

Title	最新論文クラスタとのキーワード比較によるリサーチ フロント進展状況の把握：材料科学“二次元物質”に おけるケーススタディ
Author(s)	藤沢, 仁子; 迎, 佑介; 山下, 泰弘; 吉田, 秀紀
Citation	年次学術大会講演要旨集, 35: 717-722
Issue Date	2020-10-31
Type	Conference Paper
Text version	publisher
URL	http://hdl.handle.net/10119/17277
Rights	本著作物は研究・イノベーション学会の許可のもとに 掲載するものです。This material is posted here with permission of the Japan Society for Research Policy and Innovation Management.
Description	一般講演要旨

最新論文クラスタとのキーワード比較による リサーチフロント進展状況の把握 —材料科学“二次元物質”におけるケーススタディー—

○藤沢 仁子, 迎 佑介, 山下 泰弘, 吉田 秀紀 (科学技術振興機構)
satoko.fujisawa@jst.go.jp

1. はじめに

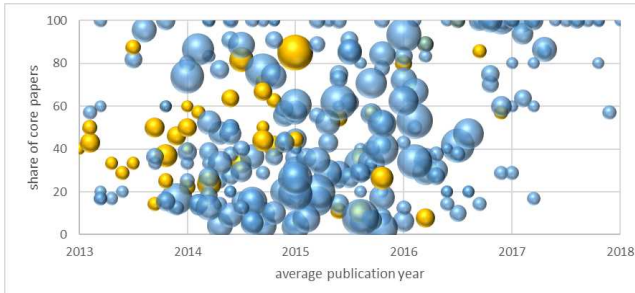
JST エビデンス分析室では、トップサイエンスの動向把握やエマージング領域の発掘を目的に、クラリベイトによる高被引用論文の共引用クラスタ「リサーチフロント (RF)」を活用している。

RF は、Web of Science に収録された直近 6 カ年約 1600 万報の論文を対象に、高被引用論文、共引用という 2 段階の機械処理によって形成された論文集合である。それでも尚、約 3 万報のコアペーパーから構成される 2,400 超の RF が存在し、材料科学分野に絞っても 4,363 報 330RF にのぼる。

RF には、被引用数などの一般的な計量書誌指標の他、RF を構成するコアペーパー数といった“大きさ”を表す指標や、コアペーパーの平均出版年といった“新しさ”を表す指標も付与されている。

図 1 は、これらの指標を用いて、中国(a)と日本(b)の著者を含む 2018RF 材料科学分野コアペーパーの各国シェア(整数カウント)を平均出版年に対してそれぞれ分布を示したものである。バブルの大きさは各 RF のコアペーパー数を相対的に表す。コアペーパーに日本著者を含むのが 111RF なのに対し、中国は 272RF と 2 倍以上に及ぶ。また、中国は 80%以上の高シェア層に RF が多く、シェア 100%の RF も多数ある。一方で、日本はシェア 20%以下の低シェア層が厚く、平均出版年 2017 年以降ではシェア 20%以上のエリアに RF は存在しない。

(a) 中国



(b) 日本

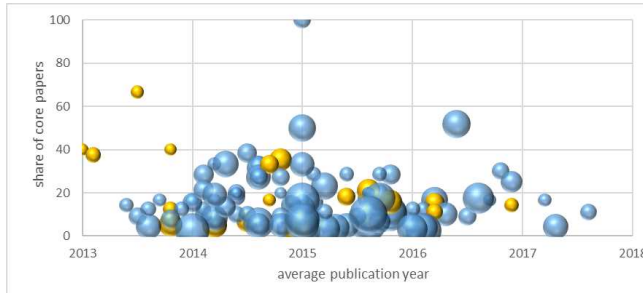


図 1 RF2018 材料科学 国別シェアと平均出版年

図 2 は、RF2018 材料科学分野におけるコアペーパーシェア分布を国別に見たもの。ここで、ある RF について、コアペーパーの内、特定国の著者を含む論文の割合をその RF における当該国のシェアとし、3 階級で RF 数を比較した。中国のシェア 80%以上の RF 数は 272RF 中 79RF と他国に比べて圧倒的に多く、中国シェア 100%も 44RF 存在する。このような中国が高シェアを占める RF を個別に見ていくと、特定の研究グループのみで形成されていることが多いことが明らかになった。

