

数学と物理と材料と私たちの暮らし： コンピュータは何の役に立つのか

神谷利夫
東京工業大学 フロンティア材料研究所
物質理工学院 材料系

参考図書：透明金属が拓く脅威の世界 [絶版 !!]

透明金属が拓く 驚異の世界

不可能に挑む
ナノテクノロジーの錬金術

細野秀雄・神谷利夫

science:  サイエンス・アイ新書

SoftBank Creative

文科省「元素戦略」の切り札!

シリコン・光ファイバーを超える

「透明酸化物半導体」の
すべてを凝縮 日本のナノテクは
ここまで来た

科学とITの

仕組み 理論 テクノロジー が

図解でよくわかる

サイエンス・アイ新書

創刊!

第1章 プロローグ：材料研究が持つ可能性

第2章 透明金属の用途

第3章 透明ってどういうこと？
金属と絶縁体の違いは何？

第4章 電気を流すもの、流さないもの

第5章 色と電気伝導度の関係

第6章 新しい透明金属と応用

第7章 ガラスが高性能の
透明トランジスタに変身

第8章 セメントを透明な半導体、
さらに金属に変身させる

第9章 エピローグ：材料科学への誘い

内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとう有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

多くの機能デバイスが半導体を使って作られている

ダイオード

トランジスタ (CPU, メモリーetc.)

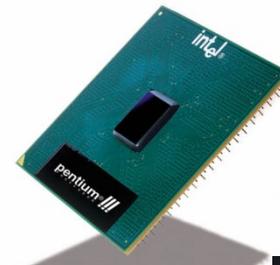
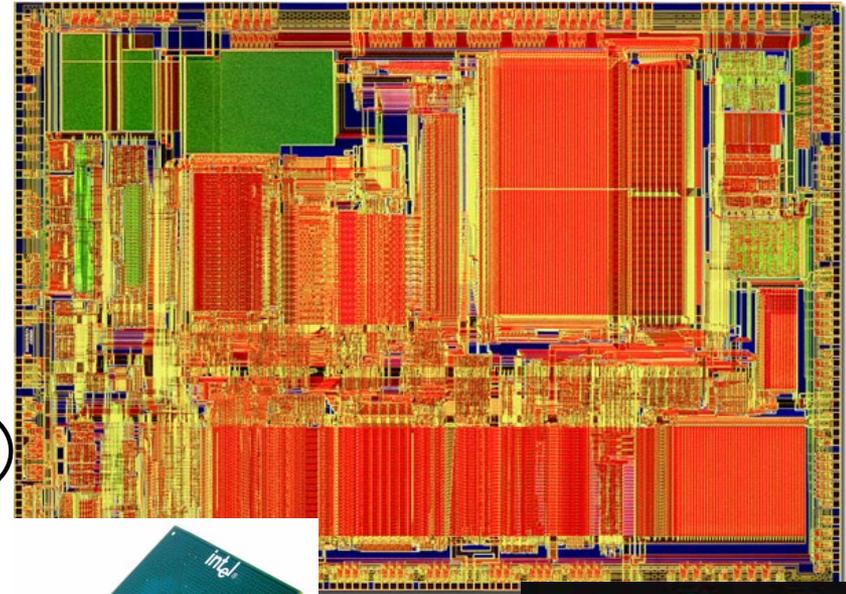
発光素子

光センサー

熱電素子 (発電、温度センサー)

太陽電池

光触媒



Q: なぜ半導体がさまざまな機能をもてるのか？



太陽電池モジュール

アルミレール
ルーフィング

酸化物はどこに？

化学I、数件出版、平成14年3月検定

5

化学の役割

身のまわりの生活の中にある化学と関連したものをさがしてみよう。



水道 (水)



台所用品



コップ類 (ガラス)



カップ、皿 (陶磁器)



容器 (プラスチック)



鍋、包丁、食器 (金属)



ガス器具 (ガス)



私たちの生活を支える製品には、化学の成果が生かされている。



電線、鉄塔 (金属)



電車・レール (金属)

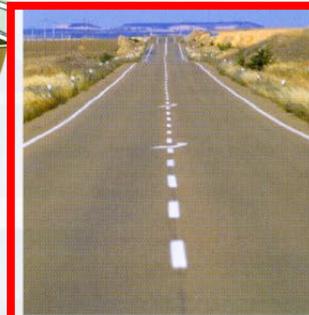


建物 (コンクリート)



光ケーブル (石英ガラス)

化学品製造工場



道路 (アスファルト)



自動車用排ガス浄化装置の触媒



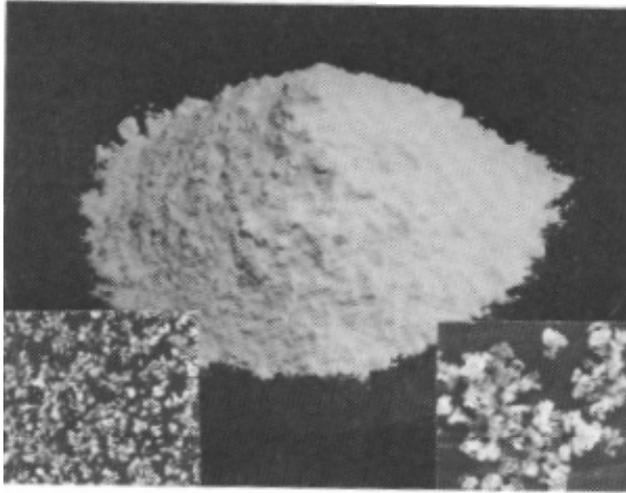
レンズ付きフィルム (フィルム、電池)



原料は同じ (アルミの例)

粉末

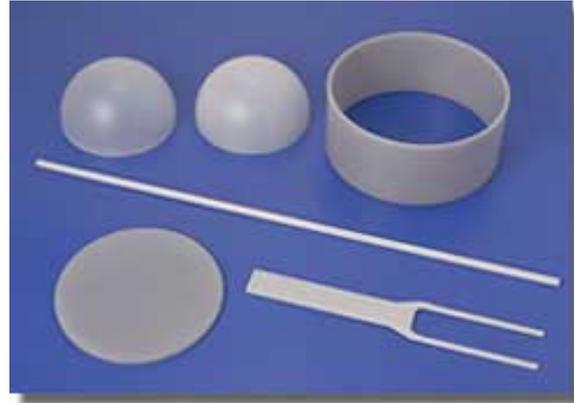
ニューセラミックス、
坂野久夫著、パワー社



“SAPPAL”透光性アルミナ (高圧ナトリウムランプ)

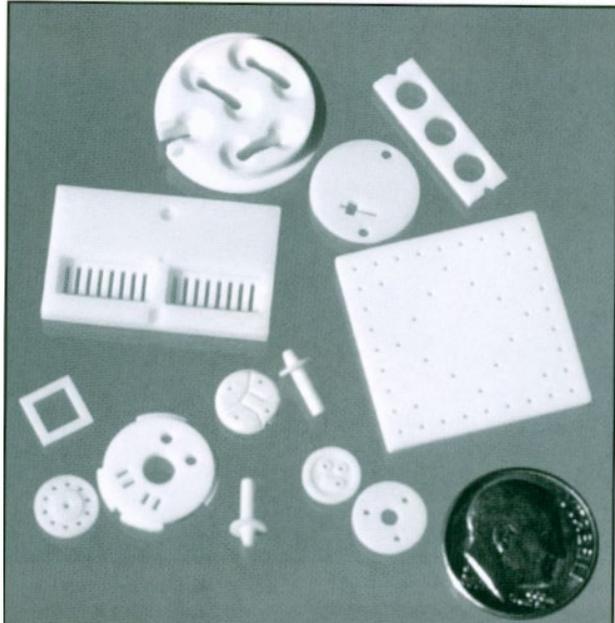
東芝セラミックス

<http://www.tocera.co.jp/ja/products/semicon/sapphal.html>



焼結体 (細かい単結晶の塊)

単結晶酸化アルミニウム



The Magic of Ceramics, D.W. Richerson,
The Am. Ceram. Soc., 2000



人工宝石

中央：ルビー

周囲：ルビー5個

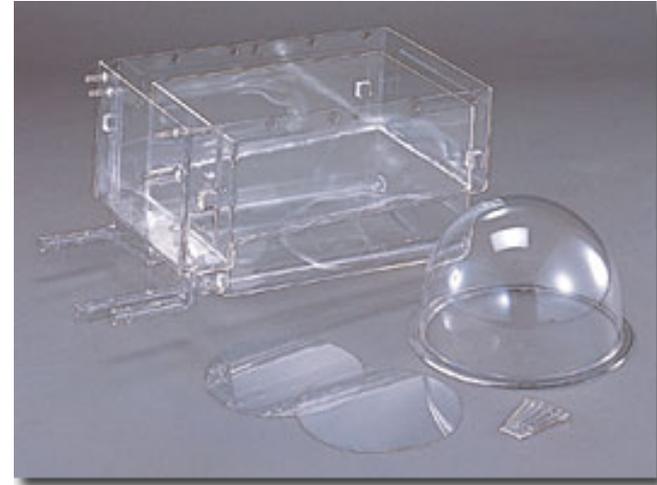
エメラルド2個

擬似ダイヤモンド3個

原料は同じ (シリコンの例)

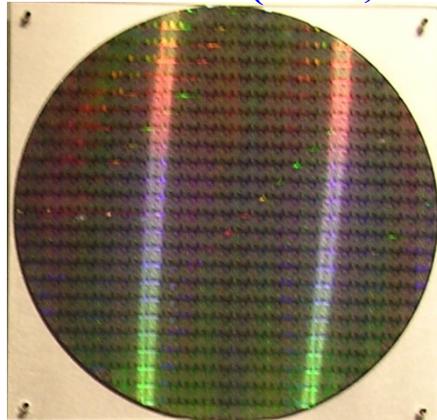


株式会社 新陽
<http://www.sinyo.jp/prod.html>



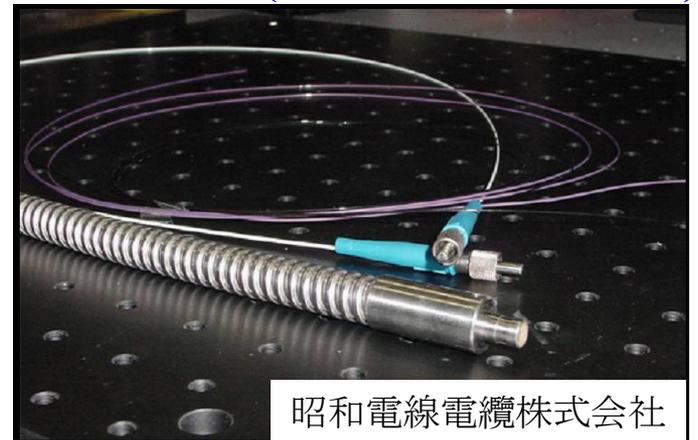
株式会社 新陽
<http://www.sinyo.jp/prod.html>
窓ガラス、食器、装飾品

コンピュータ(CPU,メモリー)



インテル博物館

光ファイバー (深紫外光ファイバー)



昭和電線電纜株式会社

酸化物の特徴は？

セラミックス: セメント、ガラス、茶碗

1. 脆い
2. 電気を流さない
3. 構造材料としてしか使えない

酸化物の特徴は？

1. 脆い

曲がる酸化物はたくさんある

2. 電気を流さない

電気を流す酸化物はたくさんある

3. 構造材料としてしか使えない

使い方によってはSiよりも優れた半導体デバイスを作れる

酸化物の特徴は？

1. 脆い

曲がる酸化物はたくさんある

ガラスファイバー セラミックファイバー セラフレックス (ZrO₂)



http://www.japan-fc.co.jp/products/pro_4.html

長崎ポップペン



<http://www.idemitsu.co.jp/moconet/archives/spot/gangu/line2.html>

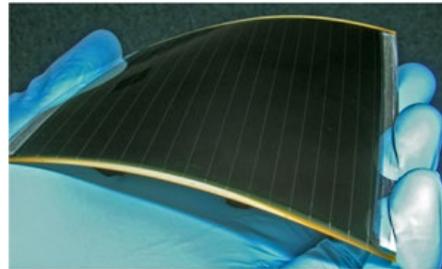
ガラスファイバー



50 μm厚
p-Si太陽電池
(Sharp 2005)



ガラス被覆セラミック
CIGS太陽電池
(AIST PVSEC2010)



曲がる液晶
東芝 (2002/5/21)
R = 20 cm, 8.4" 800x600



<http://pc.watch.impress.co.jp/docs/2002/0521/toshiba.htm>

曲がるガラス

日本電気硝子

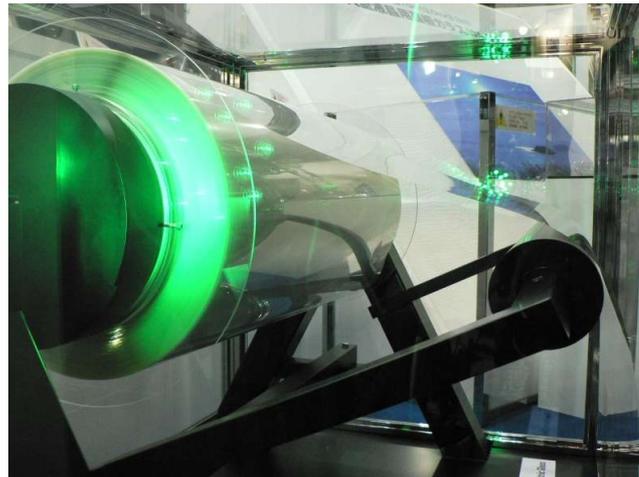


2009/10/29

<http://techon.nikkeibp.co.jp/article/NEWS/20091029/177081/>

Green Device 2009 (10/28-30, パシフィコ横浜)

厚さ100 μm , 長さ400 m, 無アルカリガラス



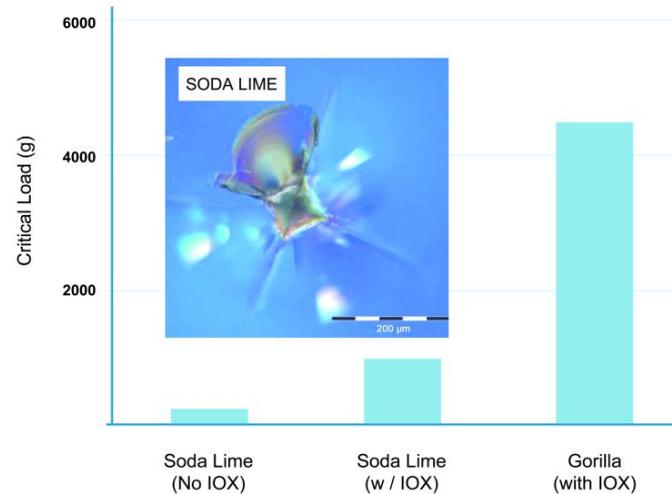
ゴリラガラス

Corning® Gorilla® Glass 化学強化ガラス

プラスチックの20倍の剛性、30倍の硬度

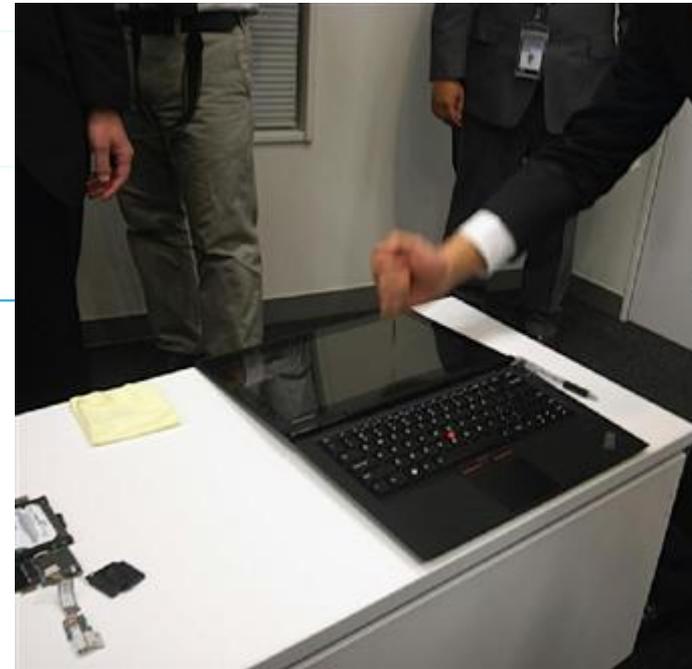
ガラス中の Na^+ イオンを大きな K^+ イオンで交換することで
表面に圧縮応力をかけて強化

Greater damage resistance.



ドライバーで突ついても
傷ひとつつかない

「ThinkPad X11」



動画: iPhone 4を落とすと壊れる
<http://japanese.engadget.com/2010/06/25/drop-iphone-4/>

酸化物の特徴は？

1. 脆い

曲がる酸化物はたくさんある

2. 電気を流さない

電気を流す酸化物はたくさんある

透明導電性酸化物 (TCO) が使われている機器

平面テレビ (LCD, PDP, 有機EL)

タッチパネル



薄膜太陽電池

産総研, メガソーラータウン



東急電鉄 すずかけ台駅

ボーイング787 Dreamliner

Newton2011年12月号



LEDライト
ヘッドアップディスプレイ
タッチパネル
エレクトロクロミックガラス

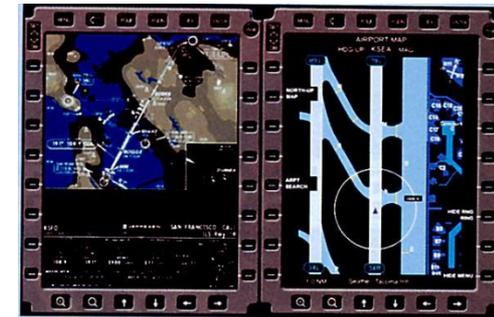


B787のcockpit。両側の席ともにヘッドアップ・ディスプレイ(写真中の矢印)がつけられた。B787がはじめてだ。中央の五つのディスプレイはそれぞれ切りかえることができ、一部が故障して使えなくなってもほかで代用が可能だ。操縦桿(コントロールホイール、座席正面)を前後に押し引きすることで機首の上下(水平尾翼のエレベーターを動かす)を、左右にまわすことで機体の傾き(旋回するときの動き、主翼のエルロンなどを動かす)を制御する。足下のペダルでは、機首の左右(垂直尾翼のラダーを動かす)を制御する。写真は2011年9月28日に羽田空港に到着した初号機を撮影。

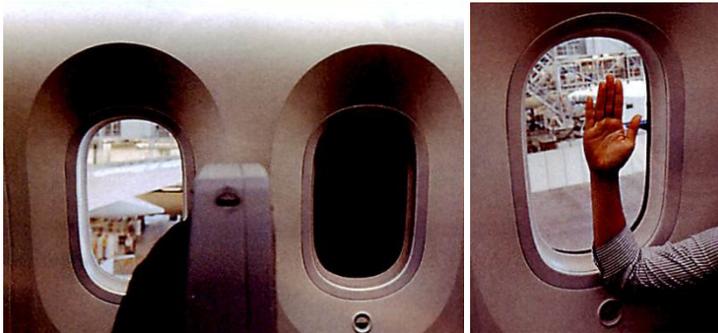


五つあるモニターの一つ。cockpit(左ページ写真)の中央右側のディスプレイを拡大した写真。画面の下3分の1に表示されているのは、飛行機がこれから飛行する高度の情報。このような垂直(鉛直)方向の情報を表示するのは、B787がはじめてだという。

ヘッドアップ・ディスプレイ。視線を下げなくても情報がえられる透明の表示器。高度など、必要な情報を選んで表示できる。パイロットが座った位置からだけ表示が見え、左ページの写真では画面を見ることができない。上の写真は座席から撮影した写真。



パイロットの脇(外側)にある端末。タッチパネルで操作できる。飛行経路がわかる地図や、空港の情報などを見ることができる。従来、厚い冊子となっていた情報を端末で自由に見ることが可能となった。地上と交信することで、最新の情報に簡単に更新できる。



電子式のシェード(日よけ)

B787の客室の窓を機内から撮影した写真。左側の写真が、電子式シェードのいちばん明るい場合と暗い場合を比較したもの。窓の下のボタンで5段階の明るさに調整できる。ボタンを押すとゆっくりと窓に色がついていき、暗くなる。写真では見にくいですが、一番暗くした状態でも約5%の透過度があり、外の景色がうっすら見える。B787の窓は大きさが従来より約1.3倍ほどになった(右側の写真参照)。ANAによると、窓が大きくなったことで、窓際の席だけでなく、中央の席に座っても水平線が見えるのだという。

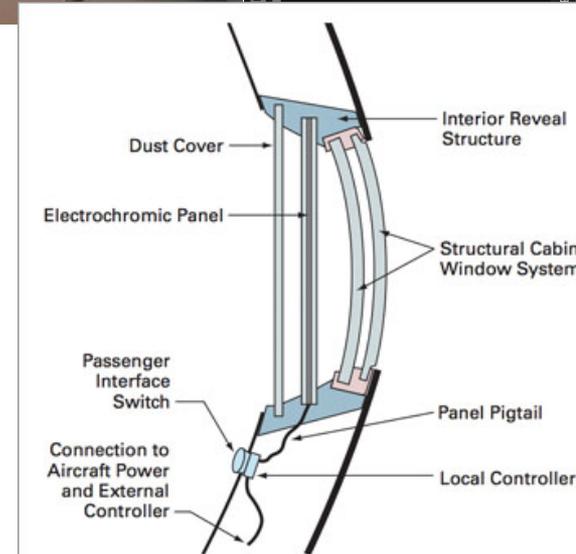
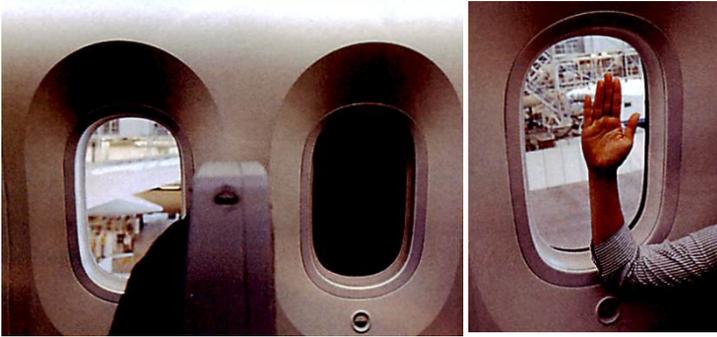
ボーイング787 Dreamliner

Newton2011年12月号

B787のコックピット。両側の席ともにヘッドアップディスプレイ（写真中の矢印）がついたのは、B787がはじめてだ。中央の五つのディスプレイはそれぞれ切りかえることができ、一部が故障して使えなくなってもほかで代用が可能だ。操縦桿（コントロールホイール、座席正面）を前後に押し引きすることで機首の上下（水平尾翼のエレベーターを動かす）を、左右にまわすことで機体の傾き（旋回するときの動き、主翼のエールロンなどを動かす）を制御する。足下のペダルでは、機首の左右（垂直尾翼のラダーを動かす）を制御する。写真は2011年9月28日に羽田空港に到着した初号機を撮影。

電子式のシェード（日よけ）

B787の客室の窓を機内から撮影した写真。左側の写真が、電子式シェードのいちばん明るい場合と暗い場合を比較したもの。窓の下のボタンで5段階の明るさに調整できる。ボタンを押すとゆっくりと窓に色がついていき、暗くなる。写真では見にくいですが、一番暗くした状態でも約5%の透過度があり、外の景色がうっすら見える。B787の窓は大きさが従来より約1.3倍ほどになった（右側の写真参照）。ANAによると、窓が大きくなったことで、窓際の席だけでなく、中央の席に座っても水平線が見えるのだという。



<http://optpelec.blog.fc2.com/blog-entry-540.html>

GENTEX Corp.

