

戦略的創造研究推進事業
—さきがけ(個人型研究)—

研究領域

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」

研究領域事後評価用資料

研究総括: 常行 真司

2021年10月

目 次

1. 研究領域の概要	1
(1) 戦略目標	1
(2) 研究領域	1
(3) 研究総括	2
(4) 採択研究課題・研究費	3
2. 研究領域および研究総括の設定について(JST 記載)	8
(1) 研究領域の設定について	8
(2) 研究総括の設定について	8
3. 研究総括のねらい	9
4. 研究課題の選考について	10
(1) 選考の方法と過程	11
(2) 選考結果	12
(3) 戦略目標を達成する上で必要な研究課題、研究者の参加が適切に得られたか	13
5. 領域アドバイザーについて	15
(1) 領域アドバイザー一覧	15
(2) 人選にあたっての考え方について	15
6. 研究領域のマネジメントについて	17
(1) 研究課題の進捗状況の把握と評価、それに基づく研究課題の指導	17
(2) 研究課題間や他の研究領域、国内外の他の研究機関、異分野との連携・協力の推進	20
(3) 研究費配分上の工夫	21
(4) 研究領域としての人材の輩出・成長の状況	23
(5) その他マネジメントに関する特記事項	31
7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について	32
(1) 研究総括のねらいに対する研究成果の達成状況	32
(2) 研究領域全体として見た場合の特筆すべき研究成果	33
(3) 研究成果の科学的・技術的な観点からの貢献	45
(4) 研究成果の社会的・経済的な観点からの貢献	45
(5) 本研究領域に続く研究資金の獲得状況	45
(6) その他の特記事項	46
8. 総合所見	47
(1) 研究領域のマネジメント	47
(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況	47

(3) 本研究領域を設定したことの意義.....	48
(4) 科学技術イノベーション創出に向けた、今後への期待、展望、課題.....	48
(5) 所感、その他.....	49

1. 研究領域の概要

(1) 戦略目標

- 目標 1： 多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製
- 目標 2： 情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創製
- 目標 3： 分野を超えたビッグデータ利活用により新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術及びそれらを支える数理的手法の創出・高度化・体系化
- 目標 4： 環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計「分子技術」の構築

(2) 研究領域

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」（2015 年度発足）

計測・分析技術の進歩、コンビナトリアル合成などのハイスループット実験手法の発展、スーパーコンピュータに代表される計算機能力の飛躍的向上、第一原理計算などの強力な計算科学から得られる高精度な知見などにより、物質・材料科学における原理解明が進むとともに関連するデータが短時間で大量に得られるようになっている。また、大量かつ複雑なデータからそれらの持つ意味や新しい知識を引き出す情報科学技術の進展もめざましいものがある。

本研究領域では、これら実験科学、理論科学、計算科学、データ科学の連携・融合によって、それぞれの手法の強みを活かしつつ相互に得られた知見を活用しながら新物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクスの基盤構築と、それを牽引する将来の世界レベルの若手研究リーダーの輩出を目指す。

具体的には、

- ① 社会的・産業的に要求される機能を実現する新物質・材料の発見の促進、設計指針の構築
- ② 大規模・複雑データから構造・物性相関や物理法則を帰納的に解明する手法の開発とそれを用いた新材料の探索・設計
- ③ 未知物質の物性を高精度に予測し、合成・評価の実験計画に資する候補物質を高速・大量にスクリーニングする手法の構築
- ④ 多種多様な物質データを包括的に整理・記述・可視化する新しい物理的概念や方法論の構築
- ⑤ データ科学と物質・材料科学の連携・融合に資する物性データ取得・蓄積・管理手法の開発、データベースの整備、各種計算・解析ツールの構築

などの研究を対象とする。

研究推進にあたっては、情報科学研究者と物質・材料科学研究者等が連携し互いに触発しながらシナジー効果を得る体制を整え、エネルギー、医療、素材、化学など多くの産業応用に資する物質・材料の設計を劇的に加速しうる先駆的・革新的な研究を推進し、物質・材料科学にパラダイムシフトを起こすことを目指す。

(3) 研究総括

常行 真司 (東京大学 大学院理学系研究科 教授)

(4) 採択研究課題・研究費

表1から表3に、各採択年度別に採択課題及び研究費の一覧を示す。

表1 採択研究課題一覧 (1/3)

(百万円)

採択年度	研究者	所属・役職 上段：研究終了時 下段：採択時	研究課題	研究費
2015年度	大久保 勇男	物質・材料研究機構 機能性材料研究拠点・ 主任研究員 MANA 研究者	第一原理計算・インフォマ ティクス主導型新物質開拓	29
	烏山 昌幸	名古屋工業大学大学院 工学研究科・准教授 同上	機械学習に基づく効率的な 界面物性探索法の開発	26
	小林 正人	北海道大学大学院 理学研究院・講師 同上 助教	化学反応における多元系の シナジー効果の評価と触媒 探索への応用	33
	小原 真司	物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点・ 主任研究員 同機構 先端的共通技術部門・ 主任研究員	機能性不規則系物質の原 子・電子レベル構造解析基 盤の構築	37
	是常 隆	東北大学大学院 理学研究科・准教授 理化学研究所 創発物性科学研究センター・ 上級研究員	有効模型化を利用したマテ リアルズインフォマティク ス	28
	佐伯 昭紀	大阪大学大学院 工学研究科・准教授 同上	超高速スクリーニング法を 駆使したエネルギー変換材 料の探索	37
	世古 敦人	京都大学大学院 工学研究科・准教授 同上	機械学習手法による合理的 な材料物性予測技術の構築	37
	袖山 慶太郎	物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門・ 主任研究員 京都大学 学際融合教育研究推進センター・ 特定研究員	高精度 DFT-MD 法とデータ科 学を融合させた新規高濃度 電解液探索	37
	瀧川 一学	北海道大学大学院 情報科学研究科・ 准教授 同上	大規模データに基づく電子 物性予測のための深層学習 技術の創出	28
	Dam Hieu Chi	北陸先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科・ 准教授 同上	実験・計算データのマイニ ングと精密結晶構造解析と の融合による 逆問題可解な 材料設計技術の開発	37
	塚田 祐貴	名古屋大学大学院 工学研究科・ 准教授 同科 助教	材料開発を加速するための 組織シミュレーション基盤 技術の構築	23
	中島 千尋	科学技術振興機構 さきがけ研究者 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構・ 助教	物性測定における『熟練』 と機械学習の統合的アプロ ーチ	20

	中村 壮伸 ¹⁾	産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデ ザイン研究センター 研究員 東北大学 原子分子材料科学高等研究機構・ 助教	トポロジカルデータ解析に 基づくアモルファス構造の 包括的記述と特徴抽出	34
	畑中 美穂	奈良先端科学技術大学院大学 研究推進機構 特任准教授 近畿大学 理工学部理学科・助教	発光・消光経路のデータベ ース化によるランタノイド 発光センサーの分子設計指 針の構築	37
	山地 洋平	東京大学大学院 工学系研究科・特任准教授 東京大学大学院 量子相エレクトロニクス研究センター・ 特任講師	強相関第一原理電子状態計 算と分光学実験データの統 合によるトポロジカル物質 の理論物質設計手法創出	37
			研究費 計(a)	480

¹⁾ ライフイベントにて研究期間を2ヶ月延長、第二期生終了時に評価を実施。

表 2 採択研究課題一覧(2/3)

(百万円)

採択年度	研究者	所属・役職 上段：研究終了時 下段：採択時	研究課題	研究費
2016 年度	池野 豪一	大阪府立大学大学院 工学研究科・准教授 同大学 21 世紀科学研究機構・ 助教	機械学習と第一原理計算による新規スペクトル解析技術の確立	32
	緒明 佑哉	慶應義塾大学 理工学部・准教授 同上	はく離挙動を制御する指針の確立によるナノシート材料の機能設計	37
	大塚 朋廣	東北大学 電気通信研究所・准教授 理化学研究所 創発物性科学技術センター・研究員	機能性固体微細材料のマイクロレベル電子物性解析基盤技術の構築	37
	熊谷 悠	東京工業大学 科学技術創成研究院・准教授 同大学元素戦略研究センター・ 准教授	半導体材料開発のための計算データベース構築	39
	坂上 貴洋	青山学院大学 理工学部・准教授 九州大学大学院 理学研究院・助教	高分子物質のトポロジカル構造解析による新規物性の探索と設計	11
	志賀 元紀	岐阜大学 工学部・准教授 同上・助教	物質・材料の微細構造計測におけるインフォマティクス技術の開拓	32
	辻 直人	理化学研究所 創発物性科学研究センター・研究員 同上	強相関電子系に対する機械学習を用いた高精度量子多体計算の新たな数値アプローチの開拓	27
	原潤 祐	北海道大学大学院 理学研究院・助教 同大学理学研究院化学部門・ 博士研究員	円錐交差データベースに基づく蛍光分子自動設計法の開発	36
	Randy Jalem	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 主任研究員 同機構ナノ材料科学環境拠点・ ポスドク研究員	材料シミュレーションとインフォマティクスを用いたデータ駆動型リチウムイオン導電性セラミックスの探索	32
	本郷 研太	北陸先端科学技術大学院大学 情報社会基盤研究センター・准教授 同大学 先端科学技術研究科・助教	ベイズ事後分布を探索重みに活用した物質構造探査の予測性向上	36
	溝口 照康	東京大学 生産技術研究所・教授 同研究所・准教授	情報科学手法を利用した界面の構造機能相関の解明	36
	森 寛敏	中央大学 理工学部・教授 お茶の水女子大学 基幹研究院・准教授	特定混合比で発現する特異物性を利用した新材料創成のための第一原理分子シミュレーションと機械学習の連携	38
				研究費 計(b)

表 3 採択研究課題一覧(3/3)

(百万円)

採択年度	研究者	所属・役職 上段：研究終了時 下段：採択時	研究課題	研究費 (*)
2017 年度	相澤 直矢 ²⁾	理化学研究所 創発物性科学研究センター・基礎科学特別研究員	励起状態の仮想スクリーニングによる革新的有機半導体の探索と実用	40
		九州大学 稲盛フロンティア研究センター・特任助教		
	五十嵐 康彦	筑波大学大学院 システム情報工学研究科・准教授	スパースモデリングによる物質・材料設計のための基盤技術の構築	30
		物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門・NIMS ポスドク研究員		
	井上 和俊	東北大学 材料科学高等研究所・講師	離散・位相幾何学的手法による界面構造予測と粒界指標の確立	29
		同上・助教		
	岩崎 悠真	産業技術総合研究所 NEC-産総研量子活用テクノロジー連携研究ラボ・特定集中研究専門員	材料開発に特化した高精度ホワイトボックス型機械学習手法の開発と、そのスピン熱電材料開発への応用	29
		日本電気株式会社 IOT デバイス研究所・研究員		
	加藤 俊顕	東北大学大学院 工学研究科・准教授	機械学習を活用したナノカーボンアトミックエンジニアリング	36
		同上		
清水 亮太	東京工業大学 物質理工学院・准助教	自律的ものづくりを導入した金属水素化物の革新的新機能創出	37	
	同院・特任講師			
鈴木 耕太	東京工業大学 物質理工学院・助教	合成-情報科学の融合によるリチウムイオン導電体の探索手法開拓	36	
	同上			
鈴木 通人	東北大学 金属材料研究所・准教授	多極子理論とデータ科学の融合による物質設計	36	
	理化学研究所 創発物性科学研究センター・研究員			
清野 淳司	東京都立大学 理学部・特任准教授	量子化学と情報学との融合による次世代密度汎関数理論と均一系触媒における反応予測システムの開発	36	
	早稲田大学理工学術院・次席研究員 (研究院講師)			
田中 大輔	関西学院大学 理工学部・准教授	ハイスループット合成・評価システムと機械学習の統合による革新的太陽電池材料の探索	38	
	同上			
永村 直佳	物質・材料研究機構 先端材料解析研究拠点・主任研究員	多次元 X 線イメージングを活用した原子層機能デバイスの物性制御法探索基盤プロセスの構築	20	
	同拠点・研究員			

²⁾ コロナ延長支援にて研究期間を6ヶ月延長

林 智広	東京工業大学 物質理工学院・准教授	マテリアルズインフォマテ イクスと実験の融合による 階層的マルチスケールバイ オ界面の解析と医療用バイ オマテリアルの開発	37
	同上		
林 博之	京都大学 大学院 工学研究科・助教	高効率な新物質発見のため の合成手法推薦システムの 構築	34
	同上		
柳井 毅	名古屋大学 トランスフォーマティブ生命分 子研究所・教授	人工ニューラルネットワー ク理論に基づく第一原理量 子多体シミュレータの開発	36
	自然科学研究機構 分子化学研究所・准教授		
		研究費 計 (c)	474
		研究費 総計 (a+b+c)	1347

*各研究課題とも 3.5 年間の見込み総額

2. 研究領域および研究総括の設定について

(1) 研究領域の設定について

戦略目標 1 は、天然ガスの大半を占めるメタン (CH₄) や、低級アルカン (C_nH_x : n=2, 3) 等の多様な天然炭素資源を、化成品原料やエネルギーとして活用するための革新的触媒を創製するため、物質創製、計測・解析、理論計算、実験・計算データを利活用した物質探索の連携による、触媒反応の指導原理解明へ向けた共通基盤を確立することを目指すものである。

戦略目標 2 は、分野を超えたビッグデータの利活用により、新しい科学的発見や社会的課題解決に資する新たな知識や洞察を得るための、革新的な情報科学技術や数理的手法の創出・高度化・体系化を行うことで、我が国の産業競争力強化や研究基盤の整備への貢献を目指すものである。

戦略目標 3 は、将来のエレクトロニクス産業の基盤を確立するため、新規機能性材料の適用可能性の追求等による素材技術 (先端材料や部材の開発及び活用に必要な基盤技術) の創出を目指すものである。

戦略目標 4 は、精密合成技術と理論・計算科学との協働により、新規機能性物質を自在に設計・創成する技術等を構築し、「分子技術 (物理学、化学、生物学、数学等の科学的知見を基に、分子を設計、合成、操作、制御、集積することによって、分子の特性を活かして目的とする機能を創出し、応用に供するための一連の技術)」の構築を目指すものである。

有用な機能や性質を持つ新物質・新材料の研究開発は、有機化合物、無機化合物、金属・合金、高分子化合物、アモルファスなどあらゆる物質系において世界的な競争が激化している。新物質・新材料の研究開発は、エネルギー、医療、素材、化学等の様々な産業の源であると同時に、新機能・新現象の発見が基礎科学の発展にも寄与するため、我が国が将来にわたって成長し発展していくため、継続的な推進が求められている。

