

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 自律的ものづくりを導入した金属水素化物の革新的新機能創出

2. 個人研究者名

清水 亮太（東京工業大学物質理工学院 准教授）

3. 事後評価結果

無機化合物固体材料の薄膜合成と多次元の成膜条件の最適化を全自動・自律的に行う装置を開発し、人力では到達できないスピードで新機能材料を創製することを目標とした。そのためにロボット技術により試料の全自動搬送・成膜・評価を行う「ロボット部」と、ベイズ最適化を利用して次に探索すべき成膜条件をロボット部に指示する「機械学習部」からなる全自動かつ自律的（closed-loop）なシステムを開発した。無機化合物では、同一の組成式であっても、結晶多型の影響や、欠陥あるいは不純物の種類・密度に依存して物性が変わり得ることから、合成条件の最適化が非常に重要であるが、これは大変に手間と時間のかかる作業である。本システムにより人手をかけることなく条件の最適化が可能になったことで、新材料の薄膜合成が劇的に加速される。清水研究者はこのことを、Nb:TiO₂ 薄膜の電気抵抗最小化を実現する酸素分圧の探索をモデルケースとして、「全自動・自律的」な無機材料合成スタイルを実証した。

本手法はマテリアルズインフォマティクスの基盤技術として極めて有用であるだけでなく、人口少子化や新型コロナ禍のもとでは、今後ますます重要な技術となると考えられる。国の施策であるマテリアルズ DX とも非常に整合性が高く、さらには産業界からの注目度も高い、今後の材料開発の方向性を示す重要な研究成果である。