



Materials Platform
for Data Science

無機材料データベース

JAICI

化学情報協会

asm.mpds.io | crystal@jaici.or.jp

多くの研究者は、必要なデータを探す作業に、全体の作業時間の約 90% を費やしているとされています。

無機材料データベース (MPDS) は、研究者の能力を高め、革新的な取り組みを後押しするためのプラットフォームです。

MPDSは、世界有数の規模と網羅性を誇る無機材料データのレポジトリであり、相図(状態図)や結晶構造、材料特性を豊富に取り揃えています。

各ユーザーの目的や要件に合わせて、検索条件を自在に調整することが可能です。

検索カテゴリの代表例:

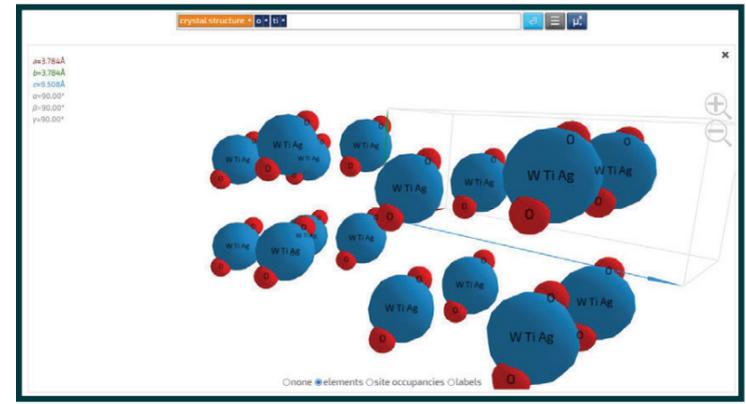
- Binary (二元系)
- 元素
- キーワード
- Materials class (材料クラス)
- 物性
- 四元系相図 (状態図)
- Ternary (三元系)
- Unary (一元系)



MPDS には 2 つの利用形態があり、ユーザーが目的に応じて効率的かつ段階的に新たな知見を得られるように設計されています。

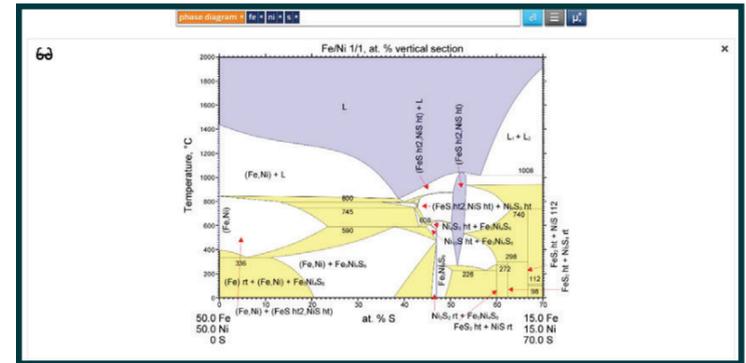
MPDS グラフィカル・ユーザ・インターフェース (GUI)

300 万件を超える実験および計算で得られた物性データが、直感的に操作できるカスタマイズ可能なツールに整理されて収録されています。これにより、ユーザーは、複数のデータベースを横断することなく、膨大な材料情報を一元的に深く掘り下げることが可能です。



結晶軸を回転させ、異なる角度から原子配列を確認することが可能です。

ナノ粉末の結晶構造



相図(状態図)上をスクロールするだけで、各元素の原子%と温度が一目で確認でき、精度の高い解析ができます。

インコネル合金に対する基本元素の三元系相図(状態図)

MPDS アプリケーション・プログラミング・インターフェース (API)

MPDS API-Access を活用することで、機械学習やシミュレーションに最適な、機械可読形式のカスタムデータセットを自在に作成できます。これにより、研究活動において、これまでにない柔軟性と高い実行力を発揮できます。