以上より本研究領域は、戦略目標 1、2、3 及び 4 の達成に向けて適切に設定されている。

(2) 研究総括の設定について

常行真司氏は、物性理論および計算物質科学等の分野において、第一線で活躍する研究者であり、電子論に立脚した第一原理物性シミュレーション手法を開発し、具体的な物質の物性をミクロな観点から探ることによる、物性物理学の新展開を切り開いてきた。特に、分子動力学法や第一原理電子状態計算などのコンピュータシミュレーション手法の開発と、それを用いた超伝導、磁性、触媒反応、半導体界面、超高压下の物性等の多様な物性研究において多くの研究成果を挙げており、2001 年には原子間力の性質や量子効果の理解に基づく未知の結晶構造を予測する研究として、超高压下物性の理論的研究への貢献

により、日本 IBM 科学賞（物理分野）を受賞している。以上から、同氏は本研究領域が対象とする物質・材料科学と情報科学の融合分野について先見性及び洞察力を有していると認められる。

加えて、日本学術会議連携会員、東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング専門委員会、社団法人 HPCI コンソーシアム理事および同副理事長、筑波大学計算科学研究センター運営協議会委員および議長などの要職を歴任していることから、国内外の関連分野の研究者から信頼され、公平な評価を行いうると認められる。

さらに、次世代スパコン戦略プログラム第2分野戦略機関「計算物質科学イニシアティブ(CMSI)」統括責任者、東京大学物性研究所計算物質科学研究センター センター長を歴任しており、研究開発、人材育成、成果の展開普及、国際連携、産学連携等を含むプロジェクトの管理・運営経験が豊富であることから、本研究領域における研究課題の効果的・効率的な推進を目指し、適切な研究マネジメントを行う経験、能力を有していると認められる。

以上を総合して、同氏は本研究領域の研究総括として適任であると判断される。

3. 研究総括のねらい

近年、組成や構造の精緻な分析を可能にする計測・分析技術、コンビナトリアル合成などのハイスループット実験手法、高性能のスーパーコンピュータによる物性の高精度予測、第一原理計算をはじめとした計算科学などの進展により、関連データが短時間で大量に得られるようになってきている。同時に、大量かつ複雑なデータからそれらの持つ意味や新しい知識を引き出す情報科学技術も大きく進展している。しかしながら、要求機能を特定した材料開発では、膨大な可能性の中から候補物質を見つけ出すことは困難であり、製造プロセスによっても組織やその特性が左右されるため、経験と勘に基づいた試行錯誤的材料開発とならざるを得ない状況が多い。

このような状況のもと、本研究領域は、実験科学、理論科学、計算科学、データ科学の連携・融合を強力に推進し、それぞれの手法の強みを活かしつつ相互に得られた知見を活用しながら新物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクスの基盤構築と、それを牽引する将来の世界レベルの若手研究リーダーの輩出を目指すこととしている。

具体的には、望んだ機能を有する新物質・新材料の発見や、機能発現する原理の深い理解、試行錯誤的ノウハウに勝るシステマティックな物質・材料設計の指導原理の解明等に関する研究を対象としている。対象とする物質・材料は戦略目標1が対象とする触媒に加えて、有機化合物、無機化合物、金属・合金、高分子化合物、アモルファスなどあらゆる物質系であり、戦略目標3および戦略目標4の達成に貢献すると期待される。また、実験科学、理論科学、計算科学だけでなくデータ科学を巻き込んだ異分野の連携・融合研究によって、複雑な物質・材料データに基づく物質探索手法の開拓や設計指導原理の解明等が進められ、戦略目標2の達成に貢献することが期待される。

4. 研究課題の選考について

＜選考にあたっての基本的な考え＞

本研究領域は、これまで物質・材料科学を牽引してきた物理学・化学・材料工学など単独の学術分野だけでは達成しえない目標を多く含み、情報学・統計学・数理科学などの分野との連携・融合が欠かせないため、提案者自身と異なる知識・技能をもつ専門家と、提案内容について予め議論を深めてある内容であることを重視した。

また、以下の点も加味し選考に臨んだ。

- 応募者が現在受けている、または、申請中の国の競争的資金制度や他の研究助成制度を十分把握して研究資金の不合理、または過度の集中をしないこと。
- 採択候補者の地域性、男女共同参画などの多様性を考慮する。

＜選考基準＞

選考は、本研究領域に設けた領域アドバイザー11名の協力を得て研究総括が行う。選考方法は、書類選考、面接選考及び総合選考とし、選考にあたっては、さきがけ共通の選考基準である「戦略的創造研究推進事業における新規研究課題の決定について」を基本とした。

募集においては、「マテリアルズインフォマティクス」という分野は、当時はまだ一般的ではなかったため、図1のように研究領域（第1章(2)参照）について求められる研究テーマの具体例を示すことで、多岐の研究分野にわたるよう多くの応募を促した。

さきがけ「マテリアルズインフォマティクス」 求められる研究テーマ具体例	
1. 新物質発見の促進、 設計指針の構築	機械学習による物性予測の高精度化・高速化、未知の候補物質、反応経路の網羅的探索、設計に有用な記述子の抽出、設計指針に資する新概念
2. 大規模データからの相関・ 法則の帰納的解明	構造-物性相関、構造-活性相関、背後にある物理法則の推定
3. 候補物質の高速・ 大量スクリーニング	未知物質の物性の高精度予測、合成・評価の実験計画に資する候補物質を高速大量スクリーニング
4. 物質・材料データの包括的 記述	各種測定データの管理・共有の方法論、多次元データの解析・可視化
5. データ取得・蓄積・管理手法、 計算・解析ツール	ハイスループットの試料評価手法、データベースの構築・管理手法、各種計算・解析ツールの構築

必ずしも上記に限定されることはなく、
従来の物質・材料開発に大きなインパクトをもたらす、挑戦的な研究を期待します

Japan Science and Technology Agency

図1 募集時に示した研究テーマ例

また、選考にあたり、採択課題に偏りがないようにポートフォリオを作成し、バランスが取れた学術分野に分散するよう配慮した。(図2参照)

	固体・結晶				分子				高分子・液体・ガラス		
	材料	伝熱	磁性	強相関	量子化学	触媒	発光	電池	バイオ	アモルファス	太陽電池
合成 実験											
計測											
理論											
設計											
計算											
探索											
データ 科学 情報・統計・数学											

図2 選考時に設定した採択課題ポートフォリオ

(1) 選考の方法と過程

応募課題については、領域アドバイザーが分担して書類審査を行い、その結果を基に書類選考会議において面接選考の対象者を選考した。続いて、面接選考および総合選考により、採択候補課題を選定した。(図3参照)

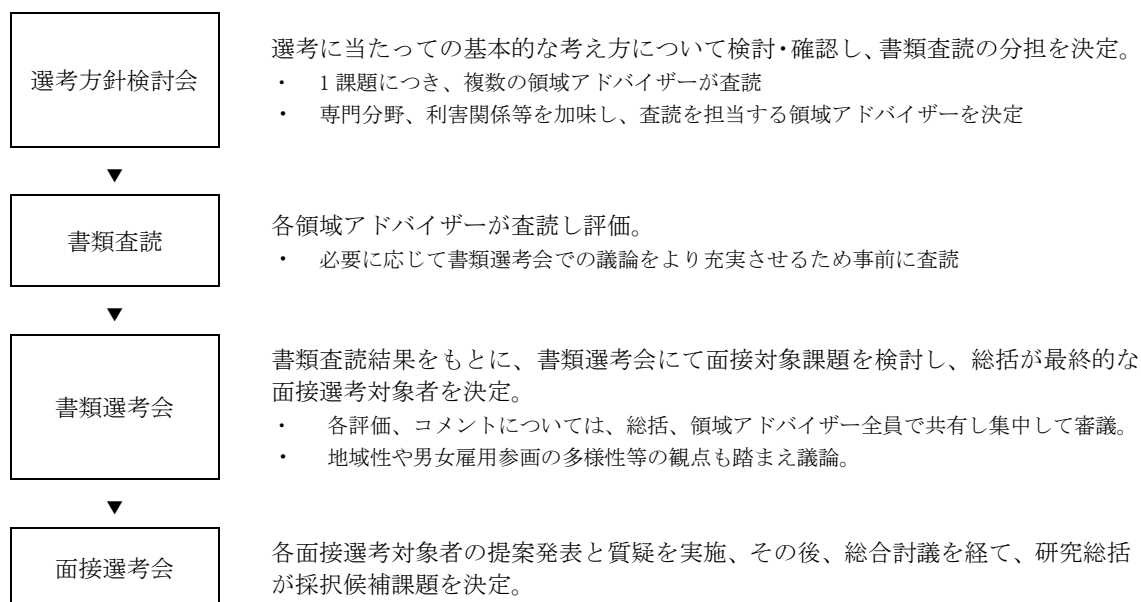


図3 選考過程

(2) 選考結果

① 公募・採択課題数の推移

2015年度から3年間において、下表に示すように、応募332件に対して面接対象として86件を選定し、最終的に41件を採択した（採択率12.3%）。そのうち、女性研究者2名、外国籍研究者2名を含む。

表4 応募・採択状況一覧

募集年度	応募・採択研究課題数 (件)					採択者 平均年齢 (才)
	応募数	面接数	採択数	女性	外国籍	
2015年度	116	36	15	1	1	36.1
2016年度	76	26	12	0	1	35.5
2017年度	100	28	14	1	0	35.1
合計	332	90	41	2	2	35.6

② 応募・採択課題概況

本研究領域には3期を通して、(1)物理、化学、材料科学、数学、情報学といったさまざまな学問分野で、(2)実験、理論、計算科学、データ科学という異なる研究方法を使って活躍してきた若手研究者から、(3)新物質・新材料の発見や、機能発現する原理の深い理解など、独自の切り口でマテリアルズインフォマティクスという新しい研究分野を切り拓こうという、多数の野心的かつ分野横断的な提案があった。採択にあたっては、統括および領域アドバイザーで相談の上、この新しい研究分野を育てるために、できる限り採択数を増やすこととした。こうして、視野が広くオープンマインドで異分野交流に長けた優秀な若手研究者を多数採択できたことで、研究者間の自発的コミュニケーションが進み、想定を超えた多数の共同研究が生まれることとなった。一方で採択できなかった応募者の提案にも、まだまだ多くの興味深いものがあったことを付記しておきたい。

● 2015年度（公募初年度）

初年度は、公募に対して116件もの意欲的な提案があった。初年度募集当時、マテリアルズインフォマティクスはまだ一般的ではなく、マテリアルズインフォマティクスの研究者であると呼べる応募者はほとんどいないという状況であった。その中で、11名の領域アドバイザーとともに厳正かつ公平な選考を行い、書類選考で選ばれた36名の候補者に対し面接選考を行い、データ科学的な視点を何とか取り入れようと考えた材料科学、物理、化学の研究者と、新たな研究展開の場を求めた情報科学や数学の研究者15名の提案を採択した。

- 2016 年度

全体で 76 件もの意欲的な提案があった。書面選考会で選ばれた 26 名の候補者に対し、ヒアリングを行い、12 名の提案を採択した。本研究領域は、これまで物質・材料科学を牽引してきた物理学・化学・材料工学など単独の学術分野だけでは達成しえない目標を多く含み、情報学・統計学・数理科学などの分野との連携・融合が欠かせないため、提案者自身と異なる知識・技能をもつ専門家と、提案内容について予め議論を深めてある内容であることを重視した採択となった。

- 2017 年度（公募最終年度）

全体で 100 件もの意欲的な提案があった。書面選考会で選ばれた 28 名の候補者に対しヒアリングを行い、14 名の提案を採択した。この頃になると、研究者コミュニティにおけるマテリアルズインフォマティクスの認知度がかなり高まっており、またデータ科学のツールも普及し始めたことから、非常に具体的で実現可能性の高い提案や、応募時点ですでにマテリアルズインフォマティクスとして成果の上がっている提案など、成熟度の高い提案が多く見られるようになっていた。そのような状況のもとで、1 期生から 3 期生までの領域全体でのポートフォリオにも配慮しながら選考を行なった結果、新しい材料を作ることのできる実験研究者が多く採択されることとなった。

(3) 戦略目標を達成する上で必要な研究課題、研究者の参加が適切に得られたか

1 期生を採択し、研究の開始時は理論・シミュレーションから開始せざるを得ない状況であったが、2 期生、3 期生が揃うに従い、情報科学、計測からの材料探索や実際の合成（特に 3 期生が多い）まで、一通りのルーチンが回せるようになった。実際に、3 期生が稼働し始めた 2018 年の領域会議からは、探索して新たなものをつくったという報告が出始めており、成功例が出ている。

以下に、戦略目標を達成する上で本領域が定めた研究領域（1 章(2)参照）を実現するために、採択した全研究者のポートフォリオを図示する。（図 4 参照）

「マテリアルズインフォ」採択課題 ポートフォリオ

1. 新物質発見の促進、設計指針の構築
機械学習による物性予測の高精度化・高速化、未知の候補物質、反応経路の網羅的探索、設計に有用な記述子の抽出、設計指針に資する新概念
2. 大規模データからの相関・法則の帰納的説明
構造-物性相関、構造-活性相関、背後にある物理法則の推定
3. 候補物質の高速・大量スクリーニング
未知物質の物性の高精度予測、合成・評価の実験計画に資する候補物質を高速大量スクリーニング
4. 物質・材料データの包括的記述
各種測定データの管理・共有の方法論、多次元データの解析・可視化
5. データ取得・蓄積・管理手法、計算・解析ツール
ハイスループットの試料評価手法、データベースの構築・管理手法、各種計算・解析ツールの構築

