

## 中間評価（ステージゲート審査）結果

1. 研究課題名： 不規則材料系のマテリアルズインフォマティクスへの展開
2. 研究代表者： 笠松 秀輔（山形大学 学術研究院 准教授）
3. 中間評価（ステージゲート審査）コメント

本課題は、原子の並びをあえて不規則にすることで様々な特性や機能を付与できることに着目し、不規則材料系に対応した高速・高精度な物性計算フレームワークを確立し、不規則材料系のマテリアルズインフォマティクス(MI)を展開するものである。フェーズ1では、計算科学の先進的な様々な手法を組み合わせることで、高濃度欠陥存在下の物性予測など、不規則系の物性開拓研究に必要な予測が可能となりつつあり、大きな進展と言える。フェーズ2では、フェーズ1の研究から導かれた様々な課題を丁寧に分析する提案であり、汎用性のあるアモルファス材料のMIの実現に繋げられる内容と判断される。他の研究と比較して新規性、独創性を明確にし、独創性の高い研究を行うことに期待する。

以上