このように、図 1, 2 で示したような計量書誌指標により RF の新しさや大きさ、各国シェアといった大局的な RF の定量評価ができる。しかしながら、これらだけでは個々の RF の研究内容や特徴といったファンディング戦略に必要な情報が見えてこない。そこで、前回報告の通り、コアペーパータイトル、必要に応じて抄録を基に各 RF に技術内容を端的に

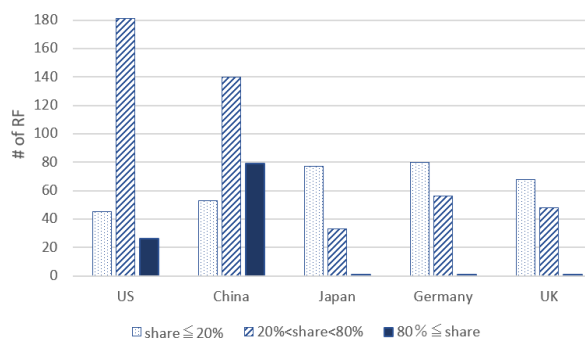


図 2 RF2018 材料科学分野 国別のシェア分布

表すラベリングを施したうえで分類・体系化し、73 小分類、21 中分類に渡る材料科学分野の RF を全体的に俯瞰できる一覧を構築した [1]。図 1 における黄色バブルが中分類「二次元物質」RF を表し、中日どちらの国においても「二次元物質」RF が占める割合が大きいことが分かる。

2010 年のノーベル物理学賞の対象となったグラフェンは代表的な二次元物質である。二次元結晶構造に由来する特異な電子構造を反映した高い電子伝導度や機械強度等の特徴から、次世代エレクトロニクス材料をはじめ、多様な新規機能材料として期待される。近年、遷移金属ダイカルコゲナイド、六方晶窒化ホウ素(hBN)、シリセン、ゲルマネン等の二次元物質もポストグラフェンとして注目されている。これら、二次元物質の応用分野は、薄膜太陽電池に使用される透明電極(導電性フィルム)、バイオセンサー、スーパーキャパシター、太陽電池、二次電池等、エレクトロニクス領域やエネルギー領域を広く含むことから、学術的にも実用的にも盛んに研究が行われている [2]。

本稿では、RF 特徴づけの手法として「二次元物質」を対象に試行したケーススタディについて報告する。2 章では、RF の質を測るために新たに我々が導入した 1) 中国論文率、2) ネイチャーインデックスジャーナル率について述べる。3 章では、RF の発展状況を分析するため、最新論文の書誌結合によりトピック形成された「二次元物質」クラスタと、二次元物質に関する RF のキーワード比較について報告する。

2. リサーチフロントの質を測る指標

RF 分析を通して重要な研究領域やエマージングな研究領域を見出すには、単に大きさや新しさだけではなく、RF 自体の質まで立ち入った特徴付けが不可欠である。前述のラベリングの過程で RF をコアペーパーレベルで精査したところ、コアペーパー著者国や掲載誌等の質的なばらつきが RF 同士にあることを見出した。具体的には、コアペーパー全ての最終著者が同一など、特定の研究グループ内の共引用により形成されたと思われる RF も存在すること、また、ネイチャーやサイエンスなどのトップ総合誌、または、米国化学誌(JACS)など分野トップ誌の論文を中心に構成された RF が存在する一方で、トップ誌を全く含まない RF も存在すること、が認められた。そこで、次項で述べる中国率とネイチャーインデックスジャーナル率の 2 つの指標を導入した。

2.1. 中国論文率

中国論文率が高い RF の質が一概に低いとは言えないが、図 1 から明らかなようにきわめて数が多いことから、除外して全体像を眺めることで新たな知見が得られることが期待される。実際には、特定研究グループによる RF は中国に限らずイランやパキスタンなど他の国にも存在するが、中国のものである割合が高いことから、最終著者が中国著者であるコアペーパーの割合を一つの目安とすることとした。

表 1 は RF2019 材料科学で新出の RF に中国率を付与したものである。円は各 RF で、大きさはコアペーパー数を、色の濃淡は中国率を表している。円の色が濃いほど中国率が高く、光物性、水分解、二次電池などで中国率が高く比較的大きな RF が多く存在することが分かる。

表 1 RF2019 材料科学で新出の RF (一部抜粋)

