

# JST MIRAI Program

未来社会創造事業



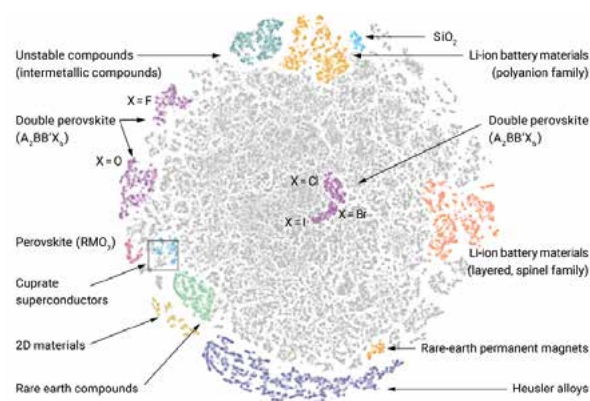
成果集 2025

探索加速型「共通基盤」領域 本格研究

マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築

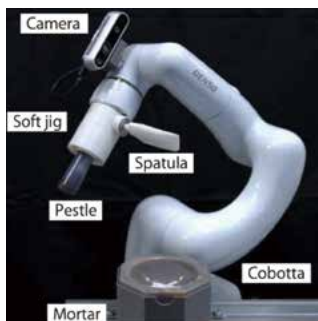


〈ロボット×AI×ヒト〉で  
材料開発の新システムを実現



**MEEP**

Materials Exploration space  
Extension Platform



研究開発代表者

長藤 圭介

東京大学  
大学院工学系研究科  
教授



国立研究開発法人  
科学技術振興機構  
Japan Science and Technology Agency

## CONTENTS

JST-Mirai Program

01  
未来社会創造事業とは

03  
プロジェクト概要

05  
研究開発成果の紹介

13  
今後の展望



未	来	社	会
創	造	事	業
と	は		

未来社会創造事業では、社会・産業ニーズ(潜在的なニーズを含む)を踏まえ、経済・社会的にインパクトのあるターゲット(出口)を明確に見据えた技術的にチャレンジングな目標を設定し、戦略的創造研究推進事業や科学研究費助成事業等の有望な成果の活用を通じて、実用化が可能かどうか見極められる段階(概念実証/POC:Proof of Concept)を目指した研究開発を実施します。その研究開発において、斬新なアイデアの取り込み、事業化へのジャンプアップ等を柔軟かつ迅速に実施可能とするような研究開発運営を採用します。

本事業は異なる2つのアプローチ「探索加速型」と「大規模プロジェクト型」で構成されます。

### 【探索加速型】

比較的少額の課題を多数採択(スモールスタート)する探索研究から、それらの課題を絞り込み、集中投資する本格研究へと段階的に研究開発を進めます。探索研究では、多くの斬新なアイデアを公募して取り入れ、本格研究に向けてアイデアの実現可能性を見極めるための研究開発を行います。探索研究から本格研究への移行時や、本格研究実施期間中において、ステージゲート評価を実施し研究開発課題を絞り込むことで、最適な研究開発課題を編成します。

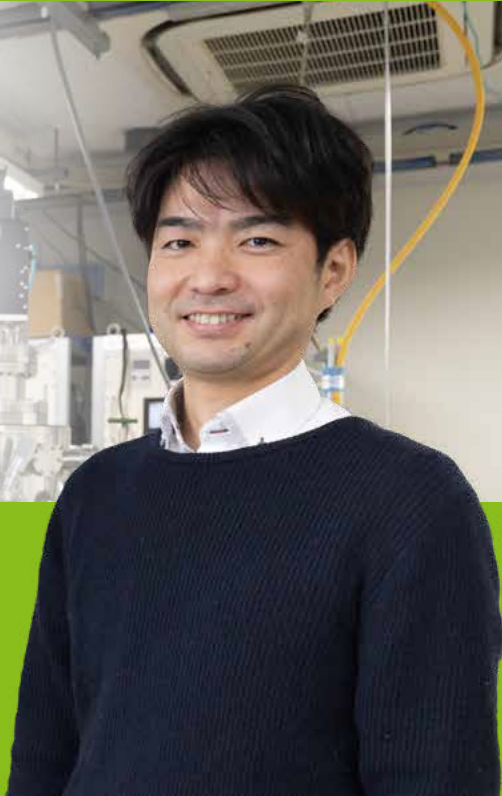
### 【大規模プロジェクト型】

科学技術イノベーションに関する情報を収集・分析し、現在の技術体系を変え、将来の基盤技術となるよう文部科学省が特定した「技術テーマ」に係る研究開発課題を公募し、集中的に投資します。



## 〈ロボット×AI×ヒト〉で 材料開発の新システムを実現

世界各国で材料探索の自動化・自律化が進む中、日本のマテリアル産業が今後も優位性を維持していくには、材料開発のスピードアップが必須である。東京大学の長藤圭介教授が率いるチームでは、ロボティクスによる自動化、得られたデータから次の実験をデザインするAI、日本の強みである人の経験や勘をかけ合わせ、材料探索を大幅に高効率化するシステムを構築した。それにより日本の学術と産業のあり方そのものも変えることを目指す。



### 長藤 圭介 Keisuke NAGATO

#### Profile

東京大学 大学院工学系研究科 教授  
2021年より未来社会創造事業研究開発代表者



#### 背景

人々の生活を支える様々な製品の基盤になるのがマテリアルである。日本のマテリアル研究開発は、ヒトの勘・コツ・経験に基づいたマテリアル探索が研究開発の基本となっている。日本はこれらの研究開発ノウハウに強みを持ち、世界のマテリアル研究や産業を牽引してきた。しかし、近年のマテリアル研究は、ロボット技術や機械学習を組み合わせた研究手法が世界中で急速に発展している。

