

# 科学技術の潮流

JST研究開発戦略センター

(219)

## 材料開発効率化

### 「超強力な磁石」

「大容量で安価な蓄電池」といった社会からの要望に応えるには、

優れた性能を持つ材料を開発する必要があり、ところが、現行の材料は長年の性能向上に向けた努力の結果生み出されてきたものであり、さらなる飛躍的な性能向上には一般的に難しさを伴う。

2010年頃から、人工知能(AI)やデータ科学を用いることで新材料の発見や材料設計の効率化を目指し

た、マテリアルズ・インフォマティクスを中心に据えた研究開発が世界中で行われるようになった。しかし現状では、一部の触媒や磁性体などの新材料発見や、半導体結晶合成プロセスの効率化といっ

たいくつかの成功事例で精密に予測する技術を生み出したものの、全ての材料開発において大幅な時間短縮を実現するまでには至っていない。

この課題に一つの解を与える可能性があるデジタルツインは、現実の世界に存在する物質や装置を計算機上でモデル化し、それらの状態や動きを実際に実験を行わずに計算機上

# 材料創製にデジタルツイン

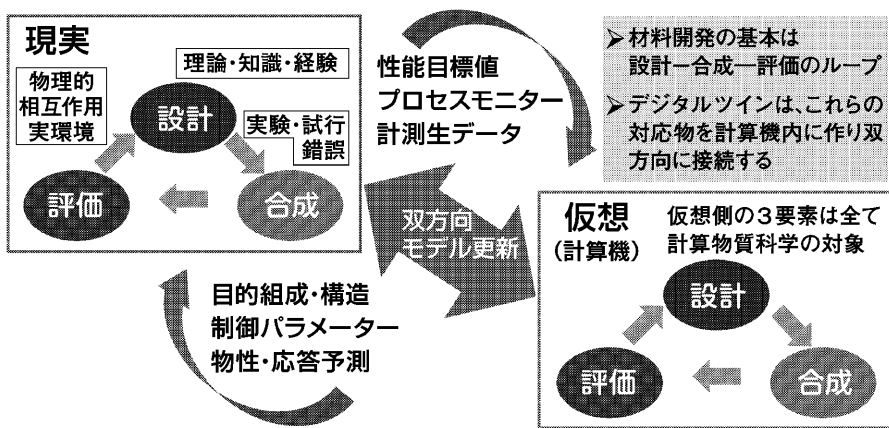


科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センターフェロー(ナノテクノロジー・材料ユニット) 眞子 隆志

東京大学大学院修士課程修了。電気メーカにおいて、酸化材料、燃料電池などの研究開発に従事。19年より現職、ナノテクノロジー・材料分野の研究開発戦略立案を担当。博士(工学)、技術士(応用理学)。

の現象、利用される環境での刺激に対する応答などを計算機で予測

## 材料創製のためのデジタルツインのイメージ



JST研究開発センター「計算物質科学の新展開 ~デジタルツインによる材料創製基盤の革新~」(公開予定)を基に作成

## 現象モデル化

近年、スーパーコンピュータが持つ高い性能を最大限に引き出す手法や機械学習の効果的な利用法が進展し、以前に比べてはるかに多くの原子を対象とした物質科学の計算が可能となった。また、電池の電極における化学反応のように、従来は計算が難しかった現象をモデル化する方法も発展してきている。

材料創製のためのデジタルツイン構築に向けては、計算物質科学の多くの領域で予測技術の一層の深化・統合を成し遂げていく必要があるが、その兆しは見え始めている。(金曜日掲載)