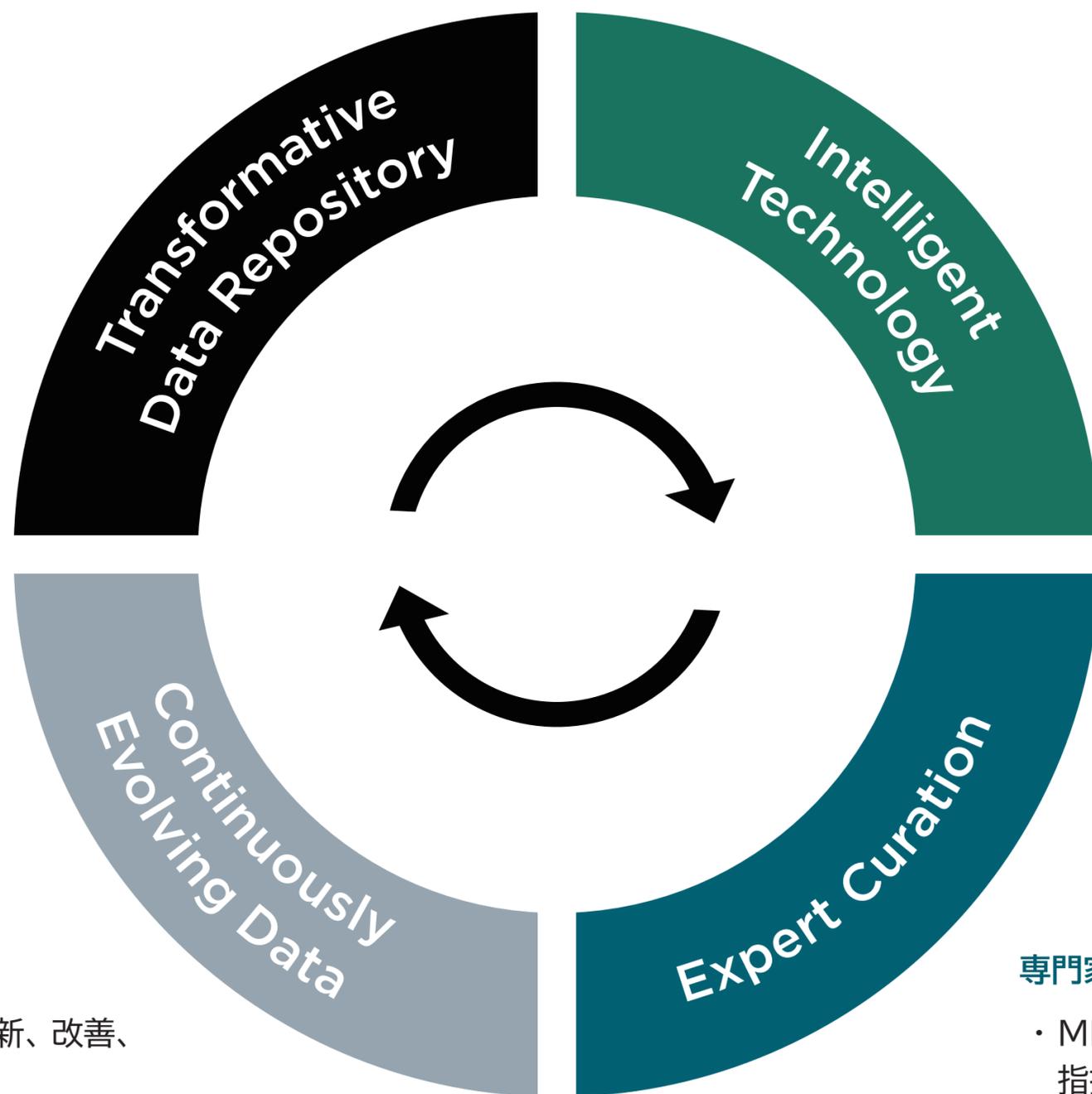
変革をもたらす データ・レポジトリ

過去 100 年以上前の公開文献から
300 万件以上の材料特性を収録

- ・ 実験値
- ・ 機械学習を用いて生成したデータ
- ・ *ab initio* モデリングによる計算値

知能技術

- ・ 高度な機械学習ツール
- ・ 段階的な発見を可能にする簡便な検索テクノロジー
- ・ カスタムデータセットを作成するための使い勝手の良いツール
- ・ パブリック・ドメインにない独自のデータ



