

データ駆動科学を推進する自動・自律実験システムの開発： ロボットと機械学習を活用した薄膜新材料の探索

○鈴木 陽太^{1,2)}、西尾 和記¹⁾、相場 諒¹⁾、滝原 慧¹⁾

小林 成³⁾、中山 亮³⁾、清水 亮太³⁾、長峯 靖之²⁾、一杉 太郎^{1,3)}

¹⁾東工大物質理工、²⁾東工大 OFC 設計製作部門、³⁾東大院理

1. はじめに

ロボットと機械学習を活用して、「自動的・自律的」に実験を進めることが可能になってきた^[1-5]。まさに、実験室に大きな変革が起きている。今や、実験室は「実験装置の置き場」ではない。実験室は、「実験装置群がシステムとして動く、物質とデータの生産工場」と捉えることができる。実験の繰り返し作業を機械学習により制御されたロボットシステムに任せることにより、膨大な数の試料とデータを生成することが可能である。このデータ・ロボット駆動科学の動きは、機器の標準化やデータ収集の自動化と連動し、研究者の働き方や研究開発の進め方に大きな変化をもたらすのは確実である。本発表では、自動的・自律的に薄膜新材料を探索するシステムの開発のなかで、合成および評価装置へ試料を自動で搬送するために、人間の巧みな操作をロボットが代替する技術的な開発の取り組みを報告する。

2. 自動・自律的に実験を行うシステムの構成

図1に自動・自律実験システムの模式図を示す。薄膜はRFマグネトロンスパッタ法により作製する。評価装置として、ラマン分光(Raman)、走査型電子顕微鏡/エネルギー分散型X線分光(SEM/EDS)、紫外可視分光(UV-Vis)、X線回折(XRD)装置が接続されている。薄膜試料を各装置へロボットにより自動搬送する。自律的に実験を行うために、評価装置で得られた測定結果(物性値)と薄膜合成のパラメーター(基板温度、圧力、RF出力等)をデータセットとして扱い、機械学習の一種であるベイズ最適化により次なる合成条件を予測する。そして、提案された合成条件をもとに次の薄膜試料の合成、及び評価を行う。この合成、評価、次なる合成条件の予測のサイクルが進み、機能性新材料の発見に至るまで実験が自律的に進行する(図2)。

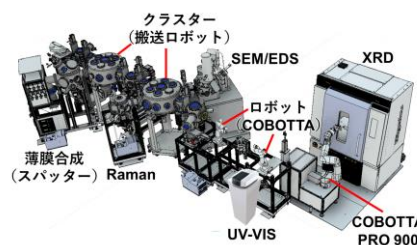


図1 自動・自律実験システムの構成

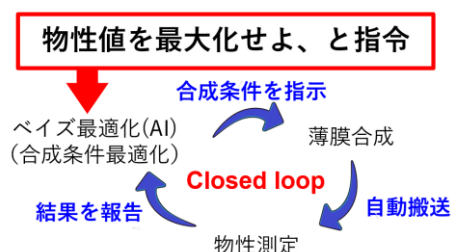


図2 自律的に実験が進行する概要

3. ロボットによる薄膜試料の自動搬送

試料として、無機セラミクス材料の基板(サイズ: 10 mm×10 mm、厚さ 0.5 mm)上に厚さ 100 nm 程度の薄膜を堆積する。自動・自律実験システムにおいて、規格が統一された図3(a)に示す試料ホルダー^[6]を利用する。これにより、試料ホルダー上に乗った基板に対して、真空中における試料の搬送、薄膜合成、Raman および SEM/EDS 測定・分析を可能にしている。UV-Vis および XRD 測定は大気中で行われる。XRD 装置は X 線が発生するため、管理区域である装置筐体内に薄膜試料(基板)を搬送する必要がある。この搬送のために、試料ホルダーおよび、薄膜試料を取り出して搬送するためのロボットアームに工夫をしてある。

まず、試料ホルダーに関して、ロボットアームによる基板の掴み損ねが生じないように、切り欠き部を深くしてある(図3(b)赤点線枠内)。XRD 測定後に、薄膜試料は基板ホルダーへ再度搬送される。その

