

## 自律合金材料探索に向けた XRD 自動化の試み

### Automation of X-ray diffraction measurement process for realizing autonomous exploration of alloys

NIMS<sup>1</sup>, 筑波大<sup>2</sup> ◦寺嶋 健成<sup>1</sup>, (D2)王 威勝<sup>1,2</sup>, 高野 義彦<sup>1,2</sup>

NIMS<sup>1</sup>, Univ. of Tsukuba<sup>2</sup>, ◦Kensei Terashima<sup>1</sup>, Wei-Sheng Wang<sup>1,2</sup>, Yoshihiko Takano<sup>1,2</sup>

E-mail: TERASHIMA.Kensei@nims.go.jp

近年マテリアルズ・インフォマティクスの発達に伴い、機能性材料候補物質の予測が実験実証を上回る速さで供されている。このため機械学習モデルと予測の妥当性の検証や、それに拠る機能性材料開発には実験パートの加速が不可欠である。この需要を充たすための物質合成・評価プロセスの自動化・効率化が進んでいる。とりわけ酸化物に対しては、最近ミシガン大と Samsung の共同研究[1]やカリフォルニア大と Google の共同研究[2]などが報告され注目を集めている。

我々は固体バルク材料の中でも、上述の酸化物と並んで重要な機能性材料の宝庫である合金に着目し、合金試料合成のメジャーな手法の一つであるアーク溶解を全自動化した[3]。この自動アーク炉に合成物を特定する X 線回折(XRD)を自動化・連結できれば、主相や不純物相を同定する自動 XRD 解析パッケージ[4]や、目的相の分率を最大化する運用でのベイズ最適化パッケージ[5]を組み込むことで、自律的な固体バルク合金材料の探索が可能となると考えられる。

粉体を対象とする XRD については上述の酸化物のほか先駆的報告として、阪大小野グループによる詳細な報告がある[6]。我々はこれを参考に XRD 測定の自動化を行った(図 1)。ただし先行研究たちと異なり、対象が有限の硬さと大きさをもつ合金材料であるため、別途の測定試料準備を必要とした。講演では現状について報告する。

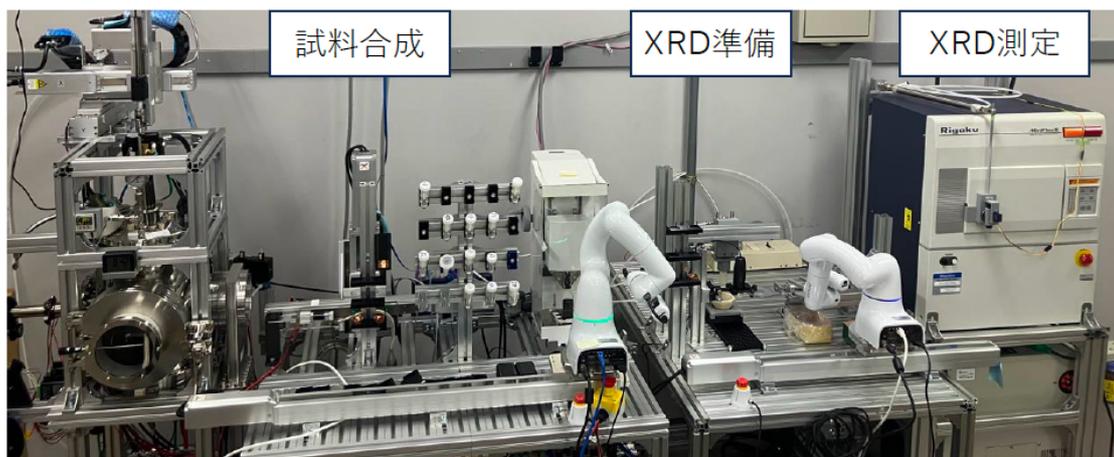


図 1 自動アーク炉と自動化 XRD 装置

- [1] J. Chen *et al.*, Nat. Synthesis **3**, 606 (2024). [2] N. J. Szymanski *et al.*, Nature **624**, 86 (2023).  
[3] 寺嶋健成他 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会 20p-A21-5 [4] P. B. Castro *et al.*, Adv. Theo. Sim. **5**, 2100588 (2022). [5] R. Tamura *et al.*, STAM:Methods **3**, 2232297 (2023). [6] Y. Nakajima *et al.*, Digital Discovery **3**, 2130 (2024). Y. Yotsumoto *et al.*, Digital Discovery **3**, 2523 (2024).