【公報種別】特許法第１７条の２の規定による補正の掲載
【部門区分】第６部門第３区分
【発行日】令和6年12月9日(2024.12.9)

【国際公開番号】WO2023/188733
【出願番号】特願2024-511292(P2024-511292)
【国際特許分類】
Ｇ１６Ｃ 20/20(2019.01)
【ＦＩ】
Ｇ１６Ｃ 20/20

【手続補正書】
【提出日】令和6年9月20日(2024.9.20)
【手続補正１】
【補正対象書類名】特許請求の範囲
【補正対象項目名】全文
【補正方法】変更
【補正の内容】
【特許請求の範囲】
【請求項１】
コンピュータが実行する情報処理方法であって、
複数の多面体に関する第１情報を取得するステップと、
前記複数の多面体の各々に配置される複数の原子に関する第２情報を取得するステップと、
前記第１情報及び前記第２情報に基づいて、前記複数の多面体を配置させた３次元構造に前記複数の原子の各々が配置された場合にとり得る結晶構造を示す第３情報を生成するステップと、
生成した前記第３情報を出力するステップと、を含む、
情報処理方法。
【請求項２】
前記３次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である、
請求項１に記載の情報処理方法。
【請求項３】
前記第１情報を取得するステップでは、前記第１情報として、前記複数の多面体が隙間なく配置された前記３次元構造に関する情報を取得する、
請求項２に記載の情報処理方法。
【請求項４】
前記３次元構造に関する情報は、前記３次元構造を示す情報、前記３次元構造を表す数字若しくは文字を含む数列を示す情報、及び前記３次元構造を表す周期グラフを示す情報のうちの少なくとも１つを含む、
請求項３に記載の情報処理方法。
【請求項５】
前記第３情報を生成するステップでは、前記結晶構造においてとり得る前記複数の原子の配置パターンを用いて、前記結晶構造を示す前記第３情報を生成する、
請求項１～４のいずれか１項に記載の情報処理方法。
【請求項６】
前記配置パターンは、前記原子が前記複数の多面体の各々の頂点及び前記複数の多面体の各々の内部の少なくとも一方に配置されることを示す、
請求項５に記載の情報処理方法。
【請求項７】

前記第２情報を取得するステップでは、前記第２情報として、前記複数の多面体の各々に配置される前記原子を含有する材料に関する材料情報を取得し、
前記第３情報を生成するステップでは、前記材料情報に基づいて、前記材料がとり得る前記結晶構造を示す前記第３情報を生成する、
請求項１～４のいずれか１項に記載の情報処理方法。
【請求項８】
前記第２情報を取得するステップでは、前記材料情報として、前記複数の原子の各々の種類を示す元素情報を更に取得し、
前記第３情報を生成するステップでは、前記元素情報が示す当該種類の原子が１又は複数個配置された前記結晶構造を示す前記第３情報を生成する、
請求項７に記載の情報処理方法。
【請求項９】
前記第２情報を取得するステップでは、前記材料情報として、前記材料の組成に関する組成情報を更に取得し、
前記第３情報を生成するステップでは、前記組成情報が示す組成を有する前記結晶構造を示す前記第３情報を生成する、
請求項７に記載の情報処理方法。
【請求項１０】
前記第２情報を取得するステップでは、前記材料情報として、前記複数の多面体の各々に配置される前記複数の原子の個数を示す原子数情報を更に取得し、
前記第３情報を生成するステップでは、前記原子数情報が示す原子の個数だけ前記原子が配置された前記結晶構造を示す前記第３情報を生成する、
請求項７に記載の情報処理方法。
【請求項１１】
前記第１情報を取得するステップでは、前記第１情報として、前記結晶構造の基礎となる基礎結晶構造を示す結晶構造情報を取得し、
前記第３情報を取得するステップでは、前記結晶構造情報が示す基礎結晶構造に前記原子が配置された場合にとり得る前記結晶構造を示す前記第３情報を生成する、
請求項１～４のいずれか１項に記載の情報処理方法。
【請求項１２】
前記第３情報を生成するステップでは、前記結晶構造情報が示す基礎結晶構造に基づいて、前記原子が配置される前記複数の多面体の各々の頂点の位置、及び前記複数の多面体の各々の内部の位置を判定する、
請求項１１に記載の情報処理方法。
【請求項１３】
第一原理計算及び機械学習された予測モデルの少なくとも一方を用いて、前記第３情報が示す前記結晶構造の物性に関する第４情報を算出して出力するステップを更に含む、
請求項１～４のいずれか１項に記載の情報処理方法。
【請求項１４】
前記第３情報を生成するステップでは、算出した前記第４情報に基づいて、所定の物性を有する前記結晶構造に限定して前記第３情報を出力する、
請求項１３に記載の情報処理方法。
【請求項１５】
複数の多面体に関する第１情報、及び前記複数の多面体の各々に配置される複数の原子に関する第２情報の入力を受け付ける第１画像を表示部に表示させた後に、入力された前記第１情報及び前記第２情報に基づいて生成された、前記複数の多面体を配置させた３次元構造に前記複数の原子の各々が配置された場合にとり得る結晶構造を示す第３情報を表す第２画像を前記表示部に表示させる表示制御部、を備える、
情報処理システム。
【請求項１６】

前記第１画像は、前記第１情報の入力を受け付ける第１入力画像と、前記第２情報の入力を受け付ける第２入力画像とを含み、
前記表示制御部は、前記第２入力画像を前記表示部に表示させ、入力された前記第２情報に基づいて、前記第１入力画像を前記表示部に表示させる、
請求項１５に記載の情報処理システム。
【請求項１７】
複数の多面体に関する第１情報を取得するステップと、
前記複数の多面体の各々に配置される複数の原子に関する第２情報を取得するステップと、
前記第１情報及び前記第２情報に基づいて、前記複数の多面体を配置させた３次元構造に前記複数の原子の各々が配置された場合にとり得る結晶構造を示す第３情報を生成するステップと、
生成した前記第３情報を出力するステップと、をコンピュータに実行させる、
プログラム。