

CREST「元素戦略を基軸とする物質・材料の革新的機能の創出」  
理論と実験の連携強化を目指したシンポジウム

# マテリアルズ・インフォマティクスの構築と 新材料の効率的探索

<http://cms.mtl.kyoto-u.ac.jp/informatics.html>



京都大学大学院 工学研究科 材料工学専攻  
京都大学 福井謙一記念研究センター  
ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所



田中 功

2012年1月24日  
富士ソフトアキバプラザ5階 アキバホール

# 背景：巨大情報処理が可能な時代

## ハードウェア技術の進歩

演算能力の増大

記憶容量の増大

ネットワーク整備

## ソフトウェア技術の進歩

データ処理・解析技術の進歩



# 巨大情報処理の成功例:ビジネス

- ナレッジマネジメント : 巨大データの有効活用
- データマイニング : 巨大データの中に潜んでいる知識や価値を発掘 (Mine:発掘)

## データマイニングの

### マーケットバスケット

販売時点情報管理(Point of sale=POS)システム のデータ処理

米国ウォルマート

『紙おむつを買う男性は, ビールも一緒に買う。』

Amazon.co.jp

『山田 \* 郎様へのおすすめ商品』

## バイオ・インフォマティクス (*Bio-informatics*)

- 実験による多量のデータ取得
- データの選別と加工
- 解析(統計的手法, データ・マイニングなど)

ゲノムの構造(塩基配列)や機能(遺伝子発現情  
から生命現象を理解する

その情報に基づいて, 医療技術を設計・開発す

ゲノム創薬 *Pharmaco-Genomics*

### マテリアルズ・インフォマティクス (*Materials informatics*)

- 多量のデータ取得
- データの選別と加工
- 解析(統計的手法, データ・マイニングなど)

電子・原子配列や機能発現の微視的機  
から材料現象を理解する

その情報に基づいて, 新規材料を設計・開発す

材料科学への新しいアプローチ

# データベースの一例

# ICSD

**JAICI**  
化学情報協会 HOME

English

協会案内 | 製品とサービス | 講習会 | イベント | 資料請求

**結晶構造・スペクトルデータベース**  
結晶構造、スペクトルなど化学に関する各種データベースをお届けしています。

製品とサービスのトップへ ▲

結晶構造・スペクトルデータベース

CSD

**ICSD**

CRYSTMET

NIST11

構造解析ソフトウェア

GOLD Suite

Relibase+

DASH

各種辞典・叢書類

化合物辞典 DVD / Web 版

Science of Synthesis

配列データベース

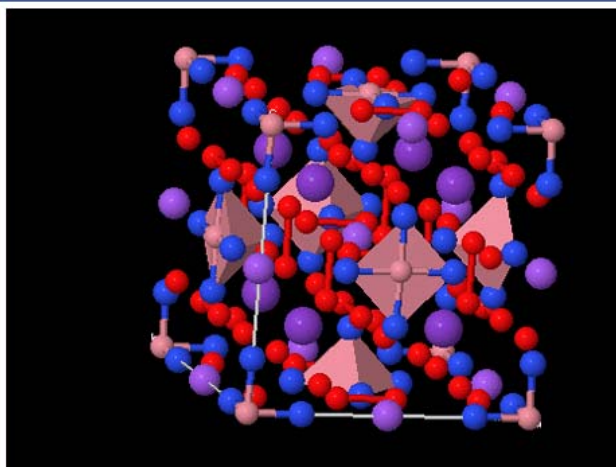
USGENE in-house

よくあるご質問

お申込/お問い合わせは  
科学データ情報室まで  
TEL:03-5978-3622  
FAX:03-5978-3600

eメール (科学データ情報室)

## ICSD (無機結晶構造データベース)



× 線解析による鉱物・セラミックス・金属間化合物など、元素と無機化合物の結晶構造が収録されています。検索プログラム、結晶構造表示プログラム、粉末パターンシミュレーションプログラムが付いています。含有元素、組成式、結晶学データ、キーワード、ANX formula できます。

### ICSD (無機結晶構造データベース) の概要

Inorganic Crystal Structure Database: ICSD

製作	FIZ Karlsruhe (独), NIST (米)
内容	無機化合物の名称、分子式、三次元原子座標値、結晶学データ、書誌事項
件数	142,000 件以上 (2011 年 12 月現在)
更新	年 2 回、年約 1 万件追加

ICSD 2

Items: 1 - 500  
Page #: 1  
Total Hits: 725

Num Checked: 0  
Change page

(((O AND Mg AND Si)) AND (EC[4]))

CCode	Year	Space Group	Z	Sum Formula	Unit Cell	Reduced Cell	
<input type="checkbox"/>	261438	2011	CCCM	4	Al4 Mg2 O18 Si5	17.288 9.833 9.41 90 90 1599.63	9.41 9.833 9.944 119.630 90 89
<input type="checkbox"/>	261439	2011	P6/MCC	2	Al4 Mg2 O18 Si5	9.779 9.779 9.333 90 90 120 772.93	9.333 9.779 9.779 120 90 90 77
<input type="checkbox"/>	261440	2011	P6/MCC	2	Al4 Mg2 O18 Si5	9.876 9.876 9.382 90 90 120 792.48	9.382 9.876 9.876 120 90 90 79
<input type="checkbox"/>	34185	1979	P121/A1	4	Al8.31 Mg3.78 O...	11.286 14.438 9.957 90 125.4 90 13...	9.814 9.957 14.438 89.999 90 1
<input type="checkbox"/>	34186	1979	P121/A1	4	Al8.31 Mg3.78 O...	11.286 14.438 9.957 90 125.4 90 13...	9.814 9.957 14.438 89.999 90 1
<input type="checkbox"/>	15200	1969	P121/A1	4	Al9 Mg3.5 O20 S...	11.266 14.401 9.929 90 125.46 90 1...	9.783 9.929 14.401 89.999 90 1
<input type="checkbox"/>	73776	1993	P63	6	Ba1 Mg1 O4 Si1	9.1118 9.1118 8.7371 90 90 120 628...	8.737 9.111 9.111 120 90 90 62
<input type="checkbox"/>	420258	2009	C12/C1	8	Ba1 Mg2 O7 Si2	7.2455 12.7138 13.7481 90 90.2107 ...	7.245 7.316 13.748 89.895 89.7
<input type="checkbox"/>	81117	1995	P4-21M	2	Ba2 Mg1 O7 Si2	8.2036 8.2036 5.4058 90 90 90 363.81	5.405 8.203 8.203 90 90 90 363
<input type="checkbox"/>	419862	2009	P3-	3	Ba3 Mg1 O8 Si2	9.7241 9.7241 7.2765 90 90 120 595...	7.276 9.724 9.724 119.999 90 9
<input type="checkbox"/>	460006	2000	P21/M1	1	Ba1 Mg1 O8 Si2	5.6145 5.6145 7.2765 90 90 120 100...	5.614 5.614 7.276 90 90 120 10