大分類	中分類	主なリサーチフロント	RF 数	色 = 中国の割合			
				○ 0-20%	● 21-79%	● 80-100%	
				大きさ = コア論文数			
				● 5-10	● 11-29	● 30-50	
物質・材料	2D 物質	MoSe ₂ /WSe ₂ , MXene, 黒リン, ヤヌス単分子層, ツイスト二層グラフェン, C ₃ N	11	○	○	●	●
	複合系	ZrB ₂ 基, 耐熱, 伝熱, h-BN 系, セルロースナノファイバー	4	○	●	●	●
	MOF/COF	触媒, スーパーキャパシタ ^② , センサー ^② , 電磁波吸収, 発光, 水分解	7	○	●	●	●
	ソフトマター	機能性ポリマー ^③	3	○	●	○	
	トポロジカル物質	トポロジカル絶縁体, 半金属	2	○	●		
光化学系	光物性	フォトルミネセンス ^⑦ , メカノルミネセンス	8	○	●	●	●
	水分解	水分解 ^④ , 可視光光触媒	25	○	○	○	○
電池・キャパシタ	太陽電池	ペロブスカイト ^④ , 有機系, シリコンヘテロ接合	6	○	○	○	○
	二次電池	リチウムイオン電池 ^② , ポストリチウムイオン電池 ^⑦	9	○	●	●	●
	スーパーキャパシタ	電極材料 ^④	4	○	●	●	●
	燃料電池	酸素還元触媒 ^⑤ , 固体酸化物電池 (SOFC)	6	○	○	○	○

2.2. ネイチャーインデックスジャーナル率

コペーパーの掲載ジャーナルによりリサーチフロントの質を比較してみた。ここでは、ネイチャーインデックスが「研究者が自身の最高の研究成果を出したいジャーナル」という選定基準により選定した82誌に注目した[3]。この82誌は、Web of Scienceの収録誌の内、わずか4~5%に過ぎないが、これらのジャーナルが集める引用はWeb of Science全体の30%近くに上る[4]。この82誌に掲載された論文をコペーパーに含む割合「ネイチャーインデックスジャーナル率(NIJ率)」をRFの評価指標とした。表2と図3は、RF2019新出の二次元物質RFのNIJ率と中国率を見たもの。中国率が低く、NIJ率が高いRFには「ツイスト二層グラフェン」、「MoSe₂、WSe₂の大面積CVD合成」などのRFが該当した。反対に、NIJ率0%で中国率の100%のRFには「MoS₂のH₂貯蔵」が見られた。

表2 RF2019新出 二次元物質RFのNIJ率と中国率

RFラベル	NIJ率	中国率
ツイスト二層グラフェン	97.8% (44/45)	10.4% (5/44)
黒リン	83.3% (5/6)	83.3% (5/6)
MoSe ₂ , WSe ₂ の大面積CVD合成	71.4% (5/7)	12.5% (1/7)
MXene 他, センサー	71.4% (5/7)	85.7% (6/7)
C ₃ N	50.0% (3/6)	33.3% (2/6)
ヤヌス単分子層	42.9% (3/7)	71.4% (5/7)
光触媒, LED	28.6% (2/7)	50.0% (4/7)
ガス検出, 薬物吸着	0% (0/6)	0% (0/6)
吸着	0% (0/6)	50.0% (3/6)
光化学	0% (0/6)	83.3% (5/6)
MoS ₂ のH ₂ 貯蔵 (電極触媒, リチウムイオン電池との複合的なRF)	0% (0/5)	100.0% (5/5)

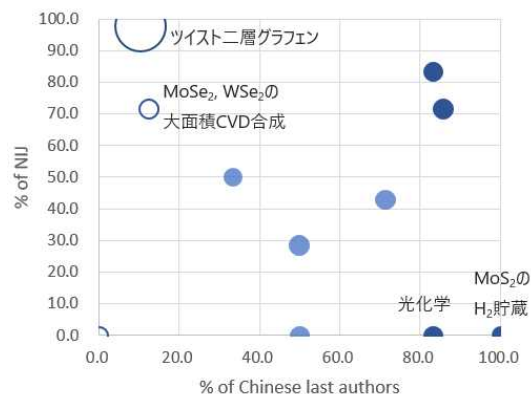


図3 RF2019新出二次元物質RFのNIJ率と中国率

3. リサーチフロントの発展・波及状況を分析する

3.1. 分析方法

3.1.1. 2018材料科学クラスタの形成

ここまでRFそのものを分析してきたが、さらに、RFを引用する最新論文を分析することでRFの進展・波及状況を測れるかどうかを検討した。

まず、最新論文は引用がまだ少ないことから、共引用ではなく書誌結合によりクラスタリングを施し、トピックごとにまとめた。2018年出版された材料科論文分野の全論文(Web of Science収録)を書誌結合した結果、約11万報から726クラスタが形成された。RF2018材料科学と2018材料科学全論文の書誌結合クラスタ(以下、2018クラスタ)を対比して示す(表3)。対象論文の数は同程度だが、RFはトップ1%論文に限定したうえで共引用クラスタリングしているのに対し、2018材料クラスタの論文は被引用数により限定していない。

