



材料と分析、そしてデジタル技術 の融合による 化学研究の新しい進め方

一杉 太郎

東京大学 理学系研究科 化学専攻 教授
東京科学大学 物質理工学院 特任教授

The Nobel Prize 2024

Physics



J. J. Hopfield



G. E. Hinton

Chemistry



D. Baker



D. Hassabis



J. M. Jumper

"for foundational discoveries and inventions that enable **machine learning** with artificial neural networks"

"for computational protein design"
"for protein structure **prediction**"

機械学習の有用性は証明済み → ロボットも同様

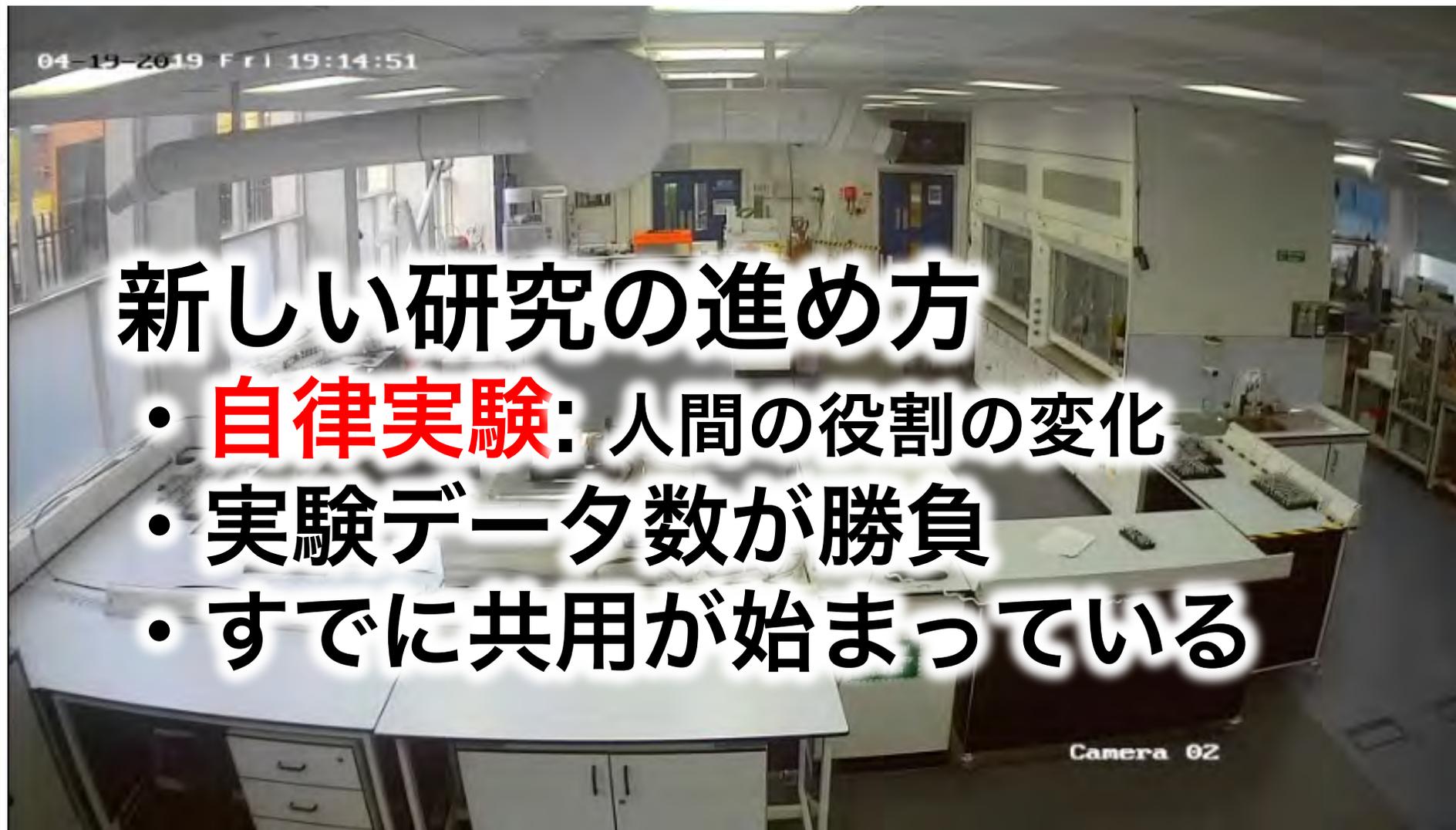
→ **機械学習とロボットをいかにして使いこなすかが勝負**

新しい研究の進め方を模索すること自体が、サイエンス

A mobile robotic chemist

英国

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



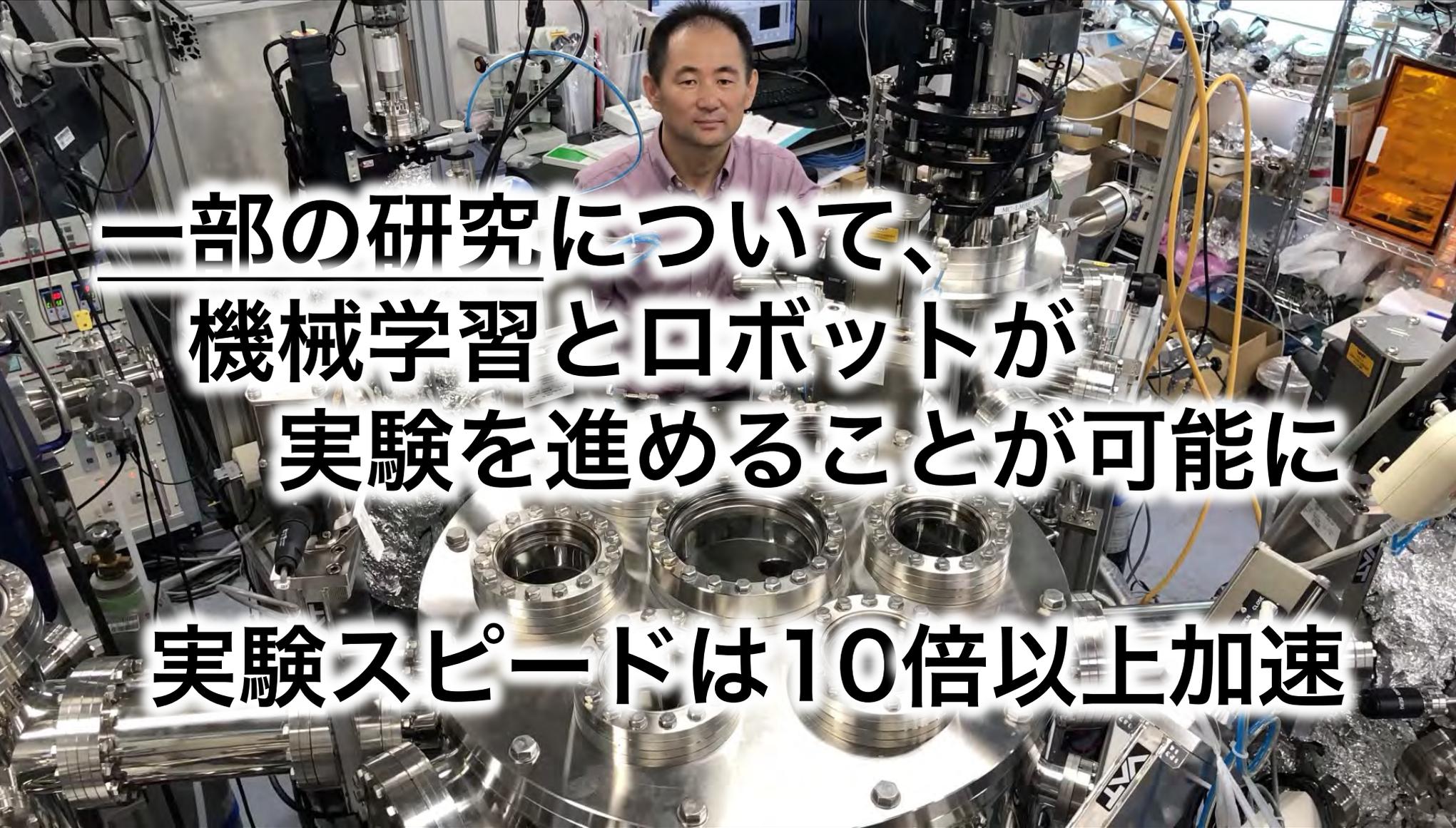
新しい研究の進め方

- **自律実験**: 人間の役割の変化
- 実験データ数が勝負
- すでに共用が始まっている

- 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
APL Mater. 8, 11110 (2020)



