

一般セッション(口頭講演) | 23 合同セッションN「インフォマティクス応用」 : 23.1 合同セッションN「インフォマティクス応用」

📅 2025年3月17日(月) 9:00 ~ 11:30 📍 K505 (講義棟)

[17a-K505-1~9] 23.1 合同セッションN「インフォマティクス応用」

沓掛 健太朗(名大)、知京 豊裕(物材機構)

PR

ソニーセミコンダクタソリューションズ株式会社

◆ 奨励賞エントリー

9:00 ~ 9:15

[17a-K505-1]

カスケード工程におけるSiウェーハ内部の酸素析出物分布のデータ同化

○楠木 琢也¹、阿部 諄汰¹、永井 勇太¹、須藤 治生¹、岩城 浩也¹、高須 理栄¹、番場 博則¹、泉妻 宏治¹、前田 進²、関 翔太² (1.グローバルウェーハズ・ジャパン、2.アイクリスタル)

9:15 ~ 9:30

[17a-K505-2]

半導体製造における企業間を跨いだデジタルツインによるウェーハ・デバイスプロセスの全体最適化

○関 翔太^{1,4}、中西 佑児¹、松岡 毅¹、前田 進¹、高石 将輝¹、楠木 琢也²、永井 勇太²、永倉 大樹³、谷川 公一³、沓掛 健太朗⁴、宇治原 徹^{1,4} (1.アイクリスタル、2.グローバルウェーハズ・ジャパン、3.ソニーセミコンダクタマニュファクチャリング、4.名大)

9:30 ~ 9:45

[17a-K505-3]

半導体熱処理条件の最適化における既存条件を考慮した目的関数の検討

笠原 亮太郎¹、○沓掛 健太朗^{1,2}、原田 俊太¹、宇治原 徹¹、関 翔太³、高石 将輝³、永井 勇太⁴ (1.名大、2.理研、3.アイクリスタル、4.グローバルウェーハズ・ジャパン)

9:45 ~ 10:00

[17a-K505-4]

結晶成長の外挿に適した物理の知識に基づくベイズ最適化

○若林 勇希¹、小林 亘²、大塚 琢馬³、鄭 源宰² (1.NTT 物性研、2.NTT 先デ研、3.NTT CS研)

10:00 ~ 10:15

[17a-K505-5]

マルチフィデリティベイズ最適化によるミクロ構造最適化

○栗田 智啓¹ (1.名古屋大工)

◆ 英語発表

10:30 ~ 10:45

[17a-K505-6]

[The 46th Young Scientist Award Speech] Phase and property control of heterogeneous $\text{Hf}_x\text{Zr}_{(1-x)}\text{O}_2$ thin films by machine learning

○Zeyuan Ni¹, Hidefumi Matsui¹ (1.TTS)

◆ 英語発表

10:45 ~ 11:00

[17a-K505-7]

Enhancing an Autoregressive Generative Wafer Polishing U-net Model

○Kevin Operiano¹, Roberto Iaconi¹, Riku Tanaka¹, Fumiya Kawate¹, Sepasy Saeed², Yoshifumi Watanabe² (1.Aixtal Corporation, 2.Mipox Corporation)

◆ 奨励賞エントリー

11:00 ~ 11:15

[17a-K505-8]

乳鉢装着ロボットアームによる粉体粉碎と洗浄システム

○(B)真下 美咲¹、中島 優作¹、武市 泰男¹、小野 寛太¹ (1.阪大 工)

11:15 ~ 11:30

[17a-K505-9]

自律合金材料探索に向けたXRD 自動化の試み

○寺嶋 健成¹、王 威勝^{1,2}、高野 義彦^{1,2} (1.NIMS、2.筑波大)

カスケード工程におけるSi ウェーハ内部の酸素析出物分布のデータ同化

Data assimilation for oxygen precipitates distribution inside Si wafers in cascade process.

グローバルウェーハズ・ジャパン(株)¹, アイクリスタル(株)², ◯楠木 琢也¹, 阿部 諄汰¹, 永井 勇太¹, 須藤 治生¹, 岩城 浩也¹, 高須 理栄¹, 番場 博則¹, 泉妻 宏治¹, 前田 進², 関 翔太²

GlobalWafers Japan¹, Aixtal²

◯Takuya Kusunoki¹, Junta Abe¹, Yuta Nagai¹, Haruo Sudo¹, Hiroya Iwashiro¹, Rie Takasu¹, Hironori Banba¹, Koji Izunome¹, Susumu Maeda², Shota Seki²

E-mail: Takuya_Kusunoki@sas-globalwafers.co.jp

近年、半導体デバイスの高性能化には、基板である Si ウェーハ内部の欠陥密度や不純物濃度をデバイス構造に応じて最適化することが求められている。そのためには、Si ウェーハ製造プロセスとデバイス製造プロセスを個別に最適化するだけでなく、両プロセスを一貫して最適化するアプローチが必要不可欠である。そこで本研究チームでは、Si ウェーハ製造からデバイス製造までを一貫して模擬するデジタルツインを構築し、上流から下流へと直列多段で連なるカスケード工程全体の最適化を目指している。このような全体最適化を達成するためには、高精度なシミュレーションが要となる。