<http://www.gentex.com/aerospace/aircraft-windows>

TCO / gel のエレクトロクロミック材料 / TCO

将来のディスプレイは透明になる？

ヘッドアップディスプレイ



F/A-18C Hornet
Wikipedia, Japanese
<http://ja.wikipedia.org/>



Defi-Link VSD CONCEPT
Nippon Seiki Co. Ltd.
<http://www.nippon-seiki.co.jp/defi/>

未来の姿？

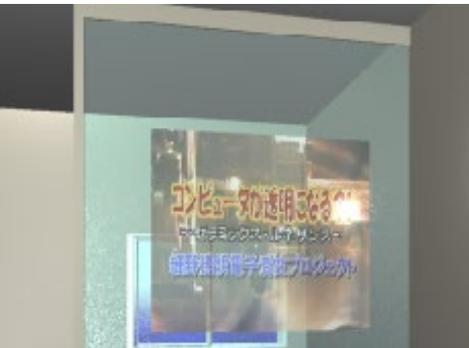
Time Machine, 2002, Dreamworks



Minority Report, 2002, 20Century Fox



透明窓ディスプレイ



実用化された酸化物機能材料

1. 強誘電体メモリー (FeRAM)

1999: 富士通のFeRAM混載LSI

2006: ソニーの FeliCaに採用



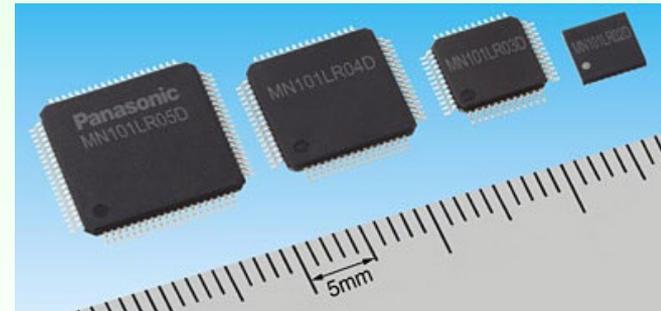
2. 抵抗変化メモリー (ReRAM)

2013: パナソニック 8bit コンピュータ (Ta_2O_5)

サンプル出荷

3. エレクトロクロミック

一部の自動車用防眩ルームミラー



4. 圧電セラミックス

加速度センサー、圧電ジャイロ

5. ディ스플레이用薄膜トランジスタ

2012~: スマートフォン, 80" LCD, 88" OLED TV

内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料: 計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介: 分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計: 機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

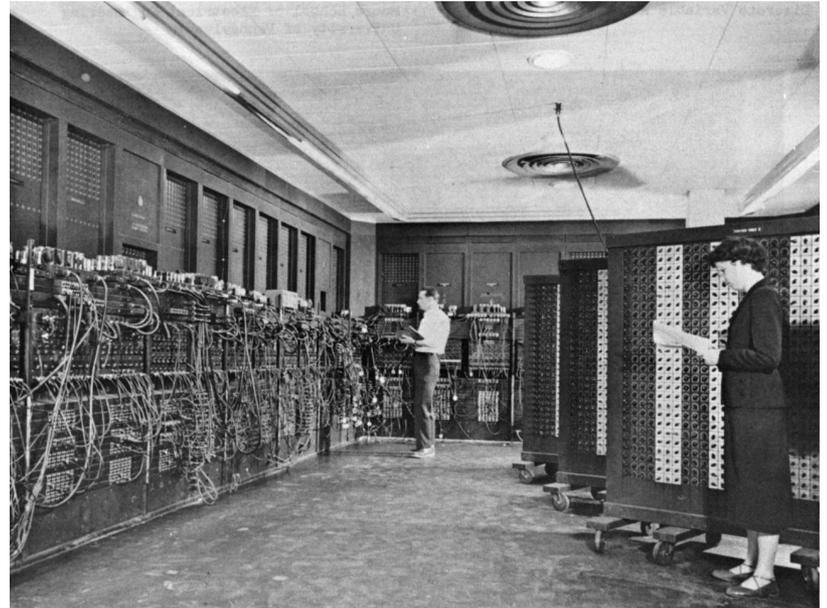
ENIAC: 最初のコンピュータ

<https://ja.wikipedia.org/wiki/ENIAC>

微分方程式で表すことができるような多くの種類の問題について
積分法によって数値的な解を得る

砲撃射表の計算を第一の目的として設計された

1946年2月14日の夕方に完成したマシンが公開、翌日にはペンシルベニア大学で正式に使用が開始。1946年7月にアメリカ陸軍に正式に引き渡された



運動方程式で未来と過去を知ることができる

ニュートンの運動の第二法則 (運動の法則): 運動方程式

$$m\vec{a} = \vec{F}$$

$$\text{(平均)加速度: } \vec{a} = \frac{\vec{v}_2 - \vec{v}_1}{t_2 - t_1}$$

$$\text{(平均)速度 : } \vec{v} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{t_2 - t_1}$$

上の定義式を変形すると、未来を予測できる

時刻 t_1 における位置 \vec{r}_1 , 速度 \vec{v}_1 がわかれば、
質点にかかる力 \vec{F}_1 が計算できる。これらから、

$$\vec{a}_1 = \vec{F}_1/m$$

$$\vec{v}_2 = \vec{v}_1 + (t_2 - t_1)\vec{a}_1 = \vec{v}_1 + (t_2 - t_1)\vec{F}_1/m$$

$$\vec{r}_2 = \vec{r}_1 + (t_2 - t_1)\vec{v}_1$$

により、時刻 t_2 における位置 \vec{r}_2 , 速度 \vec{v}_2 を予測できる。

=> 上の作業を繰り返すことで、

時刻 t_3, t_4, t_5, \dots の運動を予測できる。

地表近傍の砲弾の運動：数値解法

- ・ 砲弾を質点とみなし、地上面は平面とする
- ・ 時刻 $t_1 = 0$ において、
 $\vec{r}_1 = (0, 0)$ から初速度 v_0 、方位角度 θ で
砲弾を射出する： $\vec{v}_0 = (v_0 \cos \theta, v_0 \sin \theta)$
- ・ 質点にかかる重力は位置に依らず一定

$$\vec{F} = (F_x, F_y) = (0, -mg)$$

- * 時刻 t_i の位置、速度から
時刻 t_{i+1} の位置、速度を計算し、繰り返す

$$\vec{v}_{i+1} = \vec{v}_i + (t_{i+1} - t_i) \vec{F}_i / m$$

$$\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_i + (t_{i+1} - t_i) \vec{v}_i$$

Python

- インストールが簡単
- いろいろな科学計算ライブラリが使える

Anacondaというディストリビューションを推奨

<https://www.anaconda.com/products/individual>

- 必要なライブラリがすべて入っている
- Ver 3.x を選択すること

Anaconda以外のディストリビューションの場合:

- numpyをインストールする必要

```
pip install numpy
```

プログラムダウンロード:

<http://conf.msl.titech.ac.jp/tachikawa/>

地表近傍の砲弾の運動

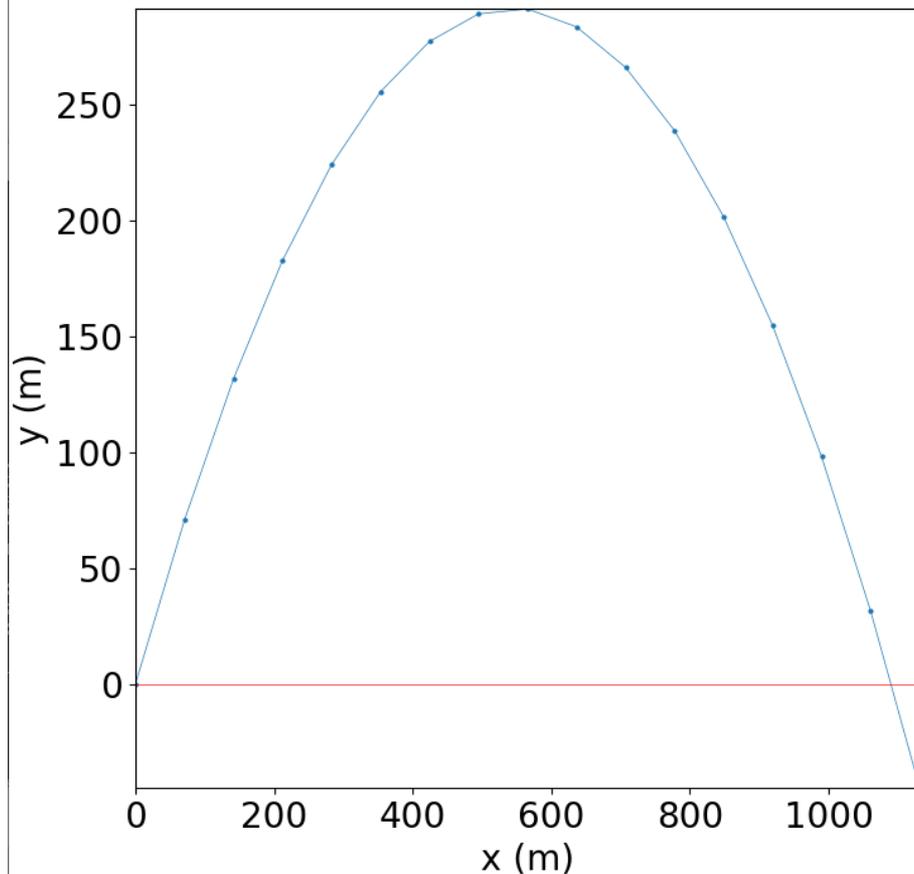
プログラム: cannonball_flat.py

使い方: python cannonball_flat.py 初速度(m/s) 射出角度(度) 時間間隔(s)

例1: python cannonball_flat.py

初期値 $v_0 = 100.0$ m/s, $Q_0 = 45$ 度, $dt = 1$ sで計算

等加速度運動なので
放物運動をする



初速度の大きい砲弾の運動：数値解法

- ・ 砲弾を質点とみなし、**地上面は半径 R_E の球**とする
- ・ 時刻 $t_1 = 0$ において、
 $\vec{r}_1 = (0, 0)$ から初速度 v_0 、方位角度 θ で
砲弾を射出する： $\vec{v}_0 = (v_0 \cos \theta, v_0 \sin \theta)$
- ・ 質点に係る重力は
地球の中心からの距離 r^2 に反比例

$$\vec{F} = (\mathbf{0}, -mg[R_E/r]^2)$$

- * 時刻 t_i の位置、速度から
時刻 t_{i+1} の位置、速度を計算し、繰り返す

$$\vec{v}_{i+1} = \vec{v}_i + (t_{i+1} - t_i) \vec{F}_i / m$$

$$\vec{r}_{i+1} = \vec{r}_i + (t_{i+1} - t_i) \vec{v}_i$$

初速度の大きい砲弾の運動

プログラム: cannonball_round.py

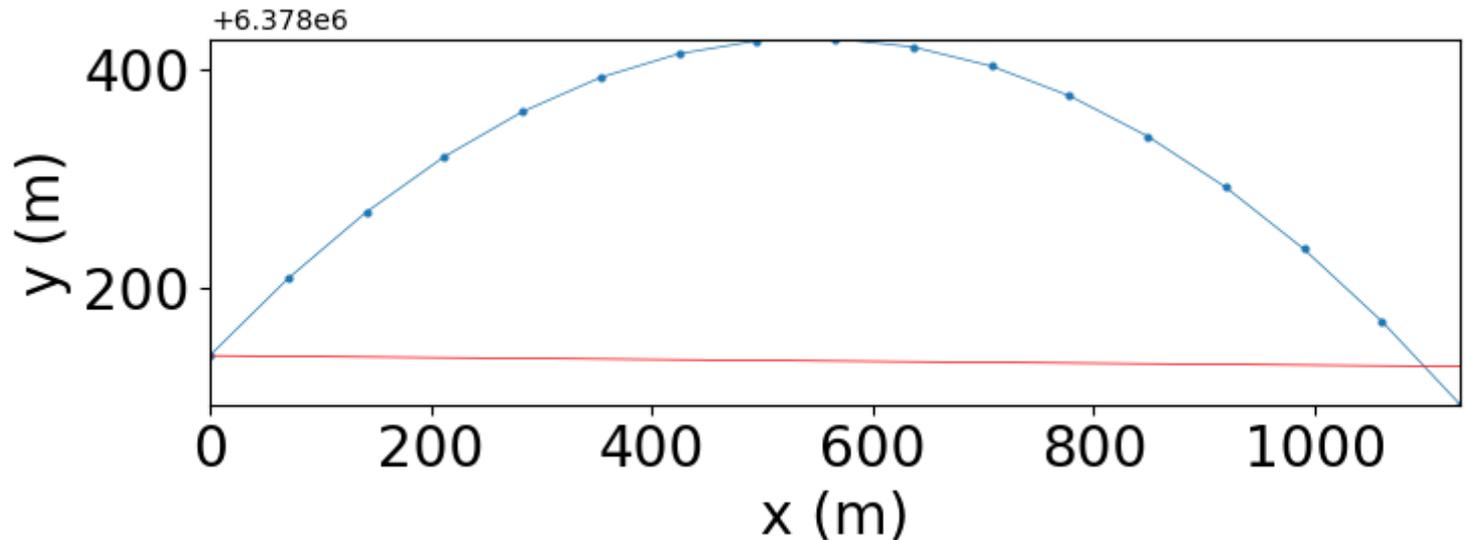
使い方: `python cannonball_round.py` 初速度(m/s) 射出角度(度) 時間間隔(s)

例1: `python cannonball_round.py`

初期値 $v_0 = 100.0$ m/s, $Q_0 = 45$ 度, $dt = 1$ sで計算

初速度が小さいとほぼ放物運動をする。

注意; グラフの縦横比が1:1になるように表示している



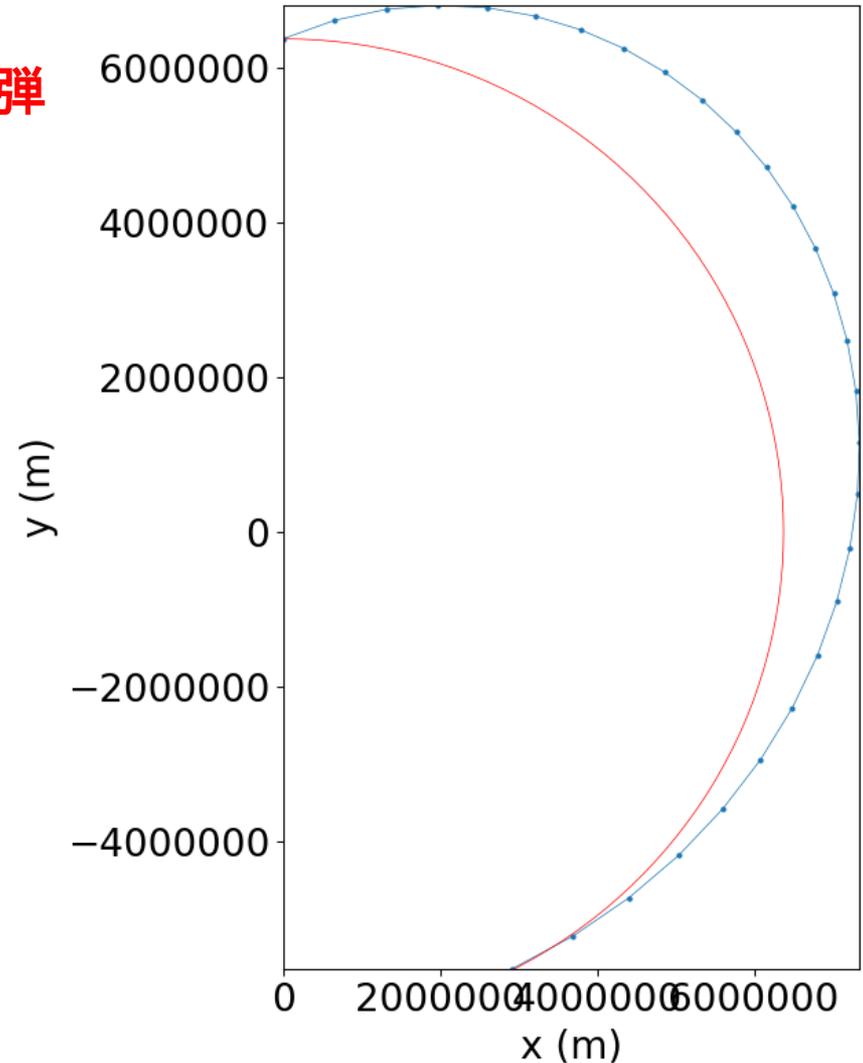
初速度の大きい砲弾の運動

プログラム: cannonball_round.py

python cannonball_round.py 7000 20 100

初期値 $v_0 = 7000.0$ m/s, $Q_0 = 20$ 度, $dt = 100$ s で計算

地球の裏側に着弾



初速度の大きい砲弾の運動

プログラム: cannonball_round.py

```
python cannonball_round.py 10000 20 100
```

初期値 $v_0 = 10000.0$ m/s, $Q_0 = 20$ 度, $dt = 100$ sで計算

地球から脱出してしまふ

参考

第一宇宙速度 約 7.9 km/s

地表半径以上で衛星軌道に乗る最低速度

第二宇宙速度 約 11.2 km/s

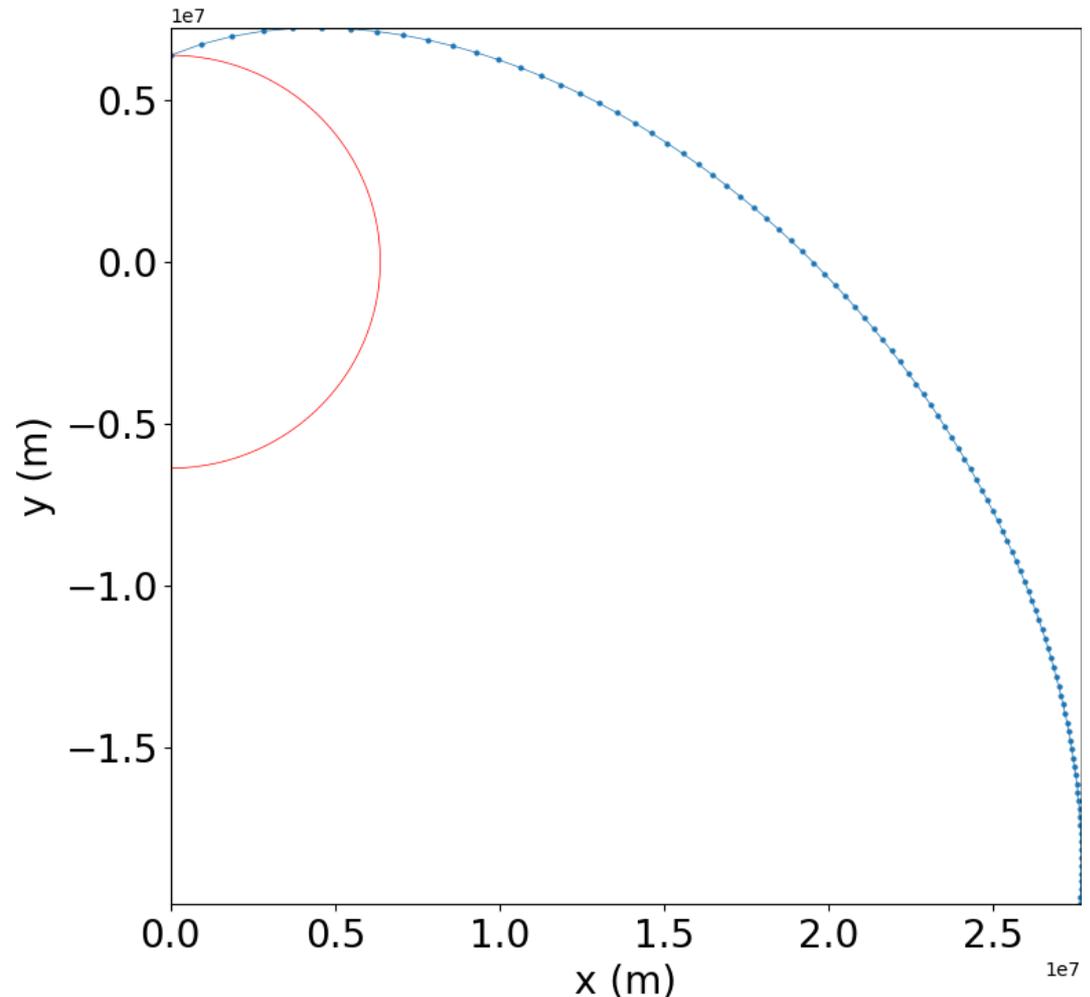
地球脱出速度

第三宇宙速度 約 16.7 km/s

太陽系脱出速度

第二宇宙速度以下なので地球から
脱出しないはずだが...

$dt = 100$ sだと計算誤差が大きい



人工衛星の運動を再現するには？

プログラム: cannonball_round.py

人工衛星を再現するには?: (i) 射出角を浅くする (ii) 初速度を調整する

* dtを小さくして計算精度を上げる

```
python cannonball_round.py 7900 5 10 10000 0.001
```

初期値 $v_0 = 7900.0$ m/s, $Q_0 = 5$ 度

dt = 10 sで、1000ステップの計算

グラフを0.001秒ごとに更新

参考

第一宇宙速度 約 7.9 km/s

地表半径以上で衛星軌道に乗る最低速度

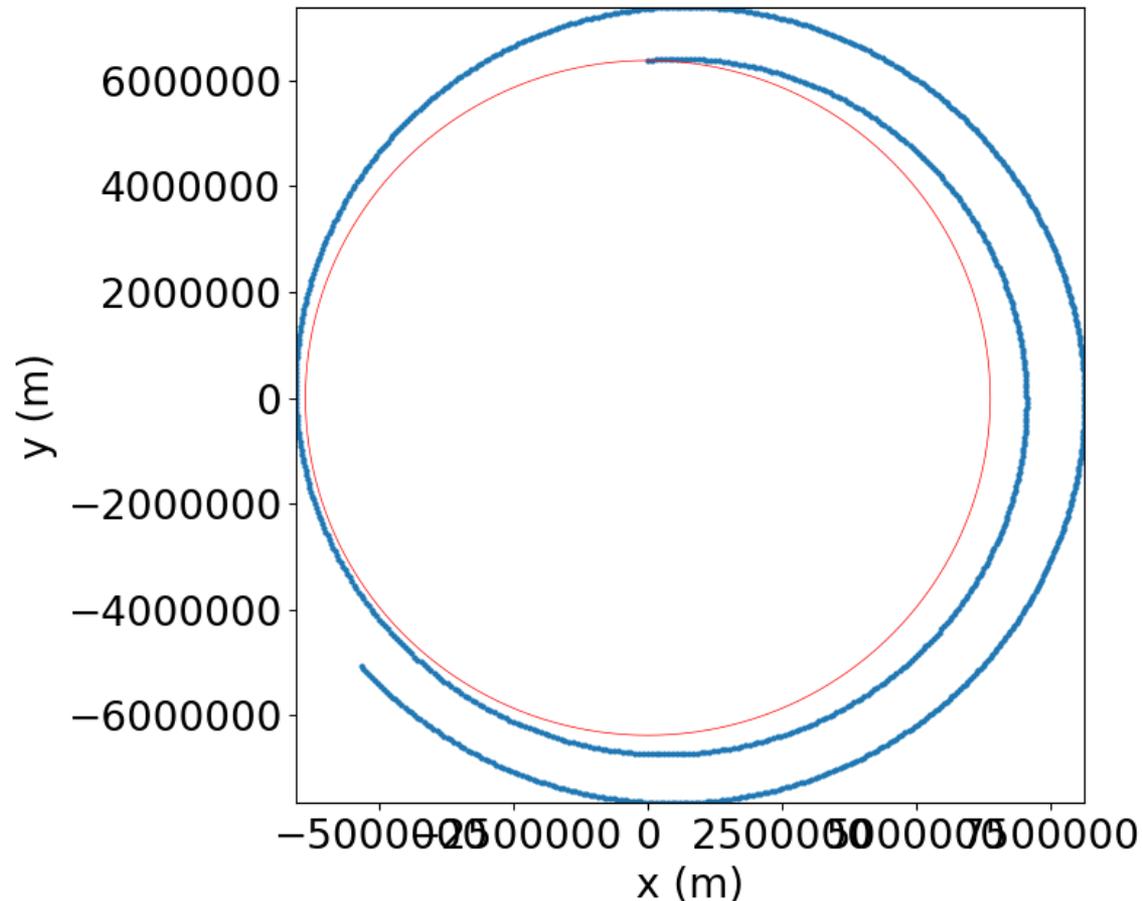
第二宇宙速度 約 11.2 km/s

地球脱出速度

第一宇宙速度と第二宇宙速度の間の初速で浅い射出角で打ち上げれば最終的に周回楕円軌道に乗る。

だが、**計算誤差**のため、軌道半径が大きくなっていく

**円軌道に乗せるには
所定高度に達したところで
軌道修正が必要**



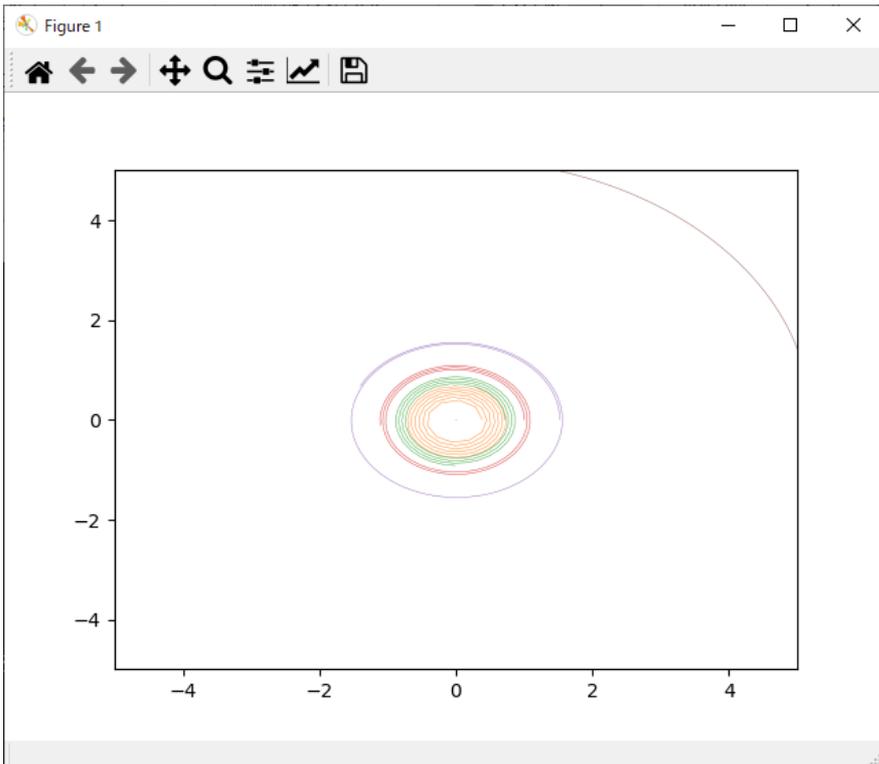
惑星シミュレータ

複数の質点について、ニュートンの運動方程式を解く

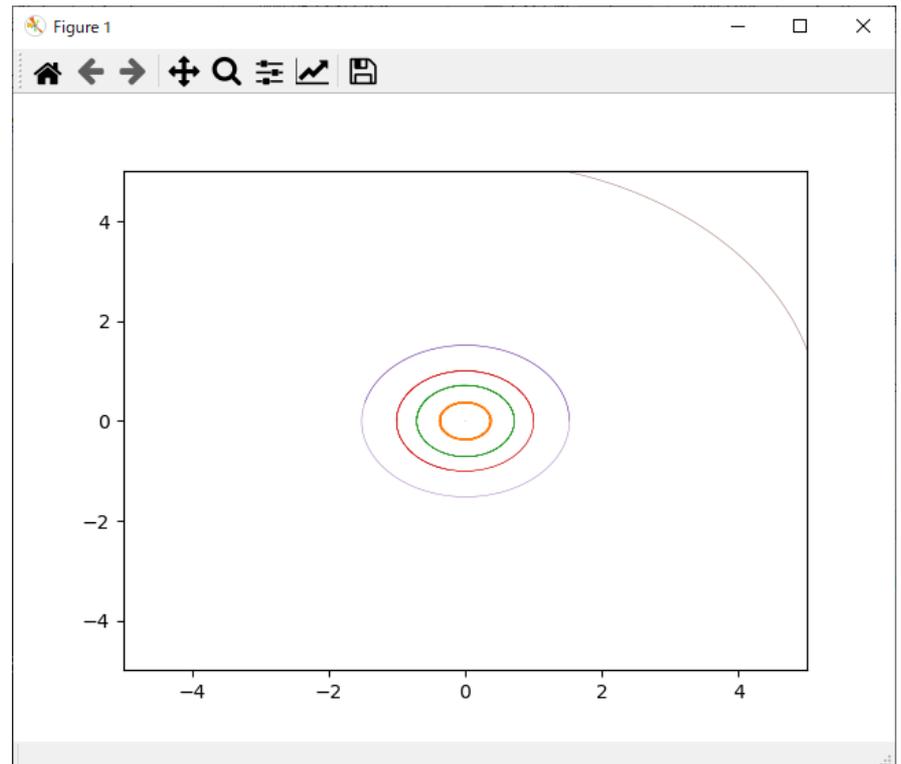
使い方: `python planet.py` 積分方法 時間間隔(日) 繰り返し回数