ロボットが自動的に材料の合成と計測を繰り返すことで膨大な実験データを習得し、機械学習で新マテリアルをいち早く発見することが可能になりつつある。欧米、中国ではこれらの技術へ巨額投資を行い、スケールメリットを活用してマテリアル探索を行う動きが活発化している。世界中でマテリアルの探索速度が加速する中、日本の強みを生かした、新たなマテリアル探索手法の開発が急務となっている。



#### 実現したい未来社会

マテリアル探索空間を圧倒的に拡張し、マテリアル研究開発の効率を上げる。そのためにヒトの勘・コツ・経験・作業のみに依存した研究手法からの脱却、すなわちパラダイムシフトを起こす必要がある。

従来のヒトのノウハウに依存した仮説駆動型研究は、試行錯誤の回数に限界がある。ハイスループット自律探索システムを活用したデータ駆動型研究は、従来の反復的な作業を研究者に代わって遂行する。このアプローチによって得られる膨大なデータ・発見をヒトが理解し、日本が強みとする勘・コツ・経験と組み合わせることで、実用性の高い新規マテリアルの発見におけるセレンディピティの発生頻度を向上させる。

さらに発見マテリアルにおける機能発現の因果関係を掘り下げることで、物性の指導原理を解き明かし、更に高性能なマ

テリアルを効率よく探索する。

このような研究開発手法のパラダイムシフトを起こすことで、マテリアル探索空間拡張プラットフォームを構築し、研究開発のスピードを向上させ、製品化リードタイムを短縮する。





研	究	Introduction of research and development results	
開	発	成	果
の	紹	介	



長藤 圭介  
Keisuke NAGATO

東京大学  
大学院工学系研究科  
教授

## 手作業から自動探索へ 日本のマテリアル産業を変えたい

人の生活を支えているモノや製品は、すべて材料からできており、社会を前に進めていくためには、新たなよい材料をいかに発見・開発できるかが重要となる。たとえば、窒化ガリウムの発見がLEDの発明につながり、照明の消費電力量を大きく低減させたように、新しい材料は我々の生活を豊かにすることに直結している。

現代の材料開発では、材料の配合や製法を変えながら新しい物質を生み出し、その性質を評価し、それを受けて配合を変え…という試行錯誤が繰り返される。従来、この過程では研究者個人の経験や勘が重要な役割を果たしてきた。日本はその点に強みを持ち、マテリアル産業は基幹産業として発展してきたが、近年は開発スピードの面で大きな課題に直面している。

「新材料の開発に向けた試行錯誤には膨大な時間と人手が必要です。世界ではAIロボットを使った材料開発の自動化・自律化が進んでおり、従来のやり方では太刀打ちできません。我々は日本のやり方そのものを変えていきたいと考えています」。そう語るのは、機械学習とロボットを用いて材料の自律探索を行う

「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」プロジェクトの代表を務める東京大学の長藤圭介教授だ。

MEEPの前身は、長藤教授の取り組んできた「粉体成膜プロセス研究のハイスループット化のためのデータ駆動型プロセス・インフォマティクス」、大阪大学の小野寛太教授による「数理科学を活用したマルチスケール・マルチモーダル構造解析システム」、東京大学の一杉太郎教授による「マテリアルロボティクスによる新材料開発」、そしてNIMSの知京豊裕 LSTC 材料研究ラボ長による「Materials Foundryのための材料開発システム構築とデータライブラリ作成」という4つの探索研究である。2021年に本格研究に移行するにあたり、これらを統合し、オムロンサイニックス株式会社(東京都文京区)の牛久祥孝リサーチバイスプレジデントをリーダーとする機械学習の要素も加えた大型プロジェクトとして再始動した。現在はさらにNIMSの長田貴弘グループリーダーも参画している。

統合に際しては、皆で議論を重ねて5年間のビジョンをつくった。現実に日本の材料開発のあり方を変えるには、外部の産業界ともビジョンを共有していく必要があるため、MEEPという愛称や三眼望遠鏡をあしらった親しみやすいロゴも作成した。



**MEEP**

Materials Exploration space  
Extension Platform

3つの望遠鏡をあしらったMEEPのロゴデザイン

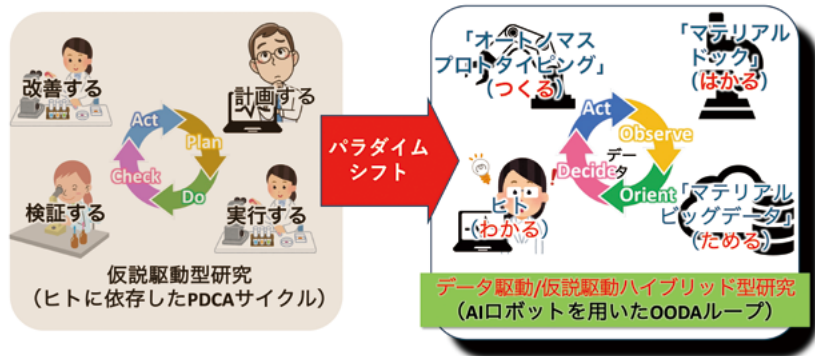
## AIが描く「材料地図」から次の一手へ

本格研究として始動するにあたり、最初の課題は、日本に適した材料探索の方法論を見出すことだった。材料の組み合わせは無限度で、人の手だけで立ち向かうには限界がある。海外では多数のロボットを並べた総当たりの探索も行われているが、日本では現実的ではない。

