

【戦略的創造研究推進事業チーム型研究（CREST）】

実験と理論・計算・データ科学を融合した 材料開発の革新

研究領域事後評価

研究総括：細野 秀雄
令和7年2月26日

目次

- 1 研究領域の概要：戦略目標
- 2 研究総括のねらい
- 3 研究課題の選考／研究費の配分
- 4 領域アドバイザー／運営アドバイザー
- 5 研究領域の運営
- 6 代表的成果
- 7 総合所感

1. 研究領域の概要：戦略目標

「実験とデータ科学等の融合による革新的材料開発手法の構築」

https://warp.ndl.go.jp/info:ndljp/pid/11293659/www.mext.go.jp/b_menu/houdou/29/03/attach/1383122.htm

■ 達成目標

実験を基盤に、データ科学等との融合を図ることで、革新的材料開発へとつながる手法の構築を目的とする。

- 実験データの解析と理論計算から機能設計の指針の確立とそれを用いた新材料の合成
- 材料の機能を支配する粒界などの非一様な構造を取り扱える方法論の開発

日本の材料研究に対する現状認識

- 日本の産業競争力の強みである製造業を支えてきたのは「材料研究」の強さ。しかし、近年その優位性が急速に失われつつある。
- 我が国は、材料分野で際立った業績を有する研究者を数多く輩出してきたが、人材の伸び悩みが顕在化
- インフォマティクス技術や計算機シミュレーションなどが急速に進展
- 米国Materials Genome Initiativeなど、海外の材料開発プロジェクトが先行
- 各国の研究開発投資額や研究人材が増大する中、我が国らしい研究開発手法自体の革新が必要

2. 研究総括の狙い

- **強い実験**と、理論・計算・データ科学などと有機的に融合・連携させた**新しいスタイル**の革新的な材料の開発研究手法を生み出す。
- 物質科学にとどまらず、**社会的インパクトのある「材料」**をターゲットとし、中間評価後には産業界と連携する。
- 材料系、プロセスは限定しない。無機系、有機系、金属系、機能材料、構造材料、など幅広い分野を対象とする。
- 理論、計算、データ科学による研究開発の**加速だけでなく**、従来研究の延長と違う**手法の革新性**を明確に打ち出す。
- 材料研究の**フロンティア**を開拓するにふさわしい**チーム**を編成し**有効な協働の形**を示す。
- **材料分野のリーダー**と**若手研究者**の育成を促進する。

3. 研究課題の選考・研究費の配賦

採択年度	応募件数	書類選考 採択件数	面接選考 採択件数	採択倍率
① 2017年度	60	12	5	12.0
② 2018年度	42	9	4	10.5
③ 2019年度	28	8	4	7.0
合計	130	29	13	10.0

○選考方針（領域要件評価の観点）

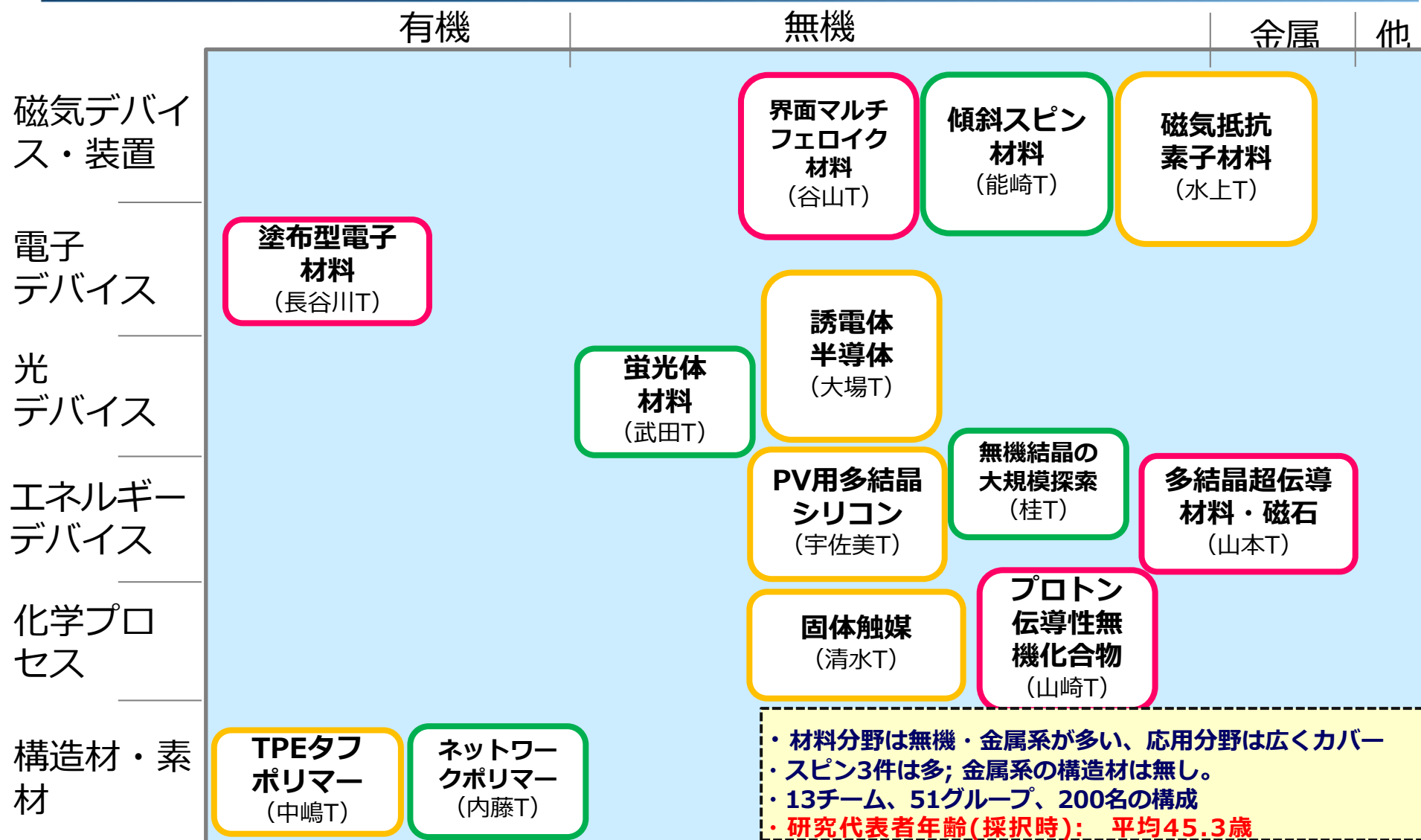
- (1) 提案されている材料開発手法は斬新か
- (2) 研究のアウトプットである重要な「材料」が具体的に明記されているか
- (3) 強い実験と計算科学やデータ科学・数学的手法が有機的に連携したチーム編成か
- (4) チーム体制の独自性と強み（特に実験研究者）が、明記されているか
- (5) 研究代表者が次世代の材料開発を担うリーダーとなる人材として適切であるか

