

# 自動・自律的実験の実際と 導入に際して考慮すべきこと

「竹槍では戦えない！」

一杉 太郎

東京大学 理学系研究科 化学専攻 教授  
東京工業大学 物質理工学院 特任教授

# A mobile robotic chemist

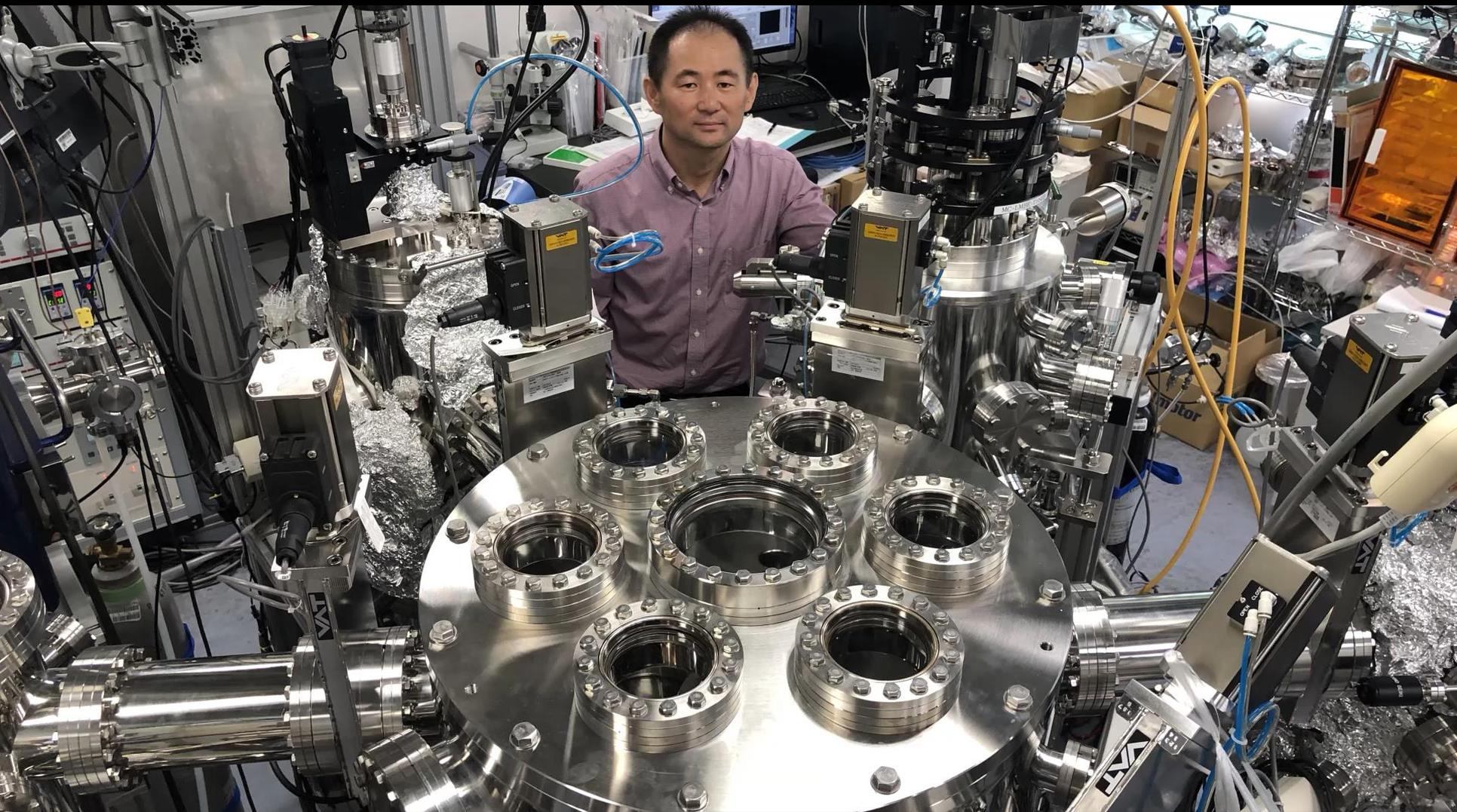
Cooper *et al.*, Nature 583 (2020) 237



- 水分解光触媒を探索: **8日間**で**688回**の実験を自動的に行う
- 初期に配合した触媒の6倍以上の活性を持つ混合物を発見

# 全自動・自律的に材料を探索する

JST-CREST/さきがけ/MIRAI  
の支援による



清水亮太准教授、小林成 助教

APL Mater. 8, 111110 (2020).

