

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2023年8月31日(31.08.2023)



(10) 国際公開番号

WO 2023/162004 A1

(51) 国際特許分類:

G06N 99/00 (2019.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2022/007265

(22) 国際出願日: 2022年2月22日(22.02.2022)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(71) 出願人: 日本電信電話株式会社 (NIPPON TELEGRAPH AND TELEPHONE CORPORATION) [JP/JP]; 〒1008116 東京都千代田区大手町一丁目5番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 大塚 琢馬 (OTSUKA, Takuma); 〒1808585 東京都武蔵野市緑町3丁目9-11 N T T 知的財産センタ内 Tokyo (JP). 若林 勇希

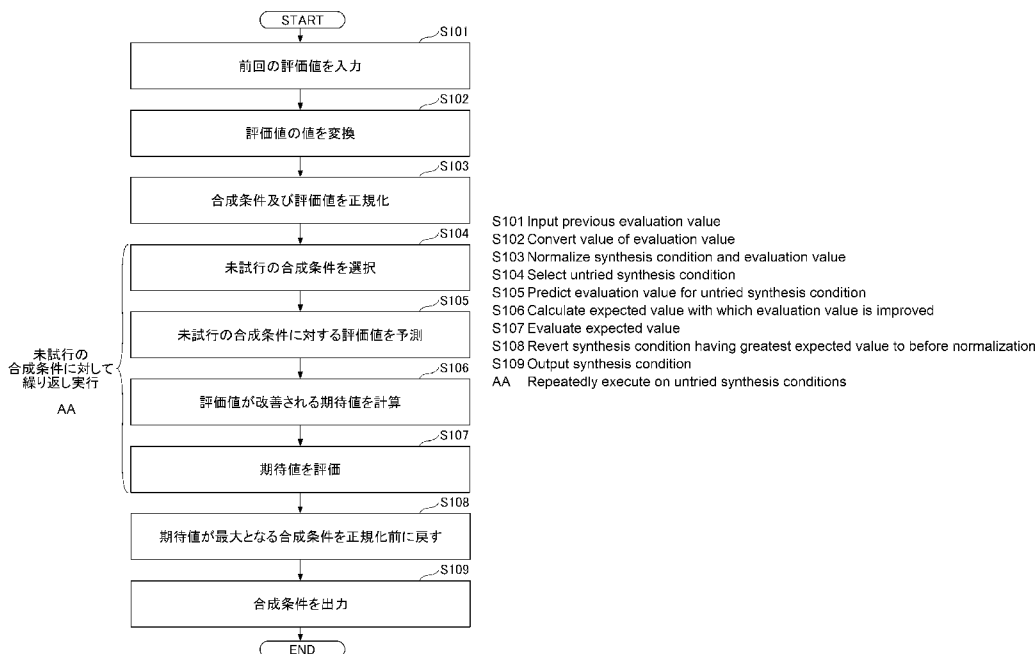
(WAKABAYASHI, Yuki); 〒1808585 東京都武蔵野市緑町3丁目9-11 N T T 知的財産センタ内 Tokyo (JP). 澤田 宏 (SAWADA, Hiroshi); 〒1808585 東京都武蔵野市緑町3丁目9-11 N T T 知的財産センタ内 Tokyo (JP). 谷保 芳孝 (TANIYASU, Yoshitaka); 〒1808585 東京都武蔵野市緑町3丁目9-11 N T T 知的財産センタ内 Tokyo (JP). 山本 秀樹 (YAMAMOTO, Hideki); 〒1808585 東京都武蔵野市緑町3丁目9-11 N T T 知的財産センタ内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 伊東 忠重, 外 (ITO, Tadashige et al.); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目1番1号 丸の内 M Y P L A Z A (明治安田生命ビル) 16階 Tokyo (JP).

(54) Title: SYNTHESIS CONDITION GENERATION METHOD, SYNTHESIS CONDITION GENERATION DEVICE, AND PROGRAM

(54) 発明の名称: 合成条件生成方法、合成条件生成装置及びプログラム

[図5]



(57) Abstract: A synthesis condition generation method according to one embodiment of the present invention generates a synthesis condition in a trial run in which generation of a substance that conforms to the synthesis condition, measurement of an evaluation value for evaluating the substance, and generation of the synthesis condition are executed in the stated order. In the synthesis condition generation method, a computer executes: an evaluation value conversion procedure in which, when there exists a trial run n' in which the evaluation value $y_{n'}$

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

($n' \in \{1, \dots, N\}$) of a substance could not be measured among the past N rounds of trial runs, an evaluation value $y_{n'}$ in the trial run n' is replaced with the worst evaluation value; a prediction procedure in which the evaluation value y of an untried synthesis condition x is predicted using a synthesis condition x_n and an evaluation value y_n in a trial run ($n=1, \dots, N$); and a generation procedure in which a synthesis condition that yields a better evaluation value than the best value of an evaluation value y_n ($n=1, \dots, N$) is generated, as a synthesis condition x_{N+1} in a trial run $N+1$, using the result of having predicted the evaluation value y of the synthesis condition x of the untried trial run.