課題ポートフォリオ

2017年
採択

2018年
採択

2019年
採択



研究費① 2017年度採択課題（5件）

研究代表者	所属・役職 (事後評価時)	研究課題名
宇佐美徳隆 	名古屋大学・教授	多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立とスマートシリコンインゴットの創製
大場史康 	東京工業大学・教授 (東京科学大学・教授)	データ駆動型材料探索に立脚した新規半導体・誘電体の加速的開拓
清水研一 	北海道大学・教授	触媒インフォマティクスの創成のための実験・理論・データ科学研究
中嶋健 	東京工業大学・教授 (東京科学大学・教授)	熱可塑性エラストマーにおける動的ネットワークのトポロジー制御
水上成美 	東北大学・教授	計算科学を用いた磁気抵抗スイッチ素子基盤材料の創出

研究費② 2018年度採択課題（4件）

研究代表者	所属・役職 (事後評価時)	研究課題名
谷山智康 	名古屋大学・教授	界面マルチフェロイク材料の創製
長谷川達生 	東京大学・教授	実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発
山崎仁丈 	九州大学・教授	実験と計算科学の融合による革新的プロトン伝導性無機化合物の創製
山本明保 	東京農工大学・特任准教授 (同・准教授)	超伝導インフォマティクスに基づく多結晶型超伝導材料・磁石の開発

研究費③ 2019年度採択課題（4件）

研究代表者	所属・役職 (事後評価時)	研究課題名
桂ゆかり 	東京大学・助教 (物質・材料研究機構・主任研究員)	新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発
武田隆史 	物質・材料研究機構・主幹研究員 (同・グループリーダー)	実験とデータ科学の循環による蛍光体開発
内藤昌信 	物質・材料研究機構・グループリーダー	データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発
能崎幸雄 	慶應義塾大学・教授	ナノ構造制御と計算科学を融合した傾斜材料開発とスピンデバイス応用

研究費配分のマネジメント

- 採択時の配賦予定総額を**3億円**とした。
- ただし**桂チーム／武田チーム**は、研究提案書の内容と採択時の評価に応じ、採択時の配分予定総額を**2億円／2.5億円**に設定、研究の進捗状況に応じて研究費の増額を検討することとした。
- 国際強化支援、出産・育児・介護支援のための予算を申請に応じ各チームに配分した。
- 想定外の研究機器の修理・購入等に係る予算を申請に応じ各チームに配分した。
- 長谷川チームのサイトビジットでの議論の際に、**極薄有機結晶構造解析（クライオTEM）の技術の必要性**を認識。2020年度、長谷川チームに新規の研究グループ（米倉グループ）を設置し、その研究予算を総括裁量経費から配分。
- 各チームの**若手研究者の研究活動を支援する予算**を、領域会議での発表などの審査結果に基づき総括裁量経費より配分した。
- 課題中間評価の結果に応じ、研究加速のための予算を総括裁量経費より配分した。
- チーム間連携を促進・支援するため、2022年度以降、総括裁量経費より**共同研究促進予算**を支出した。

4. 領域アドバイザー/運営アドバイザー

■ 領域アドバイザー (13名:(元)産業界2名、女性1名)

氏名	所属・職位	専門
石田 清仁	東北大学・名誉教授	金属材料学、組織制御学
伊藤 耕三	東京大学・教授	高分子材料学、超分子化学
伊藤 聡	計算科学振興財団・チーフコーディネータ	計算物質科学
大橋 直樹	物質・材料研究機構・拠点長	無機電子機能材料
楠 美智子	名古屋大学・名誉教授	応用物性・結晶工学、無機材料・物性、構造・機能材料
高田 昌樹	東北大学・教授	放射光科学
津田 宏治	東京大学・教授	機械学習・バイオインフォマティクス
野本 和正 (2022/7～)	ソニーグループ(株)・テクノロジーフェロー	有機EL材料、有機トランジスタ、フレキシブルディスプレイ技術
中川 淳一 (最終年度退任)	東京大学・特任教授(日本製鉄研究所から異動)	数理科学/逆問題、鉄鋼製造プロセスシミュレーション、金属結晶構造学

山口 周	大学改革支援・学位授与機構・ 特任教授	固体化学、欠陥化学、固体イオニクス、 材料の熱力学
山崎 聡	金沢大学・特任教授（産総研）	物理、材料科学、電子デバイス
吉田 博	東京大学・特任上席研究員 （大阪大学名誉教授）	物性理論、計算機マテリアルデザイン
湯浅 新治 (2020/4～)	産業技術総合研究所・ 研究センター長	磁気工学、金属薄膜、スピントロニクス

