

解説

マテリアルキュレーション® : 科学原理に立脚した仮説形成を特徴とする

吉武道子

物質・材料研究機構

〒305-0003 茨城県つくば市桜 3-13

Yoshitake.michiko@nims.go.jp

(2018年5月21日受理; 2018年8月20日掲載決定)

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、著者が提唱している「マテリアルキュレーション®」について報告する。この手法は、「大量のデータを機械学習により解析する」手法を用いることができない、「データ量が少ない・ほとんど無い」状態で材料探索を行うために開発された手法である。

Materials Curation®: Hypothesis Generation Based on Scientific Principles

Michiko Yoshitake

National Institute for Materials Science

3-13, Sakura, Tuskuba, Ibaraki 305-0003 Japan

Yoshitake.michiko@nims.go.jp

(Received: May 21, 2018; Accepted: August 20, 2018)

Materials Curation®, which has been proposed by the author as a method to search materials by combining scientific principles in multi-disciplinary way, is reported. This method has been developed to overcome a problem that experimental or calculation data on materials in a issue are far below enough for big-data type analysis with machine learning. By utilizing scientific principles interdisciplinary, material search is made possible with data in a very small size.

1. はじめに

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、著者が提唱している「マテリアルキュレーション®」である[1-3].

材料研究開発において、現状の改良・改善を超えた画期的な材料を探索する際に、往々にして常識にとらわれがちである。今はやりのビッグデータ利用も、従来の常識の枠内でデータを集めて解析した場合に得られるのは、従来の枠内での最適化 (Fig 1 の

局所最適点) で、枠の外にある最適点へとジャンプすることは難しい。

「マテリアルキュレーション®」では、Fig. 2 に手順を示したように、まず常識を忘れて科学原理をさかのぼることで、俯瞰的・分野横断的に材料探索を可能にする。それにより、Fig.1 における破線で囲んで示した、最適点が存在する領域を見つける (最適点を見つけるわけではない)。本稿では、科学原理に遡って考察することで、従来は別々に考えられていた事象を結び付け、そこから材料探索指針や材

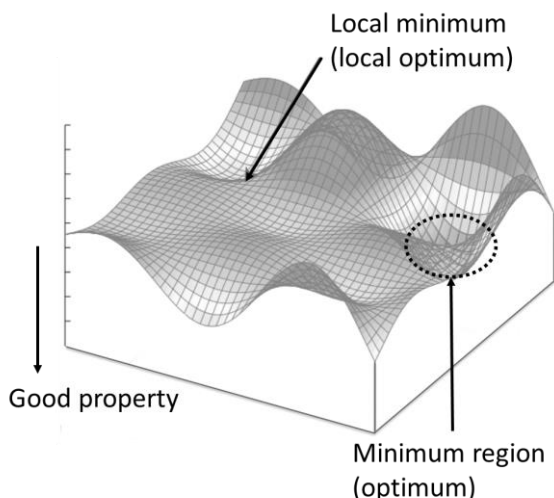


Fig. 1. Conceptual representation of local minimum and minimum point far from local minimum in materials search.

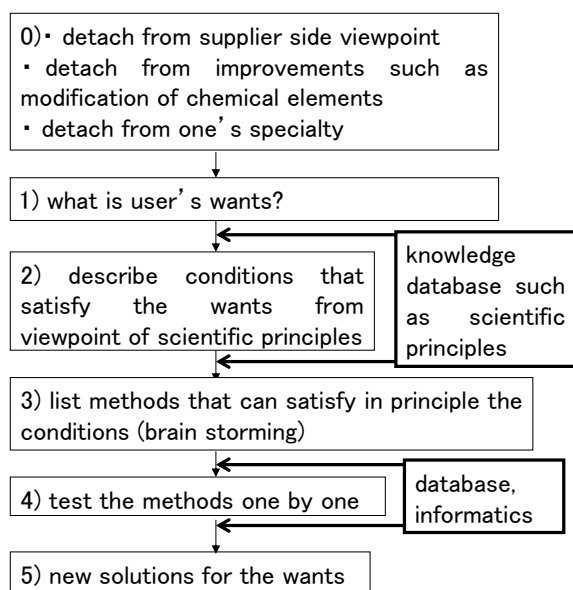


Fig. 2. Schematic representation of the process of "materials curation™".