(57) 要約: 一実施形態に係る合成条件生成方法は、合成条件に従った物質の生成と前記物質を評価する評価値の測定と前記合成条件の生成とを順に実行する試行における前記合成条件を生成するための合成条件生成方法であって、これまでの N 回の試行の中で物質の評価値 $y_{n'}$ ($n' \in \{1, \dots, N\}$) が測定できなかった試行 n' が存在する場合、試行 n' における評価値 $y_{n'}$ を最悪の評価値に置き換える評価値変換手順と、試行 n ($n = 1, \dots, N$) における合成条件 x_n 及び評価値 y_n を用いて、未試行の合成条件 x の評価値 y を予測する予測手順と、前記未試行の合成条件 x の評価値 y を予測した結果を用いて、評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) の最良値よりも良い評価値を取る合成条件を、試行 $N + 1$ における合成条件 x_{N+1} として生成する生成手順と、をコンピュータが実行する。

明 細 書

発明の名称：

合成条件生成方法、合成条件生成装置及びプログラム

技術分野

[0001] 本発明は、合成条件生成方法、合成条件生成装置及びプログラムに関する。

背景技術

[0002] 与えられた合成条件（レシピ）に従って生成された物質の評価値を測定する試行を繰り返しながら良い評価値を与える合成条件を探索することが従来から行われている。例えば、図1に示すように、 n を試行回数として、（1）合成条件 x_n を生成し、（2）この合成条件 x_n に従って試料（物質）を生成し、（3）その試料を評価して評価値 y_n を測定する、という試行を繰り返しながら良い評価値を与える合成条件を探索することが行われている。

[0003] 与えられた合成条件に従って薄膜（物質、試料）を生成する手法としては、例えば、分子線エピタキシー法（非特許文献1）等がある。これ以外にも、例えば、スパッタリング法、パルスレーザーアブレーション法、物理蒸着法、化学気相成長法、スピンコート法、原子層堆積法、フローティングゾーン法、フラックス法、チョクラルスキー法等といった薄膜合成・バルク合成法等が挙げられる。また、合成条件に対する評価値が常に得られる問題設定の下で次に試行する合成条件を生成する手法として、ベイズ的最適化等がある（特許文献1、非特許文献2及び3）。なお、合成条件に従って物質が生成され、その物質の用途等に応じて予め設計された評価指標でその物質の評価値を測定するという過程が複雑なため、合成条件と評価値の関係が陽に記述できない状況もあり得るが、ベイズ的最適化では、このような状況においても合成条件を探索できる手法として知られている。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：特開2018-147075号公報

非特許文献

[0005] 非特許文献1：Y. Krockenberger et al. Emerging superconductivity hidden beneath charge transfer insulators, Scientific Reports 3:2235, 2013.

非特許文献2：J. Snoek, H. Larochelle, and R. P. Adams: Practical Bayesian Optimization of Machine Learning Algorithms, Advances in Neural Information Processing Systems 25, pp. 2951-2959, 2012.

非特許文献3：Y. K. Wakabayashi et al. Machine-learning-assisted thin-film growth: Bayesian optimization in molecular beam epitaxy of SrRuO₃ thin films, APL Materials 7, 101114, 2019.

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] しかしながら、良い評価値を与える合成条件を探索する従来手法では、評価値が得られない合成条件があり得るという問題点がある。これは、合成条件の探索範囲内のすべての合成条件で安定な物質が生成されるとは限らないためである。また、或る合成条件において、目的とする物質と異なる組成や結晶構造を持つ物質が得られることもあり得るためである。

[0007] 本発明の一実施形態は、上記の点に鑑みてなされたもので、与えられた評価指標の下で最適な物質が得られる合成条件を生成することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0008] 上記目的を達成するため、一実施形態に係る合成条件生成方法は、合成条件に従った物質の生成と前記物質を評価する評価値の測定と前記合成条件の生成とを順に実行する試行における前記合成条件を生成するための合成条件生成方法であって、これまでのN回の試行の中で物質の評価値 $y_{n'}$ ($n' \in \{1, \dots, N\}$) が測定できなかった試行 n' が存在する場合、試行 n' における評価値 $y_{n'}$ を最悪の評価値に置き換える評価値変換手順と、試行 n ($n = 1, \dots, N$) における合成条件 x_n 及び評価値 y_n を用いて、未試行の

合成条件 x の評価値 y を予測する予測手順と、前記未試行の合成条件 x の評価値 y を予測した結果を用いて、評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) の最良値よりも良い評価値を取る合成条件を、試行 $N + 1$ における合成条件 x_{N+1} として生成する生成手順と、をコンピュータが実行する。

発明の効果

[0009] 与えられた評価指標の下で最適な物質が得られる合成条件を生成することができる。

図面の簡単な説明

[0010] [図1]評価値が良い合成条件を得るための試行の一例を示す図である。

[図2]本実施形態に係る合成条件生成システムの全体構成の一例を示す図である。

[図3]本実施形態に係る合成条件生成装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

[図4]本実施形態に係る合成条件生成装置の機能構成の一例を示す図である。

[図5]本実施形態に係る合成条件生成処理の一例を示すフローチャートである。

[図6]シミュレーション実験における評価値を示す図である。

[図7]シミュレーション実験の結果を示す図である。

[図8] $SrRuO_3$ 実験の結果を示す図である。

発明を実施するための形態

[0011] 以下、本発明の一実施形態について説明する。以下の実施形態では、与えられた評価指標の下で最適な物質が得られる合成条件を生成することができる合成条件生成システム1について説明する。

[0012] <合成条件生成システム1の全体構成>

本実施形態に係る合成条件生成システム1の全体構成例を図2に示す。図2に示すように、本実施形態に係る合成条件生成システム1には、合成条件生成装置10と、物質生成装置20と、物質評価装置30とが含まれる。

[0013] 合成条件生成装置10は、試行回数を表すインデックスを n として、前回

の試行までに得られた合成条件（レシピ）とその評価値とを用いて、今回の試行で用いる合成条件を生成する。合成条件とは或る手法により1以上の原料の反応を進めて或る物質を得るための条件（例えば、組成元素の量、反応温度、原料を投入するタイミング等）であり、一般に、ベクトルで表される。一例として、 SrRuO_3 薄膜を生成するタスクでは、合成条件は、（a）Ruの供給量、（b）薄膜を付着させる基板の温度、（c）酸素原子Oを供給するオゾンノズルと基板との間の距離、の3つ要素を持つベクトルで表される。以下、 n 回目の試行を「試行 n 」ともいい、試行 n で物質の生成に用いられる合成条件を「 x_n 」とする。

