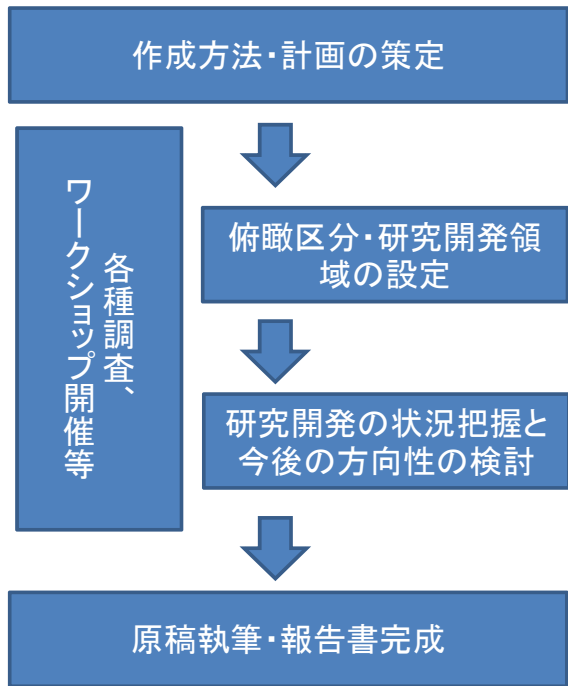


分野別俯瞰報告書の主な作成プロセス



主な活動

- 外部専門家との情報交換
- 情報収集(論文・参考資料、学会参加など)
- 各種DBによるファクト分析
- CRDSメンバーによる議論(ユニットミーティング、フェロー会議等)

外部専門家の協力

- インタビュー: 延べ215人
 - WS等開催: 65回
 - WS参加者: 延べ808人
 - 原稿執筆協力者: 延べ540人
- (5分野の合計)

第3章 研究開発領域の記載例

研究開発の俯瞰報告書
ナノテクノロジー・材料分野 (2015年)

3.5.7 データ駆動型材料設計 (マテリアルズ・インフォマティクス)

(1) 研究開発領域の簡潔な説明

計算科学による特性予測、それを実証するハイスループット材料合成と評価のデータを統合管理する材料データベースや機械学習などを統合的に活用した材料探索・設計の取り組み全般を指す研究開発領域である。実験、計算で得られた材料に関する知識とデータを駆使して、統計的手法により物質・材料の機能を規則を探り、それを通して具体的に新物質、新材料の「発見」を加速する。究極理論研究者の参画により、規則の背景にある材料特性を支配する法則を「発見」可能な材料「設計」を可能とする系統的アプローチを構築することを指すもの。

(2) 研究開発領域の詳細な説明と国内外の動向

【背景と意義】

計算科学に基づいたマテリアルズ・インフォマティクスの概念は2000年頃かかれていたが、当時は取り扱える原子数や精度にも限界があった。また大量のデータと材料科学の問題をマイニングする手法も未開拓であり、そのアイデアの実践的であった。しかし、ここ数年の計算機の進歩と大量なデータを取り扱える環境の状況が劇的に変えつつある。2011年、米国で Materials Genome Initiative として、計算科学、データマイニングを融合させたデータ駆動型材料設計プラットフォーム(スクリーニング)が再注目されている。

つまり、計算機、アルゴリズムの発展により、実験、理論と鼎立する第3の「計算科学」が、物質・材料研究においても解析や予測の手段として、重を占めるようになった。さらに、近年それぞれ3本の柱を束ねる第4の科学として「データ科学」の重要性が認識されつつある。そのような時代背景において、1) 検出に代表される情報科学・技術の深化、2) 第一原理計算による物質データ解析、3) 大型施設や高度実験装置を用いた効率的合成・評価技術の深化と相俟、材料研究においてもシミュレーション技術が関連する実験的手法やデータ融合させ、「データ科学」を取り込むことにより、新機能材料のスクリーニング、開発コストを大幅に下げることができ、日本の産業競争力強化にもつながり期待されている。

