

マテリアルキュレーションのための物性相関図検索システム

Searching System on Network of Various Materials Properties for Materials Curation

○吉武 道子¹ (1. 物材機構)

○Michiko Yoshitake¹ (1.NIMS)

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

材料情報（データだけでなく科学法則なども）を分野横断的に活用して材料探索指針を探る手法として、「マテリアルキュレーション」を提案している。「マテリアルキュレーション」は、ごく最近使われ始めた「キュレーション」という言葉をマテリアルに対して適用しようと、発表者が作り出した造語である[1, 2]。美術館や博物館で展示物の収集や展覧会の企画を担当する専門職を指す「キュレーター」という言葉に由来し、キュレーターの行っている“①既存のコンテンツの意味を捉えなおし、②選択・絞り込み・結合・編集を行い、③新しい価値・意味づけ・文脈をユーザーに提供する”ことを「キュレーション」と呼ぶ[3]。

今まで、いくつかの「マテリアルキュレーション」例を示してきたが、その一つとして“仕事関数（デバイス動作電圧の指標）が、ビッカース硬さからわかる”がある[4]。一見別々の事象（電気特性と機械特性）で研究分野も異なっているがきちんと理屈でつながっている。このような、一見別々の事象を科学法則に則って結び付け、既存のデータを駆使して物性値の予測や材料探索指針の発見を行おうというのが「マテリアルキュレーション」である。今回、科学法則に則って様々な物理現象・物性値を関連付けしておき、一見関係が無さそうな事象同士に関係性があるかどうかをコンピュータに自動的に見つけさせるプログラムの開発を行った。例えば、左下図のように様々な物性量間の関係性を入力しておく、右下図（物性量を A,B,C などの記号で表記）の A と J の間がどの経路をたどって（どのような関係で）関連しているか、何通りの経路が存在するか、どの経路が最短か、などがわかる。

[1] 吉武道子, 「機能材料」2013 年 2 月号 Vol.33、pp.48-55.

[2] M. Yoshitake, International Journal of Science and Research, 4, 571 (2015).

[3] 勝見明, 石ころをダイヤに変える「キュレーション」の力, 潮出版(2011)

[4] M. Yoshitake, J. Vac. Sci. Technol. A 32, 061403 (2014).