\*data for ICSD #157083  
Coll Code 157083  
Rec Date 2008/02/01  
Chem Name Magnesium Aluminium Catena-alumosilicate \*  
Structured (Mg0.975 Al0.025) ((Si0.975 Al0.025) O3)  
Sum Al0.05 Mg0.975 O3 Si0.975  
ANX AB39C40X120  
Min Name Unnamed\_Perovskite  
D(calc) 4.1

©2011 by Fachinformationzentrum Karlsruhe, and the U.S. Secretary of Commerce on behalf of the United States. All rights reserved.

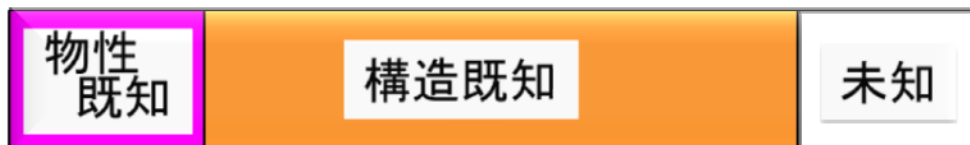
件数

142,000 件以上 (2011 年 12 月現在)

# 無機化合物の多様性

結晶構造データベース	ICSD(ドイツ)	: 50000種 (重複除外)
熱力学データベース	NIST(米)	: 4600種
	FACT(米)	: 4500種
	MALT(日)	: 2200種
その他の物性値のデータ	Landolt-Börnsteinなど	: < 1000種

## 無機化合物結晶の種類



$$2元 : {}_{80}C_2 \times 10 = 3万$$

組成比10種類



$$3元 : {}_{80}C_3 \times 100 = 800万$$

組成  $A_xB_yC_z$  ( $x+y+z=10$  かつ整数比)

多形, 不規則相などで, もっと多様に.

- 構造既知な化合物は単純2元系. それ以外は僅か.
- さらに物性既知な化合物は, 極めて少ない.

# 結晶の第一原理計算の進展

計算技術の進歩(ソフト)  
計算機の進歩(ハード)

多重実行による  
熱・統計力学との連携  
自由エネルギー( $T, p, x_i$ )