[0014] 物質生成装置20は、合成条件生成装置10により生成された合成条件に従って原料の反応を進めて物質（試料）を生成する。物質生成装置20としては、例えば、分子線エピタキシー法、スパッタリング法、パルスレーザーアブレーション法、物理蒸着法、化学気相成長法、スピコート法、原子層堆積法、フローティングゾーン法、フラックス法、チョクラルスキー法等といった薄膜合成・バルク合成法等により物質を生成する装置である。一例として、 SrRuO_3 薄膜を生成するタスクでは、分子線エピタキシー法による薄膜生成装置を物質生成装置20として用いることができる。

[0015] 物質評価装置30は、物質生成装置20により生成された物質（試料）を所定の評価指標により評価した評価値を測定する。なお、評価指標としては、所望の物質とその形状（薄膜、バルク等）に応じた既存の評価指標を用いればよい。一例として、 SrRuO_3 薄膜を生成するタスクでは、薄膜の元素の並びの良さを測る評価指標として残留抵抗比（RRR : Residual Resistivity Ratio）を用いることが考えられる。

[0016] 以下、評価値は、物質（試料）が安定した物質であるか否か又は所望の物質であるか否かを表す2値情報とその物質の良さを表すスカラ値とで構成されるものとし、物質が安定した物質又は所望の物質である場合はスカラ値、物質が安定した物質又は所望の物質でない場合はNaNを取るものとする。例えば、電気抵抗の大きい絶縁体を得たい場合には、評価値は、所望の試料

が得られた場合はその電気抵抗値、そうでなかった場合はN a Nを取る。なお、N a Nは非数（Not a Number）を表す。

[0017] また、以下、合成条件 x_n に従って物質生成装置20により生成された物質に対する評価値を「 y_n 」として、評価値が大きいほど良い評価であるものとする。なお、評価値が小さいほど良い評価である場合には、例えば、評価値の符号を反転させることで、本実施形態を同様に適用することが可能である。

[0018] ここで、本実施形態に係る合成条件生成システム1は、これまでの試行で得られた合成条件とその評価値 $\{(x_n, y_n) \mid n=1, \dots, N\}$ （ただし、Nはこれまでの試行回数）を用いて合成条件生成装置10が合成条件 x_{N+1} を生成し、この合成条件 x_{N+1} に従って物質生成装置20が物質（試料）を生成し、この試料を物質評価装置30が評価して評価値 y_{N+1} を測定する、という試行を繰り返しながら良い評価値を与える合成条件を探索する。以下では、物質生成装置20及び物質評価装置30をブラックボックスとして扱い、これまでの試行で得られた合成条件とその評価値 $\{(x_n, y_n) \mid n=1, \dots, N\}$ を用いて、N+1回目の試行でより良い評価値を与える合成条件 x_{N+1} を合成条件生成装置10が生成する場合について説明する。これにより、この試行が繰り返されることで、最適な物質が得られる合成条件を生成することが可能となる。

[0019] ただし、図2に示す合成条件生成システム1の全体構成は一例であって、これに限られるものではない。例えば、合成条件生成装置10と、物質生成装置20及び物質評価装置30のうちの2以上の装置が同一の装置で実現されていてもよい。

[0020] <合成条件生成装置10のハードウェア構成>

本実施形態に係る合成条件生成装置10のハードウェア構成例を図3に示す。図3に示すように、本実施形態に係る合成条件生成装置10は、入力装置101と、表示装置102と、外部I/F103と、通信I/F104と、RAM（Random Access Memory）105と、ROM（Read Only Memory）

１０６と、補助記憶装置１０７と、プロセッサ１０８とを有する。これらの各ハードウェアは、それぞれがバス１０９を介して通信可能に接続されている。

[0021] 入力装置１０１は、例えば、キーボード、マウス、タッチパネル等である。表示装置１０２は、例えば、ディスプレイ、表示パネル等である。なお、合成条件生成装置１０は、例えば、入力装置１０１及び表示装置１０２のうちの少なくとも一方を有していなくてもよい。

[0022] 外部Ｉ／Ｆ１０３は、記録媒体１０３ａ等の外部装置とのインタフェースである。合成条件生成装置１０は、外部Ｉ／Ｆ１０３を介して、記録媒体１０３ａの読み取りや書き込み等を行うことができる。記録媒体１０３ａとしては、例えば、フレキシブルディスク、ＣＤ（Compact Disc）、ＤＶＤ（Digital Versatile Disk）、ＳＤメモリカード（Secure Digital memory card）、ＵＳＢ（Universal Serial Bus）メモリカード等がある。

[0023] 通信Ｉ／Ｆ１０４は、合成条件生成装置１０を通信ネットワークに接続するためのインタフェースである。ＲＡＭ１０５は、プログラムやデータを一時保持する揮発性の半導体メモリ（記憶装置）である。ＲＯＭ１０６は、電源を切ってもプログラムやデータを保持することができる不揮発性の半導体メモリ（記憶装置）である。補助記憶装置１０７は、例えば、ＨＤＤ（Hard Disk Drive）やＳＳＤ（Solid State Drive）等のストレージ装置（記憶装置）である。プロセッサ１０８は、例えば、ＣＰＵ（Central Processing Unit）やＧＰＵ（Graphics Processing Unit）等の演算装置である。

[0024] 本実施形態に係る合成条件生成装置１０は、図３に示すハードウェア構成を有することにより、後述する合成条件生成処理を実現することができる。なお、図３に示すハードウェア構成は一例であって、合成条件生成装置１０のハードウェア構成はこれに限られるものではない。例えば、合成条件生成装置１０は、複数の補助記憶装置１０７や複数のプロセッサ１０８を有していてもよいし、図示したハードウェア以外の様々なハードウェアを有していてもよい。

