

## 化学・材料科学の研究現場におけるラボオートメーションと DX 化：勘所と留意点

(東大院理) 清水 亮太

Laboratory Automation and Digital Transformation in Chemistry and Materials Science Research

(Department of Chemistry, The University of Tokyo) ○Ryota Shimizu<sup>1</sup>

The landscape of materials exploration is rapidly expanding to meet the social demand for functional materials. Autonomous materials research, using AI-based decision-making with automated synthesis and measurements carried out by robots, presents a promising avenue. Recently, significant progress has been made in the development of solid-state systems, alongside conventional liquid systems where materials are more easily handled. Here, we present our recent research on the autonomous synthesis of functional inorganic oxide thin films. Through iterative operations of automated thin film deposition (utilizing robots), measurement of electronic/ionic conductivity (also performed by robots), and the application of Bayesian optimization (AI) for decision-making, we autonomously study chemistry and materials science, achieving a tenfold increase in throughput. Additionally, I will discuss future perspectives regarding the introduction of combinatorial technology and a materials exploration system integrated with various measurement instruments.

*Keywords : Autonomous experiments; Inorganic materials; Combinatorial synthesis*

機能性材料に対する社会的な需要に応えるため、材料の探索空間が急速に拡大している。そのアプローチとして、AIを基盤とした意思決定とロボットによる自動合成・測定を活用した自律的な材料研究が注目されている。最近では、材料の取り扱いが比較的容易な従来の液体系に加え、固体材料の開発への適用にも大きな進展が見られている。そこで本発表では、機能性無機酸化物薄膜の自律的合成に関する最近の研究を紹介する。我々の装置では、ロボットを利用して薄膜成膜（ロボットを使用）や電子/イオン伝導率の測定を自動で行い、ベイズ最適化（AI）による意思決定が可能である。この装置による自律探索により、スループットを10倍に増加させることに成功している。さらに、複数の測定機器と統合された材料探索システムや、コンビナトリアル合成技術の組み合わせに関する今後の展望についても紹介する予定である。

1) R. Shimizu *et al.*, APL Mater. **8**, 111110 (2020).

2) S. Kobayashi, R. Shimizu *et al.*, ACS Mater. Lett. **5**, 2711 (2023).