第1期生・2期生・3期生 合計41名 ※年齢及び所属は採択時のもの

	固体・結晶				分子				高分子・液体・ガラス		
	材料	伝熱	磁性	強相関	量子化学	触媒	発光	電池	バイオ	アモルファス	太陽電池
合成 実験	大久保勇男(41)NIMS コンビナトリアル合成・評価	林博之(35)京大 合成半導体膜システム	清水亮太(33) 東工大 ロボット、水素、緑化等	樽澤直矢(29) 九州大学 有機EL、 発光、レーザー食糧	加藤俊顕(36) 東北大 ナノカーボン、プラ ズマ合成	繪明佑哉 (36)慶応大 制御制御と ナノシート材料	林智宏(42) 東工大 バイオ、再生医療	小原真司(44)NIMS 放射光実験基盤構築			
計測	永村直樹(35)NIMS 放射光分析、X線、計測	大塚朋廣(33)理研 電子物性、X線、計測					鈴木耕太(31)東工大 リチウムイオン電池開発	田中大輔(36) 関西学院大 合成化学、太陽電池			
理論	中島千尋(34)東北大 圧縮センシング 顕微鏡フォログラフイ	世古敦人(35)京大 結晶構造解析モデル 物性予測モデル構築	辻直人(32)理研 グラフ、強相関 高精度量子多体計算	清野淳司(35) 早稲田大学 反応予測システム 高速電子状態計算	畑中美穂(31)奈良先端 発光センサー設計指針確立	清口照康(41)東大生研 界面構造解析		中村壮伸(36)東北大 多次元ホモロジー アモルファス構造の記述			
設計	池野豪一(38)大阪府立 電子線、X線 スペクトル解析技術確立	鈴木通人(37)理研 磁性体、設計手法	是常隆(38)理研 有効モデル、超伝導 熱電物質：設計法確立		原潤祐(30)北大 発光分子自動設計	JalemRandy(32) NIMS 電池材料探索		坂上貴洋(40)九州大 高分子物質探索 ひも、トポロジ構造解析			
計算 探索	Dam Hieu Chik(39) 北陸先端大 スパースモデリング 固体材料の構造推定	塚田祐貴(30)名大 フェーズフィールド法 材料相関シミュレーション	山地洋平(34)東大 相関第一原理計算 +ボロジナル物質設計 熊谷(34)東工大 半導体材料 計算DG構築	柳井毅(37) 分子科学研究所 第一原理計算、 ニューラルネットワーク	森寛敏(37)お茶の水 混合系熱力学物性予測	袖山慶太郎(39)NIMS DFT-MD法、電離遷移探索	井上和俊(38) 東北大 数学、界面	佐伯昭紀(38)阪大 超高速スクリーニング法による 有機・無機材料の物性解明			
データ 科学	志賀元紀(37) 岐阜大 電解、X線、スペクトル 物質材料の機械構造計測	瀧川一学(38) 北大 ディープラーニング 電子物性予測	岩崎悠真(30) NEC 材料開発、スピン	五十嵐康彦(32) 東大 電解、X線、NIR-STEM/EDX	鳥山昌幸(31) 名工大 機械学習 界面・結晶構造解析						

図4 本領域における全採択課題ポートフォリオ

5. 領域アドバイザーについて

(1) 領域アドバイザー一覧

下表に、領域アドバイザーの一覧を記す。

表 5 領域アドバイザー一覧

領域アドバイザー名 (専門分野)	終了時の所属	役職	任期
青柳 岳司 (ナノテク・材料/高分子材料/ 高分子計算機科学)	産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザ イン研究センター	総括研究主幹	2015年5月～ 2021年3月
伊藤 聡 (ナノテク・材料/応用物性/計 算物質科学)	(公財) 計算科学振興財団	チーフコーデ ィネータ	2015年5月～ 2021年3月
射場 英紀 (ナノテク・材料/新型電池)	トヨタ自動車(株) 先端材料技術部	チーフプロフェ ッショナルエン 지니어	2015年5月～ 2021年3月
小谷 元子 (数学/離散幾何解析学)	東北大学 材料科学高等研究所 東北大学	主任研究者・ 教授 理事・副学長	2015年5月～ 2021年3月
佐藤 寛子 (化学/計算化学/データケミ ストリ)	情報・システム研究機構 チューリッヒ大学	准教授 研究員	2015年5月～ 2021年3月
田中 功 (材料工学/計算物質科学)	京都大学 大学院工学研究科	教授	2015年5月～ 2021年3月
知京 豊裕 (電子・電気材料工学)	物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門	副拠点長	2015年5月～ 2021年3月
津田 宏治 (メディカル情報生命)	東京大学 大学院新領域創成科学研究科	教授	2015年5月～ 2021年3月
寺倉 清之 (物性理論/固体電子論)	産業技術総合研究所	名誉リサーチ ャー	2015年5月～ 2021年3月
中井 浩巳 (理論化学、量子化学、電子状 態理論)	早稲田大学 理工学術院	教授	2015年5月～ 2021年3月
樋口 知之 (統計科学)	中央大学 AI・データサイエンスセン ター 中央大学 理工学部	所長 教授	2015年5月～ 2021年3月

(2) 人選にあたっての考え方について

本研究領域は、さきがけではあるが異分野融合のチーム型研究が必要であり、これまで物質・材料科学を牽引してきた物理学・化学・材料工学など単独の学術分野のみならず、情報学・統計学・数理科学などの分野との連携・融合が欠かせない。この前提条件を踏まえ領域アドバイザーの人選においては、各分野における世界レベルのリーダーはもとより、データ科学を前向きに取り入れている研究者、異分野の専門家と積極的に議論できる専門家、への参画をお願いした。

特に研究推進においては、情報技術分野の研究者が物質・材料工学等の研究者と連携

すること、または諸分野の研究者が情報技術分野に参入することを重視した。これにより、様々な分野の研究者が相互に影響し合い、異分野横断・融合的な視点で問題解決に取り組むことで、シナジー効果を得る体制を整え、エネルギー、医療、素材、化学など多くの産業応用に資する物質・材料を創出するという点では、広い知見をお持ちの専門家に依頼した。

6. 研究領域のマネジメントについて

(1) 研究課題の進捗状況の把握と評価、それに基づく研究課題の指導

各研究者の研究進捗状況を把握するために、年に2回の領域会議を開催した。領域会議では、研究総括や領域アドバイザーからの質疑だけでなく研究者同士の討論も活発に行われた。総括やアドバイザーは、できるだけ研究者の意思を尊重し、さらなる発展につながるアドバイスを与えることを基本とした。壁にぶつかった研究者には、研究内容の意義を多面的に見直して、自由な発想で突破口を見つけられるように指導を行った。

また各研究者の成果を発表するために、積極的な公開シンポジウムや国際ワークショップを開催し、発表のみならず、研究者の活動範囲を広げる工夫を行った。

表6 領域活動一覧

年度	領域活動				
	領域会議 (本項①参照)	公開シンポジウム (本項②参照)	国際シンポジウム (②) ②参照)	他領域との連携 (②) ①参照)	領域勉強会 (⑤) ②参照)
2015	1. 東京/12月				1. 2016年1月
2016	2. 北海道/5月 3. 葉山/12月			さきがけ「革新的触媒」領域会議での合同セッション	2. 8月 3. 10月
2017	4. 淡路島/6月 5. 沼津/11月	1. 2018年2月			4. 8月
2018	6. 富山/6月 7. 奈良/12月	2. 8月	1. 東京 /2019年2月	CREST「革新材料開発」領域会議参加	5. 4月
2019	8. 盛岡/5月 9. 大阪/11月	3. 8月	2. 横浜/12月		6. 6月
2020	10. Online/6月 11. Online/11月				
備考	計11回開催	全て東京開催			計6回開催

① 領域会議(非公開)

本研究領域では、研究総括、領域アドバイザー、研究者が一堂に会して、年2回、一泊二日～二泊三日での開催を基本として領域会議を運営した。また、2019年度以降は、研究終了者も自由参加で集合し、相互の情報交換をおこなった。(下表に開催実績を示す。)

本会議においては、

- ・ 研究計画のレビュー(初回参加時)、
進捗フォローアップ
- ・ 研究加速のための助言、

研究者相互の意見交換

を主に行った。また、相互交流の促進として、

- ・ ポスターセッション
- ・ 領域アドバイザートーク

などを取り入れ議論を行った。



図5 領域会議風景（第8回）

また、合宿により夜間の議論も深まり、研究者間の交流促進にも大きな効果があった。

さらに、2020年度は新型コロナの影響によりオンライン開催とした。オンラインにすることで意見交換、情報交換などの相互交流などに影響があると見られたが、最後の回においては、Zoomのブレイクアウトルーム機能を使ったポスターセッションや、夜の部での領域アドバイザートークなどをオンラインで実施し、リアルに近い領域会議が実現できた。

表7 領域会議の開催実績一覧

No.	年度	開催月	開催地	備考
1	2015	12月	東京	初回開催
2	2016	5月	北海道	
3		12月	葉山	第二期生初参加
4	2017	6月	淡路島	
5		11月	沼津	第三期生初参加
6	2018	6月	富山	
7		12月	奈良	第一期生終了報告（非公開）
8	2019	5月	盛岡	
9		11月	大阪	第二期生終了報告（非公開）
10	2020	6月	オンライン	
11		11月	オンライン	第三期生終了報告（非公開）

② 公開シンポジウム（国内）

本研究領域では、様々な研究テーマをさらに深掘する機会を得るため、各研究者にはそれぞれの研究課題を様々な場所で発表してもらった。その意味において、本シンポジウムは、広く社会のステークホルダー、例えば、関係分野の研究者、産業界、ベ

ンチャーへの出資者、省庁等の政策立案者などの参加を期待し公開にて開催した。(下表参照)

表 8 公開シンポジウムの開催履歴一覧

シンポジウム名	日時	場所	入場者数	発表数
第1回公開シンポジウム	2018年2月22日	東京	109名	1～2期生から7名
第2回公開シンポジウム	2018年8月24日	東京	86名	1～2期生から7名
第3回公開シンポジウム	2019年8月27日	東京	109名	2～3期生から7名

本公開シンポジウムでは、一般の方が来場しやすいように全回共に半日として開催した。半日開催であることから、成果発表のみのシンプルな構成であったが、一般企業の来場者からは、参加しやすいとの評価を得た。

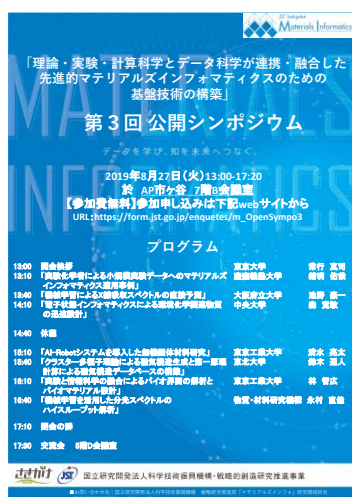


図 6 シンポジウムプログラム(第3回)および、開催風景(第1回)

2019年度の第3回の参加状況(関係者含む)では、122名の事前登録に対して、当日は88%程度の参加があった。参加者の業態比率は、下図のようになっており、一般企業からの参加者が非常に多く質問も多岐に渡った。

また満足度も非常に高く、アンケートによる評価（回収率 57%）も 5 段階中 4.24 という結果となった。

区分	関係者（発表者含）	大学関係	研究機関・官公庁	企業その他	計
参加者数	11	18	22	58	109

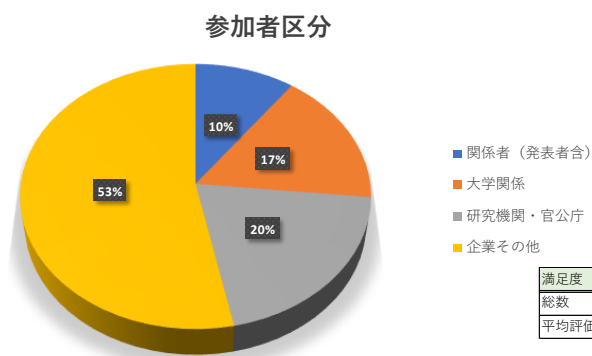


図 7 シンポジウム参加者区分の比率

満足度	5	4	3	2	1	未記入
総数	18	37	4	0	0	3
平均評価	4.24					

図 8 シンポジウム満足度調査結果

(2) 研究課題間や他の研究領域、国内外の他の研究機関、異分野との連携・協力の推進

① 他の領域との連携・協力

本研究領域は、物理学・化学・材料工学、そして情報学・統計学・数理科学などの研究者で構成されているため、他の研究領域からも注目をされており、実際に領域会議へ招聘され研究内容の発表を行った。

実例としては、本研究領域より後から発足した CREST「革新材料開発」（総括：細野秀雄 東京工業大学 名誉教授／元素戦略センター長）やさきがけ「革新的触媒」（総括：北川宏 京都大学大学院理学研究科 教授）の研究者らと交流を行い、つながりを深めた。

② 国際シンポジウム

本研究領域の成果を広く世界に向けて発信し、世界における日本の存在感を高めるべく、国際シンポジウムを主催した（表 9 参照）。これら国際シンポジウムの開催は、マテリアルズインフォマティクスに馴染みのない研究者や企業関係者も含め、広範な分野の研究者が参加されたことから、本研究領域の発展とプレゼンス向上に貢献しただけでなく、本研究領域終了後のマテリアルズインフォマティクス分野の継続的発展にも非常に有益であったと言える。

(i) PRESTO International Symposium on Materials Informatics

本研究領域 1 期生の卒業を機に、全期生が揃う集大成での発表機会として 2019 年 2 月に開催した。年度末の週末および祝日を利用しての開催であったにもかかわらず、連日 150～180 名もの参加者がある盛況で、この分野への関心

が非常に高いことがわかった。

(ii) MRM(Materials Research Meeting) 2019

日本 MRS (MRS Japan) の創立 30 周年を記念して 2019 年 12 月に開催された国際会議 MRM2019 の中で、マテリアルズインフォマティクスをテーマにしたトピカルシンポジウムを開催した。これは、本研究領域と CREST「革新材料開発」、物質・材料研究機構の情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I) との合同シンポジウムであり、この分野を牽引する海外著名研究者を 8 名ほど招聘し、本研究領域の成果を広く世界に向けて発信した。

表 9 国際シンポジウムの開催履歴一覧

国際シンポジウム名	日時	場所	入場者数	特記事項
PRESTO International Symposium on Materials Informatics	2019 年 2 月 9～11 日	東京	538 名 (3 日間の 延人数)	海外招聘者 13 名 1～3 期生から 11 名
MRM (Materials Research Meeting) 2019	2019 年 12 月 10～13 日	横浜	600 名以上	海外招聘者 8 名 1～3 期生から 25 名 (ポスターセッション含む)

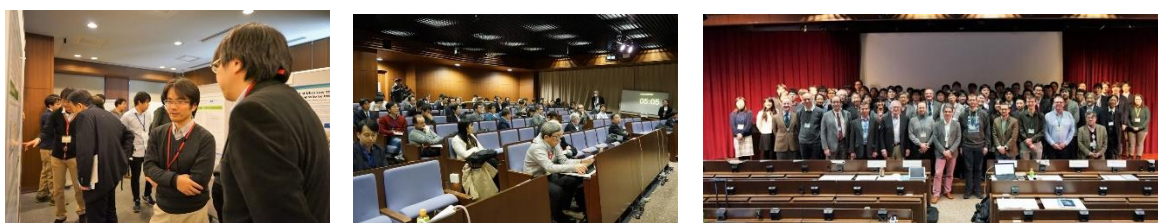


図 9 開催風景(PRESTO International Symposium on Materials Informatics)

(3) 研究費配分上の工夫

各研究者から提出された研究計画書について、さきがけ研究開始時はもちろんの事、定期的にレビューを実施し、次年度予算の承認をおこなった。また、年度途中においても、以下 2 点を含め、おおむね四半期ごとに研究進捗に伴う予算執行・見直しを実施し、増額、前倒し・後ろ倒し執行、また減額等の措置をおこなった。