2015年版では計**355**の研究開発領域を取り上げた

(6) 国際比較

国・地域	フェーズ	現状	トレンド	各国の状況、評価の際に参考にした根拠など
日本	基礎研究	△	ノ	基礎研究に注力している例として、科研費新学術領域のスペースモデリング(代表者東田真一)とナノ構造情報(代表者京浜中功)が挙げられる。東北大学(代表者松本元彦)が医学進歩による基礎研究を開始しているほか、学際的・萌芽的な試みが始まっている。日本金属学会では公募シンポジウムが開催され、セラミックス協会では学術論文発表等の企画もはじまっている。しかし、国際会議で発表するレベルの研究者数は、米国、欧州に比べて未だ少ない。
	応用研究・開発	△	ノ	物質・材料研究機構グループによる3次元コンピュータ材料合成手法の開発とそれを応用したゲート電極材料の開発や材料開発への応用などを基に、スタートアップ企業、株式会社COMETが2007年に設立され、産官における材料の開発支援などを行っている。特に一定の競争を保ちつつ産官連携が変化できる方式では、非常に強い競争力を持つ特異的な材料も見つかったことが挙げられる。また、移動するマスクの穴の形状を変えて3次元コンピュータ材料合成の手法をさらに発展させたコンピュータリアルタイム印刷技術、コンピュータリアルタイム装置が出版され、材料開発を加速している。
	産業化	△	ノ	電気、自動車、重工、素材メーカーなどで、効率的な材料探索・開発への期待が大きく膨らんでいる。計算科学を主導し新材料を発見した好例として、シャープと京大の産学連携による長寿命電池を示すLiイオン電池用正極材料の開発が挙げられる。ハイスループット材料合成やデータ解析を受注するような企業は育っていない。
米国	基礎研究	○	ノ	プロジェクトが材料開発の効率アップを目指し工学的色彩が強いため、基礎研究としての連携は十分とは言えない。しかし、数学や情報科学研究と材料科学との連携は開始しており、学会シンポジウムや国際会議も頻繁に行われている。参考書や専門誌の発行計画も米国の主導で進んでいる。
	応用研究・開発	○	ノ	NISTではノースウェスタン大学、シカゴ大学、アルゴンヌ国立研究所などと連携して、「Center for Hierarchical Materials Design: CHiMaD」を設立し、計算科学を使ったマルチスケールでの材料特性、相図、熱力学データなどの情報を提供している。
	産業化	△	ノ	米国では、ハイスループット材料合成やそのデータ解析に関するスタートアップ企業が存在する。代表的なものは電池材料の開発を行うWildcat社、半導体デバイス製造の材料開発を専門に営むIntermolecular社などである。この会社は材料のデサインコンセプトの構築、300mmのSi基板を使ったハイスループット材料合成、得られたデータを管理しその中から新材料を見つけた。データ解析ソフトウェアを統合したプラットフォームを提供している。バイオから触媒まで幅広くマテリアルインフォマティクスを展開したSymyx社は1994年に設立され急成長した会社だが、2010年には一部がハイスループット材料合成を専門にFresolite社となり、データ駆動型材料開発部門はAccelrys社に移り、現在でも積極的な材料開発を行っている。
欧州				欧州は、第一原理計算の理論構築やソフトウェア開発において強みがあり、近年になってそれをinformaticsに近づけようという意識が強い。たとえばドイツResearch Hubの理論的Sub-領域の材料科学

国際比較について

- フェーズ
 - 基礎
 - 基礎研究フェーズ: 大学・国研などの基礎研究のレベル
 - 現状
 - 応用研究・開発フェーズ: 研究・技術開発(プロトタイプのもの開発含む)のレベル
 - 産業
 - 産業化フェーズ: 量産技術・製品展開力のレベル
- 現状
 - ◎: 他国に比べて顕著な活動・成果が見えている
 - : ある程度の活動・成果が見えている
 - △: 他国に比べて顕著な活動・成果が見えていない
 - ×: 特筆すべき活動・成果が見えていない
- トレンド
 - ↗: 上昇傾向 →: 現状維持 ↘: 下降傾向