・退任： 稲垣伸二（豊田中研）、寺倉清之（NIMS）、時任 静士（山形大学）

■ 運営アドバイザー（産業界3名）

氏名	所属・職位	専門
浅見 正弘	日本知的財産協会・参与	無機溶液化学、X線構造解析、 材料化学、知財
佐川 真人	大同特殊鋼(株)・顧問	永久磁石材料
吉野 彰	旭化成(株)・名誉フェロー	電気化学、LIB

アドバイザー構成と方針

- 本研究領域は材料分野を限定しないため、有機（伊藤（耕）氏、稲垣氏（途中退任）、時任氏（途中退任）、野本氏）、無機・半導体（伊藤（聡）氏、大橋氏、楠氏、山崎氏）、金属（石田氏、中川氏）、触媒・イオニクス（山口氏）を広くカバーできるよう、それぞれの専門家を選定。
- 実験に融合させる研究手法としてデータ科学・計算科学（伊藤（聡）氏、津田氏、中川氏、吉田氏、寺倉氏（途中退任））、および先端分析技術（高田氏）を重視するため、それぞれの専門家を選定。
- 産業界との連携を重視するため、企業出身の領域アドバイザー（中川氏、稲垣氏（途中退任）、野本氏）を確保。
- 企業でインパクトのある実用材料を開発した実績を有する方を運営アドバイザーにお願いした（浅見氏、佐川氏、吉野氏）。
- 三期にわたる採択の結果、スピントロニクスのデバイス課題の割合が増したことから、この分野の指導者として1名を領域アドバイザーに追加した（湯浅氏）。

5. 研究領域の運営

■ 概要

目的	手段	内容
全体計画の 確認・修正	サイトビジット	採択翌年度の上期に研究代表者を関係ADと訪問。研究の立上がり状況を確認、成果イメージ・課題を共有、必要に応じ計画修正を依頼。
研究進捗の フォロー	領域会議	原則、年2回実施。当日の議論に加えADコメントをフィードバック、研究チームで議論してもらい回答を回収。レーティング結果は総括/ADで共有。
	個別指導	進捗/ニーズの変化により研究項目を見直し、必要に応じ研究グループを追加。年次計画書につき、総括コメント（期待）を送付。
	課題中間評価	・ Pj後半の課題/成果拡大の方策を議論。 ・ Pj加速ファンドを配賦。
若手の育成	若手発表 若手ファンド	領域会議にて各チーム1名ずつ若手に研究紹介をしてもらい、優れた提案には本人に研究費(期間2年まで)を配分。

目的	手段	内容
新型コロナ禍でのコミュニケーション確保	領域セミナーの開催	・ 2～3時間程度のオンライン会議を3回開催。 ・ 基本的にテーマは、研究チームの要望に応じて設定。
チーム間連携による成果拡大	共同研究ファンド	2022年度に提案を募集・審査し、2023～2024年度（領域6・7年次）の研究費に配分。
アウトリーチ	学会/展示会での報告	・ 日本物理学会、MRM2021・2023、及び日本MRSでシンポジウム開催。 ・ CEATEC展示。 ・ 最終報告書とその後の進展をSTAM投稿15報。
産業界連携の促進	個別指導 課題中間評価 延長課題選考	・ JST産連・NEDO-Pjの紹介。 ・ 研究テーマに近い開発実務経験者の紹介。（必要に応じ、研究参加者に追加） ・ 延長課題選考時に社会実装の観点を重視。

領域会議



- 原則年2回開催。
- 研究の進捗を確認、成果の発展方向、チーム連携、計画修正等を議論。
- AD講演、若手発表も含める。
- 研究代表者/主たる共同研究者/若手研究者が参加。JST知財部/産連部からも出席。全3期揃ったコロナ禍明け（2021年11月）で120名規模。
- 事後ADコメントをフィードバック、研究チームで対応を検討してもらい、回答を回収・ADへ報告。

領域会議の様子（2018年11月）

本領域と関連の深いさがけ「マテリアルズインフォ」の常行総括・研究者からの領域概要/研究成果紹介も合わせて実施。

サイトビジット

■ サイトビジット

- ・ 原則、採択翌年度の上期に実施。
- ・ CREST研究の立上がり状況を確認、成果イメージ/問題点を共有。
- ・ 場合によりチームリーダーの合意をもとに計画変更を要請。

■ 個別指導

- 清水チーム（第一期「触媒イノヴェティクス創成のための実験・理論・データ科学研究」）
 - ・ 研究進捗が当初計画から大きく外れたため、3年次に総括面談を実施。
 - ・ 未探索領域の予測への活用は不可との判断から「文献データの機械学習による触媒予測モデル/データベースの構築」を中止、新構造活性サイトのデザインにつながる理論研究に注力に変更
- 長谷川チーム（第二期「実験・計算・データ科学融合による塗布型電子材料の開発」）
 - ・ 必要性の低下した「塗工プロセスのその場観察」の比重を下げ、「極薄有機薄膜の構造解析手法開発」を優先することに方針変更。
 - ・ X線に加えクライオTEMの利用を推奨。総括裁量経費を充当し、有機極薄膜のクライオTEM分析を担う米倉グループ（理化学研究所）を2020年に追加。
- 武田チーム（第三期「実験とデータ科学の循環による蛍光体開発」）
 - ・ 狭帯域蛍光体の開発に励起状態の理論的解明が必須であるとの認識から、初期段階で研究グループを追加。
- 内藤チーム（第三期「データ駆動型分子設計を基点とする超複合材料の開発」）
 - ・ 研究開始から2年経過時点で論文発表の少ないことが懸念点であるものの、領域会議にてデータ科学/AI、計測装置、実験を連携させ高分子材料合成の優れた枠組みを構築、新規物質を合成しつつあることを確認。本指導の結果、論文は1⇒41報、特許出願数は1⇒35件となった。

