

Jornadas de Automática

Desafíos en manipulación robótica inteligente en laboratorios autónomos

Oña, Edwin Daniel*, Mena, Lisbeth, Copaci, Dorin S.

RoboticsLab, Universidad Carlos III de Madrid, Avda. de la Universidad, 30, 28911, Leganés (Madrid), España.

To cite this article: Oña, E.D., Mena, L., Copaci, D.S.. 2025. Challenges in intelligent robotic manipulation in self-driving laboratories. *Jornadas de Automática*, 46. <https://doi.org/10.17979/ja-cea.2025.46.12244>

Resumen

Los laboratorios autónomos o *self-driving labs* (SDL) representan un enfoque innovador que combina inteligencia artificial, automatización de procesos, robótica, y ciencia de materiales. Estos entornos están diseñados para realizar experimentos sin intervención humana directa, acelerando significativamente el descubrimiento y optimización de nuevos materiales. En este artículo se presentan los componentes generales de un SDL, describiendo su funcionalidad, dependencia e interacción entre ellos para realizar experimentos químicos. Dentro de estos componentes, uno de los bloques fundamentales es la manipulación robótica, que permite ejecutar tareas experimentales de manera precisa, repetible y eficiente. Los brazos robóticos programables realizan operaciones como dispensado de líquidos, mezcla de compuestos, transferencia de muestras, y limpieza de instrumental, reemplazando tareas tradicionalmente realizadas por técnicos humanos. Por ello, este artículo también identifica los principales desafíos en manipulación robótica inteligente requerida para el óptimo funcionamiento de SDL.

Palabras clave: Automatización, Manipulador robótico, Laboratorio autónomo.

Challenges in intelligent robotic manipulation in self-driving laboratories

Abstract

Self-driving labs (SDLs) represent an innovative approach that combines artificial intelligence, process automation, robotics, and materials science. These environments are designed to perform experiments without direct human intervention, significantly accelerating the discovery and optimization of new materials. This article presents the general components of an SDL, describing their functionality, dependencies, and interactions with each other to perform chemical experiments. Within these components, one of the fundamental blocks is robotic manipulation, which allows experimental tasks to be executed in a precise, repeatable, and efficient manner. Programmable robotic arms perform operations such as liquid dispensing, compound mixing, sample transfer, and instrument cleaning, replacing tasks traditionally performed by human technicians. Therefore, this article also identifies the main challenges in intelligent robotic manipulation required for the optimal functioning of SDLs.

Keywords: Automation, Robotic manipulator, Self-driving lab.

1. Introducción

La Unión Europea (UE) está inmersa en una transición ecológica sin precedentes, enfocada en el desarrollo de tecnologías sostenibles para alcanzar la neutralidad climática y una economía baja en carbono, enfrentando así los ambiciosos desafíos del cambio climático (European Council, 2019).

Además, la Unión Europea está avanzando hacia el liderazgo digital, para el cual es prioritario poner la investigación y la innovación en Inteligencia Artificial (IA) al servicio de una industria sostenible.

En este contexto, acelerar el descubrimiento de nuevos materiales, así como desarrollar métodos ecológicos y sostenibles para sintetizarlos, ayudará a abordar los desafíos glo-

*Autor para correspondencia: eona@ing.uc3m.es
Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International (CC BY-NC-SA 4.0)

bales en energía, sostenibilidad y salud (Abolhasani and Kumacheva, 2023). El reciente auge de la ciencia de datos y las técnicas de experimentación automatizada ha dado lugar a la aparición de laboratorios autónomos o *self-driving laboratories* (SDL) – por sus siglas en inglés – mediante la integración del aprendizaje automático, la automatización de laboratorios y la robótica.

Los SDL son plataformas experimentales de vanguardia que integran inteligencia artificial (IA), aprendizaje automático, robótica y análisis automatizado de datos, para llevar a cabo experimentos científicos de manera completamente autónoma. Estos sistemas operan a través de algoritmos que seleccionan de manera iterativa una serie de experimentos, con el objetivo de cumplir metas definidas por los usuarios (científicos). Esta capacidad de operar de forma autónoma acelera de manera significativa el ritmo de la investigación en áreas como la química, la ciencia de materiales e incluso el desarrollo de medicamentos, gracias a que los procesos (síntesis, caracterización, evaluación, etc) se realizan a mayor velocidad, y con un incremento sustancial de iteraciones.