**一部の研究について、
機械学習とロボットが
実験を進めることが可能に
実験スピードは10倍以上加速**

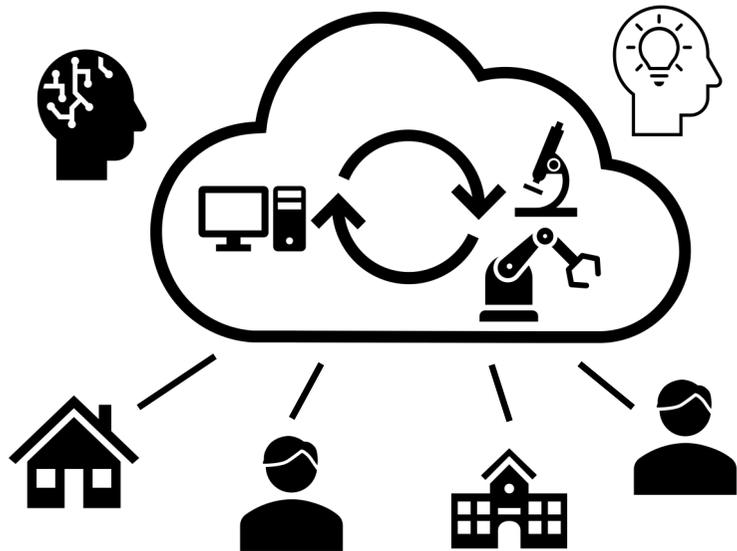
清水亮太准教授、小林成 助教

動画作成協力：名古屋大学・竹内一郎先生

もう一つのループ: 研究者は常にチャレンジを!!!

