

清水 亮太

東京工業大学物質理工学院
助教

自律的ものづくりを導入した金属水素化物の革新的新機能創出

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、AI(ベイズ最適化)とロボットを組み合わせた「無機材料合成と条件最適化を全自動で行う装置」を開発し、新たな機能をもつ材料創製を目指している(図 1)。2019 年度には、全自動伝導特性評価装置の実装と最適化プロセスによる Closed-loop サイクルを構築した。

全自動伝導特性評価装置には、2本の針状プローバを準備し、薄膜サンプルに押し付けることで自動測定・データ取得を行った。得られる物性値は、イオン伝導度や電気抵抗などである。

以上の装置の動作検証のために、ガラス上における Nb ドープ TiO_2 薄膜の電気抵抗最小化を試みた。成膜時の酸素/Ar 流量比(説明変数, 0.04 - 1.0%)を変化させ、電気抵抗(目的変数)の全自動最小化を行った。ターゲットには酸素量の異なる $\text{Ti}_{0.94}\text{Nb}_{0.06}\text{O}_2$ ターゲット(T1)と $\text{Ti}_{1.98}\text{Nb}_{0.02}\text{O}_3$ ターゲット(T2)を用いた。すると、T1 ターゲットでは 14 回目(~1.5 日)、T2 ターゲットでは 18 回目(~2 日)で最小の抵抗を示す試料作製に成功した。今後は説明変数の多次元化を速やかに検証し、目的のイットリウム水素化物における酸素/水素比最適化による光-外場誘起の特異な伝導特性を示す材料創製を目指す。

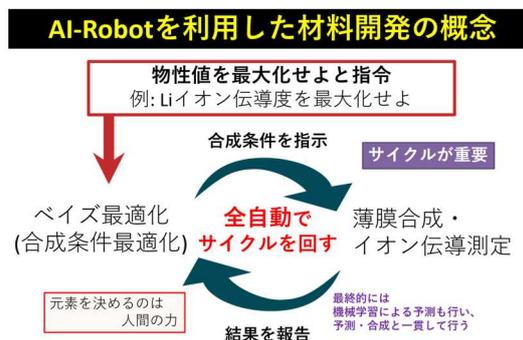


図 1: AI-ロボット材料研究の概念図