

マテリアルズ・ インフォマティクス 開発事例最前線



■発行 2021年1月 ■体裁 B5判322頁 ■定価 本体50,000円+税
■ISBN 978-4-86043-708-4 ■Cコード C3058

※NTSサイトにて電子版の
試読(無料)が可能です。

- データ駆動型の材料探索を強化するモデル構築から素材開発の実際を一挙収録!
- 新材料探索プラットフォームや量子ビーム評価実験など最新の動向も掲載!
- 結晶構造、電子・電池材料、高分子素材や超伝導物質など開発事例も豊富!

監修者 **伊藤 聡** 計算科学振興財団

【執筆
者】

伊藤 聡 計算科学振興財団
田村 亮 物質・材料研究機構
津田 宏治 東京大学
犬丸 啓 広島大学
折井 靖光 長瀬産業(株)
戸田 浩樹 長瀬産業(株)
廣瀬 修一 長瀬産業(株)
小林 正和 長瀬産業(株)
金子 弘昌 明治大学
田中 謙 総合科学研究機構/
北海道大学 名誉教授
藤岡 淳 北海道大学

上野 哲朗 量子科学技術研究開発機構
小野 寛太 高エネルギー加速器研究機構
藤本憲次郎 東京理科大学
相見 晃久 東京理科大学
一木 輝久 名古屋大学
山下 智樹 長岡技術科学大学/大阪大学
常行 真司 東京大学
北井 孝紀 東京大学
本郷 研太 北陸先端科学技術大学院大学
室野 隆博 (株)デザイン/
(元)北陸先端科学技術大学院大学
前園 涼 北陸先端科学技術大学院大学

森川 龍哉 九州大学
田中 將己 九州大学
森分 博紀 ファインセラミックスセンター
堀内佐智雄 産業技術総合研究所
石橋 章司 産業技術総合研究所
船津 公人 東京大学/
奈良先端科学技術大学院大学
東京工業大学
森川 淳子 産業技術総合研究所
長谷 泉 日本電気(株)/
岩崎 悠真 産業技術総合研究所/
科学技術振興機構

山口 滋 理化学研究所
矢田 陽 産業技術総合研究所
菊地 直人 産業技術総合研究所
三溝 朱音 東京理科大学
緒明 佑哉 慶應義塾大学
五十嵐康彦 筑波大学
松本 凌 物質・材料研究機構
高野 義彦 物質・材料研究機構
伊豫 彰 産業技術総合研究所
川島 健司 (株)イムラ材料開発研究所
松本 要 九州工業大学

序 論

データ駆動による
新材料探索の
展開

第1編

物性予測モデルの
構築と
基盤システム

第2編

量子ビーム実験と
モデル

第3編

素材開発の
実際

株式会社 **エヌ・ディー・エス** 行 **FAX:047-314-0810**

年 月 日

「マテリアルズ・インフォマティクス開発事例最前線」

冊子版()部 / CD版()部

申込要領

団体名	TEL			
	FAX			
所在地	□□□□-□□□□			
購入希望 部 署	氏名			
e-mail				
申込担当 部 署	氏名			
e-mail				
通信欄			NTS 担当者	

■直接小社宛にFAX、郵便またはホームページにてお申し込み下さい。なお、送料は無料です(国内に限ります)。

■お支払い方法
商品到着後、銀行振込、郵便振替、カードにてお支払い下さい(一部カード会社によってはリボリングや分割払いがご利用頂けない場合がございます)。

■お申し込みお問い合わせ先
(株)エヌ・ディー・エス 営業部

株式会社 エヌ・ディー・エス

◆市川AIセンター
〒272-0023
千葉県市川市南八幡4-3-3 武蔵ビル4F
TEL047-314-0801 FAX047-314-0810
<http://www.nts-book.co.jp>

購
入
申
込
書

ここに記入いただいた個人情報は、下記目的のために利用されます。
(1)お客様との契約の履行、管理 (2)新規書籍及びセミナーの紹介等、当社の営業内容の紹介 (3)お客様にとり有用と思われる当社提携先の書籍・サービス等の紹介
尚、弊社における「個人情報のお取り扱いについて」及び「個人情報保護方針」については弊社HPをご覧ください。

序 論 データ駆動による新材料探索の展開

- 《伊藤 聡》
- 1 はじめに
 - 2 データ駆動型材料探索技術の動向
 - 3 データ駆動型材料探索技術の課題
 - 4 おわりに

第1編 物性予測モデルの構築と基盤システム

◆第1章 材料インフォマティクスに適した機械学習法の開拓

- 《田村 亮、津田 宏治》
- 1 はじめに
 - 2 ベイズ最適化パッケージCOMBO
 - 3 相図作成手法パッケージPDC
 - 4 Windows用MIツール
 - 5 おわりに

