【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4月22日(2024.4.22)

【国際公開番号】WO2023/008172
【出願番号】特願2023-538411(P2023-538411)
【国際特許分類】
Ｇ１６Ｃ 20/70(2019.01)
Ｇ１６Ｃ 60/00(2019.01)
Ｇ１６Ｃ 20/40(2019.01)
【ＦＩ】
Ｇ１６Ｃ 20/70
Ｇ１６Ｃ 60/00
Ｇ１６Ｃ 20/40

【手続補正書】
【提出日】令和5年12月27日(2023.12.27)
【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】
材料の組成についての３次元空間における原子配置の安定構造を探索するための探索方法であって、
コンピュータが、
前記材料の組成がとり得る前記３次元空間における原子配置の構造である複数の初期構造を取得する第１ステップと、
複数の前記初期構造のうちの一部の初期構造に対して構造最適化を実施し、構造最適化された原子配置の構造に対応する第１エネルギーを算出する第２ステップと、
複数の前記初期構造のうちの他の初期構造に対して予測モデルを用いることにより、前記他の初期構造に対して構造最適化が実施された場合の原子配置の構造に対応する第２エネルギーを予測する第３ステップと、
前記第１エネルギー及び前記第２エネルギーに基づいて、極小値を示す第３エネルギーを抽出する第４ステップと、
前記第３エネルギー、前記第３エネルギーに対応する原子配置の構造である第１構造、または、前記第３エネルギー及び前記第１構造を出力する第５ステップと、を実行し、
前記予測モデルは、任意の原子配置の構造を入力として、当該構造に対して構造最適化が実施された場合の構造に対応するエネルギーを前記第２エネルギーとして出力するように機械学習されている、
探索方法。
【請求項２】
前記第１ステップにおいて、ｎ個（ｎは２以上の整数）の前記初期構造を取得した場合に、
前記第２ステップにおける前記一部の初期構造は、ｍ個（ｍは１≦ｍ＜ｎの整数）の前記初期構造であり、
前記第３ステップにおける前記他の初期構造は、（ｎ－ｍ）個の前記初期構造である、
請求項１に記載の探索方法。
【請求項３】

前記第３エネルギーは、前記第１エネルギー及び前記第２エネルギーの最小値である、
請求項１又は２に記載の探索方法。
【請求項４】
前記第１ステップでは、前記材料の組成と類似する既知材料の３次元空間における原子配置の構造である既知構造を取得し、前記既知構造に基づいて、複数の前記初期構造を生成する、
請求項１又は２に記載の探索方法。
【請求項５】
前記既知材料は、前記材料の組成に含有される元素と異種の元素を少なくとも１種含有し、
前記第１ステップは、前記異種の元素を前記材料の組成に含有される元素と同種の元素に置換する過程を含む、
請求項４に記載の探索方法。
【請求項６】
前記第１ステップは、前記既知構造を少なくとも１次元方向に拡張する過程を含む、
請求項４に記載の探索方法。
【請求項７】
前記予測モデルは、
前記初期構造を入力データ、当該初期構造に対応する前記第１エネルギーを正解データとして含む第１学習用データセットを用いて機械学習されたモデルである、
請求項１又は２に記載の探索方法。
【請求項８】
前記予測モデルは、
更に、前記構造最適化された原子配置の構造を入力データ、当該構造に対応する前記第１エネルギーを正解データとして含む第２学習用データセットを用いて機械学習されたモデルである、
請求項７に記載の探索方法。
【請求項９】
前記第２ステップにおける前記一部の初期構造の数は、複数の前記初期構造の数の９０％以下である、
請求項１又は２に記載の探索方法。
【請求項１０】
材料の組成についての３次元空間における原子配置の安定構造を探索するための探索システムであって、
前記材料の組成がとり得る前記３次元空間における原子配置の構造である複数の初期構造を生成する生成部と、
複数の前記初期構造のうちの一部の初期構造に対して構造最適化を実施し、構造最適化された原子配置の構造に対応する第１エネルギーを算出する算出部と、
複数の前記初期構造のうちの他の初期構造に対して予測モデルを用いることにより、前記他の初期構造に対して構造最適化が実施された場合の原子配置の構造に対応する第２エネルギーを予測する予測部と、
前記第１エネルギー及び前記第２エネルギーを出力する出力部と、を備え、
前記予測モデルは、任意の原子配置の構造を入力として、当該構造に対して構造最適化が実施された場合の構造に対応するエネルギーを前記第２エネルギーとして出力するように機械学習されている、
探索システム。
【請求項１１】
前記出力部は、前記第１エネルギー及び前記第２エネルギーに基づいて抽出された、極小値を示す第３エネルギー、前記第３エネルギーに対応する原子配置の構造である第１構造、または、前記第３エネルギー及び前記第１構造を出力する、