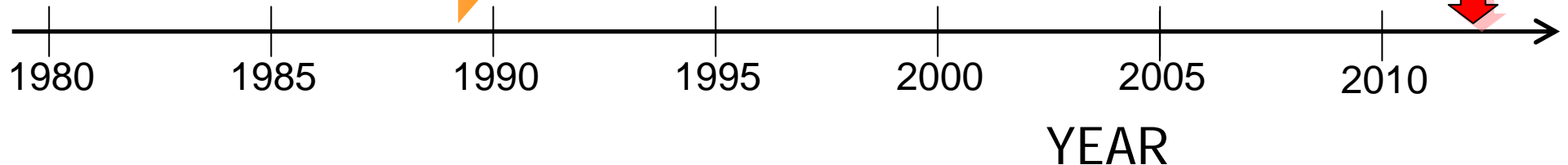
複雑欠陥・ナノ構造  
at  $T=0$  K

複雑結晶・単純欠陥  
at  $T=0$  K

単純結晶  
at  $T=0$  K

高精度化

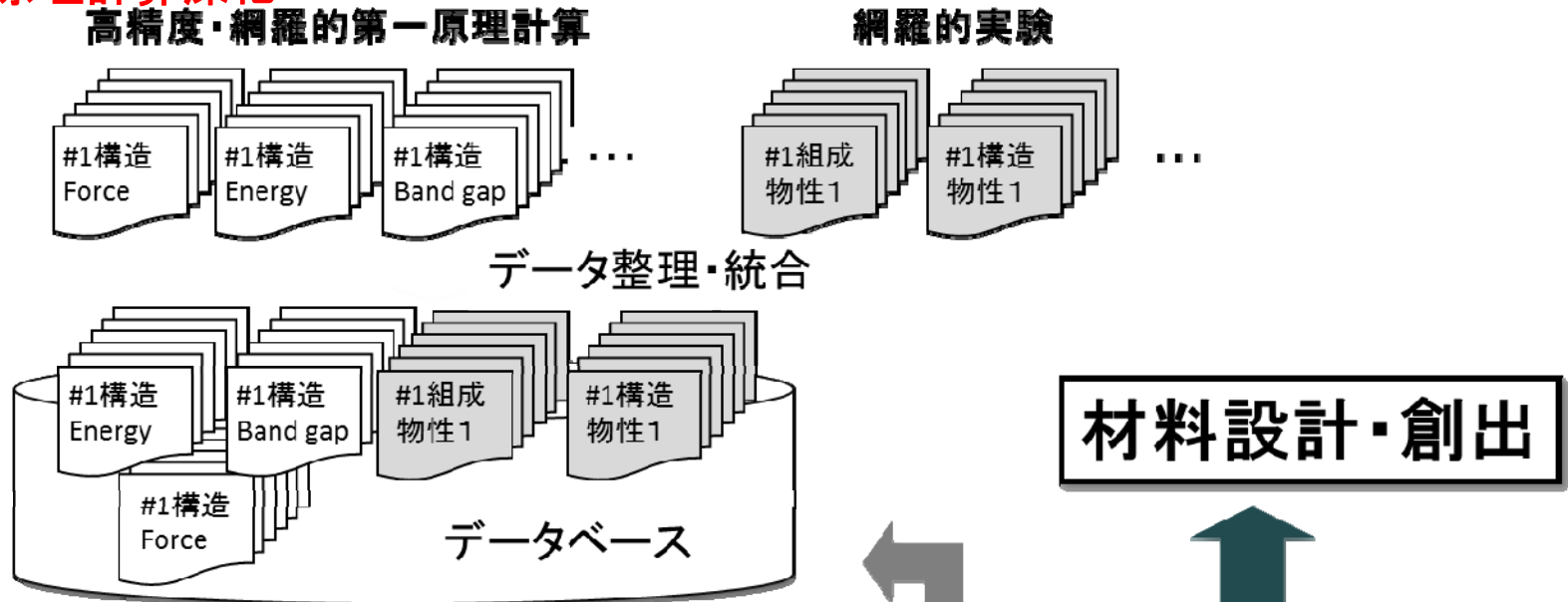
網羅的計算





# 第一原理計算に基づくマテリアルズ・インフォマティクス

## ① 第一原理計算深化



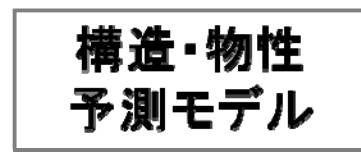
## ② データベース構築



## ④ 実験と計算による検定



## ③ 予測モデルの構築とスクリーニング



# ① 第一原理計算の深化

格子振動(フォノン)計算

熱膨張係数

比熱の温度依存性

自由エネルギー(振動項)

格子ダイナミクス計算

非調和振動 物性

原子拡散

熱伝導度

合金構造

固溶体の自由エネルギー

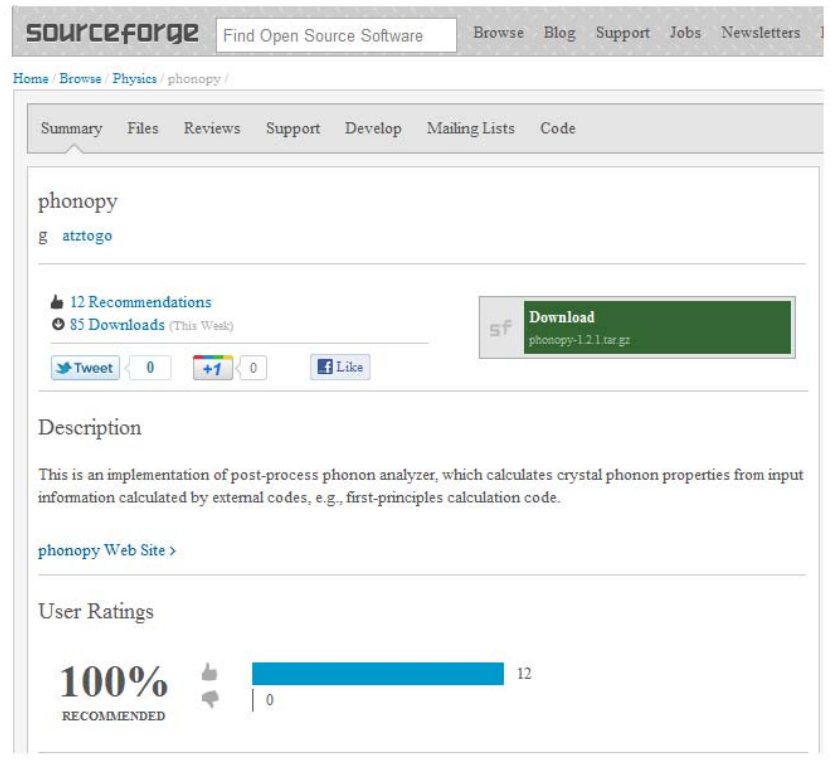
構造探索

基底状態探索, 反応経路探索

# フォノン計算プログラム phonopy: open source公開

<http://phonopy.sf.net/>

(京大・東後篤史)



sourceforge Find Open Source Software Browse Blog Support Jobs Newsletters

Home / Browse / Physics / phonopy /

Summary Files Reviews Support Develop Mailing Lists Code

phonopy  
g atzogo

12 Recommendations  
85 Downloads (This Week)

Download  
phonopy-1.2.1.tar.gz

Tweet 0 +1 0 Like

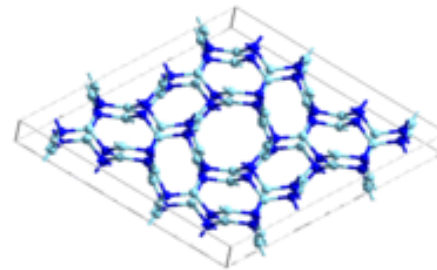
Description

This is an implementation of post-process phonon analyzer, which calculates crystal phonon properties from input information calculated by external codes, e.g., first-principles calculation code.

[phonopy Web Site >](#)

User Ratings

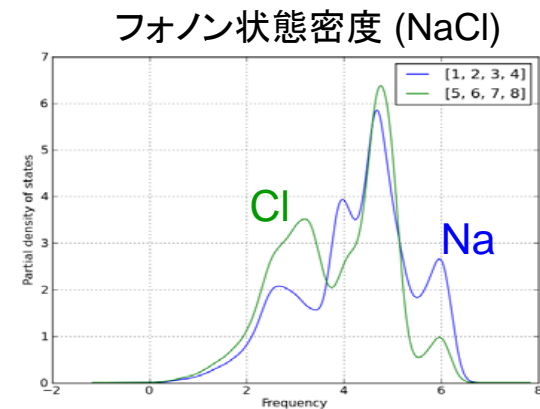
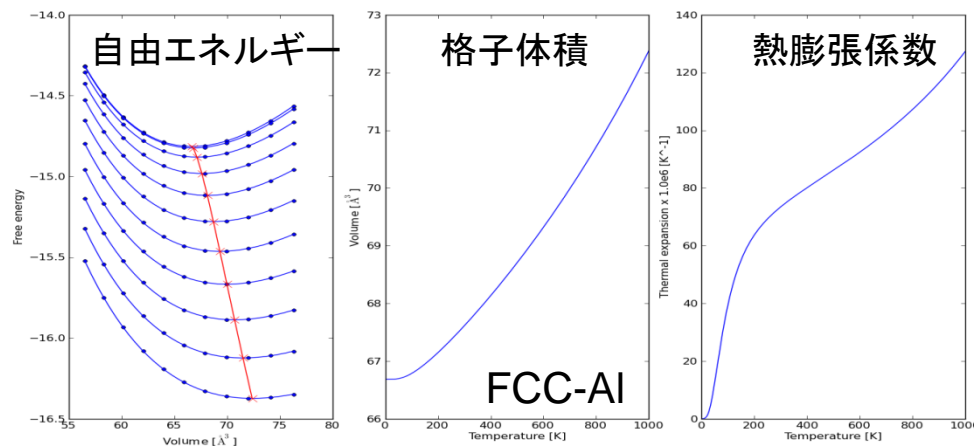
100% RECOMMENDED 12