積分方法: Euler: 先の方法と同じ Verlet: より精度が高い

`python planet.py Euler 0.2 5000`



`python planet.py Verlet 0.2 5000`



惑星シミュレータ

Planet_db.csvに、各惑星の公転半径、質量、公転速度が記入されている。

木星(Jupiter)の質量(Mass)を100倍にしてみる (太陽の質量の約1/10)

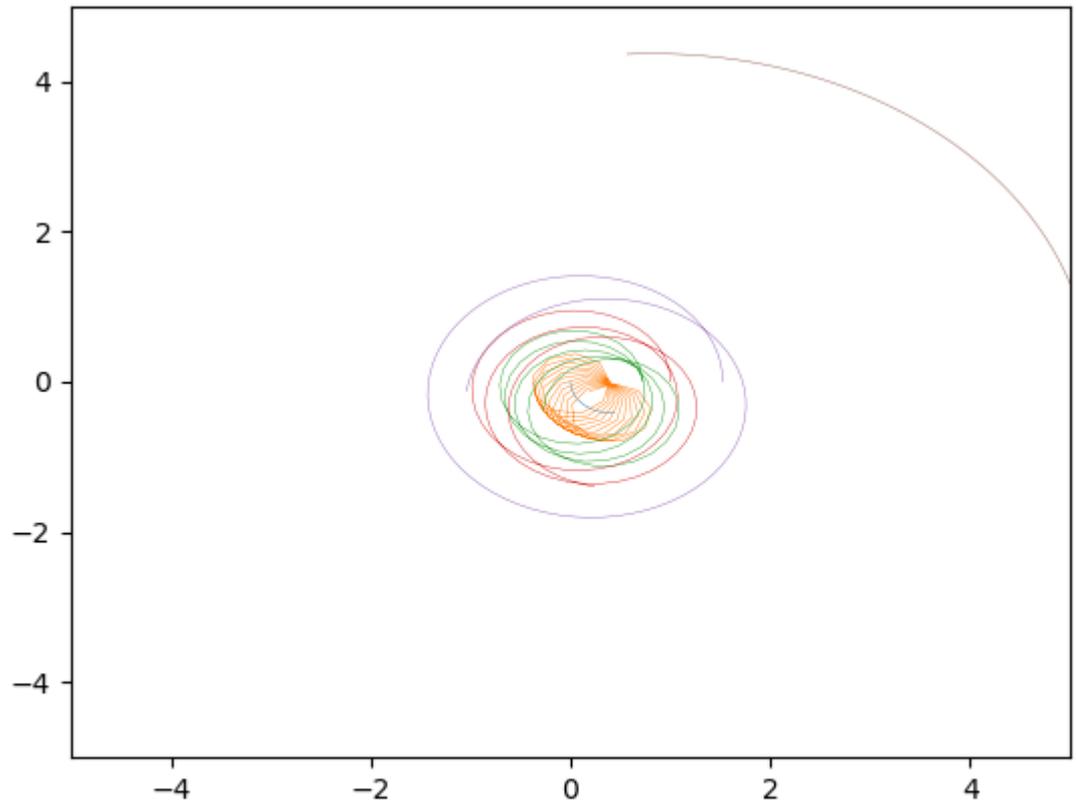
Jupiter,1.43E+08,0,1.90E+27,1.33,0,7.78E+11,1.31E+04

を

Jupiter,1.43E+08,0,1.90E+29,1.33,0,7.78E+11,1.31E+04

に修正

python planet.py Verlet 0.2 5000



惑星シミュレータ

Planet_db.csvに、各惑星の公転半径、質量、公転速度が記入されている。
木星(Jupiter)の質量(Mass)を1000倍にしてみる (太陽の質量と同程度)

Jupiter,1.43E+08,0,1.90E+27,1.33,0,7.78E+11,1.31E+04

を

Jupiter,1.43E+08,0,1.90E+30,1.33,0,7.78E+11,1.31E+04

に修正

```
python planet.py Verlet 0.2 10000
```

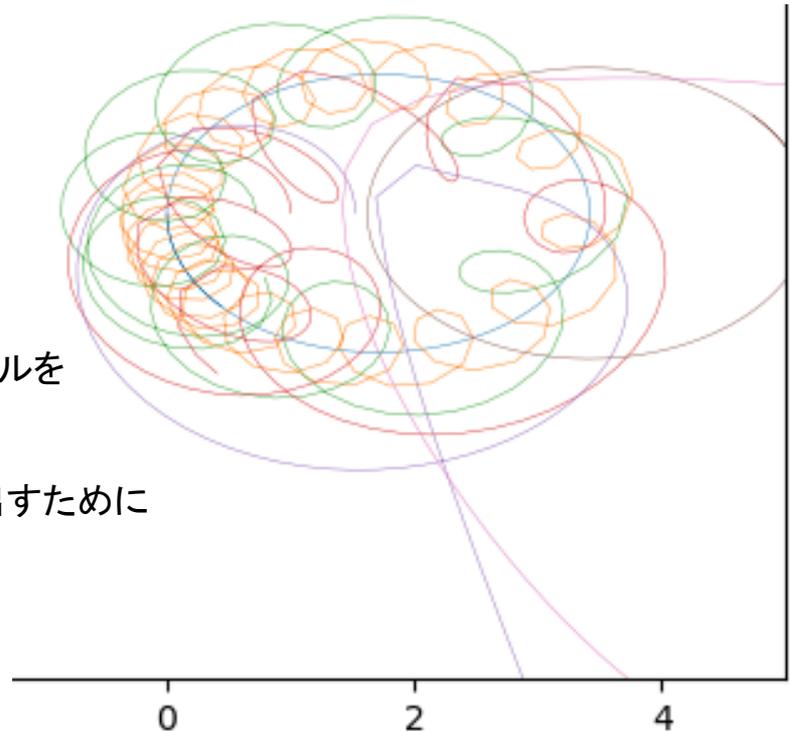
接近した他の惑星により
加速されてふっ飛ぶ

=> **スイングバイ**

<https://ja.wikipedia.org/wiki/スイングバイ>

天体の運動と重力を利用し、宇宙機の運動ベクトルを
変更する技術

内惑星や外惑星、さらには太陽系外へといった、
地球軌道外の目的軌道へ宇宙探査機などを送り出すために
よく使われる。

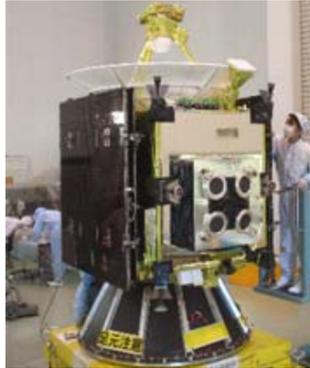


はやぶさのスイングバイ軌道

https://www.jaxa.jp/press/2004/05/20040526_sac_hayabusa_j.html

第20号科学衛星 (MUSES-C)

- ・ 2003年5月9日 M-Vロケット5号機にて打ち上げ
- ・ 質量510kg
- ・ 主な搭載機器
 - イオンエンジン
 - サンプル採集装置
 - 近赤外線分光器
 - 望遠カメラ
 - 広角カメラ(2台)
 - 小型探査ロボット「ミネルバ」
 - 再突入カプセル(サンプル回収カプセル)
- ・ 2005年夏に「ITOKAWA」とランデブー、2007年6月に地球に帰還予定。



小惑星「イトカワ」
(1998SF36)

小惑星到着
(2005夏)

打上げ
(2003.5.9)

地球スイングバイ
(2004.5.19)



■スイングバイの概要

イオンエンジン+スイングバイ 併用した技法は世界初

- ・ 地球最接近 5/19 15:22 (日本時間)、東太平洋上空 高度3700km。
- ・ スイングバイにより太陽周回軌道速度30km/s→34km/sに加速。

小惑星到着までの軌道

邪馬台国の卑弥呼

<https://ja.wikipedia.org/wiki/卑弥呼>

日本列島における皆既日食

・ 247年3月24日日没 ・ 248年9月5日日出

卑弥呼の死

247年に邪馬台国からの使いが狗奴国との紛争を報告したことに発する一連の記述がある。卑弥呼の死が247年か248年か(あるいはさらに後か)については説が分かれている。また247年の記述は、240年に梯儁(ていしゅん)が来てから以降の倭の出来事を伝えたものとするれば、卑弥呼の死も240年から246年ごろに起きた可能性が高い。

天文学者の斎藤国治は、248年9月5日朝(日本時間。世界時では9月4日)に北部九州で皆既日食が起こったことを求め、これが卑弥呼の死に関係すると唱えた。

さらに、橘高章と安本美典は、247年3月24日夕方にも北部九州で皆既日食が起こったことを指摘し、247年の日食が原因で魔力が衰えた卑弥呼が殺され、248年の日食が原因で男王に代わり壹与が即位したと唱えた。

これらの説は、邪馬台国北九州説や卑弥呼・天照大神説と密接に結びついている。

しかし現在の正確な計算によると皆既日食は日本付近において、247年の日食が朝鮮半島南岸から対馬付近まで、248年の日食が隠岐付近より能登半島から福島へ抜ける地域で観測されたと考えられ、いずれの日食も邪馬台国の主要な比定地である九州本島や畿内の全域で(欠ける率は大きい)部分日食であり、部分日食は必ずしも希な現象ではないことから、日食と卑弥呼の死の関連性は疑問視されている。

原子の運動を計算する: 原子間ポテンシャル

参考: 惑星シミュレータの場合は重力だけ

$$U_{ij}(r_{ij}) = G \frac{m_i m_j}{r_{ij}}$$

原子(イオン)の場合: **分子動力学法**

$$U_{ij}(r_{ij}) = \frac{z_i z_j e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_{ij}} + A_i \exp\left[-\frac{r_{ij}}{B_{ij}}\right]$$

静電ポテンシャル **反発力**

セメント鉱物 C12A7に電子をドーピングする

C12A7: $12\text{CaO}\cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$

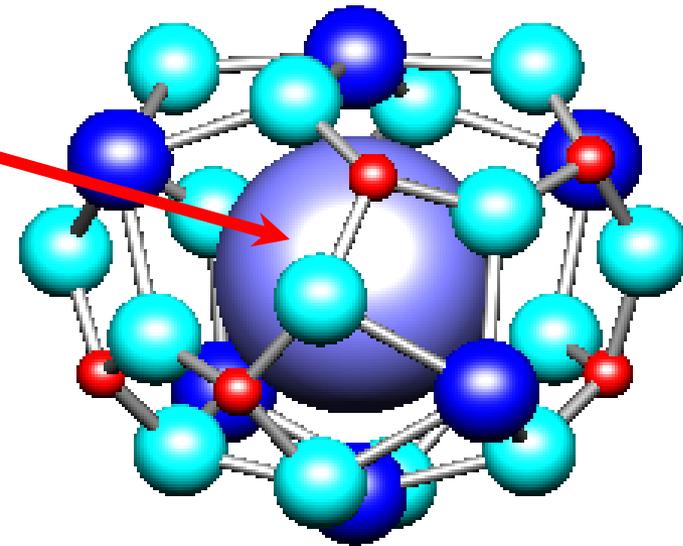
アルミナセメントの原料

電気絶縁体

何の特別な機能は無い

正に帯電した籠構造 ($\sim 0.4 \text{ nm}$)

自由酸化物イオン (O^{2-})



自由 O^{2-} イオンを置き換える



O^- , H^- , e^- , etc.

新しい機能

C12A7: O^-

C12A7: H^-

C12A7: e^-

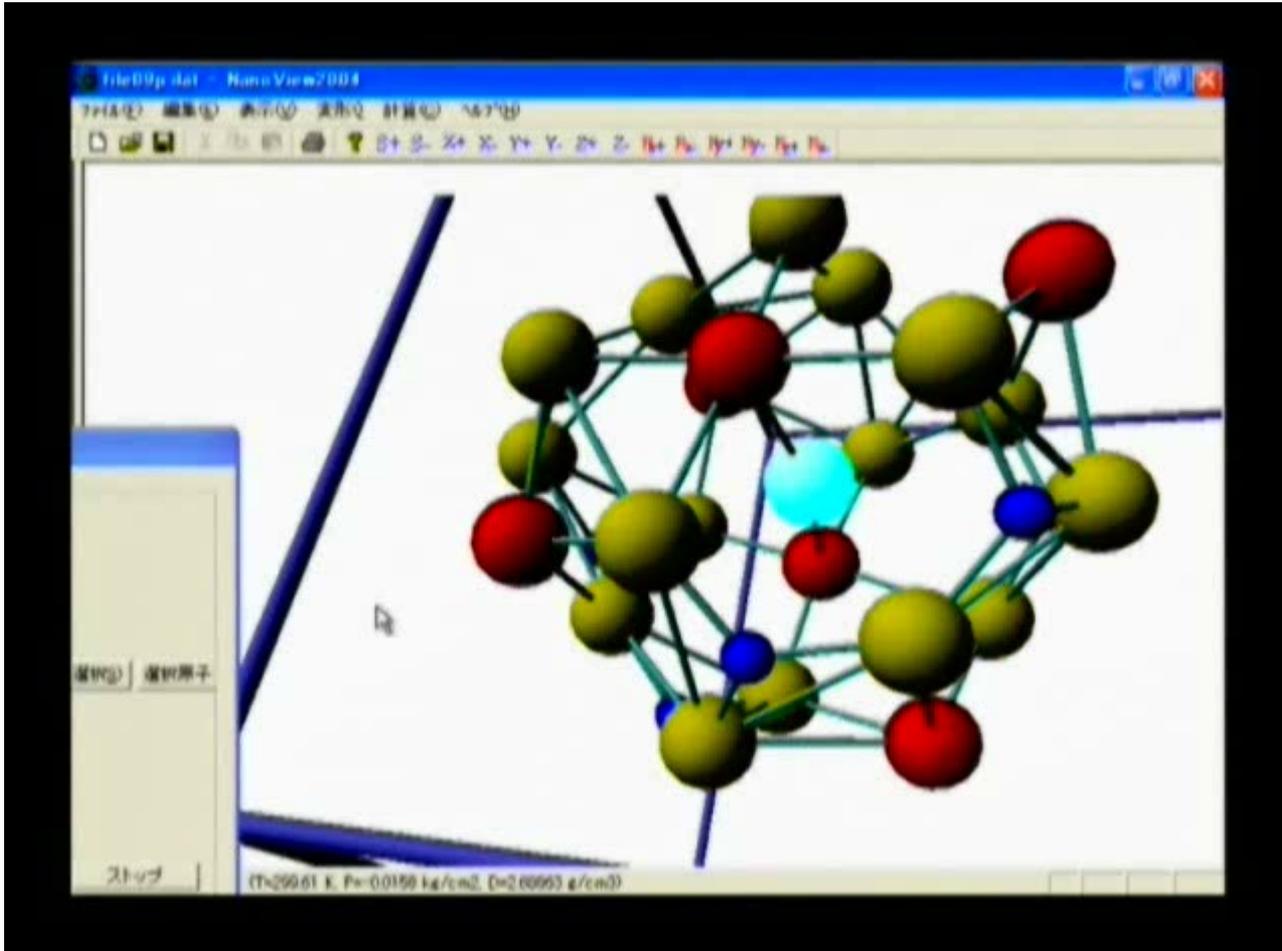
セメント鉍物 C12A7に電子をドーピングする

- 有機ELの電極
- アンモニア合成触媒
- 電子銃



物質の中の原子の運動: 分子動力学法

$12\text{CaO}\cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$, 300K – 1400K



内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

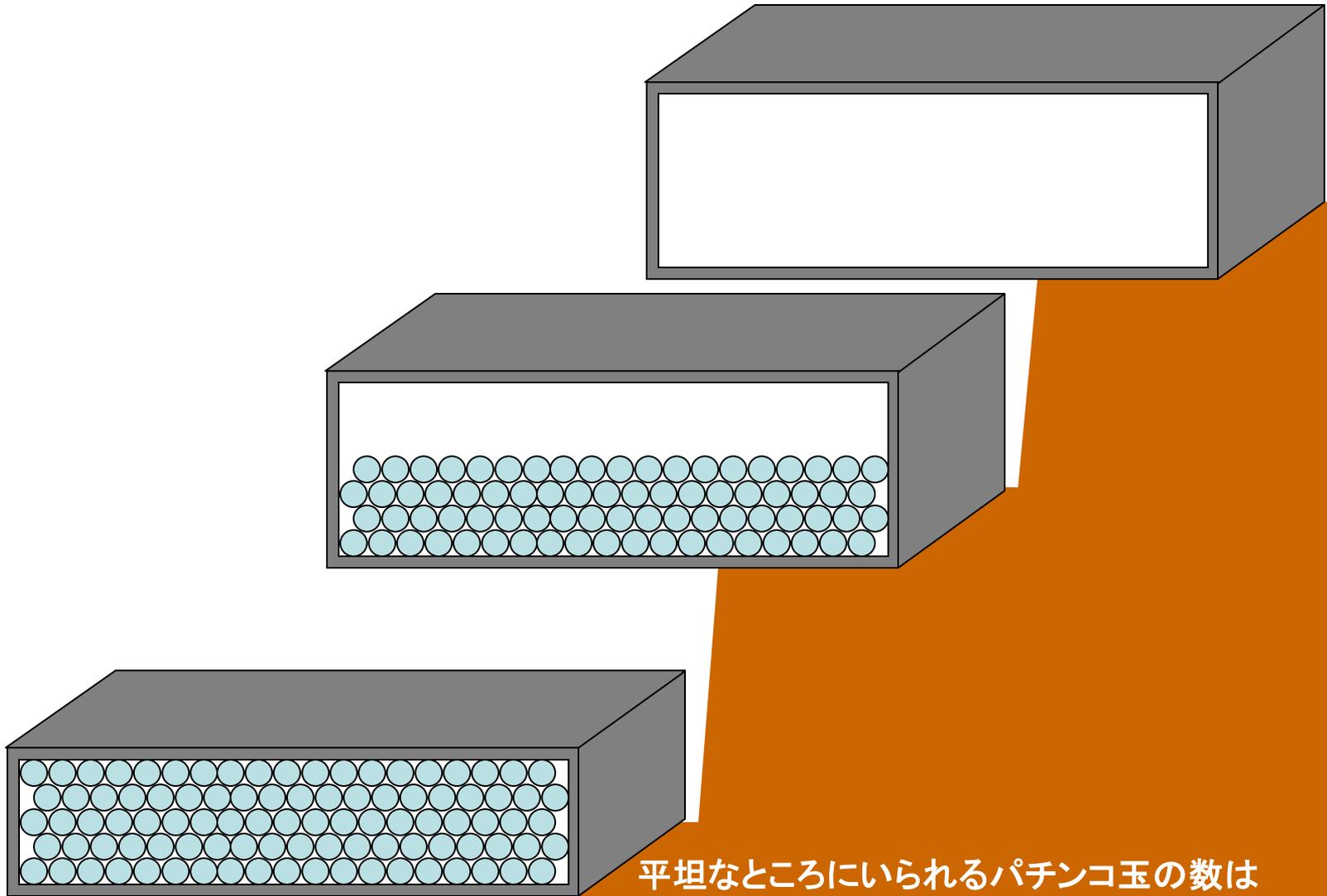
- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

固体中の電子(横から見た図)

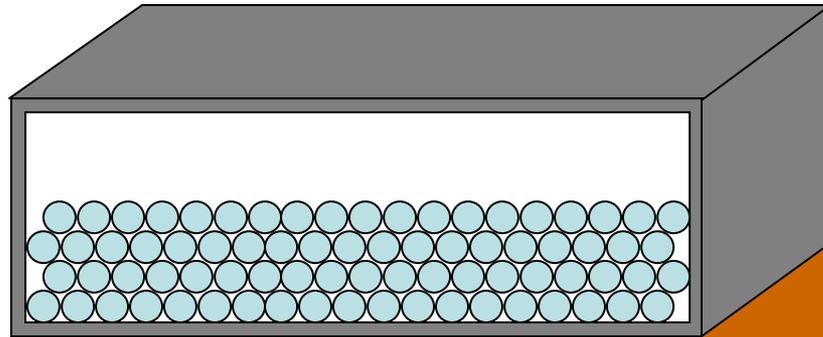
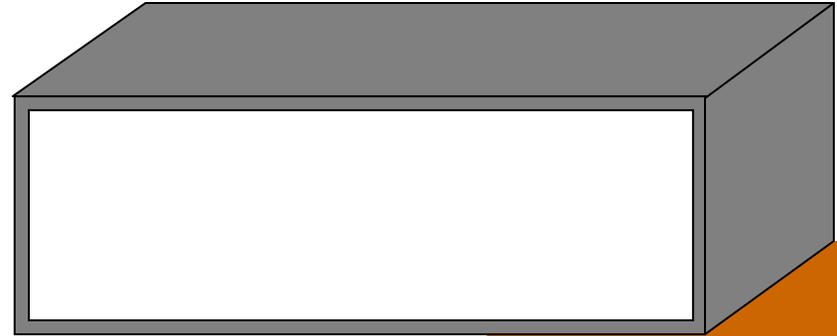
↑
上方向(電子のエネルギー)



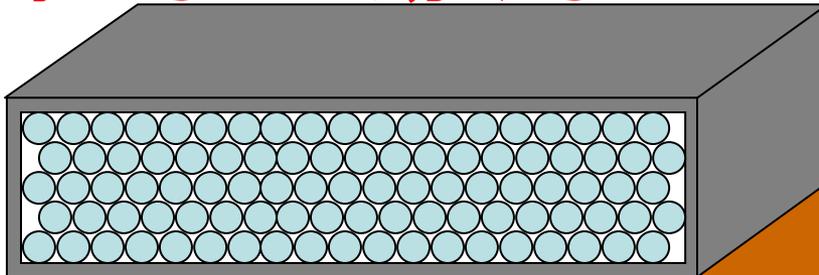
平坦なところにいられるパチンコ玉の数は
限りがある
下の箱に隙間があったら、すぐに落ちる

金属の中の電子

隙間があるとよく動く
=> 電気を流す“金属”

