

自律的な X 線回折実験システムの開発

Development of an autonomous X-ray diffractometer

高工研¹, 総研大², 阪大工³ ◯中島優作^{1,2}, 羽合 孝文¹, 小野 寛太^{1,2,3}

KEK¹, SOKENDAI², Osaka Univ.³

◯Yusaku Nakajima^{1,2}, Takafumi Hawai¹, Kanta Ono^{1,2,3}

E-mail: yusaku@post.kek.jp

計測機器の性能向上やマテリアルズ・インフォマティクス進展により、材料の分析・評価の自動化が進み、材料開発の効率が改善している。われわれは材料科学のさらなる発展において、分析・評価の自動化だけではなく、自律化を目指すべきであると考え研究開発を進めている。計測機器の自律化により、様々な計測やデータ解析がクラウドベースで統合され、マルチモーダルな計測・解析プラットフォームの実現が可能となる。自律化では、自動化に加えて従来は専門家が

行っていた人間の意思決定の大部分をシステムが担うことに特徴があり、最適な実験計画の自動策定、実験の効率や再現性の向上、ヒューマンエラーの軽減、研究者のバイアスの軽減が期待される。本研究では材料科学で一般的に用いられている粉末 X 線回折実験(XRD)の自律化を目指し、システムをクラウド上に構築した(Figure1)。

XRD 装置はリガクの MiniFlex600-C、得られた XRD パターンの自動解析は BBO-Rietveld^[1]、自律化システムの構築には Python を用いた。開発した Autonomous XRD システムの評価のため、標準試料としてルチル、アナターゼ構造の TiO₂ 混合物を用いた。試料を XRD 装置にセットする以外は人間が介在することなく、最適実験計画に基づいて X 線粉末回折実験を行ったのち、定量分析は自動リートベルト解析により行い、定量分析結果および最適化された構造が出力された。解析結果は従来専門家が行っていた解析と比較して遜色ないことがわかった。

本研究では、最適化された計測および解析を人間の介在なしで実行する自律的な XRD システムをクラウド上に構築することに成功した。本研究で提案する計測機器の自律化は個別の計測機器や制御・解析ソフトウェアに依存しないため、粉末 X 線回折だけでなく様々な分析・評価手法の自律化、またそれらの統合へ応用することが可能であり、われわれはマルチモーダルな自律分析・評価システム「マテリアル・ドック」の実現を目指して研究を進めている。

本研究の一部は JST 未来社会創造事業「共通基盤」領域、「マテリアル探索空間拡張プラットフォームの構築」により行われた。

[文献]

[1] Y. Ozaki *et al.* npj Computational Materials 6, 75 (2020).

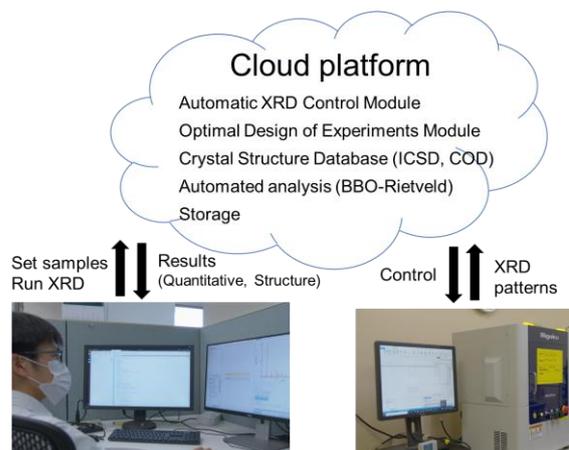


Figure1. Schematic diagram of the autonomous XRD system based on the cloud platform.