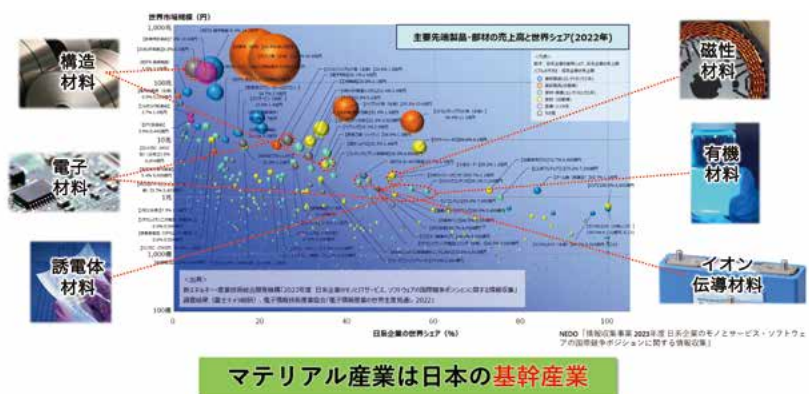
導き出されたのが、ロボットとAIによる自律探索に人間の経験や勘を組み合わせることで、効率的な材料探索を実現する〈ロボット×AI×ヒト〉という考え方である。探索対象としては全固体電池の材料であるイオン伝導無機材料を選定した。「従来のPDCAではなく、Observe-Orient-Decide-ActというOODAの方法論を採用し、研究のあり方そのものを変えることを目指しました。そこでも、まずはやってみようと、Observe(観察)ではなくAct(つくる)から始めています」と長藤教授は語る。

この方法論を具体化したのが、自動実験、自動計測装置とデータベース、AIを接続して構築された自律型材料探索システム(Autonomous Materials Exploration System: AMES)だ。新しい材料を自動的に合成し、その性質や構造を自動的に計測・評価。得られ

たデータを標準化してNIMSのデータセンターに蓄積し、AIがシミュレーションを行って新しい材料候補を2次元のマテリアルマップとして提示する。それを研究者が読み取り、次の一手を決めていく。単純な自動化ではなく、人の知見を加えているのが大きな特徴である。



研究手法のパラダイムシフト



日本の産業におけるマテリアルの位置付け

## 発見された材料を産業に繋げる

材料の探索が加速すれば、次に律速となるのは新材料を量産し、産業化するためのリードタイムである。材料は合成されただけではあまり付加価値を生まず、機能という価値を持つことで産業に繋がる。材料を大量生産するプロセス、材料を加工して付加価値を与えるプロセスは、材料探索のための試作プロセスとは異なる試行錯誤が必要となっており、長藤教授はこのようなプロセス最適化の自動・自律化に取り組んでいる。燃料電池の触媒層について、製造ラインを縮小した自律実験装置を用い、発電性能の良い塗布乾燥条件の探索で10倍の効率化を実現した。

「今後は、ここで得られた成果を量産プロセスにつなげ、開発した材料が世界中で使われるようになるまでを

実現したいですし、MEEPが示した新しいパラダイムを広く日本社会に普及させていくことが私の使命であるとも考えています」。長藤教授率いるMEEPの挑戦が日本の産業をどのように変えていくのか、これからの展開が注目される。



## 新材料試作のプロセスを自動化 規格の異なる装置を接続



一杉 太郎  
Taro HITOSUGI

東京大学  
大学院理学系研究科  
教授

研究室いっぱいに広がる装置を前に、「これまで人間が手を動かしていた新材料試作のプロセスをすべて自動化した装置が完成しました」と語るのは、材料合成と特性評価を自動化するオートノマスラボグループを率いてきた東京大学の一杉太郎教授だ。この装置は、新材料を自動でつくるスパッタ成膜装置、できた試料の構造を観察する走査型電子顕微鏡、元素組成を測定するエネルギー分散型X線分光装置、結晶構造を分析するX線回折装置やラマン分光装置、紫外可視分光光度計、電気抵抗測定装置、そしてデータベースやAIに接続するコンピュータがモジュールとして相互接続された自律型材料探索システム AMES だ。

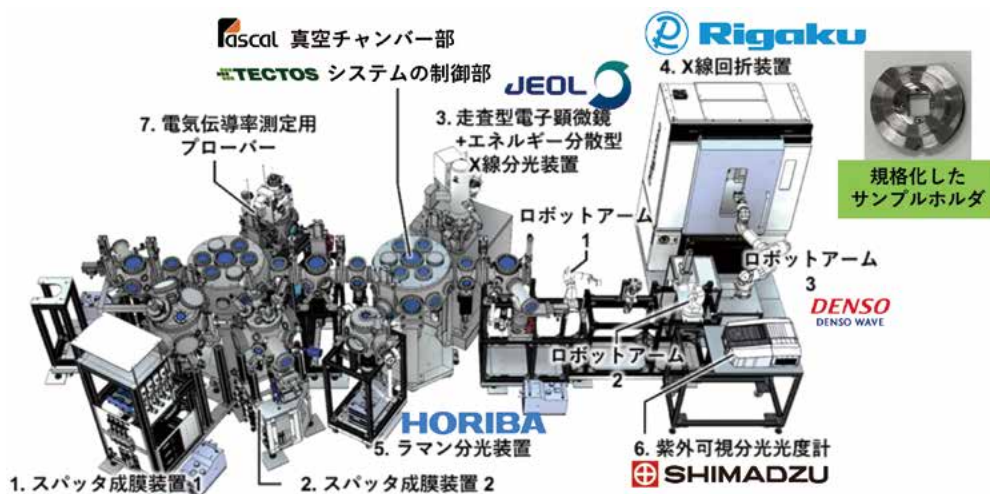
薄膜材料は、半導体やディスプレイなど幅広い分野で鍵を握る。一方で、材料の組み合わせは膨大で、「考えられる材料の数は、宇宙の星の数より多い」ため、総当たりで探索を進めるには限界がある。こうした課題意識から、一杉教授らは理化学機器メーカーと連携し、自動・自律型

の材料探索システム AMES の構築に取り組んできた。

AMESでは、元素の組み合わせや成膜温度といった条件をAIが推定して新材料を試作し、その結果をもとに次の条件をAIが導き出す。必要に応じて研究者の着想も加えながら、試作と評価を自動的に繰り返すことができる。これにより材料探索の速度は従来の約10倍に向上し、高性能の新材料の発見にもつながっている。