料分析指針を得る方法と、そのために開発してきたツールに関して報告する。

2. 表面分析における例

著者が経験した例として、Ni メッキされた基板の不良品解析の例を挙げる。Ni-Au メッキを施した表面に斑点状に黒い点が発生しており、その後のプロセスに問題が生じるとのことで、黒い点の XPS による組成・化学状態分析を依頼された。微小スポ

ット XPS で分析したところ、黒い斑点部分と周囲の部分とで XPS スペクトルに現れるピークに違いは無く、組成・化学状態に違いは無かった。気になった点として、XPS スペクトル形状は同じものの、黒い斑点部分の XPS スペクトルは周囲の部分に比べて 1 割ぐらい強度が低いことであった。そこで、黒い斑点部分は穴になっていて光電子の一部が表面から出てこれない可能性を考えた。目視で黒いということは、全可視光領域にわたって光が吸収されているということで、黒く見える理由としては、材料そのものの特性として可視光を吸収する場合と、入射した光が反射・散乱されない構造が形成されている場合の二つが考えられる。黒い斑点部分と周囲の部分の組成が同じなら、材料そのものの特性ではなく光が反射・散乱されない構造 (= 穴) が形成されている可能性が高い。穴の発生であれば、二次電子像などの手法で確認できるとアドバイスを行い、実際二次電子像観察をしてもらったところ、穴が発生していた。

XPS も SEM も分析手法であるが、分析手法は通常、手法ごとに整理・分類されて説明がなされ、表面分析手法では、情報深さやプローブとして用いる励起源の種類 (電子・イオン・X 線など) や何を検出するか (電子・イオン・X 線など) によって分類するのが通常である。このような、既存の分類に囚われずに別の視点から情報を整理することで、新たな解決方法へのヒントを得る (Fig. 3 に模式図) ことが、マテリアルクキュレーション®の Fig. 2 における 1) から 2) , 2) から 3) へのプロセスである。

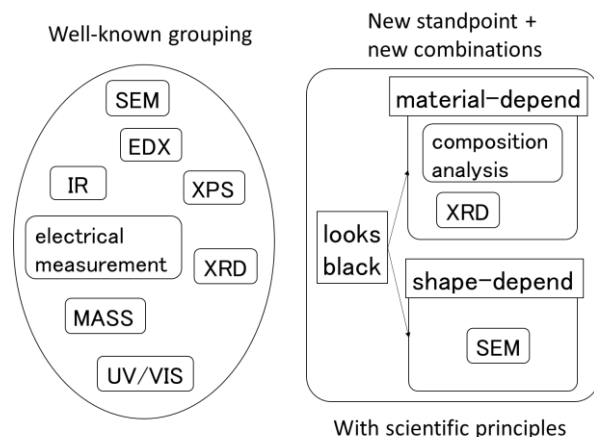


Fig. 3. Combination of analysis techniques with new standpoints.

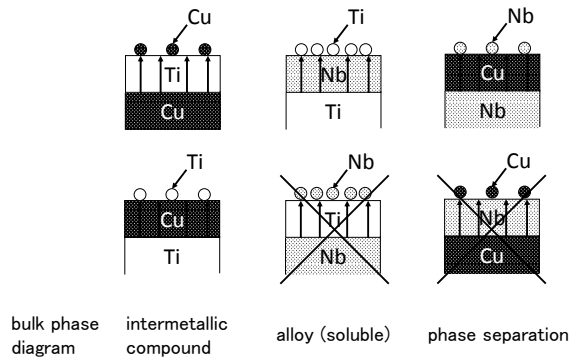


Fig. 4. Surface segregation behavior of substrate metal in different combinations of film-substrate metals having different phase diagrams (indicated in the bottom of the figure). There seems no apparent relationship between segregation behavior and bulk phase diagram type.

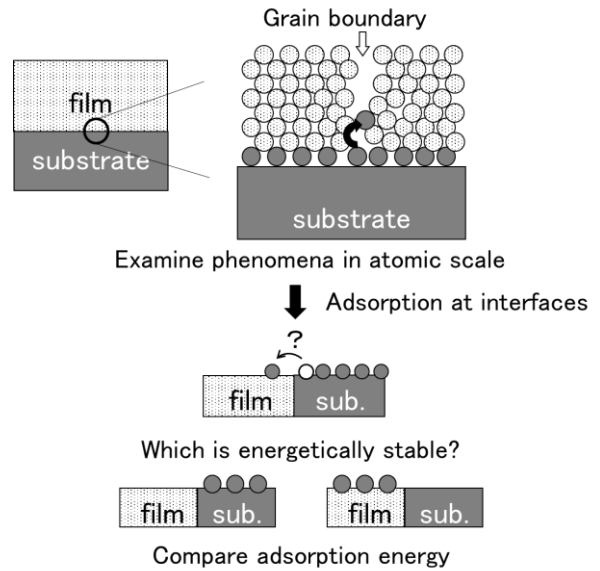


Fig. 5. Consideration of the driving force of surface diffusion and segregation of substrate metal on the film from atomistic views.