次に、2018材料クラスタは、構成する論文の多い上位170クラスタを分析対象とし、RFと同様に各クラスタの内容を端的に表すラベルを付与した。この170クラスタを構成する論文は約10万報で、2018材料科学論文約11万報の9割をカバーしている。構成論文の多い上位10クラスタを表4に示したが、1,000報を超える巨大なクラスタも多く、扱う量的な観点と質的な観点の両面から、被引用数トップ1%の論文に限定した。

最大クラスタ(4,807報)は、2次元物質に関するクラスタであり、最新論文クラスタで見ても、2次元物質が盛んに研究されていることが示唆された。

表3 材料科学RFと2018材料クラスタとの違い

	材料科学RF	2018材料クラスタ
クラスタリング手法	共引用	書誌結合
出版年	2013-2018	2018
対象論文	トップ1%論文(約10万報)	材料分野の全論文(約11万報)
分野	・全分野の論文を対象にクラスタリング ・コア論文に材料科学分野を含むRFを抽出	材料科学分野の論文を対象にクラスタリング
クラスタ数	330RF(約2,400論文)	726クラスタ(約11万論文)

表4 論文数の多い2018クラスタ

2018クラスタ(ラベル)	論文数
2D物質, グラフェン, MoS ₂	4,807
計算物理	4,206
二次電池	4,163
DDS	2,933
誘電体セラミックス	2,843
可視光光触媒	2,834
バイオマテリアル(生体足場材料)	2,710
構造材料(マグネシウム合金)	2,320
ペロブスカイト太陽電池	2,167
バイオマテリアル(人工骨)	2,135

3.1.2. 二次元物質 RF と 2018 二次元物質クラスターのキーワード比較

こうして特定された 2018 二次元物質クラスターと二次元物質 RF のキーワードを比較し、RF の発展状況を分析する。RF と最新論文クラスターのキーワード比較対象の論文群を図 4 に示す。RF は、2D 物質に関する 31RF のコアペーパー 354 報、一方、最新論文クラスターは二次元物質クラスターの構成論文 4,807 報の内、二次元物質 RF のコアペーパーを引用する論文(サイティングペーパー)1,354 報を対象とした。

キーワード集計に先立ち、対象論文のキーワードに対して、1) 化学式・物質名の表記を統一、2) 複数形を単数形に統一、3) 物質名+形状など概念を分離できる複合語は分割する(例えば、MoS₂ nanosheets は MoS₂ と nanosheet に分けて扱う)等の語の統一を行った。3) については、Carbon Nanotube など 1 概念として定着しているものは 1 語として扱うこととした。

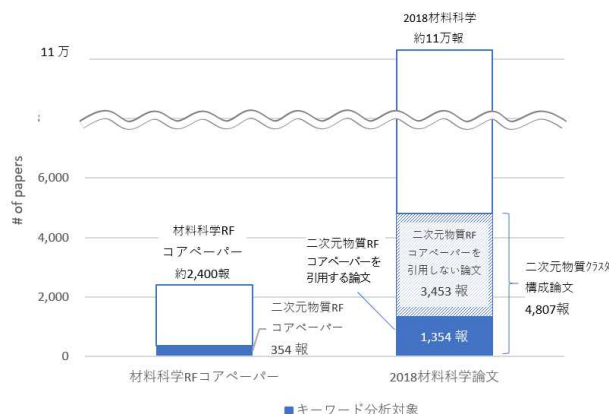


図 4 キーワード比較の対象

3.2. 結果

3.2.1. RF と 2018 材料クラスター共に頻出のキーワード

RF とサイティングペーパーの両者に頻出したキーワードを見ると、頻度上位 4 語は全く同順位で“MoS₂”, “graphene”, “monolayer”, “nanosheet”と並んだ。これらの他にも多くのキーワードが共通で見られた(表 5)。

表 5 RF・サイティングペーパー 頻出キーワード (WoS)