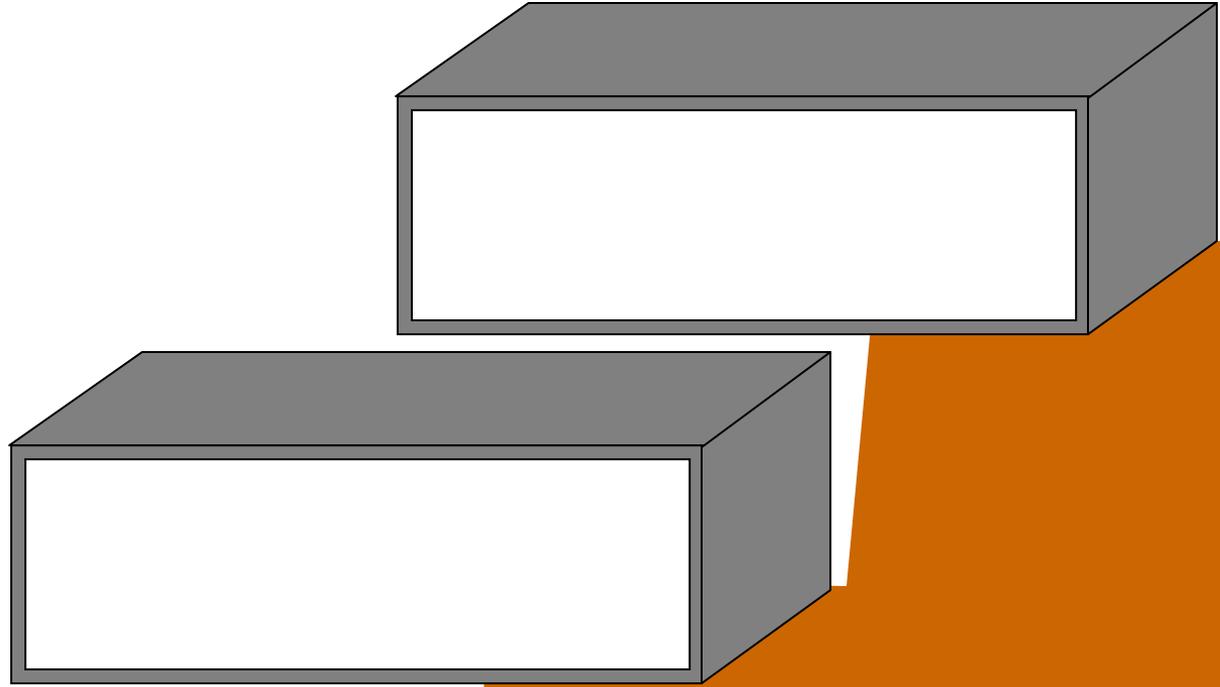


隙間がないと動けない

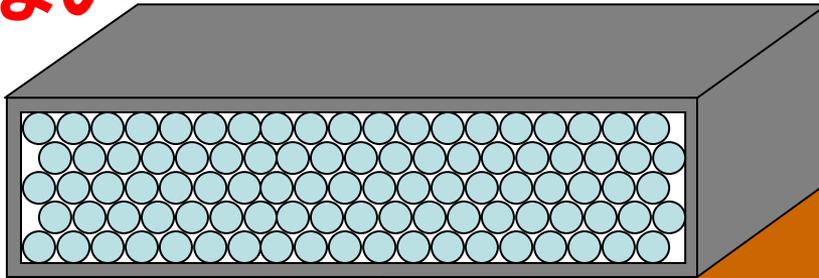


電気絶縁体の中の電子

電子がない

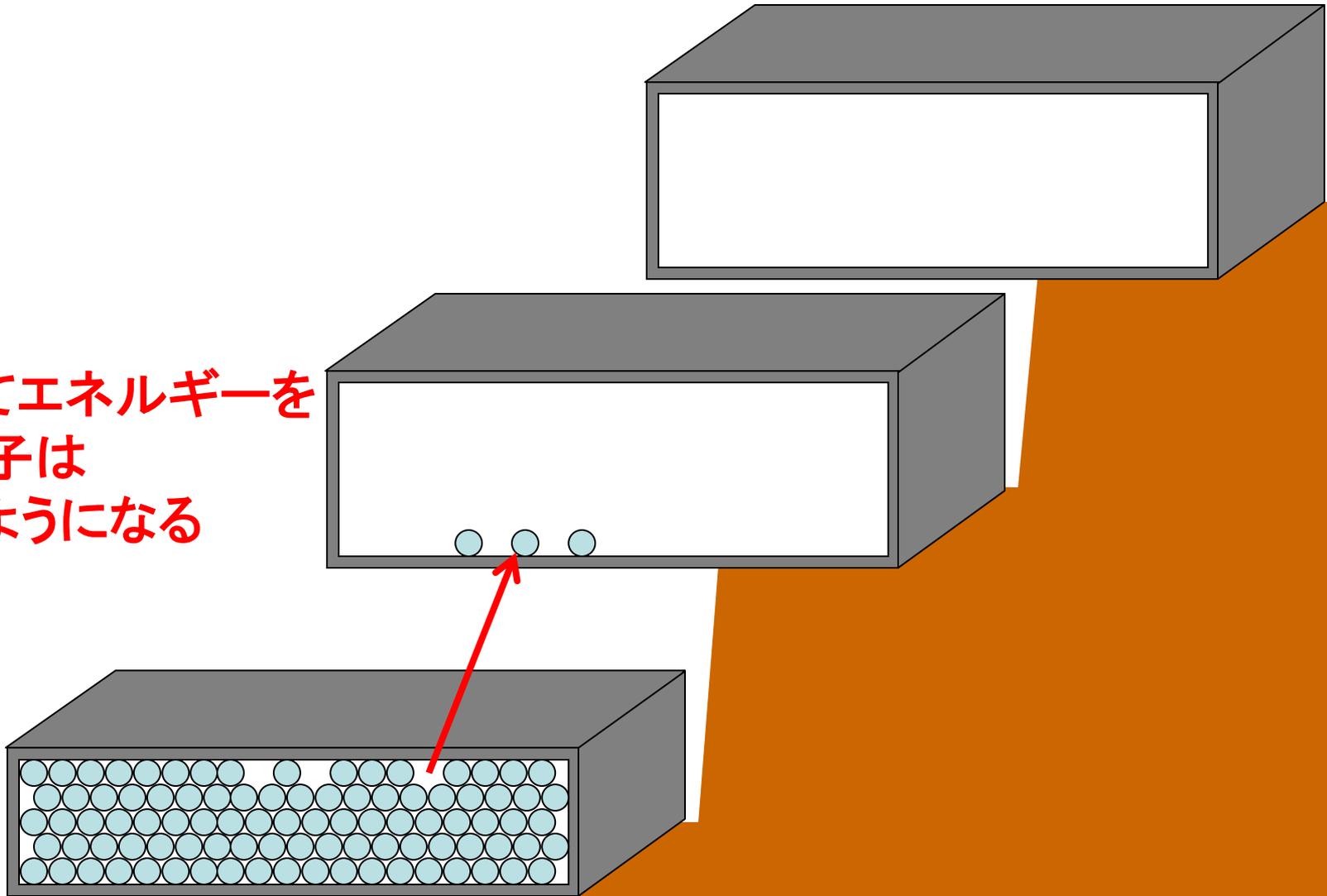


隙間がない



半導体の中の電子

温まってエネルギーを得た電子は
動けるようになる



どれくらいの数の電子が動けるのか？

物質の中で、
 e 以上のエネルギーを持つ電子の割合は
いくらか？

「100人を部屋に集めてお金をランダムな相手に渡し続ける」とだんだんと貧富の差が生まれる

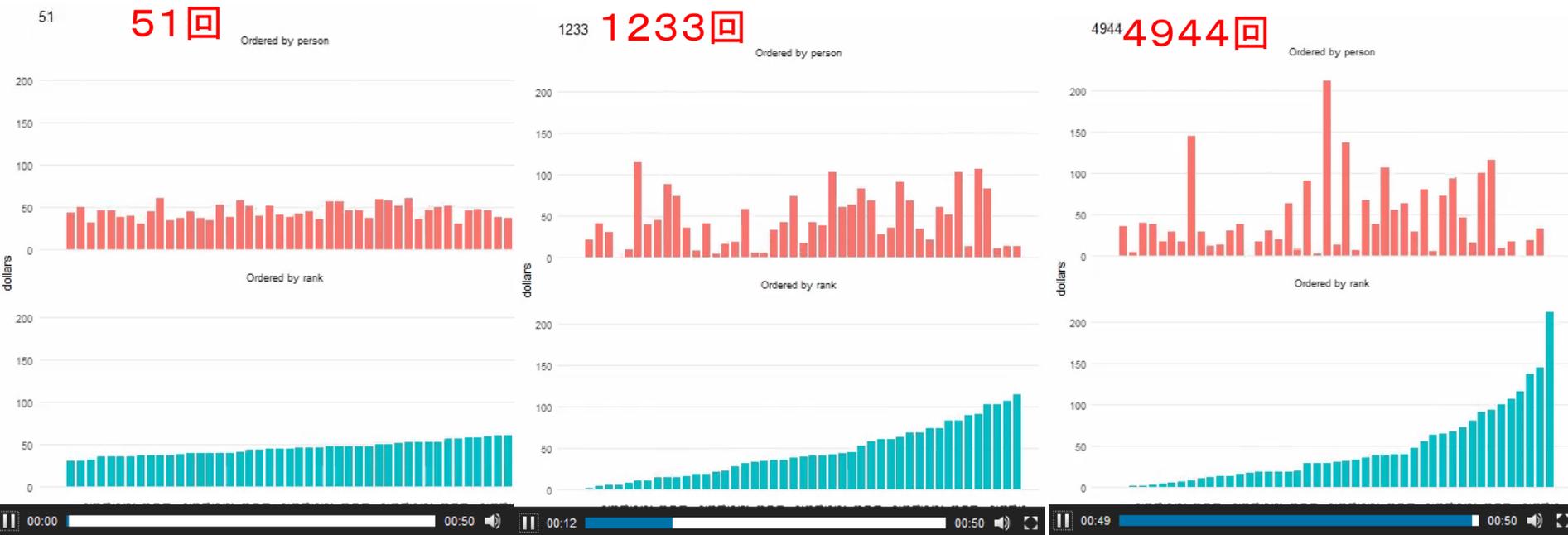
2017/9/11 Gigazine

<http://gigazine.net/news/20170711-random-people-give-money-to-random-other-people/>

100ドルを持った100人を1つの部屋に集めて、それぞれ無作為に選ばれた人に1ドルを渡したらどうなるか。

⇒ お金を渡す機会が増えれば増えるほど偏り、つまりは貧富の差が生まれる。

\$45を持った45人でスタートした例:



「100人を部屋に集めてお金をランダムな相手に渡し続ける」とだんだんと貧富の差が生まれる

Pythonプログラム: randomtrade.py

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/StatisticsC/index.html>

pythonのインストール (英語):

<http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/python/InstallPython/InstallPython.html>

使い方: 引数無しで `python randomtrade.py` を実行すると、Usageを表示

`python randomtrade.py npersons value(average) vtrade n(maxiteration) n(plotinterval) n(distribution func)`

使用例: `python randomtrade.py 200 50 1 10000 100 21`

200人が、最初に50ドルずつもっていて、1ドルずつ交換を10000回行う。

100サイクルごとにグラフを更新。

分布関数の横軸は、value(average)の10倍の範囲を21分割する。

実行例: `python randomtrade.py 2000 50 1 100000 100 21`

上段: それぞれの保有金額

中段: 保有金額順に並べ替えた結果

下段: 青線 金額に関する分布関数。

赤線 総数が `npersons`、

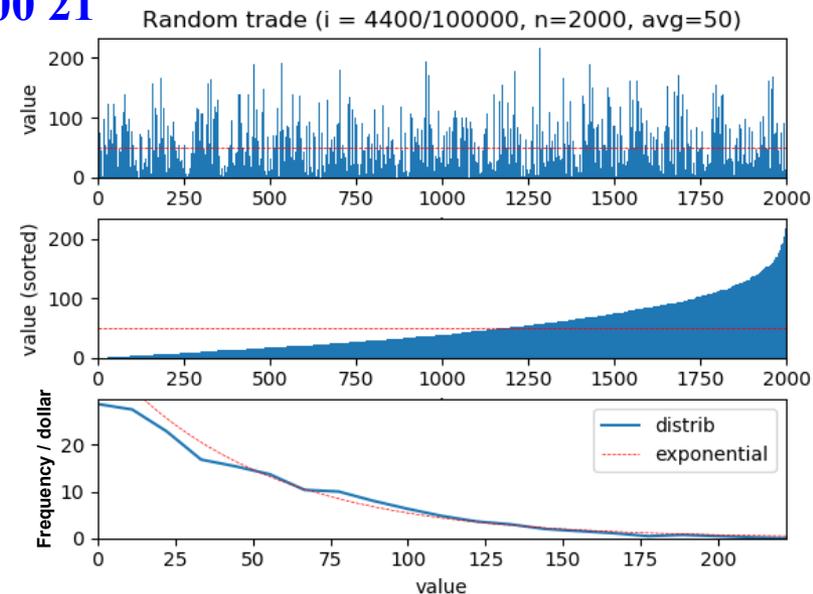
平均所有額 m が value(average)になる

指数関数分布曲線 $f(m) = A \exp(-bm)$

$$b = 1 / \langle m \rangle$$

$$A = Nb$$

右図は、4400回の交換サイクル終了時の結果



物質中の原子、電子も同じ

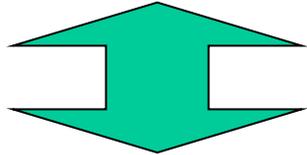
大学の「統計力学」で習います：温度 T はエネルギー平均 $\langle e \rangle$ と等価： $\langle e \rangle = k_B T$

「温度 T において、エネルギー e を持つ電子はどれくらいの割合いるのだろうか？」

「 N 個の電子が全エネルギー E_{tot} を分け合います。

電子が衝突するたびに小さなエネルギー Δe を交換していくと、最後にはどのようなエネルギー分布になるでしょうか？」

$$P(e) \propto \exp\left(-\frac{e}{k_B T}\right)$$

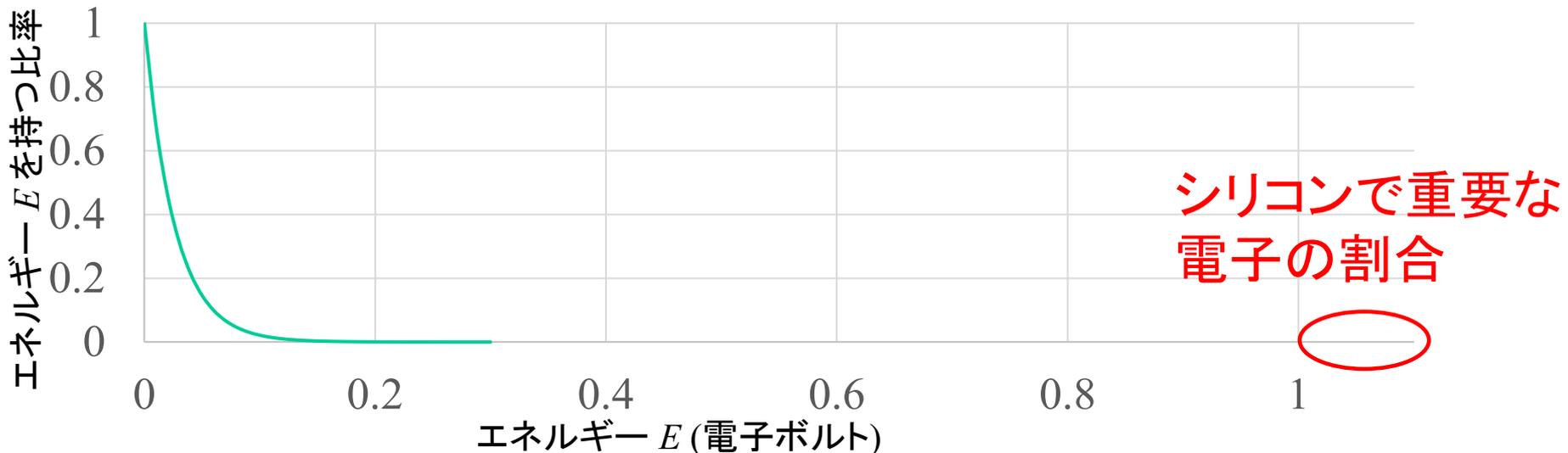


「 N 人が全財産 M_{tot} を分け合います。

それぞれが出会うたびに小さな金額 Δm を交換していくと、最後にはどのような財産分布になるでしょうか？」

$$P(m) \propto \exp\left(-\frac{m}{\langle m \rangle}\right)$$

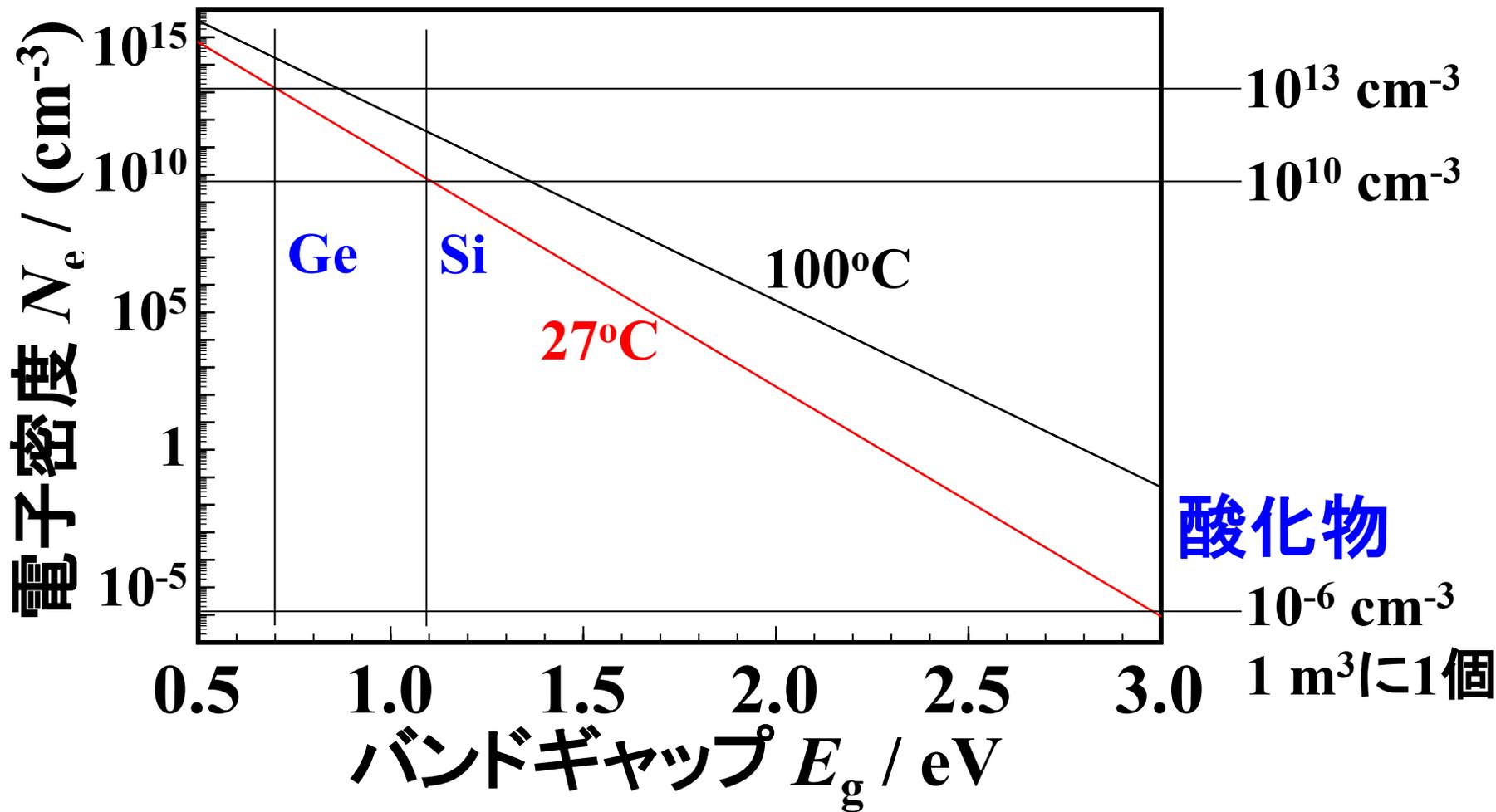
$$\langle m \rangle = M_{\text{tot}}/N$$



なぜ半導体がいろいろな機能を持つのか

$$N_e = N_0 \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B kT}\right)$$

Siの原子密度 $5 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$
金属の電子密度 $5 \sim 30 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$



なぜ半導体がすごいのか

・バンドギャップが 0.1電子ボルト 増えると、電子の数は1/10になる

	バンドギャップ	電子の数
金属:	0	10^{23}

半導体

シリコン:	1.1	10^{10}
-------	-----	-----------

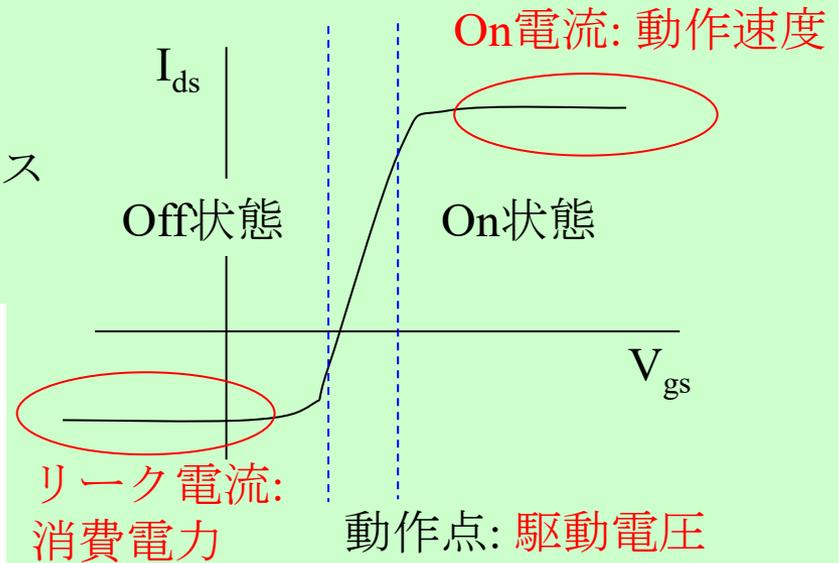
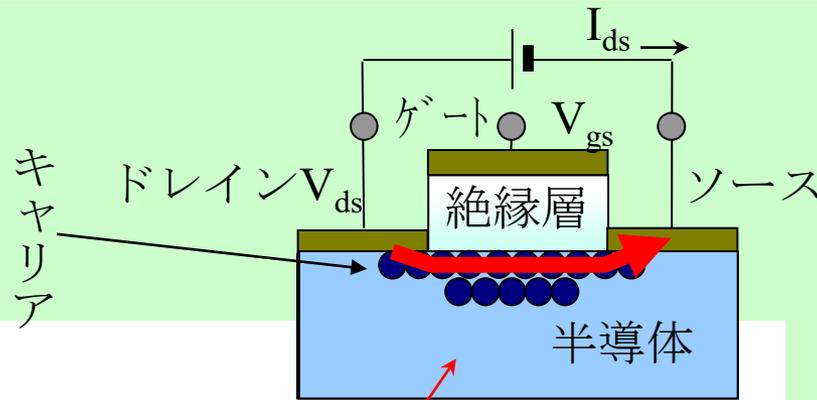
1/10000 の薬を入れると

電子の数が 1億倍になる

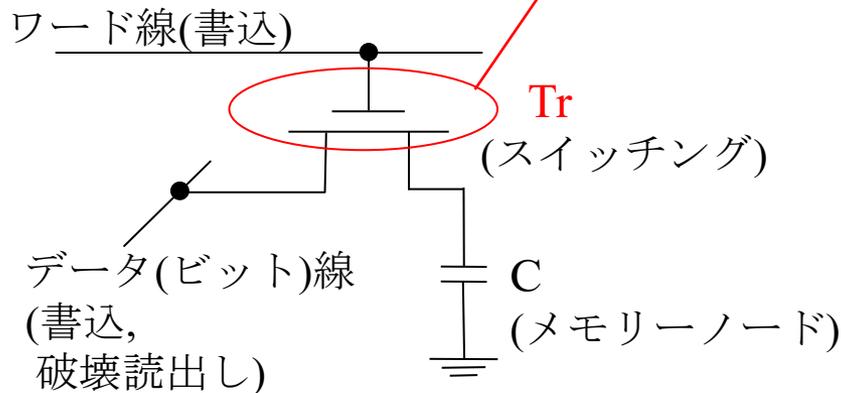
電界効果トランジスタ(FET)の基本動作

トランジスタの基本機能

1. 増幅機能 ゲート電圧に電流が比例する領域を利用
2. **スイッチ機能** ゲート電圧による大きな電流の変調を利用



DRAMの構造



内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

熱で発光する物体のスペクトル

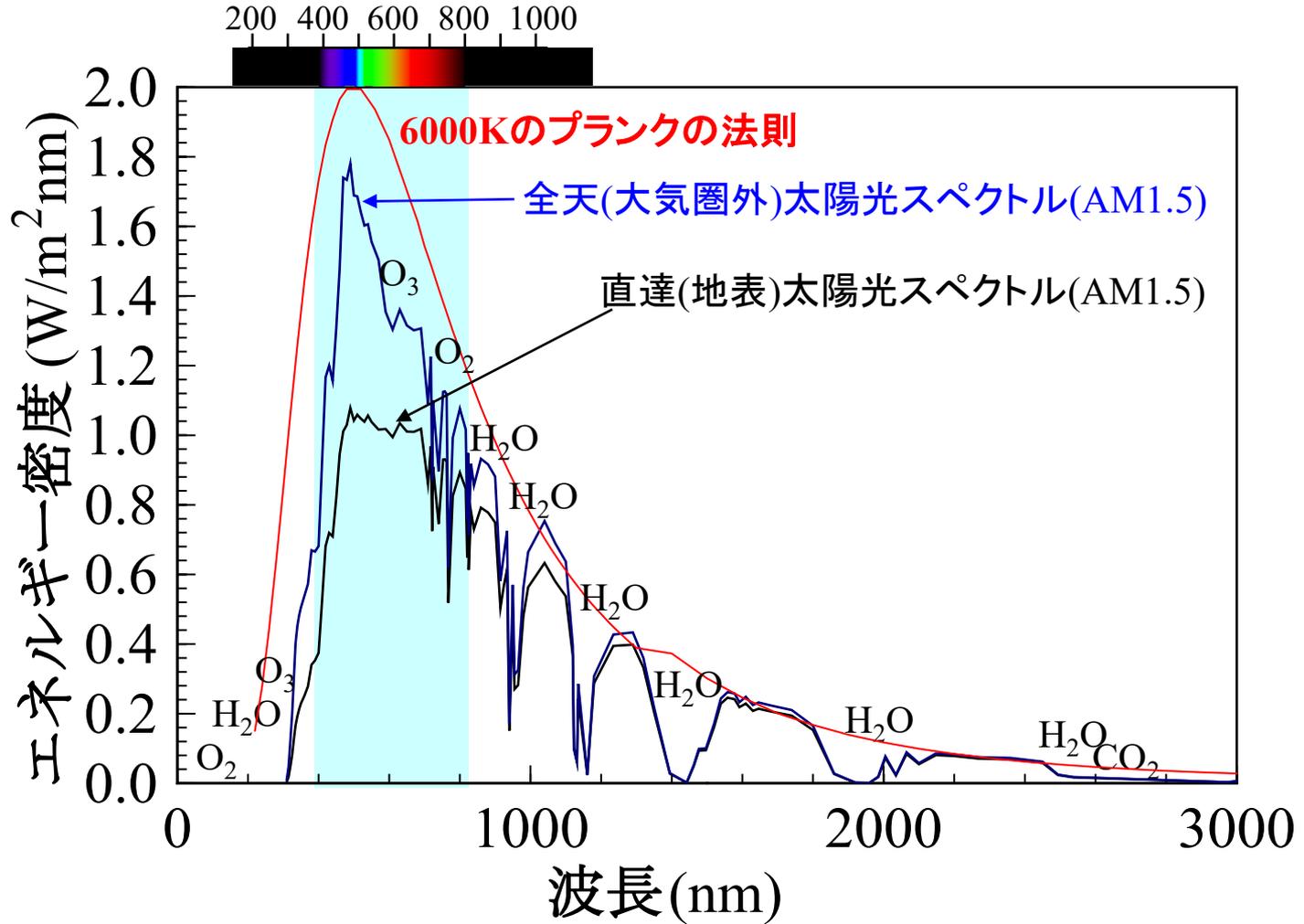
波長 λ を持つ光がもつエネルギーの割合

$$\langle E_\lambda \rangle = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{\exp(\beta hc/\lambda) - 1}$$

