

データ駆動型 材料開発

発刊：2021年11月
体裁：B5判290頁
定価：本体52,000円＋税
ISBN：【冊子版】
978-4-86043-759-6
【電子版】
978-4-86043-760-2
Cコード：C3058



オントロジーとマイニング、計測と実験装置の自動制御

- ・マテリアルズ・インフォマティクスを加速化させ実験プロセスを革新する「データ駆動型材料開発」の全貌！
- ・材料探索のオントロジー、文献情報の抽出、計測インフォマティクスから実験装置の自動制御まで！
- ・新規触媒や電池材料など、最新のデータ駆動型材料探索手法も一挙掲載！

※NTSサイトにて
無料の電子試読が
可能です

監修者

船津 公人

奈良先端科学技術大学院大学／
東京大学名誉教授

編集委員

(巨次構成順)

高橋 ローレンニコール 北海道大学

山縣 友紀 理化学研究所

松本 裕治 理化学研究所

上田 渉 神奈川大学

富谷 茂隆 ソニーグループ(株)／東京工業大学

長田 貴弘 物質・材料研究機構

執筆者

(掲載順)

船津 公人 奈良先端科学技術大学院大学／
東京大学名誉教授

堀 憲次 (株)Transition State Technology
((株)TSテクノロジー)／山口大学

山口 徹 (株)Transition State Technology
((株)TSテクノロジー)

高橋 ローレンニコール 北海道大学

山縣 友紀 理化学研究所

堀田 達矢 理化学研究所

松本 裕治 理化学研究所

石井 真史 物質・材料研究機構

岡 博之 物質・材料研究機構

鈴木 晃 物質・材料研究機構

坂本 浩一 物質・材料研究機構

石垣 達也 産業技術総合研究所

加藤 明彦 奈良先端科学技術大学院大学

吉川 友也 千葉工業大学

進藤 裕之 奈良先端科学技術大学院大学

久米 慧嗣 大阪電気通信大学

古崎 晃司 大阪電気通信大学

高下 大貴 奈良先端科学技術大学院大学

小野 直亮 奈良先端科学技術大学院大学

黄 銘 奈良先端科学技術大学院大学

Md.Altaf-UI-Amin

奈良先端科学技術大学院大学

金谷 重彦 奈良先端科学技術大学院大学

香掛健太郎 理化学研究所／名古屋大学

原田 俊太 名古屋大学

宇治原 徹 名古屋大学

清水 研一 北海道大学

濱本 信次 福岡工業大学

蒲池 高志 福岡工業大学

日沼 洋陽 産業技術総合研究所

宮里 一旗 北海道大学

高橋 啓介 北海道大学

矢田 陽 産業技術総合研究所

佐藤 一彦 産業技術総合研究所

富谷 茂隆 ソニーグループ(株)／

東京工業大学

山本 寛人 ソニーグループ(株)

山下 俊介 ソニーグループ(株)

永村 直佳 物質・材料研究機構／

科学技術振興機構／

東京理科大学

松村太郎次郎 産業技術総合研究所

安藤 康伸 産業技術総合研究所

堀場 弘司 量子科学技術研究開発機構

尾嶋 正治 東京大学名誉教授／

東京都市大学

孝橋 照生 (株)日立製作所

石附 直弥 東京工業大学

清水 亮太 東京工業大学

一杉 太郎 東京工業大学

長田 貴弘 物質・材料研究機構

柳生進二郎 物質・材料研究機構

松田 翔一 物質・材料研究機構

岩崎 悠真 物質・材料研究機構

石田 真彦 日本電気(株)

概要目次

序 章 研究手法を変えるデータ駆動型化学

第1章 データ駆動型合成経路開発

第2章 材料データベースとオントロジー

第3章 材料設計の知識探索

第4章 構造・物性探索と機械学習

第5章 新規触媒開発

第6章 計測インフォマティクス

第7章 実験の自動化化学

第8章 解釈可能な機械学習を用いた
磁性熱電材料開発

株式会社 エヌ・ティー・エス 行 FAX:047-314-0810

年 月 日

「データ駆動型材料開発」

冊子版()部 / CD版()部

申込要領

■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よりボルビ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・ティー・エス 営業部

