

# トピックス

## 機械学習による 薄膜作製プロセスの高速化

物質・材料研究機構の大久保勇男 主任研究員、侯 柱鋒 特別研究員（現 中国科学院）、東京大学 Mikk Lippmaa 教授らの研究グループは、材料研究に欠かせない薄膜作製プロセスに機械学習を用いることで、高品位薄膜試料の作製条件最適化プロセスを高速化する技術を開発した。

厚さがナノメートルスケールの薄膜試料の作製は、基礎から産業応用まで幅広く利用されており、その作製には、高品位試料の高い再現性が求められる。一方、温度や原料の供給速度等多数のパラメータが影響し、再現性の高い最適な組み合わせを見出すには、時に膨大な回数の薄膜作製実験が必要となる。本研究では、こ

の課題を改善するために機械学習（ベイズ最適化）を導入した。数回分の初期薄膜作製実験結果を学習データとして用い、次回以降のパラメータを機械学習で推定し、この条件で作製した薄膜作製実験の結果を、機械学習の推定のためのデータに加えることを繰り返した（closed-loop operation, 図）。実際に、結晶性により超伝導転移温度が変化する窒化チタン薄膜の作製に同手法を用い、6回の初期実験を含む、11回の実験で、最高レベルの超伝導転移温度を実現する最適な薄膜作製パラメータの組み合わせを決定した。この手法は、外部データに頼ること無くシステム内の閉じた系で実験を実行しデータを蓄積するため、導入コストの抑制が可能であり、薄膜作製プロセスの自動化のための重要な要素技術となる。本研究成果は、Materials Today Physics 誌にて2020年9月28日にオンライン掲載された（Mater. Today Phys. 16, 100296 (2021).）。

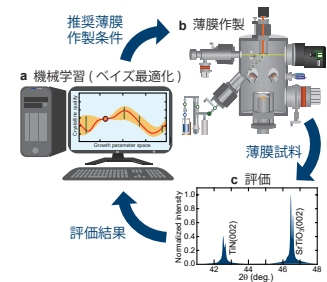


図 Closed-loop operation による薄膜作製パラメータ最適化

(国研) 物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点  
主任研究員 大久保勇男  
連絡先：〒305-0044 茨城県 つくば市 並木 1-1  
E-mail: OHKUBO.Isao@nims.go.jp  
URL : [https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohkubo\\_isao?locale=ja](https://samurai.nims.go.jp/profiles/ohkubo_isao?locale=ja)  
[2020年12月9日]

★上記記事は2021年1月に掲載されましたが、文字の一部が見切れておりましたので、再掲載いたします。誠に申し訳ありませんでした。（編集部）