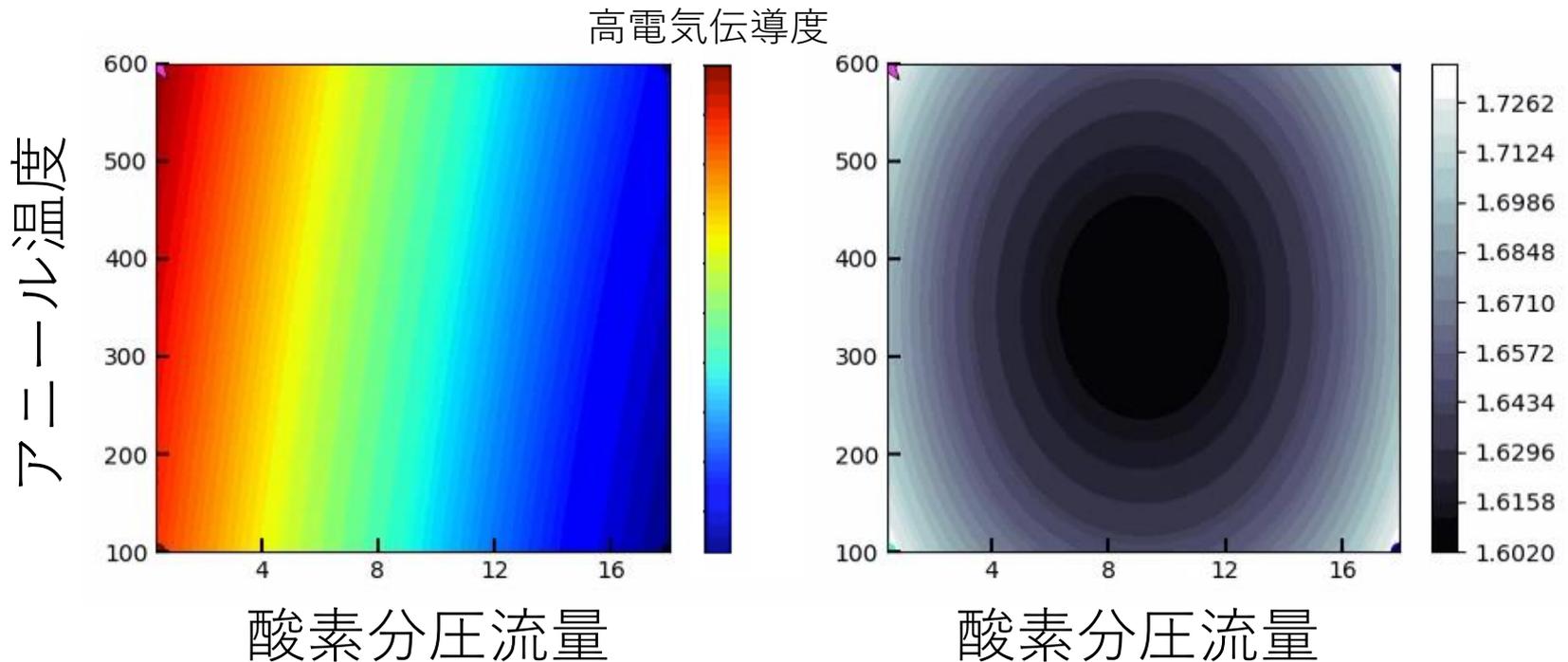
# 実験スピードを10倍に

Hitosugi *et al.*, APL Mater. 8, 111110 (2020)