3. その他の例

著者は、このような考え方をを用いて様々な予測法や材料探索指針を開発してきた。ここではそのひとつ、積層膜における下地層の表面偏析の予測を取り上げる。具体的には、Fig.4 に示したように、基板の上に蒸着した μm 程度の膜の試料を加熱処理した際に、下地の金属が膜の表面に拡散してきて偏析することがあるが、この現象が起こるかどうかによって決まっているのかわからないという問題があった。この問題は、高融点金属（拡散の活性化エネルギーが高い）を拡散バリアとして挿入したにもかかわらず、拡散が起こってしまう[4]という実用的な課題と密接に関係している。

この問題に対し、Fig. 5 に模式的に示したように、拡散を界面における吸着と捉えることで表面吸着によるエネルギー安定化という概念を取り入れ、吸着エネルギーの大小から予測する方法を確立した[5]。なお、吸着エネルギー的に偏析が安定と判断される場合においても拡散の活性化エネルギーが高いと（速度論的に）偏析は起こらない。その意味で、実際の予測システム[6]においては薄膜における粒界拡散に関する知見も加味されている。この場合の、知識情報の組み合わせを模式的に表したのが Fig. 6 である。

このようにいくつかの分野を横断して知識情報を組み合わせて問題解決のヒントを得るには、あらかじめ科学原理に基づいた諸物性量間の関係（知識と

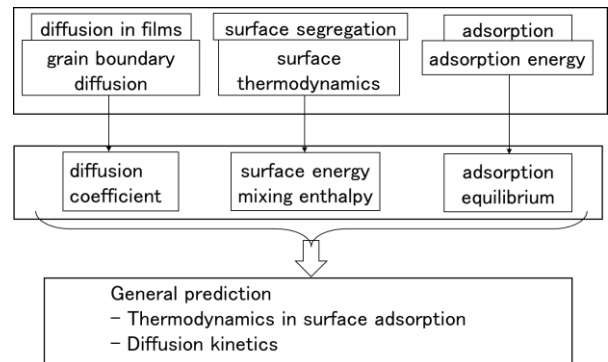


Fig. 6. Diagram of knowledge connection in different fields for general prediction of segregation in films.

しては既知) が整理され可視化可能な形になっているとよい。Fig. 7 には、熱電材料の性能指数を向上させるという課題に対して著者が作成した、関係する物性量間の関係図を示した。この図には示していないが、物性量間の増減関係を加味してトレードオフ関係を避けながら性能指数を向上させる指針を得ている[7]。

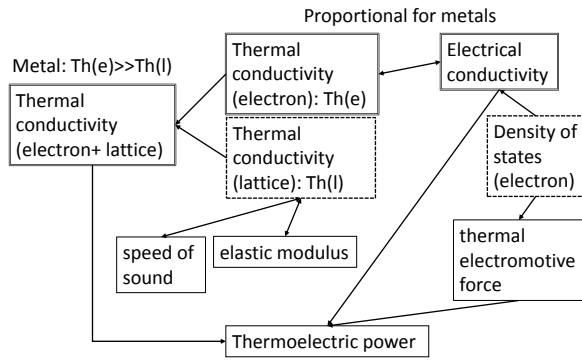


Fig. 7. Relations among various materials quantities (partial) regarding thermal conductivity and electrical conductivity.

4. マテリアルクレーション®

4.1 背景

著者が提唱してきた「マテリアルクレーション®」は、基本的に「望む特性を持つ材料を、従来の延長線上ではない材料系で探索するための方法論」である。その中で、望むものが材料そのものではなくキャラクター化であれば、“「望む特性」が、本当にそれが必要なのかを、なぜその特

性を望むのかに遡って検討し、本当に必要なもの=「wants」を見つける”部分を、“「望むキャラクター化」が、本当にそれが必要なのかを、なぜそのキャラクター化を望むのかに遡って検討し、本当に必要なキャラクター化を見つける”と置き換えればよい。

本当に望む特性が規定されたなら、その特性が、科学原理的に何によって決定されるかを調査し、望む特性を得るために原理的にどのような条件が必要かを絞り込む。絞り込まれた条件ごとに、その実現可能性を、データベース中の計測・計算データやインフォマティクス技術を利用して検証し、実現可能性の高い方法を見出す。これが、Fig. 2 に示したフローである。

4.2 科学原理を利用するためのツール

Fig.2 の 2), 3) の過程が、望む特性が、科学原理的に何によって決定されるかを調査し、望む特性を得るために原理的にどのような条件が必要かを絞り込む部分である。この過程では、望む特性の決定要因を分解する過程で、他の特性との関係が明らかになり、Fig. 7 のような物性間の関係性のネットワーク図を描くことができる。このような関係性は、様々な特性の間に存在し、非常に多くの特性が関係

