

# 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

**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

**研究開発代表者**： 知京豊裕 国立研究開発法人 物質・材料研究機構 (NIMS)・統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS) 特命研究員、参事役

**共同研究機関**： 東京大学 物性研究所

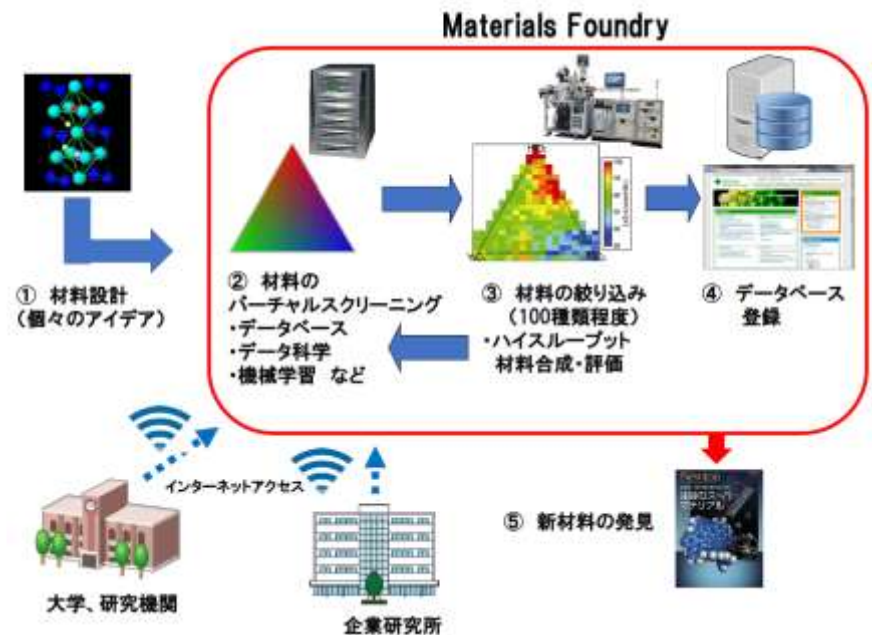


**目的**： 材料開発の共創の場としてMaterials Foundryを構築する。そのためにデータ科学を使ったバーチャルスクリーニング、ハイスループット材料合成・評価を使った材料データライブラリを作成し、新材料開発のワークフローを開発する。

**研究概要**： 未来の材料開発は、その材料によって生まれる成果が重要になる。その成果は、材料から製品までのバリューチェーンの中に組み込まれている。そのために短時間で効率的に材料を探索する必要がある。

データ科学を使って帰納的に材料を探索するマテリアルズインフォマティクスは高速に材料のスクリーニングが可能であることから大きな注目を集めている。しかし、材料合成のプロセスデータは不足し、スクリーニングに必要な記述子の探索も課題である。短期間で効率的な材料開発を進める“Materials Foundry”では、①バーチャルスクリーニングを含む材料設計、②機械学習を使った最適化を行うハイスループット合成・計測、③リモートアクセスによる合成実験などを通じて、材料データライブラリ構築する。

最終的には材料設計、合成、計測、データライブラリ作成を遠隔地から操作し、一貫して材料合成を行うシステム開発を進め、新材料開発に必要なワークフローの開発を進める。



# Realization of Common Platform Technology, Facilities, and Equipment that creates Innovative Knowledge and Products

**R&D Project Title:** Development of Materials Design Workflow and Data Library for “Materials Foundry”

**Project Leader :** Toyohiro Chikyow, Senior Scientist with Special Missions & Associate General Manager, Materials Data & Integrated System (MaDIS), National Institute for Materials Science( NIMS)

**R&D Team :** Department of Advanced Materials Science, Graduate School of Frontier Sciences, University of Tokyo



## Summary :

**Purpose:** “Materials Foundry” where the materials design tools and materials data are shared is proposed as the place for new materials discovery.

**Social Need:** New materials are in the value chain of the products and faster development is inevitable in the market.

**Challenge:** To accelerate the new materials discovery, vertical screening with materials descriptors, high throughput experimentation with machine learning are adopted. The obtained data is kept in the storage and reused for another screening. Also the high throughput equipment is accessed via internet and operated by another Institutes. Finally the workflow of materials design is completed in the “Materials Foundry”.

