高分子材料開発における自律型実験とポリマーインフォマティクス

(NIMS¹) ○内藤 昌信¹

Self-driving Lab and Polymer Informatics in Polymer Material Development

(¹Research Center for Macromolecules and Biomaterials, National Institute for Materials Science)

○Masanobu Naito¹

AI and IoT Revolutionizing Material Discovery

The integration of AI and IoT-enabled systems is transforming material discovery through Self-Driving Labs (SDL), a group of autonomous experimental systems. Over the past five years, SDLs have rapidly spread across various material fields, driven by the rise of materials informatics (MI). These labs address the need for comprehensive evaluation of physical properties and material performance, which are constantly evolving. Our SDL employs an agile development approach, combining diverse AI tools and services without rigid technical specifications. Leveraging NIMS's "DICE" platform, which provides electronic lab notebooks, data analysis AI, IoT tools, and data servers, we accelerate system development and enhance flexibility. Traditional material evaluation required significant time, effort, and craftsmanship, hindering high-throughput development. To overcome this, we developed MI-driven automated systems, enabling the evaluation of over 10,000 samples annually. This has led to advancements in adhesive materials, superhydrophobic surfaces, and gradient materials combining multiple properties. In this presentation, I will share recent developments and case studies demonstrating the effectiveness of SDLs and MI tools in creating innovative materials.

Keywords : Self-Driving Lab; Machine Learning; Polymer synthesis, Mechanical Property

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 と連動した自動自律ラボ (Self-Driving Lab, SDL) とよばれる自動装置群である。マテリアルインフォマティクス (MI) の浸透に呼応するように、ここ 5 年ほどで様々な材料分野に急速に広まりつつある。材料開発の現場では、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、SDL 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 SDL 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、本プロジェクトでは、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・高速化することに成功した。これにより年間 1 万以上のサンプル数を評価できるようになり、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。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。