シミュレーション精度向上の手法としてデータ同化が注目されているが、従来の研究では単一工程のみを対象とする研究¹⁾が主であり、複数工程を直列多段に扱う「カスケード工程」での適用例はない。本研究では、Si ウェーハ内部の金属不純物ゲッタリング能力に寄与する酸素析出物 (Bulk Micro Defect: BMD) の形成・成長・溶解挙動を一括して再現できるシミュレータを用い²⁾⁻⁴⁾、カスケード工程全体を通じた BMD の分布予測精度を向上させるためにデータ同化を適用する。単一工程ごとにシミュレータのデータ同化による内部パラメータの推定・調整を行っても、熱処理工程を繰り返す中で BMD 挙動が段階的に変化するため、工程全体を見据えたプロセス最適化にはつながりにくい。そこで本研究は、カスケード工程における各工程の相互作用を踏まえ、ウェーハ深さ方向の BMD 密度分布や BMD サイズ分布のシミュレーションに対してデータ同化する手法を検討した。

データ同化には遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm, GA) を用いた。BMD の実測値の取得ポイントとしては、カスケード工程中の 5 工程後、13 工程後、22 工程後の計 3 つの熱処理工程をモニタリング対象とし、赤外散乱(IR)トモグラフィ法によりウェーハ内部の BMD 分布を測定した。深さ方向の BMD 密度・BMD サイズ分布のうち、デバイス形成領域である表層とバルクを評価し、シミュレーション結果と実測値の誤差が最小化されるようにフィッティングパラメータを探索した。その結果、3 工程すべてにおいてシミュレーション精度が向上し、カスケード工程全体の BMD 分布をより正確に再現できることを確認した。

本研究により、カスケード工程全体を通じた BMD の形成・成長・溶解挙動の高精度予測が可能となり、デバイス構造に応じたウェーハ内部欠陥の最適設計へとつながることが期待される。

【参考文献】

1. Akimitsu Ishii et al., Acta Materialia, Volume 278, 1 October (2024), 120251
2. S. Maeda et al., Journal of Applied Physics 123, 161591 (2018)
3. H. Sudo, ECS Journal of Solid-State Science and Technology, 8 (1) P35-P40 (2019)
4. H. Sudo, J. Appl. Phys. 131, 055704 (2022)

【謝辞】

本研究は国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)先導研究プログラム(JPNP14004)の成果として得られたものです。

半導体製造における企業間を跨いだデジタルツインによる ウェーハ・デバイスプロセスの全体最適化

Wafer and device process co-optimization in semiconductor manufacturing
by cross-company overall process-digital twins

アイクリスタル(株)¹, グローバルウェーハズ・ジャパン(株)²,
ソニーセミコンダクタマニュファクチャリング(株)³, 名大未来研⁴

○関 翔太^{1,4}, 中西 佑児¹, 松岡 毅¹, 前田 進¹, 高石 将輝¹, 楠木 琢也², 永井 勇太²,
永倉 大樹³, 谷川 公一³, 沓掛 健太郎⁴, 宇治原 徹^{1,4}

Aixtal¹, GlobalWafers Japan Co., Ltd², Sony Semiconductor Manufacturing Corporation³,
IMaSS Nagoya Univ.⁴

○Shota Seki^{1,4}, Yuji Nakanishi¹, Tsuyoshi Matsuoka¹, Susumu Maeda¹, Masaki Takaishi¹,
Takuya Kusunoki², Yuta Nagai², Hiroki Nagakura³,
Koichi Tanigawa³, Kentaro Kutsukake⁴, Toru Ujihara^{1,4}

E-mail: s.seki@aixtal.com

【緒言】 半導体製造プロセスは非常に多くの工程からなるが、デバイスプロセスの個々の工程や企業内の閉じた工程のみのプロセス最適化では性能の向上は頭打ちになってきている。近年、デバイス特性の改善において、基板である Si ウェーハ内部の欠陥密度や不純物濃度のデバイス構造に応じた適切な作り込みの必要性が明らかになってきており、ウェーハ製造からデバイス製造までを企業を超えて一気通貫で最適化する必要がある。本研究では、ウェーハ工程からデバイス工程まで企業間を跨いで連なった工程を模したデジタルツインを作成し、プロセスの全体最適化を行った。

