

コンパクトな自律型実験システム

(阪大院工¹) ○小野 寛太¹

Compact Autonomous Robotic Experimental System (¹*Graduate School of Engineering, Osaka University*) ○Kanta Ono¹

In recent years, with the advancement of machine learning and robotics technologies, research on automation and autonomous execution of chemical and physical property experiments has made significant progress. The experimental process in chemistry and physical property studies consists of a recursive self-improvement cycle: sample synthesis and preparation, measurement and characterization, and data analysis. Based on the analysis results, subsequent hypotheses, and experimental conditions are determined for the next iteration. To achieve autonomy in this process, automating all these steps while establishing mechanisms for autonomous decision-making is essential. Currently, laboratory automation has been implemented only in limited methodologies, leaving substantial room for research and development in the autonomous execution of experimental processes. Our research group is developing compact autonomous experimental systems to achieve automation and autonomy in chemistry and physical property experiments. We have successfully implemented sample preparation for synthesis and measurements using human-collaborative robots and AI, enabling precise control of chemical reaction pathways and experimental conditions that would be challenging for human operators.

Furthermore, we have developed a powder X-ray diffraction system that autonomously performs all processes, from sample preparation to measurements and data analysis optimization without human intervention. These compact autonomous systems enhance efficiency through automation and enable previously infeasible experiments, complex condition optimization, and novel discoveries through automated data analysis. This presentation will address current challenges in autonomous chemical and physical property experiments and discuss future perspectives.

近年、機械学習とロボット技術の発展に伴い、化学・物性実験を自動化、自律化することを目指した研究が急速な進展を遂げている。化学・物性実験プロセスは、試料合成・作製、計測、解析という一連のステップで実施され、解析結果に基づいて次なる仮説や実験条件を決定し、再度実験を行う再帰的自己改善プロセスとなっている。このプロセスの自律化には、上記すべてのステップを自動化するとともに、各ステップで必要となる判断を自律的に行う仕組みの構築が不可欠である。現状では、ごく限られた手法においてのみ自動化が実現されており、化学・物性実験プロセスの自律化に至る研究開発の余地は極めて大きい。

われわれの研究グループでは、化学・物性実験の自動化・自律化を目指し、コンパクトな自律駆動型実験システムの研究開発を行なっている。ヒト協働ロボットと AI を活用した試料合成や計測のための試料調製を実現し、人間では到達困難な環境や実験制御を可能にするとともに、化学反応経路の精密制御にも成功した¹⁾。また、試料作

製から最適計測、データ解析まで人の介入なく自律的に行う粉末 X 線回折システムの開発にも成功した²⁾。これらのコンパクトな自律型実験システムの特筆すべき点は、単なる人的作業の代替による効率化にとどまらず、人間では実現不可能な実験を行い、複雑な条件の制御および最適化、さらには自動データ解析から新たな知見を発見を可能にする点にある。本講演では、化学・物性実験の自律化における現状の課題を整理するとともに、将来展望について議論する。

- 1) Force-controlled robotic mechanochemical synthesis. Yusaku Nakajima, Kai Kawasaki, Yasuo Takeichi, Masashi Hamaya, Yoshitaka Ushiku and Kanta Ono, *Digital Discovery* **2024**, 3, 2130.
- 2) Autonomous robotic experimentation system for powder X-ray diffraction, Yuto Yotsumoto, Yusaku Nakajima, Ryusei Takamoto, Yasuo Takeichi and Kanta Ono, *Digital Discovery* **2024**, 3, 2523 (2024).