領域セミナー

- 新型コロナ禍でのコミュニケーション不足を緩和するために開催。
- 2～3時間程度のオンライン会議。
- テーマは、研究チームからの要望/総括からの提案に基づき設定。
- 2022年以降はコロナも収束し、アウトリーチ活動等に移行した。

#	テーマ	内容
第一回 2021/2/24	知財	・ 総括「アカデミアの材料研究者にとっての特許：個人的経験から」 ・ 湯浅AD「MTJに係わる知財取得・権利行使の実際」 ・ JST知財部「研究成果を知財につなげる」・「JST知財サポートの紹介」
第二回 2021/7/2	チーム型研究	・ 総括「ERATO-Pj紹介/研究チームのマネジメントへの要望」 ・ 伊藤（耕三）AD「ImPactにおけるマトリクスマネジメント」 ・ 浅見AD「企業におけるチーム型研究開発のマネージメント」
第三回 2021/10/4	チーム間連携	・ 各チームから連携の構想/アイテムを発表 ・ 事後、共同研究計画をチーム間で議論・提案。 ⇒審査後、2022年度（期首）より研究費を配分（総括裁量経費）。

若手発表/若手研究促進ファンド

- 領域会議にて総括・AD・他チームの前で発表・議論してもらう機会を設定。
- レーティング結果に基づき2年度内で研究費（目安200～400万円/人）を個人に（グループ委託研究費として）提供。概ね40歳以下を対象。
- 2019年度の採択倍率～2.2。チーム／個人で重複しないよう配慮の上、2024年度まで継続。下記は採択・配分実績で、11チーム20名に配賦した。

配分年度	採択数	対象者
2020	5	小島・横井（宇佐美T）、田村（大場T）、濱本（清水T）、北原（長谷川T）
2021	4	勝部（大場T）、笠松（山崎T）、井上（長谷川T）、畑野（山本T）
2022	5	古川（清水T）、新屋（水上T）、宇佐美（谷山T）、藤井（山崎T）、Wen（能崎T）
2023	3	大西（谷山T）、高場（長谷川T）、中村（内藤T）
2024	3	松石（武田T）、永田（内藤T）、山野井（能崎T）

共同研究の推奨

- 本領域はターゲット材料分散型 → 材料開発手法をベースに置く連携を推奨。
- 連携本格化のため「共同研究促進ファンド」を設定、2022年度以降8件に配賦。
- 9報の共著論文出版。

#	1	2	3	4
テーマ名	多結晶の組織制御に向けた双晶ネットワーク解析の拡張と粒界形成プロセスの原子レベル解明	結晶構造のドロネー四面体分割に基づく触媒表面シミュレータの開発	機械学習型推定状態図に基づく新規多元系化合物探索	プロトン伝導性膜型反応セルと触媒の融合によるCO ₂ 還元およびC ₃ H ₈ 脱水素化反応の脱平衡収率化
連携チーム	山本T（第二期） 宇佐美T（第一期）	桂T（第三期） 清水T（第一期）	桂T（第三期） 大場T（第一期）	山崎T（第二期） 清水T（第一期）
成果目標	・双晶ネットワーク解析の拡張（正方晶・斜方晶など・他の結晶系に拡張、汎用性高度化） ・粒界形成プロセスの原子レベル解明（粒界形成プロセスのその場観察、ANNポテンシャルを利用した予測技術）	・結晶構造シミュレータの高機能化 ・触媒表面シミュレータの開発	・新規物質探索を指向した状態図作成システムの構築 ・機械学習型状態図に基づいた新規化合物の創製 ・研究補助員の自立実験システムの確立 ・機械学習型推定状態図をリンクさせた電子ラボノートの開発	・従来の不均一触媒では到達不可能な、平衡収率を超えるCO₂還元とC₃H₈の脱水素化反応を実現する ・オペランド赤外吸収分光法を用いた電極-電解質界面反応場を直接観察し、反応中間体を実測、反応律速過程を特定する

共同研究の推奨

(p20スライドの続き)

#	5	6	7	8
テーマ名	巨大磁気回転効果の実現に向けた単結晶スピ ンメカトロニクスの研究	次世代磁気トンネル接 合における高性能界面 マルチフェロイク構造 を用いた低電圧磁化制 御	MI 駆動による相反機 能を有する高分子材料 の合目的探索手法の確 立 ～水中・解体性接 着剤の開発加速の実証 ～	ナノカ学マッピング法 で支援する絶縁ポリ マーブレンド法による 実用的塗布型電子デバ イスプロセス開発
連携チーム	谷山T (第二期) 能崎T (第三期)	谷山T (第二期) 水上T (第一期)	内藤T (第三期) 大場T (第一期)	長谷川T (第二期) 中嶋T (第一期)
成果目標	・ 表面弾性波励起可能な強誘電体単結晶基板への単結晶スピントロニクス材料の成長 ・ 強磁性単結晶の磁気回転効果によるスピン波励起の巨大化 ・ 非磁性金属単結晶の磁気回転効果による巨大スピン流生成とスピントルクの発現 ・ マルチフェロイック界面の磁気電気効果に由来する磁気トルクを用いた新しいスピン波励起法	・ Si基板上に作製を可能とする酸化物基板 (STO など)上に、強誘電体薄膜(谷山)/強磁性ホイスラー合金薄膜(浜屋)/CoMn合金系磁気トンネル接合素子(水上)を積層する技術を独自に開発する ・ 強誘電体薄膜の歪みを利用し、次世代型磁気抵抗メモリ(TMR比～100%以上)の低電圧書き込み(数V以下)動作を実証	・ 相図作成支援AI を活用した相反物性材料の探索手法の開拓 ・ 高強度な水中接着性と解体性を有する接着材料の開発	・ ナノカ学マッピング法の確立と薄膜作製プロセスに対する理解 ・ 素子構造に起因した薄膜秩序の変化の解明とその制御による薄膜デバイス性能の最大化 ・ プロセス条件と層内構造の相関の解明と粗視化モデルによる相分離構造のシミュレーション

