# データ駆動型材料研究の展望

## Prospects for Data-driven Material Research

科学技術振興機構 研究開発戦略センター　○福井 弘行

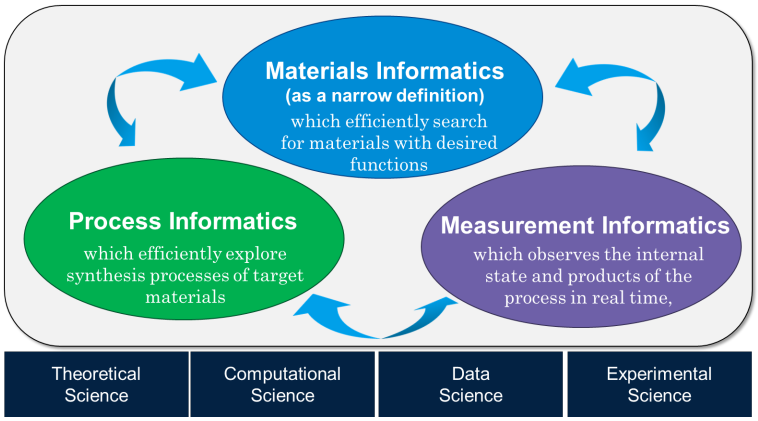
JST-CRDS　°Hiroyuki Fukui

E-mail: hiroyuki.fukui@jst.or.jp

SDGs の達成や Society 5.0 の実現に向けて、材料開発に対する要求がますます高度化するなか、新物質・新材料に対するデータ分析や機械学習の手法を取り入れたマテリアルズ・インフォマティクスに期待が寄せられている。マテリアルズ・インフォマティクスは、広義には、従来からの実験科学、理論科学、計算科学と、近年の進展が著しいデータ科学を、統合的・融合的に活用することによる物質・材料科学の諸問題を解明するための科学技術的手法と定義される。

これまで「何を作るか？」、すなわち、新物質・新材料の予測・設計において成功例が多く出てきており、新材料開発において強力なツールとなることが実証されてきている。しかし、候補となる新材料の組成・構造が予測されているものの、その材料を「実際に作れるのか」、「どう作るのか」までは明確にできていない例も散見される。今後は、「どう作るか？」を検討するプロセス・インフォマティクスや「何ができているか？」を検討する計測インフォマティクスと密に連携させ、新たなステージで物質・材料創製研究に取り組むことが重要になってくる。

本講演では、データ科学・シミュレーション技術の高度化、プロセスのリアルタイム観測技術、ハイスループット実験技術など関連する研究開発動向について俯瞰するとともに、JST-CRDS が 2021 年 6 月に発行した戦略プロポーザル [1]についても概要を紹介する。




参考資料

1)　JST-CRDS 戦略プロポーザル「材料創製技術を革新するプロセス科学基盤～プロセスインフォマティクス～」（2020 年 6 月）　CRDS-FY2021-SP-01
https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2021-SP-01.html

2)　JST-CRDS「デジタルトランスフォーメーションに伴う科学技術・イノベーションの変容」−The Beyond Disciplines Collection−（2020 年 4 月）　CRDS-FY2020-RR-01
https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2020-RR-01.html

© 2022年 応用物理学会