El funcionamiento de los SDL se basa en una combinación de tecnologías esenciales. En primer lugar, la IA y el aprendizaje automático se emplean para diseñar experimentos, generar hipótesis y tomar decisiones sobre qué experimentos ejecutar, optimizando factores como la velocidad, el coste o el potencial de descubrimiento. Por otro lado, las plataformas robóticas automatizan la ejecución física de los experimentos, lo que incluye desde la preparación de muestras hasta la síntesis, medición y recopilación de datos. Además, la caracterización automatizada mediante instrumentos y sensores permite analizar los resultados sin intervención humana, alimentando nuevamente los datos al sistema de IA para su interpretación y planificación futura. Este proceso se complementa con un ciclo continuo de retroalimentación, en el que los resultados de experimentos previos informan y refinan las acciones futuras, cerrando así el bucle entre la experimentación y la modelización computacional.

Aunque quizás el concepto de laboratorios autónomos no es demasiado complejo de entender, sí lo es estructurar los elementos que lo componen y la forma en la que interactúan. A continuación se describe la estructura general que poseen un SDL.

2. Estructura de los laboratorios autónomos

Los Laboratorios Autónomos o *self-driving laboratories* (SDL) representan un enfoque avanzado para acelerar el método científico mediante la automatización de flujos de trabajo experimentales y la toma de decisiones basada en datos (empíricos o digitales). La automatización de laboratorios ofrece beneficios como: i) mayor eficiencia, ii) control de calidad consistente, iii) mayor reproducibilidad, iv) acceso más sencillo a los datos, v) cumplimiento de normativas, vi) protocolos estandarizados, vii) fomento de la colaboración global, y viii) reducción de costos.

Estos laboratorios se clasifican según su grado de autonomía en software y hardware, similar a los niveles de autonomía de los vehículos autónomos (Tom et al., 2024). Actualmente, la mayoría de los SDL alcanzan los niveles 2 y 3, con

algunos ejemplos de autonomía de nivel 4 para tareas sencillas. Sin embargo, lograr un SDL de nivel 5 totalmente autónomo sigue siendo un objetivo inalcanzable en este campo.

Alcanzar un nivel 5 de autonomía en un SDL implica superar múltiples desafíos tecnológicos y de integración. Entre los más críticos se encuentran la manipulación robótica compleja, especialmente en tareas no estructuradas o con materiales sensibles; la percepción robusta mediante sensores y algoritmos capaces de interpretar entornos dinámicos, objetos transparentes o procesos químicos en tiempo real; y la planificación autónoma de experimentos, que requiere modelos de inteligencia artificial capaces de razonar, optimizar y adaptarse a nuevos contextos con mínima intervención humana. Además, persisten retos en la orquestación e interoperabilidad de hardware y software, debido a la falta de estandarización en interfaces y protocolos, así como en la gestión y uso eficiente de datos, esenciales para el aprendizaje continuo y la reproducibilidad científica. Todo esto debe lograrse garantizando seguridad operativa en entornos con riesgos químicos, eléctricos y mecánicos.

Dichos niveles de autonomía provienen de la combinación apropiada de los elementos que componen la infraestructura de un SDL. Dicha infraestructura necesaria para el funcionamiento autónomo de un SDL se puede analizar desde las mismas dos perspectivas: hardware y software.

2.1. Hardware

Los experimentos químicos requieren diferentes tipos de operaciones, como la manipulación de sustancias químicas, la ejecución de reacciones, el procesamiento/purificación posterior a la reacción, la formulación, la fabricación de dispositivos y la medición de propiedades químicas. Para ciertos pasos, existen desde hace décadas sistemas de hardware automatizados específicos para cada tarea, y muchos se han comercializado como instrumentos estándar de laboratorio. La mayoría de estos sistemas no se han diseñado para flujos de trabajo totalmente automatizados, sino para interactuar con un investigador humano. Ejemplos destacados provienen del campo de la química analítica, donde las soluciones automatizadas, que a menudo abarcan flujos de trabajo analíticos de varios pasos (por ejemplo, cromatografía-espectrometría de masas desde un muestreador automático), están disponibles de forma rutinaria en los laboratorios de química (Martin et al., 2023). La integración de estas plataformas con soluciones automatizadas adicionales para habilitar los SDL presenta un desafío importante y puede abordarse mediante diferentes estrategias.