[0025] <合成条件生成装置 10 の機能構成>

本実施形態に係る合成条件生成装置 10 の機能構成例を図 4 に示す。図 4 に示すように、本実施形態に係る合成条件生成装置 10 は、評価値入力部 201 と、評価値予測部 202 と、合成条件探索部 203 と、合成条件出力部 204 とを有する。これら各部は、例えば、合成条件生成装置 10 にインストールされた 1 以上のプログラムが、プロセッサ 108 等により実行される処理により実現される。また、本実施形態に係る合成条件生成装置 10 は、記憶部 205 を有する。記憶部 205 は、例えば、補助記憶装置 107 等により実現される。なお、記憶部 205 は、例えば、合成条件生成装置 10 と通信ネットワークを介して接続されるデータベースサーバ等の記憶装置により実現されてもよい。

[0026] 評価値入力部 201 は、試行 N （前回の試行）で物質評価装置 30 により評価された評価値 y_N を入力する。なお、この評価値 y_N は記憶部 205 に記憶される。

[0027] ここで、各評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) は NaN を取り得るため、 $y_n = NaN$ のときの変換処理が必要である。また、合成条件 x_n を構成する各要素のスケールの違いや、評価値 y_n そのもののスケールによって、評価値予測部 202 が評価値を予測する際の予測精度が悪化する可能性がある。このため、予測精度を確保し、合成条件を効率よく探索するためには、合成条件 x_n とその評価値 y_n の正規化処理が必要である。そこで、評価値入力部 201 は、評価値 y_N を入力すると、各 $n = 1, \dots, N$ に対して、以下の変換処理により評価値 y_n を y_n' にそれぞれ変換すると共に、以下の正規化処理により合成条件 x_n と y_n' をそれぞれ正規化する。

[0028] ・変換処理

評価値入力部 201 は、各評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) を以下の式 (1) により変換する。

[0029]

[数1]

$$y'_n = \begin{cases} y_n & (y_n \neq \text{NaN}) \\ \underline{y} & (y_n = \text{NaN}) \end{cases} \quad (1)$$

ここで、

[0030] [数2]

$$\underline{y} = \min_{n=1,\dots,N} y_n$$

である。すなわち、 $y_n = \text{NaN}$ である場合は、これまでの試行における最悪の評価値とする。ただし、これまでのすべての試行で $y_n = \text{NaN}$ である場合は、

[0031] [数3]

$$\underline{y} = 0$$

とする。このように、評価値が得られなかった合成条件に対しては、これまで得られた評価値の最悪の値で代用する。これにより、従来手法の問題点である「評価値が得られない合成条件があり得る」という点が解決される。

[0032] ・正規化処理

以下、合成条件 x_n はD個の要素で構成されるベクトルであるものとして、 $x_n = [x_{n,1}, \dots, x_{n,D}]^T$ とする。ここで、 T はベクトルや行列の転置を表す。

[0033] D個の要素 $x_{n,d}$ ($d = 1, \dots, D$) は、或る手法により或る物質を得るための条件を表している。一例として、 SrRuO_3 薄膜を生成するタスクでは、 $x_{n,1}$ はRuの供給量、 $x_{n,2}$ は薄膜を付着させる基板の温度、 $x_{n,3}$

は酸素原子Oを供給するオゾンノズルと基板との間の距離をそれぞれ表している。

[0034] d 番目の要素 $x_{n,d}$ の探索範囲の下限と上限をそれぞれ

[0035] [数4]

$$\underline{x}_d, \overline{x}_d$$

とする。ただし、

[0036] [数5]

$$\underline{x}_d < \overline{x}_d$$

である。

[0037] このとき、評価値入力部 201 は、合成条件 $x_n = [x_{n,1}, \dots, x_{n,d}]^T$ を正規化した正規化合成条件

[0038] [数6]

$$\tilde{x}_n = [\tilde{x}_{n,1}, \dots, \tilde{x}_{n,D}]^T$$

の各要素を以下の式 (2) により求める。

[0039] [数7]

$$\tilde{x}_{n,d} = \frac{x_{n,d} - \underline{x}_d}{\overline{x}_d - \underline{x}_d} \quad (2)$$

同様に、評価値に関してもおよその値の範囲

[0040]

[数8]

$$\underline{y} < \overline{y}$$

が与えられるのであれば、評価値入力部201は、その範囲を用いて、以下の式(3)により y_n' を正規化した正規化評価値を求める。

[0041] [数9]

$$\tilde{y}_n' = \frac{y_n' - \underline{y}}{\overline{y} - \underline{y}} \quad (3)$$

一方で、評価値に関するおおよその値の範囲が与えられない場合、評価値入力部201は、

[0042] [数10]

$$\underline{y} = 0, \overline{y} = 1$$

として式(3)により y_n' を正規化した正規化評価値を求める。

[0043] なお、以下、明細書のテキスト中では、合成条件 x_n を正規化した正規化合成条件を「 $\sim x_n$ 」、変換処理後の評価値 y_n' を正規化した正規化評価値を「 $\sim y_n'$ 」と表記する。また、誤解の恐れがないときは、正規化合成条件を単に「合成条件」ともいい、正規化評価値を単に「評価値」ともいう。更に、正規化合成条件を表す変数を「 $\sim x$ 」、正規化評価値を表す変数を「 $\sim y$ 」とする。

[0044] 評価値予測部202は、評価値入力部201によって求められた正規化合成条件と正規化評価値 $D_N := \{(\sim x_n, \sim y_n') \mid n=1, \dots, N\}$ を用いて、これまでに試行したことがない合成条件 $\sim x$ がとる評価値 $\sim y$ を予測

