

- HPCI戦略プログラム分野2「新物質・エネルギー創成」戦略機関(CMSI) 統括責任者
- ポスト「京」重点課題⑦「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」 課題責任者
- JSTさきがけ「マテリアルズインフォマティクス」研究総括

計算科学は材料研究に貢献できるか？

- 物質, 材料を「見る」ことによる「気づき」
- アイデアを試す 仮想実験
- 新物質, 新材料, 新構造デバイスの特性予測
- 多自由度, マルチスケール, 非平衡の壁
- 演繹的な計算機シミュレーションだけでは, 欲しい特性をもった新物質, 新材料の発見は困難

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

1. **新物質発見の促進、設計指針の構築**
2. **大規模データからの相関・法則の帰納的解明**
3. **候補物質の高速・大量スクリーニング**
4. **物質・材料データの包括的記述**
5. **データ取得・蓄積・管理手法、計算・解析ツール**

必ずしも上記に限定されることはありません。

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ています。