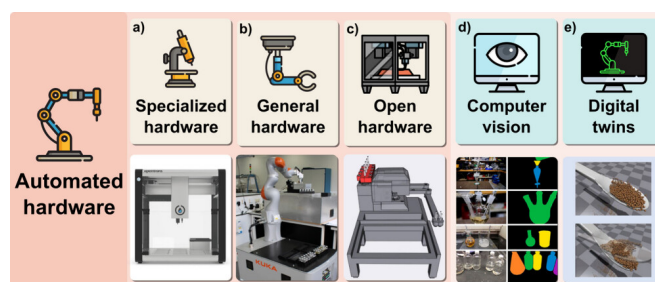


Figura 1: Componentes hardware de un SDL (Tom et al., 2024).

Los principales componentes hardware que se pueden encontrar en un laboratorio autónomo son:

- Hardware especializado: existen diversas soluciones automatizadas (hardware químico especializado) para tareas rutinarias específicas, que si bien son efectivas, carecen de adaptabilidad y tienen un alto coste.
- Robots de propósito general aplicados a la química: En contraste con lo anterior, es común utilizar brazos robóticos de propósito general para química de materiales debido a su flexibilidad y naturaleza multipropósito.
- Hardware abierto: los elevados costes del hardware específico ha generado también la integración de alternativas de bajo coste y open hardware (Baden et al., 2015) basado en impresión 3D para el equipamiento.
- Sistemas de percepción y visión por computador: este tipo de sistemas son esenciales en entornos industriales y también para la ejecución autónoma de experimentos químicos, enfrentándose a importantes desafíos como la manipulación de objetos transparentes (Xu et al., 2021; Wang et al., 2023).
- Gemelo digital para aprendizaje de habilidades de manipulación: las tareas y objetos a manipular en un SDL requieren un repertorio de muchas habilidades de laboratorio. Los robots deben adquirir esas habilidades mediante el uso efectivo de diferentes entradas sensoriales. Para ello, el uso de gemelos digitales es necesario para el entrenamiento y aprendizaje (Beeler et al., 2023) en base al modelado digital del entorno combinado con bases de datos experimentales.

Los sistemas automatizados fijos y específicos acoplan múltiples plataformas de forma estática, mientras que los flujos de trabajo parcialmente automatizados, que requieren la intervención humana, permiten plataformas adaptables y reutilizadas para diferentes experimentos. La integración de sistemas robóticos de propósito general que pueden realizar tareas químicas básicas e interactuar con los módulos, ha permitido desarrollar softwares de laboratorio completamente automatizados y modulares. Además, cada vez más se va proponiendo el uso de *open-hardware* para la automatización de laboratorios con el fin de reducir la barrera económica para la construcción de un instrumentación específica de un SDL (Ekins, 2024).

2.2. Software

La infraestructura a nivel software de un SDL consta de tres partes distintas, ejecutadas habitualmente por un software de orquestación: (1) el sistema de control y comunicación del hardware automatizado del laboratorio, (2) bases de datos de los resultados experimentales, y (3) el planificador experimental para la toma de decisiones.

En los últimos años, los campos de la química y las ciencias de los materiales han experimentado un cambio de paradigma con el auge de la IA. Los algoritmos de aprendizaje automático (ML), en particular los modelos de aprendizaje profundo (DL), han demostrado ser herramientas indispensables para descifrar patrones complejos, predecir propiedades

químicas y acelerar el diseño de nuevos materiales con propiedades personalizadas.

