

スプレー熱分解法を用いた DX プラットフォーム構築

(奈良先端大¹・奈良先端大 DSC²・奈良先端大 CMP³) ○杉田 陽彩¹・高須賀 聖五¹・高山 大鑑^{1,2}・原嶋 庸介^{1,2}・藤井 幹也^{1,2,3}

DX Platform Construction Using Spray Pyrolysis Deposition

(¹NAIST, ²NAIST DSC, ³ NAIST CMP) ○Hiroyuki Sugita¹, Shogo Takasuka¹, Tomoaki Takayama^{1,2}, Yosuke Harashima^{1,2}, Mikiya Fujii^{1,2,3}

The rapid advancement of Digital Transformation (DX) necessitates enhanced research and development efficiency. DX in research is value creation through the synergy of 'AI,' 'Data,' and 'Remote/Smart capabilities.' While significant progress has been made in individual areas, an integrated R&D infrastructure has not yet been fully explored. This study introduces a next-generation research platform combining experimental automation, Electronic Laboratory Note (ELN), and machine learning, targeting photocatalyst research.

We developed a programmable automation system for titanium oxide thin film fabrication (Fig.1), incorporating temperature regulation, sample transportation, and spray coating. We combined the experimental equipment with ELN, which enabled automated data storage and seamless transfer between the equipment, ELN, and machine learning systems. Furthermore, utilizing Bayesian optimization, we tried to optimize the experimental conditions with that efficiency as the objective variable.

This DX platform holds the promise of enhancing efficiency in various research domains beyond materials development and accelerating innovation in the fields of new materials, energy systems, and environmental technologies.

Keywords : *Research Digital Transformation; Lab Automation; Electronic Laboratory Notebook; Materials Informatics; Photocatalyst*

デジタルトランスフォーメーション (DX) の急速な進展に伴い研究開発の効率化が求められている。研究 DX とは、「AI」×「データ」×「リモート化・スマート化」による価値創造である。具体的には、実験の自動化によるリモート化・スマート化、電子ラボノートによるデータの体系的な収集・管理、そして AI によるデータの利活用を指す。これ

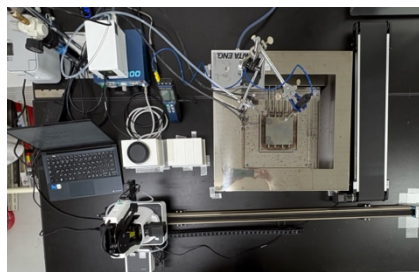


Fig.1 自動実験装置

らの個別の研究はそれぞれ発展を遂げているが、統合した研究開発基盤に関する研究はほとんど行われていない。本研究では、光触媒を題材として、実験自動化、電子ラボノート、機械学習を組み合わせた次世代の研究プラットフォームを構築した。

プログラム制御による実験自動化装置 (Fig. 1) を開発し、ホットプレートの温度制御、サンプル搬送、塗布を一連のプロセスとして、酸化チタン薄膜を作成した。また、電子ラボノートと装置を統合させ、データの自動保存機能を構築することで、実験装置、電子ラボノート、機械学習間のデータ移動をシームレスに行った。さらに、ベイズ最適化を活用し、その性能を目的変数として作製条件を最適化した。

本 DX プラットフォームは、材料開発に留まらず、幅広い研究分野の効率化と、新素材、エネルギー、環境分野におけるイノベーションの加速が期待される。