マテリアルキュレーション[®]：科学原理の分野横断的活用吉 武 道 子^a^a(国研)物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点(〒305-0044 茨城県つくば市並木1-1)Materials Curation[®]: Transdisciplinary Utilization of Scientific PrinciplesMichiko YOSHITAKE^a^aResearch Center for Functional Materials, National Institute for Materials Science (1-1, Namiki, Tsukuba-shi, Ibaraki 305-0044)**Keywords** : Material Search, Scientific Principles, Knowledge Database, Graph Theory, Materials Informatics

1. はじめに

最近、「データ駆動」ということが言われ、データをどのように(できれば自動的に)取得し、整理活用するかが注目されている。普通に「データ」と言う場合、ほとんどは「数値データ」を思い浮かべるし、MIやIoTで扱われるデータもほとんどが数値である。しかし、世の中ではTwitterやブログなどの「言葉」もデータ分析の対象であるし、論文検索システムにも文献の文字をデータとするコンピュータ処理が使われている。著者は、教科書などに書かれた「言葉」から、材料のどの性質とどの性質が関係しているという関係性の記述を見つけてデータベース化し(=いわば科学原理のデータベース)、関係性を探索することで分野横断的に材料開発を行う手法、「マテリアルキュレーション[®]」を提唱している^{1)~4)}。また、言葉をコンピュータで処理する技術である自然言語処理を用いて関係性の記述を自動的に見つけデータベース化し、探索できるシステムを企業と共同で開発している⁵⁾。科学原理のデータベースは、数値データを取得する際にも役立つ。簡単な例を挙げると、密閉された一定容量 V の容器中の気体の圧力 P と容器の温度 T の間には $PV=nRT$ の関係が成立

するので、最初に温度と圧力の値を計測すれば、その後容器の温度が時間変化した際に、温度さえ測定すれば圧力は測定する必要が無いことが分かる。実験・センシング・シミュレーションは数値データを生成し、生成された数値データの機械学習は実験・センシング・シミュレーションの条件設定を最適化するようにフィードバックを与える。それに対し、科学原理のデータベースは図1に示すように位置づけられると考えられる。マテリアルキュレーション[®]は、「何の」データを取得するかに対する指針を与える。

2. 様々な材料の性質(物性)どうしの関係とは

2.1 接触角は何で決まるか

様々な材料の性質どうしの間に、科学原理に基づいて関係を見つけていく例として、ここでは固液界面の接触角を取り上げる。接触角は、濡れ性を決定づける物理パラメータで、塗装や接着などの表面処理に重要なパラメータである。図2に、接触角に関する様々な性質の間の関連図(一部)を示した。よく知られているように、接触角 θ は、固体の表面張力(=表面自由エネルギー) γ_s 、液体の表面張力(=表面自由エネルギー) γ_L 、固液界面の界面張力(=界面自由エネルギー) γ_{SL} との間に、次のヤングの式が成立する。

図1 数値データ・自然言語データとMI・IoTとの関係の概念図

図2 接触角に関する物性間の結びつきの例(一部)

がら、2. 2の仕事関数の例においても、「仕事関数 2.56 eVの材料が欲しければ〇〇」と材料を特定できるわけではない。「TiC なら炭素組成を減らすとよい」というような指針を与える、「TiC より HfC で適切な炭素組成が見つかるのではないかな」などの仮説を立てる、だけである。指針や仮説に従ったとしても適切な材料が必ず見つかるとは限らない。指針や仮説の精度を上げるには、つながっている物性の数値データを精査して、指針や仮説に従うもので現実的な材料が存在するかどうかを検証して材料を絞り込む必要がある。うまくいけば適切な材料を見つけることもできるが、マテリアルキュレーション[®]は、材料探索の方向性を見つけるもので、最適な具体的な材料を見つけるものではない。したがって、数値データの利用・機械学習などのデータ処理と組み合わせて利用していくものである。