El proceso típico de un análisis químico implica una secuencia de acciones que incluye la síntesis de compuestos, la caracterización exhaustiva y el procesamiento meticuloso de los datos brutos resultantes. Tradicionalmente, estos protocolos se compartían mediante artículos de investigación y eran ejecutados manualmente por químicos (tipo recetas). Sin embargo, las prácticas contemporáneas permiten traducir estos protocolos a flujos de trabajo orquestados ejecutados por software computacional (Roch et al., 2020; Rahmian et al., 2022), lo que supone un cambio radical respecto a los métodos históricos.

La automatización de estos procesos acelera la generación de datos, y estos grandes conjuntos de datos deben gestionarse de manera eficiente para procesar y difundir los registros generados, en particular para el uso posterior en técnicas basadas en datos como *machine-* (ML) o *deep learning* (DP). Esto conlleva además la necesidad de protocolos estandarizados para facilitar el intercambio y la mejora de los componentes de investigación entre diferentes laboratorios.

En base a lo anterior, a medida que se hicieron accesibles grandes conjuntos de datos químicos experimentales y computacionales, los métodos estadísticos basados en datasets se han vuelto más relevantes para el descubrimiento químico utilizando técnicas de inteligencia artificial para ayudar al científico en el diseño de los experimentos (Walters and Barzilay, 2021).

3. Principales desafíos tecnológicos

Uno de los principales retos en el desarrollo de SDL radica en la integración de sistemas robóticos capaces de ejecutar experimentos complejos con un alto grado de precisión, repetibilidad y adaptabilidad (Darvish et al., 2025). A diferencia de los entornos industriales estandarizados, los laboratorios de investigación en materiales presentan una alta variabilidad en sus procedimientos, manipulación de sustancias químicas, y condiciones ambientales. Por lo tanto, para trabajar en dichas condiciones los robots deben contar con manipuladores adaptativos, sensores de alta resolución y sistemas de control avanzados que les permitan operar con exactitud en tareas como la dosificación de reactivos, la síntesis controlada, el procesamiento térmico o la caracterización estructural.

La Figura 2 describe las etapas generales en las que se puede dividir el proceso para ejecutar de forma autónoma los experimentos químicos por parte de un manipulador robótico. Dicho proceso implica recibir e interpretar las instrucciones por parte del científico que describe el experimento que se quiere realizar, la planificación de las tareas y movimientos del robot en base a los objetivos interpretados, la ejecución de los movimientos y tareas por parte del manipulador de forma autónoma y reactiva ante cambios, y el registro de datos experimentales para su posterior análisis y realimentación a bases de datos y gemelo digital. En la fase de ejecución de movimientos dentro de un SDL, es fundamental validar previamente las trayectorias y acciones en un gemelo digital (Digital Twin) antes de implementarlas en el hardware físico. Esta simulación permite detectar posibles errores, colisiones o ineficiencias sin comprometer la seguridad del sistema real. Una

