

【ナノテクノロジー・材料分野】

仮訳

## 逆設計：機能性ポリマーをカスタム作製する新手法（米国）

2026年3月16日

*新たな素材を思い描き、あとは人工知能とロボットに任せられるとしたら？*

AI、機械学習とロボット工学を組み合わせた自律型ワークフローが、精密でカスタマイズ可能な特性を持つポリマーの迅速な製造を可能にする

ポットラックパーティーで、黄金色に焼き上がった、分厚くて噛み応えのある最高のチョコレートチップクッキーを食べた。残念ながら、誰が作ったのか分からず、レシピを聞くことができない。そこで、自分で再現してみることにした。順方向設計の原則を利用すれば、数十種類のレシピの中からランダムに1つを選び、焼き上がったクッキーを観察できる。もしクッキー



多彩なエレクトロクロミックポリマーサンプルは、AIを活用した逆設計によって実現された精密な色調調整を実証し、スマートディスプレイ技術向け材料の進歩を際立たせている。(画像提供:アルゴンヌ国立研究所)

が薄すぎたなら、新たなレシピでやり直したり、小麦粉の量を増やしたり、生地をもっと長時間冷やしたりして新しいバッチを作れるだろう。もう一つの方法としては、まず理想とするクッキーの特性を特定してから、「このタイプのクッキーを作るには、どのようなレシピと焼き加減が必要だろうか」と問いを立てる。この方法は、逆方向設計と呼ばれているものだ。

このような「目標から逆算する」考え方は、現代の材料科学においてますます重要になっている。研究者は、材料に求める特性、例えば電気伝導性や耐熱性の向上、刺激への反応性や特定の色彩の発現等を明確に把握していることが多い。しかし、これらの要件を化学式と信頼性の高い製造方法に落とし込むには、数ヶ月から数年にわたる

試行錯誤が必要となる。

特に、包装材から医療機器、電子機器に至るまであらゆるものに用いられる長鎖分子であるポリマーでは、その課題は極めて厳しいものになる。ポリマーはより小さな分子の構成要素から成り、これらの構成要素の僅かな変化や組み合わせ方の変化が、性能に多大な、時には予測不可能な変化をもたらす可能性がある。

**「この研究は、機能性材料の自律的かつオンデマンドな生産における画期的な成果です」**

**－ ANL およびシカゴ大学の科学者 Jie Xu 氏**

米国エネルギー省(DOE) アルゴンヌ国立研究所(ANL)、シカゴ大学、パデュー大学の研究者らが、目標とする特性からポリマーの配合をはるかに少ない実験回数で導き出すことのできる、より迅速な方法である[自律的な](#)逆設計ワークフローを実証した。

「この研究は、機能性材料の自律的かつオンデマンド生産における画期的な成果です」と、ANL の研究員であり、シカゴ大学プリツカー分子工学大学院の助教授でもある Jie Xu 氏は言う。「何ヶ月も試行錯誤を繰り返すのではなく、目的とする特性を定め、システムにポリマーの配合を導いてもらうことができるのです」。

このアプローチは、従来の研究では一般的に個別に実施される 3 つの要素を結合させている。最初に、公表されている科学論文からテキストと画像の両方に含まれる情報を含むデータを自動的に抽出することで、既存の知識を収集する。これには、今日のチャットボットで使用されているような大規模言語モデルを含む [AI](#) の「読解」ツールを用いて論文をスキャンし、通常は手作業で収集される詳細情報を抽出した。これらの AI ツールは、段落、表、さらには画像の中に埋もれた情報を識別し、整理することができる。

「現代の AI は、人間にはとうてい不可能な規模で科学文献を読み込み、重要な要素と結果を抽出し、利用可能なデータに変換することができます」と、ANL Data Science and Learning division のディレクターであり、ANL 特別研究員、シカゴ大学コンピュータサイエンス教授でもある Ian Forster 氏は説明する。「これにより、研究室は有利なスタートを切ることができます。そして、モデルが新しい実験ごとに学習することで、システムはどんどん賢くなっていきます」。

次に、このアプローチは[機械学習](#)を用いて、望ましい結果を生み出す可能性が最も高くなる構成要素の組み合わせを予測する。最後に、その予測結果は、自動化された実験室ワークフローに直接送られ、ポリマーの合成、精製、サンプルの準備、物性測定を実施し、その結果をフィードバックして次の予測精度を向上させることができる。

「化学における GPS のようなものだと考えられます」と、ANL の科学者 Henry Chan 氏は言う。「何千件ものポリマー合成レシピを一つ一つ調べていく代わりに、AI は既知の情報に基づいて最適な次のステップを提案し、ロボットがそれを迅速にテストして結果を報告します」。