こうした装置の実現にあたっては、複数の理化学機器メーカーが開発した規格の異なる装置を、1つのシステムとして接続する点が大きな課題となった。各種装置を物理的につなげなければ試料の搬送すらできないが、装置ごとに目的や設計思想があり、扱う試料サイズなどが異なっていたからだ。データやソフトウェアも同様で、異なる形式で出力されるデータを標準化しなければ、解析の自動化はできない。ハードとソフトの両面で標準化し、共有できる仕組みを整える必要があった。ハードの標準化では計測分析装置メーカーの協力を得てサンプルホルダーを共通化し、図面をWEB上で公開している。ソフトの標準化については、日本分析機器工業会が策定した計測分析装置の分析データ共通フォーマットであるMaiML形式への統一を実施。MaiMLは2024年にJIS規格となり、現在はISO規格化も目指している。

複数の企業のそれぞれのやり方を1つにまとめるには、目的とビジョンを共有するのが近道である。「当初は、研究開発のデジタル化の意義そのものが十分に理解されず、『人よりコストがかかるのではないか』という固定観念



K. Nishio et al., Digital Discovery 2025

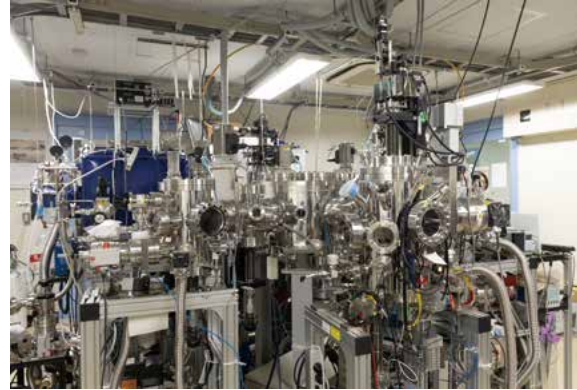
日本の理化学機器メーカーの計測器を搭載。10倍の速さでイオン伝導体を探索。

も根強くありました。そうした中でコミュニケーションを重ね、欧米の動向も含めて正確な情報を示しながら、共感を得ることに力を注ぎました」と一杉教授は当時を振り返る。

材料開発のデジタル化は世界的な潮流であり、ロボットやAIを使いこなさなければ成果が出ない時代になっている。ここで日本が先陣を切らなければ、マテリアル産業の競争力は失われかねない。一方、今デジタル化を進めれば、ビジネスチャンスは確実に広がっていく。一杉教授の熱意とヴィジョンがチーム全体に共有された結果、標準化が実現し、日本のマテリアル産業の将来を担う装置が完成した。

現在は電池材料の探索を行っているが、今後はAMESを半導体材料や触媒材料の探索へと展開していきたいという。また、こうして生まれた勢いを社会全体へ広げていくこともMEEPの重要な役割であり、一杉教授らは政府や企業への働きかけも進めてきた。2025年6月には内閣

府からAI for Science 推進を加速する方針が示されるなど、政策レベルでは動きが見え始めているが、企業の研究開発現場への本格的な浸透はまだ初期段階にある。本プロジェクトをバネに、このモーメンタムを日本の産業界に定着させ、加速させていく。



真空成膜を用いた自律実験システム

## 粉体粉碎から計測までの自動化で 解析速度が10倍に向上



小野 寛太  
Kanta ONO

大阪大学  
大学院工学研究科  
教授

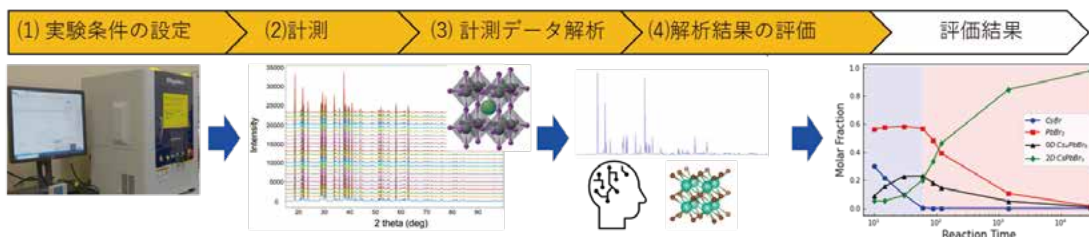
材料が持つ性能はどのような原理によって発現するのか、性能向上の決め手は何かを理解しなければ、よい材料はつくれない。大阪大学の小野寛太教授がリーダーを務めるのは、材料開発において重要な役割を担う計測・解析を担当するマテリアルドックグループだ。

従来は材料の計測・解析では試料の作製から得られたデータの解釈まで、すべて人間が行っていたが、小野教授

らは自動で大量に合成される材料を自動で粉碎し試料を作製し、計測・解析まで行うシステムを構築した。自動化・自律化により、1試料につきX線回折装置(XRD)で2時間程度かかっていた解析は約10分程度に短縮され、10倍速での解析が実現した。

特徴の1つは、自動計測装置をモジュール化し、机1つ分程度のコンパクトなものとしたことだ。「海外ではモジュール化されていないため、要する手数も多く、装置を並べる広い空間も必要ですが、我々の装置であれば、自動合成装置に接続するだけで合成から測定まで連続して行えます」と、小野教授は自信を見せる。

もう1つの特徴は、従来の自動測定装置では扱うのが難しかった粉体やスラリーと呼ばれる粘り気のある泥状の混合物にも対応可能とした点だ。海外の自動実験装置では液体は扱われるが、粉体やスラリーには対応していない。MEEPでは熟練の技が必要な材料をあえて対象と