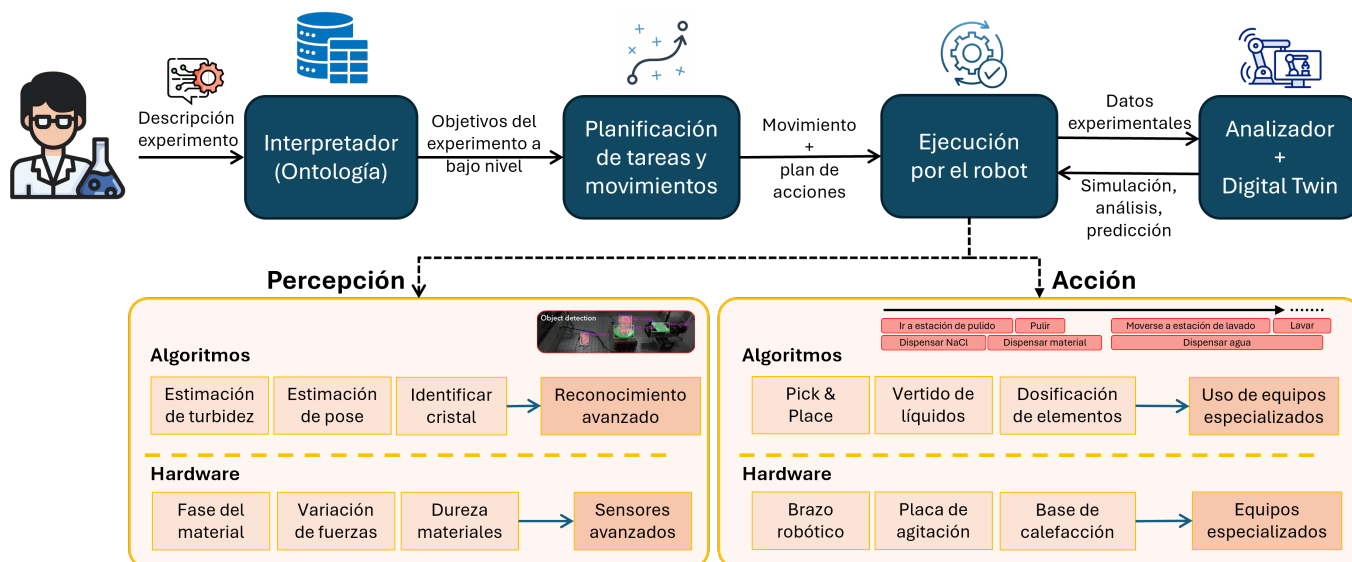


Figura 2: Etapas para ejecución autónoma de experimentos químicos por un manipulador robótico

vez ejecutadas las acciones en el entorno físico, se requiere una monitorización continua del comportamiento del robot, así como la integración efectiva de los sistemas de percepción (tanto sensores como algoritmos). Estos datos sensoriales no solo permiten validar los pasos realizados, sino también ajustar en tiempo real las desviaciones respecto al modelo simulado, alimentando así un proceso de aprendizaje continuo que mejora progresivamente la precisión y fiabilidad del sistema.

Por otro lado, la autonomía del laboratorio no solo depende de la ejecución física de experimentos, sino de la capacidad de toma de decisiones en tiempo real. Esto requiere arquitecturas de control autónomo capaces de interpretar grandes volúmenes de datos experimentales mediante técnicas de aprendizaje automático, planificación adaptativa y optimización multiobjetivo. En este contexto, la automática juega un papel clave en el diseño de bucles de retroalimentación cerrados (*closed-loop systems*), en los que el laboratorio analiza los resultados experimentales de forma autónoma, ajusta los parámetros de síntesis, y redefine las próximas etapas del proceso experimental (Martin et al., 2023). El diseño de estos sistemas implica abordar problemas de estabilidad, observabilidad y robustez frente a ruido e incertidumbre en las mediciones. En este aspecto, el desarrollo e integración de *Digital Twins* puede mejorar el entrenamiento de algoritmos de control de robots, así como corregir y adaptar las trayectorias en función de cambios en el entorno.

Además, la interoperabilidad entre los diferentes subsistemas robóticos, plataformas de caracterización, y módulos de análisis computacional representa otro obstáculo técnico de relevancia. La necesidad de protocolos de comunicación estandarizados, lenguajes de control compartidos y arquitecturas modulares es fundamental para lograr una orquestación fluida de tareas (Rahmanian et al., 2022). La integración de middleware robóticos como ROS (Robot Operating System), combinados con entornos de automatización como LabVIEW o frameworks de orquestación, está en el centro de estos desarrollos, pero aún se enfrentan a desafíos de escalabilidad,

latencia y seguridad de operación.

Finalmente, el diseño de interfaces hombre-máquina intuitivas y transparentes es crucial para facilitar la colaboración entre investigadores humanos y laboratorios autónomos. Esto implica incorporar capacidades de visualización avanzada, interpretación de comandos en lenguaje natural y sistemas explicativos que permitan entender y evaluar las decisiones del sistema autónomo.

Por ello, aunque los laboratorios autónomos prometen acelerar significativamente el descubrimiento de nuevos materiales, su desarrollo enfrenta desafíos sustanciales en robótica, automatización, y la integración de los procesos propios de la ciencia de materiales. Superar estas barreras requerirá una estrecha colaboración entre ingenieros especialistas en control y robótica, científicos de materiales, y desarrolladores de inteligencia artificial.

