

JST-LCSシンポジウム
「低炭素技術を取り込んだ街づくり」



街づくりと材料科学

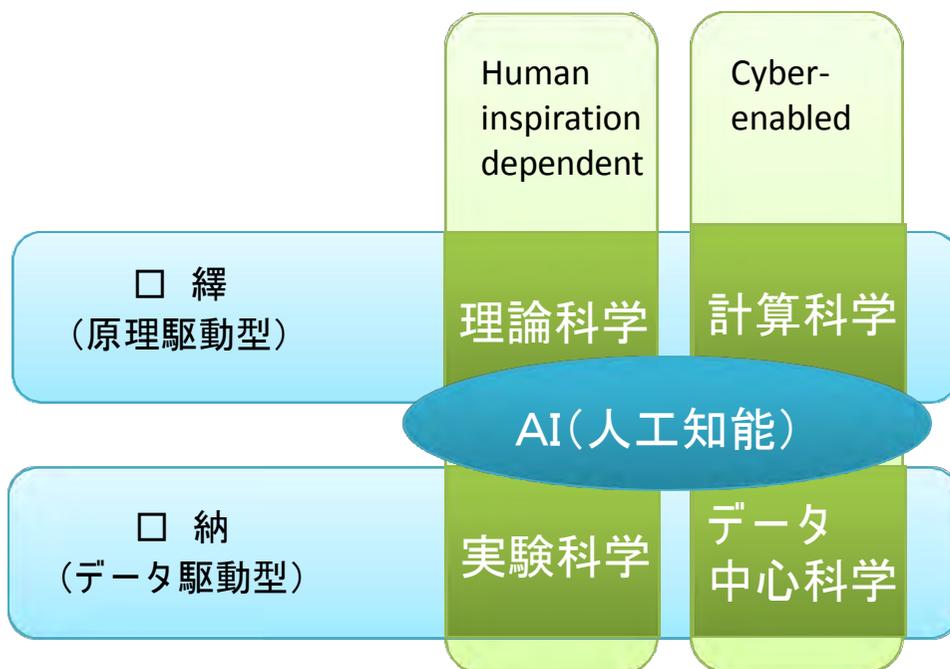
MI²I プログラムマネージャ／JST

伊藤 聡

2016年12月13日

変革する物質・材料研究開発

科学技術を推進する“四輪”



北川源四郎 (情報システム研究機構) の資料を改変

「物質・材料開発」の知能化

これまで
経験者の「閃きと経験」
(偶然いいものが見つかる)

これから
データ駆動による目的指向型の最適材料設計・開発
(これ以上いいものはない)

物質・材料研究開発を超加速化！！

2015年7月1日～ 情報統合型物質・材料開発イニシアティブ
(Materials research by Information Integration Initiative MI²I)

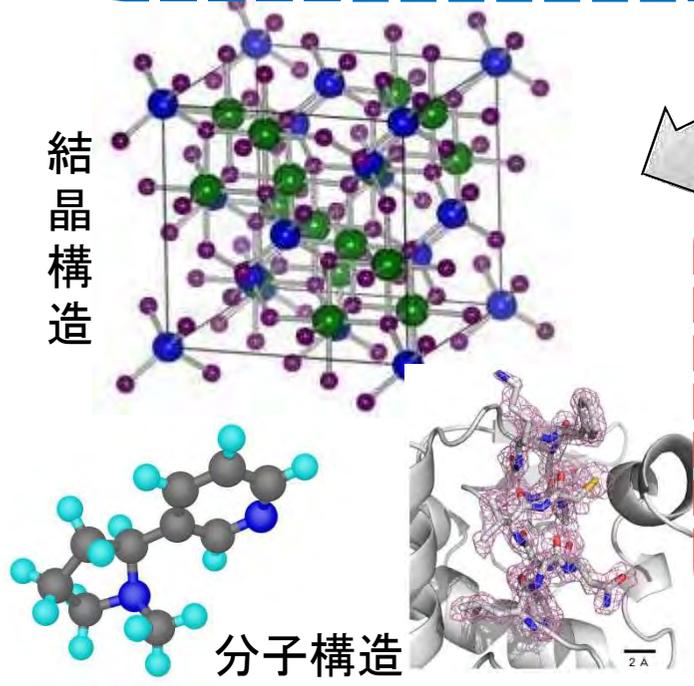
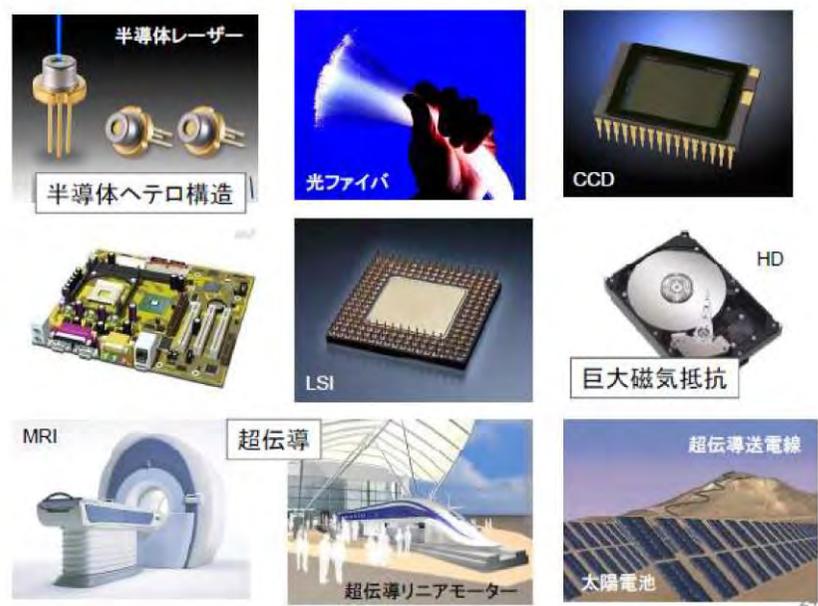
現代社会生活を支える物質・材料

