

マテリアルキュレーション®支援システムの開発

Development of Materials Curation® Support System

物材機構¹, 富士通総研², 富士通³ ○吉武 道子¹, 佐藤 文孝², 矢野 貴之², 河野 洋行², 萩原 稔³

NIMS¹, FUJITSU RESEARCH INSTITUTE², FUJITSU³ ○Michiko Yoshitake¹, Fumitaka Sato²,

Takayuki Yano², Hiroyuki Kawano², Minoru Hagiwara³

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

マテリアルキュレーション®とは、著者の一人（吉武）が提唱している、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手法で、その特徴は知識データベースを利用する点にある[1]。データが少ない・ほとんど無い場合でも、科学法則を利用して材料探索すべき方向性を見つけることが可能である。

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、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[2]。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、それをネットワーク構造に表現したものである。その際に、関係性は吉武が文献を読んで抽出し手入力したものであった。しかし、マテリアルキュレーション®が強みを発揮する分野横断的探索を可能にするような関係性ネットワークを形成するには、コンピュータによる関係性の自動抽出技術が欠かせない。

今回、共同研究により、コンピュータによる関係性の自動抽出技術を内包した物性間関係図探索システム（＝マテリアルキュレーション®支援システム）の開発を試みたので、その結果について報告する。このシステムは、ネットワークを介してウェブ上で動作するようになっており、図1に示す、基本的な探索である物性1と物性2がどのようにつながっているか（a）か、物性1とつながっている他の物性（b）を探索し表示する。その画面の例を図2に示した。

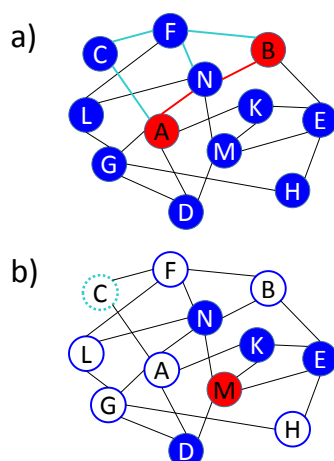


図1 基本的な探索2種

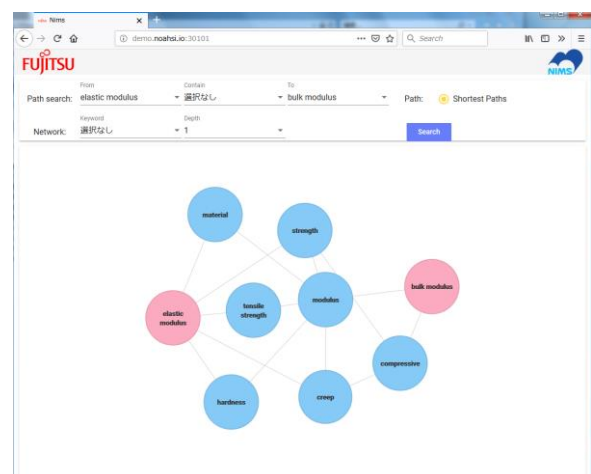


図2 マテリアルキュレーション®支援システムの画面例

[1]吉武道子: 日本金属学会誌, 80, 603(2016).

[2]吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京豊裕: 表面と真空, 61, 200(2018).