

ヘテロカーボン複合解析用データベース



正確な実構造解析／状態分析が困難なヘテロカーボンのデータベース

齋藤 永宏 (名古屋大学教授)

1. 背景

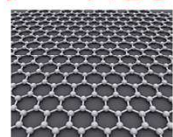
- 低炭素社会の実現に向けて、カーボン材料は、その資源持続性と多様な機能から高効率なエネルギーデバイス・電子デバイスへの活用が期待されているが、そのポテンシャルが十分に発揮されていないのが現状である。
- その大きな理由の一つに、カーボンの組成・構造の多様なヘテロ性により、正確な構造解析が困難であることが、応用デバイスの性能向上や再現性確保を阻害していることが挙げられる。



- ① ヘテロカーボンの構造解析技術の開発
- ② AI・MI解析に適用可能な分析・物性データの早期拡充

2. 類似技術との比較 (ベンチマーク・優位性)

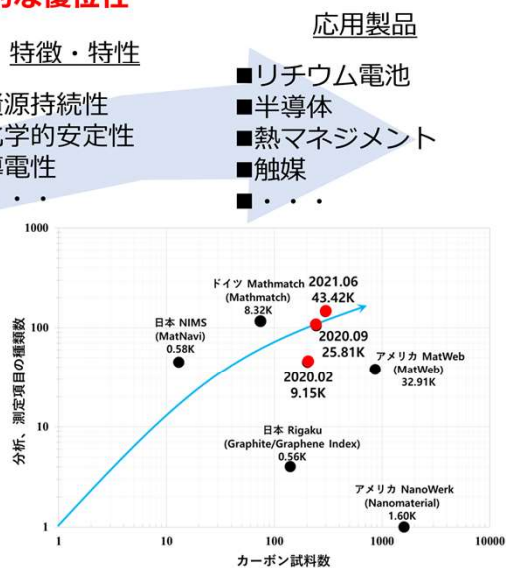
カーボンの特性と構造に特化した複合的なMI・AI解析に資するデータベースとして圧倒的な優位性



カーボン

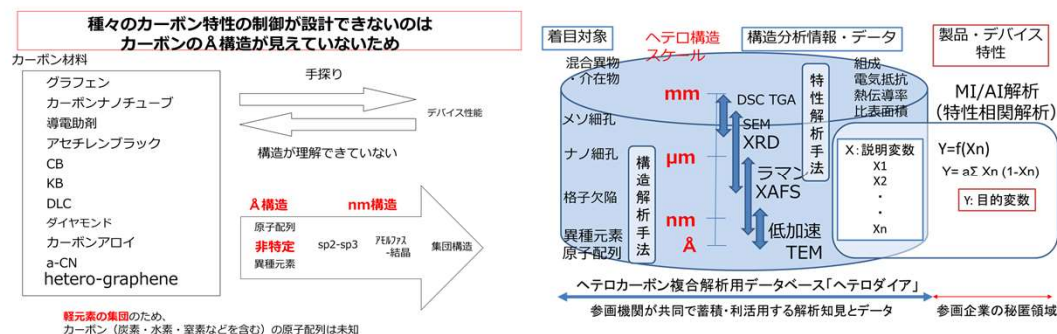
- ▶ダイヤモンド
- ▶グラフェン
- ▶グラファイト

<競争力>
カーボン材料では他に類を見ないサンプル数と分析データ量を目標に掲げ、活動開始
<現状>
データ取得：目標に沿って取得中計測サンプル300種 (契約無162種類) データ量 43.42K (契約無25.72K)



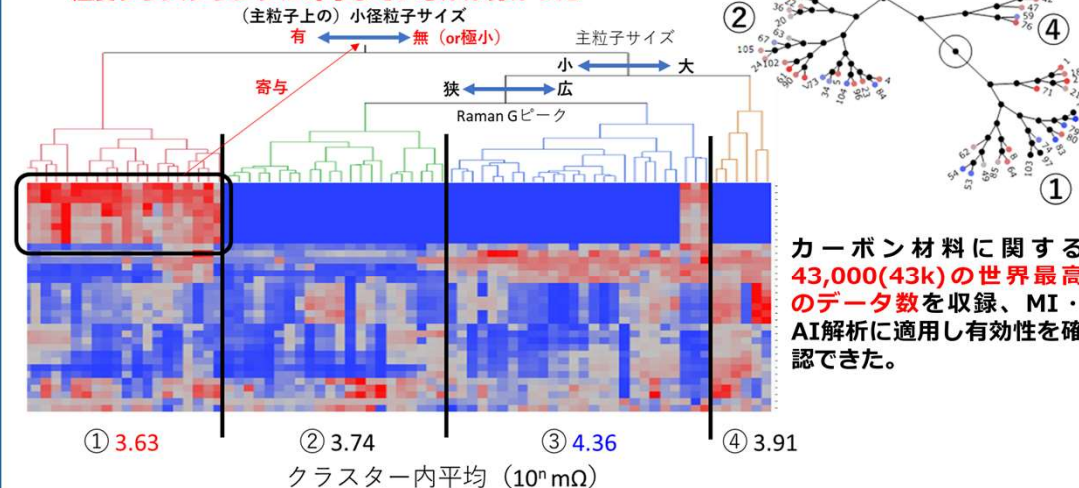
3. カーボンのA構造と特性設計

大問題!! カーボンは構造が正確に理解されないまま、機能デバイスに使われ始めている



4. 進捗状況

XRD, Raman, TGA, SEM特徴量によるクラスタリング結果
教師なし学習で、特徴量と粉末抵抗値に相関が得られた変数間クラスタを併用することで、どの特徴量がどの程度クラスタリングに寄与しているかが分かった



カーボン材料に関する43,000(43k)の世界最高のデータ数を収録、MI・AI解析に適用し有効性を確認できた。