

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： データ駆動型材料探索に立脚した新規半導体・誘電体の加速的開拓

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

大場 史康（東京工業大学科学技術創成研究院 教授）

主たる共同研究者

谷口 博基（名古屋大学大学院理学研究科 准教授）

田村 亮（物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 主幹研究員）

野瀬 嘉太郎（京都大学大学院工学研究科 准教授）

平松 秀典（東京工業大学科学技術創成研究院 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A 優れている

○総合評価コメント：

本プロジェクトは、国内外の競合するマテリアルズ・インフォマティクス（MI）に対し精度で優位性のある第一原理計算データベースと種々のサンプリング法を駆使した機械学習法、さらには相図作成効率化の手法を開発し、新しい半導体・誘電体の探索方法論を確立したという点で、優れている。特に相図作成の効率化手法は、いち早く研究領域内の他チームにも浸透させており、材料開発方法のイノベーションの成功事例の一つに挙げることができる。また論文や知的財産権の成果も十分にある。

しかしながら、このチームから際立った特性を有する、あるいは有すると予想される材料が提唱・実現されていないこと、有力な研究者から構成されながら実験チーム間の相乗効果による成果が明確には見られなかったことは残念である。

本研究で開発した計算データベースを活用した MI による新機能物質の探索や新しい記述子の抽出などの手法は、今後の材料科学に広く展開されるものと期待している。また、能動学習の実験プロセスへの応用は実利的な効果も大きいと見込まれることから、現場への普及を具体的に計画し、進めていただきたい。