$\beta$ -Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>のソフトなモード

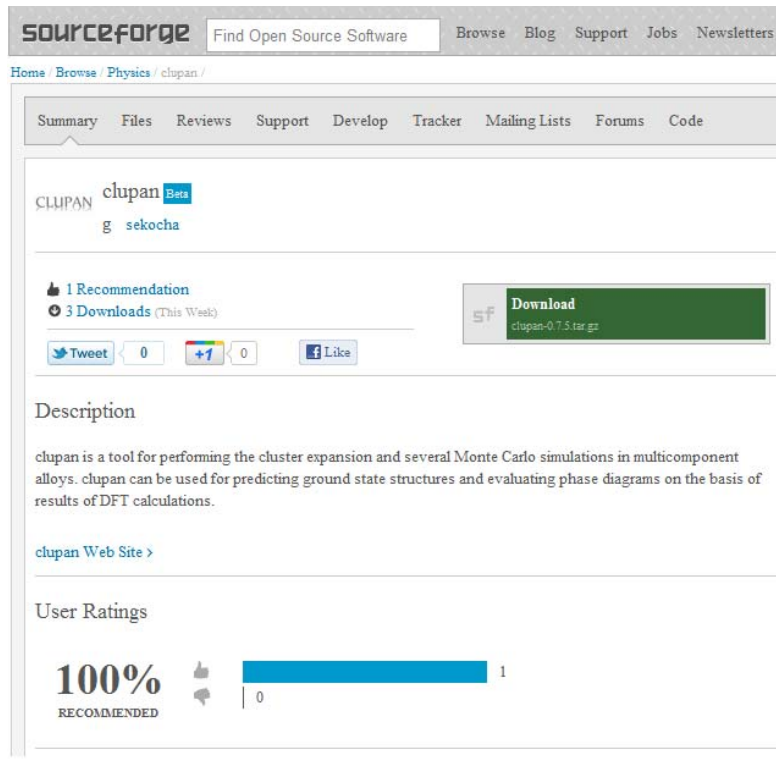


- ・第一原理計算などと連携し、フォノン計算
- ・振動モード解析, 周波数計算
- ・振動自由エネルギー計算(準調和近似)



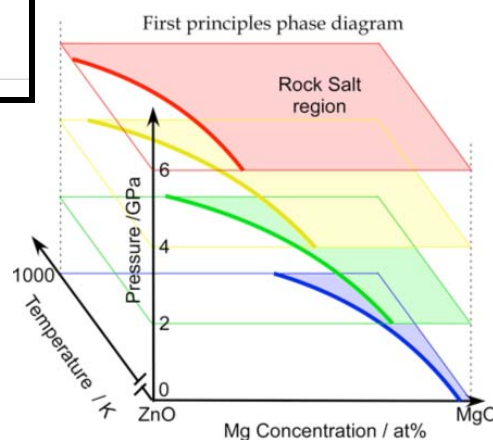
# 熱・統計力学計算プログラム clupan: open source公開

<http://clupan.sf.net/>

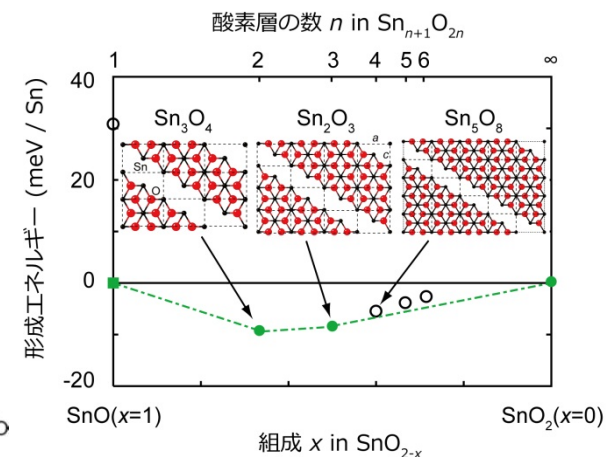


(京大・世古敦人)