【方法】 Si ウェーハ中の熱処理プロセスにおける 酸素析出物(Bulk micro defect; BMD)の形成、成長、溶解挙動のシミュレータと TCAD イオン注入シミュレータを組み合わせ、熱処理およびイオン注入からなる約 30 工程分のプロセス条件を 3,000 通り振った結晶欠陥分布を計算した。それらを教師データとして、熱処理条件からウェーハ内の BMD および不純物分布の時間発展を求める機械学習モデルを構築した。モデルは Convolutional-LSTM を基本とした Encoder-Decoder 型の自己回帰ニューラルネットワークである。作成したモデルを用いて、遺伝的アルゴリズム(NSGA-II)によりウェーハ工程/デバイス工程の計 40 変数の熱処理条件を一気通貫で最適化した。目的関数はデバイスが作られるウェーハ表層の BMD の最小化、ウェーハ深部の BMD の最大化、不純物の濃度勾配の急峻化の多目的最適化である。

【結果と考察】 テストデータにおける R2 スコアは BMD で 0.84、不純物濃度で 0.99 を超えており高精度なモデルを構築できた。連結した全工程 1 水準あたりの計算時間はシミュレーションで 40 分、デジタルツインで 3 秒であり大幅な高速化を達成した。Fig. 1 に世代ごとのスケーリング済みの各目的関数の最大値を示す。目的関数値は 9,000 世代辺りまで更新が続き、機械学習による高速化の必要性がわかる。Fig. 2 に最適解での (a)BMD、(b)不純物濃度分布を示す。100 世代(橙)と 10,000 世代(青)を比べると、(a)表層の BMD 成長を抑えつつ(青点線領域)、深部での BMD 成長を促進でき(赤点線領域)、(b)不純物の濃度勾配が急峻化されたことがわかる。

【謝辞】 本研究は国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)先導研究プログラム (JPNP14004)の結果得られたものです。

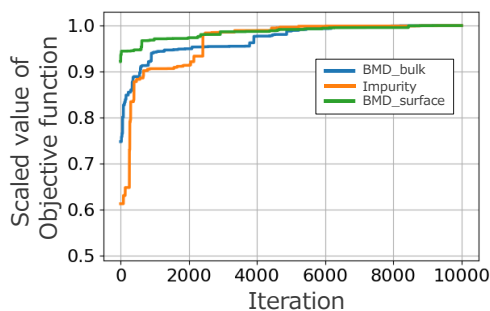


Fig.1 Scaled values of objective functions for each iteration of the optimization.

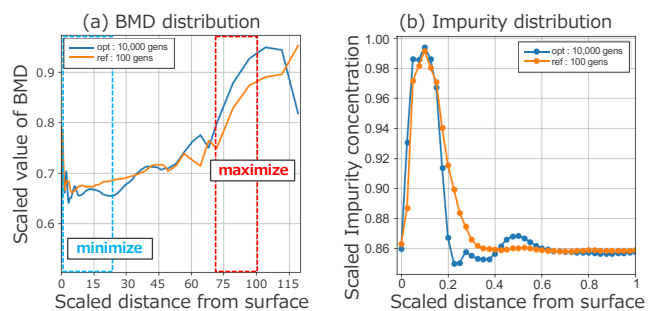


Fig.2 Distributions of scaled values of (a) BMD and (b) impurity concentration.

半導体熱処理条件の最適化における既存条件を考慮した目的関数の検討

Objective functions considering conventional conditions

in optimizing semiconductor annealing process

名大¹, 理研², アイクリスタル³, グローバルウェーハズ・ジャパン⁴

笠原 亮太郎¹, 沓掛 健太郎^{1,2}, 原田 俊太¹, 宇治原 徹^{1,3}, 関 翔太³, 高石 将暉³, 永井勇太⁴

Nagoya Univ.¹, RIKEN², Aixtal³, GlobalWafers Japan⁴

Ryotaro Kasahara¹, Kentaro Kutsukake^{1,2}, Shunta Harada¹, Toru Ujihara^{1,2},

Shota Seki³, Masaki Takaishi³, Yuta Nagai⁴

E-mail: r.kasahara@unno.material.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】 プロセスインフォマティクスの普及により、多くの製造条件の最適化に AI が活用されている。この際、量産条件などすでに製造条件が存在する場合には、AI により既存の製造条件からかけ離れた最適条件が提案されたときに導入が難しくなる。そこで本研究では既存条件を考慮した最適化を行うため、製品性能の評価指標に加えて既存条件との近さの指標を目的関数に導入した最適化を実施し、その効果を検討した。

【実験方法】 Si ウェーハの熱処理プロセスにおける酸素析出物 (Bulk micro defect ; BMD) の形成、成長、溶解挙動のシミュレータを基にサロゲートモデルを作成し 5 段熱処理モデルを構築した。このモデルを用いて 2 つの目的関数を最適化する 22 の熱処理条件の探索を行った。本研究では既存条件に近い条件の探索の手法として、3 つの異なる距離指標 “L1 ノルム” “L2 ノルム” “既存条件と一致する条件の数” を目的関数へ加え、比較した。最適化は遺伝的アルゴリズム (NSGA-II) を利用した。