継続的に進化するデータ

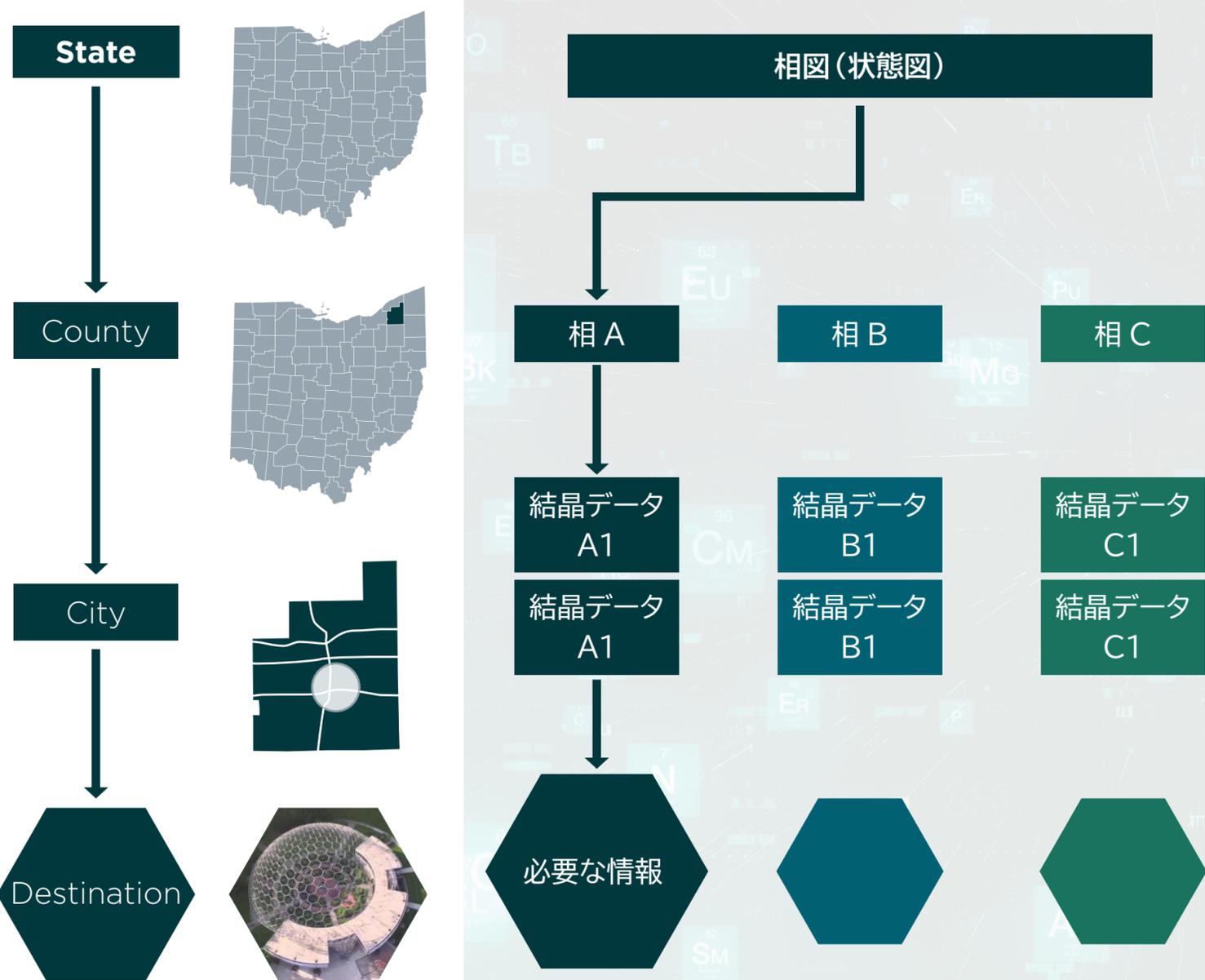
- ・ 製作元の専任チームが、データの更新、改善、拡張を継続的に行います。
- ・ 固定コンテンツの 1 回限りの購入ではなく、更新可能な年間契約