● トップ研究人材育成に関わる支援

本研究領域の特徴の一つである「国際シンポジウム」については、国際強化支援策の支援制度を活用し、領域のほぼ全研究者の参加が実現できた。また、研究者が自ら発起人となっている学会団体の国内での国際シンポジウムの開催、海外有識者の招聘、海外派遣などに関して、さきがけ研究費の使途

の範囲内で支援を行い、バックアップをおこなった。

- ライフイベント、異動等への柔軟な予算運用

研究者のライフイベントや異動に伴い、本人の要望を踏まえ、研究期間延長や年度間の予算配分調整、異動先への研究予算移行や研究室立ち上げのための増額支援等を実施して、研究進捗に支障がないように対応した。

(4) 研究領域としての人材の輩出・成長の状況

本研究領域では、下記の3点で各研究者の成長も著しく、各専門分野、および社会的にもさらに活躍の場が広がっている。

① 研究リーダーの輩出

本研究領域の研究者は、多数のプレスリリース、書籍や総説記事の執筆、国内外の学会における多数の招待講演を通して、マテリアルズインフォマティクスという新しい研究分野の成長と我が国での定着に大きく貢献しており、間違いなく分野を牽引しているといえる。そのうち4名の研究者は研究期間中に教授に、また14名は准教授に昇任し（項目④参照）、研究グループを率いることとなった。これらの研究者は、先端的な研究成果を挙げただけでなく、後進を育てることによって、マテリアルズインフォマティクスという新しい研究分野の研究リーダーとなりつつある。

② 未踏分野でのパイオニア

本研究領域の研究者はさまざまな学問分野におけるパイオニアとして活躍しているが、たとえば以下の研究者は、特に未踏分野を切り拓いたと言える。

- (i) 佐伯昭紀研究者：超高速スクリーニング法と数々のデータ科学的手法を駆使してエネルギー変換材料の探査に成功し、実験研究者にとってデータ科学が極めて有用であることを示す嚆矢となった。
- (ii) 世古敦人研究者：オンラインショッピングなどで利用される「推薦システム」を材料開発に持ち込むという斬新な試みを行い、その有用性を示した。
- (iii) 岩崎悠真研究者：機械学習、コンビナトリアル実験、計算機シミュレーションを駆使して研究を行い、世界記録を更新する高効率なスピン熱電材料を含む、複数の新材料候補を発見した。
- (iv) 清水亮太研究者：ロボット技術を用いて薄膜合成の全自動化を実現し、機械学習を用いた材料創生につながるシステムを作り上げた。
- (v) 林 智弘研究者：自ら開発した測定手法により、生体分子の材料表面への吸着挙動に関する信頼性の高いデータベースを作成し、機械学習を用いたバイオマテリアル設計への道を拓いた。

(上記研究者の研究概略は、第7章(2)に掲載している)

③ 女性研究者の活躍

本研究領域の2名の女性研究者は、それぞれの特色のある研究を推進しているとともに、アウトリーチ活動にも積極的に取り組み、リーダーシップを十二分に発揮してい

る。

- (i) 畑中美穂研究者：ランタノイド発光センサー研究の第一人者であり、発光・消光経路をデータベース化し、機会学習を利用することで望むセンサー機能を得られるなどが注目されている。2017 年度には第 11 回 PCCP (Physical Chemistry Chemical Physics) 賞を受賞、また特任准教授に昇任した。
- (ii) 永村直佳研究者：放射光や X 線による構造解析を専門としており、本研究課題においては光電子顕微分光スペクトルを機械学習で高効率に自動解析するアルゴリズムを開発、プログラム作成まで実施しているなどが高く評価されている。2019 年度に NIMS の主任研究員へ昇格、2020 年度には日本表面真空学会の若手女性研究者優秀賞受賞を受賞した。

④ 各研究者の主な動静

(i) 研究者の昇任状況

研究期間中の昇任者は、大学関係では、下表の通り 20 名と総数の約 5 割となり処遇の面でも本研究領域の研究者への評価が高いことが伺える。教授昇任については 4 名にのぼり、リーダーシップを発揮している。

表 10 研究者の昇任状況 (2020 年 12 月 11 日現在、大学講師以上)

昇任クラス	採択年度(期)	昇任数(名)	比率 昇任/総数 (%)	備考 研究者(敬称略)
教授	2015 (一期)	1		佐伯
	2016 (二期)	2		溝口、森
	2017 (三期)	1		柳井
	計	4	10	
准教授	2015 (一期)	4		鳥山、是常、畑中、山地
	2016 (二期)	6		池野、大塚、熊谷、坂上、志賀、本郷
	2017 (三期)	4		五十嵐、清水、鈴木通人、清野
	計	14	34	
講師	2015 (一期)	1		小林
	2016 (二期)	0		
	2017 (三期)	1		井上
	計	2	5	
合計	2015 (一期)	6		
	2016 (二期)	8		
	2017 (三期)	6		
	計	20	49	

(ii) 受賞

文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本学術振興会賞をはじめとして、様々な学会において各種受賞が多数である。

表 11 研究者の主な受賞履歴

(2020年12月16日現在)

受賞者名	賞の名称	授与者名	受賞時期
大久保 勇男	Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP), 2017 Outstanding Reviewer	Royal Society of Chemistry (RSC; 英国王立 化学会)	2018年3月
小原 真司	第71回(平成28年度)日 本セラミックス協会 学術賞	日本セラミックス協会	2017年6月
世古 敦人	第37回(平成28年度)本 多記念奨励賞	本多記念会	2016年5月
塚田 祐貴	平成29年度日本鉄鋼協会 研究奨励賞	日本鉄鋼協会	2017年3月
袖山 慶太郎	2017 HPCwire Awards (Best Use of HPC in Manufacturing, Readers' Choice)	HPCwire	2017年12月
畑中 美穂	第11回PCCP(Physical Chemistry Chemical Physics)賞	日本化学会	2017年12月
山地 洋平	第11回(2017年)日本物理 学会若手奨励賞	日本物理学会	2017年3月
緒明 佑哉	平成30年度科学技術分野 の文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	2018年4月
大塚 朋廣	平成30年度科学技術分野 の文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	2018年4月
熊谷 悠	第41回応用物理学会 解説論文賞	応用物理学会	2019年9月
溝口 照康	第75回日本金属学会 功績賞	日本金属学会	2017年3月
森 寛敏	GREEN Chemistry Prize	The 7th Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry (AOC7-GSC)	2018年11月
清水 亮太	令和2年度科学技術分野の 文部科学大臣表彰 若手科学者賞	文部科学省	2020年4月
鈴木 耕太	平成30年度電気化学会論 文賞	電気化学会	2019年3月
鈴木 通人	Journal of the Physical Society of Japan 2019 Highly Cited Article	JPS Journals	2018年3月

田中 大輔	科学技術・学術政策研究所 ナイスステップな研究者 2020	文部科学省	2020年12月
永村 直佳	2020年度日本表面真空学会 若手女性研究者優秀賞受賞	日本表面真空学会	2020年9月
林 智広	平成30年度 日本学術振 興会 第174委員会 若手 研究者賞	日本学術振興会	2019年1月
柳井 毅	第15回(平成30年度) 日本学術振興会賞	日本学術振興会	2019年1月

(iii) 国際会議での主な招待講演

国際会議での主な招待講演の実績については、第一期は14名中13名、第二期は13名中10名、および、第三期14名中12名の計35名と、研究者の85%が招待講演を受けており、本研究領域の研究者の研究に対する注目度に光るものがある。主な招待講演の一覧を記す。

(2020年12月11日現在) (敬称略)

<第一期生>

I-1 大久保 勇男

Isao Ohkubo, Takao Mori, “FDensity functional theory approach for developing novel nitride thermoelectric”, 7th Workshop NIMS - URI - CNRS-Saint-Gobain, 2018年3月, フランス

I-2 鳥山 昌幸

T. Tamura, M. Karasuyama, R. Kobayashi, R. Arakawa, Y. Shinhara, and I. Takeuchi, “Fast and scalable prediction of local energy at grain boundaries: Machine-learning based modeling of first-principles calculations”, 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM), 2018年10月, 日本

I-3 小林 正人

M. Kobayashi, “Calculation, Analysis, and Prediction for Catalyst and Surface Adsorption Systems with Informatics Techniques and Automated Reaction Path Search”, 2nd International Workshop on Phase Interfaces Science for Highly Efficient Energy Utilization, 2018年10月, 米国

I-4 小原 真司

S. Kohara, “Atomic and electronic structures of disordered materials revealed by a combination of quantum-beam measurements and computer simulations”, THERMEC”, 2018年10月, フランス

I-5 是常 隆

- T. Koretsune, “Ab-initio Eliashberg Approach for Superconductivity in Sulfur Hydrides”, ICCPX, 2017年1月、中国
- I-6 佐伯 昭紀
Akinori Saeki, “Charge Transport and Transfer in Perovskite Solar Cells Studied Using Microwave Spectroscopy”, The 4th International Conference on Advanced Electromaterials (ICAE2017), 2017年11月、韓国
- I-7 世古 敦人
A. Seko, “Linearized machine learning interatomic potentials for metals and recommender system for the discovery of unknown materials”, Total Energy and Force Methods Workshop 2018, 2018年1月、英国
- I-8 袖山 慶太郎
Keitaro Sodeyama, “First-principles molecular-dynamics study for solid-liquid interface film”, 12th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (PACRIM 12) (アメリカセラミックス学会), 2017年5月、米国
- I-9 瀧川 一学
Ichigaku Takigawa, “Machine learning predictions of factors affecting the activity of heterogeneous metal catalysts “, “CATL: Machine Learning for Catalysis Research”, The 255th ACS (American Chemical Society) National Meeting, 2018年3月、米国
- I-10 DAM Hieu Chi
DAM Hieu Chi, “Determining physical and chemical properties for material systems with data mining”, “255th ACS (American Chemistry Society) National Meeting, Division of Catalysis Science and Technology. Machine Learning for Catalysis Research, 2018年3月、米国
- I-11 塚田 祐貴
Y. Tsukada, Y. Murai, T. Koyama, “Relationship between material parameters and microstructure of martensite in low-carbon steels: a simulation study”, Thermec’ 2018 (International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials), 2018年7月、フランス
- I-12 畑中 美穂
M. Hatanaka, “Application of Automated Reaction Path Search Method to a Systematic Search of Transition States: A Case Study on Asymmetric Catalytic Reaction”, Computational Catalysis for Sustainable Chemistry, 2018年6月、スペイン
- I-13 山地 洋平
Youhei Yamaji, “Metallicity and Topology in Iridate Domain Walls”, APS

March Meeting 2018, Los Angeles Convention Center, 2018年3月、米国

<第二期生>

II-1 池野 豪一

Hidekazu Ikeno, “Ab-initio Multiplet Calculations for X-ray Absorption Spectroscopy: Application to Cathode Materials”, *Frontiers in Materials Science (FMS2017)*, 2017年9月, ドイツ

II-2 緒明 佑哉

Yuya Oaki, “Syntheses and Applications of Surface-Functionalized Monolayers through Exfoliation of Layered Composites”, *日本化学会 第97春季年会(2017) アジア国際シンポジウム*, 2017年3月, 日本

II-3 大塚 朋廣

Tomohiro Otsuka, Takashi Nakajima, Matthieu R. Delbecq, Peter Stano, Shinichi Amaha, Jun Yoneda, Kenta Takeda, Giles Allison, Sen Li, Akito Noiri, Takumi Ito, Daniel Loss, Arne Ludwig, Andreas D. Wieck, and Seigo Tarucha, “Charge and Spin Dynamics in a Quantum Dot-Lead Hybrid System”, *International Symposium on Frontiers of Quantum Transport in Nano Science*, 2018年10月, 日本

II-4 熊谷 悠

Yu Kumagai, “First-principles calculations on point defects in semiconductors and insulators”, *The 20th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, 2017年10月, 中国

II-5 坂上 貴洋

Takahiro Sakaue, “Some Topics on Dynamics of Chromosomal Loci”, *The Arctic Biophysics Meeting on Epigenetics and Chromosome Dynamics*, 2019年1月, スウェーデン

II-6 志賀 元紀

Takahiro Sakaue, “Statistical Machine Learning for Spectrum Image Data Analysis”, *The 19th KIM-JIM Symposium -Recent Advances in Artificial Intelligence and Simulations in Materials Science and Engineering-*, 2018年10月, 韓国

II-7 原瀨 祐

Yu Harabuchi, Satoshi Maeda, “Systematic Exploration of Conical Intersection Geometries Between the Ground and First Excited Electronic States Based on Time Dependent Density Functional Theory: Application to Photoreactions”, *IC067, The Asia-Pacific Association of Theoretical and*

Computational Chemists 2019, 2019年10月, オーストラリア

II-8 本郷 研太

Kenta Hongo, “Recent Advances in Materials Simulations and Informatics”, International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018, 2018年3月, カンボジア

II-9 溝口 照康

Teruyasu Mizoguchi, “Machine learning for crystalline interface and core-loss spectrum”, TSMC-UTokyo workshop, 2019年11月, 台湾

II-10 森 寛敏

Hiroto MORI, “Materials Informatics toward Green Cooling”, 7th Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry (AOC7-GSC 2018), 2018年11月, シンガポール

<第三期生>

III-1 相澤 直矢

Naoya Aizawa, Yong-Jin Pu, “Kinetic Prediction of Reverse Intersystem Crossing in Organic Donor-Acceptor Molecules”, CEMS International Symposium on Supramolecular Chemistry & Functional Materials 2019 (CEMSupra 2019), 2019年12月, 日本

III-2 五十嵐 康彦

Yasuhiko Igarashi, Hiroyuki Setoyama, Toshihiro Okajima, Ichiro Akai, Masato Okada, “Bayesian basis selection and reliability inference for extended X-ray absorption fine structures (EXAFS)”, 14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (NCM14), 2019年11月, 日本

III-3 井上 和俊

Kazutoshi Inoue, “Arrangement and Hierarchy of Polyhedral Units in Tilt Grain Boundaries”, MSM-AIMR Joint Workshop, 2020年8月, オンライン

III-4 岩崎 悠真

Yuma Iwasaki, “Material Development by Integrated Approach of Combinatorial Experiments, High-Throughput ab-initio calculation and Explainable AI (XAI)”, 10th International Workshop on Combinatorial Materials Science and Technology (2018), 2018年10月, 日本

III-5 加藤 俊顕

T. Kato and T. Kaneko, “Integrated Synthesis of Millions of Suspended Graphene Nanoribbons and its Non-Volatile Memory Applications”, 2020

Virtual MRS Spring/Fall Meeting & Exhibit, 2020年11月, アメリカ, オンライン

III-6 清水 亮太

Ryota Shimizu, “Hydrogen-content-dependent physical properties observed in metal hydride epitaxial thin films”, The 4th Japan-Korea Joint Symposium on Hydrogen in Materials, 2018年11月, 韓国