2D物質RFに頻出するKW	論文数	サイティングペーパーに頻出するKW	論文数
MoS ₂	141	MoS ₂	644
graphene	103	graphene	456
monolayer	76	monolayer	387
nanosheet	62	nanosheet	266
photoluminescence	45	transition-metal-dichalcogenide	260
nanoparticle	38	2-dimensional-material	255
valley-polarization	30	chemical-vapor-deposition	172
semiconductor	28	heterostructure	164
transition-metal-dichalcogenide	27	FET	162
layer	26	black-phosphorus	153
2-dimensional-material	26	layer	151
heterostructure	23	photoluminescence	149
growth	22	transistor	135
WS ₂	21	growth	132
film	21	photodetector	118
CNT	20	WS ₂	117
FET	17	transition	114
2-dimensional	17	performance	103
nanostructure	17	film	97
transistor	17	semiconductor	90

3.2.2. RF 特有のキーワード

サイティングペーパーには現れず RF のみに出現したキーワードを表 6 に示す。最多の“iron-oxide(酸化鉄)”を含む 5 報のうち 3 報は、がん治療と同時にがん細胞の状態を確認・診断する「がんセラノティクス」に関する論文、他にも“ablation(切除)”といったがん治療関連キーワードが見られた。

3.2.3. サイティングペーパーに特有のキーワード

次に、RF には現れずサイティングペーパーのみに出現したキーワードを表 7 に示す。デバイスや機能化に関連したものが特徴的に現れた。表中薄青が“device”, “LED”, “Wafer-Scale”といったデバイス関連であり、濃青は“functionalization”, “passivation”, “high-responsivity”といった機能化あるいは機能化に伴う特性に関するキーワードである。機能化については表中黄色“thermal-conductivity”, “energy-transfer”など物性関連のワードも幅広く現れ、2D 物質の用途が多岐にわたっていることを示唆している。

表 6 RF のみに出現したキーワード (WoS)

2D物質RFのみに出現するKW	論文数
iron-oxide	5
total-energy-calculation	5
MAX-Phase	4
topological-insulator-Bi2Se3	4
porous	3
electron-localization	3
FeSe	3
multimodal-imaging	3
cocatalyst	3
contrast-agent	3
layer-by-layer	3
capability	3
ablation	3
augmented-wave-method	3

表 7 サइटィングペーパーのみに出現したキーワード (WoS)

キーワード	論文数
device	36
LED	28
functionalization	25
thermal-conductivity	24
passivation	22
degradation	20
Wafer-Scale	19
ferromagnetism	17
high-responsivity	17
bilayer-graphene	16
molecular-dynamics	16
elastic-properties	15
electron-mobility	12
MoTe ₂	12
energy-transfer	12
mono	11
magnetic-property	11
covalent-functionalization	10
piezoelectricity	10
photocatalytic	10

3.3. 考察

3.3.1. MXene や蓄電デバイス関連の論文が MAX 相の論文を引用

まず、RF のみに出現した” MAX Phase (MAX 相)” に注目したい。MAX 相は、 $M_{n+1}AX_n$ の組成を有する相である [M は遷移金属, A はヘリウムを除く第 13-18 族に属する元素, X は窒素 (N) または炭素 (C)]。セラミックスと金属の性質をあわせもち、高い電気伝導度と熱的に安定で機械加工が可能である性質から新しい機能材料として近年関心を集めている [5]。

” MAX 相” をキーワードにもつコアペーパーは 4 報あり、これらを引用している論文(サイティングペーパー)は最新論文の 2D 物質クラスタ(Fig.1 青の部分)中には 44 報あった。これら 44 報のサイティングペーパーのキーワードを集計した結果が表 8 である。“graphene”, “MoS₂”, “transition-metal-dichalcogenide(遷移金属ダイカルコゲナイド)”といった物質そのものの名称が頻出し(表中濃い青)、最も頻出したのは”MXene(メクセン)”であった。 $M_{n+1}AX_n$ から A が抜けたものがメクセンであり、実際に MAX 相から剥離や化学処理によって作製され MAX 相とは不可分な関係にある物質である [6]。

様々な電池材料を初め機能材料として期待されているメクセンについては、表 8 でも “lithium(リチウム)”, “lithium-ion-battery(リチウムイオン電池)”, “intercalation(挿入)”, “high-volumetric-capacitance(高容量キャパシタンス)” など蓄電デバイスに関するキーワードも広く出現している(表中黄色)。また、二次電池アノード材料としては特に「M=Ti, A=C」としたメクセン物質が知られるが、実際 “titanium-carbide(炭化チタン)” や “Ti₃C₂” といったキーワードが出現した(表中薄青)。

