

**令和3(2021)年度 研究拠点形成事業(A. 先端拠点形成型)
中間評価資料(進捗状況報告書)**

1. 概要

研究交流課題名 (和文)	データ駆動プラズマ科学国際共同研究拠点形成		
日本側拠点機関名	大阪大学		
コーディネーター 所属部局・職名・氏名	大学院工学研究科・教授・浜口智志		
相手国側	国名	拠点機関名	コーディネーター所属部局・職名・氏名
	ドイツ	ルールボーフム大学	物理天文学部・教授・GZARNETZKI Uwe Reinhard
	フランス	エクス・マルセイユ大学	イオン分子相互作用物理研究所・教授・BENKADDA Sadruddin Mohamed
	イギリス (令和3年度より)	ヨーク大学 (令和3年度より)	理学系研究科物理学科・教授・GANS Timo (令和3年度より)
	アイルランド	ダブリンシティ大学	物理科学学科・教授・GANS Timo
イタリア	ポローニャ大学	工学部工業工学科・教授・COLOMBO Vittorio	

2. 研究交流目標

申請時に計画した目標と現時点における達成度について記入してください。

※新型コロナウイルス感染症拡大の影響により、申請時に予定していた共同研究の実施、セミナーの開催及び研究者交流等が困難又は延期せざるを得なかった場合、当初目的の達成に向け代替的に行った取組があれば、その成果も含めて記入してください。

○申請時の研究交流目標

プラズマ科学はビッグデータの宝庫である。本事業で目指す学術的成果は、プラズマ研究で得られるビッグデータから、系の物理機構を効率的に抽出する手法、及び、系の運動や変化を効率的に予測する手法を、その学術基盤とともに、確立することにある。そのための学術的アプローチは、プラズマ科学の知識に基づき、最新の「データ科学」の成果と高速計算技術を活用し、プラズマ研究（の個別課題それぞれ）に特有なデータ解析手法（データ収集・データ浄化・特性抽出・確率的推論・機械学習等）を確立し、得られたデータ解析結果を、伝統的な、高精度数値シミュレーションや実験データと比較し、データ解析結果の精度や有効性を検証することにある。ここで、「データ科学」とは、従来の統計学や情報学に基づくデータ解析を含む、確率的推論、データマイニング、機械学習、人工知能など、広範なデータ処理に関する科学のほか、GPU コンピューティング等データ解析に有利な新規の数値計算技術を指す。

本事業では、プラズマ科学の中でも、プラズマと物質の相互作用する系（プラズマプロセス）の科学に注目し、物質データについては、マテリアルズインフォマティクス(MI)の知識を最大限に活用する。具体的には、エッチングや薄膜堆積等半導体プロセスから、核融合炉第一壁の設計のほか、プラズマの様々な工学的応用はプラズマと物質の相互作用の科学を活用しており、本学術基盤の確立は、実社会へのインパクトも非常に大きい。

本事業では、上述の学術成果を実現するため、国際的な共同研究体制と各国の生成するビッグデータの相互利用システムを確立し、また、プラズマ科学とデータ科学の両分野に精通した国際的な研究者の育成を目標とする若手人材育成プログラムの確立を実現する。こうした研究成果は、例えば、プラズマプロセスを多用する最新の半導体製造工場における（現在は熟練エンジニアが行っている）製造プロセスの自動管理技術の確立等、幅広い産業分野の技術革新につながる応用開発研究基盤の構築につながるほか、巨大科学プロジェクトで、2025 年から実験の始まる国際熱核融合実験炉(ITER)のビッグデータ解析等に大きな役割を果たすことが期待される。