- ・第一原理計算と連携したクラスター展開法
- ・格子モンテカルロ計算による平衡状態図計算
- ・原子配置自由エネルギー計算



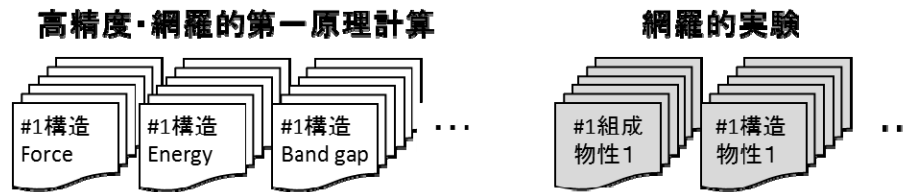
二元系平衡状態図



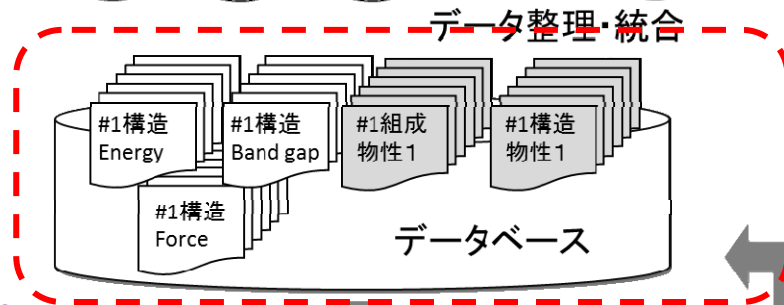
結晶構造探索

## ② データベース構築

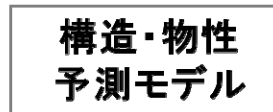
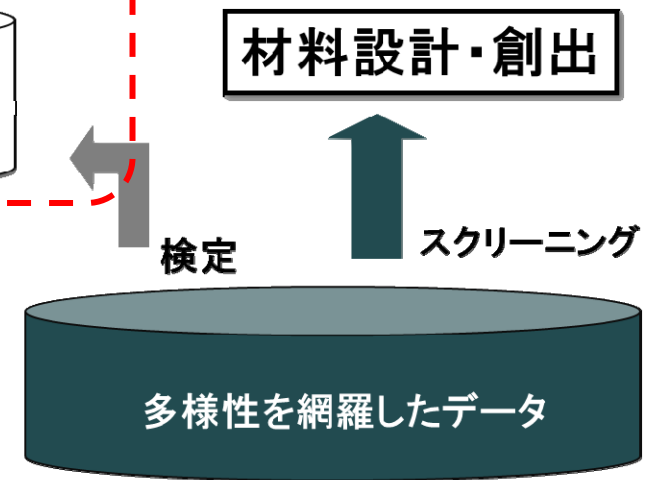
① 構造既知の物質を  
網羅して計算



② 構造未知でも  
周期表の元素組み合わせ  
に網羅的な計算



③ 様々な物性値を  
網羅的に計算



# 多重処理プログラム qsushi: open source公開

<http://qsushi.sf.net/>

## Qsushi

Qsushi is a collection of software packages for crystal calculations. Qsushi aims to offer semi-automation of calculation steps by wrapping calculators like VASP and queueing systems like GridEngine [2]. The following features are under development:

- Iteration of structure optimizations
- Total energy, eigenvalues, DOS, band structure
- Forces, Stress, Bulk modulus, elastic constants
- Phonon calculation with [phonopy](#)

The following tools to perform the tasks are prepared:

- General purpose class of crystal structure
- Batch like system for sequential calculations
- Task parallelization using queueing system
- Calculator files parsers and writers
- Crystal symmetry handling with [spglib](#)

[1] A first-principles calculation package (<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/>)

[2] An open source queueing system (<http://gridengine.org>)