実験条件の設定から評価結果の提示まで、計測・評価プロセスを全て自動化・自律化

することで、海外との差別化を図っている。

自動化装置が導入されれば、人が日中に材料をセットするだけで、夜間に実験からデータ解析までが完了できる。一つ一つの手順を正確に再現性高く実行し、条件を検証しながら最適化できるのもロボットならではの。真空中や酸素や水分のない環境での実験が可能となり、不純物の混入も防げるため、得られた材料は人間がつくるより理論値とのブレが少ないものになる。人間は働き方を効率化しながら、得られた高純度な材料と高精度な解析結果に基づいて、次の手を考えられるようになる。

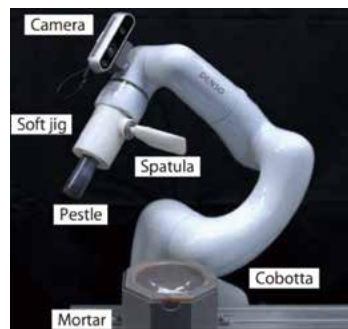
装置開発の過程では、実験の本質に向き合うことになったと小野教授はいう。基本的な実験操作である「砕く」「混ぜる」について、当初は人間の動作をそのままロボットに模倣させようとしたが、うまくいかなかった。試行錯誤を重ねる中で、人間の動作の再現ではなく、ロボットがシンプルに実行できる動きは何かを考えることが重要だと気づいたという。「円運動のような単純な動きをどう組み合わせれば、人間に近づけるか、あるいは人間を凌駕できるか。物理プロセスの原理的メカニズムから見直したことで、実験に対する理解が深まりました」。

材料を砕いて混ぜていくときには、粒子が細くなるにつれ、ガリガリしていた感触がスムーズになっていく。その変化を音響や振動、画像信号で捉え、物理的な観点から定量的に解析した結果、音や振動から何ミクロン程度の粒径になったかを把握できるようになり、粉碎や混合に

適した最適な操作の発見や、実験に最適化された試料づくりにつながった。

また、従来は人間の操作によるばらつきを吸収するため、XRD測定時には300mg程度の試料を長時間かけて計測する必要があったが、ロボット向けに最適化したことで、3mgという少量でも高精度かつ高速に計測・分析が可能となった。従来、XRD測定時に人間が行っていたサンプルホルダー上の粉末表面に力をかけて平滑にする作業が、かえって精度のばらつきを生むことも明らかになった。

自動化は単に人間の労働力を代替するにとどまらず、これまで不可能だと思われていたことを可能にし、実験の本質に近づくことで高精度な実験を可能にする。「今後は、より扱いの難しい材料に対しても、同じようなアプローチで自動化・自律化を進めていきます。最先端のものづくりを担う方々に貢献できる要素技術を磨き、社会に還元していきたいと考えています」。



材料を乳鉢で粉碎・混合するロボットアーム。画像認識のためのカメラも搭載。

## データを標準化して蓄積し 広く共有可能に



長田 貴弘  
Takahiro NAGATA

物質・材料研究機構  
電子・光機能材料  
研究センター  
機能材料分野  
ナノ電子デバイス材料  
グループ  
グループリーダー

NIMSの長田貴弘グループリーダーが率いるマテリアルデータ科学グループは、材料研究で得られる測定・解析データを体系的に蓄積し、実際の材料開発に活用できるデータベースとして整備する方法論の構築に取り組ん

できた。データは、NIMSが文部科学省とともに推進するデータベース(データ構造化システム:RDE)に蓄積し、既存の実測データをAIなどでも活用可能な形に整理することで、材料研究におけるデータ活用のロールモデルとなることを目指した。

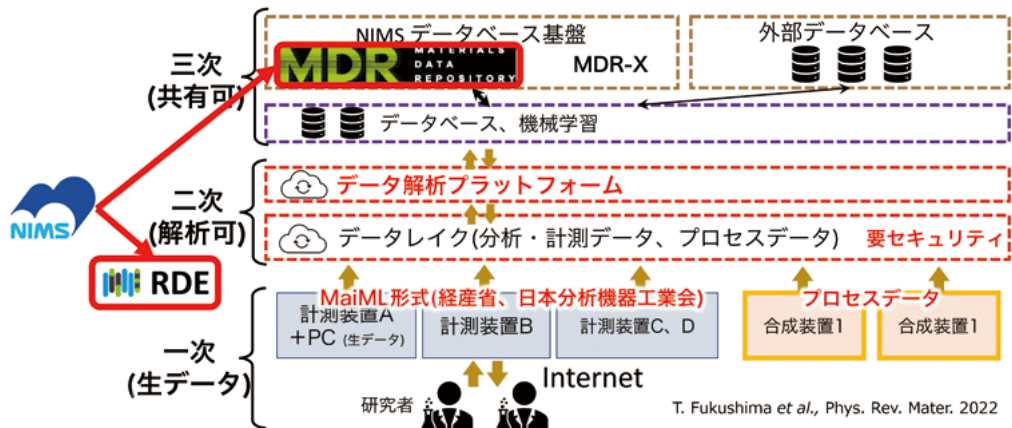
材料研究の現場から生み出される生データを共有可能な形にしていくまでには、いくつかの段階がある。まず、測定装置ごとに形式が異なる生データ(1次データ)を蓄積するが、標準化に一杉グループが進めているMaiML形式に対応を行う。これにより解析可能となった2次データを、データ解析プラットフォームに投入する。そこで自動解析の結果や研究者による解析・解釈、データ間の関係性といった情報を重ね合わせ、3次データを生成する。

「3次データは論文化や企業連携も視野に入れ、NIMSが運営する材料の公開データリポジトリ (Materials Data Repository: MDR) に蓄積し、共有可能な形で公開しています。こういった異なる研究ステージのデータを連結し、標準化・共有化した点がこのグループの大きな成果です」。