○目標に対する達成度とその理由

上記目標に対する2カ年分の計画について

※延長対象課題の令和2年度事業については、延長期間終了日までの状況を踏まえること。

十分に達成された

概ね達成された

ある程度達成された

ほとんど達成されなかった

【理由】

当初の予定では、ドイツ、フランス、イギリスに大学院生を長期派遣し、また、相手4か国から学生や若手研究者を長期受け入れして、共同研究を推進する予定であったが、コロナ禍のため、令和元年度から開始した、相互受け入れによる直接共同研究は、令和2年度には中断せざるを得なかった。しかしながら、令和元年度に得られた共同実験データ、及び、その時に綿密にたてた研究計画に沿って、令和2年度に、online 会議やメールベースで議論を進めた結果、各拠点の研究所で研究を進めた結果、当初の研究計画を十分に達成することができた。

3. これまでの研究交流活動の進捗状況

※新型コロナウイルス感染症拡大の影響により、申請時に予定していた共同研究の実施、セミナーの開催及び研究者交流等が困難又は延期せざるを得なかった場合、代替的に行った取組があれば、その内容及び成果も含めて記入してください。

(1) これまでの研究交流活動(延長対象課題の令和2年度事業は延長期間終了日まで)について、

「共同研究」、「セミナー」及び「研究者交流」の交流の形態ごとに、派遣及び受入の概要を記入してください。

※各年度における派遣及び受入実績については、「中間評価資料(経費関係調書)」に記入してください。

○共同研究

【概要】

共同研究 整理番号	共同研究課題名	相手国
R1	大気圧プラズマとその応用	ドイツ・イタリア
R2	プラズマ乱流	フランス・ドイツ
R3	プラズマ表面相互作用	ドイツ・フランス・イギリス・イタリア
R4	プラズマ仮想計測	イギリス・ドイツ・フランス

共同研究テーマは上記のとおりである。令和元年は、R1 で、ドイツから大学院生2名が、それぞれ3か月ほど大阪大学に滞在し、R3、R4 のテーマでイギリスから6名、1週間ほど来訪、一方、日本からも多数の研究者を先方に派遣した。しかし、コロナ禍で、令和2年度は計画した受け入れ・派遣を行うことができず、代替措置として、online 会議等やメールベースでの共同研究を推進した。代替措置による共同研究は、非常に順調に進捗し、研究目標は十分に達成された。具体的には、R1 では、大気圧プラズマによる気相中の揮発性有機化合物(VOC)の除去、及び、プラズマ溶液界面における化学反応プロセスの数値シミュレーション技術に大きな進展が見られた。R2 では、エクス・マルセイユ大学と大阪大学、九州大学、及び核融合科学研究所との online による共同研究で、数値シミュレーションによるプラズマ輸送現象の解析に大きな進捗があった。特に、本共同研究により、機械学習を用いたプラズマ動力学代理モデルの構築に関する、新しい研究テーマに着手した。R3 では、分子動力学シミュレーション・第一原子シミュレーションと表面反応実験による低エネルギー照射プラズマ表面相互作用の研究に大きな進展があった。特に、原子層堆積(ALD)に用いられる各種プリカーサ分子の表面吸着機構が明らかとなった。R4では、プラズマ数値シミュレーションとプラズマ放電・分光実験を用いた仮想計測技術解析研究を進展させた。特に、対象とするプラズマを、Ar プラズマから、Ar/N₂ プラズマの精密数値シミュレーションに拡張し、粒子法・流体法・ハイブリッド法等の異なる数値解析手法によるプラズマ動力学の再現性の違いを明らかにした。

○セミナー

	令和元年 (平成31年)度	令和2年度
国内開催	1 回	2 回
海外開催	2 回	0 回
合計	3 回	2 回

【概要】

令和元年度は、フランス・マルセイユにおいて「データ駆動プラズマ科学セミナー」、ドイツ・バートホネフにおいて「低温プラズマセミナー」を開催し、前者は、日本から11名、後者は日本から大学院生2名を本事業で派遣した。国内セ