III-7 鈴木 耕太

Kota Suzuki, Ryoji Kanno, “A material search of lithium ionic conductor for all-solid-state lithium batteries”, OptoX-NANO 2019, 2019年12月, 日本

III-8 鈴木 通人

Michi-To Suzuki, “Topology and multipole inducing intrinsic anomalous Hall effect in antiferromagnets”, Second TMS-PKU alliance workshop, 2018年9月, 中国

III-9 清野 淳司

J. Seino, Ryo Kageyama, Mikito Fujinami, Yasuhiro Iwabata, Hiromi Nakai, “Orbital-Free Density Functional Theory Calculation Combined with Semi-Local Machine-Learned Kinetic Energy Density Functional”, The 2nd Global Forum on Advanced Materials and Technologies for Sustainable Development (GFMAT-2), 2019年7月, カナダ

III-10 永村 直佳

Naoka Nagamura, “Operando spatio-temporal spectral analysis using synchrotron soft X-ray”, 11th International Symposium on Transparent Oxide and Related Materials for Electronics and Optics (TOEO-11), 2019年10月, 日本

III-11 林 智広

Tomohiro Hayashi, “Operando experimental and theoretical analyses of biointerfaces and data-driven design of biomaterials”, CHEMISCHE GESELLSCHAFT ZU HEIDELBERG (ハイデルベルグ化学協会) (ドイツハイデルベルグ大学), 2019年7月, ドイツ

III-12 柳井 毅

Takeshi Yanai, “Advanced Multireference Electronic Structure Theory with ab initio Density Matrix Renormalization Group”, The 8th Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry, 2017年12月, インド

(5) その他マネジメントに関する特記事項

① ライフイベントへの対応

第一期採択者の中村研究者のライフイベントに対しては、無理がない様に研究計画や研究費の各年度配分の見直しをいただき、約2ヶ月のさきがけ期間延長にて、第二期生と同時に本研究領域を評価した。

② 領域内コミュニケーションの醸成（自発的な勉強会）

研究者の自主的な交流促進を目的として、自発的な勉強会を計6回開催してきた。特に本領域は、物理学・化学・材料工学など単独の学術分野だけでは達成しえないため、情報学・統計学・数理科学などの分野との連携・融合を、これらの勉強会などで醸成できたと評価している。

表 12 領域勉強会の開催実績一覧

No.	年度	開催月	開催地	備考
1	2015	1月	東京	初回開催（6名参加）
2	2016	8月	青森	13名参加
3		10月	名古屋	10名参加
4	2017	8月	北海道	2期生初参加（10名参加）
5	2018	4月	博多	3期生初参加（18名参加）
6	2019	6月	赤穂	他領域からの招待講演（3名）、 Sprint-8見学（計19名参加）

③ コロナ延長支援への対応

第三期採択者の相澤直矢研究者に対しては、コロナ延長支援による6ヶ月のさきがけ研究期間延長が決定している。研究計画や研究費の見直しをいただき、6ヶ月後に本研究課題を追加で評価する予定である。

7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について

(1) 研究総括のねらいに対する研究成果の達成状況

本研究領域は、実験科学、理論科学、計算科学、データ科学の連携・融合を強力に推進し、それぞれの手法の強みを活かしつつ相互に得られた知見を活用しながら新物質・材料設計に挑む先進的マテリアルズインフォマティクスの基盤構築と、それを牽引する将来の世界レベルの若手研究リーダーの輩出を目指した。領域全体のポートフォリオにも配慮して課題を採択したことで、3期あわせて実験科学者12名、理論科学者13名、計算科学者11名、データ科学者5名の内訳となり、ねらい通り物質・材料研究にデータ科学を導入するという共通の目的を通じて研究者が互いに刺激し合い、実質的な連携が行われた。特に本領域で採択したデータ科学者は、データ科学に関して経験の浅い物質・材料研究者の良き相談相手となり、またさまざまな共同研究に参加することで、本領域の全体的な底上げに大きく貢献した。

本領域の公募にあたっては、マテリアルズインフォマティクスの研究テーマ例を幅広く示し（「4. 研究課題の選考について」図1参照）、さらにその例示にとられない応募を推奨した。結果的に、

- ① 新物質・新材料の発見（スピン熱電材料、高性能遅延発光材料、カーボンナノチューブの選択的合成触媒など）
- ② 物質・材料の安定性や機能を決定する記述子(descriptor)の提案と高精度物性予測（沸点・共沸、発光材料など）
- ③ 候補材料のハイスループットスクリーニング手法の提案と実証（太陽電池材料、発光材料、電池材料、触媒など）
- ④ 先行する欧米にはない独自の電子状態データベース構築（半導体欠陥、バンド構造を記述する強束縛モデル、磁気多極子）
- ⑤ 放射光や電子顕微鏡による大量計測データの自動解析手法の開発
- ⑥ ガラスや液体の構造解析手法の開発
- ⑦ 粒界構造の数学的特徴の発見
- ⑧ 誤差の少ない生体物質の吸着データ取得と特性予測
- ⑨ ロボット技術を用いた薄膜成長の完全自動化
- ⑩ 新物質および新物質合成手法の推薦システムの提案と実証（酸化物、二次電池電極材料）

など、多様な切り口で、非常に多くのオリジナリティの高い成果が得られ、領域の当初目的を十分に達成したと考えている。

(2) 研究領域全体として見た場合の特筆すべき研究成果

<第一期生>

佐伯昭紀研究者：実験データの機械学習による有機分子のバーチャルスクリーニングと、デバイス作成を要しない独自の実験的高速スクリーニング法により、有機太陽電池材料の探索に成功した。また、高品質成膜技術も開発した。

世古敦人研究者：機械学習のための様々な元素・結晶構造・化合物記述子を開発しました。また、第一原理計算により様々な物性データセットを構築し、予測モデルを作成することにより、記述子の有効性を実証した。さらにオンラインショッピングなどで利用される「推薦システム」を材料開発に持ち込むという斬新な試みを行い、領域内のさきがけ研究者と連携してその有用性を示した。

<第二期生>

溝口照康研究者：転移学習とベイズ最適化を組み合わせ、従来に比べて約 3600 倍も高速に界面構造を計算で予測する手法を開発した。またニューラルネットワークを利用することで、スペクトルデータから物質情報を直接決定するための手法も開発し、界面構造の計算だけでなく、実験的な解析にも有効な手法を開発した。

緒明佑哉研究者：自前の小規模データからの機械学習と研究者の経験や考察によって予測モデルを構築することにより、原子層単層から数層ほどの厚さをもつナノシート材料の合成プロセスや、リチウムイオン二次電池の新しい有機負極活物質の探索において、これまでの試行錯誤のみ頼った実験よりも効率的に収率向上や新規物質の発見に成功した。

<第三期生>

相澤直矢研究者：2 期生の原遡祐研究者とともに、有機半導体の弱いスピン-軌道相互作用に基づく逆項間交差の速度定数を、計算で予測する方法を開発した。また、この予測法を活用して、従来の 100 倍高い速度定数を持つ熱活性化遅延蛍光分子を設計・合成し、高輝度時にも 20%という高い外部量子効率を示す有機 EL デバイスを実現した。

岩崎悠真研究者：解釈性の高いホワイトボックス型の AI 技術、コンビナトリアル実験、計算機シミュレーションを駆使して研究を行い、世界記録を更新する高効率なスピン熱電材料（一部未発表）を含む、複数の新材料候補を発見した。

加藤俊顕研究者：これまで人間の手作業では限界があった合成条件と合成触媒の探索を、独自の高速スクリーニング手法と機械学習を活用して高効率化した結果、電子物性を支配するカイラリティ分布がこれまでになく均一な、単一カイラリティカーボンナノチューブ(CNT)の合成に成功した。

清水亮太研究者：ロボット技術を用いて薄膜合成の全自動化を実現し、機械学習を用い

た材料創生につながるシステムを作り上げた。

(次ページから各 1 ページで各研究課題の概要を掲載。ただし溝口照康研究者のみ 2 ページで掲載。)

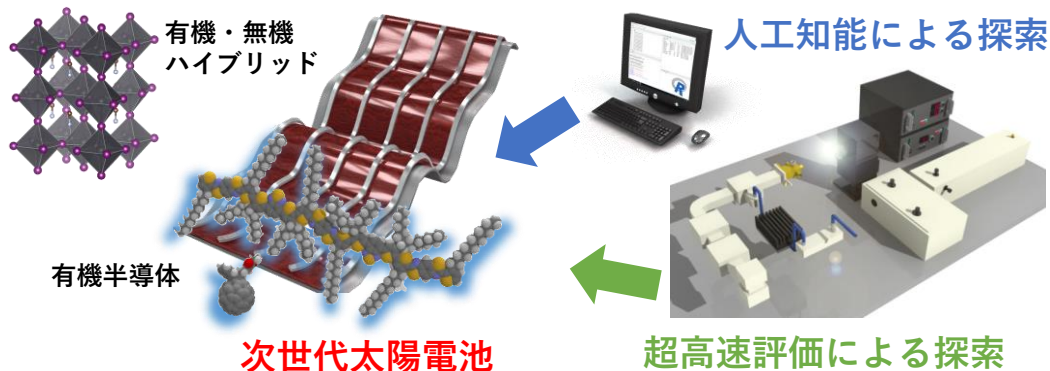
【佐伯昭紀研究者：研究概要】

人工知能と実験の融合で太陽電池開発を高速化！

佐伯 昭紀（大阪大学 大学院工学研究科・准教授）

研究課題名：「超高速スクリーニング法を駆使したエネルギー変換材料の探索」

研究期間：2015.11～2019.03



人工知能と超高速評価を組み合わせ、次世代太陽電池材料を探索

人工知能（機械学習）によるバーチャル材料スクリーニングと、実材料の光電変換機能を超高速に評価できる実験的スクリーニングを組み合わせ、有機薄膜太陽電池やペロブスカイト太陽電池といった次世代太陽電池の材料を探索します。

太陽電池は持続可能なエネルギー源として最も期待を集めており、すでにシリコンや無機化合物半導体からなる太陽電池が実用化されています。しかし、これらは価格・重量に課題があるため、次世代太陽電池の開発が進められています。電気を流すプラスチック（有機半導体）などで作られる有機太陽電池や、ペロブスカイト構造を有する有機無機ハイブリッド太陽電池は、その候補として注目されています。しかし、この有機半導体やハイブリッド材料には、ほぼ無限の分子構造や結晶構造が考えられ、通常の合成と評価では開発速度に限界がありました。そこで、実験データを基にした人工知能（機械学習）を開発し、有機太陽電池に適用可能な高分子構造のバーチャルスクリーニングを行いました。また、実際の材料を太陽電池素子にするには、薄膜化技術や素子構造の最適化など、多くの実験的な検証が必要であり、時間と労力を必要とします。そこで、太陽電池性能を簡便かつ迅速に予測できる独自の実験的スクリーニング法を用い、数百種類もの材料の中から高性能材料の探索と高品質成膜技術を開発しました。

➤ 論文

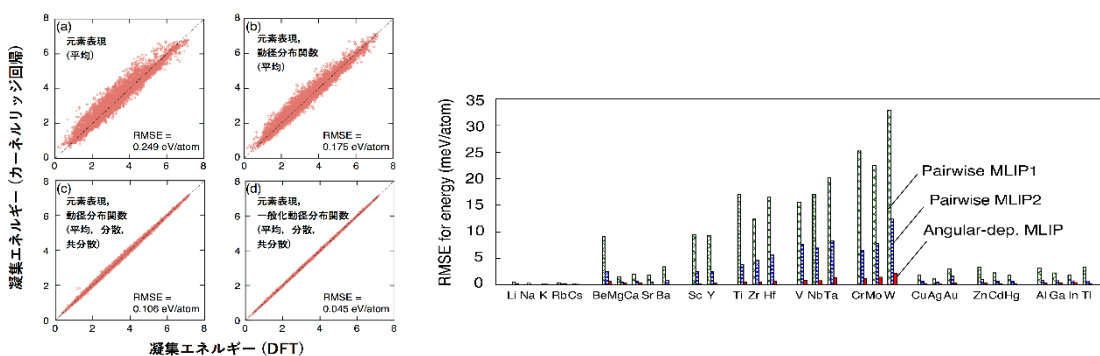
1. Nishikubo, R., Saeki, A. et al., **Adv. Mater.** 2017, 29, 1700047.
 2. Nagasawa, S., Saeki, A., et al., **J. Phys. Chem. Lett.** 2018, 9, 2639.
 3. Yamada, K., Saeki, A. et al., **ACS Photonics** 2018, 5, 3189
 2. 「オーロラのようなゆらめきをする温度応答溶液を実現—イオンと分子が高温で析出する新たな特異現象を発見—」（2017年4月）
 3. 「高分子太陽電池、人工知能で性能予測～1,200個の実験データから有効性を実証～」(2018年5月)
 4. 「2段階の熱処理で高品質のビスマス系薄膜～光応答性能を向上、次世代太陽電池開発に期待～」(2018年9月)
- プレスリリース
1. 「次世代太陽電池の材料探索時間を10分の1以下に短縮！～データ科学と高速評価法を使って、次世代太陽電池の実用化を加速～」(2016年8月)

様々な記述子開発により機械学習による物性予測が現実的に

世古 敦人（京都大学 大学院工学研究科・准教授）

研究課題名：「機械学習手法による合理的な材料物性予測技術の構築」

研究期間：2015.11～2019.03



凝集エネルギーのカーネルリッジ回帰予測値（左）
および単体金属 31 元素における機械学習ポテンシャルの予測誤差（右）

(左) 1万を超える化合物に対する高精度予測モデルを構築することができました。(右) 多くの物質に対する高精度な原子間ポテンシャルを構築することができました。

機械学習を利用した材料探索・結晶構造探索などにおいては、予測する物性についてのデータベースをもとに、物性の機械学習予測モデルを構築することが一般的な方法です。このような物性予測モデルの予測精度の大部分は、記述子(物性予測モデル構築のための説明変数)により決定されます。よって、本研究では、機械学習のための様々な元素・結晶構造・化合物記述子を開発しました。また、第一原理計算により様々な物性データセットを構築し、予測モデルを作成することにより、記述子の有効性を実証しました。

本研究の記述子は、以下の3つに分類されます。①物理・化学・材料科学の分野において、古くから様々な用途で使われている量を拡張し、網羅的な形で記述子として利用しました。電気陰性度、擬ポテンシャル半径などの元素記述子、動径分布関数などの構造記述子が該当します。②元素種や化学組成を直接的に記述子として利用しました。元素の有無を1または0で表現するOne-hot表現などが該当します。③群論的方法による化合物データや物性の対称性を満たす系統的な記述子を提案しました。