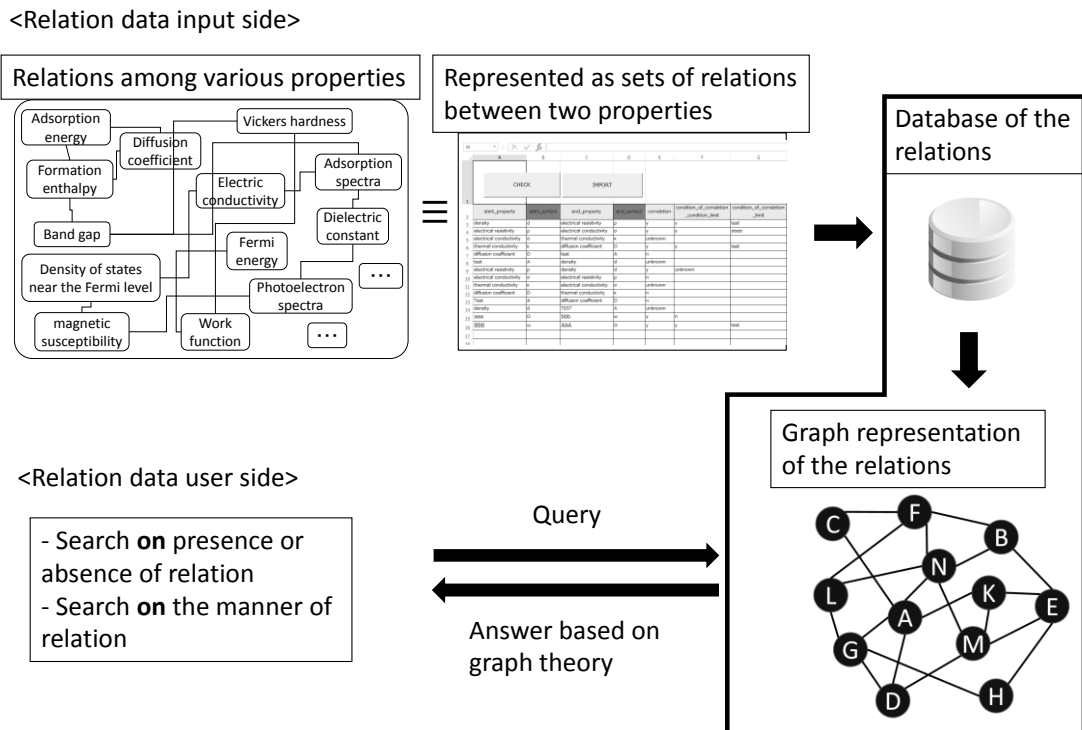


Fig. 8. Overall view of data-utilization project conducted by the author.

によりつながっており、その全体像は Fig. 7 のように人間が目で見つながりを確認することはできない。そこで、このようなネットワーク構造を数学的に解析する既に確立した手法である「グラフ理論」[8]のアルゴリズムを用いて、何と何がつながっているかを探索できるシステムのプロトタイプを開発した[9]。

Fig.8 にはこのプロトタイプ概念図を示した。多くの場合 Fig.7 に示したように関係性には方向がある。両方向に関係性が成立する場合にはそれぞれの向きの矢印を描き、二つの特性の間に向きの異なる2本の線として表現する。このように表現すると、関係性は、「始点と終点(矢印の向きは始点→終点)が結ばれているかどうか」という情報を大量に集めたデータベースとして保存可能である (Fig. 8 の Relation data input side)。このように保存された関係性のデータをグラフ表現へと変換して、グラフ理論のアルゴリズムを用いて関係性を探索する (Fig. 8 の Relation data user side)。

関係性のデータベース作成用に、始点と終点の組み合わせに対し、関係性の有無を入力できるフォームを用意した。この入力フォームは、Fig. 9 に一部を示したように、厳密に理論的に定量的に成立する

ものから近似的に成立するもの、定性的に成立するものなど、関係性の種類を区別して入力したり、定量的な関係性自体を入力するなどができるようになっている。また、科学原理が明らかでなくても、実験的に確立している相関は、関係性の種類にラベルを付けて入力できるようになっている。このような関係性のデータは、マクロによる重複などの入力チェックを得てデータベースの形で保存され、必要な時にグラフ表現へと変換できるようになっている。

一方、関係性を探索する側においては、探索には基本的に、①ある特性と別の特性との間に関係性があるかどうか、関係性がある場合にどのようなルートをとって関係しているか、②ある特性と関係する特性にはどのような特性があるか、の2種類の探索方法がある。プロトタイプでは、Fig. 10 のような画面上で、この2種類のうちのどのタイプの探索をするかどうかと共に、①においては、関係性があるかどうかを知りたい物性を A, B として入力し、関係性があった場合に、どういう物性を介して関係しているかに関してできるだけ直接的な関係性のみを抽出するか、間に入る物性の数を制限して関係性を探索するか、間に入る物性の数は制限せずとにかく A と B を繋ぐのであればすべての関係性を網羅する