する。ここで、以下では、 $\tilde{y}$ を平均 $\mu(\tilde{x})$ 、分散 $\sigma^2(\tilde{x})$ の正規分布に従う確率変数

[0045] [数11]

$$\tilde{y} \sim \mathcal{N}(\mu(\tilde{x}), \sigma^2(\tilde{x})) \quad (4)$$

として、 D_N を用いて、合成条件 $\tilde{x}$ に依存する $\mu(\tilde{x})$ 、 $\sigma^2(\tilde{x})$ をガウス過程により算出する。

[0046] ガウス過程では、 $\tilde{y}_1'$ 、 $\dots$ 、 $\tilde{y}_N'$ の同時分布を以下の共分散行列 K_N を持つ正規分布としてモデル化する。

[0047] [数12]

$$\begin{bmatrix} \tilde{y}_1' \\ \vdots \\ \tilde{y}_N' \end{bmatrix} = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{K}_N) \quad (5)$$

$$K_{mn} = k(\tilde{x}_m, \tilde{x}_n) \quad (6)$$

ここで、 K_{mn} は共分散行列 K_N の m 行 n 列の要素である。共分散行列 K_N の各要素を構成する $k(\tilde{x}_m, \tilde{x}_n)$ はカーネル関数と呼ばれ、 $\tilde{x}_m$ と $\tilde{x}_n$ の類似度を表している。すなわち、 $\tilde{x}_m$ と $\tilde{x}_n$ が似通った値である場合、 K_{mn} は大きな値を取り、その結果、 $\tilde{y}_m'$ と $\tilde{y}_n'$ の相関が高まる（似通った値を取りやすい）というモデルである。本実施形態では、一例として、カーネル関数 k にはRBF（radial basis function）カーネルを採用した。

[0048] カーネル関数 k であるRBFカーネルである場合、 $\tilde{x}_m$ と $\tilde{x}_n$ が D 次元ベクトルであるとき、これらに対して、カーネル関数 k は、以下で表される。

[0049]

[数13]

$$k(\tilde{x}_m, \tilde{x}_n) = A \exp(-\Delta) \quad (7)$$

$$\Delta = \sum_{d=1}^D (\tilde{x}_{m,d} - \tilde{x}_{n,d})^2 \quad (8)$$

ここで、 $A > 0$ はカーネル関数に与えられるパラメータである。

[0050] なお、カーネル関数 k として R B F カーネル以外の他のカーネル関数を採用してもよい。例えば、合成条件 $\sim x$ に対する評価値の変化が急峻な場合等には、非特許文献 2 に記載されている M a t e r n カーネルを採用してもよい。これ以外にも、必要に応じて様々なカーネル関数を採用することができる。

[0051] このとき、評価値予測部 202 は、上記のカーネル関数 $k(\cdot, \cdot)$ と D_N を用いて、以下により式 (4) の $\mu(\sim x)$ 、 $\sigma^2(\sim x)$ を計算する。

[0052] [数14]

$$\begin{aligned} \mu(\tilde{x}) &= \mathbf{l}_N^\top \mathbf{K}_N^{-1} \tilde{\mathbf{y}}_N, \\ \sigma^2(\tilde{x}) &= k(\tilde{x}, \tilde{x}) - \mathbf{l}_N^\top \mathbf{K}_N^{-1} \mathbf{l}_N, \\ \mathbf{l}_N &= [k(\tilde{x}, \tilde{x}_1), \dots, k(\tilde{x}, \tilde{x}_N)]^\top, \\ \tilde{\mathbf{y}}'_N &= [\tilde{y}'_1, \dots, \tilde{y}'_N]^\top. \end{aligned} \quad (9)$$

したがって、この正規分布のパラメータを用いて、式 (4) により未試行の合成条件 $\sim x$ に対する評価値を予測することができる。なお、これにより、合成条件と評価値の関係が陽に記述される。

[0053] 合成条件探索部 203 は、式 (4) で予測される評価値の分布を用いて、より良い評価値 $\sim y$ を与える合成条件 $\sim x$ を探索する。ここで、式 (9) により、或る合成条件 $\sim x$ が与えられると、それに対応する $\mu(\sim x)$ 、 $\sigma^2(\sim x)$

）が求まる。そこで、或る合成条件 $\tilde{x}$ の良さの尺度として、これまでの試行における評価値の最高値

[0054] [数15]

$$\tilde{\eta} = \max_{1 \leq n \leq N} \tilde{y}'_n$$

からの改善の期待値

[0055] [数16]

$$\begin{aligned} a(\tilde{x}) &= \int_{\tilde{\eta}}^{\infty} (\tilde{y} - \tilde{\eta}) p(\tilde{y}) d\tilde{y} \\ &= (\mu(\tilde{x}) - \tilde{\eta}) \Phi\left(\frac{\mu(\tilde{x}) - \tilde{\eta}}{\sigma(\tilde{x})}\right) + \sigma(\tilde{x}) \phi\left(\frac{\mu(\tilde{x}) - \tilde{\eta}}{\sigma(\tilde{x})}\right) \end{aligned} \quad (10)$$

を用いる。ただし、 $p(\tilde{y})$ は平均 $\mu(\tilde{x})$ 、分散 $\sigma^2(\tilde{x})$ の正規分布の確率密度関数である。また、 $\Phi(\cdot)$ 及び $\phi(\cdot)$ はそれぞれ、平均 0、分散 1 の標準正規分布の累積密度関数及び確率密度関数である。

[0056] なお、式 (10) に示す例では評価値の改善の期待値（参考文献 1）を用いたが、他の基準を用いても探索の効率化を図ることができる（参考文献 2 及び 3）。