京大・東後篤史

## Documentation

- Contents
  - How to Install
  - Environment setups

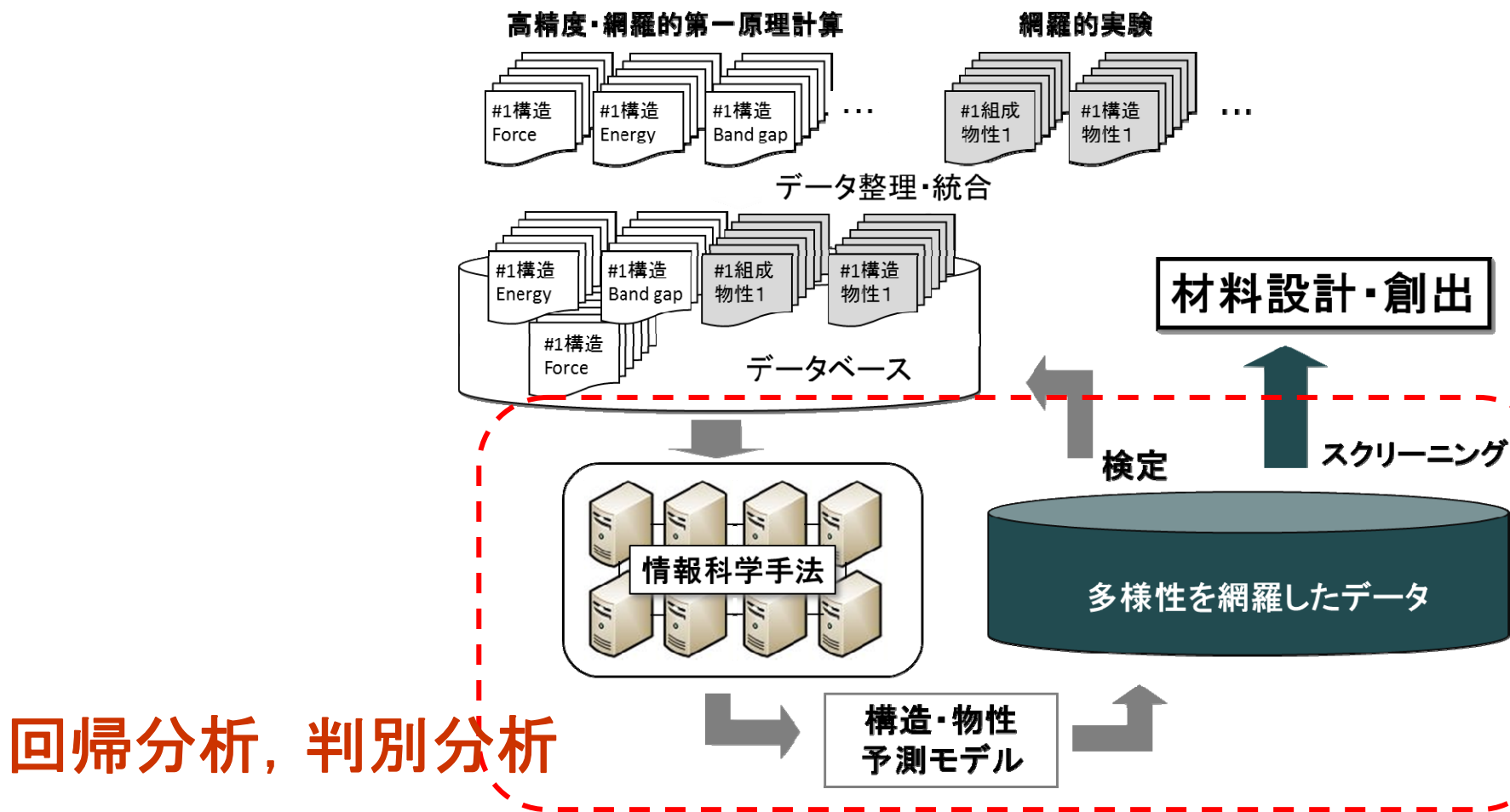
## Example scripts

```
#!/usr/bin/env python

import os
import numpy as np
import time
```

```
aachen:~/Perovskite/Amm2
BaCeO3_24/ CdIrO3_24/ CsFeF3_12/ GaSiO3_24/ KAsO3_15/ LiOsF3_12/ MoPbO3_24/ NiRhO3_24/ PtTiO3_24/ RhCO3_24/ TlOsO3_24/
BaCO3_24/ CdOsO3_24/ CsGaF3_12/ GaSnO3_24/ KBaF3_12/ LiPdF3_12/ MoPdO3_24/ NiRuO3_24/ PtZrO3_24/ RhGeO3_24/ TlPbO3_24/
BaGeO3_24/ CdPbO3_24/ CsHgF3_12/ GaTiO3_24/ KBeF3_12/ LiPtF3_12/ MoPtO3_24/ NiSiO3_24/ RbAsO3_15/ RhHfO3_24/ TlPdO3_24/
BaHfO3_24/ CdPdO3_24/ CsInF3_12/ GaZrO3_24/ KBiO3_15/ LiReF3_12/ MoRhO3_24/ NiSnO3_24/ RbBaF3_12/ RhIrO3_24/ TlPtO3_24/
BaIrO3_24/ CdPtO3_24/ CsIrF3_12/ HgCeO3_24/ KCaF3_12/ LiRhF3_12/ MoRuO3_24/ NiTiO3_24/ RbBeF3_12/ RhOsO3_24/ TlRhO3_24/
BaOsO3_24/ CdRhO3_24/ CsMgF3_12/ HgCO3_24/ KCdF3_12/ LiRuF3_12/ MoSiO3_24/ NiZrO3_24/ RbBiO3_15/ RhPbO3_24/ TlRuO3_24/
BaPbO3_24/ CdRuO3_24/ CsMnF3_12/ HgGeO3_24/ KCoF3_12/ LisbO3_15/ MoSnO3_24/ OsCeO3_24/ RbCaF3_12/ RhPdO3_24/ TlSiO3_24/
BaPdO3_24/ CdSiO3_24/ CsMoF3_12/ HgHfO3_24/ KCrF3_12/ LiSrF3_12/ MoTiO3_24/ OsCO3_24/ RbCdF3_12/ RhPtO3_24/ TlSnO3_24/
BaPtO3_24/ CdSnO3_24/ CsNbO3_15/ HgIrO3_24/ KFeF3_12/ LiTaO3_15/ MoZrO3_24/ OsGeO3_24/ RbCoF3_12/ RhRhO3_24/ TlTiO3_24/
BaRhO3_24/ CdTiO3_24/ CsNiF3_12/ HgOsO3_24/ KGaF3_12/ LiTlF3_12/ NaAsO3_15/ OsHfO3_24/ RbCrF3_12/ RhRuO3_24/ TlZrO3_24/
BaRuO3_24/ CdZrO3_24/ CsOsF3_12/ HgPbO3_24/ KHfO3_12/ LiVO3_15/ NaBaF3_12/ OsIrO3_24/ RbFeF3_12/ RhSiO3_24/ WCeO3_24/
BaSiO3_24/ CoCeO3_24/ CsPdF3_12/ HgPtO3_24/ KInF3_12/ LiWF3_12/ NaBeF3_12/ OsOsO3_24/ RbGaF3_12/ RhSnO3_24/ WCO3_24/
BaSnO3_24/ CoCO3_24/ CsPtF3_12/ HgPtO3_24/ KIrF3_12/ LiZnF3_12/ NaBiO3_15/ OsPbO3_24/ RbHgF3_12/ RhTiO3_24/ WGeO3_24/
BaTiO3_24/ CoGeO3_24/ CsReF3_12/ HgRhO3_24/ KMgF3_12/ MgCeO3_24/ NaCaF3_12/ OsPdO3_24/ RbInF3_12/ RhZrO3_24/ WHfO3_24/
BaZrO3_24/ CoHfO3_24/ HgSnO3_24/ KNbO3_15/ MgHfO3_24/ NaCF3_12/ WIrO3_24/
BeCeO3_24/ CoIrO3_24/ HgTiO3_24/ KNiF3_12/ MgIrO3_24/ NaFeF3_12/ WOsO3_24/
BeCO3_24/ CoOsO3_24/ HgZrO3_24/ KOsF3_12/ MgOsO3_24/ NaGaF3_12/ WPbO3_24/
BeGeO3_24/ CoPbO3_24/ InCeO3_24/ KPdF3_12/ MgPbO3_24/ NaHgF3_12/ WPdO3_24/
BeHfO3_24/ CoPdO3_24/ InCO3_24/ KPtF3_12/ MgPdO3_24/ NaInF3_12/ WPTO3_24/