シンポジウムの開催

■ 日本物理学会共催シンポジウム＜「革新材料開発」の進展＞

第76回年次大会（2021/3/13）にて研究領域と第一期課題（中間評価後）の成果を紹介。研究総括の領域目的発表の後、各5課題の成果を研究代表者が発表。

■ MRM2021シンポジウムA-4 : New Methodology for Developing Innovative Materials（2021/12/13-15）

第二期課題（中間評価後）の成果紹介、若手発表の促進、産業界へのアピールを目的にMRM2021にシンポジウムを設置。ポスター含め34件を発表。

■ MRM2023シンポジウムA-1 : New Methodology for Developing Innovative Materials（2023/12/12-14）

第一期課題（事後評価後）、第三期課題（中間評価後）の成果紹介、MRM2021同様の目的で、ポスター含め24件を発表。

■ 日本MRSシンポジウムA-1 : 革新材料開発のための新アプローチ（2024/12/16-18）

MEXTのMDXプロジェクトとの合同で企画。全課題の研究代表者口頭発表に加え、若手のポスター含め領域から49件を発表。

成果数値（論文・特許・口頭発表）

	論文			特許			口頭発表 括弧内は招待講演		
	合計	国内	国際	合計	国内	国際	合計	国内	国際
第一期採択 5課題	224	13	211	11	8	3	726 (359)	430 (196)	296 (163)
第二期採択 4課題	185	8	177	19	16	3	745 (226)	515 (119)	230 (107)
第三期採択 4課題	112	5	107	53	33	20	310 (123)	229 (85)	81 (38)
領域合計	521	26	495	83	57	26	1781 (708)	1174 (400)	607 (308)

○本研究領域の主目的はNature、Science等に論文を掲載することではないが、ACS関連（41報、うちJACS 8報）、Chem.Sci.（7報）、Phys.Rev.Lett.（4報）等、高IFの専門誌に出版

6. 代表的成果

以下、代表的な成果5例を紹介する。

本領域の狙いである、
“**材料研究の新スタイル**”
“**使われてこそその材料**”

を具現化した5つの事例である。

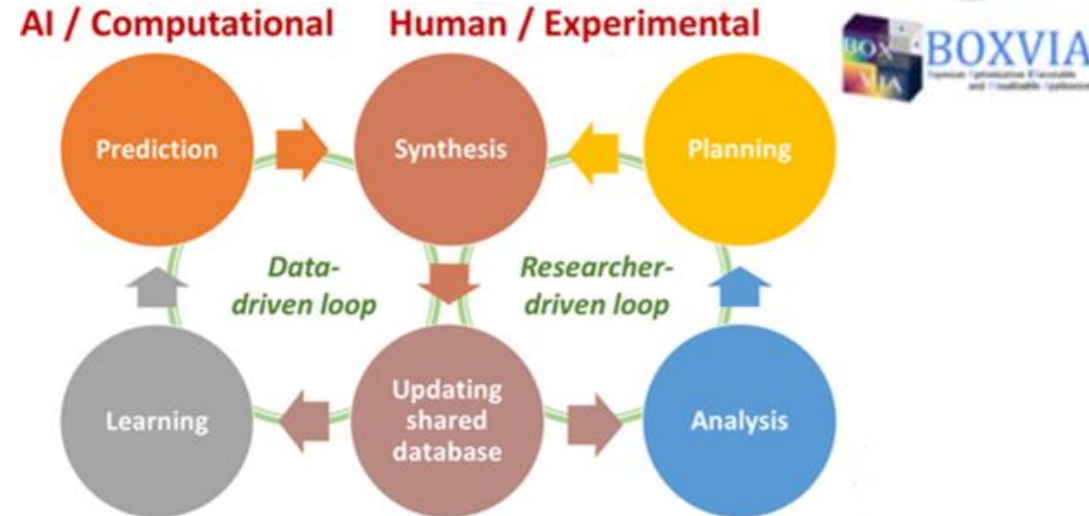
各チームの達成状況については、研究領域事後評価用資料（本文）の「6. 研究領域としての戦略目標の達成状況について」（p.16～29）をご覧ください。

MIを駆使した強磁場生成用バルク超伝導磁石

“Superstrength permanent magnets with iron-based superconductors by data- and researcher-driven process design”
Y.Yamamoto et al, *NPG Asia Mater.* **16**, 29 (2024)

