Article

A mobile robotic chemist

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

ゲームチェンジ: 実験データ数が勝負

- 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

自律実験: 実験室のCloud化

物性値を最大化せよと指令
例: Liイオン伝導度を最大化せよ

合成条件を指示

Hitosugi
APL Mater. (2020)

データの利活用

物質合成

ベイズ最適化(AI)
(合成条件最適化)

Closed loop

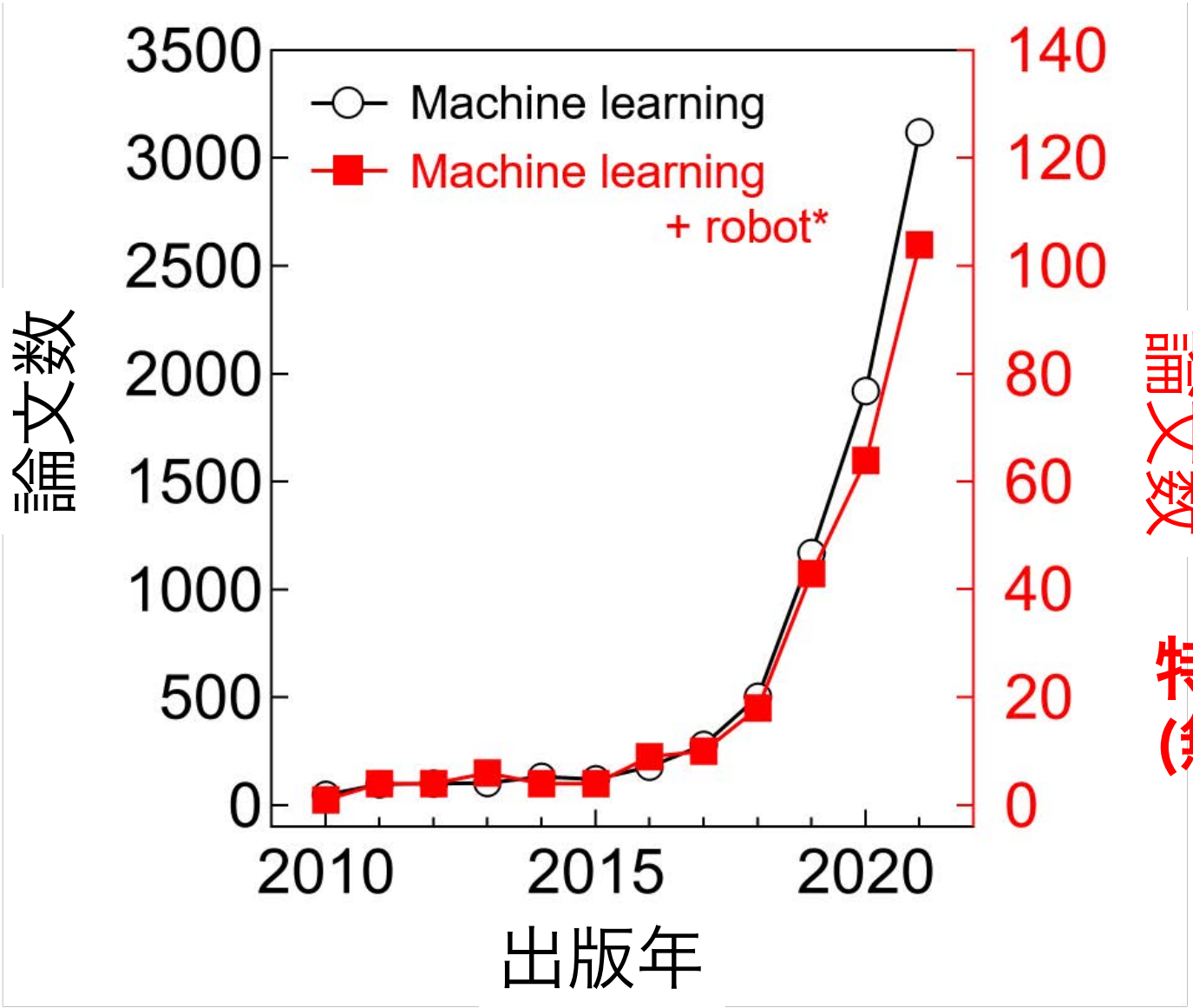
物性測定

結果を報告

研究者の場所と時間の壁を壊す、
理論家と実験家の壁を壊す

今なら主導権を握ることができる

今、思い切って投資しなければ、他国が先行する: 日本は周回遅れに



Web of Science:
Materials Science
分野で絞り込み

特に固体材料
(無機、ポリマー他)
は手つかず

デジタル化の進展

1. 人間が指定した探索空間内を自動的・自律的に探索し、
短期間で最適物質・材料を見つけだす

→**Proof of Concept完了 2020年**

時短・効率化

→広げる段階　**標準化、認知度向上**

- 理化学機器会社や合成に関わる企業との協力
- 臨機応変に対応する“柔らかい”ロボット技術
- 化学・材料向けの機械学習アルゴリズム

**2. 人間が予想しなかった新物質の発見や、
新しい学理を構築する**

→自動化・自律実験
＋マテリアルズインフォマティクス・シミュレーション

セレンディピティを生むために活用: 外挿