3.3.2. 大面積化からウェハスケールへ

サイティングペーパーのみに出現したキーワードでは “Wafer-Scale” に着目したい。ウェハ(Wafer)は薄膜デバイスの基板材料で、この上に半導体薄膜などを形成し、必要な形状に切り出す。したがって、ウェハのサイズ(径)が大きいほど一度に多くの IC チップを製造できるが、ウェハサイズを大きくすれば基板結晶格子中に現れる原子レベルの欠陥(点欠陥や線欠陥)が均質性を阻害される [7]。

“Wafer-Scale” 論文が引用するコアペーパー 57 報のキーワードは表 9 の通りとなり、“Chemical-vapor-deposition”, “Growth” など結晶成長に関するキーワードが多く現れた。また、“Wafer-Scale” 自体はないものの、大面積化を表す “large-area” は 9 報に現れた(表中緑)。コアペーパーでは一般的な概念である「大面積化」として現れていたのが、サイティングペーパーではより産業的な「ウェハスケール」というキーワードに変遷した可能性が示唆される。

表 8 MAX 相サイティングペーパーのキーワード(WoS)

サイティングペーパーKW	論文数
MXene	18
graphene	16
titanium-carbide	13
nanosheet	11
2-dimensional	10
transition-metal-dichalcogenide	10
MoS ₂	9
2-dimensional-material	9
CNT	8
black-phosphorus	8
transition-metal-carbide	6
monolayer	6
chemical-vapor-deposition	6
high-volumetric-capacitance	6
exfoliation	5
Ti ₃ C ₂ -MXene	4
intercalation	4
lithium-ion-battery	4
electronic-property	4
lithium	4

表 9 "Wafer-Scale"論文が引用するコアペーパーのキーワード (WoS)

"Wafer-Scale"に引用されたコアペーパーKW	論文数
MoS ₂	36
graphene	23
monolayer	22
photoluminescence	16
heterostructure	12
atomic-layer	11
growth	10
transition-metal-dichalcogenide	9
valley-polarization	9
chemical-vapor-deposition	9
large-area	9
2-dimensional-material	8
nanosheet	8

4. まとめ

本稿では、リサーチフロントを単に大きさや新しさだけではなく、リサーチフロントの質や進展・波及状況を分析する手法について、二次元物質におけるケーススタディを行った。

リサーチフロントの質を測る新規指標として、リサーチフロントにラベリングを施し技術トピックで分類したうえで、特定の研究グループによる RF である可能性を示唆する中国論文率や、トップジャーナル掲載論文の割合を示すネイチャーインデックスジャーナル率と言った独自の指標を導入した。これにより、「ツイスト二層グラフェン」や「MoSe₂, WSe₂の大面积 CVD 合成」といった注目トピックを見出した。

進展・波及状況を把握する手法としては、RF とサイティングペーパーのキーワード比較による分析を試行した。その結果、MAX 相といった基礎科学分野のキーワードにもコアペーパーを引用する論文からは MXene, MXene を利用したリチウムイオン電池というように応用指向を示唆するキーワードが出現するなど進展・波及を示唆する事例を見出した。また、コアペーパーでは大面积化というキーワードが、コアペーパーを引用する論文では同義ながら、より産業的な用語であるウェハスケールに変容したとように、キーワードの変化が研究の進展を示唆する結果が得られた。

今回は、サイティングペーパーと RF の関連性についてキーワードの比較に基づいたが、さらに引用関係からの分析を今後の課題としたい。

参考文献

- [1] 田中珠, 藤沢仁子, 迎祐介, 吉田秀紀. 材料科学リサーチフロントの体系化と著者所属国割合の比較. 研究・イノベーション学会第 34 回年次大会. 1 E 0 2 (2019).
- [2] 柚原淳司監修, ポストグラフェン材料の創製と用途開発最前線, 株式会社エヌ・ティー・エス, 2020
- [3] A guide to the Nature Index. Nature 515, S94 (2014).
- [4] Introducing the index. Nature 515, S52-S53 (2014).
- [5] 計算科学と実験で新機能物質 (MAX 相) を発見. ナノテクノロジープラットフォーム. 物質材料機構. (2019)
- [6] 計算科学と実験で新機能物質 (MAX 相) を発見. 東京工業大学プレスリリース. (2019)
- [7] シリコンウェハは直径 20mm から出発、450mm をめざす道程. 半導体テクノロジーの今. テレスコープマガジン. (2015).