

# ナノ科学から見たRDM

青木 学聡

名古屋大学 情報連携推進本部 情報戦略室

# 自己紹介

- 2020.4～ 名古屋大 情報連携推進本部
- ～2020.3 京大 情報環境機構、工学研究科附属情報センター
- 2000年前後～2015年頃: クラスターイオンビームを応用するナノ科学

原子集団を壊さず  
そのままぶつける



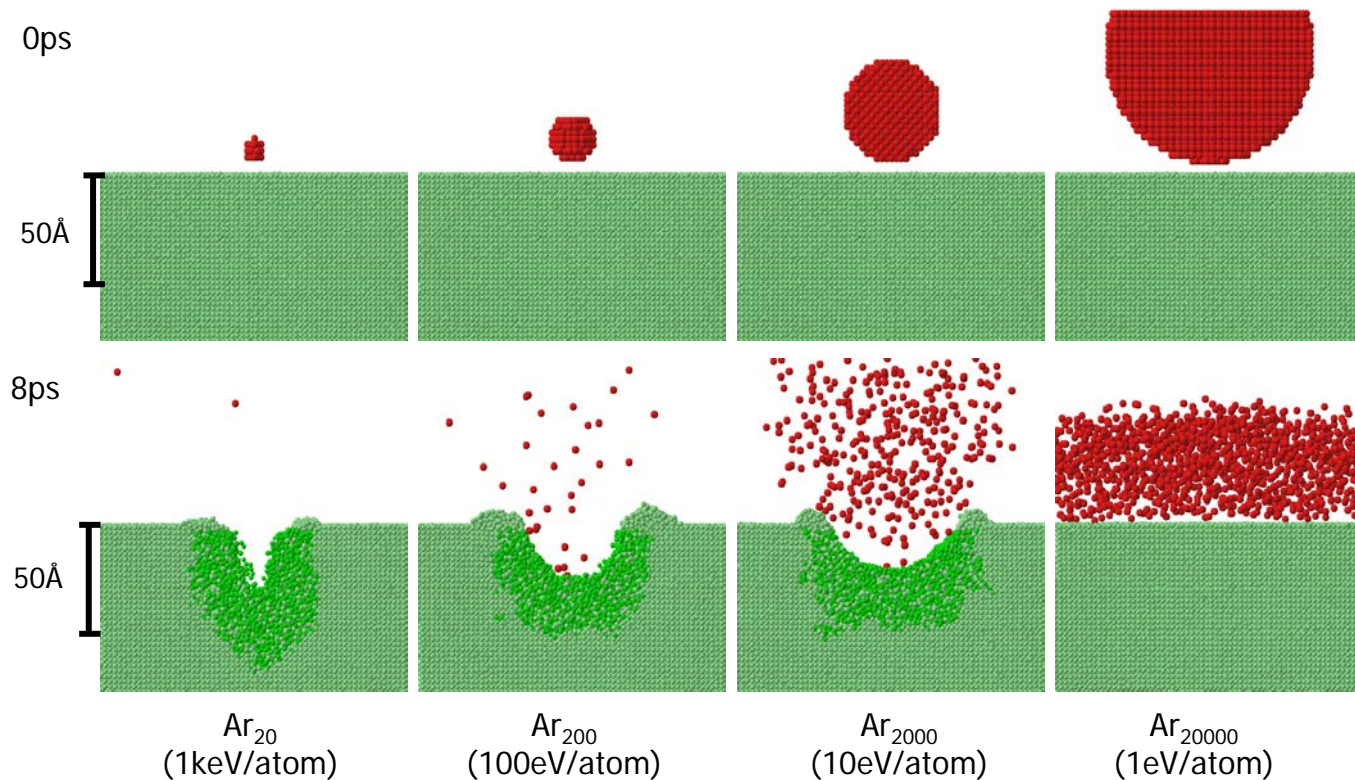
衝突現象そのものが面白い  
(塊の大きさという新しいパラメータ)



材料表面の性質を  
変える新しいツール

Ar<sub>n</sub> 20keV → Si(100)