専門家によるキュレーション

- ・ MPDS は、Pierre Villars 博士が作成を指揮する Pauling File のデジタル版です。
- ・ 30 人以上の科学の専門家がデータを収集、認定し、普及させています。

MPDS は、効率的かつ段階的な発見を可能にします。

MPDS は、研究の現在地を把握し、次のステップへの道筋を示す「研究の GPS」となります。



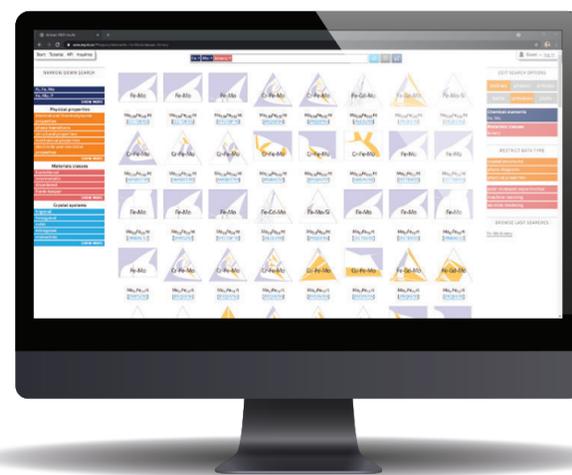
無数の検索エンジンやデータベースで検索したり、ジャーナルや論文を探し回る必要はありません。
MPDS を活用することで、研究に必要な情報と次の一手がすぐに見つかります！

サクセスストーリー

- 業界: 発電
- 応用例: 蒸気タービン内の高温バルブ
- 材料: インコネル 625 (IN625)
- 応用例における問題: 高温酸化の結果、バルブが固着し、エンドユーザの操作が直ちに強制的に停止した。
- 利用者: 高温酸化の解決策を見つけ、バルブを正常な稼働状態に戻す責任を負うエンジニア。

MPDS は、エンジニアが関連する材料データを迅速に、かつ効率的に見つけるのに役立ちました！酸化速度と成長速度を理解することによって、エンジニアは、合金と酸化物の結晶単位セルの結晶学的マッチングの操作にモデリングの専門家を集中させました。これには、インコネル 625 合金の設計調整と微調整が必要でした。

MPDS は、この問題の解決につながった 3 つの主要な問題解決ステップのうちの 2 つで必要とされる詳細情報を得る上で重要な役割を果たしました。



MPDS を使用して、問題をゼロから解決しましょう！
詳細は、asm.mpds.io にアクセスするか、今すぐお問い合わせください。

MPDSは、科学技術分野の研究者・技術者にとって 有用な情報源です。

査読済み論文から収録した物性



73,000 件以上
相図
(状態図)



489,000 件以上
結晶構造



995,000 件以上
物性値

機械学習を用いて生成した物性値



693,000 件以上
熱力学的性質



115,000 件以上
機械的性質



178,000 件以上
電子的性質



114,000 件以上
相転移

ab initio モデリングで計算された物性値



37,000 件以上
電子物性



7,000 件以上
フォノンスペクトル



30,000 件以上
弾性特性



75,000 件以上
熱力学的性質

- 国内代理店・お問い合わせ先 -

JAICI

情報で、科学をひらく

一般社団法人化学情報協会 科学データ情報室
〒113-0021 東京都文京区本駒込 6-25-4 中居ビル
TEL: 03-5978-3622 URL: www.jaici.or.jp
E-mail: crystal@jaici.or.jp