Planckの法則

例外：発光ダイオード (LED) などは
発光原理が異なるので、プランクの法則に従わない

太陽光スペクトル: プランクの法則でよく説明できる

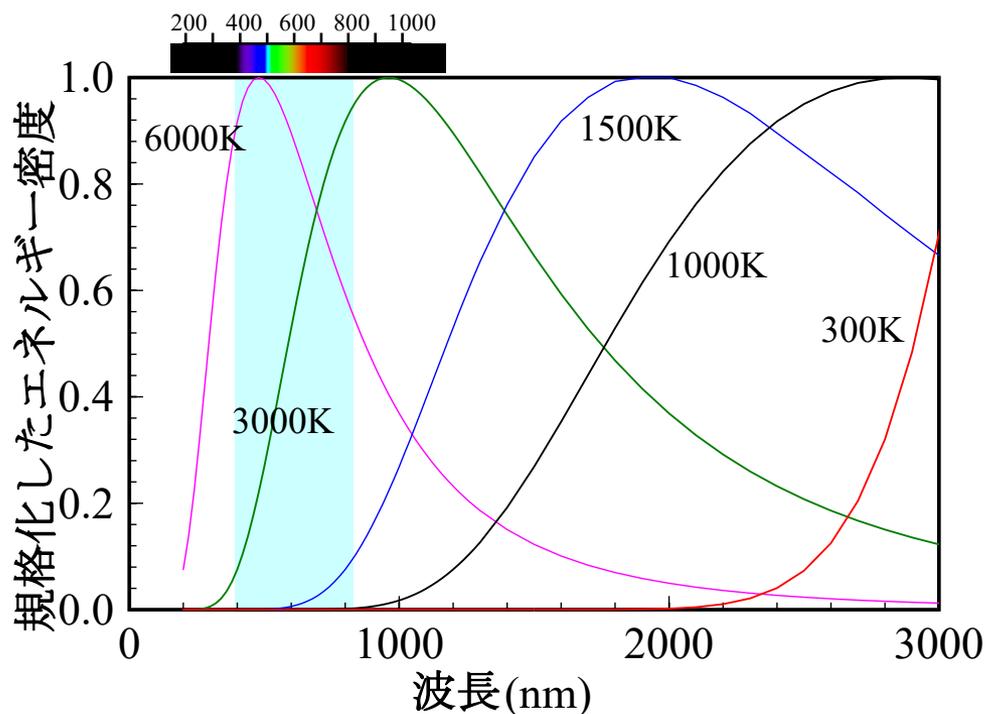


直達日射: 太陽から地表に直接入射する成分
散乱日射: 散乱されて地表に入射する成分
全天日射: 地表が受ける全ての日射

プランクの法則と放射温度計

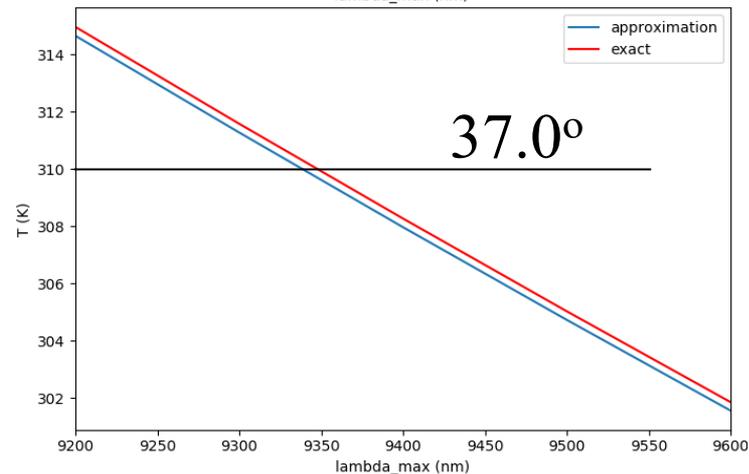
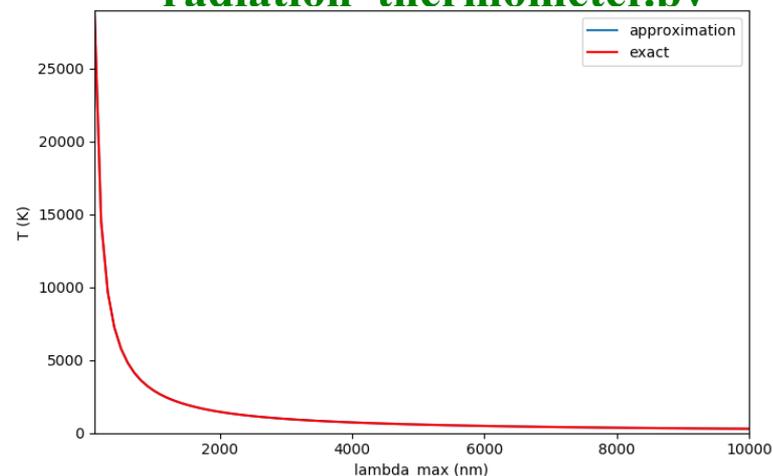
Planckの法則 $\langle E_\nu/V \rangle d\nu = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{\exp(\beta hc/\lambda)-1} d\lambda$

$\frac{d\langle E_\lambda \rangle}{d\lambda} = \frac{\langle E_\lambda \rangle}{\lambda} \left(-5 + \frac{\beta hc/\lambda}{1-\exp(-\beta hc/\lambda)} \right) = 0 \Rightarrow \lambda_m T = hc / (4.97 k_B):$ ピーク波長から T がわかる



λ_m と温度 T :

radiation thermometer.py



内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

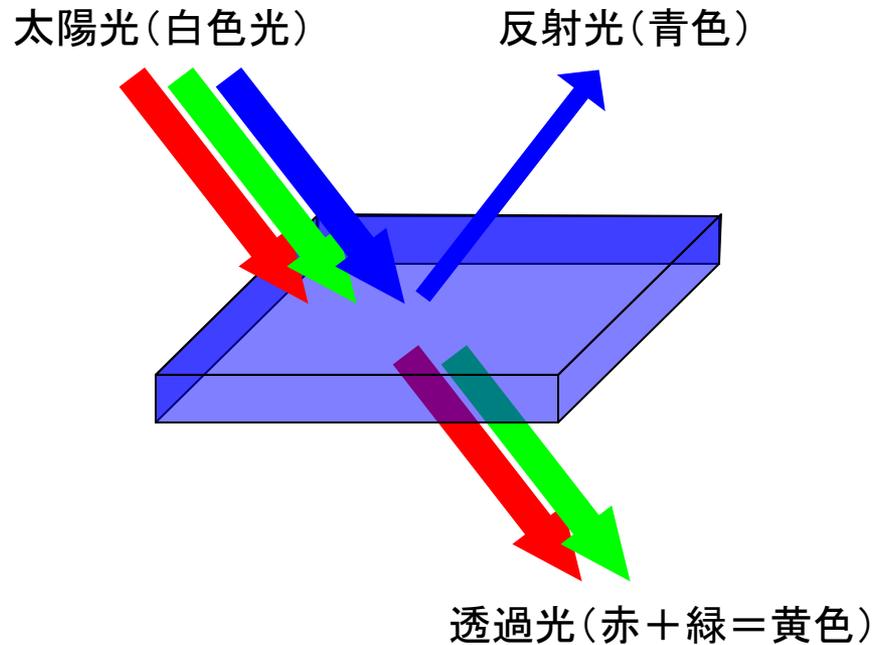
- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

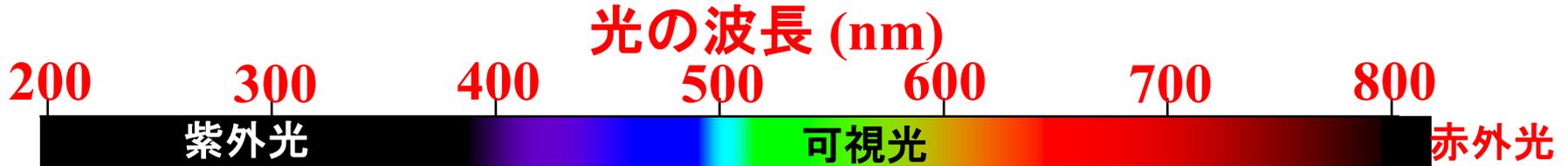
発光しない物質の色は何で決まっているか？

透過と反射色



金属、半導体、絶縁体...

金属：光沢がある、電気がよく流れる、たたくと延びる



アルミニウム



金



銅

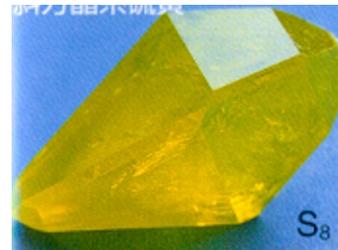


絶縁体：電気が流れない

ガラス (SiO_2)



硫黄



酸化銅(I)

Cu_2O

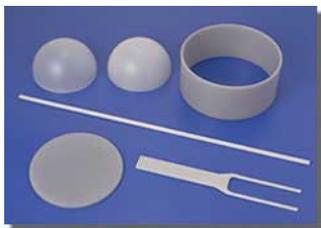


酸化銅(II)

CuO

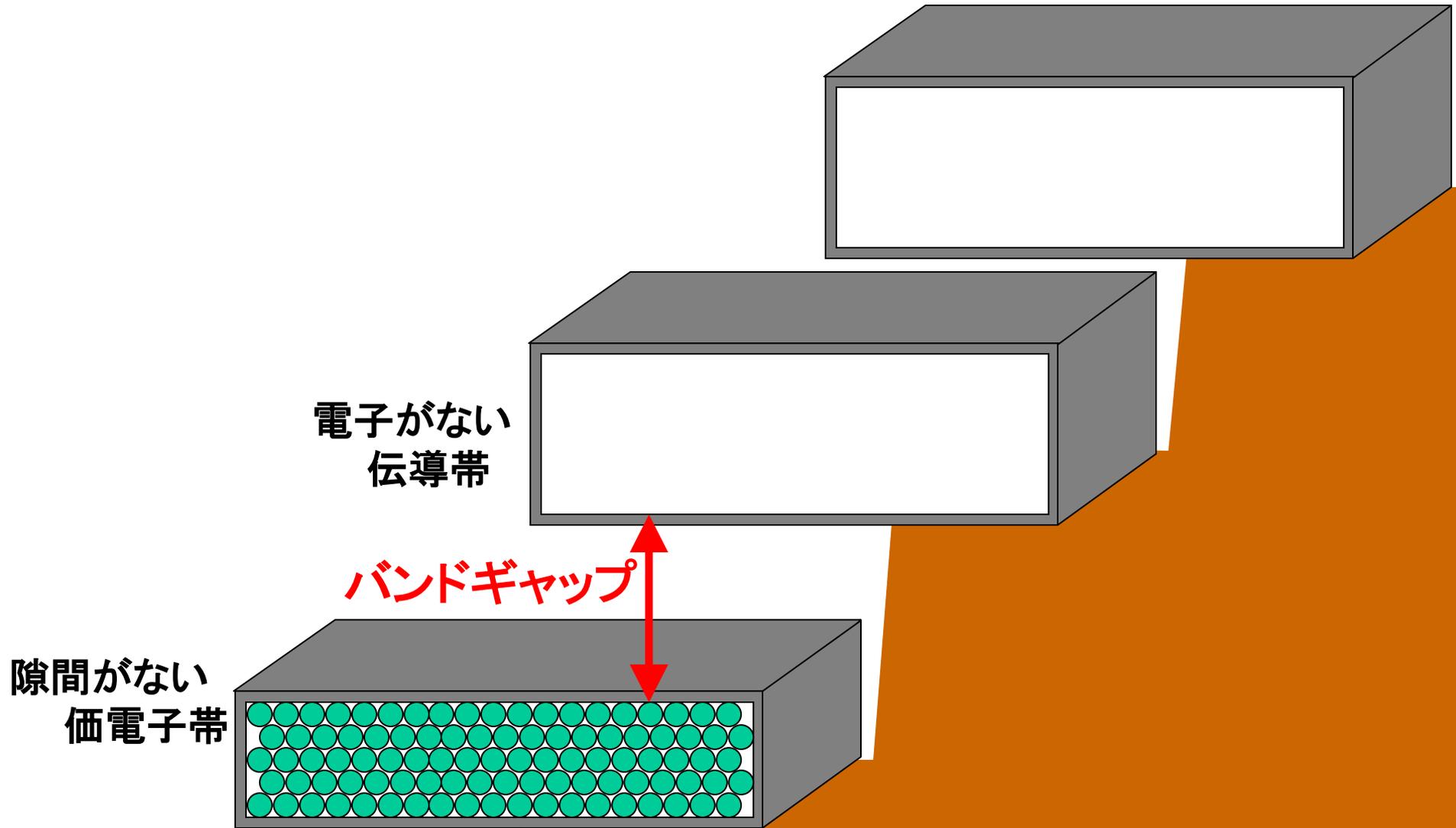


アルミナ
サファイア
ルビー
(Al_2O_3)

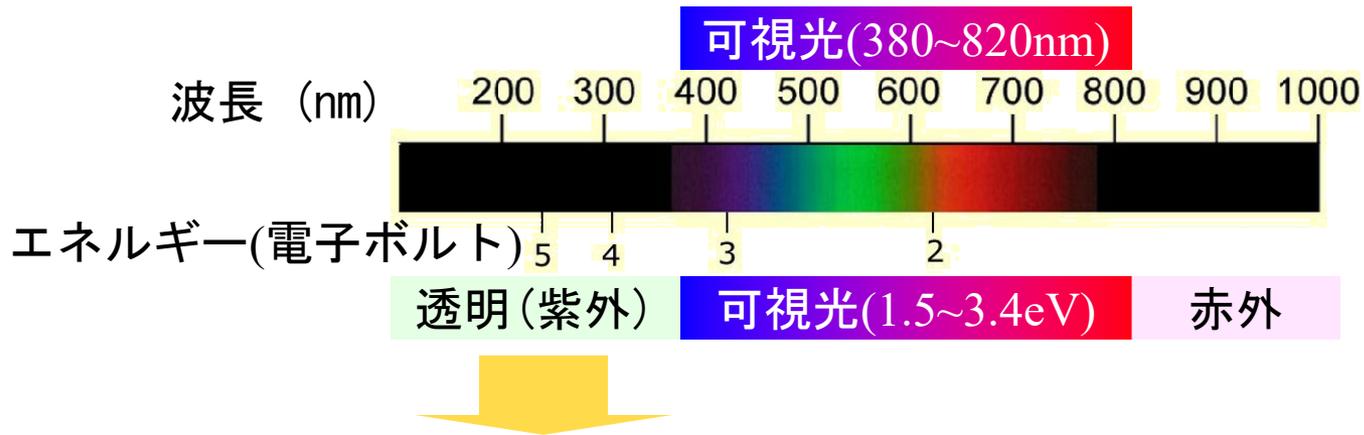


半導体は???

半導体の色はバンドギャップの大ききさで決まる



透明とはどういうことか？



透明: **バンドギャップ**が 3電子ボルト以上

	バンドギャップ	電子の数
シリコン:	1.1	10^{10}

不透明だから半導体になる

ZnO:	3.4	10^{-6}
------	-----	-----------

酸化物なんて
半導体になるはずがない！！

透明導電性酸化物 (TCO) が使われている機器

平面テレビ (LCD, 有機EL)

タッチパネル



薄膜太陽電池

産総研, メガソーラータウン



東急電鉄 すすかけ台駅

内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

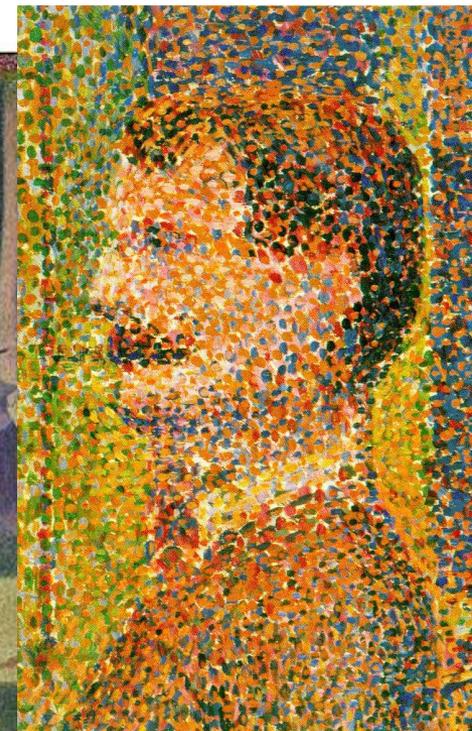
6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

グランド・ジャット島の日曜日の午後

1884~1886年

スーラ (1859~1891) 点描法



光の科学の始祖:

アイザック・ニュートン「光学」 1704年刊

ニュートン力学

アイザック・ニュートン「自然哲学の数学的諸原理(プリンキピア)」
1687年刊

微積分

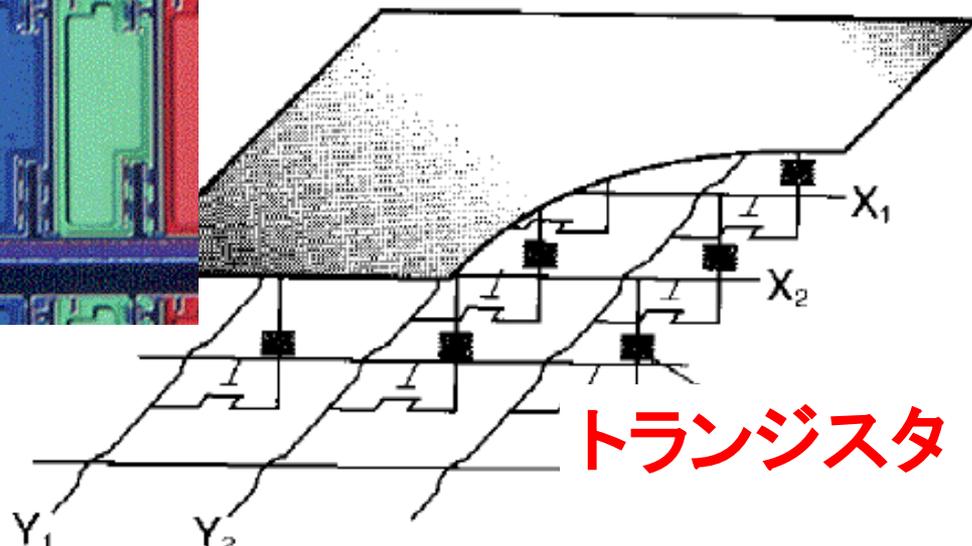
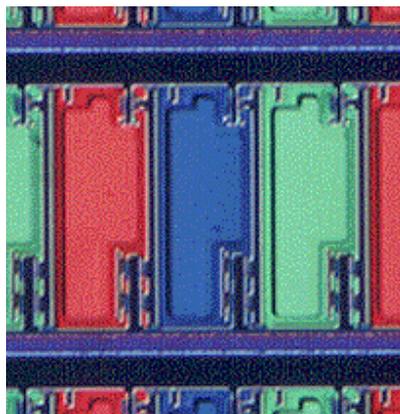
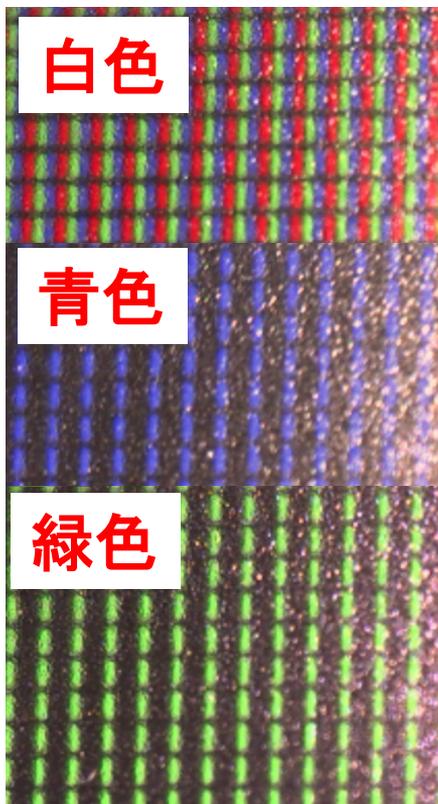
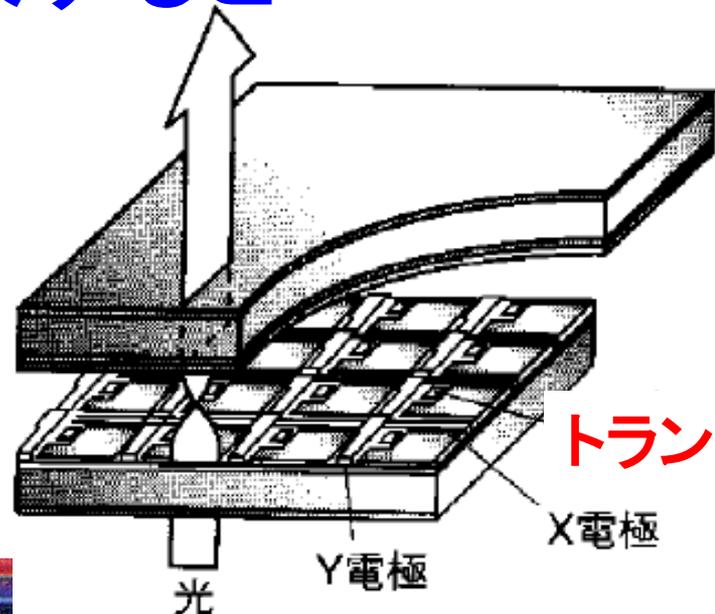
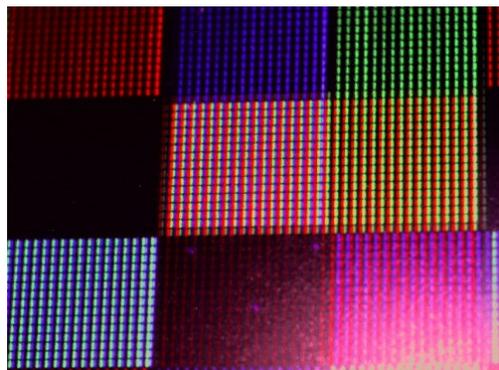
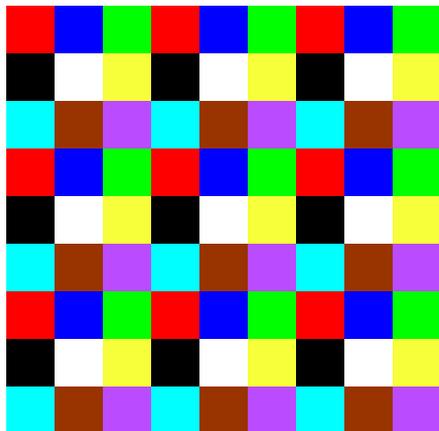
アイザック・ニュートン 「流率および無限級数の方法」 1666年

ゴットフリート・ライプニッツ

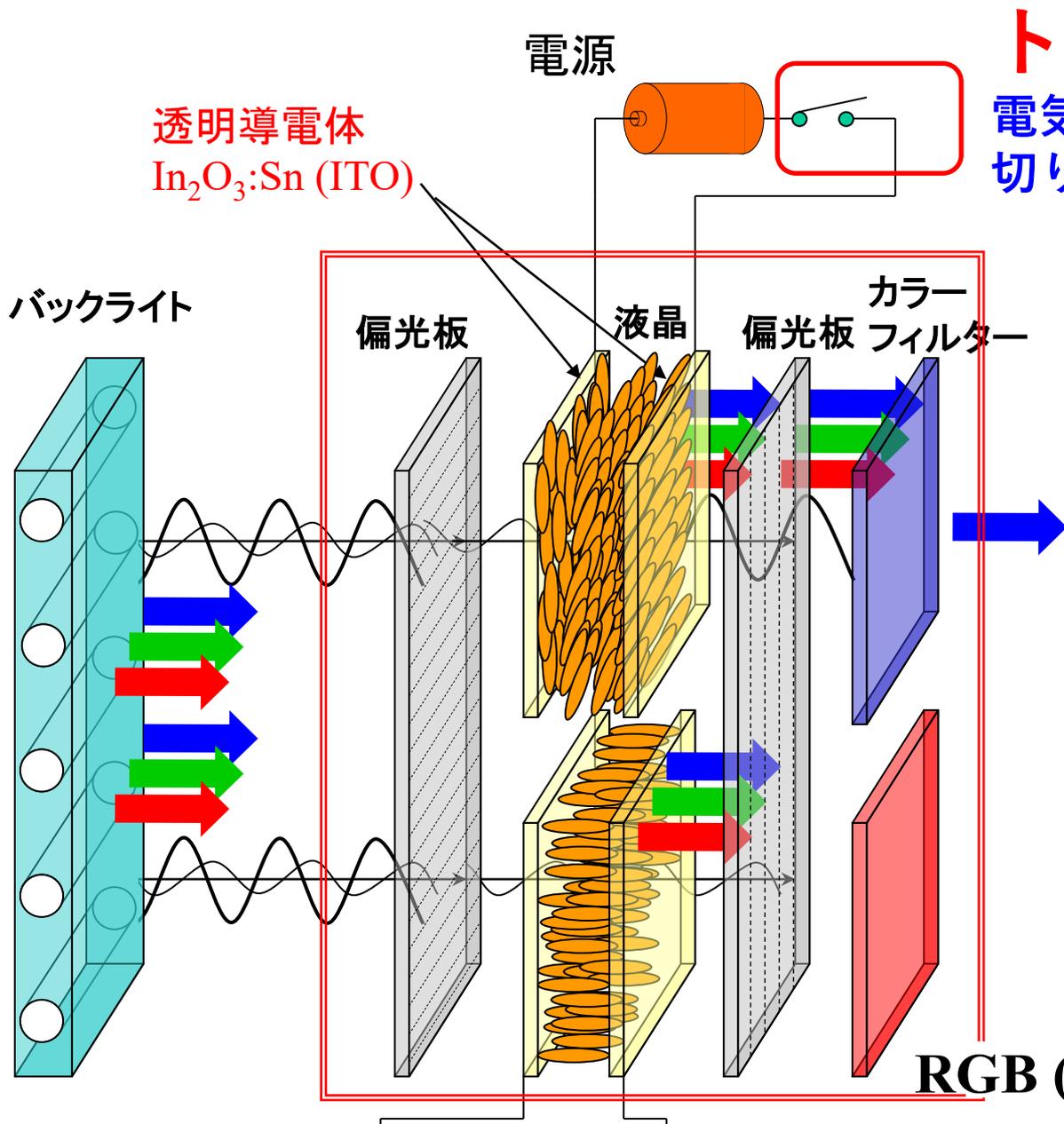
微分法 「極大と極小に関する新しい方法」 1684年

積分法 「深遠な幾何学」 1686年

液晶TVを拡大すると...