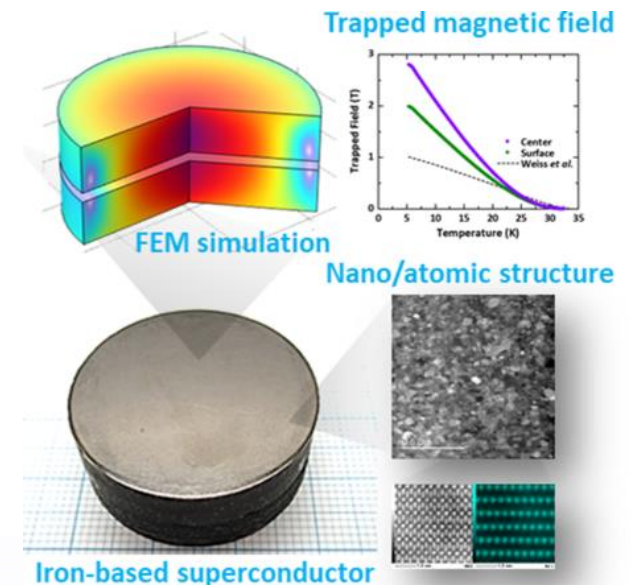
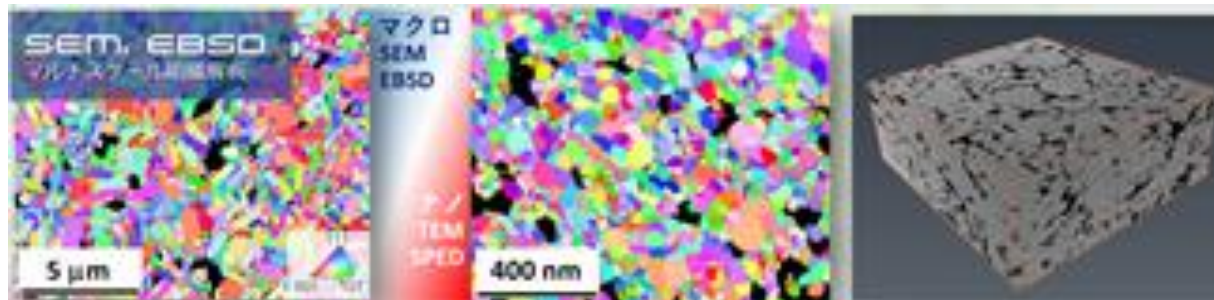
- ・研究者/データ協奏駆動型プロセスにより、強力多結晶型超伝導磁石を創出。
- ・粒界ネットワーク設計により鉄系高温超伝導で世界最高電流性能を達成。(発表当時)
- ・マルチスケール／ディメンジョン最先端電子顕微法による、多結晶焼結過程、3D構造の解析。

■ 研究者／データ協奏駆動型の材料開発プロセス



■ 得られたバルク超伝導磁石と性能

■ nm～mmのマルチスケール組織・組成解析



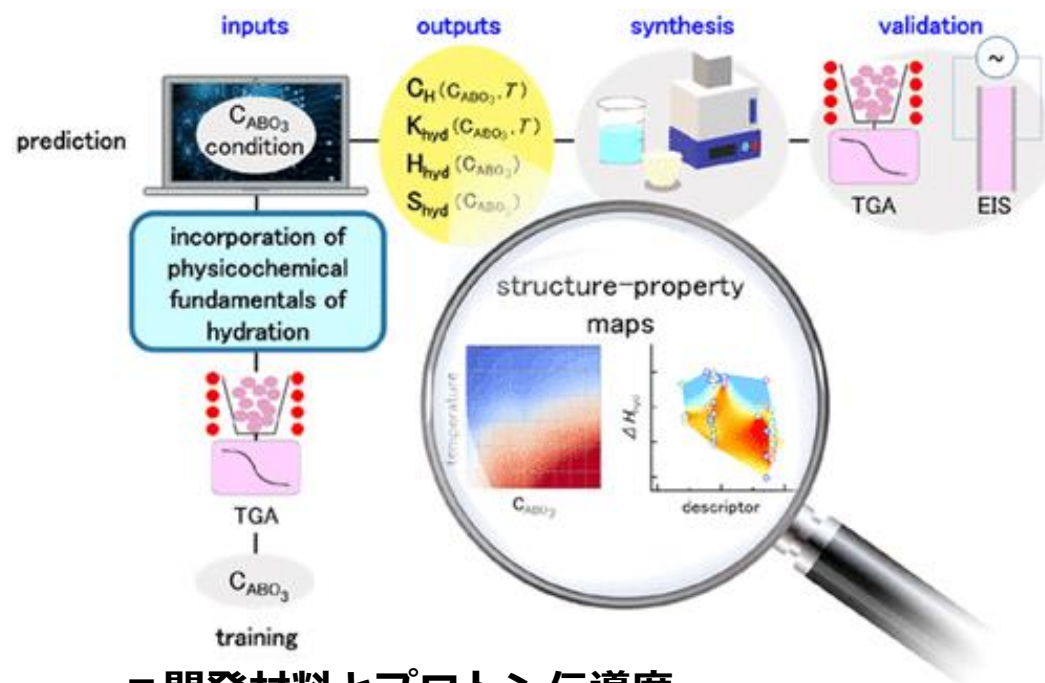
MIを駆使した高プロトン伝導体の創製

“Accelerated discovery of proton-conducting perovskite oxide by capturing physicochemical fundamentals of hydration”

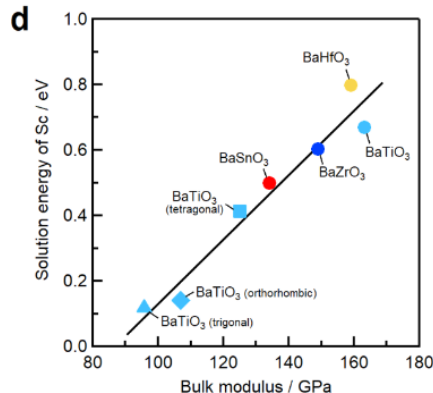
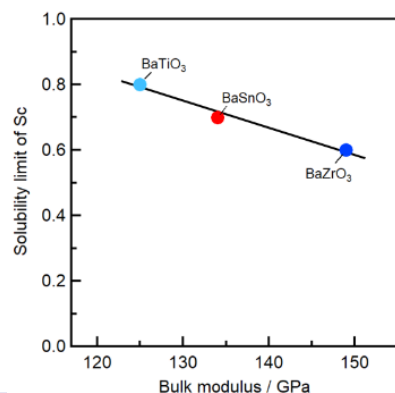
J.Hyodo et al, *ACS Energy Letters* **6**(2021)

- ・水和実験データと機械学習の融合による新たなデータ駆動型材料探索手法、第一原理計算主導による合成可否を考慮した非ペロブスカイト系新規プロトン伝導性無機化合物探索手法を開発。
- ・7つの新規プロトン伝導性酸化物材料を発見し、うち1種は 0.01 Scm^{-1} 以上のプロトン伝導度(@300°C)と高い安定性を有することを見出した。