BeIrO3_24/ CoPtO3_24/ InGeO3_24/ KReF3_12/ MgPtO3_24/ NaIrF3_12/ WRhO3_24/
BeOsO3_24/ CoRhO3_24/ InHfO3_24/ KRhF3_12/ MgRhO3_24/ NaMgF3_12/ WRuO3_24/
BePbO3_24/ CoRuO3_24/ InIrO3_24/ KRuF3_12/ MgRuO3_24/ NaMnF3_12/ WSiO3_24/
BePdO3_24/ CoSiO3_24/ InOsO3_24/ KSbO3_15/ MgSiO3_24/ NaMoF3_12/ WSnO3_24/
BePtO3_24/ CoSnO3_24/ InPbO3_24/ KSrF3_12/ MgSnO3_24/ NaNbO3_15/ WTiO3_24/
BeRhO3_24/ CoTiO3_24/ InPdO3_24/ KTaO3_15/ MgTiO3_24/ NaNiF3_12/ WZrO3_24/
BeRuO3_24/ CoZrO3_24/ FeTiO3_24/ IrGeO3_24/ LiCdF3_12/ MnPtO3_24/ NaTlF3_12/ PtCeO3_24/ ReHfO3_24/ SrPdO3_24/ ZnCeO3_24/
BeSiO3_24/ CrCeO3_24/ CaPbO3_24/ CrSiO3_24/ FeZrO3_24/ IrHfO3_24/ LiCoF3_12/ MnRhO3_24/ NaVO3_15/ PtCO3_24/ ReIrO3_24/ SrPtO3_24/ ZnCO3_24/
BeSnO3_24/ CrCoO3_24/ CaPdO3_24/ CrSnO3_24/ GaCeO3_24/ IrIrO3_24/ LiCrF3_12/ MnRuO3_24/ NaWF3_12/ PtGeO3_24/ ReOsO3_24/ SrRhO3_24/ ZnGeO3_24/
BeTiO3_24/ CrGeO3_24/ CaPtO3_24/ CrTiO3_24/ GaCO3_24/ IrOsO3_24/ LiFeF3_12/ MnSiO3_24/ NaZnF3_12/ PtHfO3_24/ RePbO3_24/ SrRuO3_24/ ZnHfO3_24/
BeZrO3_24/ CrHfO3_24/ CaRuO3_24/ CrZrO3_24/ GaGeO3_24/ IrPbO3_24/ LiGaF3_12/ MnSnO3_24/ NiCeO3_24/ PtIrO3_24/ RePdO3_24/ SrSiO3_24/ ZnIrO3_24/
CaCeO3_24/ CrIrO3_24/ CaSiO3_24/ CsAsO3_15/ GaHfO3_24/ IrPdO3_24/ LiHgF3_12/ MnTiO3_24/ NiCO3_24/ PtOsO3_24/ RePtO3_24/ SrSnO3_24/ ZnOsO3_24/
CaCO3_24/ CrOsO3_24/ CaSnO3_24/ CsBaF3_12/ GaIrO3_24/ IrPtO3_24/ LiInF3_12/ MnZrO3_24/ NiGeO3_24/ PtPbO3_24/ ReRhO3_24/ SrTiO3_24/ ZnPbO3_24/
CaGeO3_24/ CrPbO3_24/ CaTiO3_24/ CsBeF3_12/ GaOsO3_24/ IrRhO3_24/ LiIrF3_12/ MoCeO3_24/ NiHfO3_24/ PtPdO3_24/ ReRuO3_24/ SrZrO3_24/ ZnPdO3_24/
CaHfO3_24/ CrPdO3_24/ CaZrO3_24/ CsBiO3_15/ GaPbO3_24/ IrRuO3_24/ LiMgF3_12/ MoCO3_24/ NiIrO3_24/ PtPtO3_24/ ReSiO3_24/ TlCeO3_24/ ZnPtO3_24/
CaIrO3_24/ CrPtO3_24/ CdCeO3_24/ CsCaF3_12/ GaPdO3_24/ IrSiO3_24/ LiMnF3_12/ MoGeO3_24/ NiOsO3_24/ PtRhO3_24/ ReSnO3_24/ TlCO3_24/ ZnRhO3_24/
CaOsO3_24/ CrRhO3_24/ CdCO3_24/ CsCdF3_12/ GaPtO3_24/ IrSnO3_24/ LiMoF3_12/ MoHfO3_24/ NiPbO3_24/ PtRuO3_24/ ReTiO3_24/ TlGeO3_24/ ZnRuO3_24/
CdGeO3_24/ CsCoF3_12/ GaRhO3_24/ IrTiO3_24/ LiNbO3_15/ MoIrO3_24/ NiPdO3_24/ PtSiO3_24/ ReZrO3_24/ TlHfO3_24/
CdHfO3_24/ CsCrF3_12/ GaRuO3_24/ IrZrO3_24/ LiNiF3_12/ MoOsO3_24/ NiPtO3_24/ PtSnO3_24/ RhCeO3_24/ TlIrO3_24/
togo@aachen %
```