例えば、長田グループが使用しているコンビナトリアル手法では、より多くの実測データの収集ができるよう、1つの薄膜上で連続的に組成を変化させて試料を生成している。こうすることで異なる物性をもつ材料が一度につくれ、物性の相対的变化を効率的に把握できる。ただ、実測データを蓄積することは比較的容易でも、データを共有可能なものとして整備するには課題が多かった。データ形式の標準化のほかに、明らかなエラーデータをどこまで残

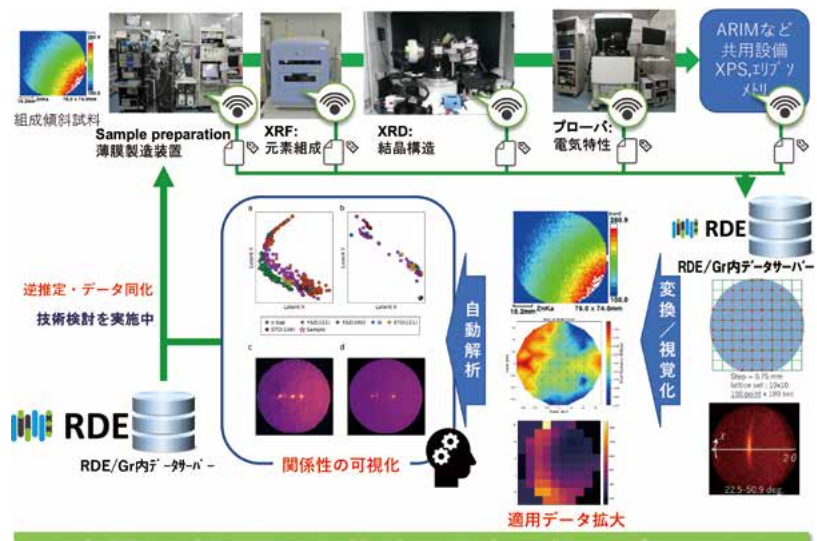
すべきか、共有を前提としたデータ選別やタグ付けをどのように行うか、といった課題にも取り組み、実際に使えるデータベースの構築を目指した。

「自動でつくって測り、データ科学と連携した解析をして、また次へ、というループが実現した一方で、次に何を試すべきかについては、やはり人間が方向性を示す必要があります。こうした人の判断を支えるため、我々はサマリーデータの可視化に取り組みました」。複雑な物性情報も、視覚的に示されることで傾向などが把握しやすくなる。マッピングにあたっては、AMESから得られるデータに加え、過去に蓄積された既存のデータベースも参照したが、実測データ数には限りがあり、既存のデータベースにも分野ごとの偏りがある。



- ・データ階層に最適な自動構造変換，共有化とデータ拡張技術の実証
- ・既存実測データ2,838から，探索対象データ数を21,243に拡大(約10倍)

データ蓄積システムの概要



**多様な計測結果を集結し共有可能なデータへ**

組成傾斜試料の製造からデータベースへの格納までの流れ

この問題を解消するため、長田グループリーダーらは機械学習グループとともに2,838の既存の物性データを基にシミュレーションを行い、バーチャルな予測物性データを生成することで、データ数を21,243にまで拡大。従

来データの10倍程度の情報量を取り出すことに成功し、材料探索の高速化に貢献した。こうしたシステムにより計測データの付加価値が高まることで、日本の計測機器メーカーの市場拡大も期待される。

## 人のひらめきを誘発する マテリアルズマップ



**牛久 祥孝**  
**Yoshitaka**  
**USHIKU**  
オムロンサイニック  
エクス株式会社  
リサーチアドミニスト  
レイティブディビジョン  
リサーチバイス  
プレジデント

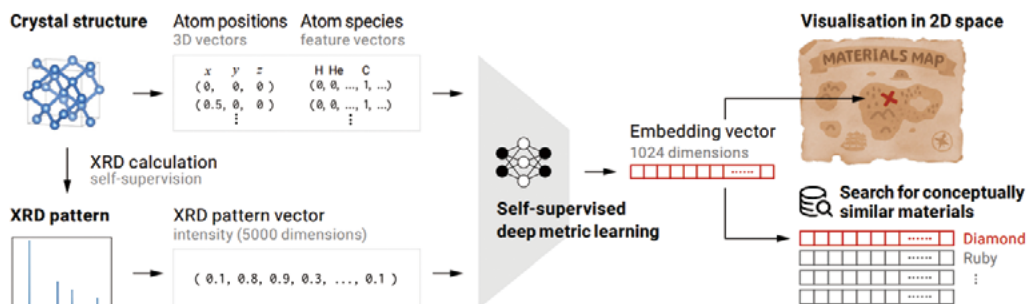
オムロンサイニックエクス株式会社(東京都文京区)の牛久祥孝リサーチバイスプレジデントがリーダーを務める機械学習グループは、「つくる」「はかる」「ためる」という各段階を、AI・機械学習によって加速してきた研究者が横断的に集まって構成された。グループが担ったのは、蓄積されたデータに人の経験や勘を重ね、次に何を試すべきかを導き出す「わかる」の部分だ。

代表的な成果が、材料特性を俯瞰的に把握するためのマテリアルズマップの構築だ。本研究では、結晶構造やX線による計測データを統合し、機械学習によって材料同士の類似性を求めた。しかし、機械学習で材料の物性を表現すると1,000次元にも及ぶ高次元データになる。数値の羅列だけでは、熟練の研究者であっても全体像を直感的に捉えることは難しい。そこでさらに本研究では、この類似性が一目で把握できる2次元のマップとして可視化した。