論文

1. A. Seko et al., Phys. Rev. B 99, 214108 (2019)
2. A. Seko et al., Phys. Rev. Mater. 2, 013805 (2018)
3. A. Seko et al., J. Chem. Phys. 148, 241719 (2018)
4. A. Seko et al., MRS Bulletin 43, 690--695 (2018)
5. A. Takahashi, A. Seko et al., J. Chem. Phys. 148, 234106 (2018)
6. A. Takahashi, A. Seko et al., Phys. Rev. Mater. 1, 063801 (2017)
7. A. Seko et al., Phys. Rev. B 95, 144110 (2017)
8. J. Lee, A. Seko et al., Phys. Rev. B 93, 115104 (2016)
9. A. Seko, A. Togo and I. Tanaka, Descriptors for Machine Learning of Materials Data, in Nanoinformatics (Springer, Open access)

受賞

1. 本多記念奨励賞, (2016)

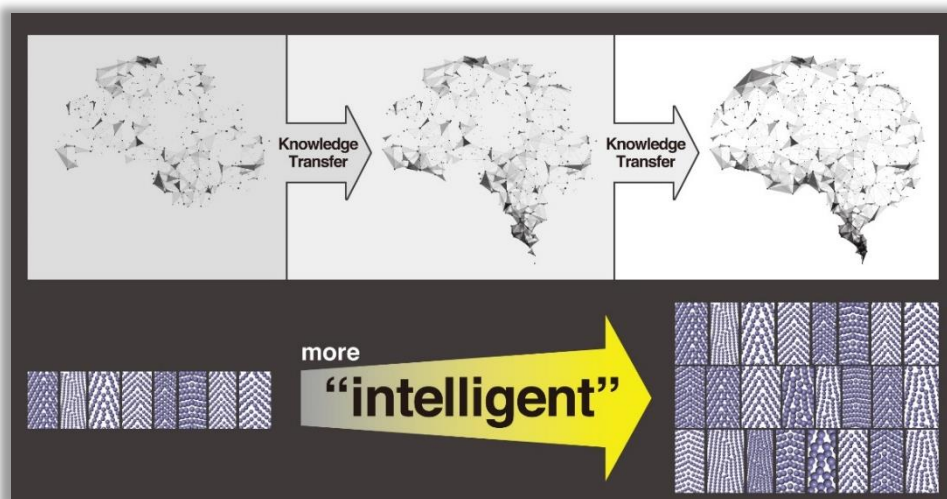
【溝口照康研究者：研究概要】

人工知能技術＋物質構造解析＝夢の社会の実現

溝口 照康（生産技術研究所・教授）

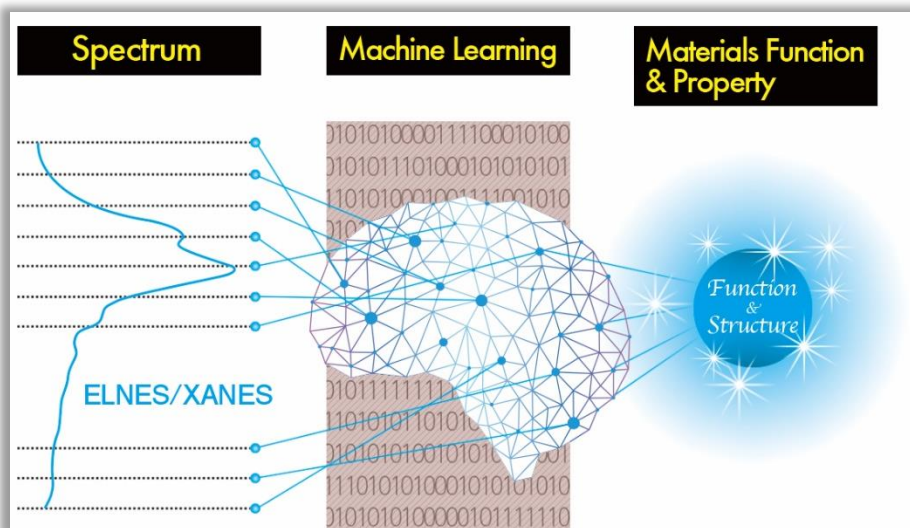
研究課題名：「情報科学手法を利用した界面の構造機能相関の解明」

研究期間：2016.10～2020.03



人工知能が「繰り返し学習すること」で計算コストを1/3600に削減

物質内部に無数に存在する「界面」の構造は、電池や触媒など多くの機能に決定的な役割を果たしています。その複雑な構造を明らかにするためには膨大な計算量が必要でした。本研究により、転移学習という技術を使って人工知能が繰り返し学習することで、界面構造決定のための計算コストを約1/3600まで削減することに成功しました。



理論計算や専門知識を用いずに人工知能がスペクトルから物質の構造や機能を直接定量

物質開発の現場では、その構造を明らかにするためにスペクトルの計測が行われる。一方で、スペクトルから機能まで推測するには、複雑な理論計算や専門知識が必要だった。本研究では、人工知能技術を利用し、スペクトルから直接、物質の構造と機能を決定する新手法を開発した。

過電流から電気機器を保護するためのバリスタ素子や、2019年にノーベル賞を受賞したリチウムイオン電池で使われているイオン伝導体など、世の中にある物質の多くは「界面」と呼ばれる領域を

多数含有しております。界面は特異な特性をしめすため、界面の構造を解析することは材料研究において最も重要なテーマとされてきました。一方で、複雑な界面の構造を決定するためには膨大な量の計算、もしくは複雑な実験を行う必要があり、界面の研究は困難と考えられてきました。

本研究は人工知能技術を利用して、物質の界面構造を解析する手法を加速することを目的としました。本研究により、人工知能技術の転移学習とベイズ最適化を組み合わせ、約 3600 倍も高速に界面構造を決定する手法を開発しました。さらに、人間の脳を模したニューラルネットワークを利用することで、スペクトルデータから物質情報を直接決定するための手法も開発し、界面構造の計算だけでなく、実験的な解析にも有効な手法を開発することができました。現在工業的に使用されている物質の多くにおいて界面は重要な役割を果たしており、物質開発のスピードを上げるためには、界面の構造を決定し、その機能を理解することが不可欠です。今回開発した手法を利用することで、界面の構造をより効率的に決定することができ、物質の開発スピードが加速されることが期待されます。

物質開発のスピードが加速されれば、長期間充電不要な携帯電話や電気自動車をつくることができたり、環境負荷のほとんどない発電システムを実現できたりするかもしれません。今後は、人工知能と物質構造解析を組み合わせた研究をさらに発展させ、そんな夢の社会をつくることに貢献していきたいと思います。

➤ **論文**

1. H. Oda, S. Kiyohara, K. Tsuda, and T. Mizoguchi, "Transfer Learning to Accelerate Interface Structure Searches", *J. Phys. Soc. Jpn*, 86 (2017) 123601-1-4.
2. S. Kikuchi, H. Oda, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi, "Bayesian optimization for efficient determination of metal oxide grain boundary structures", *Physica B*, 532 (2018) 24-28.
3. S. Kiyohara and T. Mizoguchi, "Searching the stable segregation configuration at the grain boundary by a Monte Carlo tree search", *J. Chem. Phys.*, 148 (2018) 241741-1-6
4. S. Kiyohara, T. Miyata, K. Tsuda, and T. Mizoguchi, "Data-driven approach for the prediction and interpretation of core-electron loss spectroscopy", *Scientific Reports*, 8 (2018) 13548-1-12
5. S. Kiyohara, M. Tsubaki, Kunyen Liao, and T. Mizoguchi, "Quantitative estimation of properties from core-loss spectrum via neural network", *J. Phys.: Materials*, 2 (2019) 024003-1-9
6. H. Oda, S. Kiyohara and T. Mizoguchi, "Machine learning for structure determination and investigating the structure-property relationships of interfaces", *J. Phys.: Materials*, 2 (2019) 034005-1-8
7. T. Mizoguchi and S. Kiyohara, "Machine learning approaches for ELNES/XANES", *Microscopy*, in press.
doi.org/10.1093/jmicro/dfz109 [Invited review]

➤ **本執筆**

1. "Nanoinformatics", Springer (2018)
2. Chapter 8, "Atomic-Scale Nanostructures by Advanced Electron Microscopy and Informatics" 執筆担当
3. "Machine Learning in Chemistry: The Impact of Artificial Intelligence", Royal Society of Chemistry, (2020) 印刷中, (Hugh Cartwright edited)
4. Chapter "Machine learning for core-loss spectroscopy" 執筆担当

➤ **受賞**

1. 功績賞, 日本金属学会, 2017 年 3 月
2. 風戸賞, 風戸研究奨励会, 2017 年 3 月

➤ **プレスリリース**

1. 2019 年 3 月 26 日 「理論計算や専門知識いらず！人工知能がスペクトルから物質の構造や機能を直接定量 ～物質開発の加速に期待～」
記事掲載: 日刊工業新聞, 日経産業新聞等
2. 2018 年 9 月 7 日 「人工知能が専門家の約2万倍の速さでスペクトルを解釈」
記事掲載: 日刊工業新聞, 鉄鋼新聞等
3. 2017 年 12 月 15 日 「世界初、液体中の原子1つ1つの運動を観察！ ～ 高性能電池や溶媒の開発、液体中の現象解明に革新～」
記事掲載: 日刊工業新聞, 化学工業日報, 鉄鋼新聞等
4. 2017 年 12 月 12 日 「電子顕微鏡で気体分子の挙動や特性に迫る」
オンライン掲載: オプトロニクス, 日経オンライン, 等
5. 2017 年 11 月 15 日 「人工知能が「繰り返し成長すること」で計算コストを1/3600に削減 ～ 界面構造を高速に決定し、高性能な物質開発を加速～」
記事掲載: 日刊工業新聞, 化学工業日報等

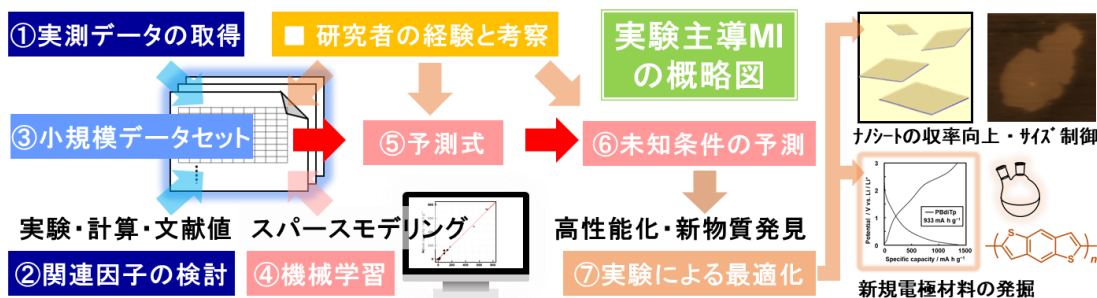
【緒明佑哉研究者：研究概要】

小規模実験データへのマテリアルズインフォマティクス

緒明 佑哉 (慶應義塾大学 理工学部・准教授)

研究課題名：「はく離挙動を制御する指針の確立によるナノシート材料の機能設計」

研究期間：2016.11～2020.03



本研究で確立した小規模実験データへのマテリアルズインフォマティクスの概要

化学実験で得られる少ない実験データ (①) とそれらを支配していると考えられる因子 (②) から、小規模なデータセットを作成し (③)、機械学習 (④) と研究者の経験・考察を融合して単純な予測モデル (式) を構築する (⑤)。さらに、その予測式を利用して未知なる実験条件の結果を予測し (⑥)、その予測に基づいた実験とさらなる最適化により (⑦)、新物質発見や性能向上を最小実験数で達成する。

実験化学者は、新しい物質・材料を開発すべく実験を行うので、多くのデータを持っています。しかし、その自前の実験データは、一般にビックデータと呼ぶ程の量には達しません。また、研究者やグループごとにデータの形式や測定条件が異なったりするため、質が異なります。そのため、自分たちの比較的小規模な実験データをいかに活用できるかが重要になります。本研究では、原子層単層から数層ほどの厚さをもつナノシート材料の合成プロセスや、リチウムイオン二次電池の新しい有機負極活物質の探索において、自前の小規模データから機械学習と研究者の経験や考察によって、これまでの試行錯誤のみ頼った実験よりも効率的に収率向上や新規物質の発見に成功しました。このように、地道な実験によって得られた貴重な小規模データも、人工知能と人間の知能の協働によって有効活用できれば、材料の研究開発が加速することが期待されます。

論文

1. Oaki Y., et al.. Advanced Theory and Simulations 2019, 2, 1800180 (11 page s).
2. Oaki Y., et al.. Advanced Theory and Simulations 2019, 2, 1900130 (10 page s).
3. Oaki Y., et al.. Chemical Communications 2018, 52, 244.

受賞

1. 平成 30 年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞

プレスリリース

1. 「マテリアルズインフォマティクスを活用しリチウム電池負極用の有機材料で世界最高水準の性能を達成～少ない実験データに経験知と機械学習を融合して～」(2019 年 9 月)
<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20190906/index.html>
2. 「マテリアルズインフォマティクスを活用してナノシート材料の高効率合成が初めて可能に」(2019 年 1 月)
<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20190110/index.html>

【相澤直矢研究者：研究概要】

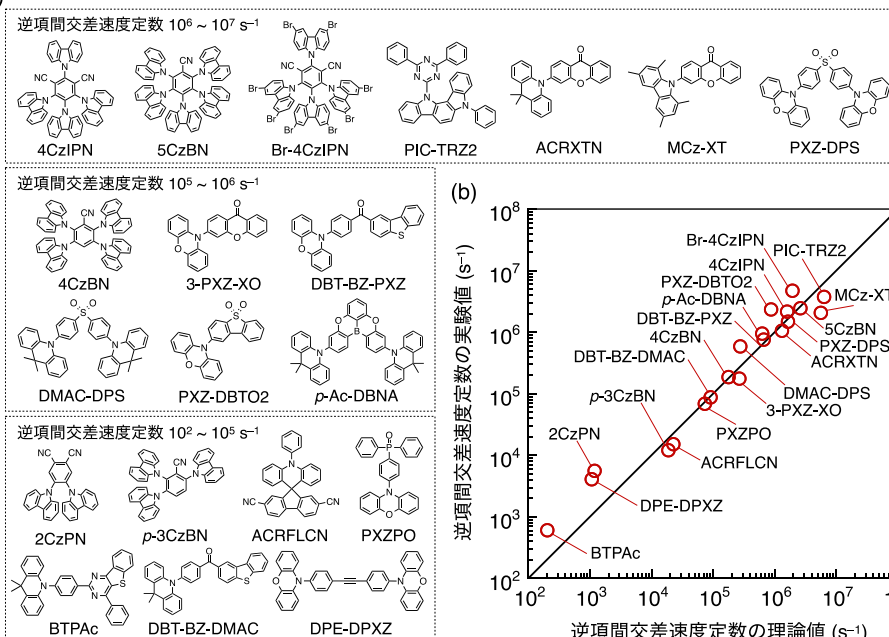
コンピューターが有機半導体の性質を予言！

相澤 直矢（理化学研究所創発物性科学研究センター・基礎科学特別研究員）

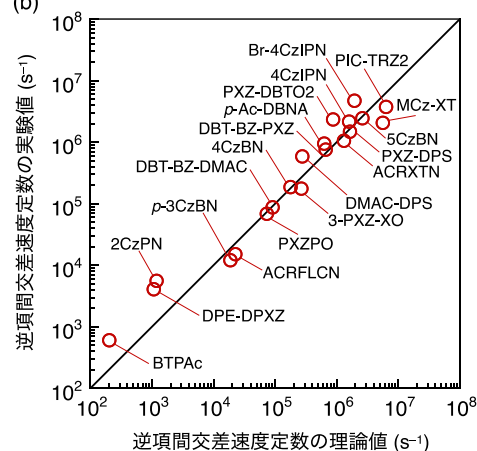
研究課題名：「励起状態の仮想スクリーニングによる革新的有機半導体の探索と実用」

研究期間：2017.10～2021.3（新型コロナウイルス感染症の影響を受け2021年9月まで延長）

(a)