液晶TVの構造

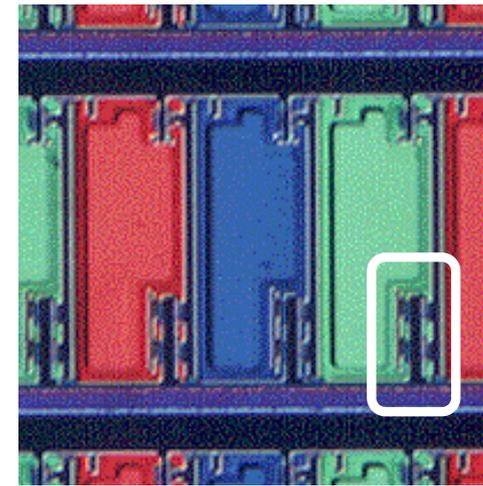


トランジスタ

電気でオン・オフを切り替えるスイッチ

シャープ

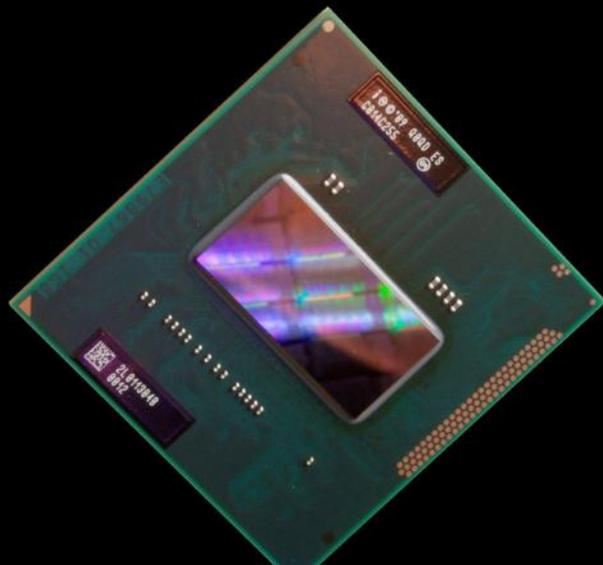
<http://www.sharp.co.jp/corporate/rd/28/28-3-2a.html>



スマホ :
0.05mm
50型4K TV: 0.25mm
200~800万個

RGB (赤・緑・青) ピクセル

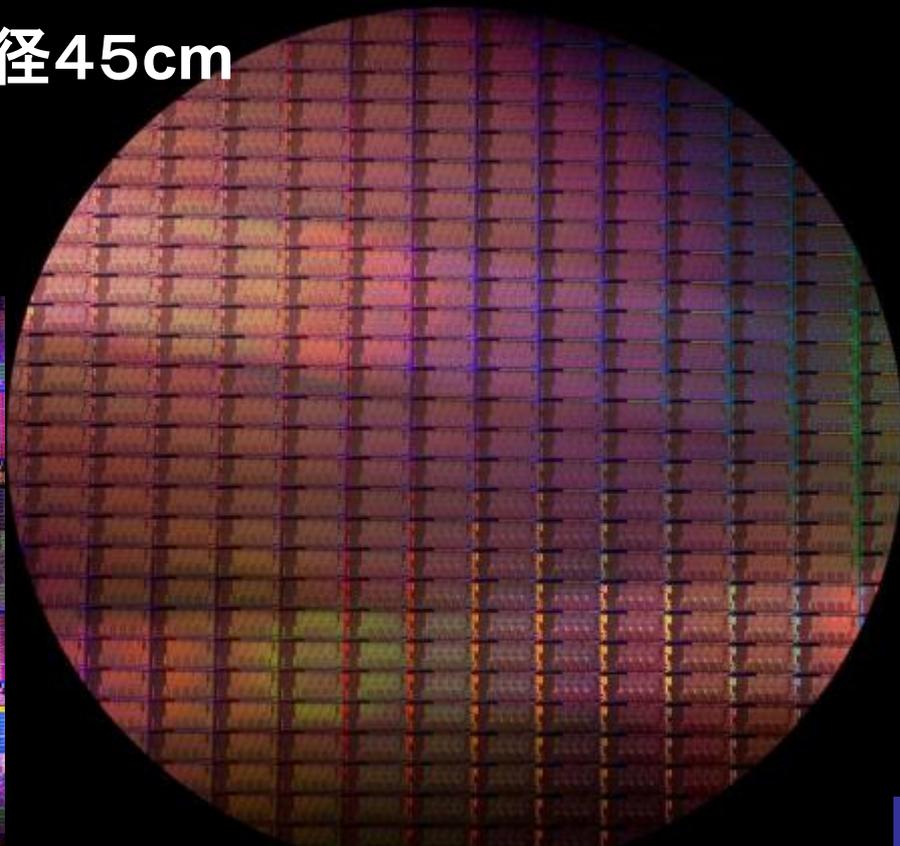
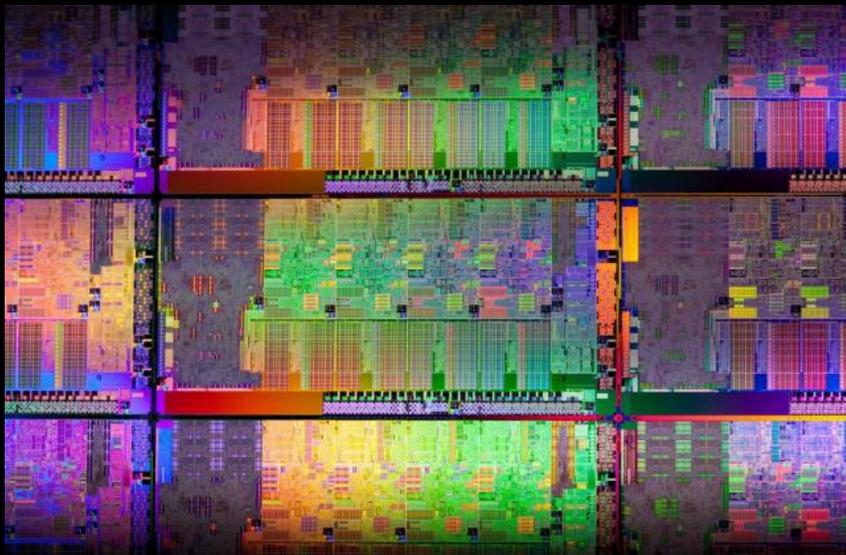
コンピュータは単結晶シリコンで作る



インテル Core i7

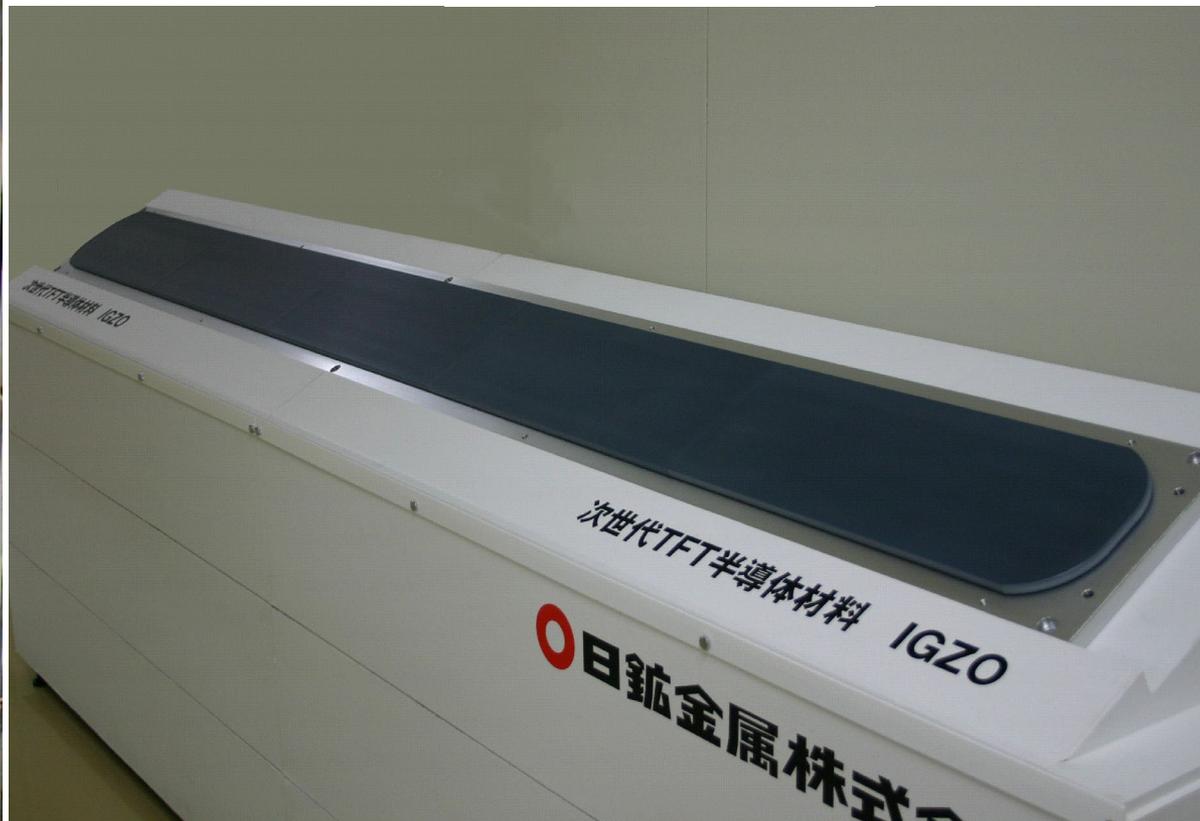
<http://www.pcgameshardware.de/aid,638219/Faszination-CPU-Wallpaper-Die-Shots-und-Wafer-von-Intel-CPUs-Update-Sandy-Bridge/Wallpaper/Download/bildergalerie/?iid=1435859>

直径45cm



薄型TVは2 m 以上のガラスに作る アルバック

日鉱金属



第8世代 (2.1×2.40 m²)

薄型TV用ガラスサイズはどんどん大きくなる

G11 3.00×3.32 m²

G10 2.88×3.13

G8.5 2.20×2.50

G8 2.16×2.46

G7.5 1.95×2.25

G7 1.87×2.2

G6 1.50×1.85

G5 1.10×1.30

G4 0.73×0.92

G3.5 0.68×0.88

G3 0.55×0.65

G2 0.37×0.47

G1 0.30×0.40



なぜ大型ガラス基板を使う？

第10世代 ガラス基板 2.88 m × 3.13 m

72型 156 cm × 96 cm	

第3世代: 550×650

12.1型6面取り

第5世代: 1000 × 1200

40型2面取り

第6世代: 1500 × 1800

40型3面取り

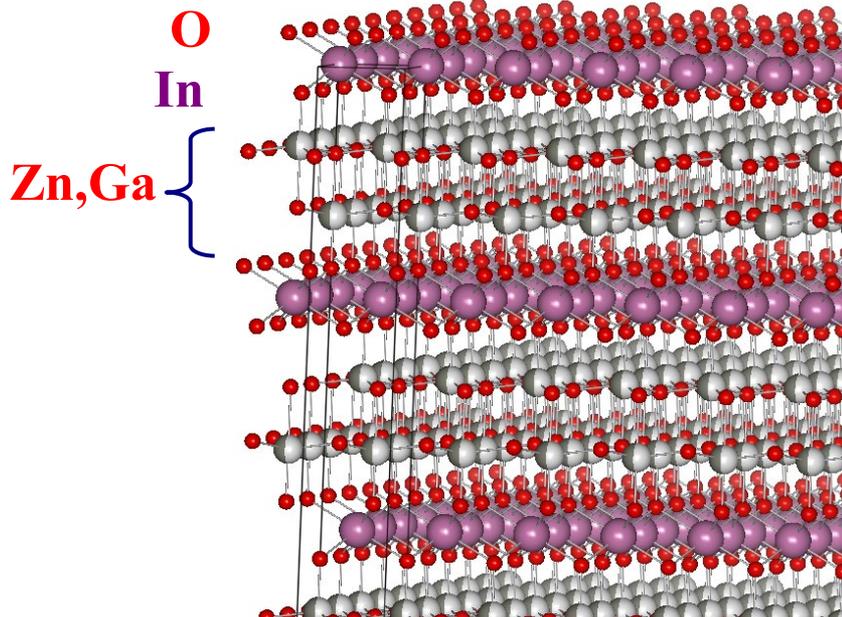
テレビに使用開始したころ

第7世代: 1870 × 2200

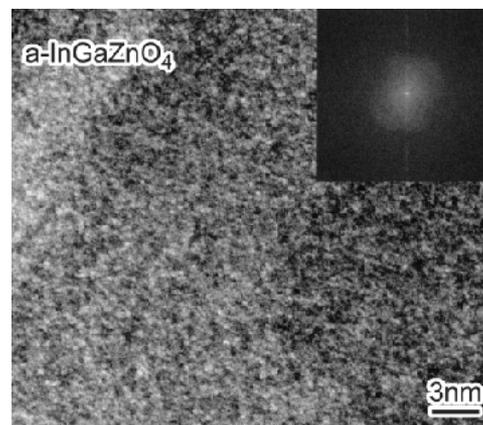
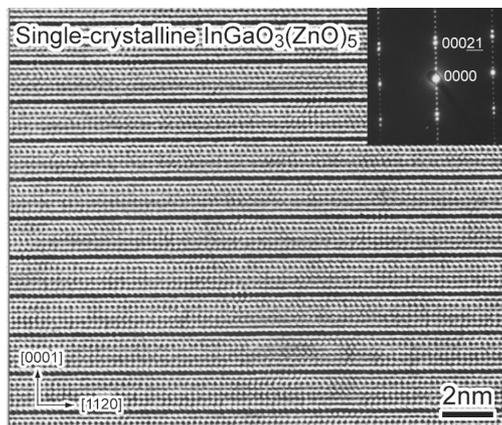
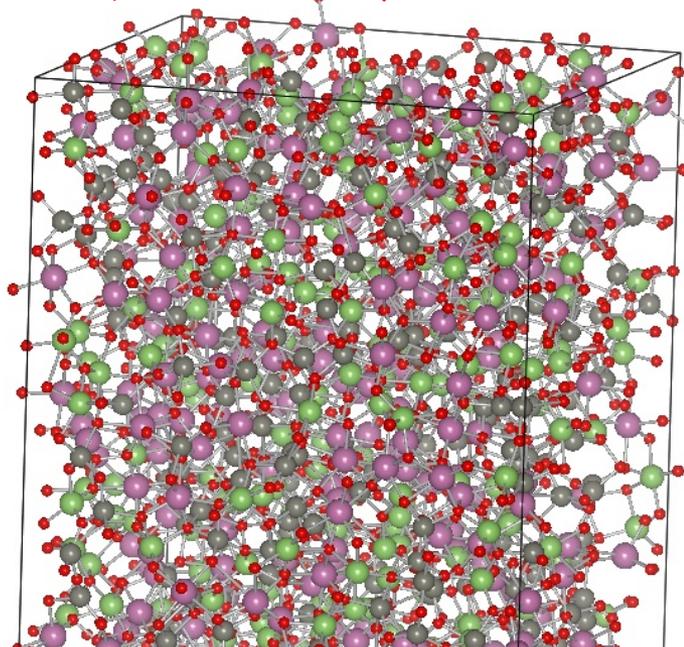
40型6面取り

結晶とアモルファス: InGaZnO_4

結晶



アモルファス



ディスプレイには結晶ではなく アモルファス (非結晶) 半導体が必要

結晶

- ・高性能
- ・単結晶は大きくできない・高価
- ・多結晶は低性能、不透明

アモルファス (非結晶)

- ・均一性が高い
- ・ガラス基板が使える
- ・大面積で作れる
- ・性能は低い???

アモルファス（非結晶）材料は特性が悪い？

アモルファスシリコン (a-Si)

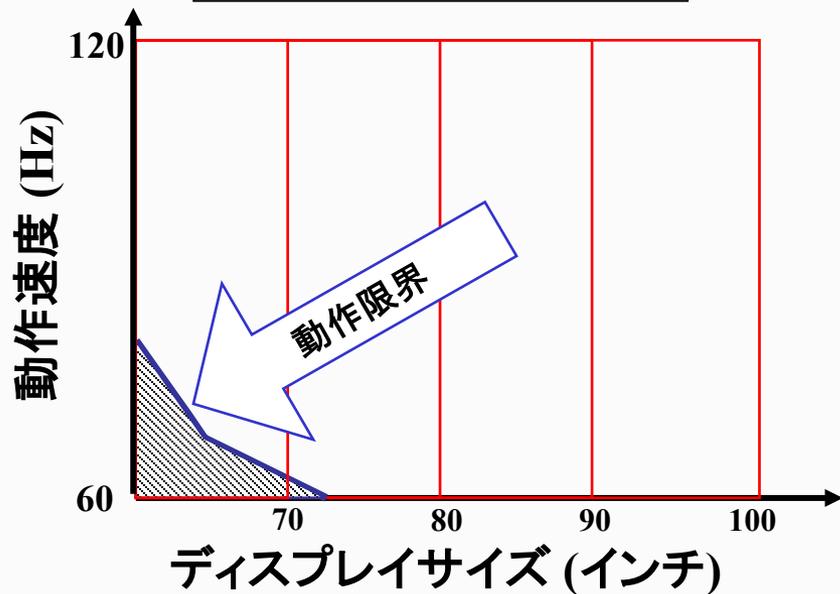
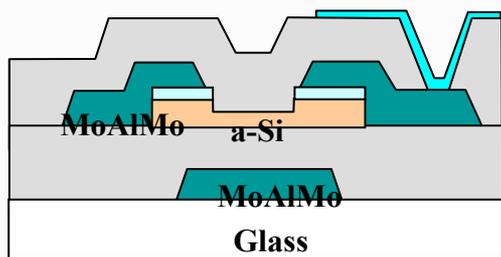
- ・欠陥が多い
- ・性能（“移動度”）が低い
単結晶Si の 1/1000 以下

誤解：すべてのアモルファスは特性が悪い

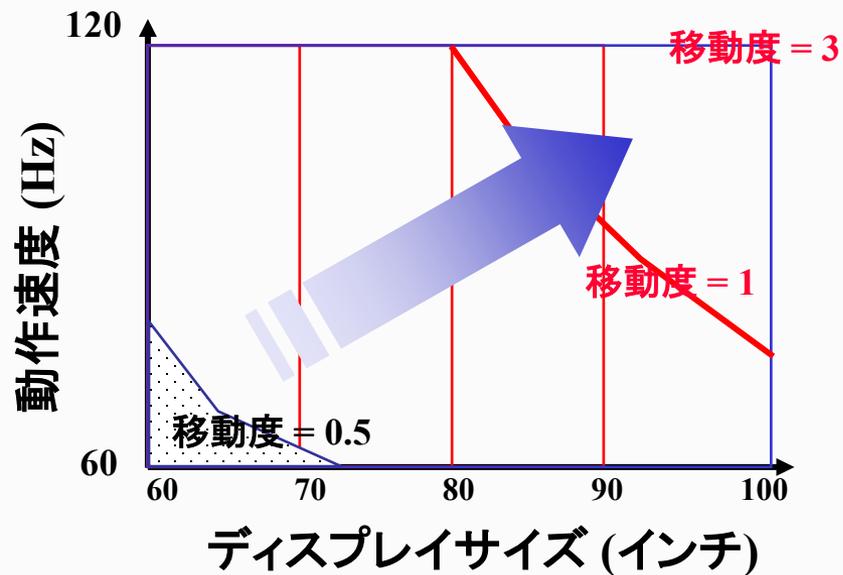
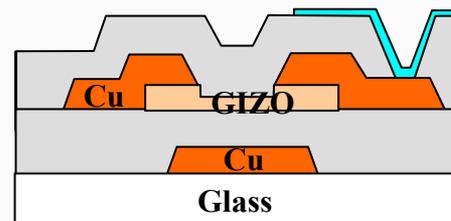
液晶TVが大型化するとシリコンは使えない

出典: Jang Yeon Kwon (SAIT), IDW 2007

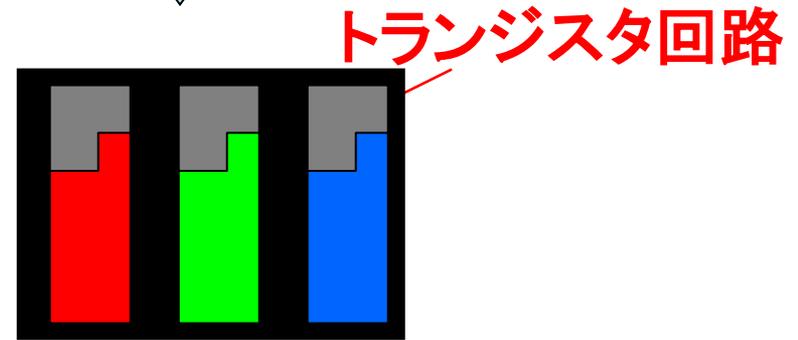
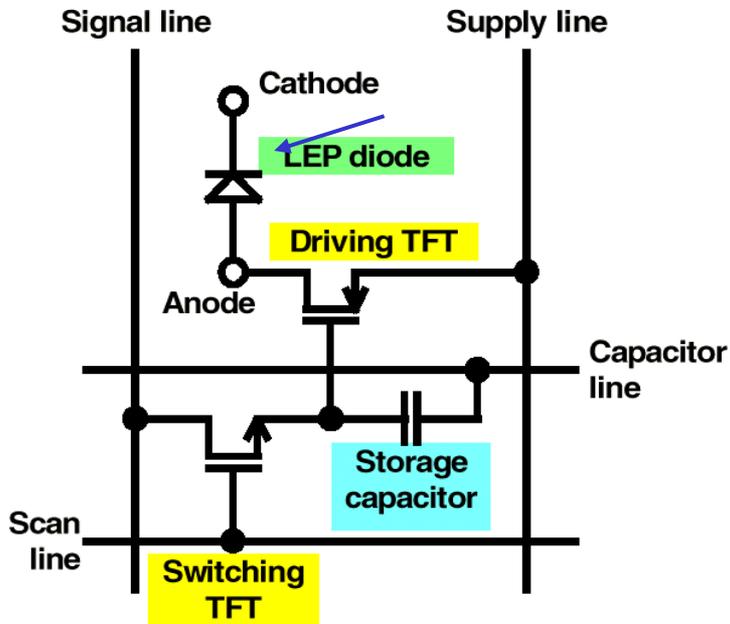
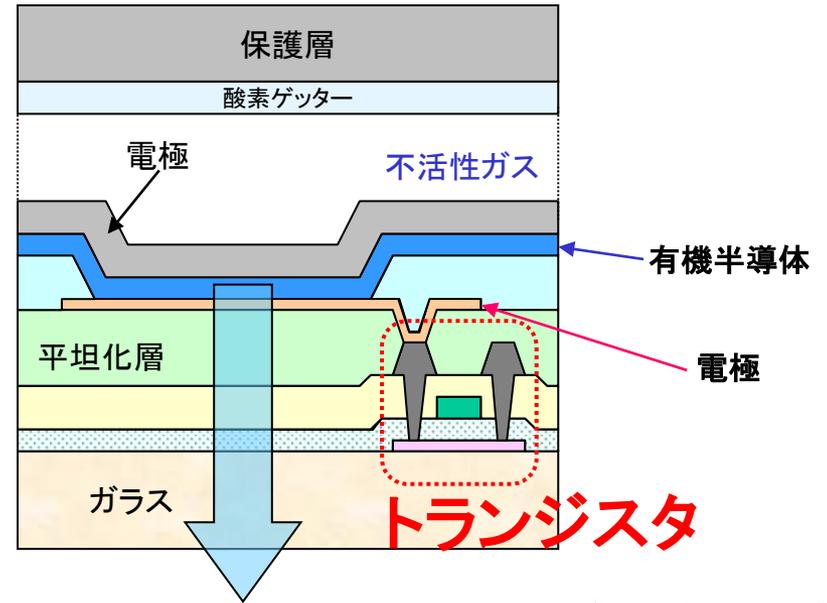
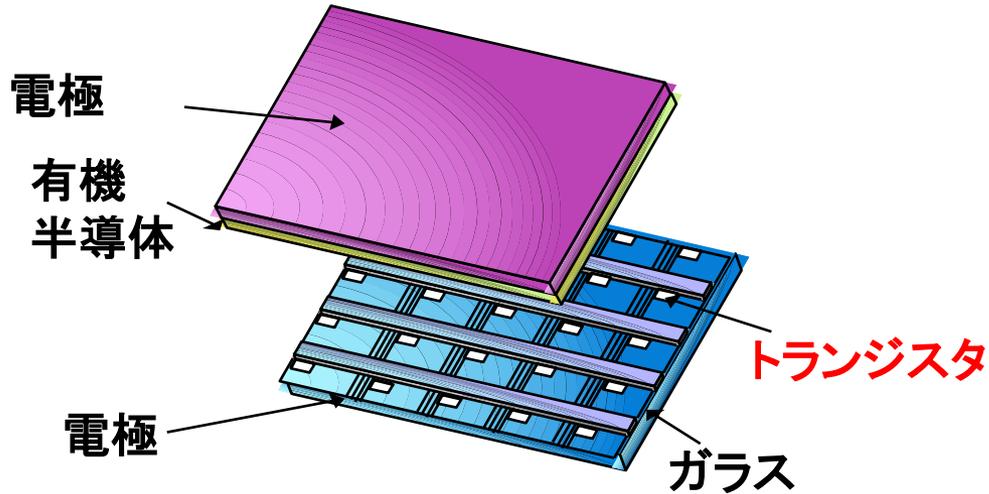
現在の a-Si トランジスタ



