

マテリアルズインフォマティクスを活用した高分子材料開発

(NIMS¹) ○内藤昌信¹

Development of Polymer Materials with Materials Informatics (¹*Research Center for Macromolecules and Biomaterials, National Institute for Materials Science*) ○Masanobu Naito¹

Artificial intelligence (AI) creates recipes, and IoT-enabled automated experimental devices autonomously search for materials. Such a science fiction-like era is just around the corner. The core technology for this is a smart lab, a collection of automated devices that work in conjunction with AI. The introduction of smart laboratories in the pharmaceutical and other fields has been preceded by the introduction of smart laboratories in the pharmaceutical and other fields, but in the past few years, smart laboratories have rapidly spread to various material fields in response to the spread of material informatics (MI). In this presentation, we will introduce our recent efforts to develop new materials using MI tools such as SmartLab, including several examples.

Keywords : *Materials Informatics; Polymer Smart Lab; Data-driven Polymer Design;*

人工知能 (AI) がレシピをつくり、IoT 化した自動実験装置が自律的に材料探索を行う。そんな SF のような時代がすぐそこまで来ている。そのコア技術となるのが、AI と連動したスマートラボとよばれる自動装置群である。製薬分野などへの導入が先行してきたが、マテリアルズインフォマティクス (MI) の浸透に呼応するように、ここ数年で様々な材料分野に急速に広まりつつある。

材料開発では、合成のみならず、物性・材料特性までを総合評価する必要がある。また、先端材料に求められる性能・特性は刻々と変化する。そのため、ポリマースマートラボには、臨機応変に対応できるロバスト性が求められる。演者らのポリマースマートラボでは、これらの課題解決のため、技術仕様を予め固めずに、様々な AI ツールやデータサービスを組み合わせていくアジャイル的な開発手法を採っている。その AI ツールやデータベースとして、NIMS が整備を進める材料プラットフォーム「DICE」が提供する電子ラボノート、データ解析 AI、IoT 化ツール、データサーバなどの各種モジュールを利用できることも、システム開発の迅速化に大きなメリットとなっている。また、従来の材料評価は、サンプル作製や測定に多くの時間・労力・職人技などが求められ、材料開発のハイスループット化を困難にしてきた。この問題に対し、我々は MI 駆動研究に特化した装置を開発することで、合成から材料評価までの一連の工程を自動化・高速化することに取り組んできた。すでに接着材料や超撥水材料、また複数素材の特性を取り入れた傾斜材料などの新たな機能性樹脂材料の開発で威力を発揮している。課題解決の迅速化に、ポリマースマートラボが強力なツールとなることは間違いない。一方で、サーキュラーエコノミーやカーボンニュートラルなど、高分子材料を取り巻く課題は多い。本発表では、スマートラボをはじめとした MI ツールを駆使しながら、新規材料の開発について、いくつかの事例を挙げながら、最近の我々の取り組みについて紹介する。