T.Aoki et al. / Nucl. Instr. and Meth. B202 (2003) 278–282



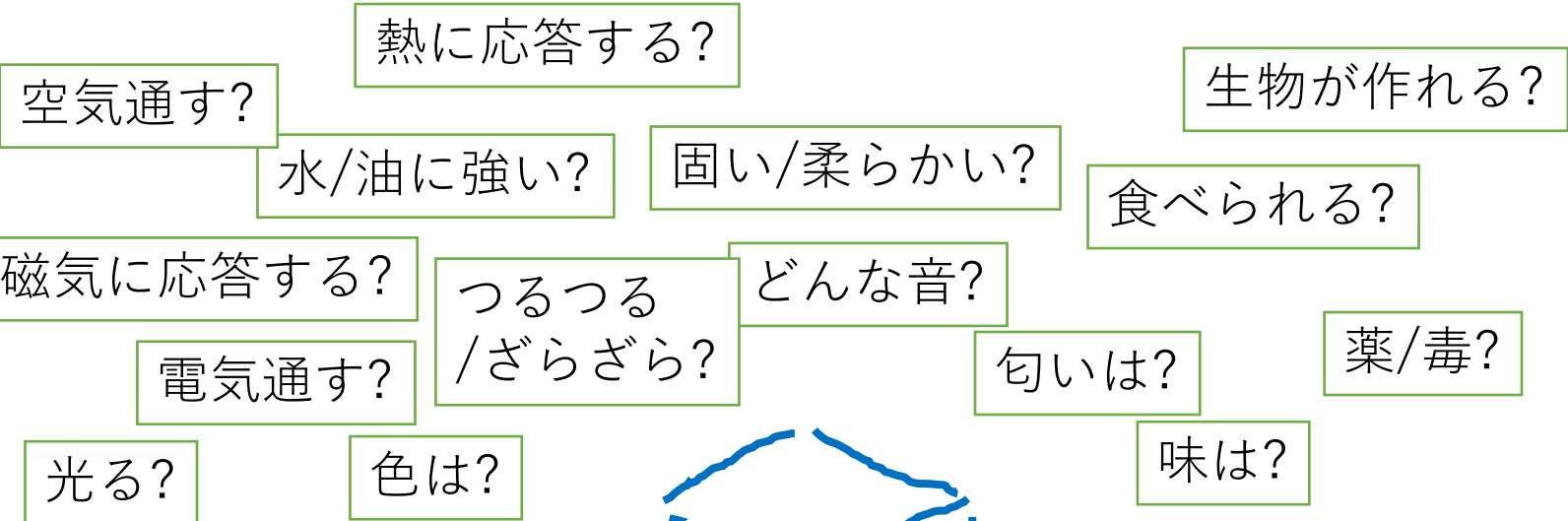
# 材料科学(materials science)

すごく大胆な言い方をすれば・・・

- 材料科学は「五感で感じるもの」に対する方法論
- 情報(科)学は「五感で感じた結果」に対する方法論

# 「材料」の評価軸と、その基本原理

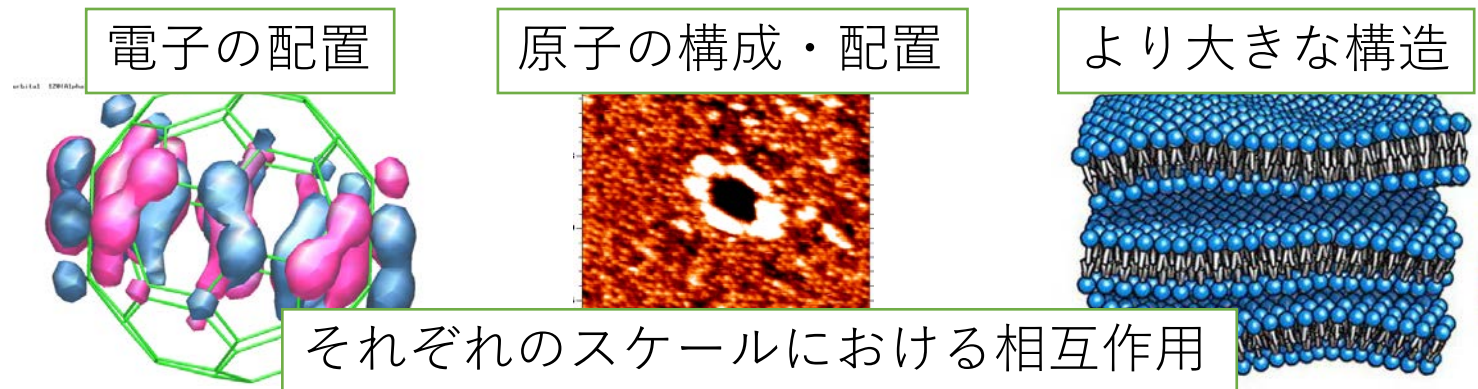
求める  
機能



分析手法  
(モデリング手法)



基本原理



# 標準手法は規格化 標準材料はデータベース化

- 標準手法 → いわゆるJIS(やISOや・・・)
- 標準材料 → 例えば日本だと、物質・材料研究機構(NIMS)がデータベースを整備(<https://mits.nims.go.jp/>)