これまでの
物質・材料科学
(理論・実験)

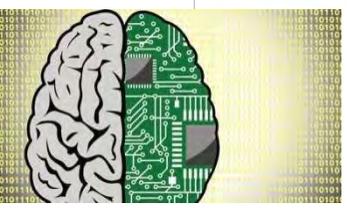
演繹的
手法

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + w(\vec{r}) \right] \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r})$$


基礎科学の研究が生んだ現代の科学技術



帰納的
手法機能的
手法




マテリアルズ
インフォマティクス
(材料に関するデータを駆使)

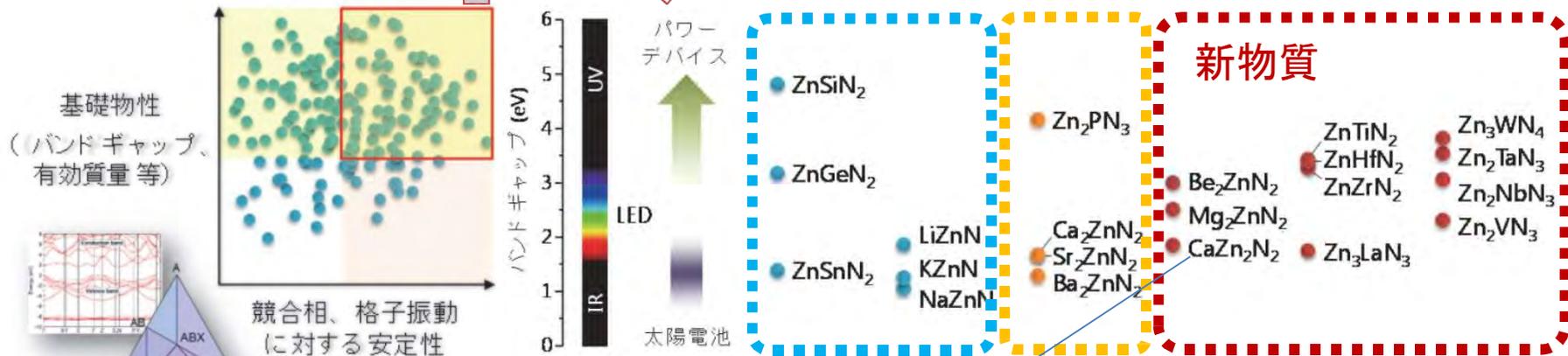
現代社会生活を支える物質・材料

希少元素フリー赤色発光材料

ユビキタス元素のみを用いた発光材料

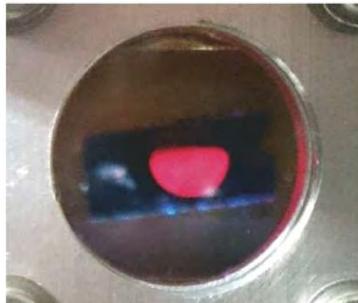
→高輝度LED、高効率太陽電池の実現へ

有望な21種の窒化物半導体を選択



583種類の既知・未知亜鉛窒化物をAI技術により分類

CaZn₂N₂ (実験)



