

## AI/Robot-driven Materials Research への挑戦

### Challenges for AI/Robot-driven Materials Research

東工大<sup>1</sup>, JST さきがけ<sup>2</sup> ○一杉 太郎<sup>1</sup>, 清水 亮太<sup>1,2</sup>

Tokyo Institute of Technology<sup>1</sup>, JST-PRESTO<sup>2</sup> ○Taro Hitosugi<sup>1</sup>, Ryota Shimizu<sup>1,2</sup>

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

少なくともこの20年間、**薄膜物質創製プロセスの生産性は、全く向上していない**と実感している。研究者は単純繰り返し作業に時間を奪われ、創造的思考を行う時間が少ない。したがって、薄膜物質開発を加速するには、旧態依然とした実験室から脱して**実験室の産業革命**を起こし、新たな高みに立たねばならない。その際、**物質探索範囲を飛躍的に拡大し、新たな物質観の構築**を目指す必要がある。

究極の目標は、望みの物性を指定するだけで、「その物性を示す物質をロボットが翌朝までに合成する」ことである。つまり、ロボット自らが成膜して物性評価を行い、成膜条件および組成の最適化を行う。従来も実験の一部を自動化することが行われていたが、我々が目指しているのは**人間が介在せず、すべての判断をロボットが行って物質合成することである**。

本システムは、現状の技術、すなわち「**薄膜作製・評価技術(ロボット技術)**」と「**人工知能(ベイズ最適化)**」の組み合わせにより構築可能である。ロボットは成膜チャンバーと物性評価チャンバー間の試料搬送を行う。半導体デバイス作製技術の進展により、ロボット搬送装置が低価格となり、大学の実験室でも導入可能である。そして、成膜条件および組成の最適化にはベイズ最適化を用いる。本システムの構築により、薄膜物質研究における以下の有効性が期待できる。

- **研究高速化:** 狙った物性値を示す薄膜物質を得るまでに要する時間を大幅に短縮する。研究者は、それにより生まれた時間をさらに**付加価値の高い仕事に展開**することができる。
- **物質探索空間の飛躍的拡大:** 人間では多数の条件を同時に最適化することはできない。しかしベイズ最適化を用いると、様々な条件からなる多次元空間内で最適可能であり、物質探索空間を飛躍的に拡大して、「計画されたセレンディピティ」を実現することができる。
- **新たな物質観の構築:** 短期間で多くの物質を合成できるため、それら物質を俯瞰的に見て、包括的に議論することによって**新たな物質観、化学観を構築**することができる。

本システムで合成した物質については、**そのすべての情報をサーバーにアップロード**し、成膜条件と物性をセットとして信頼性の高いデータを提供する。これにより、マテリアルズインフォマティクスで不足している「ビッグデータ」を提供することもできるであろう。さらに、本システムのシェアリングが実現すれば、他大学や在宅で物質合成することも可能となり、研究の進め方自体の変革につながる。

従来の研究は「**家内制工業**」であったとあって良い。これからは本システムを何台か並べ、遠隔で操作する「**データ生産工場**」時代になるであろう。**今、大きな変革期である**。