1	CHECK		IMPORT		Items continued		
2	start_property	start_symbol	end_property	end_symbol	correlation	condition_of_correlation _condition_limit	condition_of_correlation _limit
3	density	d	electrical resistivity	ρ	y	y	test
4	electrical resistivity	ρ	electrical conductivity	σ	y	y	aaaa
5	electrical conductivity	σ	thermal conductivity	κ	unknown		
6	thermal conductivity	κ	diffusion coefficient	D	y	y	test
7	diffusion coefficient	D	test	A	n		
8	test	A	density	d	unknown		
9	electrical resistivity	ρ	density	d	y	unknown	
10	electrical conductivity	σ	electrical resistivity	ρ	n		
11	thermal conductivity	κ	electrical conductivity	σ	unknown		
12	diffusion coefficient	D	conductivity	κ	n		
13				D	n		
14				A	unknown		
15				w			
16				Ω			test
17							
18							

origin_of_correlation_kinds	origin_of_correlation_degree	quantity_kinds	quantity_degree	correlation_equation	number_of_properieis_in_equation
-----------------------------	------------------------------	----------------	-----------------	----------------------	----------------------------------

Fig. 9. Example of input form.

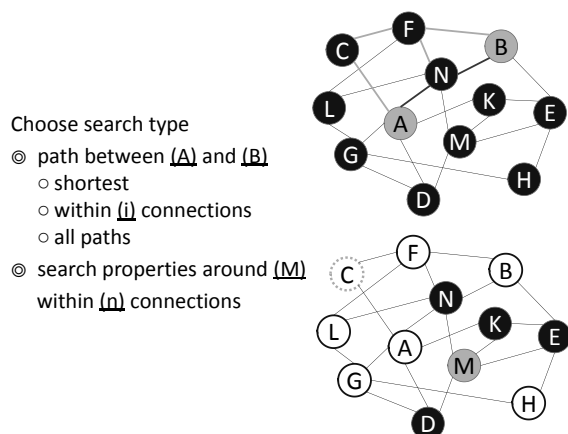


Fig. 10. Two basic types for searching relations among properties.

か、などが選択できるようになっている。また、②のある特性 M と関係する特性にはどのような特性があるかを探索する場合には、どのぐらい直接的に関係しているかに関して制限を付与して探索できるようになっている。

さらに、関係性の探索には、関係性データベース作成の箇所ですべて述べた関係性の種類の違いによる重みづけや、報告されている実験・計算データの量による重みづけなどに応じた探索ができるようになっており [10, 11], 材料探索の際に重視する観点によって適切と判断される材料が異なるようになっている。

5. 最後に

物性間の関係性を探索するシステムの設計とプロトタイプの実行は行ったが、このシステムを実用化するための大きなハードルは、物性間の関係性のデータベースを作成することである。個々の関係性は教科書に記述されている程度のものであるが、それらを広範囲の分野にわたって収集しデータベースに格納することは人手で行うには膨大過ぎる。そのため現在、関係性データの収集をある程度コンピュータで自動的に行うための技術開発を行っている。この技術は、自然言語処理と呼ばれる分野であり、今後 10 年ぐらいの間に急速に発展すると期待しており、それを用いて物性間の関係性が数千ペア以上のある程度実用に耐えるデータベースを構築したいと考えている。

なお、科学原理を利用した材料探索方法においては、探索方針を導き出した後に現実的な材料系を絞

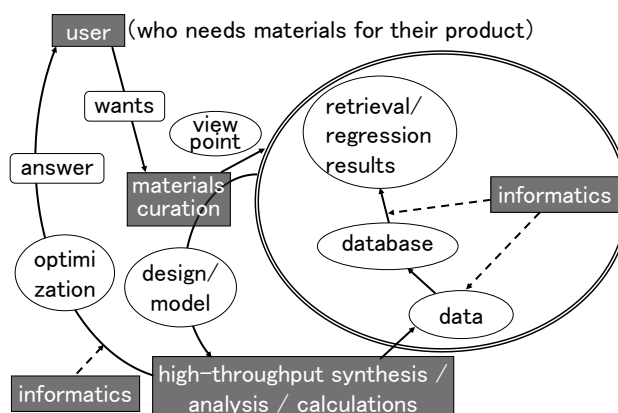


Fig. 11. Schematic of the relationship between database, informatics, materials curation, and high-throughput techniques for material development in future. Materials curation finds user's "wants", not "needs", gives a viewpoint for materials search based on scientific principles and proposes a new design/model for materials search with the aid of database, then the proposed material systems are tested by high-throughput techniques, whose results are optimized using informatics, then the optimized result is an answer to the user.