株式会社 エヌ・ティー・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

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	

ここにご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)お客様に有用と思われる当社提携先の書籍・サービス等の紹介
高、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。

データ駆動型材料開発

オントロジーとマイニング、計測と実験装置の自動制御

序章 研究手法を変えるデータ駆動型化学

〈船津 公人〉

第1章 データ駆動型合成経路開発

〈堀 憲次, 山口 徹〉

第2章 材料データベースとオントロジー

第1節 材料データベースとオントロジー

〈高橋 ローレンニコール〉

第2節 オープンサイエンス時代の化合物データベースと医薬品開発における安全性評価のためのオントロジー

〈山縣 友紀, 柳田 達矢〉

第3章 材料設計の知識探索

第1節 材料設計の知識抽出

〈松本 裕治〉

第2節 データ抽出と自然言語処理

第1項 高分子材料設計のための

文献データの自動抽出・アノテーション概説

〈石井 真史, 岡 博之, 鈴木 晃〉

第2項 論文からのデータ抽出の具体例

〈岡 博之, 鈴木 晃, 石井 真史〉

第3項 効率的なアノテーションツール

〈鈴木 晃, 岡 博之, 石井 真史〉

第3節 材料設計のための知識ベース構想

〈坂本 浩一, 石井 真史〉

第4節 材料設計のための自然言語処理技術

〈石垣 達也〉

第5節 高分子材料文献からの図表の抽出と読み取り

〈加藤 明彦, 古川 友也, 進藤 裕之〉

第6節 材料知識探索のためのオントロジー

〈久米 慧嗣, 古崎 晃司〉

第4章 構造・物性探索と機械学習

第1節 構造・物性探索と深層学習

〈高下 大貴, 小野 直亮, 黄 銘, Md.Altaf-Ul-Amin, 金谷 重彦〉

第2節 無機材料プロセス開発MI

〈杵掛 健太郎, 原田 俊太, 宇治原 徹〉

第5章 新規触媒開発

第1節 第一原理計算とインフォマティクスを用いた触媒設計に向けて

〈清水 研一, 濱本 信次, 蒲池 高志, 日沼 洋陽〉

第2節 データ科学が導く新規触媒開発

— 触媒データから見た

触媒インフォマティクスの現状と課題

〈宮里 一旗, 高橋 啓介〉

第3節 産業技術総合研究所の触媒開発におけるインフォマティクスの現状と展望

〈矢田 陽, 佐藤 一彦〉

第6章 計測インフォマティクス

第1節 電子線損失分光法による窒化物半導体の解析

— 材料加工・成膜プロセスをケーススタディとして —

〈富谷 茂隆, 山本 寛人, 山下 俊介, 船津 公人〉

第2節 半導体デバイス・電池における

オペランドイメージング分析

〈永村 直佳, 松村 太郎次郎, 安藤 康伸, 堀場 弘司, 尾嶋 正治〉

第3節 Nd-Fe-B焼結磁石における

スピノSEMによる織構造／磁性解析

〈孝橋 照生〉

第7章 実験の自動化化学

第1節 自律的物質創製技術

〈石附 直弥, 清水 亮太, 一杉 太郎〉

第2節 スマートラボによる薄膜材料開発とデータ連携

〈長田 貴弘〉

第3節 サンプルマルチ診断のための

マテリアルシーケンサー開発

〈柳生 進二郎〉

第4節 電池材料探索の自動化技術

〈松田 翔一〉

第8章 解釈可能な機械学習を用いた磁性熱電材料開発

〈岩崎 悠真, 石田 真彦〉

* 本書に記載されている会社名、製品名、サービス名は各社の登録商標または商標です。なお、本書に記載されている製品名、サービス名等には、必ずしも商標表示(®、TM)を付記していません。