

## 未来社会創造事業 探索加速型探索研究

### 事後評価結果

#### 1. 領域

「共通基盤」領域

#### 2. 重点公募テーマ

革新的な知や製品を創出する共通基盤システム・装置の実現

#### 3. 研究開発課題名

Materials Foundry のための材料開発システム構築とデータライブラリ作成

#### 4. 研究開発代表者名(機関名・役職は評価時点)

知京 豊裕(物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 特命研究員・参事役)

#### 5. 評価結果

本課題の探索研究期間において、当初の目標として設定した材料開発を加速するバーチャルスクリーニング手法の開発、機械学習を取り入れたハイスループット合成・評価、材料とプロセスデータの蓄積、リモートアクセス技術の実証について、ほぼ計画通りに進捗し、Materials Foundry 実現のための要素技術開発に成功したことを高く評価する。特にハイエントロピーアロイについては、高い軟磁性を示す4元系合金の候補を見出したという点で特筆すべき成果と考える。また、本格研究で薄膜合成にプロセス・インフォマティクスを適用するために、従来不可能であったスパッタ過程の薄膜特性を支配する主要因の特定をするための記述子検討という非常に困難な課題解決へ挑戦した。また、本格研究へ向けて東京大学との共同研究を深めハイスループット合成装置に対するリモートアクセス技術の構築を達成するなど体制の充実を精力的に行った。また、世の為、人の為に本課題がどのような新しい価値を提供しうるのかについて、ハイエントロピーアロイ7万件のデータを、計算により自動生成することにより材料探索空間を拡張できることを示し、新材料発見の方法論を明らかにした。合わせて関連する研究テーマのセッションのある国際シンポジウムで自ら講演を行うなど積極的な発信に努めるとともに、国内外の動向把握も着実に実施してきた。

以上のような、探索研究期間での活動および成果によって、当初の計画は順調に進捗しており、今後の研究開発の進展についても大きな期待が持たれる。

以上