[0057] これにより、良い合成条件 $\tilde{x}$ を探索する問題は、式 (10) を大きくする合成条件 $\tilde{x}$ を探索する問題

[0058] [数17]

$$\tilde{x}_{N+1} = \underset{\tilde{x}}{\operatorname{argmax}} a(\tilde{x}) \quad (11)$$

へと帰着する。

[0059] ここで、合成条件 $\sim x$ の探索空間の次元が大きい場合、式(10)を評価する点の数が、次元の指数関数として増加してしまう。そこで、式(10)の評価回数を小さくする工夫として、まず粗いグリッドで式(10)を評価した後、改善の期待値が高い上位数個の点を頂点に持つ領域を選択し、その領域内においてグリッドの解像度を上げて評価することで、近似的に式(11)の最大化を行う。言い換えれば、まず探索空間内を粗い解像度のグリッドで探索及び評価した後、その評価結果が高い上位数個の点を頂点に持つ領域内でより細かい解像度のグリッドで探索及び評価する。

これにより、式(10)の期待値を近似的に最大化する合成条件 $\sim x_{N+1}$ が得られる。

[0060] 合成条件出力部204は、合成条件探索部203により探索された合成条件 $\sim x_{N+1}$ の各要素に対して、以下の式(12)に示す逆正規化処理(正規化を元に戻す処理)を行って、 $x_{N+1} = [x_{N+1,1}, \dots, x_{N+1,D}]^T$ を出力する。

[0061] [数18]

$$x_{N+1,d} = \underline{x}_d + \tilde{x}_{N+1,d} (\bar{x}_d - \underline{x}_d) \quad (12)$$

これにより、 $N+1$ 回目の試行では合成条件 x_{N+1} により物質(試料)の生成とその評価とが行われる。なお、この合成条件 x_{N+1} は記憶部205に記憶される。

[0062] 記憶部205は、これまでの試行で得られた合成条件とその評価値 $\{(x_n, y_n) \mid n=1, \dots, N\}$ を記憶する。また、記憶部205は、それらの正規化合成条件と正規化評価値 $\{(\sim x_n, \sim y_n') \mid n=1, \dots, N\}$ を記憶する。

[0063] <合成条件生成処理>

次に、本実施形態に係る合成条件生成処理について、図5を参照しながら説明する。なお、以下では、 N 回の試行が行われた下で、 $N+1$ 回目の試行

でより良い評価値を与える合成条件 x_{N+1} を生成する場合について説明する。

[0064] まず、評価値入力部 201 は、前回の試行 N の評価値 y_N を入力する（ステップ S101）。この評価値 y_N は前回の試行 N における合成条件 x_N と対応付けて (x_N, y_N) として記憶部 205 に記憶される。なお、前回の試行 N における合成条件 x_N は記憶部 205 に既に記憶されていることに留意されたい。

[0065] 次に、評価値入力部 201 は、これまでの評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) を式 (1) の変換処理により y_n' にそれぞれ変換する（ステップ S102）。

[0066] 次に、評価値入力部 201 は、これまでの合成条件 x_n ($n = 1, \dots, N$) と変換処理後の評価値 y_n' ($n = 1, \dots, N$) を正規化処理によりそれぞれ正規化する（ステップ S103）。

[0067] すなわち、評価値入力部 201 は、式 (2) により合成条件 x_n を正規化して正規化合成条件 $\sim x_n$ を生成すると共に、式 (3) により変換処理後の評価値 y_n' を正規化した正規化評価値 $\sim y_n'$ を生成する。これらの正規化合成条件と正規化評価値 $(\sim x_n, \sim y_n')$ は記憶部 205 に記憶される。

[0068] 以下のステップ S104～ステップ S107 は、探索空間内の未試行の合成条件 $\sim x$ に対して繰り返し実行される。なお、上述したように、まず探索空間内の粗いグリッドを未試行の合成条件として以下のステップ S104～ステップ S107 を繰り返した後、改善の期待値が高い上位数個の点を頂点に持つ領域を選択し、その領域内においてグリッドの解像度を上げてそれらのグリッドを未試行の合成条件として以下のステップ S104～ステップ S107 を繰り返すことが好ましい。以下では、或る繰り返しにおけるステップ S104～ステップ S107 について説明する。

[0069] 評価値予測部 202 は、探索空間内から未試行の合成条件 $\sim x$ を選択する（ステップ S104）。

[0070] 次に、評価値予測部 202 は、上記のステップ S104 で選択した合成条件 $\sim x$ の評価値を予測する（ステップ S105）。具体的には、評価値予測部

202は、合成条件 $\sim x$ の評価値の分布を決定する平均 $\mu(\sim x)$ 、分散 $\sigma^2(\sim x)$ を式(9)により計算する。

[0071] 次に、合成条件探索部203は、式(4)で予測される評価値の分布を用いて、式(10)の期待値(N回目までの試行で得られた最高評価値からの改善の期待値)を計算する(ステップS106)。

[0072] そして、合成条件探索部203は、上記のステップS106で得られた期待値を評価(例えば、これまでに得られた期待値を昇順又は降順にソートしたり、最大値を特定したりする等)する(ステップS107)。

[0073] 以上のステップS104～ステップS107が繰り返されることで、式(11)に示す合成条件 $\sim x_{N+1}$ が近似的に得られる。

[0074] 合成条件出力部204は、上記のステップS104～ステップS107の繰り返しで最終的に得られた合成条件 $\sim x_{N+1}$ に対して式(12)の逆正規化処理を行って、合成条件 x_{N+1} を生成する(ステップS108)。なお、この合成条件 x_{N+1} は記憶部205に記憶される。

