

○ 戦略目標「多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製」(271 ページ)、「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」(279 ページ)、「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」(285 ページ)および「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」(288 ページ)の下の研究領域

6.2.12 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

研究総括：常行 真司(東京大学 大学院理学系研究科 教授)

研究領域の概要

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きます。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ります。

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します。

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します。

第 6 章 募集対象となる研究領域

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します。

募集・選考・研究領域運営にあたっての研究総括の方針

(1) 背景

物質・材料には人間の想像を遙かに超える機能が潜んでおり、それらを科学技術によって発見し活用するため、世界的な競争が激化しています。新物質・材料の開発は、さまざまな産業を支え社会を進化させる源であり、我が国が将来にわたって成長し発展していくために、継続的に推進していくことが求められています。また高温超伝導体の発見が強相関係物理学の興隆をもたらし、新しい原理に基づくデバイスの開発へと展開しつつあるように、新物質・新材料の発見は基礎科学の発展とそれに裏打ちされた革新技术の開発をもたらす揺籃でもあります。

近年、物質・材料科学の分野において、組成や構造のこれまでにない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、計算能力が飛躍的に向上したスーパーコンピュータを活用して物性を高精度で予測できる、第一原理計算をはじめとした計算科学など、いわゆる第1の科学から第3の科学の連携が強力に進んだ成果として、物質・材料科学が急速に発展しています。

しかしながら要求機能を特定した材料開発を目指す場合、膨大な可能性の中からの的確な元素の組成と安定構造を見つけ出すことは、たいへん困難な作業です。また仮に候補物質が見つかったとしても、その製造プロセスによって材料組織やその特性が違ってくるため、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見られます。

一方で、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ります。ハイスループット合成手法や大規模シミュレーションなどから短時間で得られる大量のデータに物質・材料科学の知見を意味づけながら解析すること、すなわち第4の科学であるデータ科学を導入することで、これまでにない新しい知識が獲得でき、材料開発においてブレークスルーをもたらすことが期待できます。

(2) 求められる研究

このような背景の下、本研究領域では、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生かしつつ、得られた知見を相互に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確立と、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ます。

第 6 章 募集対象となる研究領域

具体的には「研究領域の概要」の 1)～5)にあるような研究例を想定していますが、必ずしもそれらに限定されることはありません。従来物質・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ています。

対象とする物質・材料は有機化合物、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を含みます。むしろ、電磁気的特性、光学特性、熱的特性、反応性、機械強度などの要求する機能を出発点として、それを実現する化学組成、結晶構造、電子状態、合成方法、マイクロ組織構造などを作るという逆デザインの発想で包括的に候補物質を選択することを奨励します。

提案内容には、材料開発にもたらす科学的なインパクト、その手法で獲得できると見込まれる新知識、得られる新物質・材料の機能、産業や社会への貢献などを含むことが望まれます。

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ムティックな物質・材料設計の指導原理の構築などにより、材料開発時間や開発コストの劇的な合理化を実現し、世界的競争の中で我が国が優位に立ち続けることに貢献できる研究、海外先行研究の後追いではない、新鮮な発想に基づくチャレンジングな提案を求めます。

(3) 異分野連携の推奨

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・融合が欠かせません。研究提案書の作成にあたっては、異分野の専門家と議論することで、研究提案の具体性・実現性の向上が期待できます。また、提案者だけの視点では見落とされていた課題や解決策が発見できる可能性もあります。このような観点から、本研究領域では、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おくことを強く推奨します。

昨年度に引き続き、今年度も他の研究者とのコラボレーションを含む研究提案（連携提案）も受け付けます。ただし、さきがけは個人型研究なので、採択に係る評価は個人研究としての提案をもとに行います。連携提案を研究提案書に記載するかどうかは任意です。記載の有無は採択に係る評価に直接関係しませんが、採択後に研究領域で推進する取り組みの中で、提案書に記載の内容を尊重しつつ連携研究を奨励することを考えています。なお、連携提案について提案書に記載する場合には、提案者がどのような部分を担当するのか、個人研究で達成できないどんなことを可能にするのか等、具体的に記載するようにしてください。

(4) 採択後に研究領域で推進する取り組み

上記(3)でコラボレーション提案を可能としていますが、採択後にも必要と思われる協働を研究領域として積極的に支援していきます。また、関連する CREST、さきがけ研究領域をはじめとした国内外の様々な研究プロジェクト等との連携を進めていきます。さらには、データやデータ解析ツールの共有・活用などのオープンサイエンスの推進を他プロジェクトとともに図ります。

第 6 章 募集対象となる研究領域

採択後には、データマネジメントプランの作成が予定されています（117 ページ「(5) データマネジメントプランの作成及び実施について」参照）。

※ 本研究領域に応募される場合は、提案書様式が他の研究領域と異なるため、本研究領域用の提案書書式を e-Rad からダウンロードしてください。

※ 本研究領域の募集説明会を下記日程で開催します。ご関心のある多くの方々の参加をお待ちしております。なお、4月24日（月）は、CREST 領域「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」との合同開催となります。

	日時	場所
関西	4月21日（金）13:00～14:30	TKP ガーデンシティ京都 会議室「睡蓮」 （京都市下京区烏丸通七条下る東塩小路町 721-1 京都タワーホテル 2 階）
関東	4月24日（月）13:00～15:00	科学技術振興機構（JST）東京本部別館 1 階ホール （東京都千代田区五番町 7 K' s 五番町）

詳細については、<http://www.senryaku.jst.go.jp/teian.html> をご参照ください。