【結果及び考察】 距離指標なしを含む 4 パターンの最適化によって得た最適解を Fig.1 に示す。丸点が通常の目的関数にて探索した際のパレート面の一部を、三角・星・四角点が既存条件からの距離指標を目的関数へ加えた最適化で得られた解の一部を示す。距離指標を加えた最適化においても、目的関数値が通常の最適化で得られるパレート面に近い値を得ることができた。次に熱処理条件の内の 4 つを取り出し、各最適化で得られた最適条件と既存条件との絶対誤差を Fig.2 に示す。距離指標を目的関数へ加えた最適化の結果は既存条件に比較的近かった。特に L1 の最小化ではある条件は既存条件と一致するスパースな解を得ることができ、L2 の最小化では条件全体が平均的に既存条件に近い解を得ることができた。これはそれぞれのノルムの最小化の効果によるものであり、状況に応じて使い分けることでより適切な解を得ることができる。

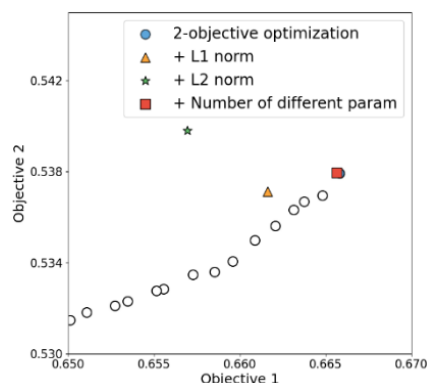


Fig. 1 Four optimization results.

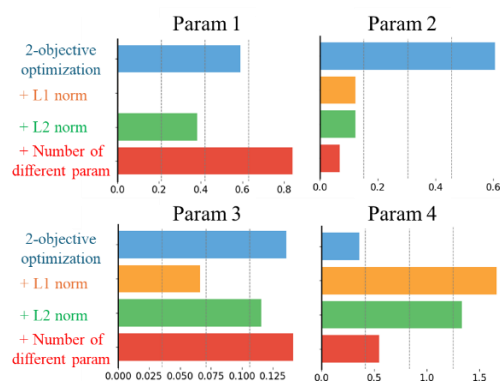


Fig. 2 Absolute error between existing conditions and the optimal solution.

【謝辞】 本研究は NEDO 先導研究プログラム (JP14004) より支援を受けた。

結晶成長の外挿に適した物理の知識に基づくベイズ最適化

若林 勇希^{*1}, 小林 亘², 大塚 琢馬³, 鄭 源宰²¹NTT 物性科学基礎研究所, ²NTT 先端集積デバイス研究所,³NTT コミュニケーション科学基礎研究所

*E-mail: yuuki.wakabayashi@ntt.com, wtr.kobayashi@ntt.com,

takuma.otsuka@ntt.com, gensai.tei@ntt.com

近年、機械学習技術を材料科学に統合することで、高効率な材料・物質開発を行うマテリアルズインフォマティクスが加速している [1-4]。機械学習における一般的な課題として、既存のデータセットの存在しない領域での実験結果を予測する外挿予測の困難さがある。本研究では、III-V 族化合物半導体の結晶成長における物理的な知見（ベガード則と、ガス流量と組成の間の線形関係）を活用した、物理の知識に基づくベイズ最適化（PIBO）を開発し、III-V 族半導体 $\text{In}_{(1-x)}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{(1-y)}$ (InGaAsP) の有機金属化学気相成長（MOCVD）に適用した。これにより、既存の（学習）データセットに含まれない成長条件領域で、目標とするバンドギャップ波長 (λ_g) と格子定数 (d) を持つ InGaAsP を少ない試行回数で効率的に合成することが可能となった。

InGaAsP は、半導体レーザー、光変調器、光増幅器など、光ファイバーシステムに関連するさまざまな光学部品で広く使用されており、そのため、所望の光学特性を持つ InGaAsP を合成することは産業的に重要な課題である。PIBO の概要は以下の通りである。まず最初に目的とする物性値 (λ_g, d) を、目的となる InGaAsP の組成 (x, y) にベガード則によって変換する。これにより目的値が正規化され、多変量最適化におけるスケール不一致問題を回避することができる。そして、 Ga と As のガス流量 ($F_{\text{Ga}}, F_{\text{As}}$) に対する組成 (x, y) の関係を予測するために、($F_{\text{Ga}}, F_{\text{As}}$) と (x, y) 間の線形増加の関係を仮定し、線形な変化からのズレを、統計的機械学習モデルであるガウス過程 (GP) により予測した。ガス流量と組成の間の線形関係を取り入れたことにより、未探索領域においても外挿可能な予測が実現する。