4. 表面処理に関係する例

4. 1 合金化と腐食

耐食性向上は表面処理の重要な目的の一つである。ここでは、腐食を純粋な電気化学反応ととらえて(不働態化などを考慮しない)、酸化還元電位を議論する。純金属 A に別の元素 B (A よりイオン化しにくい)を添加したときに、金属 A の耐食性が向上するかどうかは A-B 状態図から簡単に予測できる。A-B 状態図に、A に B を添加した組成の相が存在していれば、B がどの元素であっても B 元素の添加によって A の耐食性は向上する。B 元素を添加した材料を A(B)と表記すると、A(B)の生成エンタルピーがわかれば、どのぐらい酸化還元電位が変化するかもわかる。これは、物理化学の教科書に出ている、標準酸化還元電位 E^0 と、腐食(=金属 A のイオン化、溶解)の電気化学反応のギブス自由エネルギー変化 $-\Delta G^0$ の間に、 $\Delta G^0 = -zFE^0$ (z は電気化学反応の電荷数、 F はファラデー定数)の関係式があるからである(通常、標準酸化還元電位の数値は、腐食の逆反応であるイオンが還元されて析出する反応の電位として与えられている)。これから、元素添加によるギブス自由エネルギー変化が負(添加した相が安定)ならば、元素添加により A のイオン溶出が起こりにくくなる(耐食性が向上)ことが分かる。

図4 材料の探索空間の模式図。数値データの機械学習においては、入力する数値データの種類によって探索空間がハッチを付けた平面内に限定される。また、数値データは従来の探索領域(従来材料の周辺)に限られることが多く、局所最適点は見つかるが、平面を飛び出した空間に良い材料があっても探せない。マテリアルキュレーションは、科学法則を用いて平面の外に探索空間を広げる方法。

4. 2 表面偏析の予測

蒸着などによる表面コーティングもよく行われる表面処理である。電子デバイスにもよく蒸着薄膜は利用されている。このような材料が蒸着後に熱処理されることもしばしば有り、熱処理によって下地の金属が表面に偏析してコーティングの効果を実無しにすることもある。著者らは、偏析が、下地金属原子の膜金属上への吸着によるエネルギーの安定化による考え、そのような吸着エネルギーの実験値が皆無の中、純金属の基礎的な物理量からのみ吸着エネルギーを推定して偏析の有無を予測する方法を開発した¹⁰⁾。近似式を用いているので、予測結果を著者らの実験結果と比較すると 85% 程度の的中率であるが、材料のスクリーニングには十分と思われる。なお、本予測方法は、ウェブ上で元素を周期表から選んで入力すれば偏析の有無が表示されるソフトウェア(図5参照)として公開されており^{11),12)}、登録(無料)をすれば誰でも無料で使うことができる。

5. 関係性探索システム

5. 1 物性同士の関係性のデータベース

図2や図3で示した物性同士の関係図は、著者が該当分野の教科書の文献を読んでそれぞれの目的に沿って作成したものである。研究者は多かれ少なかれ似たような作業を行っていると思われるが、それらの情報は一過性で、公開されて情報共有されることはほとんどなく、検索可能なデータベースとして蓄積されることもない。著者は、教科書など、原理に基づいて物性同士の関係性を導き説明している文書から、物性同士の関係性を抽出してネットワーク型のデータベースに蓄積し、コンピュータによる関係性の探索が可能なシステムの構築を提案した^{13),14)}(図6)。このようなシステムがあると、ユーザーの専門とする分野を超えて物性同士のつながりを見出して分野横断的に材料探索をする助けになると考える。実際に多くのユーザーに有用なシステムにするには、多くの文書から関係性を抽出する必要があり、コンピュータによる自動抽出が不可欠である。そこで企業と共同研究を行い、「自然言語処理」と呼ばれる技術を用いて、文書からコンピュー