3.1. Manipulación inteligente

El rápido progreso en robótica, automatización y eficiencia algorítmica ha hecho posible el uso de diversas plataformas robóticas autónomas en entornos de laboratorio. Se han identificado diferentes estrategias para eliminar tareas tediosas y repetitivas de la rutina de los químicos. Sin embargo, todavía existe una brecha abierta a la hora de que los robots realicen tareas más allá de la manipulación pre-programada. Esto se ha abordado desde dos perspectivas: (1) la adaptación de las herramientas, y (2) usar técnicas de control que adapten la manipulación a los instrumentos (Kemp et al., 2007).

En este último, la manipulación robótica en entornos de laboratorios se enfrenta a diversos desafíos tecnológicos a nivel de cómo percibir la suficiente información del entorno para ejecutar una tarea, ejecutar satisfactoriamente la tarea combinando percepción y hardware, y optimizar la información relevante para aprender nuevas habilidades (Billard and Kragic, 2019). A nivel técnico, esto implica desafíos en estrategias de control cinemático avanzado de brazos robóticos, integración multi-sensorial (*sensor fusion*) y desarrollo de actuadores precisos que funcionen en condiciones químicamente agresivas

o térmicamente exigentes, y desarrollo de técnicas de aprendizaje automático. La Tabla 1 describe los principales retos técnicos en manipulación inteligente en SDL.

Tabla 1: Retos en manipulación robótica en SDL

Desafíos	Descripción
Control cinemático	Elevada capacidad de cómputo cinemático en tiempo real para adaptarse a las condiciones del entorno y morfología de los objetos a manipular. En muchos casos, es recomendable el uso de bi-manipulares sobre plataformas móviles, lo cual incrementa la dificultad en los bucles de control y planificación
Integración multi-sensorial	Integración de múltiples sensores heterogéneos (visión, temperatura, fuerza, etc.), que al fusionar sus datos permiten obtener una percepción más robusta y precisa.
Actuadores	Lograr una interacción precisa, segura y confiable con materiales y equipos diversos en entornos altamente variables. A diferencia de entornos industriales estandarizados, los laboratorios químicos presentan condiciones cambiantes, sustancias sensibles y manipulaciones complejas que requieren actuadores versátiles y adaptables
Aprendizaje basado en contacto	Este tipo de habilidades han sido ampliamente estudiadas para tareas de ensamblaje (peg-in-hole) en entornos industriales. En el contexto de SDL la fragilidad del instrumental y su tamaño reducido hacen que estrategias de control basado en contacto sean esenciales para manipulación exitosa y segura
Seguridad	La presencia de elementos reactivos y contenedores frágiles en los laboratorios de química puede afectar el riesgo de accidentes de diversas maneras, lo que requiere un enfoque diligente en la seguridad durante la manipulación y la gestión de riesgos
Reconocimiento objetos	Dificultades para detectar y manipular objetos transparentes como botellas de vidrio, probetas de laboratorio, etc.. Además, se necesitan diferentes algoritmos robustos de visión artificial para reconocer estados intermedios de reacciones
Gemelo digital	Entrenamiento de robots en simulaciones (digital twins) para que aprendan tareas complejas antes de ejecutarlas en el entorno real. Simulación de fluidos, polvos y objetos deformables sigue siendo un reto técnico importante. Con bucles de realimentación se intenta reducir la brecha entre simulación y realidad (“sim-to-real”)

Mientras que la manipulación con un solo brazo ya requiere precisión, planificación y coordinación sensorial, la bi-manipulación añade un nivel extra de complejidad al exigir coordinación simultánea entre dos brazos robóticos. Esto implica no solo controlar de forma independiente cada actuador, sino también gestionar su interacción física y dinámica en tareas colaborativas como abrir frascos, verter líquidos o ensamblar componentes (Billard and Kragic, 2019). Además,

en entornos de laboratorio, donde los objetos pueden ser frágiles, transparentes o contener sustancias peligrosas, el riesgo de errores aumenta considerablemente (Xu et al., 2021). A esto se suma la necesidad de percepción espacial precisa, planificación de movimientos conjunta y retroalimentación sensorial sincronizada, aspectos que aún presentan limitaciones en los sistemas actuales. En resumen, la bimanipulación en SDLs requiere avanzar en control multibrazo, percepción robusta y estrategias de planificación adaptativa para lograr un desempeño seguro y eficiente.

