

科学技術の潮流

JST研究開発戦略センター

①

M-1からP-1へ

材料開発に対する要求がますます高度化する中、マテリアルズインフォマティクス(MI)に期待が寄せられている。MIは、計算科学やシミュレーション、実験から得られたデータを活用して、機械学習などのデータ科学により物質・材料の物性を予測・設計するもので、電池材料、半導体材料、触媒材料などさまざまな例で研究成果が出始めている。

しかし、従来のMI

は「所望の特性を得るにはどんな材料を用意すべきか？」という答えを与えてくれるが、それをどうやって作るか?」は教えてくれない。今後は「本当に作れるのか? どうや

って作るか?」という問いに対してデータ科学を活用し合成プロセスを設計していくアプローチ、つまり、プロシミュレーション、つまり、プロセスインフォマティクス(PI)が必要になるもの、技術流出防止の観点からそれを

「インベの状態をその場で正確に把握すること」が可能にする先端計測技術、それに伴って発展しつつある計測インフォマティクスも重要な要素である。

合成プロセスは、非常に多数のパラメータでできない。このようなハイスループット実験に関する材料組成とプロセス条件の同時最適化、汎用ロボットを活用

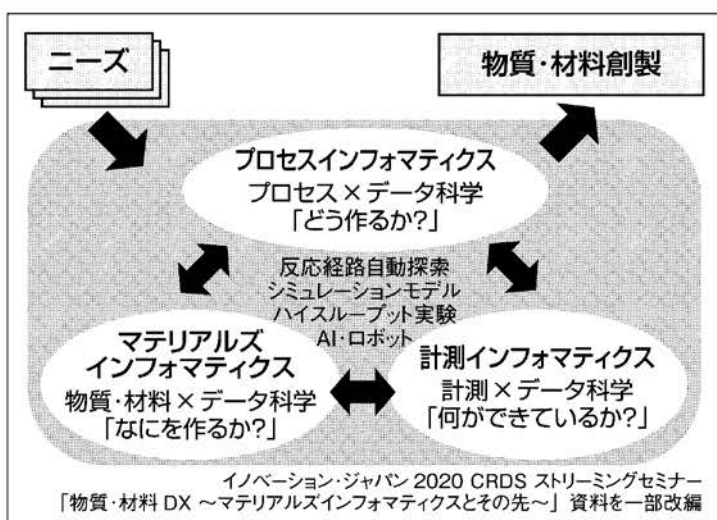
これらの研究成果・技術の有機的に組み合わせ発展させること、また企業内データの活用を促進する産学連携体制を構築することが、PIを核とするデータ駆動型の物質・材料創製に向けた第一歩となる。

データ駆動型で材料創製



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

東京大学大学院工学系研究科修士課程修了後、旭化成入社。触媒、機能性材料などの研究開発に従事。同社、先端技術研究所長、高機能マテリアルズ技術開発センター長を経て、2020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)。



今後、材料に対する要求はさらに高度化する。データ駆動型の物質・材料創製を我が国が率先して推進することはきわめて重要である。(金曜日掲載)