(b)



開発した理論計算法による逆項間交差速度定数の予測

(a) 計算対象とした有機半導体の分子構造。(b) 逆項間交差速度定数の実験値-理論値プロット。プロットが実線に近いほど理論が実験値を精度良く再現していることを表します。

安価・軽量・フレキシブル・プリンタブル・希少金属フリーといった利点を有する「有機半導体」の創出は、有機 EL をはじめとする次世代の電子デバイスの根幹を担う重要な課題であり、世界中の研究者が優れた分子設計指針と特性を求めて、日夜しのぎを削っています。

本研究では、有機半導体の弱いスピン-軌道相互作用に基づく逆項間交差の速度定数(kRISC)を、コンピューターを用いた量子化学計算により予測する方法を開発しました(参考情報 論文 1)。また、この予測法を活用して、高い kRISC を示す発光材料を設計・合成し、有機 EL デバイスへ応用しました。開発した材料の kRISC は、従来材料の約 100 倍に相当する 10^8 s^{-1} に到達し、作製した有機 EL デバイスは 104 cd m^{-2} の高輝度時においても 20%以上の高い外部量子効率を示しました(参考情報 論文 2)。現在、量子化学計算と機械学習を組み合わせたマテリアルズ・インフォマティクス研究を推進しており、新規材料の効率的な探索とデバイス性能の飛躍的な向上に繋がる学理の樹立を目指しています。

<論文>

1. Naoya Aizawa, Yu Harabuchi, Satoshi Maeda, Yong-Jin Pu, Nature Communications, 11, 3909 (2020).
2. Naya Aizawa, Akinobu Matsumoto, Takuma Yasuda, Science Advances (2021), 7, 5769 (2021).

<受賞>

1. 「CEMS Rising Star Award」(2018)
2. 「高柳健次郎財団第 35 回研究奨励賞」(2019)

<プレスリリース・成果展開>

1. 「有機半導体の逆項間交差を理論予測～有機EL材料の開発加速～」(2020年8月)

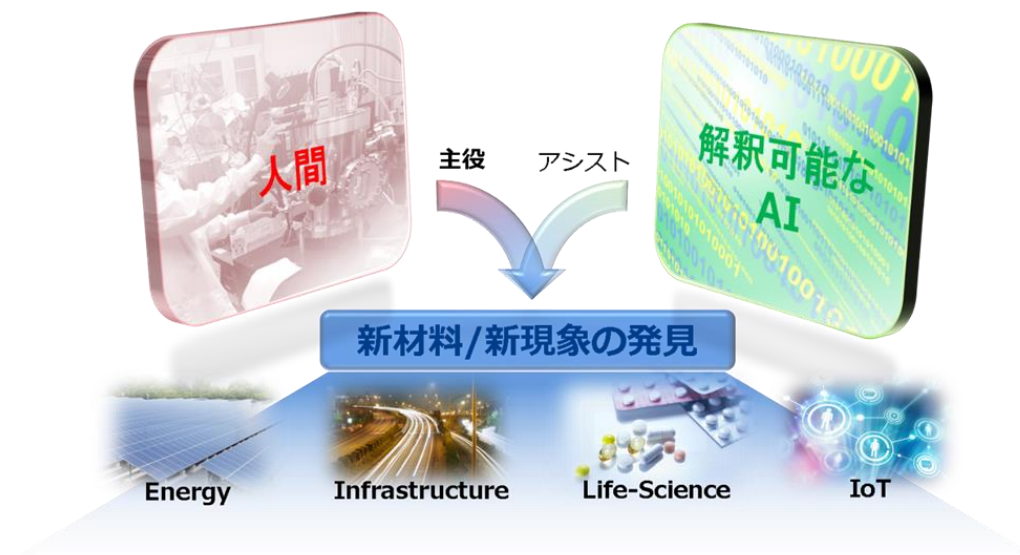
【岩崎悠真研究者：研究概要】

人と AI が協創するマテリアルズ・インフォマティクス

岩崎 悠真（産業技術総合研究所 特専研究員）

研究課題名：「材料開発に特化した高精度ホワイトボックス型機械学習手法の開発とそのスピン熱電材料開発への応用」

研究期間：2017.10～2021.03



解釈可能な AI を用いたマテリアルズ・インフォマティクス

物理・化学・材料学等の専門知識を有した人間が、解釈性の高い AI の内部を読み解くことによって、人間だけでは思いつくことができなかった奇抜な新材料や新法則の発見が可能となります。

AI 囲碁等による AI ブームの影響から、材料開発の分野でも AI 技術を用いた取り組みが行われています。囲碁などでは、AI が人間を超越した存在となっていますが、材料開発の分野では解くべき問題が複雑であるため、AI 技術のみですべてを解決することはできません。そのため、材料開発では『人と AI の協創』が重要となります。しかし、深層学習等の AI は、内部がブラックボックスとなっているため、AI の内部を人間が解釈・解析することが難しく、人間が所有する物理・化学・材料学の知見と AI をうまく融合させたマテリアルズ・インフォマティクスを展開することは困難でした。

そこで本研究では、解釈性の高いホワイトボックス型の AI を用いたマテリアルズ・インフォマティクスのシステム(手法)を構築しました。さらに、本システムを用いて新材料の発見・合成に成功しました。

『人と AI が協創するマテリアルズ・インフォマティクス』を展開することができる本システムは、様々な材料開発に展開することが容易であるため、材料開発全体に貢献することができます。

論文

Y. Iwasaki et al. Identification of advanced spin-driven thermoelectric materials via interpretable machine learning. npj Comput. Mater. 5, 103 (2019)...

プレスリリース

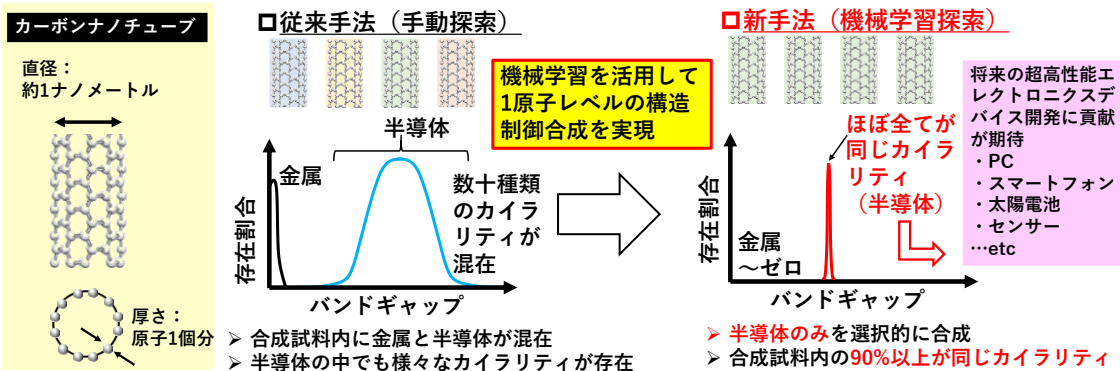
NEC と東北大、「開発者が解釈可能なマテリアルズ・インフォマティクス」で特性向上の主要因を抽出する手法を開発 (2019 年 10 月)

AIでカーボンナノチューブの原子配列を制御

加藤 俊顕（東北大学 大学院工学研究科・准教授）

研究課題名：「機械学習を活用したナノカーボンアトミックエンジニアリング」

研究期間：2017.10～2021.3



機械学習を用いたカーボンナノチューブの原子構造制御合成概略図

(左)典型的な単層カーボンナノチューブの構造模式図。(中)従来手法と(右)新手法で合成されるナノチューブのバンドギャップ(構造によって決まる電気特性)と合成試料内における存在割合の関係。

カーボンナノチューブという材料は、炭素原子1個分の厚みからなる二次元炭素シートが円筒状に丸まった構造を持ちます(図(左))。このカーボンナノチューブは、直径が僅か1ナノメートル程度の究極のナノ材料であり、既存のあらゆる材料と比較して、非常に優れた電气的性能を持ちます。このため、将来のPCやスマートフォン等の超高性能エレクトロニクス応用に欠かすことのできない新材料として注目されています。ナノチューブの電气的特性はカイラリティと呼ばれる原子構造により決定されるため、様々な応用分野で活用するには、カイラリティの制御が必須です。従来手法で合成したナノチューブの場合、一度の合成で数億本以上のナノチューブが合成できますが、その試料内には数十種類以上のカイラリティが混在した状態です(図(中))。将来の超高性能エレクトロニクス応用には、合成した試料内の構造ばらつきを極限まで抑制し、一種類のみのカイラリティが高純度で存在した単一カイラリティナノチューブ合成が25年以上に渡り重要な課題とされ世界中で研究されています。そこで本研究では、機械学習を活用してナノチューブの原子配列を制御した単一カイラリティ合成に挑戦しました。これまで人間の手作業では限界があった合成条件探索を機械学習を活用して高効率化した結果、合成試料内のカイラリティ分布が極めて均一な単一カイラリティナノチューブの合成に成功しました(図(右))。この手法を活用することで、ナノチューブが本来持つ優れた特性を様々な応用分野に活用した、超高性能エレクトロニクスの実現が期待できます。

<論文>

1. Li C., et al., Scientific Reports, 2019, 9, 12958-1-7.
2. Li Q.-Y., et al., ACS Nano, 2019, 13, 9182-9189.
3. Suzuki H. et al., Scientific Reports, 2018, 8, 11819-1-9.

<プレスリリース>

1. 「グラフェンナノリボンを使った新型メモリを開発 フレキシブル不揮発性メモリの実現に期待」(2018年8月)
2. 「半導体原子シートの新たな合成機構を解明 ～次世代フレキシブル光電子デバイス実現に期待～」(2019年9月)

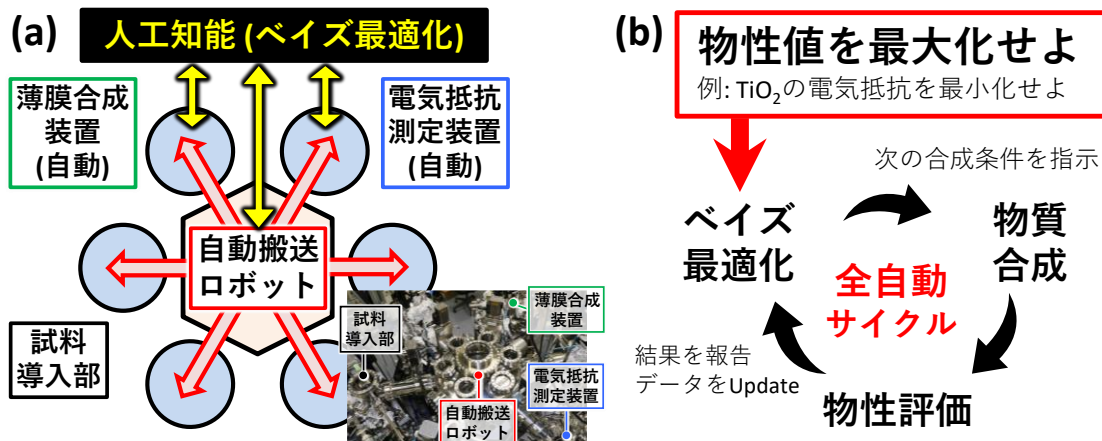
【清水亮太研究者：研究概要】

無機固体物質研究に向けたロボット科学者の誕生

清水 亮太（東京工業大学 物質理工学院・准教授）

研究課題名：「自律的ものづくりを導入した金属水素化物の革新的新機能創出」

研究期間：2017.10～2021.3



本研究で開発した無機薄膜合成ロボットシステムの構成図(a)と研究の概念図(b)

(a) 自動化された試料搬送・薄膜合成・抵抗測定の各過程と、ベイズ最適化による条件指示をコンピュータで管理します。

(b) 本システムによる物質合成の概念図。二酸化チタン(TiO₂)の電気抵抗最小化を例として、ベイズ最適化による合成条件指示・物質合成・抵抗評価を行い、その結果を加えたデータセットから新たな合成条件を指示、というサイクルを全自動・自律的に行います。

化学や素材、自動車、エレクトロニクス産業などにおいて、新物質・材料研究スピードの向上が急務となっています。その一方で、従来の物質研究では、目的とする物質を1つずつ丁寧に作製し、合成条件の最適化も人間が行っており、研究スピードには限界がありました。さらに、with/postコロナにおいて働き方改革を推進するため、遠隔操作による実験の重要性も高まっています。

そこで本研究では、物質合成と電気抵抗評価を全自動で行うロボット技術と、合成条件最適化を行う人工知能(ベイズ最適化)を統合し、全自動かつ自律的に薄膜合成を行う物質探索ロボットシステムを開発しました。

このシステムにより、従来の10倍のスピードで、人間が介在することなく(自律的)二酸化チタン薄膜の電気抵抗を最小化することに成功しました。本研究は無機固体物質用として世界で初めてのシステムです。

今後は、研究者が繰り返し単純作業から解放され、より創造的な研究活動に従事できます。研究スピード向上と遠隔操作を実現し、「物質研究開発の進め方を改革する」ことが大きな狙いです。

<論文>

1. Ryota SHIMIZU et al., APL Mater. 8, 111110 (2020).
2. Ryota SHIMIZU et al., J. Phys. Soc. Jpn. 89, 051012 (2020).

<受賞>

1. 令和2年度文部科学大臣表彰 若手研究者賞 (2020).
2. 平成30年度東工大挑戦的研究賞

<プレスリリース>

1. 「自律的に物質探索を進めるロボットシステムを開発 -物質・材料研究開発の進め方について革新を起こす-」(2020年11月)