ミナーは、「非平衡プラズマ複雑系科学国際シンポジウム」として開催し、海外からも多数の本事業参加者が参加した。令和2年度は、予定していた国際会議がコロナ禍ですべて中止となり、2回の国内開催セミナーは国内参加者のみで行った。但し、当初予定の海外セミナーに代わり、online 国際セミナー「Physics informed AI (PiAI) Seminar」を、ほぼ週1回のペースで開催し、また、国際会議「3rd International Conference on Data Driven Plasma Science」を、予定を変更して、若手研究者中心の online セミナーとして開催し、本事業関係者を含め、国内外から多数の参加者があった。これら、当初の予定になかったセミナーを含めると、令和2年度の国内開催セミナー数は4となる。

○研究者交流

【概要】

令和元年は、本事業経費による日本から海外への渡航人数は、のべ28名、海外からの日本への渡航人数は、のべ、11名であり、順調に交流が進んだ。令和元年は初年度であり、交流計画は、本事業が採択されない場合でも実施する計画であったため、本事業経費によらず他予算で、交流を行った本事業参加者も多かった。実際の研究交流は、拠点予算で手当てされた以上に、大きく進んだ。一方、令和2年3月から始まったコロナ禍のため、その後の研究者交流は、皆無となったため、コロナ禍以降は、特に若手研究者が、海外拠点を訪問して、新しい技術や新しい考え方、研究の視点を学ぶ機会が持てなかったのは、大きな痛手である。但し、online セミナーや、個別の online 会議等により、継続的な情報交換の場は、コロナ禍以前より、相当数増えたと考えられる。このため、国際共同研究自体は順調に進み、本事業の研究成果の論文や学会発表数も、増え続けている。

(2)(1)の研究交流活動を通じて、申請時の計画がどの程度進展したか、以下の観点から記入してください。

○日本側拠点機関及び相手国拠点機関の交流によってえられた、世界的水準の国際研究交流拠点となりうるような学術的価値の高い成果

これまでの研究で得られた様々な成果の中から、特筆すべきものとして次の2件を挙げる。

1. 半導体製造用原子層プロセス(ALP)におけるプラズマ表面相互用の機構解明と、機械学習によるプロセス開発のために基礎技術の確立。

ALPとは、原子層ごとに物質表面を除去するプロセス(原子層エッチング:ALE)や薄膜堆積を原子層ごとに行うプロセス(原子層堆積:ALD)を指す。これらは、主として、低エネルギーの反応性プラズマを加工すべき表面に照射することで実現するが、表面物質の種類によって、プラズマを生成するガス種からプラズマ放電条件まで極めて多様であり、プロセス開発に膨大なコストがかかっている。このため、本研究では、原子レベルの表面反応シミュレーションとビーム実験を用いて、重要な表面反応プロセスに関して、複雑なプラズマの本質的な物理機構を解明すると同時に、且つ、これまで得られたデータを基に、エッチング率等、未知の表面反応課程を予測する機械学習システムを構築した。

2. プラズマ・シミュレーション支援によるプラズマプロセス装置仮想計測技術の確立

本研究の目的は、直接計測に難しいプラズマ装置の内部状態を予測するために、精度の高い数値シミュレーション技術を開発するとともに、その結果を実験装置において確認し、シミュレーション結果と実験結果の相関を明確化することで、リアルタイムでプラズマの内部状況を予測(仮想計測)する技術を確認することにある。これまでの研究で、対称性の高い実験装置(ドイツ側の協力機関の実験装置)によるプラズマ実験から、分光データを含むプラズマの放電データを集積し、一方、プラズマ・シミュレーションと連結した衝突放射モデルにより、プラズマ放電条件から、分光データを数値シミュレーションを用いて、高精度で再現できること確認した。また、実際には計算時間のかかる数値シミュレーションを、代理モデルを構築することにより、リアルタイムで数値シミュレーションを行う基礎技術も確立した。これにより、近い将来は、代理モデルのリアルタイム・シミュレーションとデータ同化により、実験中のプラズマの内部状態を予測するシステムの開発の目途が付いた。