## 二酸化チタン薄膜の電気伝導を最大化

### 予測曲面と実測値(相図)

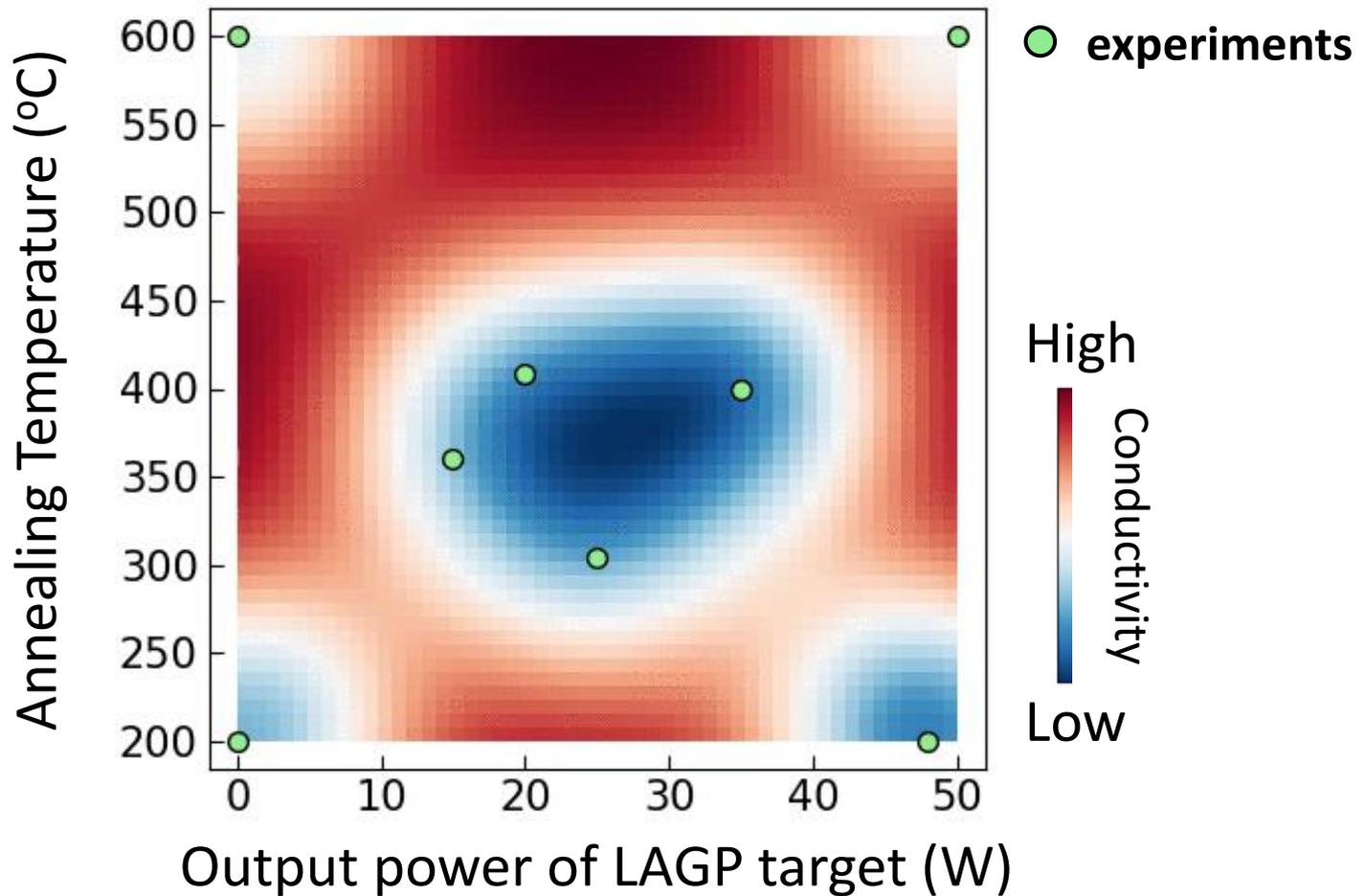
### 標準偏差



データが有効活用できるようになる

# 相図を自動で作成

## Electrical conductivity: experiments and simulations



Composition: 組成

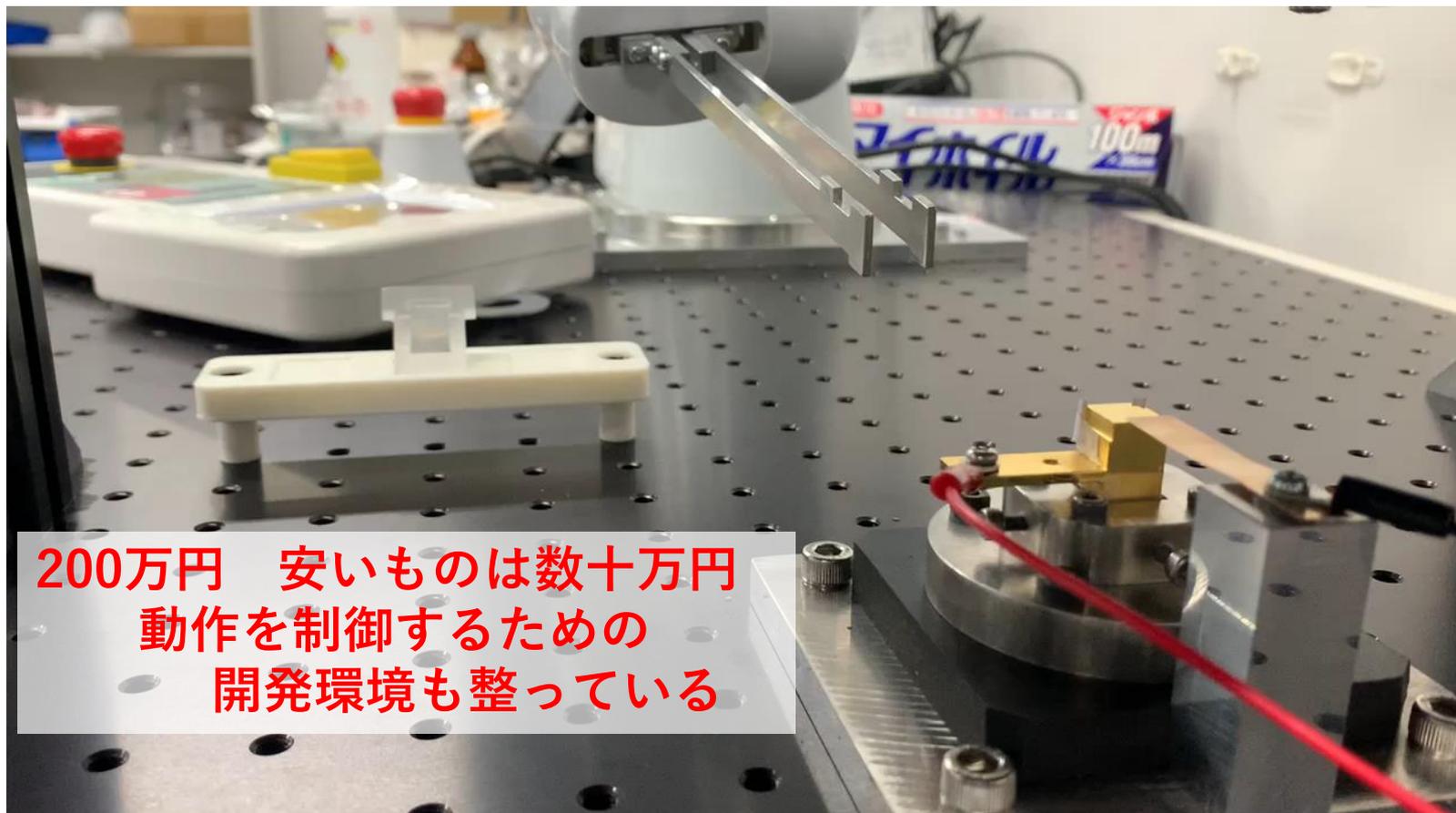
# 単純作業の自動化から

200万円 安いものは数十万円



日本の強い  
ロボット産業と組む

# Automation of Contact Resistance System (Hitosugi lab)



200万円 安いものは数十万円  
動作を制御するための  
開発環境も整っている

**Cobotta and pressing machine were  
successfully operated together by Labview (D1の学生が構築)**

# 研究を加速するために必要なこと

## 1. 意識改革(大学、企業)→人材育成:ロボット活用の意識付け

- 世界一多くの大谷選手(二刀流: デジタル×マテリアル)を育成  
→ 「AIロボを投入すべき最適課題」を判断できる人材の育成
- 大学研究者: JST-さきがけ等(若い人ほどアンテナが高い)立ち上げ
- 企業研究者: 自動化は協調領域→体験できる共用ラボ
- 教育: 学部レベルでも進める(オンラインで大学の壁を越えて教育)