このワークフローでは、ANL にある DOE 科学局(SC)のユーザー施設である [Center for Nanoscale Materials](#) に設置される、自律走行型実験プラットフォームの [Polybot](#) を活用している。AI 駆動システムによってロボットと計測機器を連携させるように設計された Polybot は、人間の介入を最小限に抑えた実験の継続的な実行を可能にする。Polybot は、既知の手順を自動化することに加え、各実験が望ましい結果に近づくように選択される逆設計ループの実行にも使用されている。

精度が重要とされる課題においてワークフローがどのように機能するかを示すため、研究チームは、微弱な電圧を印加すると色や透明度が変化する材料のエレクトロクロミックポリマーに注目した。これらのポリマーは、建物のエネルギー消費を削減するスマートウィンドウや、拡張現実(AR)や仮想現実(VR)ヘッドセット用のティントレイヤーといった技術の候補となっている。

「エレクトロクロミックポリマーは、印刷やパターン形成によってデバイスにすぐに使える形態に加工できるため、特に注目されています」と、ANL の [Materials Engineering Research Facility](#) で printable electronics lab を率い、これらの機能性ポリマーをプロトタイプディスプレイデバイスに印刷する研究チームと協力した材料科学者の Yuepeng Zhang 氏は説明する。

「科学者たちは長年にわたり多くのエレクトロクロミックポリマーを開発してきましたが、正確な色合いを再現することは、単に赤色や緑色を再現するよりもはるかに困難です。色合いは RGB 値等の標準化された色座標を用いて定量的に定義できますが、近似色を得るには一般的にポリマーの配合を大幅に最適化する必要があります」と、パデュー大学の Richard and Judith Wien Professor of Chemistry であり、本研究の共著者でもある Jianguo Mei 氏は言う。RGB とは、赤、緑、青の光を用いた 3 色ビデオディスプレイモデルを指す。

研究者らはまず、公表されている文献からポリマーの構造、合成の詳細、そしてこれらの材料が発する色合いに関するデータを収集し、専用のエレクトロクロミックポリマーデータベースを構築した。AIは、多数の論文の散在する情報を一貫性のある使いやすいデータセットに変換し、検索可能なレシピと結果のライブラリを作成することで、「知識収集」のステップの加速を支援した。

収集したデータから標準化された色値を算出し、既に報告されている色の「マップ」を作成した。次に、ポリマーの「レシピ」がほとんど、あるいは全く記録されていないマップ上の領域にある 2 つの特定の色、すなわち難易度の高い緑色と橙色を目標とするよう Polybot に指示した。

Polybot は 72 時間以内に自律的にポリマーのレシピを提案し、材料を製造してその結果を目標値と比較した。1,000 種類以上の組成候補があったにもかかわらず、同システムは僅か数十回の実験後に目標値に近い組成を絞り込んだ。3 種類の構成要素の比率を段階的に微調整することで、これを実現した。新たな結果はすべてデータベースに追加され、モデルの次の予測精度向上に役立てられた。

この成果は、エレクトロクロミックポリマー材料にとどまらない。自動化された知識収集、予測型機械学習、そしてロボットによる反復実験サイクルを組み合わせたこのアプローチは、探索空間が膨大で試行錯誤のコストが高い他の材料の課題にも応用できる。

Xu 氏と Mei 氏が述べているように、「エレクトロクロミック特性の逆設計は、私たちの AI ロボットフレームワークによって実証された最初の機能です。このアプローチは、機械、光学や電気といった他の特性や、他の種類の材料にも広げることができます」。

材料設計をより迅速かつ体系的なプロセスへと変革することで、本研究は科学者が特定の特性を要求し、それに応じたレシピを迅速に入手し、さらなる開発や実用化に活用できる未来を示唆している。

本研究成果は、[Journal of the American Chemical Society](#) に掲載されている。

本研究には、ANL の Doga Ozgulbas 氏、Subramanian Sankaranarayanan 氏、Maria Chan 氏、Qiaomu Yang 氏、ANL とパデュー大学の Yukun Wu 氏、Jianing Zhou 氏も貢献した。パデュー大学の Zhiyang Wang 氏、ジョージア工科大学の Anna Österholm 氏と John Reynolds 氏、Shiyu Hu 氏、Rafael Vescovi 氏、Aikaterini Vriza

氏は、本研究が行われた当時、ANL に所属していた。

本研究は、DOE 基礎エネルギー科学部(BES)および ANL の Laboratory Directed Research and Development Program の資金援助を受けて実施された。さらに、シカゴ大学の Big Ideas Generator seed funding program と米国空軍科学研究所(AFOSR)からも支援を受けた。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、米国アルゴンヌ国立研究所の記事 “Inverse design: A new pathway to custom functional polymers”（<https://www.anl.gov/article/inverse-design-a-new-pathway-to-custom-functional-polymers>）を翻訳したものである。