○研究交流活動の成果から発生した波及効果

研究交流活動の成果から発生した波及効果として、次の3点が挙げられる。

1. 国内企業との共同研究

半導体プロセス等のプラズマ技術に、機械学習などデータ駆動技術を導入する必要性、及び、その基となる基礎的データの取得を取得の必要性を認識している企業が増えている。このため、本研究交流活動の成果を基に、いくつかの国内企業との共同研究が開始された。また、国内大学との共同研究を通して、海外の拠点事業参加研究グループとの共同研究を間接的に行う企業も現れている。これは、当初の計画通りであり、本事業が修了する5年目以降に、自律的に本拠点が、国際研究拠点として継続するために経済的基盤の構築につながる。

2. 海外企業との共同研究

同様に、本研究交流活動の成果が、海外企業との共同研究の開始にも大いに役立っている。日本側拠

点の大阪大学と、海外のグローバル企業3件との共同研究が開始された。(1件は、令和2年度に完了。他2件は、現在も継続中。) 国際的な共同研究拠点として、外国人共同研究者も参加するなど、英語で共同研究を行う環境の充実が、国際的産学連携に強化に貢献したと考えられる。

3. 幅広い国際共同研究の進展

本事業の海外拠点がすでに行っている、幅広い国際共同研究を、本事業を通して知ることとなり、本事業の枠を超えた、国際共同研究が広がっている。例えば、現在、米国のプリンストン大学、ロスアラモス国立研究所等、本共同研究事業に参加していない研究者も含めたレビュー論文の共同執筆を行っており、将来的に日本側拠点が、研究の幅を広げる際に、こうした交流が非常に役立つと考えられる。具体的な最近の例としては、量子コンピュータの実用化に伴う、極低温の半導体デバイスの製造プロセスに、ダメージの極端に少ないプラズマ・プロセスが求められており、本事業の当初の計画にはなかった、新しい研究課題に取り組む本事業参加研究者も現れている。

○若手研究者育成への貢献

- ・若手研究者が身につけるべき能力・資質等の向上に資する育成プログラムの実施及びその効果

本事業では、機械学習などの最新の技術を活用するため、若手研究者の活躍の場が広い。特に、大学院生をはじめとして、データ科学と最深のプログラミングに興味を持つ若手研究者多い。このため、こうした基礎技術を学ぶ場を、セミナーなどを通して、提供している。但し、1、2日のセミナーでは、最先端技術の情報を得ることは可能だが、実践的なトレーニングには不十分である。一方、現在では、online セミナーや、初心者向けの機械学習や AI プログラミングの講習も多く、意欲のある学生には、こうした一般のセミナーを推奨している。実際には、こうした技術をプラズマ科学分野にどのように活用するかということを実例を継続的に学ぶことで、基礎技術の学習意欲も高まるため、ほぼ毎週開催する PiAI セミナーを通して、この分野の面白さを、若手研究者が学ぶ機会を提供している。その効果として、これまでのプラズマ科学の研究に、機械学習等、データ科学的手法を活用する若手研究者が増えている。実際に、若手研究者の学会発表などにも、こうした研究成果が徐々に表れるようになっている。

- ・日本と交流相手国における次世代の中核を担う若手研究者の研究ネットワーク構築状況

若手研究者のネットワークの構築に関しては、対面での交流が、online 会議等を通じた交流に比べて、圧倒的に、有利である。令和2年度から、国際的な summer school 等への参加が不可能となり、若手研究者の研究ネットワーク構築については、不利な状況が続いている。本年度後半から、可能な範囲で、受け入れや派遣を増やし、若手研究者の国際的な研究ネットワークの構築に貢献する。国内の研究ネットワークの構築は、本事業セミナーや個別の研究会を通して、順調に進んでいると考えられる。