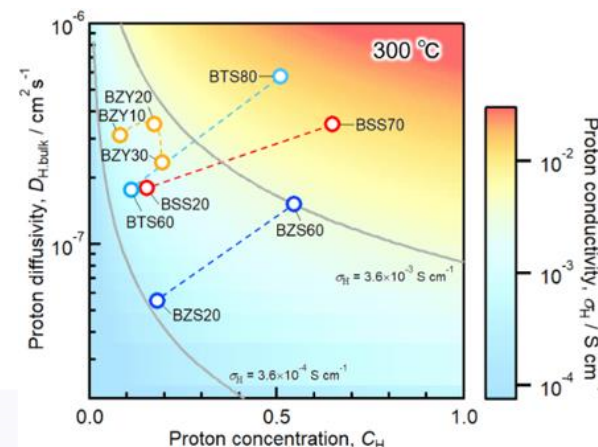
■水和実験データと機械学習の融合による新たなデータ駆動型材料探索手法



■プロトン伝導度と材料探索記述子



■開発材料とプロトン伝導度

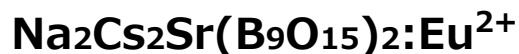
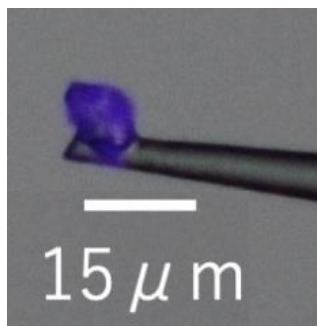


単粒子診断法とMIを駆使した8K用 蛍光体の実現

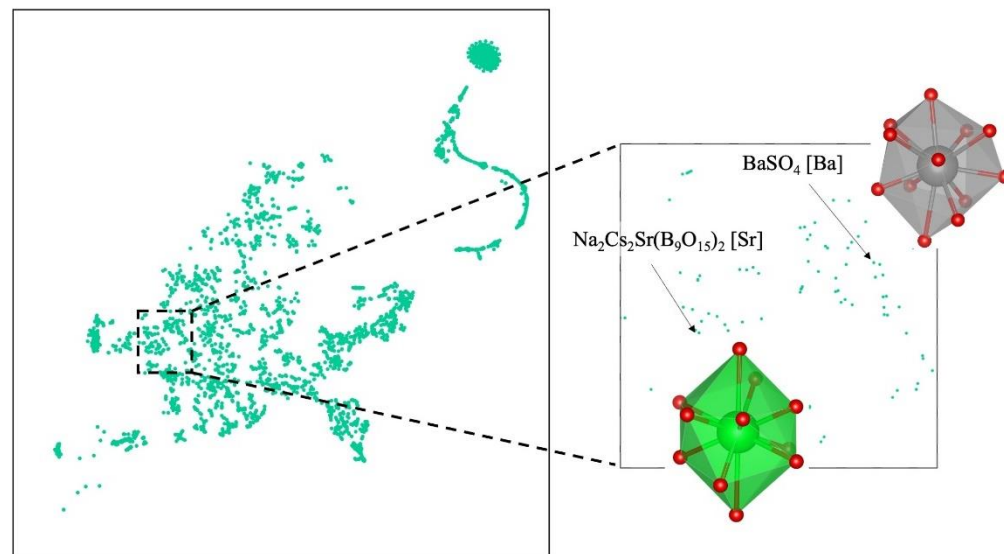
“Narrow-Band Emitting Phosphor
 $\text{Na}_2\text{Cs}_2\text{Sr}(\text{B}_9\text{O}_{15})_2:\text{Eu}^{2+}$ Discovered from Local
Structure Similarity with Sulfate Phosphor”
S.Takemura et al, *J.Phys.Chem.Lett.* **13** (2022)

- ・発光波長や発光半値幅の機械学習モデルと、局所構造の類似性から、候補物質を推測。
- ・単粒子診断による高速実験で合成・評価することで、発光半値幅の狭い蛍光体と温度特性に優れた蛍光体を見出した。
- ・励起状態計算や熱振動効果を取り入れる計算手法開発も行い、開発蛍光体の発光スペクトルの理論的な検証も進めた。

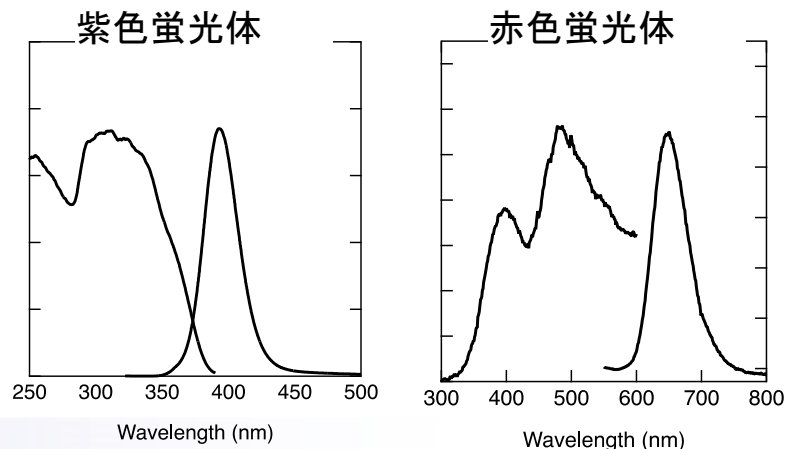
■ 開発した新規蛍光体



■ 機械学習と候補物質推測手法



■ 開発材料の励起・蛍光スペクトル



成果紹介-5：内藤チーム

スタートアップ設立
(準備中)