◆第2章 遷移金属元素の個性の化学的直観と計算化学の融合—金属窒化物におけるケーススタディ

- 《犬丸 啓》
- 1 はじめに
 - 2 窒化チタン—窒化クロム固溶体の強磁性：実験結果をもとに計算科学が詳細な機構を解き明かしたパターン
 - 3 層状窒化ストロンチウムSr₂N薄膜の2次元自由電子：計算物理の結果が実験化学者による実験研究を誘発したパターン
 - 4 なぜ窒化ニッケルNiNは合成できないか：実験化学者が計算科学を活用して仮説に定量化を与えたパターン
 - 5 おわりに

◆第3章 材料開発を高速化するマテリアルズ・インフォマティクス

- 《折井 靖光、戸田 浩樹、廣瀬 修一、小林 正和》
- 1 はじめに
 - 2 AIの進化
 - 3 コグニティブアプローチ
 - 4 アナリティクスアプローチ
 - 5 MIシステムのプラットフォーム化
 - 6 材料開発を高速化するマテリアルズ・インフォマティクス
 - 7 おわりに

◆第4章 分子設計・材料設計・プロセス設計・プロセス管理のためのデータの可視化およびモデルの直接的逆解析を可能にするデータ駆動型モデル

- 《金子 弘昌》
- 1 はじめに
 - 2 Generative Topographic Mapping (GTM)
 - 3 Generative Topographic Mapping Regression (GTMR)
 - 4 結果と考察
 - 5 おわりに

◆第5章 探索的分析・学習シナリオ構築過程の基礎理論と支援環境フレームワークの実証研究

- 《田中 謙、藤岡 淳》
- 1 マテリアルズ・インフォマティクスと探索的分析・学習シナリオ
 - 2 連携多重ビュー&分析可視化フレームワーク
 - 3 実装例：Materials Acquisition by Data Science (MADS)

第2編 量子ビーム実験とモデル

◆第1章 適応型実験デザイン法によるX線スペクトル測定の効率化

- 《上野 哲朗、小野 寛太》
- 1 はじめに
 - 2 量子ビーム実験の例：X線吸収分光とその派生手法
 - 3 能動学習とガウス過程回帰
 - 4 適応型実験デザイン法
 - 5 おわりに

◆第2章 マテリアルズ・インフォマティクスに向けた粉体材料における放射光実験の高速化

- 《藤本 憲次郎、相見 晃久》
- 1 はじめに
 - 2 粉末試料用放射光測定治具の開発
 - 3 結晶構造解析の自動化法の開発

◆第3章 材料観察画像の機能推定

- 《一木 輝久》

- 1 計測データからのモデリング
- 2 ABAトブロック共重合体
- 3 観測される状態と自由エネルギー
- 4 自由エネルギーの推定
- 5 力学特性の推定
- 6 将来展望

第3編 素材開発の実際

◆第1章 結晶・ナノ構造

第1節 機械学習が拓く高効率結晶構造探索手法の開発

- 《山下 智樹》
- 1 はじめに
 - 2 ベイズ最適化による構造探索
 - 3 LAQAによる構造探索
 - 4 おわりに

第2節 不完全な粉末回折実験データを用いたデータ同化結晶構造探索

- 《常行 真司》
- 1 はじめに
 - 2 これまでの構造探索手法
 - 3 データ同化構造探索
 - 4 いくつかの事例
 - 5 まとめ

第3節 量子アニーリングを用いたメタマテリアル設計

- 《北井 孝紀、津田 宏治、田村 亮》
- 1 はじめに
 - 2 ブラックボックス最適化としての材料設計
 - 3 量子アニーリングを用いた最適化手法：FMQA
 - 4 放射冷却性能の指標FOMと設計問題
 - 5 まとめ

第4節 界面局所構造モデリングに基づく

- 第一原理濡れ性解析
- 《本郷 研太、室野 隆博、前園 涼》
- 1 はじめに
 - 2 第一原理マテリアルズ・インフォマティクス(AIMI)
 - 3 第一原理計算におけるモデリングと相関関係
 - 4 第一原理濡れ性解析におけるモデリング
 - 5 銅表面の第一原理濡れ性解析
 - 6 まとめと今後の展開

第5節 ナノスケールマーキングによる局所塑性ひずみ解析とひずみ分布の統計的評価

- 《森川 龍哉、田中 将己》
- 1 はじめに
 - 2 ナノスケールマーキング法について
 - 3 ナノスケールマーキング法のプロセス
 - 4 局所変形の定量的見積もり
 - 5 ナノスケールマーキングによるひずみ解析の実際
 - 6 おわりに