## 2. 理化学機器メーカーの変革を支援

- ラボの理化学機器がDX対応していない
- 世界のデファクトスタンダードを狙う (プラグアンドプレイに)

## 3. ラボシステムインテグレータ(SI)の育成

- 世界中のラボを日本企業が建設
- ラボSIは最初にデータに触れる→**ラボのデータを握るチャンス**  
→ これが海外企業になると産業界・学界は壊滅

# DX技術を導入するのに 適した実験とは？ **課題設定の目**

- **マニュアルが整備され、再現性が高い**
  - = ワークフローが明解で個人差が少ない
  - さらに実験ステップ数は少ない方が良い
- **技術の発展が少ない**
  - すぐに陳腐化しない
- **多くの人々が時間を費やしている作業**
  - 費用対効果

**汎用技術へ適用: まずは自動化から**

今は評価の方が適用しやすい

# まずはシンプルな自動化から！

Workflow



ボトルネック

→ ロボット化



デジタルデータ

人材不足

- 費用対効果の算出
  - 実現にかかる時間の算出
- ができる人材がない

- 「**研究者が“楽”になる**」ために、何をすれば良いのか検討する
- **まずは小さな成功から**： 人間の手が入ってもいいので気楽に

**単に人間の作業を置きかえるだけではなく、  
より成果が出るプロセスに転換、そして、データ活用**

# どのように構築するのか

1. 以下の5つを統合 (→ チームを作る)
  - ① 化学・材料の研究者