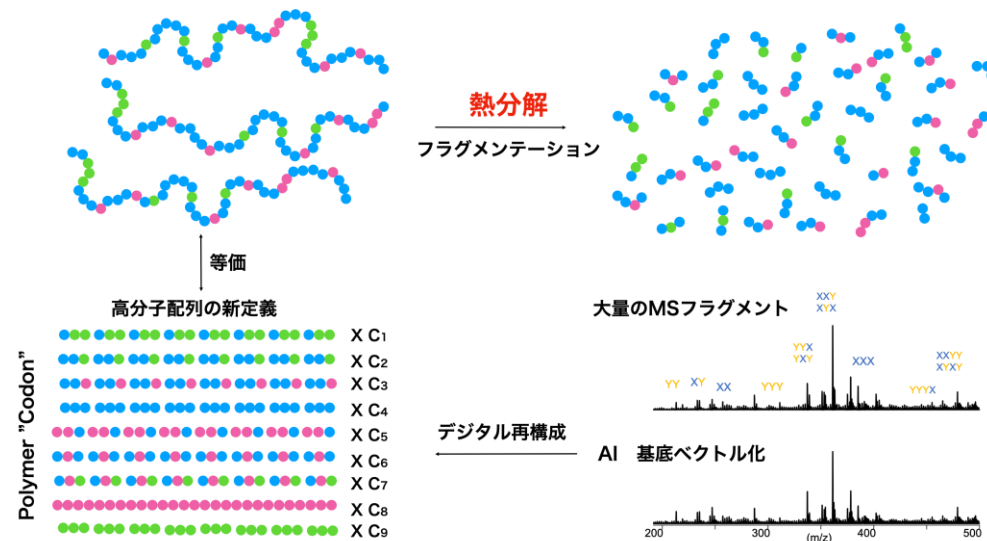
熱分解MSによるポリマーシーケンサーの開発と新規材料

"A data-driven sequencer that unveils latent "codons" in synthetic copolymers"

Y. Hibi, et al, *Chem. Sci.*, **14**, 5619 (2023)

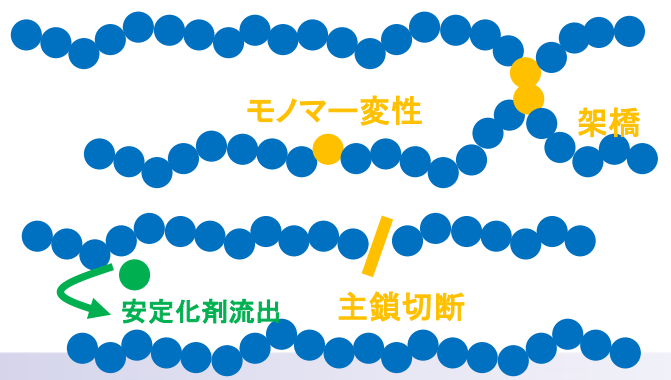
- ・熱分解質量分析のAI解析により、ランダム共重合体の配列を、短配列の組成比で記述する高分子の新たな表現方法を提唱した。さらに、高分子材料の化学劣化の定義について提唱し、自動合成やデータベースを駆使して、データ駆動型による高分子材料開発を行った。
- ・開発した"Polymer Sequencer"をソフトウェアパッケージとして外販すべく、スタートアップの設立準備中。

■ MSフラグメントのAI解析から配列予測

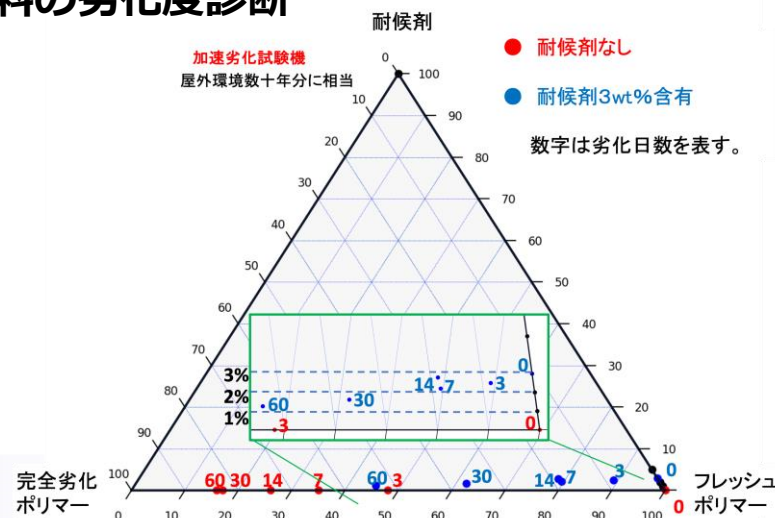


■ 高分子材料の化学的な劣化度をAIで定義

様々な劣化を包括的、定量的に評価する手法を開発



■ 実材料の劣化度診断



7. 総合所感

- 実験＋情報科学などによる「材料研究の刷新」に相応しい成果が得られたと判断。MIの材料研究への活用が極めて迅速に進行し、急速に進歩している世界のトップクラス（US,中国）に離されずに済んだ。
- 本領域の狙いは、材料研究の方法論の刷新であった。それに相応しいと判断される成果は以下のとおり。
 - * 多結晶材料情報学の創始（宇佐美T）、世界記録バルク超伝導磁石（山本T）
 - * 材料探索指針の確立と実例（高プロトン伝導（山崎T）、8 K用発光体（武田T）、熱電（桂T））
 - * 新解析法（ポリマーシークエンサー（内藤T）、クライオTEMによる有機半導体の構造解析（長谷川T））
- 優れた若手研究者が育ってきた：（例）田村氏、横井氏、日比氏
- 懸念点：
 - * 知財の対する認識が不十分
 - * 世界トップを目指す意欲が弱い
- 全体として、領域の目標はほぼ達成できたと判断している。