図 1. に学習データとして InGaAsP 、6 サンプルの ($F_{\text{Ga}}, F_{\text{As}}$) に対する実験的に決定した組成 (x, y) のデータセットを用いた際の、($F_{\text{Ga}}, F_{\text{As}}$) に対する組成 (x, y) の予測結果を示す。この例では、目的物性値は (λ_g, d) = (1180 nm, 5.8688 Å) で、対応する目組成は (x, y) = (0.1953, 0.4247) である。ガス流量と組成の関係に関する物理知識を予測モデルに組み込んだ結果、予測された x および y の値は、 F_{Ga} および F_{As} の増加に伴い単調に増加している。この単調増加の関係は、実験データが存在しない領域でも成り立っており、予測が外挿に適していることを示している。この予測に基づいて、目的組成が得られると予想された次の実験条件(図 1、十字)では、(λ_g, d) = (1175 nm, 5.8688 Å) の InGaAsP が得られ、目的とする光学特性を持った InGaAsP が実際に得られた [5]。

本研究は、堅牢な物理学的知識を統合することで、外挿可能な機械学習モデルが実現できることを示しており、これにより高速かつ自律的な材料合成の効率が向上することが期待される。

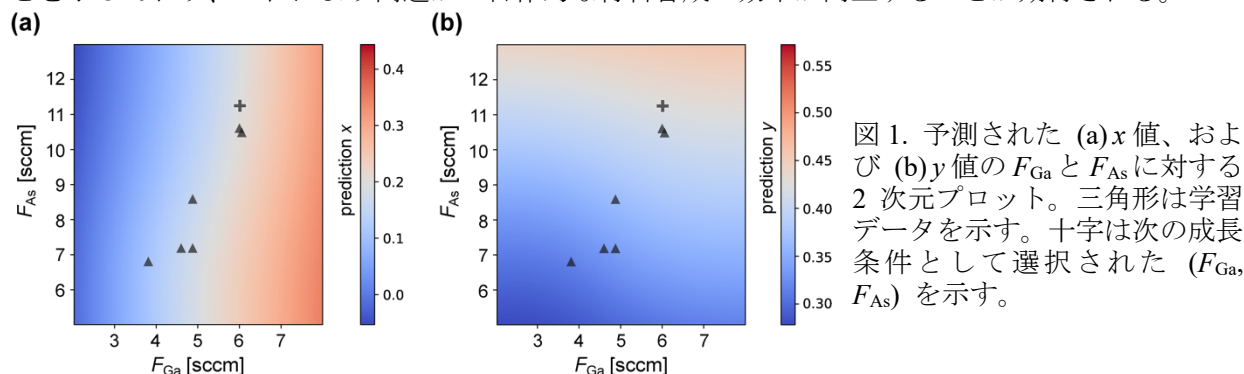


図 1. 予測された (a) x 値、および (b) y 値の F_{Ga} と F_{As} に対する 2 次元プロット。三角形は学習データを示す。十字は次の成長条件として選択された ($F_{\text{Ga}}, F_{\text{As}}$) を示す。

[1] Y. K. Wakabayashi*, T. Otsuka *et al.*, APL Mater. **7**, 101114 (2019). [2] R. Shimizu *et al.*, APL Mater. **8**, 111110 (2020). [3] Y. K. Wakabayashi*, T. Otsuka* (co-1st) *et al.*, npj. Comput. Mater **8**, 180 (2022). [4] Y. K. Wakabayashi*, T. Otsuka* (co-1st) *et al.*, APL mach. learn. **1**, 026104 (2023). [5] W. Kobayashi*, T. Otsuka* (co-1st), Y. K. Wakabayashi* (co-1st), and G. Tei* (co-1st), submitted.

マルチフィデリティベイズ最適化によるマイクロ構造最適化 Optimization of Microstructures Using Multi-Fidelity Bayesian Optimization

名古屋大学¹, 理研 AIP² ◯栗田智啓¹, 崔羿¹, 竹野 思温^{1,2}, 竹内 一郎^{1,2}

Nagoya Univ.¹, RIKEN AIP², ◯Tomohiro Kurita¹, Cui Yi¹, Shion Takeno^{1,2}, Ichiro Takeuchi^{1,2}

E-mail: takeuchi.ichiro.n6@f.mail.nagoya-u.ac.jp

3D プリント技術の進展により、複雑な構造の設計・製造が可能となり、軽量化や高性能化を目的とした構造最適化への関心が高まっている。本研究ではコンプライアンス値を最小化する構造を発見する問題を考える。コンプライアンス値の評価には有限要素法 (Finite Element Method, FEM) が一般に用いられる。しかし、FEM による高精度なコンプライアンスの計算には、対象物を離散化した領域であるメッシュをより細かくして解析を行う必要があるため、計算コストが急増する。したがって、計算コストについて効率的な構造最適化法が求められている。

本研究では、マクロ構造を固定したマイクロ構造の最適化を考える。マイクロ構造の設計には、点群データからボロノイ図を求めることで柔軟な形状を生成する設計手法を用いた。このマルチスケール最適化問題には、いくつかの既存法が提案されている [1]。しかし、これらの方法では、マクロ構造に対してマイクロ構造が非常に小さいという仮定のもと近似が行われるため、適用対象に制限がある。