Por un lado, numerosos trabajos en la literatura abordan la automatización de laboratorios para tareas específicas, como tareas mecánicas como la recuperación de muestras de cristales raspando la pared de un vial (Pizzuto et al., 2024) y moliendo polvo con una plantilla blanda (Nakajima et al., 2022). El vertido de líquido mediante retroalimentación visual (Kennedy et al., 2019) y de peso (Huang et al., 2021) se ha estudiado como un método alternativo para transferir líquidos. Sin embargo, queda mucho camino por recorrer para dotar a los manipuladores robóticos de capacidades suficientes para una interacción segura, inteligente, autónoma y eficiente en entornos de laboratorios, para la ejecución autónoma de experimentos químicos.

4. Conclusiones

El desarrollo de laboratorios autónomos para la generación de nuevos materiales es un campo relevante para combatir retos globales como el cambio climático. Sin embargo, dotar a estos laboratorios de la autonomía necesaria para realizar experimentos de forma independiente conlleva numerosos desafíos. La manipulación robótica en estos entornos se enfrenta a la identificación y reconocimiento de objetos transparentes y pequeños, el manejo de materiales en diferentes fases (líquido, gas, sólido), la interacción con equipamiento e instrumentos específicos, secuenciación de movimientos, entre otros.

A pesar de la gran automatización que los SDL ofrecen, el papel de los investigadores humanos sigue siendo esencial. Los científicos son los encargados de establecer los objetivos, interpretar los resultados complejos y guiar la dirección de la investigación. De esta manera, los SDL no sustituyen la creatividad y la supervisión humana, sino que la complementan, ampliando las capacidades humanas en la exploración de nuevos conocimientos.

En conclusión, la implementación de los laboratorios SDL enfrenta varios desafíos sustanciales. La integración de tecnologías avanzadas como la robótica, la inteligencia artificial y las infraestructuras de laboratorio conlleva una complejidad multidisciplinaria considerable. Además, la interpretabilidad de los descubrimientos realizados por los SDL sigue siendo un reto, ya que es fundamental que los resultados generados por la IA sean comprensibles y aprovechables por los científicos.

Finalmente, dada la gran capacidad de esta tecnología, emergen preocupaciones éticas y de seguridad que requieren atención. Estos desafíos generan interrogantes sobre cómo garantizar una supervisión adecuada, el impacto que los SDL tendrán y la responsabilidad de los investigadores en el futuro de la ciencia.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer a la Comunidad de Madrid por el apoyo financiero al Proyecto FotoArt5.0-CM (TEC-2024/TEC-308) a través del programa de actividades de I+D “Tecnologías 2024”.