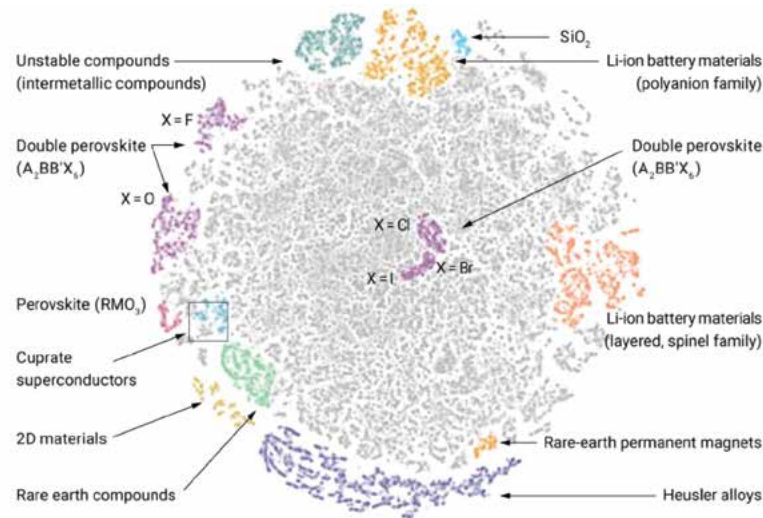
可視化により、人のひらめきが誘発されると牛久リサーチバイスプレジデントは指摘する。「物性の近い材料が近くに配置されるため、電池材料がこのあたり、超伝導材料はこのあたり、ということがわかると、この近くの未探索の材料の中によい材料があるのでは、と自然に発想できますね」。マップの一部の着色された部分が、すでに情報のある材料を示している。圧倒的に多いのが、グレーの未探索の領域だ。この空白の領域をいかに効率的に探索するかが、新材料の発見の鍵となる。

材料間の類似性を抽出し、2次元へと写像する過程では機械学習が活用された。実測データ数は有限で、分野の偏りもあったため、牛久リサーチバイスプレジデントらは過去のデータに加えて、ある条件を与えたモデル化を行い、バーチャルな物性情報を生成・解析。その結果、実測データ数の10倍相当の物性情報を取り出すことに成功し、マップの情報密度を大幅に増加させることができた。

材料探索に機械学習を組み合わせた本研究においては、機械学習の研究者はAIには詳しいが材料についてはあまり知らず、逆もまた同様である、という点が障壁になった。材料研究のどこに本質的な課題があり、それをAIでどのように解くのが有効かを見極めるには、お互いの分野に対する理解が欠かせない。高度なAI技術を導入しても、課題の立て方を誤れば、期待する成果にはつながらない。両者のコミュニケーションが、研究を前に進めるうえで重要な要素となった。



結晶構造からマテリアルズマップを作成する際の処理の概念図



Yuta Suzuki et al., Mach. Learn.: Sci. Technol. 2022

### 1000次元の情報を2次元に転写して可視化

マテリアルズマップ

例えば、マテリアルズ・インフォマティクスの問題の1つに、ある結晶構造の材料ができた場合、その物質の超電導性や安定性はどうかを推定する、というものがある。結晶構造は基本的に、上下左右奥行き方向に同じ並び方が無限に繰り返されているため、そのままではAIに回答を求めることはできない。なぜなら、AIには「無限」を投入できないからだ。構造の一部だけを投入しても、その先にある原子との相互作用などを計算できず、その物質本来の物性を示せない。

では、どうするか。「原子間の相互作用をモデル化し、1つの結晶構造の繰り返しの情報だけで、あたかも無限個の原子が入っているかのようにAIが想像しながら物性を推定する手法を開発しました。このモデルは、当時、物

性の推定精度で世界一を記録しました」。この読みは的中し開発したモデルは、当時の物性の推定精度で世界一を記録した。

現在のマテリアルズマップの情報は、まだ限られた領域のものにとどまるため、AMESの実測データと過去のデータベースに蓄積されているデータを組み合わせ、さらなるマップの拡張を図っていく必要がある。その際、公開データだけに依存すると、本来の探索対象とずれた学習が行われる恐れがあるため、実際の材料合成と評価を繰り返しながら、その結果をAIにフィードバックしていく循環が必要となる。こうした実験と学習が連動する仕組みを通じて、より精度の高い材料探索を実現していく。

## 主な論文

- Kazunori Nishio, Akira Aiba, Kei Takihara, Yota Suzuki, Ryo Nakayama, Shigeru Kobayashi, Akira Abe, Haruki Baba, Shinichi Katagiri, Kazuki Omoto, Kazuki Ito, Ryota Shimizu, Taro Hitosugi, "A digital laboratory with a modular measurement system and standardized data format", Digital Discovery 4, 2025, 1734-1742. DOI: 10.1039/d4dd00326h
- Yuto Yotsumoto, Yusaku Nakajima, Ryusei Takamoto, Yasuo Takeichi and Kanta Ono, "Autonomous robotic experimentation system for powder X-ray diffraction", Digital Discovery 3, 2523 (2024). DOI: 10.1039/d4dd00190g
- Tatsunori Taniai, Ryo Igarashi, Yuta Suzuki, Naoya Chiba, Kotaro Saito, Yoshitaka Ushiku, Kanta Ono, "Crystalformer: Infinitely Connected Attention for Periodic Structure Encoding", The Twelfth International Conference on Learning Representations, 2024.
- Shinjiro Yagyu, Michiko Yoshitake, Takahiro Nagata, Takeshi Yasuda, Takatsugu Wakahara, Yubin Liu, Yoshiyuki Nakajima "Automated analysis of photoelectron yield spectroscopy spectra interpreted via power laws" SCIENCE AND TECHNOLOGY OF ADVANCED MATERIALS: METHODS 5, 2465257 (2025) DOI:10.1080/27660400.2025.2465257
- Naruki Yoshikawa, Yuki Asano, Don N. Futaba, Kanako Harada, Taro Hitosugi, Genki N. Kanda, Shoichi Matsuda, Yuuya Nagata, Keisuke Nagato, Masanobu Naito, Tohru Natsume, Kazunori Nishio, Kanta Ono, Haruka Ozaki, Woosuck Shin, Junichiro Shiomi, Kunihiko Shizume, Koichi Takahashi, Seiji Takeda, Ichiro Takeuchi, Ryo Tamura, Koji Tsuda, Yoshitaka Ushiku "Self-driving laboratories in Japan" Digital Discovery 4, 2025, 1384-1403 DOI: 10.1039/d4dd00387j

