

マテリアルキュレーション™：生成エンタルピーと物性

Materials Curations™: Formation Enthalpy vs. Materials Properties

NIMS¹ ○吉武 道子¹, 柳生 進二郎¹, 知京 豊裕¹

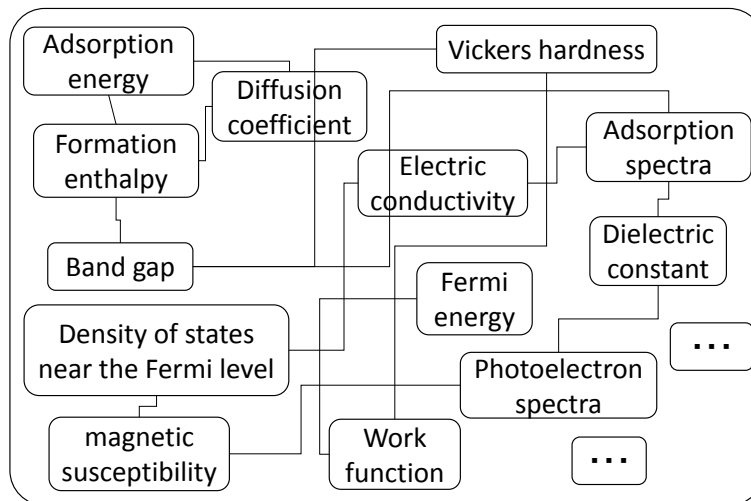
NIMS¹, °Michiko Yoshitake¹, Shinjiro Yagyu¹, Toyohiro Chikyow¹

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

「マテリアルキュレーション™」とは、科学原理も含めた材料情報を分野横断的に活用して材料探索を行う、著者が提唱している手法である[1,2]。今まで、応用物理学会の講演会においてもその概念や具体例をいくつか発表してきた。また、その探索のツールとなる物性間関係図探索システムのプロトタイプ開発も行ってきた[3,4]。物性間関係図とは、さまざまな材料の性質がその性質の発現原理に基づく関係性を有し、それを下図のようなネットワーク構造に表現したものである。

今回、基本的な物理化学量で、多くの化合物について実験データがそろっていて、かつ第一原理計算でも容易に求めることができる「生成エンタルピー」に着目して、この量が「バンドギャップ」や「酸化還元電位」、「吸着エネルギー」など、さまざまな物性とよい相関関係にあることが、化学結合に関する基本的な考察のみから導かれることを示す。

Fig. Network representation of relations between various material properties



[1]吉武道子: 機能材料, 33, 48(2013)

[2]吉武道子: 日本金属学会誌, 80, 603(2016).

[3]吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京豊裕: 特願 2016-122551.

[4]吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京豊裕: 特願 2017-037387.