

材料開発における4つのインフォマティクスと自律材料探索

Four informatics in material science

物材機構¹, [○]岩崎 悠真¹

NIMS¹, [○]Yuma Iwasaki¹,

E-mail: IWASAKI.Yuma@nims.go.jp

近年、人工知能や機械学習を活用したデータ駆動型材料開発技術が大きく注目されている。材料研究者の勘・コツ・経験をデータ科学でアシストすることによって、材料開発の飛躍的な効率化が期待されている。当然、半導体材料開発・半導体製造においても応用可能な技術が数多くある。

そこで、本講演の前半は、データ駆動材料開発技術の現状を俯瞰し、簡単に説明する。この技術領域を細かく分類すると、新材料・物性値などをデータ駆動で予測する『マテリアルズ・インフォマティクス』、効率的に材料を合成する『プロセス・インフォマティクス』、効率的に計測・解析を行う『計測インフォマティクス』、材料科学の理解を目的とした『物性（物理）インフォマティクス』に分けて考えることができる。本講演の前半は、これら4つの分野を簡単な事例を交えて紹介する。

本講演の後半は、データ駆動型材料開発技術の一つである自律材料探索にフォーカスを当てて紹介する。自律材料探索とは、機械学習、ロボティクス、シミュレーション等を組み合わせて、広大な材料探索空間を自律的に探索する技術である。本講演では、ロボットを活用した自律材料探索（Robotic autonomous material search）とシミュレーションを活用した自律探索（In-silico autonomous materials search）に分けて紹介し、その後、これらを活用して実際に材料探索を行った事例を発表する。

謝辞

本研究は JST-CREST『未踏探索空間における革新的物質の開発（研究総括：北川宏）』における研究課題『科学者の能力を拡張する階層的自律探索手法による新材料の創製（研究代表：岩崎悠真）』の支援を受けたものである