高性能トランジスタ



有機ELの駆動方法



アモルファス（非結晶）材料は特性が悪い？

アモルファスシリコン (a-Si)

- ・欠陥が多い
- ・性能（“移動度”）が低い
単結晶Si の 1/1000 以下

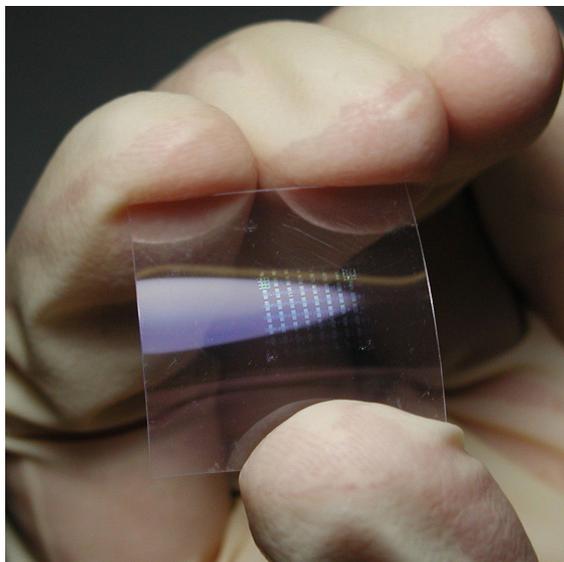
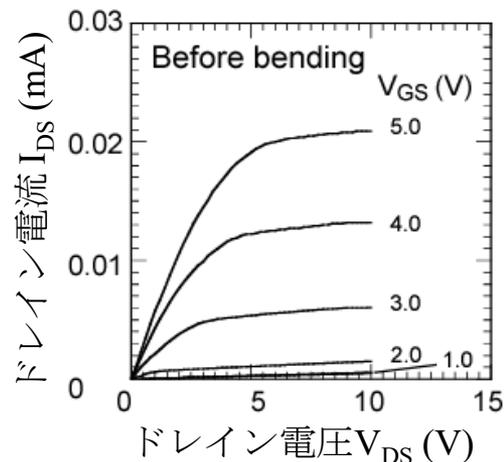
誤解：すべてのアモルファスは特性が悪い

酸化物：アモルファスでも
高性能の材料は見つかる！

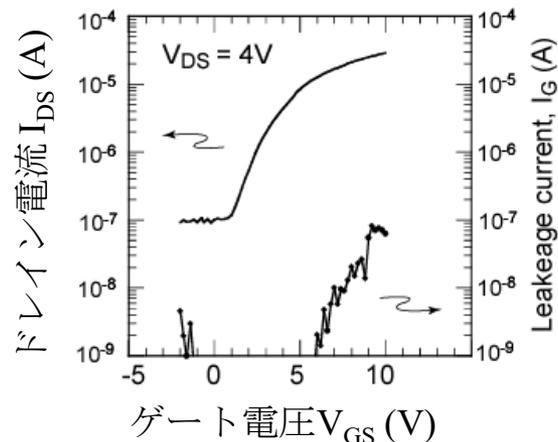
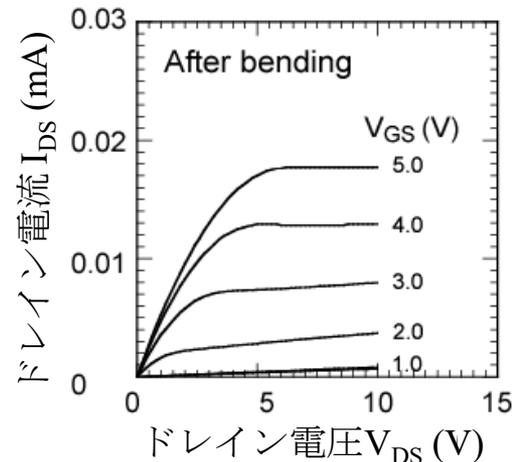
透明・フレキシブル・高性能酸化物トランジスタ

PLD, L / W = 50 μ m / 200 μ m

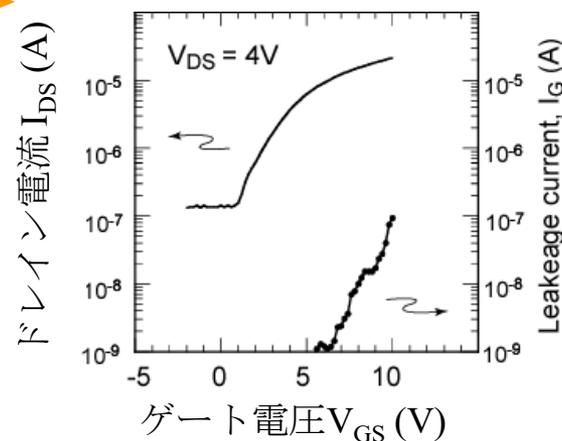
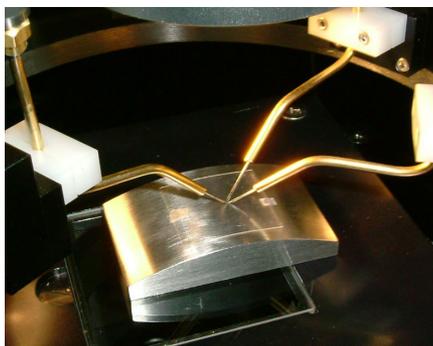
曲げる前



曲げた後



R=30mm



移動度 8.3 cm^2/Vs

移動度 7 cm^2/Vs

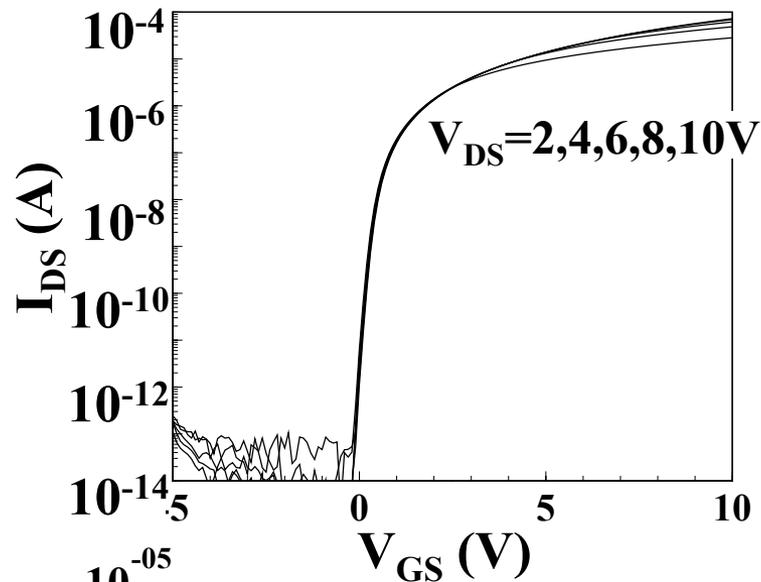
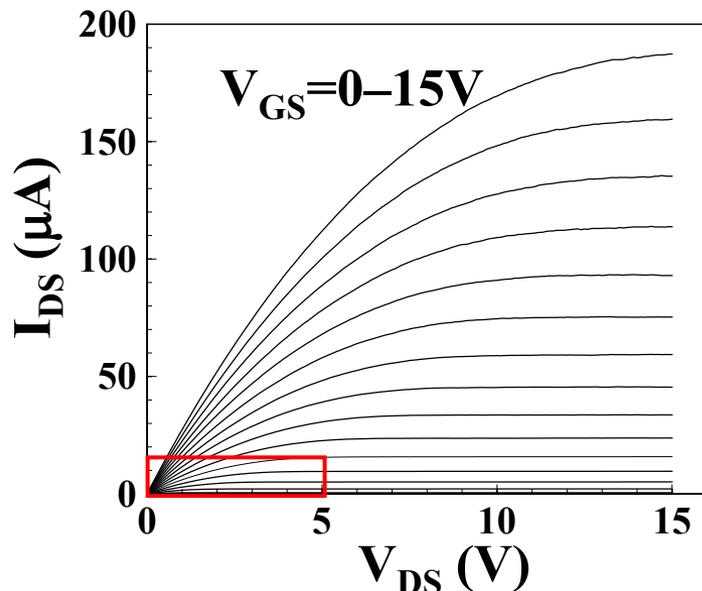
酸化物トランジスタは100倍の電流を流せる

Kamiya et al., Sci. Technol. Adv. Mater. (2010) in print

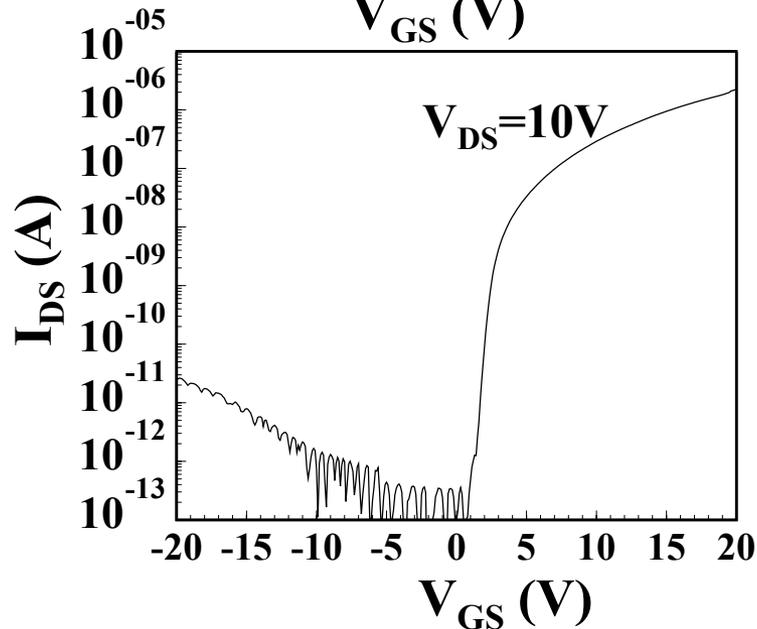
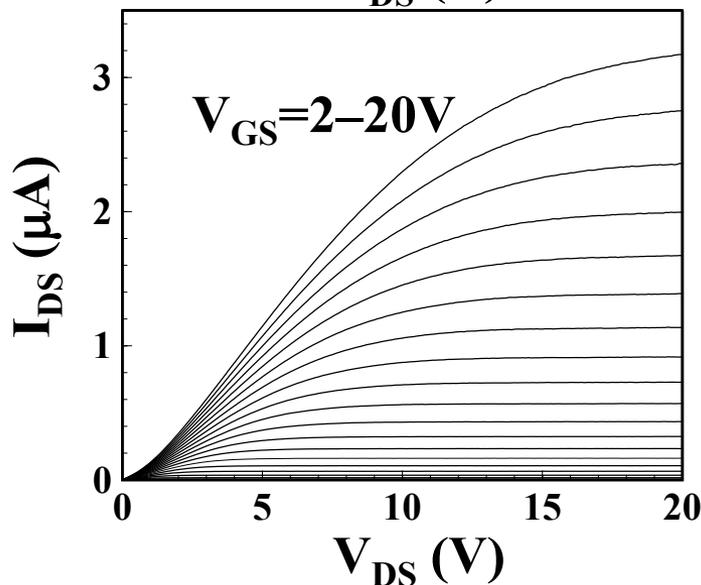
a-IGZO: Top-contact, bottom gate 40nm-thick a-IGZO / 150nm-thick SiO₂ / c-Si, W/L = 300/50 (μm)

a-Si:H : Inverted staggered 200nm-thick a-Si:H / 200nm-thick SiN_x, W/L = 28/6 (μm)

a-IGZO



a-Si:H



シャープ AQUOS Phone Zeta SH-02E

IGZO



InGaZnO₄

2000 材料発見

2004 トランジスタ
動作

市販されているIGZO製品

AQUOS PHONE ZETA SH-06E
4.8", 1,080×1,920 LCD 460ppi
(Sharp, 2013/5)



iPad mini (レティナ) 324ppi
7.9", 2,048×1,536 (Sharp, 2013/11)



アップル iPad Pro
12.9型, 2,732×2,048
(シャープ, LG, サムスン, 2015/11)



55"曲がった有機EL TV
1,920×1,080
(LG, 2013/11)



iMac 27" Retina model
27" 液晶, 5,120×2,880
(LG, 2014/10)



マイクロソフト Surface Pro 4
12.3", 2,736×1,824
(サムスン, 2015/10)



超大型有機ELディスプレイ

仁川空港

55型有機EL×(10×14), 8×13 m²



Nソウルタワープラザ (南山、ソウル)

9 m 有機ELトンネル



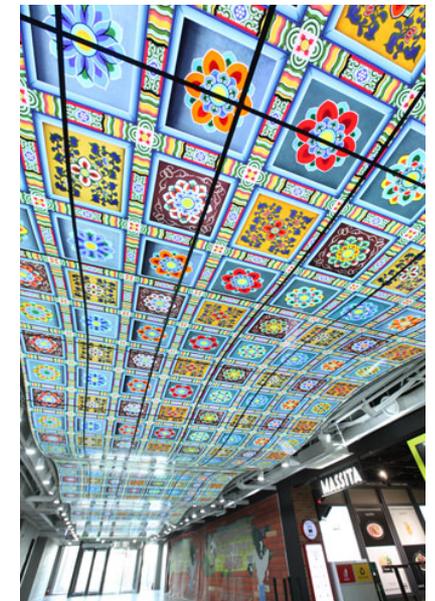
15 m パノラマ有機EL



LG 3Dワールド



波型有機EL天井 24 m



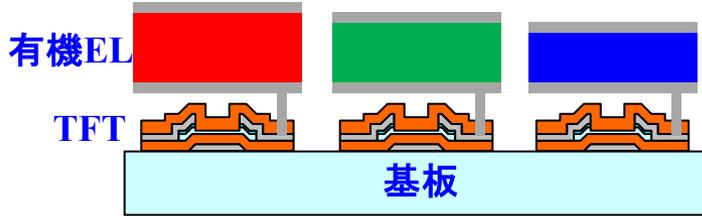
大日本印刷
五反田ビル
ショールーム

55型有機EL×(6×4),
5×4.2 m²



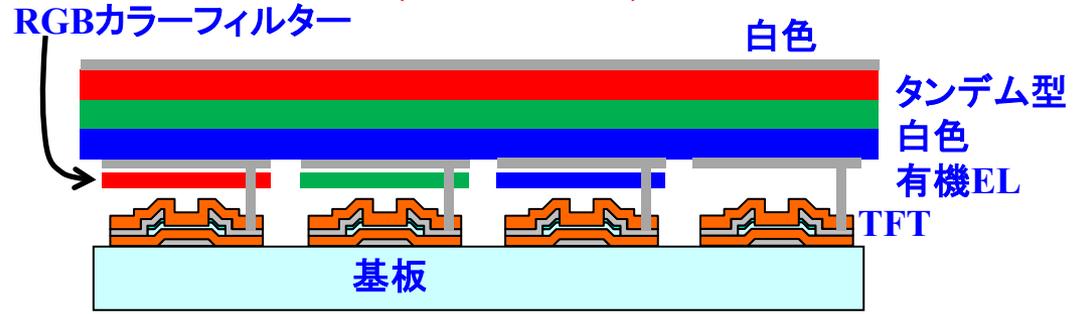
大型有機EL TVを動かせるのは酸化物だけ

小型 (5 ~ 10") サムスン, LG



LTPS TFT : 大面積化困難 (G6)
RGB OLED: 作製 難しい
 効率、輝度 : 良
 色域 : 良

大型 (55 ~ 77") LG



IGZO TFT : 大面積化OK (G8 1,200×2,200mm²)
WOLED : 作製容易 (G8を2分割)
 効率、輝度 : 悪
 色域 : 良

GALAXY Note Edge



Nexus 6



LG G Watch R



55" 有機EL TV

まとめにかえて

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料：計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介：分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計：機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

COVID-19による罹病判定

前提:

COVID-19に感染している割合: 0.002

2020/5/16 YAHOO!ニュース歪んだ日本のPCR検査信仰、死者・感染者が少ないのには理由がある<https://headlines.yahoo.co.jp/article?a=20200516-00072596-gendaibiz-soci&p=3>

感度 : 病気にかかっている人が 検診を受けると、80% (最大) の確率で陽性と判定される。

特異度: 病気にかかっていない人が検診を受けると、90% の確率で陰性と判定される。

10000人の集団を考える

- ・ 感染者数 20人: **入院する必要のある人数**
- ・ 非感染者数 9980人

(1) 10000人が無差別に検診を受ける場合

- ・ 感染者で 陽性と判定される $20 * 0.8 = 16$ 人: **正常判定で入院させられる人数**
- ・ 非感染者で陰性と判定される $9980 * 0.9 = 9882$ 人: 正、陰性判定
- ・ 感染者で 陰性と偽判定される $20 - 16 = 4$ 人: 誤、**野放しになっている感染者数**
- ・ 非感染者で陽性と判定される $9980 - 9882 = 98$ 人: 誤、**無駄に使われている病床**

結果: 陽性と判定された人のうち、正しく判定された人はたったの14%

20人しか入院の必要がないのに、98床のベッドが無駄遣いされる

感染しているのに野放しにされる人は4人

COVID-19による罹病判定

前提: 診断判定精度が極端に良くなった場合でも...

COVID-19に感染している割合: **0.002**

病気にかかっている人が 検診を受けると、 **$1 - 0.002$** の確率で陽性と判定される。

病気にかかっていない人が検診を受けると、 **$1 - 0.002$** の確率で陰性と判定される。

10000人の集団を考える

- ・ 感染者数 20人: **入院する必要のある人数**
- ・ 非感染者数 9980人

(1') 10000人が無差別に検診をうける場合

- ・ 感染者で 陽性と判定される $20 * 0.998 = 20$ 人: **正常判定で入院させられる人数**
- ・ 非感染者で陰性と判定される $9980 * 0.998 = 9960$ 人: 正、陰性判定
- ・ 感染者で 陰性と偽判定される $20 - 20 = 0$ 人: 誤、**野放しになっている感染者数**
- ・ 非感染者で陽性と判定される $9980 - 9960 = 20$ 人: 誤、**無駄に使われている病床**

結果: 陽性と判定された人のうち、正しく判定された人はやっと50%

検診の精度を0.998まで上げて、半数のベッドが無駄遣いされる

感染しているのに野放しにされる人はいない

COVID-19による罹病判定

(1) 10000人が無差別に検診を受ける場合

- ・感染者で 陽性と判定される $20 * 0.8 = 16$ 人: 正、正常判定で入院させられる人数
- ・非感染者で陰性と判定される $9980 * 0.9 = 8982$ 人: 正、陰性判定
- ・感染者で 陰性と偽判定される $20 - 16 = 4$ 人: 誤、野放しになっている感染者数
- ・非感染者で陽性と判定される $9980 - 8982 = 998$ 人: 誤、無駄に使われている病床

結果: 陽性と判定された人のうち、正しく判定された人はたったの1.6%

20人しか入院の必要がないのに、998床のベッドが無駄遣いされる

感染しているのに野放しにされる人は4人

(2) 他の症状や診断 (事前診断) で、感染可能性が高い人を100人選択して検診をする場合

前提: 事前診断で選択した集団のうち、感染者の割合 10%

- ・選択した集団のうち感染者 10人
- ・選択した集団にとらえられなかった感染者 10人 野放しになっている感染者数

選択した集団のうち:

- ・感染者で 陽性と判定される $10 * 0.8 = 8$ 人: 正、正常判定で入院させられる人数
- ・非感染者で陰性と判定される $90 * 0.9 = 81$ 人: 正、陰性判定
- ・感染者で 陰性と偽判定される $10 - 8 = 2$ 人: 誤、野放しになっている感染者数
- ・非感染者で陽性と判定される $90 - 81 = 9$ 人: 誤、無駄に入院している健常者数

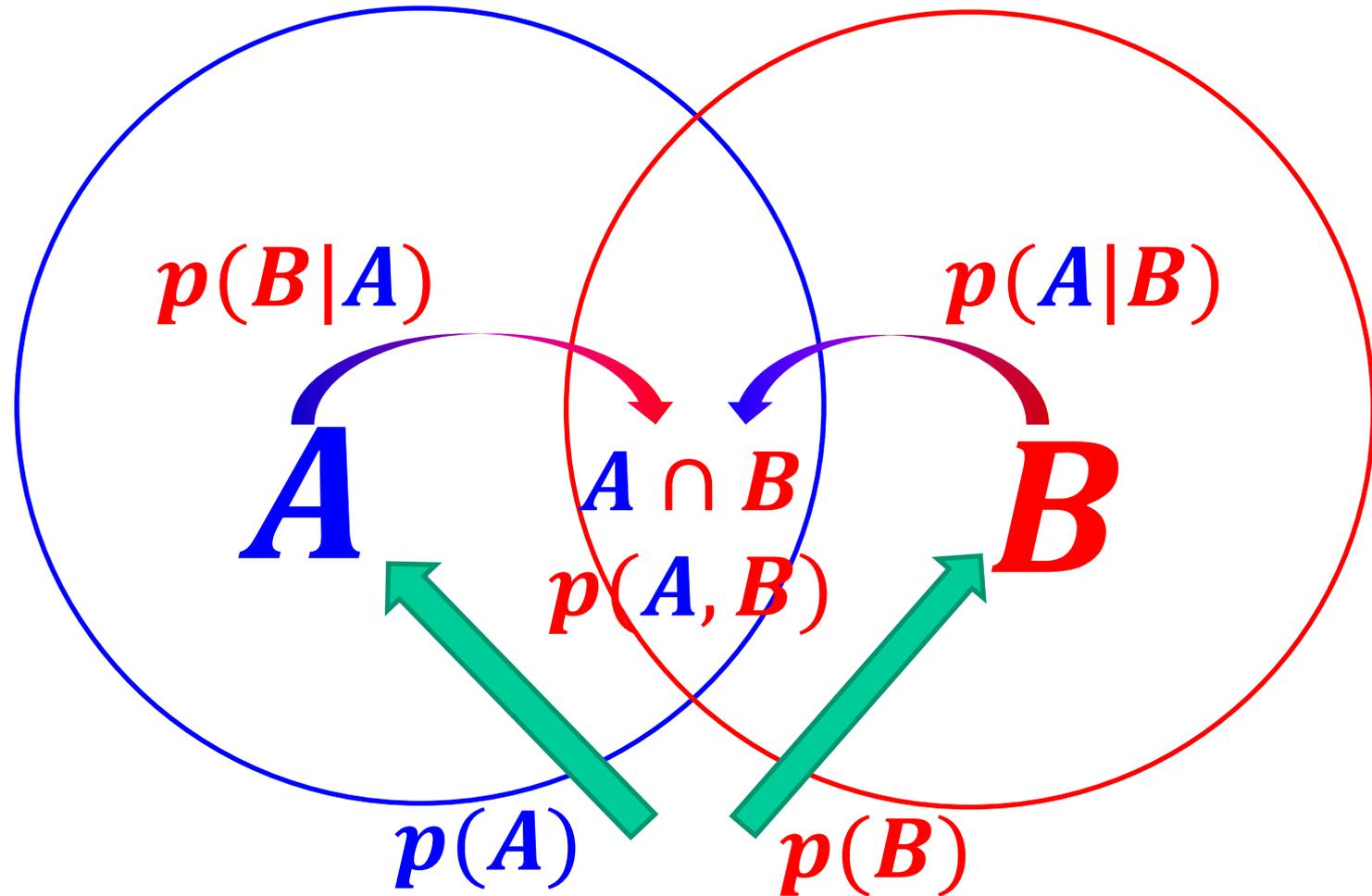
結果: 陽性と判定された人のうち、正しく判定された人は47%に増加

無駄遣いされるベッドは9床に減る

感染しているのに野放しにされる人は12人に増える

確率に関するベイズの定理

$$p(A, B) = p(B|A)p(A) = p(A|B)p(B)$$



ベイズの定理: $p(A|B) = p(B|A)p(A)/p(B)$

事後確率

事前確率

ベイズの定理の応用: COVID-19による罹病判定

豊田秀樹著、基礎からのベイズ統計学、朝倉書店(2015)

https://qiita.com/oki_mebarun/items/ee345ba45c7d3752b54c

2020/3/14 イタリア 感染者数 145,637人、死者 5,436人、人口 6000万人

COVID-19 (A) に感染する割合: 0.0024 (事前確率 $p(A)$)

病気Aにかかっている人が 検診Bを受けると、8割の確率で陽性になる。

病気Aにかかっていない人が検診Bを受けると、9割の確率で陰性になる。

検診Bによって陽性と判定された場合、その受信者が病気Aにかかっている確率 (事後確率) を求めよ。

条件付確率: 病気にかかっている人の判定確率

正常診断: $p(\text{陽性}|\text{病気}) = 0.8$, $p(\text{陰性}|\text{病気でない}) = 0.9$ **正常に判定する確率は8割以上だが...**