安定性、発光性、発光波長
の特性を予測の上、合成

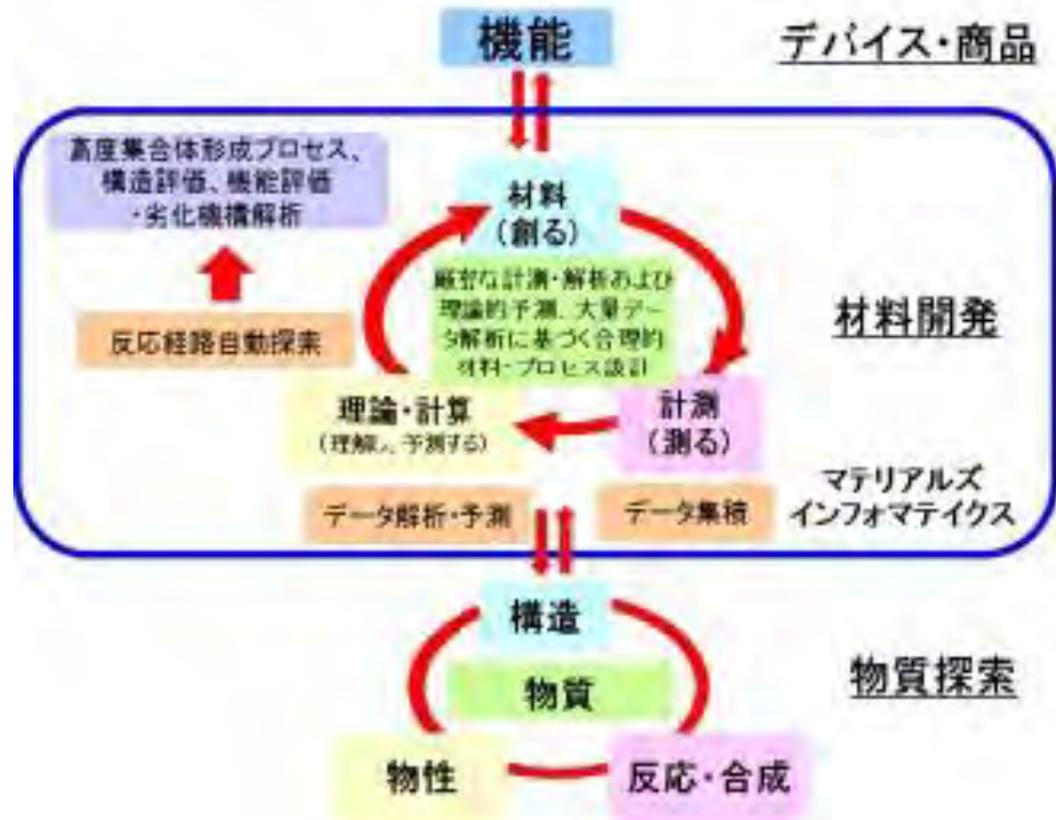


予測通りの発光特性を示す新材料

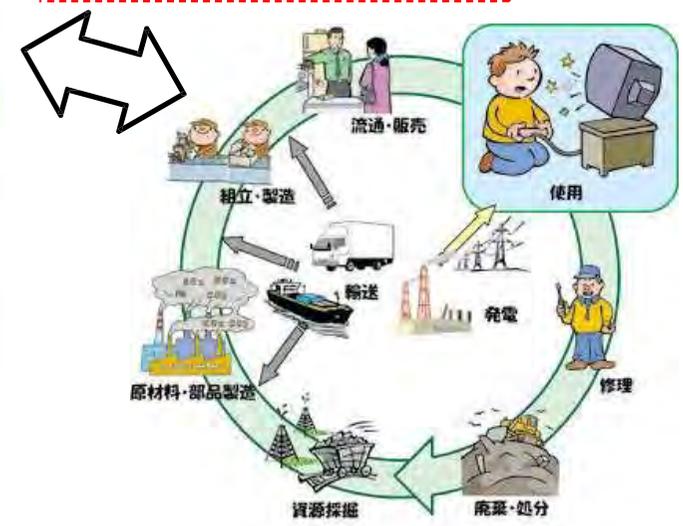
カルシウム、亜鉛、窒素というありふれた元素 (ユビキタス元素) から構成

現代社会生活を支える物質・材料

物質・材料開発サイクル



- 要求性能・機能
- 経済的制約
- 環境的制約
- 事業的制約



データ駆動型材料科学による最適設計の実現

ライフサイクルアセスメント (LCA)