[0075] そして、合成条件出力部204は、上記のステップS108で得られた合成条件 x_{N+1} を物質生成装置20に出力する(ステップS109)。

[0076] 以上により、N+1回目の試行の合成条件 x_{N+1} が得られる。したがってN+1目の試行では、この合成条件 x_{N+1} に従って物質生成装置20で試料(物質)が生成され、この試料が物質評価装置30で評価されて評価値 y_{N+1} が測定される。このような試行が所定の回数繰り返されることで、最も良い評価値(例えば、最大の評価値)が測定された試料の生成に用いられた合成条件が、最適な物質が得られる合成条件として得られる。

[0077] <実験結果>

以下、本実施形態に係る合成条件生成システム1による2種類の実験結果について説明する。1つ目はシミュレーションデータを用いた実験(以下、シミュレーション実験という。)であり、2次元の合成条件の探索空間がシミュレーションデータとして与えられた場合である。2つ目は SrRuO_3 を分子線エピタキシー法で生成する実験(以下、 SrRuO_3 実験という。)で

ある。

[0078] シミュレーション実験

本実験では、以下の式（13）で表される評価値を用いた。

[0079] [数19]

$$y = \exp(-\|M_0(x - c_0)\|_1) + \exp(-(x - c_1)^T M_1(x - c_1)) \quad (13)$$

ただし、各定数の値はそれぞれ以下である。

[0080] [数20]

$$M_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0.3 \\ 0.3 & 1.5 \end{bmatrix}, \quad M_1 = \begin{bmatrix} 1.3 & -0.5 \\ -0.5 & 0.8 \end{bmatrix}, \quad (14)$$

$$c_0 = [0.5, 0.5]^T, \quad c_1 = [-0.7, -0.4]^T \quad (15)$$

また、 $\|v\|_1 = \sum_d |v_d|$ はベクトル v の L_1 ノルムを表す。

[0081] 上記の評価値は $x \doteq [0.48, 0.52]^T$ 付近で $y \doteq 1.24$ と最大となる。

[0082] 合成条件の探索範囲は $x \in [-1, 1] \times [-1, 1]$ である。ただし、

[0083] [数21]

$$x_1^2 + x_2^2 \leq 1 \quad (16)$$

の範囲内でのみ評価値は式（13）に従い、それ以外の範囲では $y = \text{NaN}$ となる。本実験で用いた評価値を図示すると図6のようになる。

[0084] 本実験の結果を図7に示す。図7において、Our methodが本実施形態に係る合成条件生成システム1を表す。padは従来手法であり、N

a Nを評価値0として扱う手法である。図7においては、横軸が評価値を得る試行回数、縦軸がその試行までに得たNaNを除く最高評価値を示している（すなわち、グラフが左上（より少ない試行でより高い評価値）にあるほど良い。）。

[0085] 図7に示すように、Our methodでは15回程度の試行回数で評価値が1.20を超えた一方で、padでは試行回数が30回を超えても評価値が1.20未満である。このため、Our methodでは、従来手法よりも、より少ない試行回数でより良い評価値が得られていることがわかる。

[0086] ・SrRuO₃実験

合成条件の各要素とその探索範囲を以下の表1に示す。

[0087] [表1]

要素	探索範囲
Ru 供給量	[0.1, 0.8] (Å/s)
基板温度	[550, 750] (K)
オゾンノズル距離	[1, 31] (mm)

評価値は残留抵抗比 $y := \rho(300\text{ K}) / \rho(4\text{ K})$ を用いた。ただし、薄膜生成に用いられた合成条件xの値によっては $y = \text{NaN}$ である。

[0088] 本実験の結果を図8に示す。図8において、横軸が評価値を得る試行回数、縦軸がその試行までに得た最高評価値を示している。図8に示すように、試行回数の増加に応じて継続した評価値の改善が確認できる。

[0089] <まとめ>

以上のように、本実施形態に係る合成条件生成システム1では、物質生成に成否のある合成条件空間において自動的に探索を行って評価値の良い合成条件を発見できるため、例えば、新材料の創出等に活用することができる。

また、本実施形態に係る合成条件生成システム 1 では、従来手法よりも少ない試行回数で評価値の最適化（最大化又は最小化）が可能となり、新材料の開発期間・開発時間の削減やコスト削減といった効果が期待できる。

[0090] 本発明は、具体的に開示された上記の実施形態に限定されるものではなく、請求の範囲の記載から逸脱することなく、種々の変形や変更、既知の技術との組み合わせ等が可能である。

[0091] [参考文献]

参考文献 1 : J. Mockus, V. Tiesis, and A. Zilinskas: The application of Bayesian methods for seeking the extremum, Towards Global Optimization 2, 1978.

参考文献 2 : N. Srinivas, A. Krause, S. Kakade, and M. Seeger: Gaussian Process Optimization in the Bandit Setting: No Regret and Experimental Design, International Conference on Machine Learning, 2010.

参考文献 3 : E. Contal, V. Perchet, and N. Vayatis: Gaussian Process Optimization with Mutual Information, International Conference on Machine Learning, 2014.

符号の説明

[0092]

1	合成条件生成システム
1 0	合成条件生成装置
2 0	物質生成装置
3 0	物質評価装置
1 0 1	入力装置
1 0 2	表示装置
1 0 3	外部 I / F
1 0 3 a	記録媒体
1 0 4	通信 I / F
1 0 5	R A M
1 0 6	R O M

1 0 7	補助記憶装置
1 0 8	プロセッサ
1 0 9	バス
2 0 1	評価値入力部
2 0 2	評価値予測部
2 0 3	合成条件探索部
2 0 4	合成条件出力部
2 0 5	記憶部

請求の範囲

[請求項1] 合成条件に従った物質の生成と前記物質を評価する評価値の測定と前記合成条件の生成とを順に実行する試行における前記合成条件を生成するための合成条件生成方法であって、

これまでのN回の試行の中で物質の評価値 $y_{n'}$ ($n' \in \{1, \dots, N\}$) が測定できなかった試行 n' が存在する場合、試行 n' における評価値 $y_{n'}$ を最悪の評価値に置き換える評価値変換手順と、

