

AI とロボットを融合した全自動・自律的薄膜合成システムの構築

Development of AI-robot-driven autonomous thin film growth system

東工大物質理工¹, JST さきがけ², 産総研³ °清水亮太^{1,2}, 小林成¹, 安藤康伸³, 一杉太郎¹

Tokyo Tech¹, JST-PRESTO², AIST³ °R. Shimizu^{1,2}, S. Kobayashi¹, Y. Ando³, T. Hitosugi¹

E-mail: shimizu.r.af@m.titech.ac.jp

現代の物質科学では物質を探索する範囲が急拡大しており、効率的な新物質開発が強く望まれている。全固体 Li 電池の材料開発の例を挙げると、現在の世界最高の Li イオン伝導率を示す固体電解質(Li_{9.54}Si_{1.74}P_{1.44}S_{11.7}Cl_{0.3}; 25 mS/cm、室温)は 5 つの元素を含み、その組成も非常に精密に調整されている[1]。もはや、単純な元素組成や構造の物質では現代社会の要求する性能・機能を満足することが難しく、従来の研究スタイルを大きく転換する必要がある。とりわけ、いまだに「人力頼み」である物質合成の現状を脱却し、速やかな合成と実用材料への展開が急務である。

このような背景のもと、我々は AI とロボット技術を融合した新たなシステムの開発に着手した。その概念図を Figure 1 に示す[2]。最良の物性値をベイズ最適化によって導出する「AI 部」と、全自動搬送・成膜・評価を行う「ロボット部」から構成される。「AI 部」から指示された合成条件に従って「ロボット部」が合成・評価を行い、結果を「AI 部」に報告する。更新されたデータセットから「AI 部」が逐次的に学習して最適条件を指示する、というサイクルを回す。

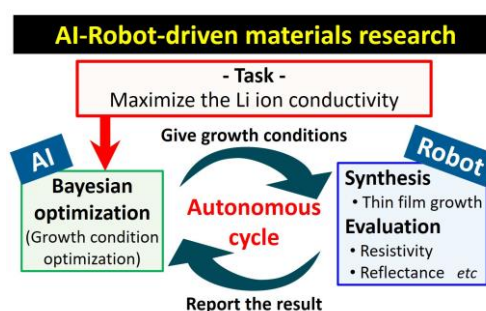


Figure 1: Schematic illustration of the concept of AI-robot-driven materials research.

AI-ロボットシステムの活用例として、Table 1 に透明導電体 Ti_{0.99}Nb_{0.01}O₂ 薄膜合成の過程を示す。マグネトロンスパッタ法を用い、O₂/Ar 流量比(0.04–1.0%)を可変パラメータとして室温で 30 分間堆積し、堆積後には 400°C にて 15 分加熱して結晶化させた[3]。その後、プローバを用いた抵抗測定を自動で行い、抵抗が最小値になるようベイズ最適化により次回成膜時の O₂/Ar 流量比を指示している。終日運転の状態で 15 サンプルの作製・評価を 30 時間で完了できており、抵抗の最小化と研究の加速を実証した。特筆すべき点は、自律的に、すなわち、人間の指示無く物質合成の最適化が完了することである。

参考文献

- [1]: Y. Kato *et al.*, Nat. Energy **1**, 16030 (2016).
 [2]: 清水亮太、一杉太郎: 「人と共生する AI 革命」
 (エヌ・ティー・エス, 東京, 2019), 11.1 節.
 [3]: T. Hitosugi *et al.* Phys. Status Solidi A **207**, 1529 (2010)

Table 1: A log of Ti_{0.99}Nb_{0.01}O₂ thin film deposition using the AI-robot system.

Date	<i>n</i>	O ₂ /Ar ratio (%)	Resistance (Ω)
2019/11/24 15:58	1	1.000	1.00e+08
2019/11/24 18:12	2	0.250	1.69e+05
2019/11/24 19:25	3	0.040	5.94e+04
2019/11/24 22:43	4	0.996	1.00e+08
2019/11/25 00:01	5	0.044	3.96e+04
2019/11/25 02:47	6	0.048	3.29e+04
2019/11/25 04:37	7	0.548	1.00e+08
2019/11/25 06:42	8	0.070	5.16e+04
2019/11/25 08:08	9	0.081	2.45e+04
2019/11/25 10:24	10	0.074	3.73e+04
2019/11/25 14:10	11	0.078	3.61e+04
2019/11/25 15:37	12	0.085	2.13e+04
2019/11/25 18:30	13	0.051	3.85e+04
2019/11/25 19:56	14	0.055	2.56e+04
2019/11/25 21:22	15	0.059	2.92e+04