請求項１０に記載の探索システム。
【請求項１２】
材料の組成についての３次元空間における原子配置の安定構造を探索するためのプログラムであって、
前記材料の組成がとり得る前記３次元空間における原子配置の構造である複数の初期構造を取得する第１ステップと、
複数の前記初期構造のうちの一部の初期構造に対して構造最適化を実施し、構造最適化された原子配置の構造に対応する第１エネルギーを算出する第２ステップと、
複数の前記初期構造のうちの他の初期構造に対して予測モデルを用いることにより、前記他の初期構造に対して構造最適化が実施された場合の原子配置の構造に対応する第２エネルギーを予測する第３ステップと、
前記第１エネルギー及び前記第２エネルギーを出力する第６ステップと、をコンピュータに実行させ、
前記予測モデルは、任意の原子配置の構造を入力として、当該構造に対して構造最適化が実施された場合の構造に対応するエネルギーを前記第２エネルギーとして出力するように機械学習されている、
プログラム。
【請求項１３】
前記第１エネルギー及び前記第２エネルギーに基づいて、極小値を示す第３エネルギーを抽出する第４ステップを前記コンピュータに更に実行させ、
前記第６ステップでは、前記第３エネルギー、前記第３エネルギーに対応する原子配置の構造である第１構造、または、前記第３エネルギー及び前記第１構造を更に出力する、
請求項１２に記載のプログラム。
【請求項１４】
コンピュータが、
材料の組成がとり得る３次元空間における原子配置の構造である初期構造を取得する第１ステップと、
前記初期構造を入力データ、当該初期構造に対して構造最適化を実施して得られた原子配置の構造に対応するエネルギーを正解データとして含む学習用データセットを用いて、任意の原子配置の構造の入力に対して当該構造が構造最適化された場合の構造に対応するエネルギーを出力するように機械学習させる第７ステップと、を実行する、
予測モデル構築方法。
【請求項１５】
材料の組成がとり得る３次元空間における原子配置の構造である初期構造を生成する生成部と、
前記初期構造を入力データ、当該初期構造に対して構造最適化を実施して得られた原子配置の構造に対応するエネルギーを正解データとして含む学習用データセットを用いて、任意の原子配置の構造の入力に対して当該構造が構造最適化された場合の構造に対応するエネルギーを出力するように機械学習させる学習部と、を備える、
予測モデル構築装置。
【請求項１６】
請求項１５に記載の予測モデル構築装置により機械学習された予測モデルを用いて、前記材料の組成についての前記３次元空間における原子配置の安定構造を探索するための探索方法であって、
コンピュータが、
複数の前記初期構造を取得する第１ステップと、
複数の前記初期構造それぞれに対して前記予測モデルを用いることにより、当該初期構造に対して構造最適化が実施された場合の原子配置の構造に対応するエネルギーを予測する第８ステップと、
予測された複数の前記エネルギーから、極小値を示すエネルギーを抽出する第９ステッ

プと、を実行する、
探索方法。
【請求項１７】
請求項１５に記載の予測モデル構築装置により機械学習された予測モデルを用いて、前記材料の組成についての前記３次元空間における原子配置の安定構造を探索するための探索方法であって、
コンピュータが、
複数の前記初期構造を取得する第１ステップと、
複数の前記初期構造のうちの一部の初期構造に対して構造最適化を実施し、構造最適化された原子配置の構造に対応する第１エネルギーを算出する第２ステップと、
前記一部の初期構造のうちの少なくとも１つの初期構造に対して前記予測モデルを用いることにより、当該初期構造に対して構造最適化が実施された場合の原子配置の構造に対応する第２エネルギーを予測する第１０ステップと、
前記第１エネルギーと前記第２エネルギーとを比較することで前記予測モデルの予測精度を検証する第１１ステップと、を実行する、
探索方法。
【請求項１８】
前記第１１ステップにおける結果が所定の条件を満たす場合に、
前記コンピュータが、
複数の前記初期構造のうちの他の初期構造に対して前記予測モデルを用いることにより、前記他の初期構造に対して構造最適化が実施された場合の原子配置の構造に対応する前記第２エネルギーを予測する第１２ステップと、
前記第１エネルギー及び前記第２エネルギーに基づいて、極小値を示す第３エネルギーを抽出する第１３ステップと、を更に実行する、
請求項１７に記載の探索方法。