

Overview of Material Research by Information Integration Initiative (MI2I)

K Terakura
(NIMS)

米国での Materials Genome Initiative (MGI) に刺激されて、世界の多くの国で所謂マテリアルズ・インフォマティクスプロジェクトが始まっている。我が国でも昨年より、JST のプロジェクトとして、物質・材料研究機構 (NIMS) を拠点とした情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I) が始まった¹⁾。主な目的は、データ科学と物質・材料科学の連携により、物質・材料開発を加速することである。本プロジェクトでの重要な出口課題の一つとして、磁石・スピントロニクス材料を設定しており、その枠における一つの具体的な成果として、希土類元素と 3d 遷移金属元素からなる磁性体のキュリー温度の実験データをつかって、機械学習によりキュリー温度の予測をした。機械学習を用いて、望みの性質を持つ物質・材料を探索する仕組みを説明し、いくつかの具体的な例を紹介する。

Reference

- 1) <http://www.nims.go.jp/research/MI2-I/index.html> (Accessible on 2016/06/01)