り込むプロセスである、Fig. 2 における 3) から 4), 4) から 5) において、実験・計算データが重要である。したがって、ハイスループット合成・評価やスーパーコンピュータを活用した自動第一原理計算などによる効率的データ生成、大量のデータの迅速な検索システムなど、実験・計算データとメタデータのデータ周辺の技術整備も非常に重要である。Fig.11 には、著者が考える、科学原理の利用に立脚する「マテリアルキュレーション®」と、材料データ関係の様々な技術との関わりを模式的に示した。

6. 参考文献:

- [1] 吉武道子, *機能材料*, **33**, 48 (2013)..
- [2] 吉武道子, *表面科学*, **10**, 533 (2015).
- [3] 吉武道子, *日本金属学会誌*, **80**, 603 (2016).
- [4] K. Holloway, P. M. Fryer, C. Cabral, Jr., J. M. E. Harper, P. J. Bailey and K. H. Kelleher, *J. Appl. Phys.* **71**, 5433 (1992).
- [5] M. Yoshitake, Y.-R. Aparna and K. Yoshihara, *J. Vac. Sci. Technol. A* **19**, 1432 (2001).
- [6] SurfSeg. NatNavi applications, <http://surfseg.nims.go.jp/>, (cited 2018-05-21).

- [7] NIMS 調査分析室レポート「熱電」, [ISBN] 978-4-990056360 (2015.01.21 published) (http://www.nims.go.jp/publicity/publication/thermoelectric_m_report.html), p.181-200 (in Japanese).
- [8] J. A. Bondy and U. S. R. Murty, *Graph Theory with Applications*, Elsevier, North-Holland (1976).
- [9] 吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京豊裕, *表面と真空*, **61**, 200 (2018).
- [10] 吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京豊裕, 特願 2016-122551 及び PCT/JP2016/086739.
- [11] 吉武道子, 桑島功, 柳生進二郎, 知京豊裕, 特願 2017-037387 及び PCT/JP2018/4108.

査読コメント, 質疑応答

査読者 1 吉原一紘 (シエンタオミクロン)

著者が提唱する「マテリアルキュレーション」について, 全体像を簡潔に, 分かりやすく解説した論文です. 材料開発の新しい方向を会員が理解する上で有用な論文ですので, 掲載を薦めます. 文章や内容の修正が必要な部分はありませんが, 以下にコメントを記します. コメントに対応した説明を付加していただければ, より理解が進む(あるいは誤解を避ける)と思われます. ご検討いただければ幸いです.

[査読者 1-1]

4.1 節にマテリアルキュレーションを「望む特性を持つ材料を, 従来の延長線上ではない材料系で探索するための方法論」と定義していますが, 「従来の延長線上ではない」を「材料系」にかかる修飾語だとすると, マテリアルキュレーションの適用範囲が限定されるように思えます. 例えば, 現状では耐熱合金は Ni 系合金を対象として開発されていますが, Ni 系合金は「従来の延長線上の材料」と想定されます. 耐熱合金開発はマテリアルキュレーションの範囲外なのでしょうか.

[著者]

基本, マテリアルキュレーションは「従来の延長線上ではない」材料系を探索するのに威力を発揮する手法で, そのために開発しました. 耐熱合金開発でも, 従来の Ni 系合金(合金化する元素も数種類に限定されていると思います)でない耐熱合金を探索するのは, “「従来の延長線上ではない」材料系の探索”です. しかし, マテリアルキュレーションは “「従来の延長線上ではない」材料系の探索”でない探索(つまり従来の延長線上の探索)でも利用することは出来ます. ただ, 従来の延長線上の探索をするのなら, 機械学習等の別の有力な方法もあります.

[査読者 1-2]

4.2 節に物性(特性)間の関係性を示すデータベースの構築方法が説明されています. データベースを個人で作成し, 個人で利用するのならば個人の責任ですから問題はありませんが, データベースを共有化する場合には, 物性間の関係性の重み付けなどに関しては何らかの認証(学会等による正当性の保証)

が要求されるかもしれません。データベースの将来展望を示していただければ、読者のマテリアルクキュレーションに対する理解が深まると思います。

[著者]

物性（特性）間の関係性を示すデータベースは、教科書に書かれている科学法則を分野横断的にグラフ理論のアルゴリズムを用いて探索できるようにしたデータベースであり、①分野ごとに分断された学会等による保証は難しいと考えられること、②教科書に書かれているものをコンピュータで自然言語処理を用いて自動的にデータベース化することを考えていることから、出典を明示しておけば保証は必ずしも必要ないと考えています。また、ユーザーからのフィードバック（これもユーザーで共有される）による修正・アップデートという方法があり得ると考えています。