**新しいチャレンジ
ドメイン知識の獲得**

AIロボット
実験システム



研究者は

創造性が高い仕事

に取り組む

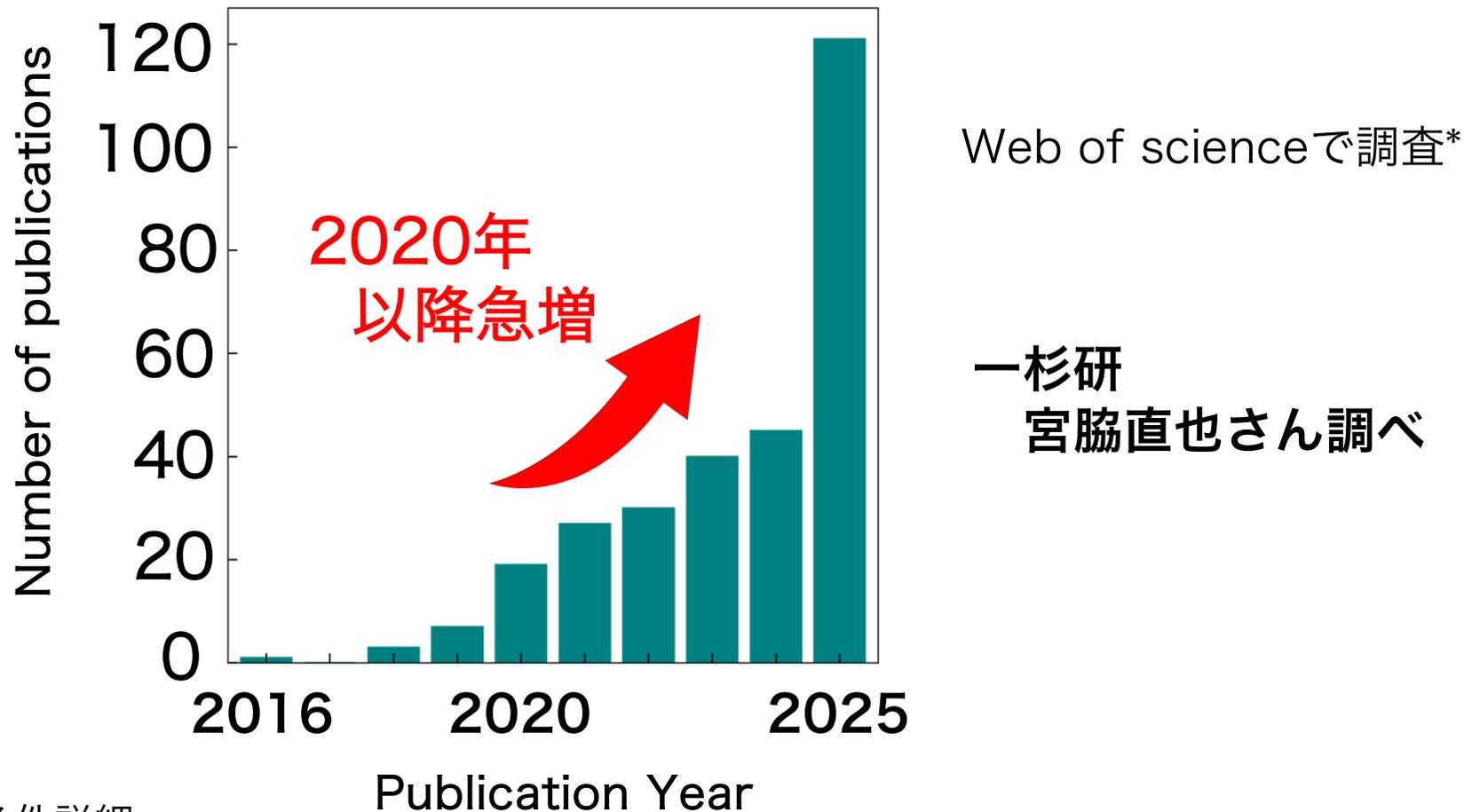
さらなる高みへ

方向性の決定

五感(肌感覚)を活用する研究

「暗黙知」をシステムに埋め込む

自律実験関連論文数の推移



* 検索条件詳細

- ・ データベース : Web of Science Core Collection
- ・ ドキュメントタイプ : Article (原著論文) 又は Review Article (総説)
- ・ Database: Web of Science Core Collection. Search query: TS=("self-driving laborator*" OR "self-driving platform*" OR "autonomous experiment*" OR "autonomous synthesis" OR "autonomous syntheses" OR "autonomous discover*") AND TMAC="2 Chemistry".

主要国の投資状況 マテリアル分野のデータ駆動型研究、自動・自律実験

官民によるデータ駆動型研究開発への**巨額**な投資が各国で活発化



NSF Designing Materials to Revolutionize and Engineer our Future (DMREF)

- 主要な社会的課題に取組むための先進的な材料の設計と製造の自動化を促進するプログラム
- AI **2025年11月発表 Genesis Missionプロジェクト**
- 2024年10月発表 **現代の「マンハッタン計画」**

【出典】2023



Canada Acceleration Consortium

分析機器企業の巻き込みが弱い

- トロント大学を中心に2021年コンソーシアム発足。
- Canada First Research Excellence Fund (CFREF)から新材料・新物質の発見を加速する
- 取組み対して、**7年間で約230億円**（約2億カナダドル）投入。
- 本ファンドとトロント大により、**約150億円**（1.3億カナダドル）で施設を拡張。

【出典】2023年4月28日, U of T News, 「U of T receives \$200-million grant to support Acceleration Consortium's 'self-driving labs' research」



Materials Innovation Factory

UKにマテリアル産業がない

- リバプール大学とユニリーバの共同で2018年発足。
- 最新のロボットと計算環境を組み合わせた最先端材料の研究開発を推進。
- 2024年2月、化学向けの最新AIを開発・活用した新製品開発期間の短縮を狙う計画を発表。
- **約160億円**（8,100万ポンド）投入。

【出典】2018年10月5日, University of Liverpool News, 「Materials Innovation Factory officially opened by President of the Royal Society」



Automated Synthesis Testing and Research Augmentation Lab (ASTRAL)

- KAIST, Seoul National University, KIST
- Samsung, POSCO, Hyundai他が精力的に動いている

文科省資料を改変

【出典】Nature Synthesis 3, 606-614 (2024), 「Navigating phase diagram complexity to guide robotic inorganic materials synthesis」