## DATABASE

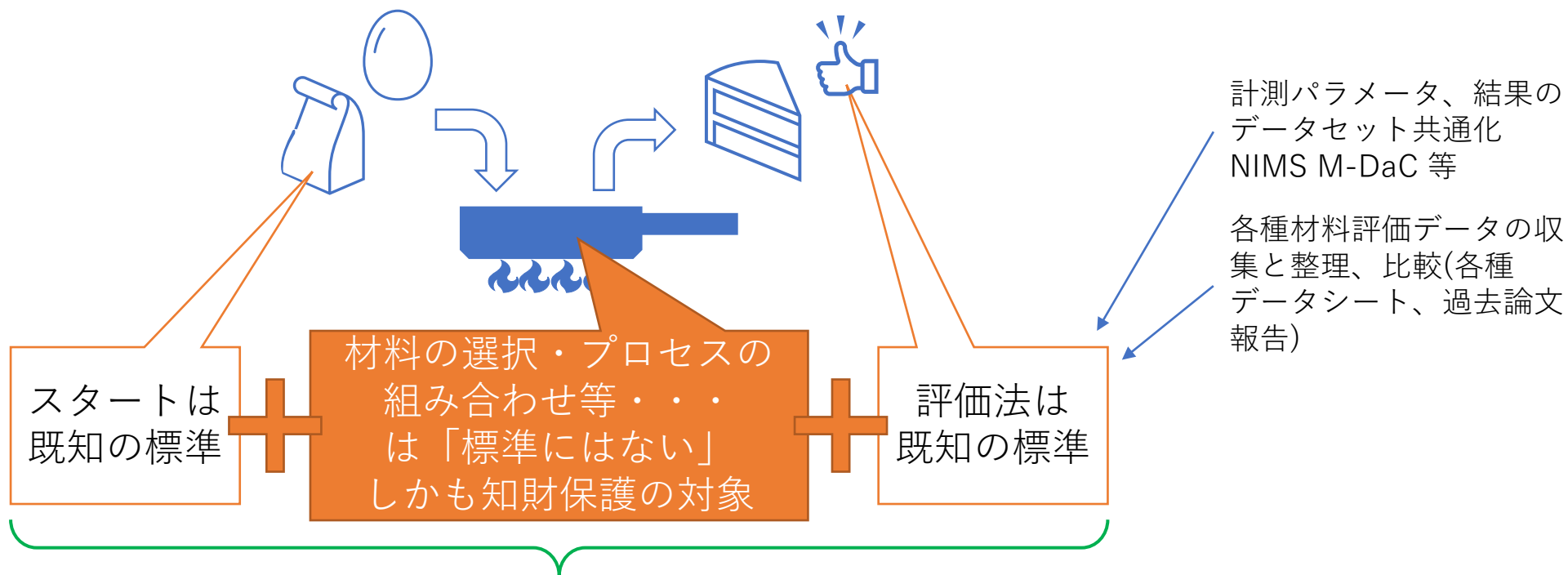
基礎物性

 <p>高分子データベース(PoLyInfo)は、科学技術文献から抽出したポリマーの名称、化学構造、物性値、測定条件、重合方法、成形方法、原料モノマーなどの情報を収録しています。</p> <p><a href="#">&gt; 詳細へ</a></p> <p><a href="#">&gt; ログイン</a></p>	 <p>無機材料データベース (AtomWork) は、科学技術文献から抽出した無機材料の結晶構造、X線回折、特性、状態図の情報を収録しています。</p> <p><a href="#">&gt; 詳細へ</a></p> <p><a href="#">&gt; ログイン</a></p>	 <p>計算状態図データベース (CPDDB) は、CALPHAD法による熱力学解析により得られた各相のギブスエネルギー関数をまとめたデータベースファイル (TDBファイル) を集録しています。</p> <p><a href="#">&gt; 詳細へ</a></p> <p><a href="#">&gt; ログイン</a></p>	 <p>電子構造計算データベース(CompES-X)は、AtomWorkに収録されている結晶構造データを対象に、第一原理計算 (VASP) を実行し、得られた一元～多元系物質の電子構造を収録しています。</p> <p><a href="#">&gt; 詳細へ</a></p> <p><a href="#">&gt; ログイン</a></p>
 <p>放射性物質の除去・回収技術のためのデータベース (READS)は、特に天然鉱物等の無機材料を利用して、セシウム、ストロンチウムおよびヨウ素の吸</p>	 <p>中性子反応データベース(NeuTran) は、様々な核種を含む材料に中性子を照射した際の反応チャンネルと反応断面積の中性子エネルギー依存性を収録</p>	 <p>界面熱伝達率データベース (ITC)は、界面の両側の結晶構造、ヤング率 (縦弾性係数)、音速のデータを利用して、フォノンミスマッチモデルにより界面</p>	 <p>拡散データベース (Kakusan)は、科学技術文献から抽出した無機化合物および金属材料中の拡散に関するデータ (拡散原子、拡散係数、活性化エネルギー</p>

ところで・・・

材料科学の研究開発は、「これまでの標準にないもの」を作ることだが・・・

「どこに」「どうやって」標準を取り入れてる？



結局のところ、自分たちのやり方は自分たちで記述しないとダメ

# (改めて)DMPはなぜ必要?

- 自分自身、または共同研究者との間でのデータの取扱いに関する合意事項の確認
- 複数のポリシーが衝突する場合に、論理的にこれを解決するための手段
- 「強い」DMPを持つと後々便利?
  - 標準的な手法を多く参照できるとよい
  - オリジナルな部分も、標準化への展開を前提としてできるとよい

+  $\alpha$

組織(=大学)でRDMを支援すること、  
のより現実的な検討

- RDM支援サービスへの問いかけ
  - 誰が利益を享受するのか(本当に研究者なの?)
  - どのような利益がもたらされるのか
  - その利益のために誰がどう働くか
  - 継続するための資金はどのように回収するか
  - 等々 . . .