本研究では、マルチフィデリティベイズ最適化 (Multi-fidelity Bayesian Optimization, MFBO) と呼ばれる機械学習法を用いることで、より仮定の少ないマルチスケール構造最適化を目指す。MFBO は予測の不確実性が定量化できるベイズモデルをもとに、本稿の例を取り上げれば、コンプライアンス計算を行う対象構造とメッシュの細かさを適応的に選択しデータの取得を繰り返すことで最適化を行う方法論である。とりわけ、計算コストとデータの取得による効用を考慮することによって、累計計算時間に関して効率的な最適化を目指す。典型的には、はじめに低精度の FEM によって構造の候補を絞り込み、その後高精度の FEM によって絞り込まれた構造候補から最適な候補を探し出す。この MFBO は汎用的な方法論であり、マルチスケール構造最適化に適用可能だが、そのコンポーネントであるベイズ予測モデルはデータに応じて作成する必要がある。とくに、点群データに対するベイズ予測モデルの構築方法は非自明である。本稿では、通常のベイズ予測モデルを用いた MFBO と比べ、点群データに特化したベイズ予測モデルを用いた MFBO を構築することで、累計計算時間についてより効率的な最適化を目指す。

当日は、点群データに特化したベイズ予測モデルの構築方法および実データ実験による従来法との比較結果について発表する。

参考文献

[1] Rodrigues, H., Guedes, J. M. and Bendsoe, M. P., Hierarchical optimization of material and structure, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 24(2002), pp.1-10, DOI:10.1007/s00158-002-0209-z.

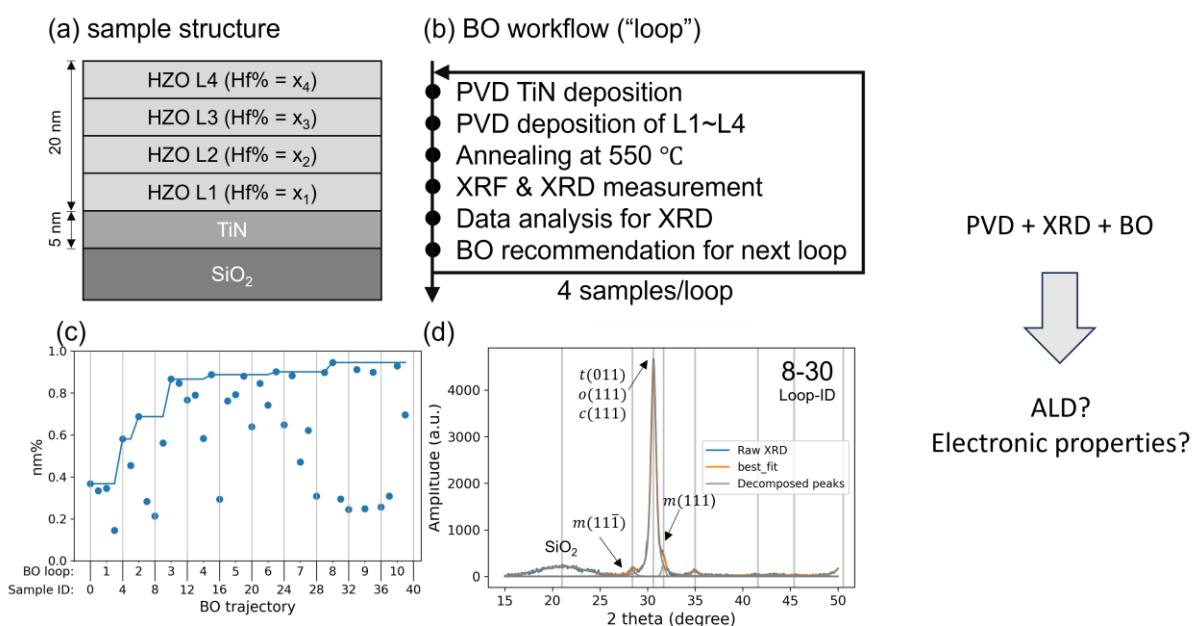
Phase and property control of heterogeneous $\text{Hf}_x\text{Zr}_{(1-x)}\text{O}_2$ thin films by machine learning

Tokyo Electron Technology Solutions Ltd.¹ °Zeyuan Ni¹, Hidefumi Matsui¹

E-mail: zeyuan.ni@tel.com

$\text{Hf}_x\text{Zr}_{(1-x)}\text{O}_2$ is renowned for its polymorphic nature, which confer a range of electronic and dielectric properties. Its metastable non-monoclinic (NM) phases exhibit enhanced properties such as high-k, ferroelectricity, anti-ferroelectricity, but they could only be stabilized under specific conditions. To explore a more complex heterogeneous HfZrO film, machine learning-incorporated closed-loop experiments is suitable but had yet to be reported in 2020.