### ③ 予測モデルの構築とスクリーニング



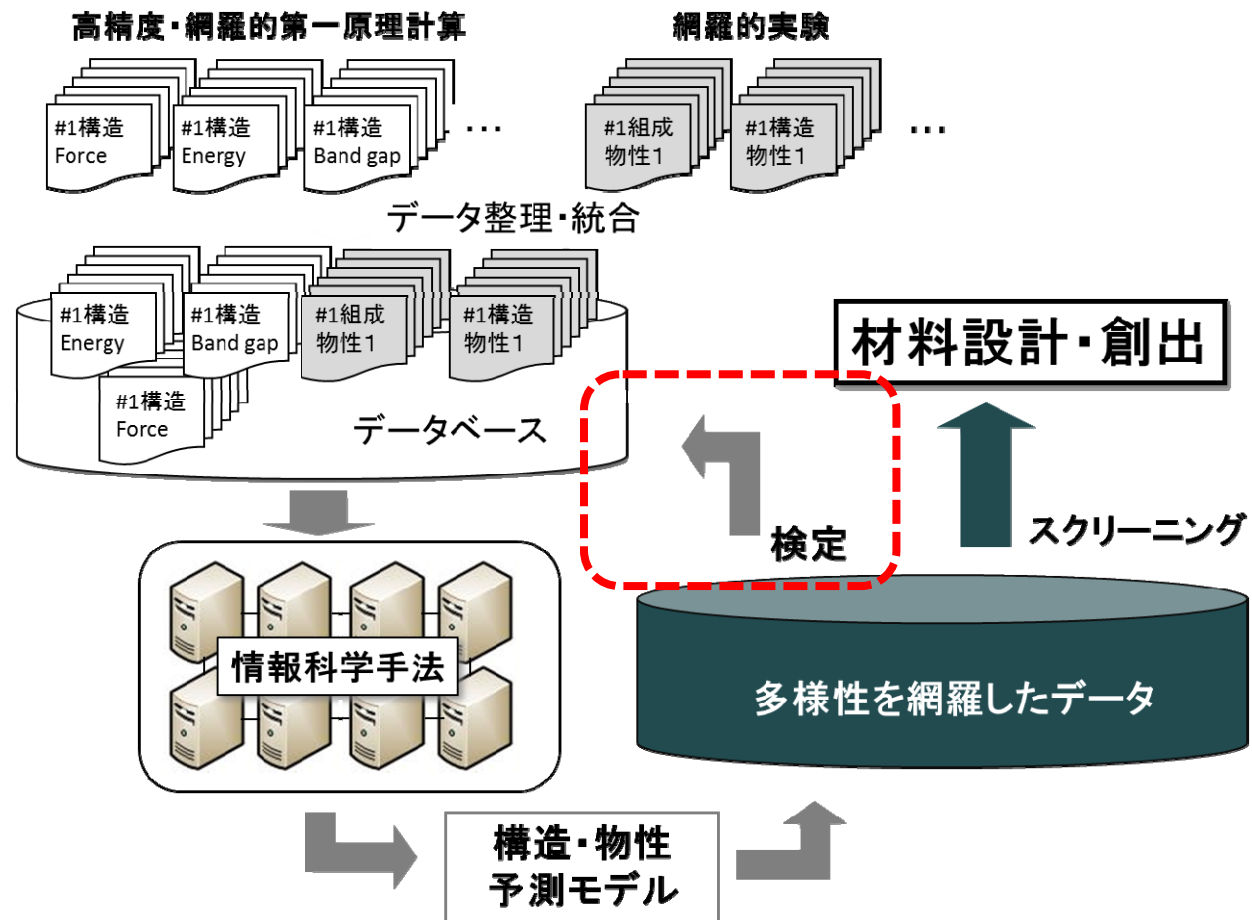
ロジスティック回帰

ニューラルネットワーク

サポートベクターマシン



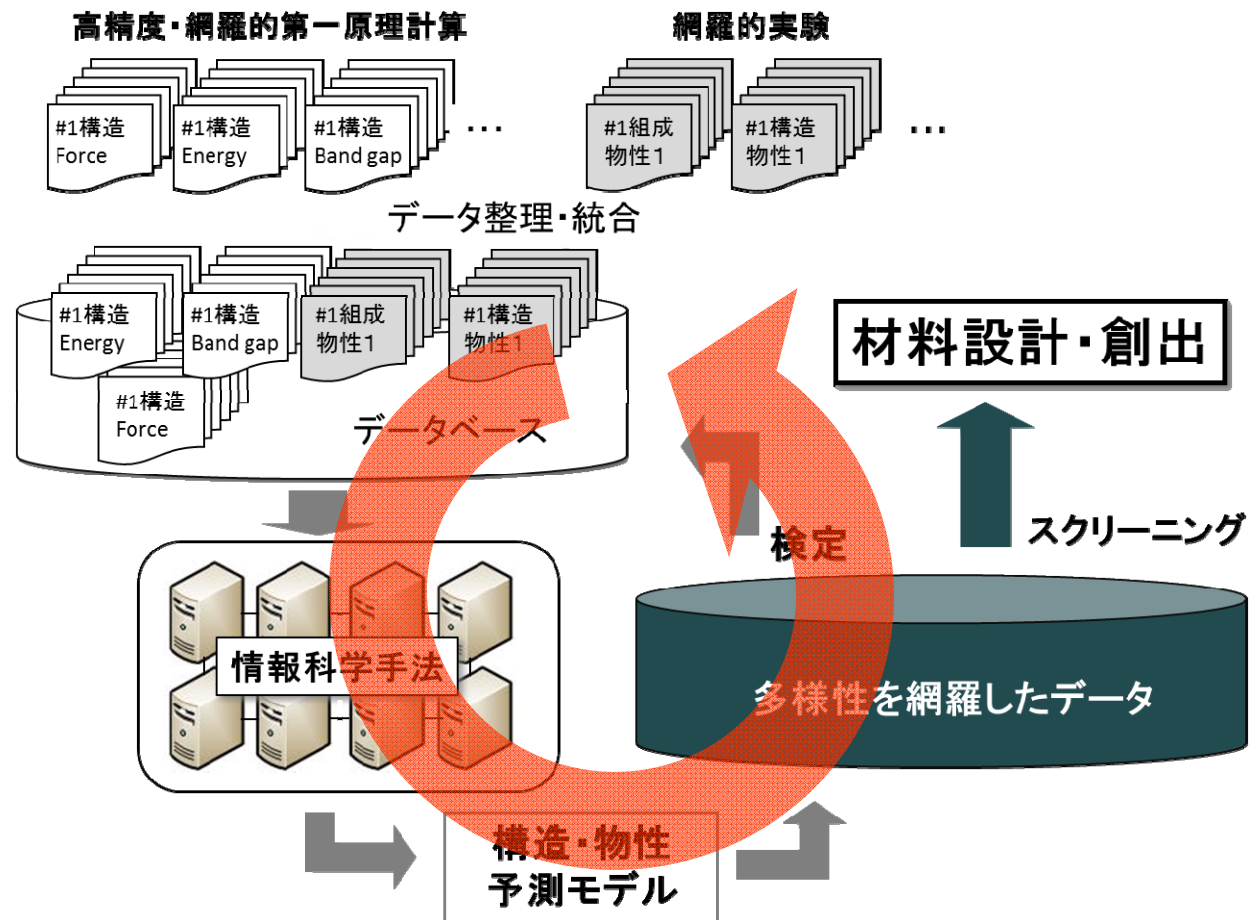
## ④ 実験と計算による検定



得られた予測の精度を上げるために、予測モデルの検証を逐次行う。

**実験 and/or 第一原理計算**

# マテリアルズ・インフォマティクスの構築



・新材料の効率的探索

・複雑な巨視的現象の素過程や機構解明にフィードバック