際に、基板をホルダー上の所定位置に戻す必要がある。その際に、基板がはみ出ないための壁部が試料ホルダーにある。この壁部の角にR部が残っていると、試料の角で乗り上げが発生してしまう。その対策として、壁部を削り全体を中心に向かった傾斜状に加工してある(図3(b))。上記の加工に対して、当部門が保有するマシニングセンタ、マキノ V22 を使用した。

薄膜試料を掴み搬送する際に、グリッパー式アームが可動するロボット (COBOTTA、デンソーウェーブ製) を利用している。これにより、基板側面をアーム先端の爪部で挟んで搬送する(図3(c))。その爪部の先端にゴム板を張り付けることで、薄膜試料の掴み損ねや搬送時の落下を防いでいる。

4. 薄膜試料の搬送テスト

製作した試料ホルダーおよびロボットアームを使用して、以下の手順で搬送の繰り返し試験を行った。まず、試料ホルダーから基板を掴み、XRD 装置手前に設置されている試料の受け台まで搬送する。次に、受け台に置かれた薄膜試料をロボットアームで掴み、試料ホルダーへ搬送して戻す。この一連の動作を2分程度かけて1サイクルの搬送作業とするプログラムを作成した。そして、夜中の運用を想定し、夕方16時から翌朝9時まで17時間連続動作(約500サイクル)の搬送試験を行った。その結果、一度も基板の掴み損ねと搬送時の落下が発生することなく連続して搬送できた。その他に、繰り返し搬送試験中に実験室内の空調機から発生する風を意図的に薄膜試料に当てたり、COBOTTA の台を揺らすことで振動を発生させて搬送に対する影響を検証した。しかし、いずれの検証においても掴み損ねや薄膜試料の落下は起きずに安定して搬送できることを確認した。

5. まとめ

自動・自律的に薄膜新材料の探索を行うために、ロボットが失敗せずに各装置へ薄膜試料を搬送しなければならない。そのため、試料ホルダー、およびロボットアームの製作部に、搬送を安定化させるための工夫をした。これにより、数百回繰り返しても失敗せずに試料の搬送ができた。また、薄膜試料の搬送を安定して行うために、ロボットの動作にも細かな工夫をしてある。当日に詳細を報告する。

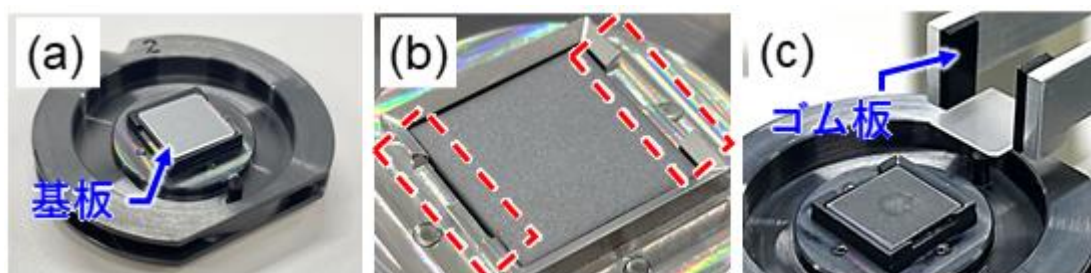


図3 (a) 試料ホルダー。中心に基板が乗っている。(b) 試料ホルダー中心部。赤点線枠内は切り欠き部を示している。(c)ロボットアーム爪部で薄膜試料を挟み搬送している様子。

参考文献

- [1] Shimizu, Hitosugi *et al.*, APL Mater. 8, 111110 (2020).
- [2] Ishizuki, Hitosugi *et al.*, STAM-M. 3, 2197519 (2023).
- [3] Kobayashi, Hitosugi *et al.*, ACS Materials Lett. 5, 2711-2717 (2023).
- [4] Nakayama, Hitosugi *et al.*, STAM-M. 2, 119-128 (2022).
- [5] Xu, Hitosugi *et al.*, STAM-M. 3, 2210251 (2023).
- [6] 図面を一杉研究室 HP で公開: https://solid-state-chemistry.jp/ai_robotics/standardization.html