As our first trail to stabilize and maximize the NM phases of PVD HfZrO films, we adopted closed-loop experiments through Bayesian optimization (BO). Within 10 cycles, we observed an impressive enhancement in NM phase, measured by XRD, from approximately 30% to nearly 100%. The NM phase ratio of the optimized composition depth profile significantly outperforms that of a similar structure by stacking of pure ZrO_2 and HfO_2 . Furthermore, we moved on to atomic layer deposition (ALD) and multi-object optimization of electronic properties, such as k and leakage. With our home-made algorithm designed for ALD, we successfully pushed the Pareto frontier, demonstrating the effectiveness of our approach.



Enhancing an Autoregressive Generative Wafer Polishing U-net Model

Aixtal Corporation¹, Mipox Corporation², Kevin Richard G. Operiano¹, Roberto Iaconi¹,
Riku Tanaka¹, Fumiya Kawate¹, Sepasy Saeed², Yoshifumi Watanabe²

E-mail: k.operiano@aixtal.com

Background

Deep learning models are susceptible to prediction errors when used in simulating manufacturing processes. One of the errors, as we have observed during the prediction of the polishing amount profiles of the SiC wafer and its pad, which requires the use of output profile as a model input recursively, leads to exponential compounding errors caused by *exposure bias*. To mitigate this problem, we propose methods (i.e., dataset preprocessing and post-processing, and autoregressive training) to promote model robustness and output stability.

Methods

We propose three methods to improve an autoregressive U-net model training and evaluation for SiC wafer polishing. The model inputs are the front and back surface wafer profiles, the upper and lower polishing pad profiles, as well as the simulation parameters (e.g., rotation speed, pressure, etc.). The output is the polishing amount profile (i.e., the profile of the material removed from all inputs).

- **Preprocessing** - Gaussian noise, quantization noise, and impulse noise are randomly introduced as data augmentations.
- **Post-processing** - Before using the model output as an input, the negative values are zeroed (i.e., the negative polish amount is removed).
- **Autoregressive Training** - The model is trained on the loss of its generated output as input over multiple steps, in addition to ground truth.

Results, Discussion, and Conclusion

Four model configurations are experimented with, namely: vanilla U-net, with preprocessing (PR), with pre- and post-processing (PP), and pre- and post-processing combined with Autoregressive Training (AT). Fig. 1 shows that each proposed method gradually stabilizes the profile prediction to a certain degree. Combining them yields the most robust prediction even after eight polish passes. Preprocessing handles the prediction fluctuations, while post-processing and autoregressive training provide output stability and model resiliency. The proposed methods effectively handle exponential compounding errors caused by recursive model evaluation.

Acknowledgement

This paper is based on results obtained from a project, JPNP21029, subsidized by the New Energy and Industrial Technology Development Organization (NEDO).

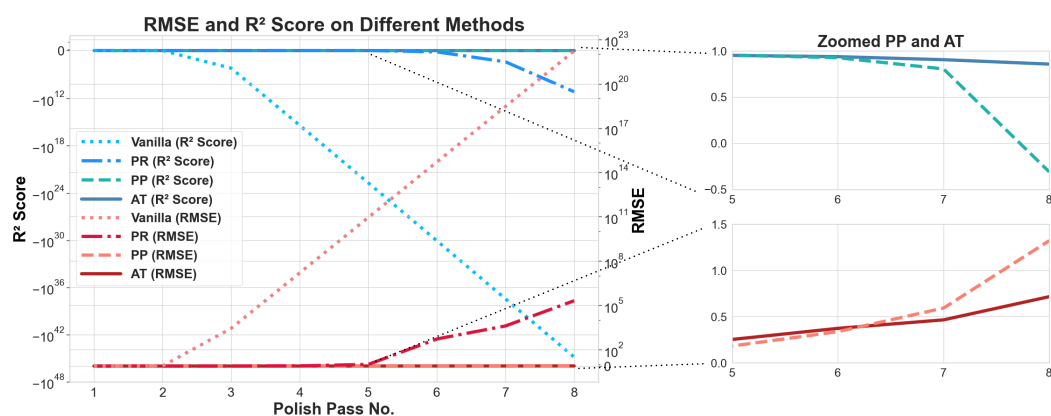


Figure 1: RMSE and R² score metrics of various proposed techniques on consecutive polish passes

乳鉢装着ロボットアームによる粉体粉碎と洗浄システム

A robotic system for powder grinding and mortar cleaning

阪大工/OTRI-SPIN¹, ○(B)真下 美咲¹, 中島 優作¹, 武市 泰男¹, 小野 寛太¹

Osaka Univ. ¹○Misaki Mashimo¹, Yusaku Nakajima¹, Yasuo Takeichi¹, Kanta Ono¹

E-mail: misaki_mashimo@ap.eng.osaka-u.ac.jp

近年、材料研究においてロボットを導入した実験プロセスの自動化が盛んに行われている[1]。粉体ハンドリングは代表的な実験プロセスであるが、提案手法では簡易的なボールミルを用いており粉体粉碎が不十分といった課題が指摘されている。我々はロボットアームが手作業と同様に乳棒と乳鉢を用いて粉体を粉碎するシステムの開発[2]に取り組んできた。開発したシステムでは、粉体材料の効率的な処理に加え、手作業以上の合成再現性を実現することに成功した[3]。しかし、これまでのシステムではロボットアームに乳棒を装着し粉体粉碎を行うため、粉碎後の乳鉢および乳棒の洗浄や粉体の運搬などの作業はすべて手作業で行うか、あるいは追加のロボットアーム等を必要とし、システムの効率化を阻む要因となっていた。本研究では、ロボットアームに乳棒ではなく乳鉢を装着し、乳棒・乳鉢のみでの粉碎が可能ならぬ、粉碎・洗浄機構を統合したシステムを提案する。