Referencias

- Abolhasani, M., Kumacheva, E., 2023. The rise of self-driving labs in chemical and materials sciences. *Nature Synthesis* 2 (6), 483–492.
DOI: 10.1038/s44160-022-00231-0
- Baden, T., Chagas, A. M., Gage, G., Marzullo, T., Prieto-Godino, L. L., Euler, T., 2015. Open labware: 3-d printing your own lab equipment. *PLoS biology* 13 (3), e1002086.
DOI: 10.1371/journal.pbio.1002086
- Beeler, C., Subramanian, S. G., Sprague, K., Chatti, N., Bellinger, C., Shahen, M., Paquin, N., Baula, M., Dawit, A., Yang, Z., et al., 2023. Chemgymrl: An interactive framework for reinforcement learning for digital chemistry. *arXiv preprint arXiv:2305.14177*.
- Billard, A., Kragic, D., 2019. Trends and challenges in robot manipulation. *Science* 364 (6446), eaat8414.
DOI: 10.1126/science.aat8414
- Darvish, K., Skreta, M., Zhao, Y., Yoshikawa, N., Som, S., Bogdanovic, M., Cao, Y., Hao, H., Xu, H., Aspuru-Guzik, A., et al., 2025. Organa: a robotic assistant for automated chemistry experimentation and characterization. *Matter* 8 (2).
DOI: 10.1016/j.matt.2024.10.015
- Ekins, S., 2024. The lab of the future: Self-driving labs for molecule discovery. *GEN Biotechnology* 3 (2), 83–86.
DOI: 10.1089/genbio.2024.29141.sek
- European Council, 2019. European green deal. [Online] <https://www.consilium.europa.eu/en/policies/european-green-deal/>, accessed: 2025-05-29.
- Huang, Y., Wilches, J., Sun, Y., 2021. Robot gaining accurate pouring skills through self-supervised learning and generalization. *Robotics and Autonomous Systems* 136, 103692.
- Kemp, C. C., Edsinger, A., Torres-Jara, E., 2007. Challenges for robot manipulation in human environments [grand challenges of robotics]. *IEEE Robotics & Automation Magazine* 14 (1), 20–29.
- Kennedy, M., Schmeckpeper, K., Thakur, D., Jiang, C., Kumar, V., Daniilidis, K., 2019. Autonomous precision pouring from unknown containers. *IEEE Robotics and Automation Letters* 4 (3), 2317–2324.
- Martin, H. G., Radivojevic, T., Zucker, J., Bouchard, K., Sustarich, J., Peisert, S., Arnold, D., Hillson, N., Babnigg, G., Marti, J. M., et al., 2023. Perspectives for self-driving labs in synthetic biology. *Current Opinion in Biotechnology* 79, 102881.
- Nakajima, Y., Hamaya, M., Suzuki, Y., Hawai, T., von Drigalski, F., Tanaka, K., Ushiku, Y., Ono, K., 2022. Robotic powder grinding with a soft jig for laboratory automation in material science. In: 2022 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems (IROS). IEEE, pp. 2320–2326.
- Pizzuto, G., Wang, H., Fakhrudeen, H., Peng, B., Luck, K. S., Cooper, A. I., 2024. Accelerating laboratory automation through robot skill learning for sample scraping. In: 2024 IEEE 20th International Conference on Automation Science and Engineering (CASE). IEEE, pp. 2103–2110.
- Rahmanian, F., Flowers, J., Guevarra, D., Richter, M., Fichtner, M., Donnelly, P., Gregoire, J. M., Stein, H. S., 2022. Enabling modular autonomous feedback-loops in materials science through hierarchical experimental laboratory automation and orchestration. *Advanced Materials Interfaces* 9 (8), 2101987.
DOI: <https://doi.org/10.1002/admi.202101987>
- Roch, L. M., Häse, F., Kreisbeck, C., Tamayo-Mendoza, T., Yunker, L. P. E., Hein, J. E., Aspuru-Guzik, A., 04 2020. Chemos: An orchestration software to democratize autonomous discovery. *PLOS ONE* 15 (4), 1–18.
DOI: 10.1371/journal.pone.0229862
- Tom, G., Schmid, S. P., Baird, S. G., Cao, Y., Darvish, K., Hao, H., Lo, S., Pablo-García, S., Rajaonson, E. M., Skreta, M., et al., 2024. Self-driving laboratories for chemistry and materials science. *Chemical Reviews* 124 (16), 9633–9732.
- Walters, W. P., Barzilay, R., 2021. Applications of deep learning in molecule generation and molecular property prediction. *Accounts of Chemical Research* 54 (2), 263–270, pMID: 33370107.
DOI: 10.1021/acs.accounts.0c00699
- Wang, Y. R., Zhao, Y., Xu, H., Eppel, S., Aspuru-Guzik, A., Shkurti, F., Garg, A., 2023. Mvtrans: Multi-view perception of transparent objects. In: 2023 IEEE International Conference on Robotics and Automation (ICRA). IEEE, pp. 3771–3778.
- Xu, H., Wang, Y. R., Eppel, S., Aspuru-Guzik, A., Shkurti, F., Garg, A., 2021. Seeing glass: joint point cloud and depth completion for transparent objects. *arXiv preprint arXiv:2110.00087*.