世界の動向(Liverpool大、Toronto大他) 人材を集め、世界に見える拠点を構築中

1. 実験技術面(小さなループ)では日本は十分進んでいる

ー ハードウェア面で進んでいるが、

機械学習を応用した大きなループで我々はビハインド

→ 理論家、情報科学、ロボットの専門家との連携が最重要事項

2. モジュール化を重視: plug and play

→ Configurable systemにして、研究のflexibilityを増す

3. 標準化の重要性は皆認識しているが、いまだばらばら

4. 理化学機器企業の巻き込みがいまだ少ない

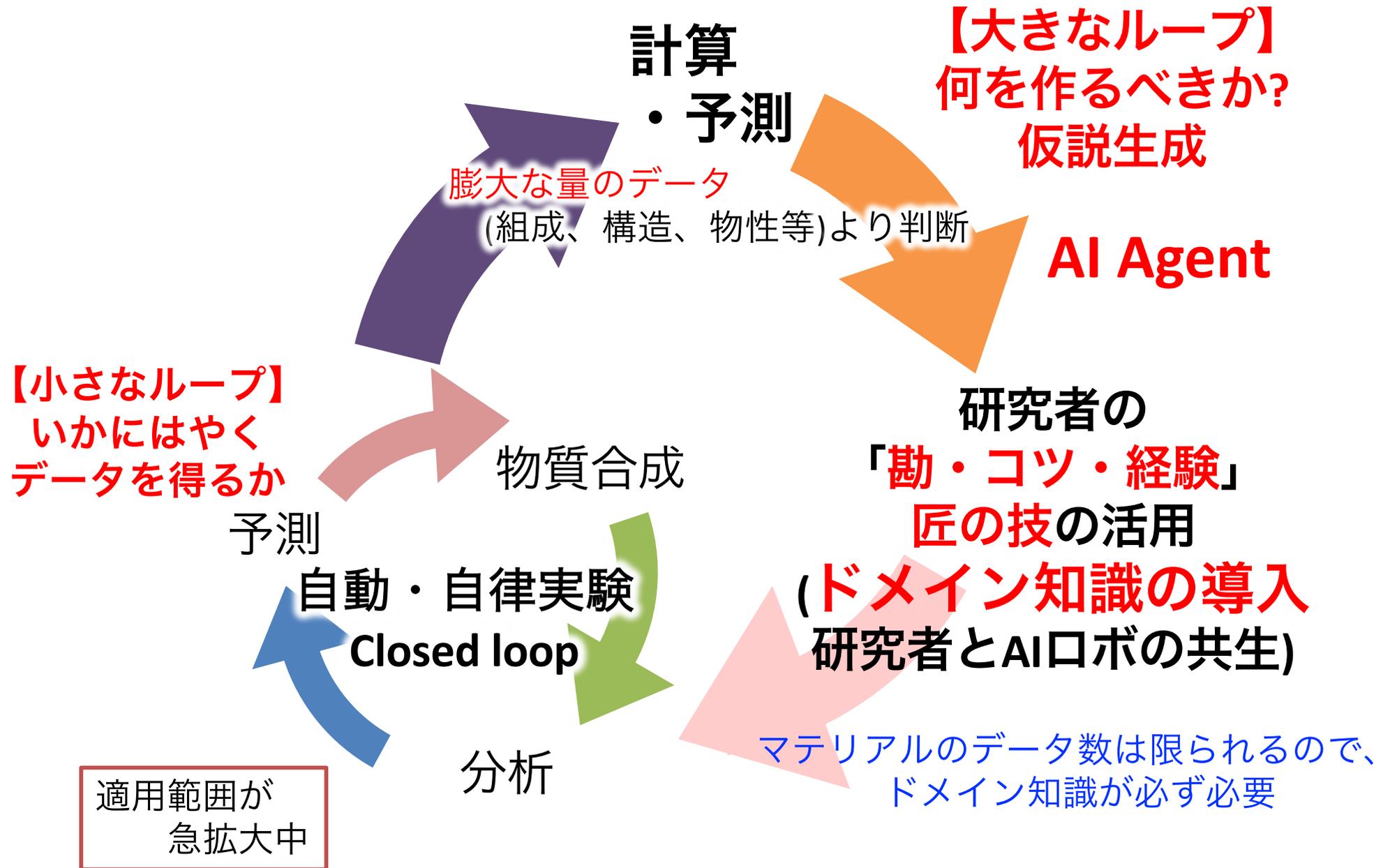
→ 日本としては大チャンス: 日本の理化学機器企業は宝

日本分析機器工業会(JAIMA)の動きが先行(MaiML、LADS)

5. データ保管するところは日が先行 → 付加価値をどう出すか?

日本が“世界の頭脳循環”をリードするには?