◆第2章 誘電材料

第1節 社会実装を目指した強誘電体・誘電体材料マテリアルズ・インフォマティクス

- 《森分 博紀》
- 1 はじめに
 - 2 強誘電体材料の第一原理計算
 - 3 典型的な強誘電体材料であるBaTiO₃の逐次相転移
 - 4 マテリアルズ・インフォマティクス適用対象の選択
 - 5 常誘電体高誘電率材料
 - 6 誘電率の第一原理計算
 - 7 常誘電体高誘電率材料マテリアルズ・インフォマティクス
 - 8 おわりに

第2節 有機強誘電体の開発

- 《堀内 佐智雄、石橋 章司》
- 1 はじめに
 - 2 有機強誘電体の設計
 - 3 データ駆動型の新物質開発
 - 4 強誘電特性評価の実際
 - 5 優れた機能性を伴う反強誘電性の発見
 - 6 分極特性の理論計算による評価
 - 7 まとめ

◆第3章 高分子材料

第1節 マテリアルズ・インフォマティクスを用いた高分子複合材料の設計

- 《船津 公人》
- 1 材料設計の現状と課題
 - 2 プロセスも含めたポリマー材料設計戦略
 - 3 プロセス・インフォマティクスの展開

第2節 機械学習による

- 高分子の熱伝導性予測と分子設計
- 《森川 淳子》
- 1 はじめに
 - 2 スモールデータ問題
 - 3 転移学習
 - 4 iQSPRワークフロー

- 5 仮想ライブラリー生成
- 6 高分子合成による実証
- 7 新計測法の開発：赤外可視化超高速熱分析法(IR-FSC)とマイクロスケール温度波熱分析法(μ -TWA)
- 8 物性検証と高次構造発現による高熱伝導化
- 9 まとめ

◆第4章 磁性材料

第1節 磁性元素を含まない磁性体の理論設計

- 《長谷 泉》
- 1 概要
 - 2 磁性の起源
 - 3 フラットバンド磁性
 - 4 s2系・s1系パイロクロ酸化物におけるフラットバンドと強磁性
 - 5 従来のパイロクロ酸化物との関係
 - 6 まとめ

第2節 実験と計算を融合したスピン熱電材料開発

- 《岩崎 悠真》
- 1 実験と計算とデータベース
 - 2 実験と計算を融合したスピン熱電材料開発
 - 3 おわりに

◆第5章 触媒

第1節 不斉合成における触媒インフォマティクス《山口 滋》

- 1 はじめに
- 2 不斉触媒反応における自由エネルギー関係
- 3 不斉触媒反応における分子場解析
- 4 おわりに

第2節 キャタリストインフォマティクスによる触媒反応の収率予測

- 《矢田 陽》
- 1 はじめに
 - 2 キャタリストインフォマティクスによる触媒開発
 - 3 キャタリストインフォマティクスによる触媒反応の収率予測
 - 4 おわりに

◆第6章 電子・電池材料

第1節 新しいワイドギャップp型酸化半導体—s2マテリアルからのアプローチ—

- 《菊地 直人、三溝 朱音》
- 1 はじめに
 - 2 ワイドギャップ酸化半導体の伝導帯と価電子帯
 - 3 ワイドギャップp型酸化半導体実現への取り組み
 - 4 s2マテリアル
 - 5 新しいp型s2マテリアル
 - 6 薄膜化
 - 7 おわりに

第2節 小規模データからのリチウムイオン電池新規有機負極活性物質の探索

- 《緒明 佑哉、五十嵐 康彦》
- 1 はじめに
 - 2 小規模実験データをもとにした訓練データセットの作成と予測モデルの構築
 - 3 予測モデルを用いた新規有機負極活性物質の探索と実験的なさらなる容量向上
 - 4 おわりに

◆第7章 超伝導物質

第1節 データベースと第一原理計算による超伝導物質の加速的探索

- 《松本 凌、高野 義彦》
- 1 はじめに
 - 2 データ駆動のアプローチに至った経緯
 - 3 新規超伝導候補物質のスクリーニング
 - 4 新規圧力誘起超伝導体の発見

第2節 バルクコンピナトリアル合成による新規超伝導物質の探索

- 《伊豫 彰、川島 健司》
- 1 はじめに
 - 2 コンピナトリアルケミストリーについて
 - 3 BC法の実施手順の概要
 - 4 BC法に必要な設備
 - 5 BC法の各プロセスの詳細
 - 6 BC法による新規超伝導物質の発見例
 - 7 課題と展望

第3節 機械学習を用いた超伝導臨界温度T_cの予測

- 《松本 要》
- 1 はじめに
 - 2 超伝導臨界温度T_c予測の試み
 - 3 機械学習を用いたT_c予測—我々が実施した例を中心に
 - 4 いくつかのT_c予測の例—3元物質系
 - 5 今回のT_c測に伴う課題
 - 6 T_c予測に関するその他の手法
 - 7 まとめ