

デジタルラボトリを活用した新多元系マテリアル研究

High-throughput discovery of materials using digital laboratory

東工大 物質理工 °一杉 太郎

Tokyo Institute of Technology (Tokyo Tech), °Taro Hitosugi

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

マテリアル科学は複雑化する一方である。元素数は増え、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。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。そして、その合成パラメータに応じて、様々な準安定構造が得られる。したがって、組成やパラメータを「次元」として表現すると、**多次元空間内で物質探索を行う**ことになる。それに加え、準安定構造の場合、「時間」という次元も増える。時間に応じて「物質相」が変化していくので、その変化をも正確に理解し、それを活用していくことが求められている。

では、有用な機能を示す物質相をどのように探索していけば良いのだろうか。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。したがって、**巨大なマテリアル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、マテリアル科学は、宇宙開拓や深海探査のように、**人類のフロンティア**であり、**夢がある**。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、巨大な探索空間のどこに良い物質があるのかをある程度事前に予測し、効率的に探索することが望まれる**。

これは**実験室に変革が必要**ということを意味している。合成や評価を担う**実験装置は、Cononnected、Autonomous、Shared、High-throughput**に向かっている。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、実験の自動化・自律化が、世界中で加速している[Science 366 (2019) 1295 や Nature Rev. Mater. 3 (2018) 5 など]。ここでのキーワードは**"closed loop"**である。無機材料においてもこの動きは加速しているが(Science Adv. 6 (2020) eaaz8867)、我が国の取り組みが遅く、強い危機感を抱いている。

以上は、研究を質的に変革し、**創造性豊かな研究に集中する環境を整える**ことにつながる。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。そのような環境から、新しい多元系マテリアルが多数生まれてくるだろう。

本研究は**清水亮太** 准教授(東工大)、**小林成** 博士課程 2 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。