二つのループ: デジタルラボラトリー



標準化を進める システムとして実験装置を組む時代

DXの本質はシステム化

→つなぐ→標準化

→ Plug and Play

パ斯卡ル、テクトス、デンソーウェーブ、三井情報

JEOL

リガク

2023年春より稼働

成膜チャンバー

島津製作所

世界で標準化の動きが加速

成膜条件
585°C

堀場製作所

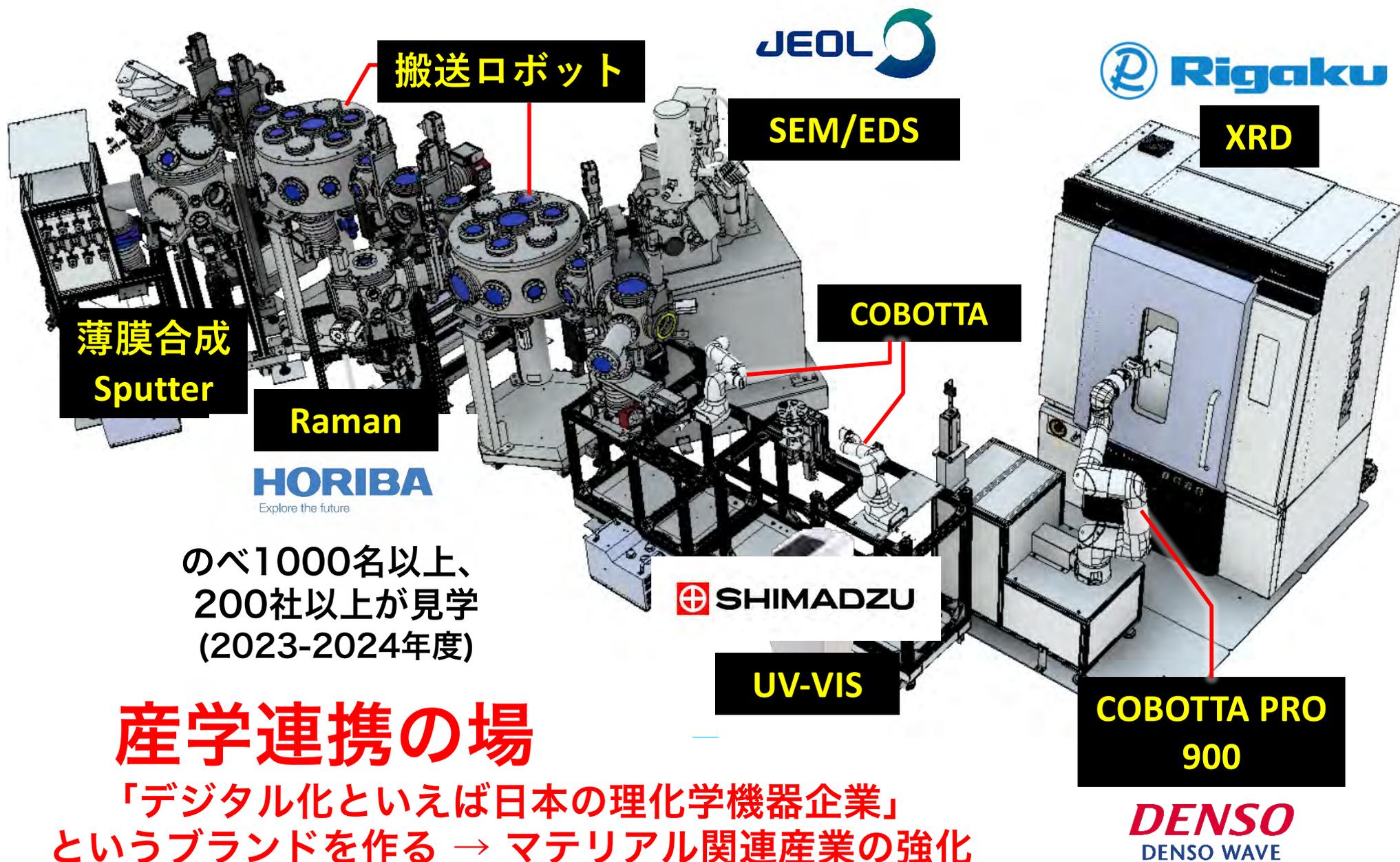
- Chemspeed, Kobotix等ベンチャー企業

日本発の規格を世界に提示
図面等、詳細情報を公開中

JST-MIRAI、文科省の支援

デジタルラボトリー

Hitosugi et al.,
Digital Discovery (2025)