[査読者 1-3]

物性関係性データベースはこれまでに得られた物性をすべてリンクさせたものとなり、開発すべき材料の要求仕様を入力すれば、自動的に必要な物性をたどって正解にたどり着く機能を持つのでしょうか。Fig.7 と Fig.8 の図中にある物性関係性データベースに示されている物性定数はそれぞれ異なっていますが、これは例示と言うことでしょうか。どのような特性を持つ材料を開発するかで、使用する物性関係性データベースが異なるとすると、データベースを共有化するならば、データベースの選択指針が必要となります。開発すべき材料によって対象となる物性は様々です。例えばアルミナ皮膜のように構造が重要なものは、構造と製法の関連、有機保護フィルムのような強度が問題とされる材料には、摩耗、弾性などの物性が重要になると思います。なお、物性間の関係性に関してですが、高速拡散と熱伝達率とヤング率に相関関係があるという論文「Characteristics of Matrix Metals in which Fast Diffusion of Foreign Metallic Elements Occurs, Y. Mae, Metallurgical and Materials Transactions A, Published on line: 01 February 2018」があります。既にご存じかもしれませんが、ご参考まで。

[著者]

「開発すべき材料の要求仕様を入力すれば、自動的に必要な物性をたどって正解にたどり着く機能を持つ」ためには、物性値のデータベースが必要です。

もちろん物性値のデータベースとリンクできれば良いですが、物性関係性データベースは、（リンクしても物性値に対する保証は出来ないの）あくまでも「ある物性の値が、別のどの物性の値にどのように影響を与える／受ける」というデータベースであり、どのような方向で材料探索したらよいかを示唆するもので、材料候補をピンポイントで提示するものではありません。また、ご指摘のように Fig.7 と Fig.8 は例示です。この例示は、使用する物性関係性データベースが異なるというわけではなく、実際には紙面には書けないほどの多くの関係が繋がったもので、その一部分を示しただけです。ですので、どのような特性を持つ材料を開発するかで使用する物性関係性データベースが異なるということはありません。また、論文のご紹介をありがとうございます。

[査読者 1-4]

Fig.11 に将来展望が図示されていますが、説明が省略されています。要求性能を入力し、マテリアルクキュレーションにより望みの材料の化学組成、物理構造などが提案された後に、製造プロセスなどの検討が行われることを示しているのだと思いますが、[materials curation] と [high-throughput] からの矢印が [informatics] に向かっています。あたかも最終目標が [informatics] にあると見えますが、解釈はそれで正しいのですか。著者の考えが Fig.11 に凝縮されているようですので、図の説明を書き加えられた方が著者の考えが正確に伝わると思います。

[著者]

Fig.11 は提出した原稿にはめ込んだ図が一部欠損しているようです。Fig.11 は、Fig.2 の手順を、物性値データベースや high-throughput 技術などの別の技術との関係性に着目して焼き直したものとなっています。欠損した部分を補足すると、最終目標は [high-throughput] と [informatics] を用いた最適化を経て、ユーザーに解を示す、となっています。Fig.11 を修正し、本文に説明を追加しました。

査読者 2 中村誠（富士通研究所）

[査読者 2-1]

「データ量が少ない・ほとんど無い」状態で材料探索をする手段は、最近はやりのビックデータを用

いてほしいものを広範囲に探索する方法に対峙しており、とても興味深い方法だと思います。本法を用いれば局所最適点にはまり込むことなく真の最適解に近い領域を見つけることができると主張されています。なぜそうなのかをもう少し説明していただければと思います。

最適点が存在する領域を探すということは、近年話題の D-wave が出している量子アニーリング（量子コンピュータ）による組み合わせ最適化問題を解くのに似ています。これらも最適解ではなくより適している解を探る方法です。そのあたりにも触れながら解説されるとタイムリーなのではないでしょうか。

[著者]

「最近はやりのビックデータを用いてほしいものを広範囲に探索する方法」は、たとえ量子コンピュータを用いても、あらかじめ人間が考えた範囲しかデータを入力することが出来ません。この「範囲」が解を探す範囲を規定します。本方法は、人が考える範囲を広げるツールです。「燃料電池用触媒の貴金属量をいかにして少しでも減らすか」という問題は、貴金属量を変化させて触媒能を測定・計算したデータを用いてビックデータの的に最適化問題を解くことが出来ます。しかし、この方法では、貴金属をまったく使わないカーボンアロイ触媒は開発されようがありません。しかし、当該触媒反応の原理からアプローチ（マテリアルキュレーション的、有機反応の触媒反応に同じメカニズムのものがある）すると、カーボンアロイ触媒という最適解に近い領域が見つかる可能性があります。過去にマテリアルキュレーションに関して実例を交えた解説記事を書いており、文献としてあげていますので参考にいただければと存じます。

