

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2021年3月11日(11.03.2021)



(10) 国際公開番号

WO 2021/044857 A1

(51) 国際特許分類:
G06F 30/10 (2020.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2020/031426

(22) 国際出願日: 2020年8月20日(20.08.2020)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2019-162137 2019年9月5日(05.09.2019) JP

(71) 出願人: 株式会社日立製作所(HITACHI, LTD.)
[JP/JP]; 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 浅原 彰規 (ASAHARA Akinori);
〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番

6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP). 林 貴之(HAYASHI Takayuki); 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP). 金澤 拓也(KANAZAWA Takuya); 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP). 森田 秀和(MORITA Hidekazu); 〒1008280 東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内 Tokyo (JP).

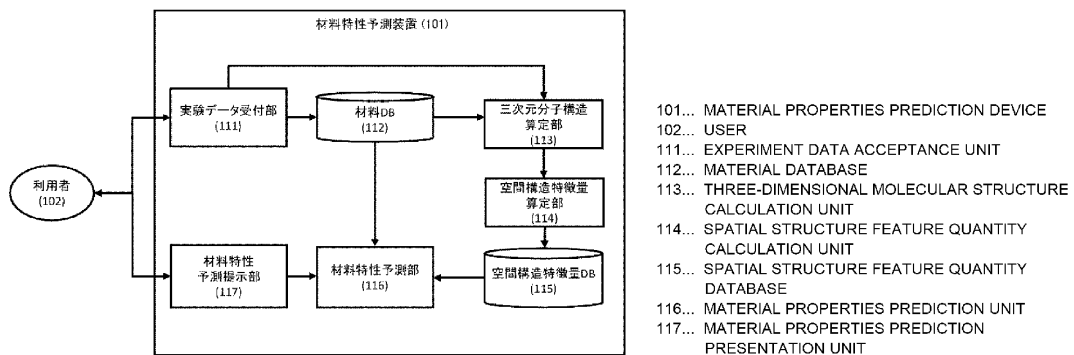
(74) 代理人: 青稜特許業務法人(SEIRYO I.P.C.);
〒1040032 東京都中央区八丁堀二丁目2番2号 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH,

(54) Title: MATERIAL PROPERTIES PREDICTION SYSTEM AND INFORMATION PROCESSING METHOD

(54) 発明の名称: 材料特性予測システムおよび情報処理方法

[図1]



(57) Abstract: The present invention defines the spatial structure of a molecule without allowing freedom with respect to the selection of a coordinate system and predicts material properties based on the spatial structure of the molecule. A material properties prediction system for predicting material properties, the system being characterized by having: a three-dimensional molecular structure calculation unit provided with a function for calculating the position coordinates of atoms constituting a molecule from the structural formula of a material; a spatial structure feature quantity calculation unit having a function for selecting three atoms and constructing a triangle on the basis of the position coordinates of atoms calculated by the three-dimensional molecular structure calculation unit, calculating the distance between the three atoms and other atoms, and employing the result as a spatial structure feature quantity; and a material properties prediction unit for predicting material properties using, as an explanatory variable, the spatial structure feature quantity generated by the spatial structure feature quantity calculation unit.

[続葉有]

CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO,
DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT,
HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, KE, KG, KH,
KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY,
MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ,
NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT,
QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL,
ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG,
US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 国際調査報告 (条約第21条(3))

(57) 要約: 座標系の選択に関する自由度をもたせることなく分子の空間構造を規定し、分子の立体構造に基づいた材料特性の予測をする。材料特性の予測を行うためのシステムであって、材料の構造式から分子を構成する原子の位置座標を算出する機能を備えた三次元分子構造算定部と、三次元分子構造算定部の算出した原子の位置座標をもとに、3つの原子を選び出して三角形を構築し、3つの原子と他の原子との距離を算出して空間構造特徴量とする機能を持つ空間構造特徴量算定部と、空間構造特徴量算定部の生成した空間構造特徴量を説明変数として材料特性を予測する材料特性予測部と、を持つことを特徴とする材料特性予測システムである。