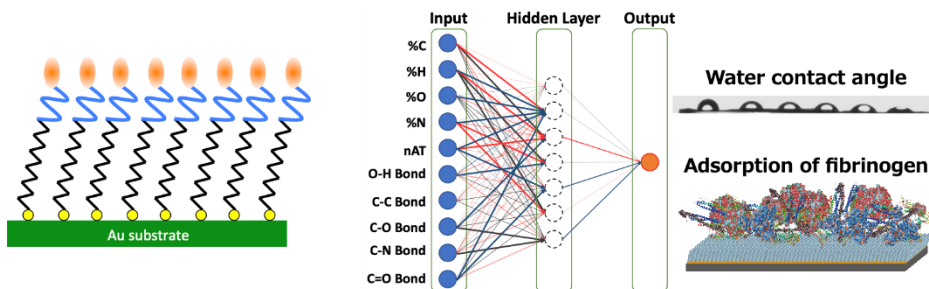
【林智広研究者：研究概要】（※ 第6章（4）で記載）

データ科学を用いて生体材料を設計

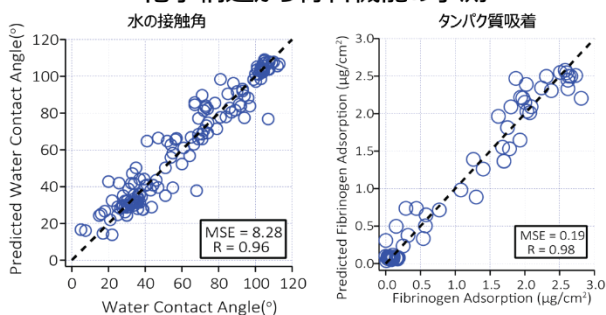
林 智広（東京工業大学 物質理工学院・准教授）

研究課題名：「マテリアルズインフォマティクスと実験の融合による階層的マルチスケールバイオ界面の解析と医療用バイオマテリアルの開発」

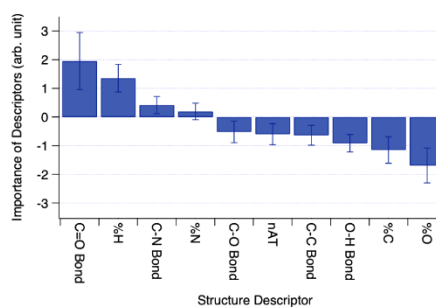
研究期間：2017.10～2021.3



化学構造から材料機能の予測



構造パラメータの重要性の定量化



データ科学を用いた単分子膜バイオマテリアルの設計

人工ニューラルネットワークモデルを用いて化学構造とタンパク質吸着の相関を解析し、材料のスクリーニングに応用した。

本さきがけ研究を通じて機械学習を用いて、生体材料を設計する新たな手法の確立に成功しました。有機薄膜の水への濡れ性、膜へのタンパク質吸着に関する過去の文献・実験データを活用してデータベースを構築し、機械学習を用いて、膜を構成する分子の化学構造と膜の特性の相関解析を行いました。これに基づいて、生体材料の化学構造から材料の濡れ性、タンパク質の吸着量を正確に予測する手法を開発しました。

この手法は未知の材料の材料特性なども予測することができ、将来は材料の高速スクリーニング（必要なものを選び出すこと）に応用し、材料開発の時間とコストを大幅に削減する可能性があることを明らかにしました。

<論文>

1. R. J. Kwaria, et al. ACS Biomaterials Science & Engineering 2020, 6, 4949.
2. 林智広ら 有機分子・バイオエレクトロニクス分科会誌 2019, 30, 228.
3. クアリアら バイオマテリアル-生体材料- 2019, 37, 238.

<プレスリリース>

1. 「AIを使い生体材料(バイオマテリアル)の設計に成功」(2021年8月)
<https://www.titech.ac.jp/news/2020/047725.html>

(3) 研究成果の科学的・技術的な観点からの貢献

本領域は日本においてマテリアルズインフォマティクスが定着する以前、NIMS の情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I) と同時期に始まり、若手研究者の自由な発想による個人研究として、多種多様な物質・材料を対象に、さまざまな切り口で独創的・挑戦的・先駆的な課題研究が実施された。その結果、それぞれの研究で科学的成果や将来につながる技術的進展が得られた。開発された手法は論文や解説記事、各種学会での招待講演等を通して普及が図られ、またデータ解析ソフトウェアやデータベースのいくつかは、公開に向けた準備がなされている。

マテリアルズインフォマティクス研究では米国が先行しているが、大型予算を投入して大きなグループで集中的に研究が行われた米国とは異なり、本領域では個人研究としてのさきがけの特徴を生かし、絞り込んだテーマに対して挑戦的研究が実施された。また異分野の研究者が自由な雰囲気の中で情報交換することにより、全体的に研究が底上げされ、著名な国際学術雑誌に掲載されるような国際的にも高水準の成果が多数得られた (国際学術雑誌論文 381 報)。

本領域において、インターネット上の人工的なデータに比べれば圧倒的にデータ量の少ない物質・材料の研究でも、データ科学的手法を利用することで研究上大きなメリットがあること、すなわちマテリアルズインフォマティクスが有用であることが、さまざまな実例によって示された。このことは、実験科学、計算科学におけるデータ取得と蓄積の重要性を示唆しており、領域外の研究者にとっても、今後の研究戦略を見直す機会となるような、インパクトのある成果であるといえる。

(4) 研究成果の社会的・経済的な観点からの貢献

さまざまな材料や用途でデータの利用が期待される産業界にとって、本領域で示された多種多様なマテリアルズインフォマティクスのあり方は、有益な情報となるはずである。実際、本領域が行った3回の公開シンポジウムでも、企業からの参加者が非常に多く (53%)、その注目度の高さがうかがわれる。

本領域で得られた複数のハイスループットスクリーニング実験手法、放射光実験データのハイスループット解析手法 (ソフトウェア公開予定)、少ないデータからの機械学習を用いた予測手法などは、企業の研究においても直ちに利用可能と思われるほか、ロボット技術を用いた薄膜合成の自動化手法も産業応用に直結する成果である。

特許は7件出願された。

(5) 本研究領域に続く研究資金の獲得状況

本研究領域の研究者は、文科省科研費、文科省元素戦略プロジェクト<研究拠点形成型>、新規さきがけ、CREST などの研究費を獲得して研究を継続している。

- 小原真司研究者
文部科学省科学研究費助成事業 学術変革領域研究 (A) / 「超秩序構造が創造する物性科学」領域 2020 年度採択
- 熊谷悠研究者
文部科学省科元素戦略プロジェクト 研究拠点形成型 / 電子材料領域 2018 年度採択
- 志賀元紀研究者
文部科学省科学研究費助成事業 学術変革領域研究 (A) / 「超秩序構造が創造する物性科学」領域 2020 年度採択
- 溝口照康研究者
CREST / 「革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明」領域 2019 年度採択
- 永村直佳研究者
さきがけ / 「電子やイオン等の能動的制御と反応」領域 2020 年度採択

(6) その他の特記事項

本研究領域では、多数のデータベースやソフトウェアが作成され、研究期間終了後も作成者によって利用されている。多くは個人利用にとどまるが、一部は公開されたり、公開に向けて準備が進められたりしているものもある。

(公開済み、もしくは公開準備中のものを抜粋)

- ・ 酸化物計算材料 DB (熊谷 悠研究者)
- ・ 磁気構造データベース (鈴木通人研究者)
- ・ スペクトルイメージングから化学成分を同定するソフトウェア (志賀元紀研究者)
- ・ 放射光 X 線イメージングのデータ解析ソフトウェア (永村直佳研究者)

研究成果の発表状況要約

- ・ 国際学術雑誌論文 384 報
- ・ 国内学術雑誌論文 17 報
- ・ 受賞者数 19 名 (文部科学大臣表彰若手科学者賞、日本学術振興会賞、本多記念奨励賞、日本金属学会功績賞ほか)
- ・ プレスリリース 28 件
- ・ 報道 (新聞、雑誌、テレビ等) 54 件
- ・ 書籍、総説、解説等 56 件

8. 総合所見

(1) 研究領域のマネジメント

本研究領域は、日本におけるマテリアルズインフォマティクス研究の“さきがけ”であることから、立ち上げ当初はデータ科学的手法の利用経験のない研究者も多かった。そこで領域のマネジメントにあたっては、領域の中で相互に教え、学びながら、領域全体としてマテリアルズインフォマティクスの経験値が上がるように、データ科学の研究者とそれ以外の分野の研究者の連携を推奨した。幸い、視野が広くオープンマインドで異分野交流に長けた優秀な若手研究者を多数採択できたこともあって、研究者間の自発的コミュニケーションが進み、想定を超えた多数の共同研究が生まれることとなった。

マテリアルズインフォマティクスを日本に定着させるため、研究領域から外に向けての情報発信も重視した。そのためにプレスリリースや解説記事の執筆を奨励し、さらに公開シンポジウムを3回開催して多くの聴衆を集めた（4回目は新型コロナウイルスにより中止）。国際的な情報発信および海外研究者との交流のため、国際シンポジウムを2回企画した（3回目は新型コロナウイルスにより中止）。これらの企画は、研究者のビジビリティを高め、若手研究者の自信にもつながったと考えている。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

本研究領域は、4つの戦略目標に基づき設置された。以下ではそれぞれの目標について、顕著な成果を述べる。

目標1：多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製

- ・ 独自の高速スクリーニング手法と機械学習を活用して高効率化した結果、均一なカイラリティを持ったカーボンナノチューブの選択的合成触媒を創製。

目標2：情報デバイスの超低消費電力化や多機能化の実現に向けた、素材技術・デバイス技術・ナノシステム最適化技術等の融合による革新的基盤技術の創製

- ・ AI技術、コンビナトリアル実験、計算機シミュレーションを駆使して、世界記録を更新する高効率なスピン熱電材料を発見。
- ・ 量子コンピューターへの応用が期待されるナノ構造中での単一電子の電荷・スピン状態ダイナミクスを解明。データ科学手法と組み合わせ、電子状態測定の高精度化、高速化を実現。

目標3：分野を超えたビッグデータ利活用により新たな知識や洞察を得るための革新的な情報技術及びそれらを支える数理的手法の創出・高度化・体系化

- ・ 走査透過型電子顕微鏡による電子エネルギー損失分光イメージングデータの自動解析手法を開発。
- ・ 放射光X線イメージングデータの高速解析手法を開発。

- ・ ガラスや液体の構造データにトポロジカルデータ解析手法を応用し、特徴づけに成功。
- ・ マテリアルズインフォマティクスに適した各種記述子の提案と実証

目標 4： 環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計「分子技術」の構築

- ・ 高性能な熱活性化遅延蛍光分子を予測し、有機 EL デバイスを実現。
- ・ 生体材料の化学構造から生体材料の濡れ性、タンパク質の吸着量を正確に予測する手法を開発

(3) 本研究領域を設定したことの意義

米国における Materials Genome Initiative (MGI) に代表されるように、マテリアルズインフォマティクス研究は米国が先行し、ヨーロッパでも大型プロジェクトが次々と開始され、近年は中国の伸張が著しい。日本におけるマテリアルズインフォマティクス研究は、一部の先駆的な研究を除き欧米より遅れて始まったと言わざるを得ないが、本領域はまさにその日本における“さきがけ”となったと言えよう。

本研究領域の設定により、物理、化学、材料科学、数学、情報学をバックグラウンドとする多数の優秀な若手研究者が、挑戦的な課題を掲げてマテリアルズインフォマティクス研究に参入し、自主的な勉強会なども使いながら異分野連携を深め、多くの成果をあげた。この人的ネットワークは、将来に残る重要な財産である。

彼らはまた、それぞれの所属学会や関連団体で多数の招待講演を行い、また依頼されて多数の解説記事を執筆した。このことは、マテリアルズインフォマティクスの認知度を高め、研究手法として定着させる上で大きな役割を果たしており、本領域設定の大きな意義の一つであったと考えている。

(4) 科学技術イノベーション創出に向けた、今後への期待、展望、課題

本研究領域では、網羅的な第一原理計算と機械学習を用いた高速スクリーニングによる材料開発という、マテリアルズインフォマティクスの典型例だけでなく、さまざまな切り口、目的でデータ科学を物質・材料研究に用いる手法が研究され、今後の科学技術イノベーション創出に向けて、マテリアルズインフォマティクス活用の様々な方向性が提示された。その中から実際に新しい材料が見つかり始めており、今後さらに材料開発における有用性が示されるだろう。一方で、データ科学は既知データの内挿に強いが外挿はできないと言われる。優れた研究者による新材料の発見には、知識の整理に基づく普遍化と抽象化、それに基づく外挿、あるいは発想の飛躍が重要である。真に新しい材料を見出すためには、マテリアルズインフォマティクスでも、そのような普遍化、抽象化、外挿の方法を模索することが重要な課題になるだろう。

マテリアルズインフォマティクスに関する国内の大型プロジェクトは、NIMS の MI²I

が2019年度末、本研究領域が2020年度末に終了し、残るはCREST「革新材料開発」（実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新）のみである。しかしながら、マテリアルズインフォマティクスはここ数年で多くの研究者の知るところとなり、文科省の大型科研費や元素戦略プロジェクトなどで、積極的にプロジェクトの中に組み込まれるようになった。いわゆるマテリアルズDXにおいても、マテリアルズインフォマティクスが重要な役割を果たすはずである。このように、マテリアルズインフォマティクス研究が特定材料の開発プロジェクトの中に取り込まれることは良いことではあるが、それだけだと、本研究領域で行われたような分野（所属学会）の壁を超えたコミュニケーションが困難になることが、今後の懸念材料である。

(5) 所感、その他

すでに述べたように、本研究領域の参加者は物理、化学、材料科学、数学、情報学といったさまざまなバックグラウンドを持つ研究者であり、当初は領域としてうまくまとまるのかを心配していた。結果的に、領域内のコミュニケーションは良好で、多数の共同研究も生まれ、多くの成果が上がったが、それはさきがけ研究者の自主性を重んじつつ的確なアドバイスをしてくださった、領域アドバイザーの力に寄るところが大きい。さきがけ研究者との議論を心から楽しみながら、本研究領域を盛り上げてくださった領域アドバイザーの皆様に、この場を借りてお礼を申し上げたい。

(2021年10月7日追記)

新型コロナ影響により、以下の課題について6ヶ月の延長支援を行った。

それにより、各課題に以下のような追加の評価コメントを付した。

【相澤 直矢】

本課題は、新型コロナウイルスの影響を受け、6ヶ月間期間を延長し、ベイズ最適化を活用した仮想スクリーニングによる有機発光材料の開発、過渡電子スピン共鳴による高次三重項励起状態を介した項間交差の実証、一重項励起状態と三重項励起状態のエネルギー逆転を示す有機発光材料の開発を行った。

その結果、海外研究グループとの連携が進み、TADFの特性を理解する上で重要な項間交差の微視的機構に関する新たな実験的知見が得られ、データ科学的手法を用いた実用材料開発がさらに進展した。

以上