図5 表面偏析の有無を、吸着エネルギーの値(元素の基本的物理量からのみ推測)から予測するシステム

タにより自動的に物性間の関係性を抽出してデータベース化し、関係性を探索できるシステムを開発している⁵⁾。

5. 2 物性間の関係性の探索システム

図7に示したのは、企業と共同開発中の、物性間の関係を探索するシステムのプロトタイプの一画面例である。この例では、tensile strengthと関係する物性が表示されていて、thermal conductivityとをつなぐ線をクリックすると、その関係性がどの文書のどの文からコンピュータが抽出したかが表示される。この例ではtensile strengthを中心にこれと関係する物性を表示させているが、二つの物性の間をつなぐ物性を表示させることもできる。「ある特性を向上させようとA物性が高い材料を選んだら、思いもかけずB物性が低下した」というような場合に、なぜB物性に影響が及んだのかその理由を見つけることができる。現状ではまだ、自然言語処理

技術そのものが発展途上なため、関係性抽出の精度はあまり高くない。しかし精度向上に取り組んでおり、ネット検索における目的情報のヒット率程度の精度は達成できると考えている。なお、商品化へ向けた製品設計のために試用版の導入企業を募集している。

6. おわりに

科学法則が記述された言語データを利用して、数値データの機械学習とは異なる材料探索を行う「マテリアルキュレーション[®]」と、その支援ツールである物性間の関係性の探索システムを紹介した。特徴は、数値データを必要としないこと、専門分野を横断的に俯瞰した示唆・仮説形成を行い材料探索の方向性を与えることである。既存材料の改良改善ではない研究開発に役立つことを目指している。なお、関係性を

図6 特性間の関係性をデータベース化してグラフ理論のアルゴリズムを用いて関係性を探索するシステムの概念図。Aは関係性を手入力したデモバージョン、Bは関係性を自然言語処理を用いてコンピュータにより自動抽出したプロトタイプバージョン。

図7 プロトタイプにおける材料の性質の繋がりの探索例。引張強度と熱伝導率の繋がりと、そのつながりを抽出した文書名および文が表示される。

数量的に(二つの物性間の関係性を数式で)抽出して表示できることが望ましく、現在その技術も開発中である¹⁵⁾。

(Received November 27, 2020)

文 献

- 1) 吉武道子 ; 表面科学, **36**, 533 (2015).
- 2) 吉武道子 ; 日本金属学会誌, **80**, 603 (2016).
- 3) 吉武道子 ; 機能材料, **40**, 45 (2020).
- 4) 吉武道子 ; JST新技術説明会2020
on web https://shingi.jst.go.jp/var/rev0/0001/0990/2020_nims_4.pdf
- 5) 吉武道子, 佐藤文孝, 河野洋行 ; *Journal of Surface Analysis*, **27**, 22 (2020).
- 6) 井本 稔 ; 物理学辞典(三訂版), p.40 (培風館, 2005).
- 7) 北原文雄 ; 色材, **43**, 622 (1970).
- 8) T. Sugimoto, F. Shiba ; *J. Phys. Chem. B*, **103**, 3607 (1999).
- 9) M. Yoshitake ; *J. Vac. Sci. Technol.*, **A32**, 061403 (2014).
- 10) M. Yoshitake, Y.-R. Aparna, K. Yoshihara ; *J. Vac. Sci. Technol.*, **A19**, 1432 (2001).
- 11) 吉武道子 ; 表面科学, **34**, 340 (2013).
- 12) SurfSeg. NatNavi applications, <http://surfseg.nims.go.jp/>, (cited 2020-11-27).
- 13) 吉武道子, 桑島 功, 柳生進二郎, 知京豊裕 ; 表面と真空, **61**, 200 (2018).
- 14) 吉武道子 ; *Journal of Surface Analysis*, **25**, 80 (2018).
- 15) 吉武道子 ; *J. Comput. Chem. Jpn.*, **19**, 36 (2020).

~~~~~