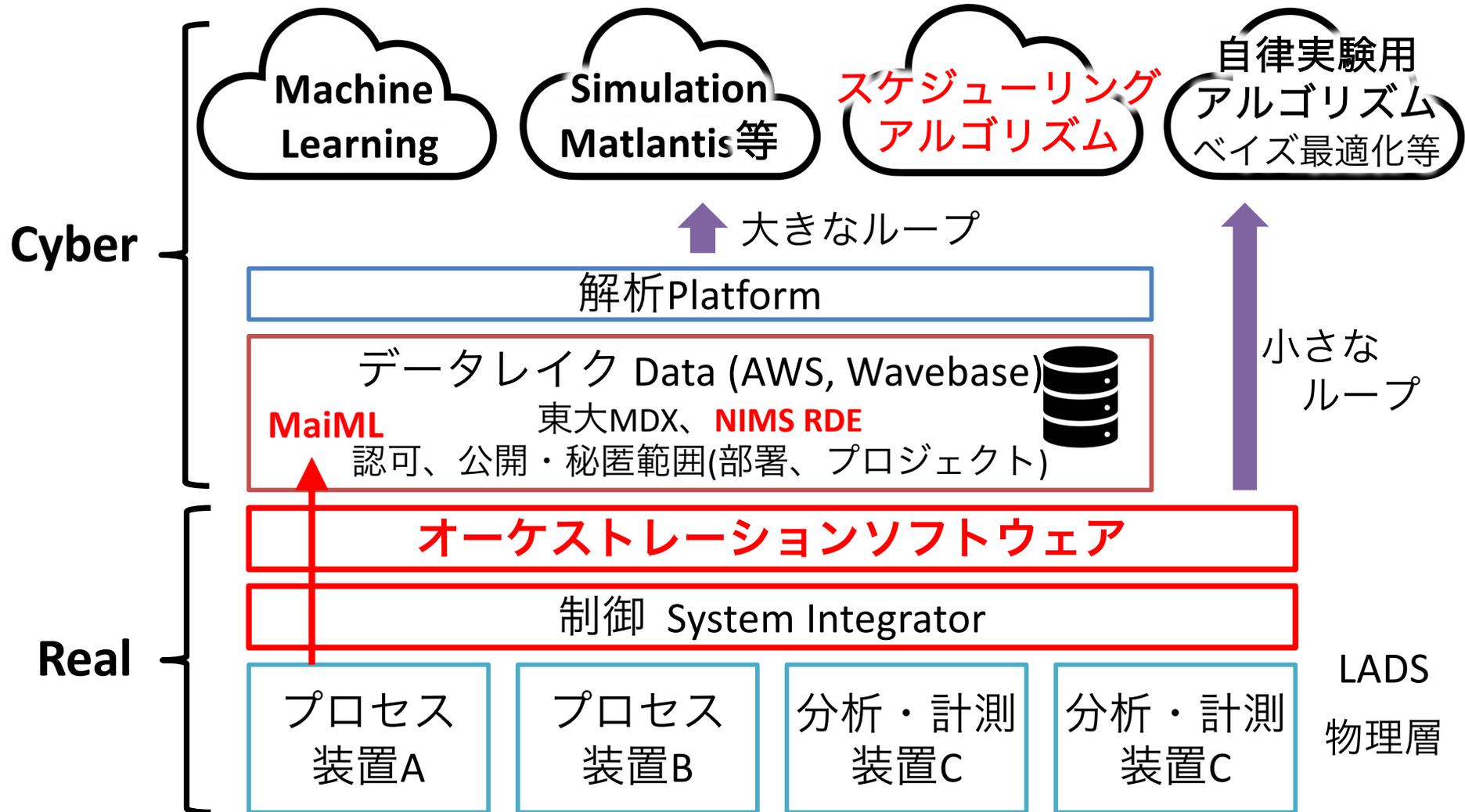
のべ1000名以上、
200社以上が見学
(2023-2024年度)

産学連携の場

「デジタル化といえば日本の理化学機器企業」
というブランドを作る → マテリアル関連産業の強化

全体システムアーキテクチャー

AIエージェント、モジュール化、疎な結合



マテリアル研究の将来像: 知識基盤

生成AI 基盤モデル

(LLM、マルチモーダル)