[査読者 2-2]

表面分析における例内に書かれている「黒い斑点は、穴である」というところ、実用現場の不良解析ではとても大事だと思います。機器分析がどんどん良くなり、簡単に分析結果が出るようになると、やみくもにいろいろな分析をしがちです。今回は、黒ですが、表面が白くなった場合、分析しても何かわからずよくよく考えたら表面荒れだったとか、ウエハ表面に酸化膜が形成されている（エリプソメータで膜の存在が確認された）ように見えたけど実は表面荒れだったなどずっと昔に経験したことがあります。

す。このような情報は、解析する皆さん（少なくとも本誌読者）で共有できるといいですね。こんな地味な知識のデータベースもあるといいですね。

[著者]

本物性関係性データベースは、概念的には上記を含みます。一般化すると、構造色と固有色の違いということになり、光の反射・吸収スペクトルと構造の関係性になります。可視光だと色として認識されますが、波長の異なる電磁波でも成立し、干渉などの現象とも関係します。ただ、物性関係性データベースは「光の吸収」「光の干渉」などの用語で構成されるので、上記のような分析ユーザーには、「黒く見える」「白く見える」などの表現を、物性関係性データベース上の用語に翻訳するインターフェースが必要になりそうです。製造プロセスでも、「湿度」→「水蒸気圧」のような翻訳インターフェースが必要だとは感じています。（どこまでユーザーを広げるかによりますが）

[査読者 2-3]

Fig.4 がよくわかりません。図とその下の英字の関係がよくわかりません。解説が必要かと思います。また6つの図の言いたいことは、「Cu 上に Ti をつけても Ti 上に Cu をつけても下地メタルが表面に析出する」けど「Nb/Ti系だと Nb はバリア膜にならず、Cu/Nb 系だと Cu はバリア膜にならない」ことを言っていますか？少し本文で説明したほうが親切でわかりやすいのではないのでしょうか？

[著者]

Fig.4 の figure caption に図とその下の英字の関係の説明を追加しました。Fig.4 は、本文中の「基板上に蒸着した μm 程度の膜の試料を加熱処理した際に、下地の金属が膜の表面に拡散してきて偏析することがあるが、この現象が起こるかどうかは何によって決まっているのかわからない」の例を示したものです。「Cu 上に Ti をつけても Ti 上に Cu をつけても下地メタルが表面に偏析する」「Ti 上に Nb をつけても下地メタルが偏析するが、Nb 上に Ti をつけても下地メタルは偏析しない」「Nb 上に Cu をつけても下地メタルが偏析するが、Cu 上に Nb をつけても下地メタルは偏析しない」ことを示しています。「バリア膜うんぬん」は、この現象と関連する実際の問題です。これも既に論文にしている文献として挙げています。本稿の大筋とずれてしまうので、参考文

献がある例については詳しい説明は文献を参照していただければと存じます。

[査読者 2-4]

「望む特性を持つ材料を、従来の延長線上ではない材料系で探索するための方法論」いいですね。夢の材料探査です。現在「マテリアルキュレーション」のプロトタイプはできているがデータベースの整備が追い付いていないとのことですね。現在の到達レベルで、可能なアプリケーションをいくつか具体的に記して頂けると読者にとって有用であるのと、実際読者が使える環境にあるのかを記して頂けるとよいと思います。

[著者]

「マテリアルキュレーション®」そのものは既に方法論として確立し、吉武は、企業への有償技術コンサルティングに用いています。プロトタイプが出来ているのは、吉武以外の方が「マテリアルキュレーション®」を用いることが出来るようにするためのツール、「物性関係性探索システム」です。このシステムは、その概念がわかるようなデモレベルのものしか出来ておりません。多少でもユーザーが試せるレベルのシステムは、最先端の AI・IT 企業の研究者・技術者の協力があっても、開発できるかどうかという代物です。現在、ユーザーが使えるレベルのシステムを作成するために必要な技術について、特許を次々と出願している最中です。また、某企業の協力で、多少でもユーザーが試せるレベルのシステムを開発予定で、10月16日の NIMS WEEK（東京国際フォーラム）における展示を目指しています。この展示において、ユーザーが試せるレベルのシステムを使用して意見のフィードバックを下さる会員を募集する予定です。なお、このフィードバックを得て、協力企業が事業化へ動いてくだされば、読者の方が利用できるようなシステムが出来上がると存じます。