

AI とロボットの活用による 新多元系材料のハイスループット探索

High-throughput discovery of materials using AI and robots

東工大 物質理工¹ ○一杉 太郎¹

Tokyo Institute of Technology (Tokyo Tech)¹, °Taro Hitosugi¹

E-mail: hitosugi.t.aa@m.titech.ac.jp

材料科学には夢がある。

我々人類がこれまで合成した化合物は、考え得る化合物のほんの一部である。最新の固体電解質や金属材料では5元素を含む化合物は当たり前である。今後、元素数がさらに大きい新材料(多元系材料)を開発しなければ、社会の要請に応えることができないだろう。また、合成技術が進歩し、現在では多様な合成パラメータを振って化合物を作ることができる。そのため、**巨大な材料探索空間が我々の目の前に存在し、そこに有用な材料が眠っている。**

したがって、材料科学は、宇宙開拓や深海探査のように、**人類のフロンティア**である。

そのフロンティアを探索するためには、材料科学にも、宇宙探査機や深海探査艇のようなツールが必要である。

そのツールは**ものづくりをする現場をスピードアップし、かつ、研究者が創造性を発揮できる環境にする**ものでなければならない。

これは**実験室に変革が必要**ということを意味しており、その方向性は、クルマが進化する方向として言われる CASE(Cononnected, Autonomous, Shared, Electric)を考えると良いだろう。

つまり、合成や評価を担う**実験装置が Cononnected、Autonomous、Shared**になるということである。さらに、個々の装置が **High-throughput**になるだろう。これらは人工知能(AI)とロボット技術を最大限活用するということであり、実験室の変革に向けて、世界中でこの動きが加速している[Science 366 (2019) 1295 や Nature Rev. Mater. 3 (2018) 5 など]。講演ではその概念について議論し、我々の取り組みについて報告する。

以上は、**未来社会に向けた、夢のある前進**であると考えている。研究者を繰り返し作業から解放し、**創造性豊かな研究に集中する環境を整える**。そして、研究者がアイデアをすぐに試すことができ、**生き活きと研究をする現場を築く**ことが狙いである。

研究者が研究を楽しむ姿を見せることにより、若者達が科学技術に興味をもち、研究者を目指す社会へとつながることを期待している。

本研究は**清水亮太** 助教(東工大)と**小林成** 博士課程1年(東工大)、**安藤康伸** 博士(産総研)との共同研究です。JST-CREST、JST-MIRAI より支援いただきました。