粉碎・洗浄は図1の機構を用いて行った。本実験では、提案システムの粉碎および洗浄性能について評価を行った。レーザー回折による粒度分布測定により粉碎性能の評価を行った。粉碎時間による粒度分布変化を観察するとともに、一定の力および粉碎時間を固定した条件のもとで、既存のシステム[2]と比較を行った。その結果、乳棒・乳鉢のみの粉碎において、本システムの方がより小さいメディアン径(D50)を得られることが確認できた。洗浄性能の評価では粉末X線回折法(XRD)によって洗浄後の残留粉体の有無を調査した。NaClとTiO₂(anatase)の2種類の粉体を連続して粉碎する実験を行い、その間に本システムの洗浄機構を適用した。その結果、残留粉体は検出限界以下であることを確認した。

本システムにより粉体の粉碎から運搬、乳鉢・乳棒の洗浄までを一貫して自動化することが可能になり、粉体合成や粉体を用いた材料研究の効率化につながることを期待される。今後は、粉体分注システムや材料評価と組み合わせることで秤量から合成、材料評価までのプロセスを全て自動化したシステムの開発を進める予定である。

本研究の一部は、JST ムーンショット型研究開発事業 (JPMJMS2236)、JST 未来社会創造事業 (JPMJMI21G2)の支援を受けて行われた。

[1] N.J. Szymanski *et al.* Nature **624**, pp. 1–6 (2023).

[2] Y. Nakajima *et al.* IROS, pp. 2320-2326 (2022).

[3] Y. Nakajima *et al.* Digital Discovery **3**, pp. 2130–2136 (2024).

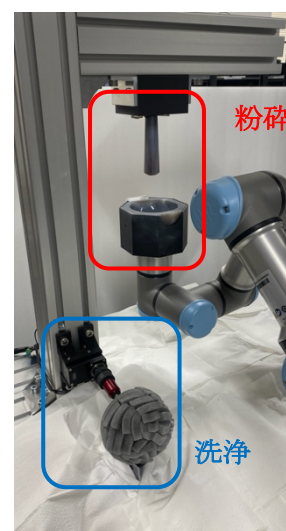


Figure1. Powder Grinding and Mortar Cleaning System Using a Robotic Arm

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

NIMS¹, 筑波大² °寺嶋 健成¹, (D2)王 威勝^{1,2}, 高野 義彦^{1,2}

NIMS¹, Univ. of Tsukuba², °Kensei Terashima¹, Wei-Sheng Wang^{1,2}, Yoshihiko Takano^{1,2}

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。

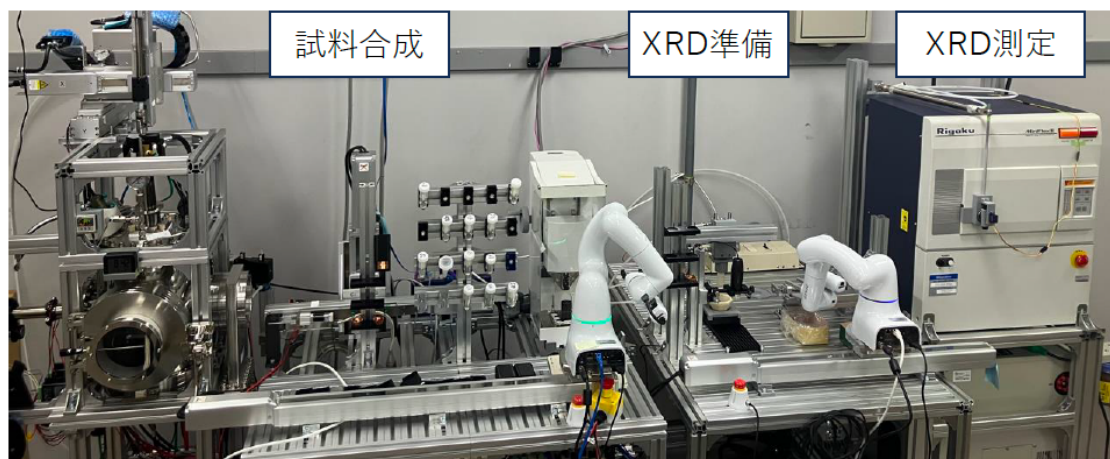


図 1 自動アーク炉と自動化 XRD 装置

- [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).