誤診 : $p(\text{陰性}|\text{病気}) = 0.2$, $p(\text{陽性}|\text{病気でない}) = 0.1$

$$\begin{aligned} \text{事後確率 } p(\text{病気}|\text{陽性}) &= p(A|B) = \frac{p(B|A)p(A)}{p(B)} = \frac{p(B|A)p(A)}{\sum_A p(B|A)p(A)} \\ &= \frac{p(\text{陽性}|\text{病気})p(\text{病気})}{p(\text{陽性}|\text{病気})p(\text{病気}) + p(\text{陽性}|\text{病気でない})p(\text{病気でない})} \end{aligned}$$

事前確率:

$$(1) p(\text{病気}) = 0.0024$$

$$\begin{aligned} p(\text{陽性}) &= p(\text{陽性}|\text{病気})p(\text{病気}) + p(\text{陽性}|\text{病気でない})p(\text{病気でない}) \\ &= 0.8 * 0.0024 + 0.1 * (1 - 0.0024) = 0.1017 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow p(\text{病気}|\text{陽性}) = 0.018 \quad \text{陽性と判断されても、98\%は病気ではない}$$

ベイズの定理の応用: COVID-19による罹病判定

Qiitaベイズの定理で理解する新型コロナウイルスへのPCR検査の検査対象を絞る意義

https://qiita.com/oki_mebarun/items/ee345ba45c7d3752b54c

感度: $RC = p(\text{陽性}|\text{病気})$

特異度: $SP = p(\text{陰性}|\text{病気でない})$

適合率: $PC = p(\text{陽性}|\text{病気})$

正解率: $AC = p(\text{陽性}|\text{病気}) + p(\text{陰性}|\text{病気でない})$

偽陽性率: $FP = p(\text{陽性}|\text{病気でない}) = 1 - p(\text{陰性}|\text{病気でない})$

偽陰性率: $FN = p(\text{陰性}|\text{病気}) = 1 - p(\text{陽性}|\text{病気})$

前提条件

再現率(=感度)RCは0.7

特異度SPは0.95

事前確率 $p(\text{病気})$ および $p(\text{病気でない})$ をパラメータとする。

covid19.py

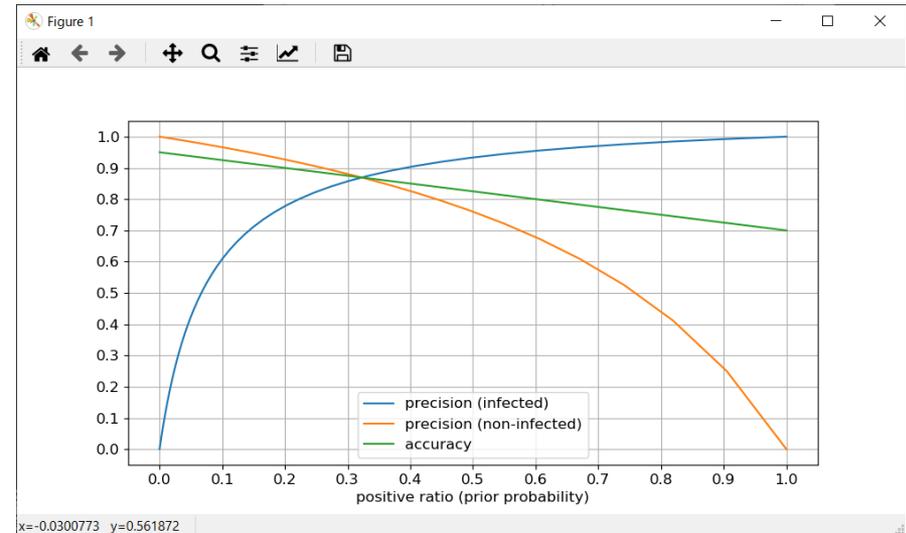
検査陽性の適合率 $PC(T)$: 事前確率 $P(\text{罹患}=T)$ が低いとかなり悪化し、

$P(\text{罹患}=T)=0.1$ のとき、検査陽性でも罹患している確率は60%程度。

検査陽性の適合率 $PC(F)$: 事前確率 $P(\text{罹患}=T)$ が高いとかなり悪化し、

$P(\text{罹患}=T)=0.9$ のとき、検査陰性でも罹患していない確率は25%程度。

正解率(AC)は、特異度と感度を線形補間する形状であり、両方とも値が高いに越したことはない。



ベイズの定理の応用: COVID-19による罹病判定

Qiitaベイズの定理で理解する新型コロナウイルスへのPCR検査の検査対象を絞る意義

https://qiita.com/oki_mebarun/items/ee345ba45c7d3752b54c

※以下は造語

嘘陽性率: 検査陽性でも罹患していない確率。 $p(\text{病気でない}|\text{陽性})$

嘘陰性率: 検査陰性でも罹患している確率。 $p(\text{病気}|\text{陰性})$

⇔ 偽陽性率: $FP = p(\text{陽性}|\text{病気でない})$ 、偽陰性率: $FN = p(\text{陰性}|\text{病気})$

前提条件

再現率(=感度)RCは0.7

特異度SPは0.95

covid19.py

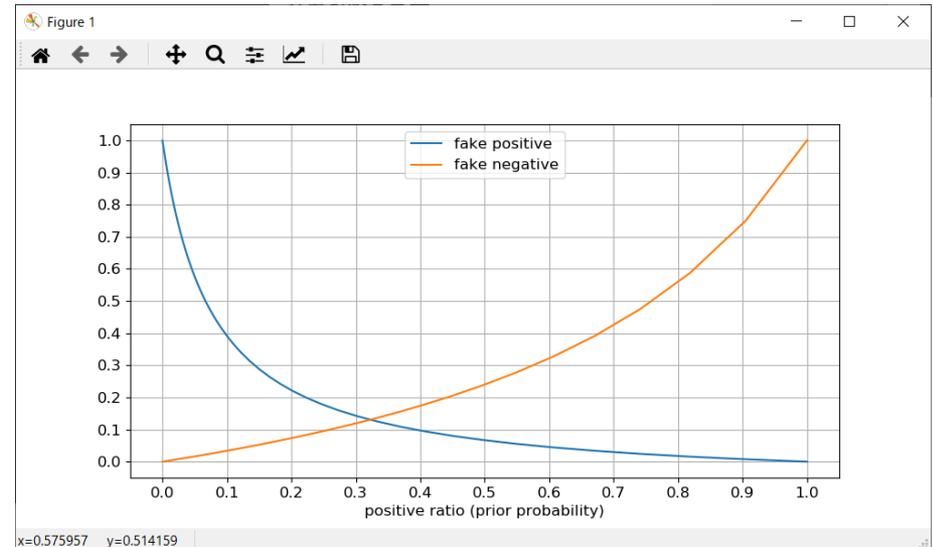
嘘陽性率は検査陽性の適合率 $PC(T)$ と、嘘陰性率は検査陰性の適合率 $PC(F)$ と逆の関係。

嘘陽性率: 事前確率 $P(\text{罹患}=T)$ が低いとかなり悪化し、

$P(\text{罹患}=T)=0.1$ のとき、検査陽性でも罹患していない確率は40%程度である。

嘘陰性率: 事前確率 $P(\text{罹患}=T)$ が高いとかなり悪化し、

$P(\text{罹患}=T)=0.9$ のとき、検査陰性でも罹患している確率は75%程度である。



ベイズの定理を材料探索に利用する

$$\text{ベイズの定理: } p(A|B) \propto p(B|A)p(A)$$

事後確率 尤度 事前確率

このように読み替える

$$\Rightarrow p(\text{構造}|\text{物性}) \propto p(\text{物性}|\text{構造})p(\text{構造})$$

- ・ 構造から物性を予測するのは比較的簡単
- ・ 知りたいのは、「欲しい物性を持ちそうな構造の確率」
 $p(\text{構造}|\text{物性})$ が大きくなる構造。
 \Rightarrow ベイズの定理を利用して、
 $p(\text{構造}|\text{物性})$ が大きくなる構造を探す

内容

1. IT技術と新材料

2. コンピュータと材料: 計算材料科学

- ・ ENIAC: 砲弾軌道の計算のために開発された最初のコンピュータ
- ・ 放物運動、惑星シミュレーション、物質中の原子の運動
- ・ その他ソフトウェアの紹介: 分子、結晶の構造、物性の計算

3. 半導体中の電子

- ・ 公平な社会では金持ちが誕生する
- ・ 半導体は金持ち電子が動かしている
- ・ なぜアモルファス酸化物半導体でないとも有機EL TVが動かせないのか

4. 材料と色と電気特性

- ・ 太陽の温度と非接触体温計
- ・ 半導体の色: なぜ透明半導体は難しいのか

5. 実用化された東工大発の「アモルファス酸化物半導体 IGZO」

- ・ 薄型ディスプレイの動作原理
- ・ 「ガラス半導体」が「有機EL TV」を実現した

6. これからの材料設計: 機械学習

- ・ 新型コロナの患者数から感染率を逆推定する
- ・ 欲しい材料の物性から構造を設計する

電子の運動と、分子・結晶の構造

ニュートンの運動方程式では解けない

古典力学

大学で習います：

電子の運動は「量子力学」で解く

コンピュータを使って、分子や結晶の構造や物性を計算できる：

これからの材料研究に必須です！！

Winmostarの起動

<https://winmostar.com/jp/>



初期画面(CH分子)

Winmostar V3.802g

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2(C) その他(Z) ヘルプ(H)

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 Rep H Chng

C:\Documents and Settings\tkamiya\Desktop\MOPAC7\temp.dat
Winmostar 2 13.02 0 -0.0852 0 0
1-2-2-1 Leng=1.1 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 C

BS1 BS2 1.15 Connect
Number All Atoms Mark
Zoom 1
Atom 0.25
Bond 10



AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF
Winmostar

1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0

1 C 0 0 0 0 0 0
Debug 1 1 1



Hを-C₆H₅基で置き換える

Winmostar V3.802g

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2(C) その他(Z) ヘルプ(H)

BS1
 BS2
 1.15 Connect

Number
 All Atoms
 Mark

Zoom 1

 Atom 0.25

 Bond 10

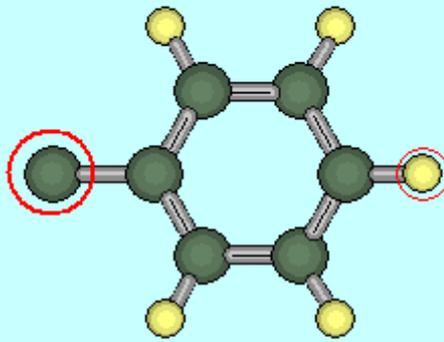
C:%Documents and Settings%tkamiya%デスクトップ%MOPAC7%temp.dat
 Winmostar 12 89.12 0 -2.5277 0.0001 -0.0001
 2-12-12-1 Leng=5.3836 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 C

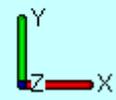
AM1
 EF
 PRECISE
 GNORM=0.05
 NOINTER
 GRAPHF

Winmostar

1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	C	1.4938	1	0	1	0	1	1	0	0
3	C	1.395048	1	120.0019	1	0	1	1	2	0
4	C	1.395048	1	119.9984	1	179.9993	1	1	2	3
5	C	1.395046	1	120.0021	1	0.028	1	4	1	3
6	C	1.395051	1	119.9993	1	0.028	1	3	1	4
7	C	1.395059	1	119.9979	1	-0.0166	1	5	4	1
8	H	1.09967	1	119.998	1	179.972	1	4	1	3
9	H	1.099663	1	120.0066	1	179.9743	1	5	4	1
10	H	1.099666	1	120.0016	1	-0.0044	1	3	1	2
11	H	1.099667	1	120.0033	1	179.9929	1	6	3	1
12	H	1.099667	1	120.0049	1	-179.984	1	7	5	4

2 C 1.4938 0 0 1 0 0





CH分子のCをOに置き換え、Hを1つ付加する

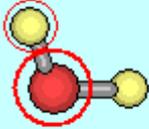
Winmostar V3.802g

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 計算(C) 計算2(C) その他(Z) ヘルプ(H)

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 Rep 0 **CH3**

D:\Programs#temp.dat
Winmostar 3 18.02 0 -0.043 -0.051 0
1-3-1-3 Leng=0.97 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 O

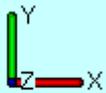
BS1 BS2 1.15 Connect
Number All Atoms Mark
Zoom 1
Atom 0.25
Bond 10



AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF
Winmostar

1	O	0.93	1	0	1	0	1	0	0	0
2	H	1.1	1	0	1	0	1	1	0	0
3	H	0.97	1	110	1	-170	1	1	2	0

1 O 0.93 0 0 0 0 0
Debug 1 1 1



計算条件設定画面

MOPAC Setup 

Hamiltonian Method

Charge Mult. OPEN

MM GNORM LARGE

GRAPH EXTERNAL

STEP POINT

STEP1 2 POINT1 2

AUX BONDS ENPART ESP
 EXCITED GEO-OK NOINTER OLDFPC
 POLAR PRECISE SYMMETRY UHF
 VECTORS XYZ

Others

Default Keywords

Winmostar

実際に使う計算条件(PM3)

MOPAC Setup 

Hamiltonian Method

Charge Mult. OPEN

MM GNORM LARGE

GRAPH EXTERNAL

STEP POINT

STEP1 2 POINT1 2

AUX BONDS ENPART ESP
 EXCITED GEO-OK NOINTER OLDFPC
 POLAR PRECISE SYMMETRY UHF
 VECTORS XYZ

Others

Default Keywords

Winmostar

H₂Oの計算結果

```
H2O.out - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
*****
** MOPAC FOR LINUX (PUBLIC DOMAIN VERSION) MTA ATOMKI, Debrecen, 95-JUN-21 **
*****

                PM3 CALCULATION RESULTS

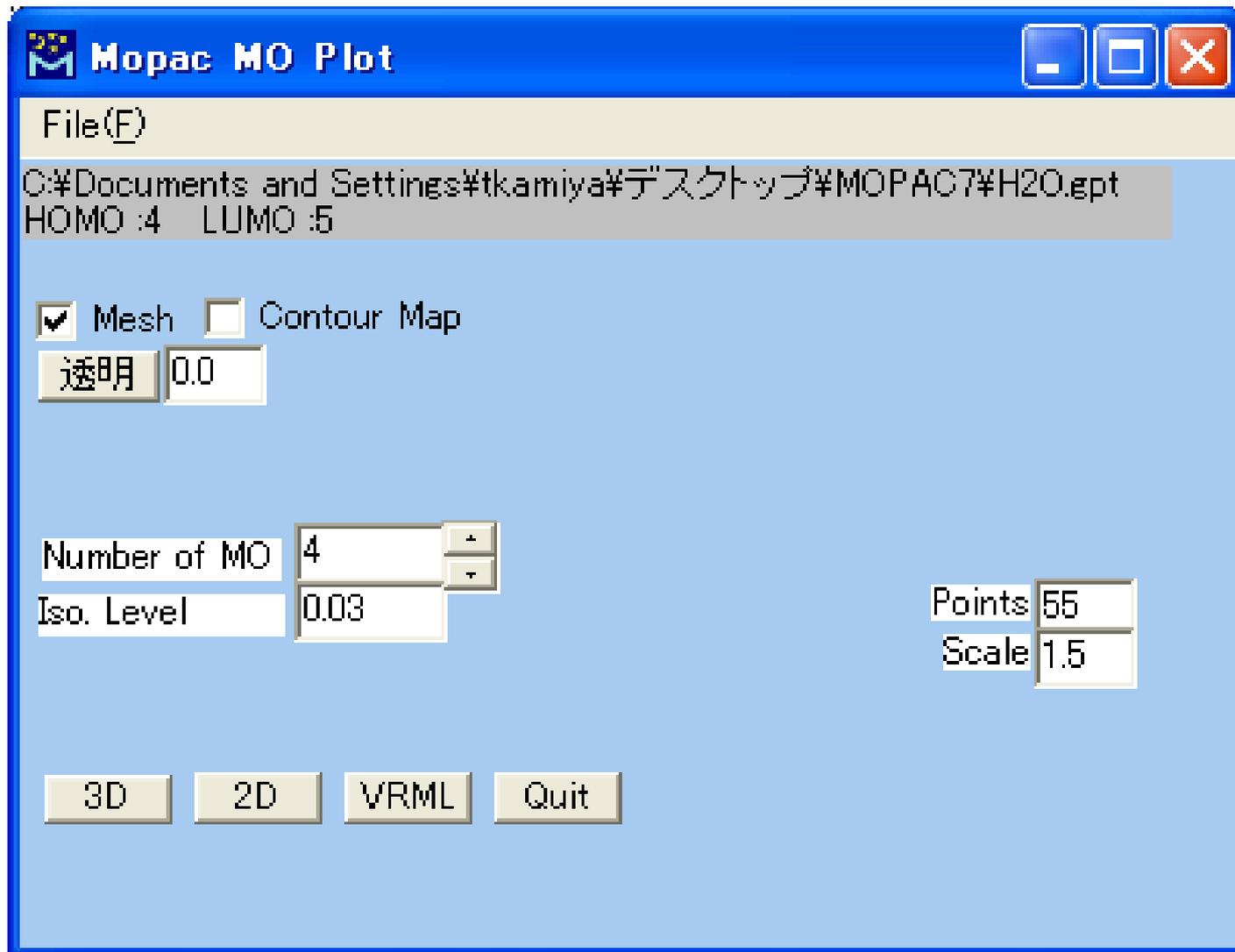
*****
*           MOPAC: VERSION 7.01                CALC'D. Tue Nov 10 07:49:18 2009
* VECTORS   - FINAL EIGENVECTORS TO BE PRINTED
* GRAPH     - GENERATE FILE FOR GRAPHICS
* T=        - A TIME OF 3600.0 SECONDS REQUESTED
* DUMP=N    - RESTART FILE WRITTEN EVERY 3600.0 SECONDS
* EF        - USE EF ROUTINE FOR MINIMUM SEARCH
* PM3       - THE PM3 HAMILTONIAN TO BE USED
* PRECISE   - CRITERIA TO BE INCREASED BY 100 TIMES
* NOINTER   - INTERATOMIC DISTANCES NOT TO BE PRINTED
* GNORM=    - EXIT WHEN GRADIENT NORM DROPS BELOW .500E-01
*****060BY060
PM3 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS

Winmostar

  ATOM   CHEMICAL   BOND LENGTH   BOND ANGLE   TWIST ANGLE
NUMBER  SYMBOL     (ANGSTROMS)   (DEGREES)    (DEGREES)
  (I)           NA:I         NB:NA:I      NC:NB:NA:I   NA  NB  NC

   1       O
   2       H       0.96127 *
   3       H       0.96127 *   103.52938 *   1   2
```

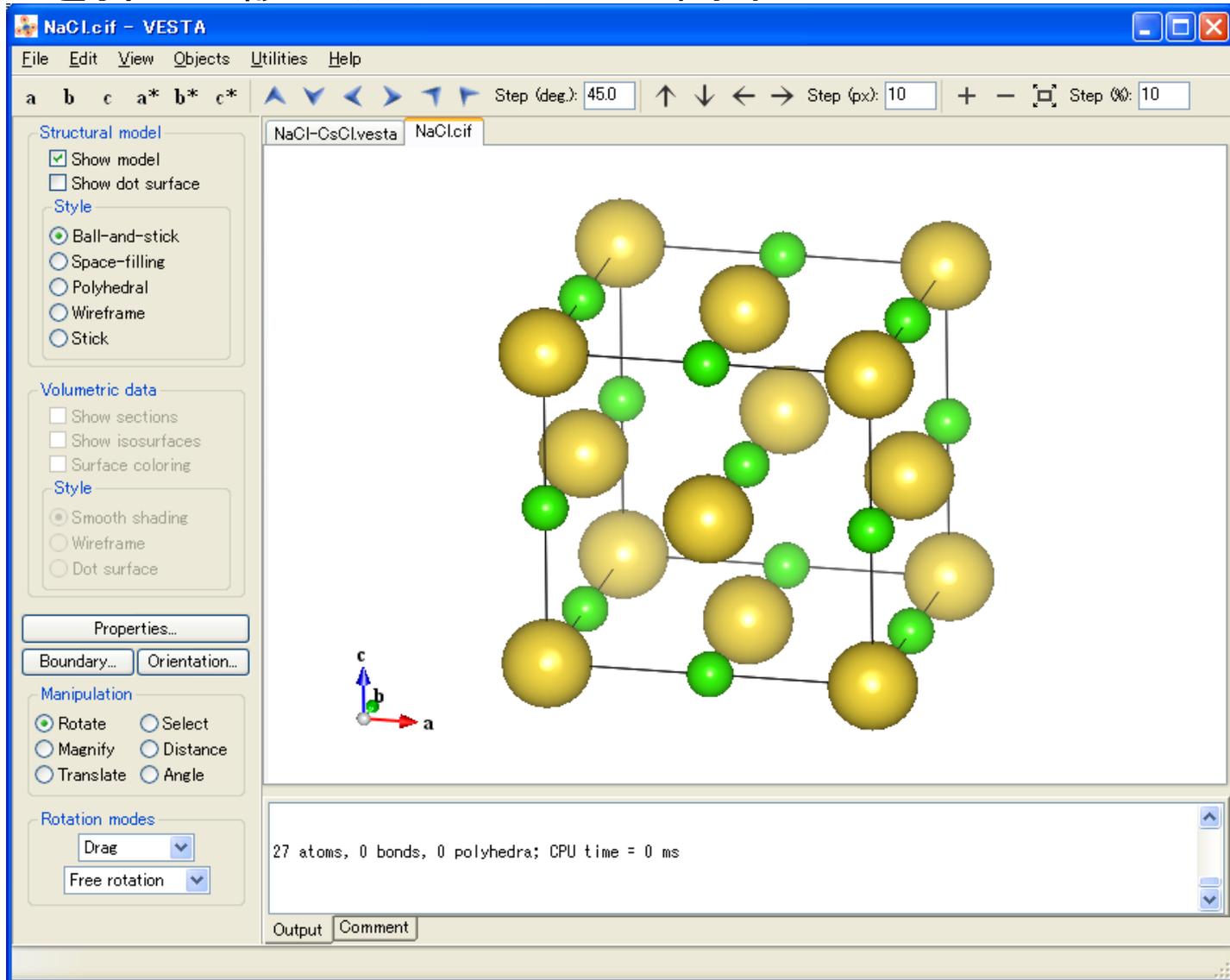
波動関数の描画



VESTA: 結晶構造を表示

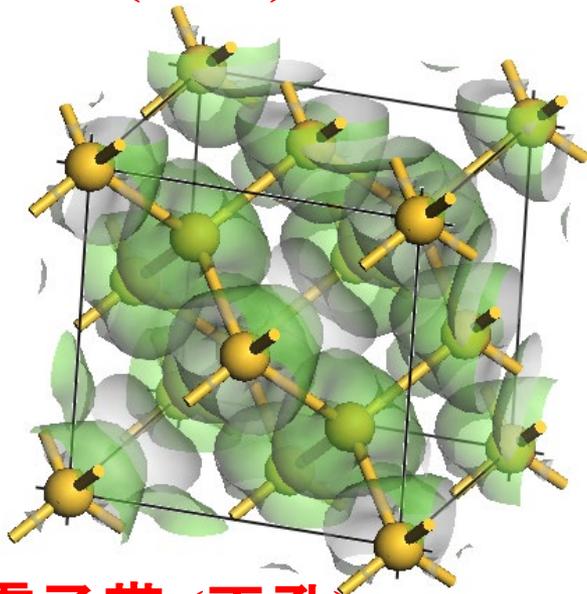
<https://jp-minerals.org/vesta/jp/>

CIFファイルを探して読み込ませるのが簡単

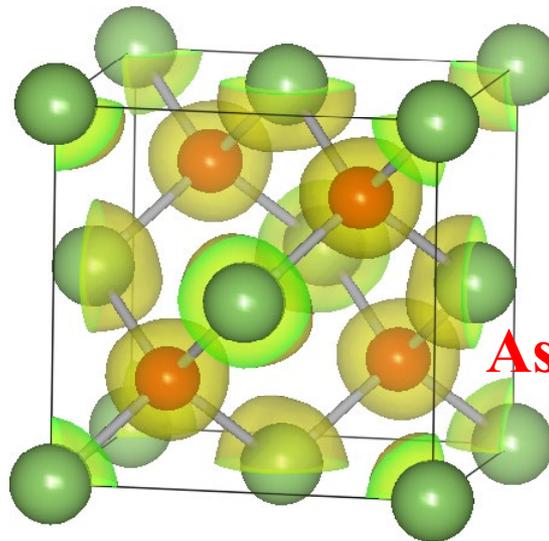


量子計算: 半導体中の電子分布

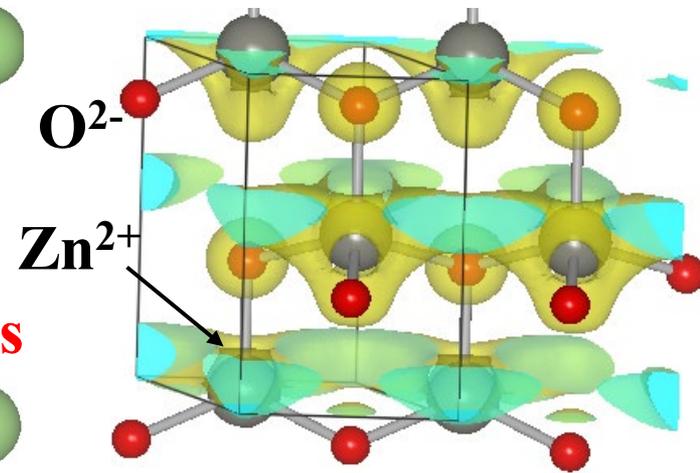
伝導帯 (電子) Si



GaAs



ZnO



価電子帯 (正孔) Si