  - ② 全体をシステムとして動かす  
ソフトウェア・ハードウェアエンジニア(生産技術部門)
  - ③ ベイズ最適化などの情報科学の技術  
(**マテリアル実験用にチューニングされている**)
  - ④ 物質合成装置のハードウェア (ロボット動作の制御系を含む)
  - ⑤ 分析装置のハードウェア
2. モジュール化
3. 最初に全体設計をしておく

**最初は①がリーダーだが、  
②が次第にリーダー役となっていく**

# 材料合成DX技術 共有ラボ

- ・超伝導のISTEC
- ・燃料電池のFCキュービック  
がイメージ

1. 多くの研究者、企業で**共通の材料合成技術**

**協調領域**

**企業に持ち帰って  
さらに味付け**

– 例: 固体材料合成システム

(秤量→混合→ペレット成形→焼成→評価)

– 液体のハンドリング、混練、スラリー形成と塗布等

2. そのシステムから出てくる**データを共有** → コンソーシアム形成

3. 一社からX万円いただき、**共有ラボ**を設置

そこで研究員を雇用すると共に、**企業が人を派遣**

4. **人材育成**の場ともする → ロボット技術の習得、講演会

他のプログラムとの連携

5. **学生と企業の出会**いの場ともする

6. JSTやNEDOプロジェクトとの連携 有効活用してもらう

7. **理化学機器企業(合成、評価、分析)が参画**

8. 研究者の独自ニーズへの

**相談窓口、コンサルティング、共同研究機能**を有する

## マテリアルロボティクス技術を共有する場が必要