# 今 後 の 展 望

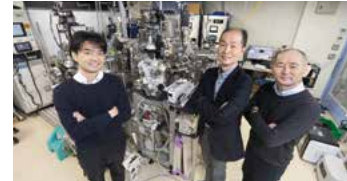
## 新たな材料研究基盤に向けて

本プロジェクトは2025年度をもって終了するが、今後も AMES のブラッシュアップは継続していく。現在、AMES を有償利用して新材料の開発に取り組んだ企業は4社であり、今後は成功事例を積み重ねながら、ユーザーの拡大を図っていく。

NIMS のデータセンターには、現在、電池材料を中心としたデータが蓄積されているが、今後は対象領域を広げてデータの集積を進め、日本の物質材料のデータセンター拠点としていく構想だ。機械学習については、過去の論文等に蓄積された知見を大規模言語モデル (Large Language Model: LLM) として取り込み、材料探索支援機能のさらなる高度化を進め

る。これらを統合した生産プロセスシステムの構築により、材料探索から量産プロセスまでを見据えた運用を可能にしていく。

また、2025年11月には、2023年に長藤教授、牛久リサーチバイスプレジデントらを発起人として発足させた「AI ロボット駆動科学イニシアティブ」を法人化した。これを本プロジェクトで生まれた材料探索の自動化・自律化のモーメンタムを加速させる基盤として活動していく予定である。



### 長藤 研究開発代表者より

無限に近い材料の組み合わせの中から、いかにより材料を見いだしていくか。世界的に材料探索の自動化が進む現在、人間の力だけでこの課題に立ち向かうことは難しくなっています。そうした状況を背景に、MEEP ではロボットと AI を活用し、実験・計測・データ化を連続的に回しながら、材料探索を加速させる仕組みづくりに取り組んできました。

MEEP の意義は、単に実験を自動化しただけではありません。24時間稼働し得る実験と、その結果が即座にデジタルデータとして蓄積されるようにしたことで、研究者が次に何を試すべきかを考えるための材料が常に手元にある環境が整いました。これにより、労働力不足や働き方の問題など、日本の社会課題の解消にもつなげていけると考えています。

MEEP は材料探索を高度化するための基盤として、実運用に耐える段階に到達しています。MEEP が示した新しいパラダイムを広く日本社会に普及させていくことが、本事業でリーダーを務めた私の使命であるとも考えています。ここで得られた成果を量産プロセスへとつなげ、開発した材料が世界中で使われるようになるところまでを実現し、日本のマテリアル産業に貢献していきます。

プロジェクトHP  
<https://meep.nagato-u-tokyo.jp/>



一般社団法人 AI ロボット駆動科学イニシアティブ  
<https://airds.or.jp/jp/>



### 岡島 博司 テーママネージャーより

新規材料の探索においては、これまでのやり方では物量で勝る国には勝てない時代が来ました。単なる自動実験や生成 AI の活用でも不十分であり、個々の研究者が独自の手法を開発するだけの状況も望ましくありません。MEEP では材料科学、プロセス工学、データ科学を用い自律研究のクロードループを回すべく4つの探索研究を統合しました。材料開発の本質的なブレイクスルーは、しばしば意図せぬ未知の発見から生まれるため、材料の広大な探索空間を効率よく網羅する手法が求められます。さらに、その過程では、結果の回帰にとどまらず、因果関係まで掘り下げることで、物性発現の新たな指導原理に到達できる可能性があります。

MEEP がその端緒を切り開いた意義は大きく、本国の材料研究・産業の巻き返しの一手となる発見を期待します。

### 今後に期待すること



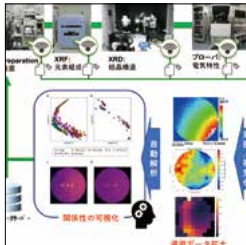
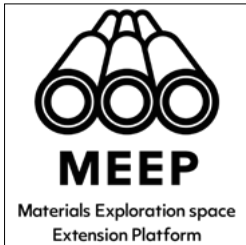
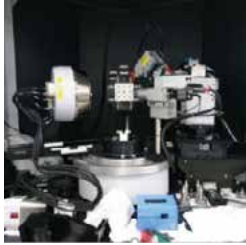
### 長我部 信行 運営統括より

本研究開発課題は共通基盤領域の中で、AI とロボティクスを活用したマテリアル分野の新たな研究開発基盤を拓くプロジェクトとして採択されました。

世界中で AI とロボティクスを活用した材料研究が活発になっていますが、材料の実験方法は複雑で、得られるデータも多岐に渡るため、決定的な手法やデータベースは生み出されていません。

その中で、複数分野の研究者が連携し、パイオニアとして材料分野の新しい研究開発のあり方にチャレンジすることは困難も多かったと考えますが、得られた知見やインサイトは非常に重要な物です。本領域でパイオ分野の高橋課題らとともに設立した AI ロボット駆動科学の学協会活動を通じ、これまでの知見の啓蒙や人材育成を進め、AI for Science に繋がることを期待します。

### 今後に期待すること





国立研究開発法人科学技術振興機構  
未来創造研究開発推進部

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町

TEL : 03-6272-4004

E-mail : [kaikaku\\_mirai@jst.go.jp](mailto:kaikaku_mirai@jst.go.jp)

WEB <https://www.jst.go.jp/mirai/jp/>



X [https://x.com/JST\\_mirai](https://x.com/JST_mirai)



発行：令和8年3月