ChatGPT
Gemini
Claude他

ドメイン1
基盤モデル

ドメイン2
基盤モデル

RAG
Fine tuning

研究機関、企業
固有のデータ

自動・自律実験
ロボットによる実験

自動・自律
シミュレーション

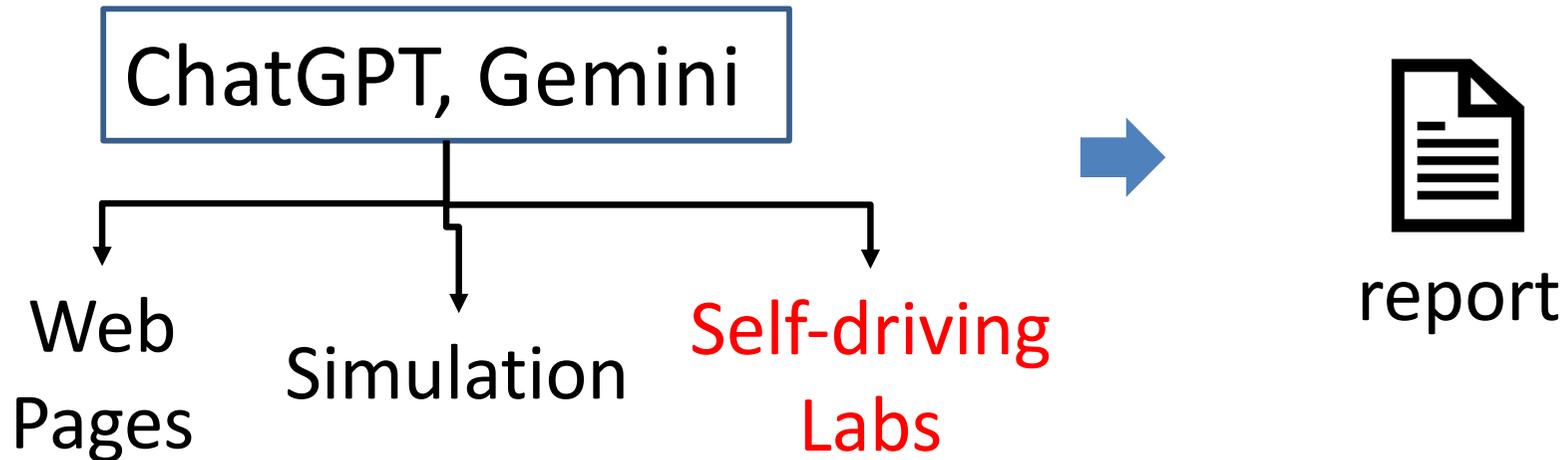
+

研究者の勘・コツ・経験



シミュレーション技術
デジタルツイン

Agentic AIの活用



1. 自然言語(人間が使う言葉)で目標を指示すると、
実験順序や実験条件を自律的に計画する
2. 実際にAIが自動実験システムを制御して実験を進める
3. Web上にある論文や実験、シミュレーションデータを活用し、
考察も含めて結果を報告する

実験装置の自動化・自律化は

「Agentic AIによる制御」を可能とするために必須

日本の強みを活用する

1. 国内マテリアル産業の強さ(もちろん、学界も)

- 化学・材料・セラミックス・自動車・鉄鋼等
- 原材料から完成品まで国内にバリューチェーンが形成し、
研究現場と市場ニーズの距離が近い

2. 理化学機器企業の存在感(プロセスと分析の両方)

- JEOL、リガク、島津製作所、堀場製作所、日立ハイテク他
- ロボット産業も強い(ロボットシステムインテグレータも豊富)

3. SPring8、J-PARC、Nanoterasu、KEK、富岳等 世界に誇る施設を有している

4. 産学連携が他国より進んでいる

勝ち筋: ハードウェアは日本が有利

拠点を整備し、AI、ロボット技術、**研究者の勘・コツ・経験**を
組み合わせた日本独自のマテリアル研究推進法の確立



DIGITAL
LABORATORY
CONSORTIUM

JFCA
(日本セラミックス協会)
JAIMA
(日本分析機器工業会)
と連携

現在**50社**以上

デジタルラボラトリー研究会

新しい時代の実験室 自動・自律化とデータ駆動科学

実験室に大きな変革が起きています。機械学習とロボット技術の進化により「自動的に」実験を進めることが広まってきました。その技術に「データ駆動科学」アプローチ、そして、人間の勘・コツ・経験・知恵を組み合わせることで、実験の自動化は確実に進んでいます。私たちがこの変革を先導するための戦略・戦術を強力に実行します。

会員募集中!

協調領域: 装置開発、人材育成、標準化

8社(トヨタ、三井金属、TDK、積水化学、三井情報、JEOL、リガク、デンソー)と**協働ラボ**を本郷に設置
→ **粉体材料合成プロセスの自動・自律化**

<https://www.s.u-tokyo.ac.jp/ja/press/10741/>

この研究を進めるほど、

「人間の研究者は何に注力すべきか」

を考えさせられる

単なる時短、効率化ではない:

知識を共有して、

「新しい発想」

を得るのが狙い



研究者はより創造的な仕事に取り組む

科学者の新しいリテラシー

「AIロボットの限界と可能性を知ること」

研究者を「自由に」
そして、「強く」する

創造性が高い研究に注力
日本が勝つなら、今がラストチャンス