試行 n ($n = 1, \dots, N$) における合成条件 x_n 及び評価値 y_n を用いて、未試行の合成条件 x の評価値 y を予測する予測手順と、

前記未試行の合成条件 x の評価値 y を予測した結果を用いて、評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) の最良値よりも良い評価値を取る合成条件を、試行 $N+1$ における合成条件 x_{N+1} として生成する生成手順と、

をコンピュータが実行する合成条件生成方法。

[請求項2] 前記予測手順は、

試行 n ($n = 1, \dots, N$) における合成条件 x_n 及び評価値 y_n を用いて、前記未試行の合成条件 x に依存する平均 $\mu(x)$ 及び分散 $\sigma^2(x)$ を前記予測の結果として計算し、

前記生成手順は、

前記平均 $\mu(x)$ 及び分散 $\sigma^2(x)$ を用いて、前記未試行の合成条件 x の評価値 y が前記最良値よりも良い評価値を取る期待値を計算し、前記期待値が最大となる未試行の合成条件を前記合成条件 x_{N+1} として生成する、請求項1に記載の合成条件生成方法。

[請求項3] 前記予測手順は、

合成条件の探索空間内における所定の第1の解像度のグリッド点から未試行の合成条件 x を選択し、選択した前記未試行の合成条件の評価値 y を予測し、

前記第1の解像度のグリッド点から前記未試行の合成条件 x がすべ

て選択された後は、前記期待値が高い順に所定の個数の前記未試行の合成条件 x を選択し、選択した前記未試行の合成条件 x を頂点に持つ領域内において、前記第 1 の解像度よりも高い第 2 の解像度のグリッド点から未試行の合成条件 x を選択し、選択した前記未試行の合成条件の評価値 y を予測する、請求項 2 に記載の合成条件生成方法。

[請求項4]

前記合成条件生成方法には、

試行 N における合成条件 x_N と前記評価値 y_N とを正規化する正規化手順が更に含まれ、

前記予測手順は、

正規化後の合成条件 x_n 及び評価値 y_n を用いて、前記未試行の合成条件 x の評価値 y を予測する、請求項 1 乃至 3 の何れか一項に記載の合成条件生成方法。

[請求項5]

前記評価値変換手順は、

試行 n ($n = 1, \dots, N$) におけるすべての評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) が測定できなかった場合、 $y_N = 0$ とする、請求項 1 乃至 4 の何れか一項に記載の合成条件生成方法。

[請求項6]

合成条件に従った物質の生成と前記物質を評価する評価値の測定と前記合成条件の生成とを順に実行する試行における前記合成条件を生成するための合成条件生成装置であって、

これまでの N 回の試行の中で物質の評価値 $y_{n'}$ ($n' \in \{1, \dots, N\}$) が測定できなかった試行 n' が存在する場合、試行 n' における評価値 $y_{n'}$ を最悪の評価値に置き換える評価値変換部と、

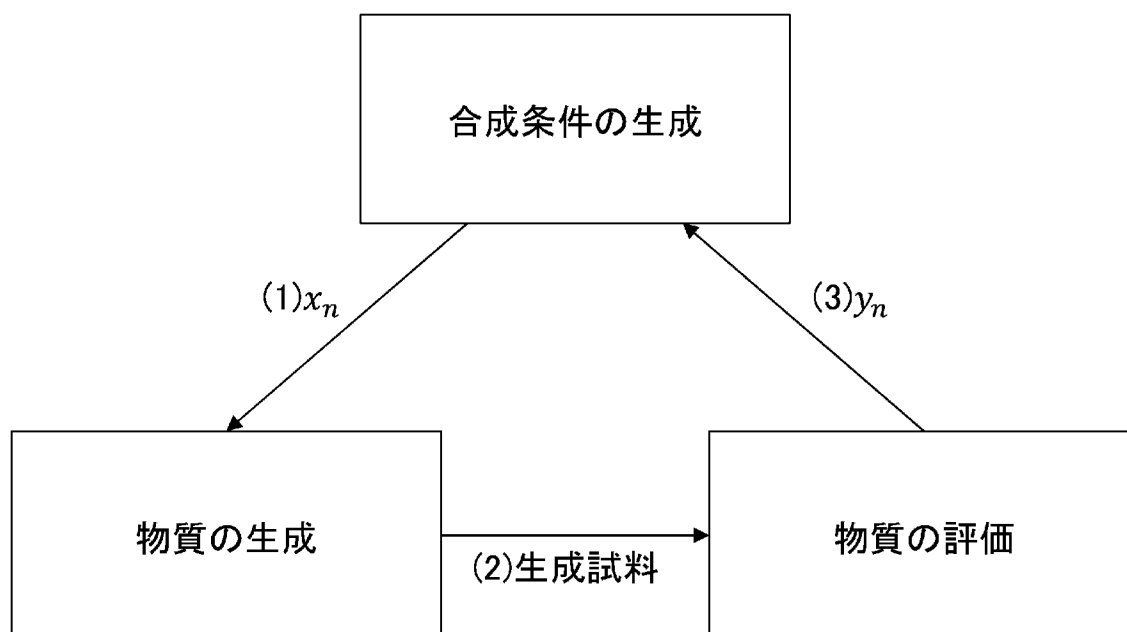
試行 n ($n = 1, \dots, N$) における合成条件 x_n 及び評価値 y_n を用いて、未試行の合成条件 x の評価値 y を予測するように構成されている予測部と、

前記未試行の合成条件 x の評価値 y を予測した結果を用いて、評価値 y_n ($n = 1, \dots, N$) の最良値よりも良い評価値を取る合成条件を、試行 $N + 1$ における合成条件 x_{N+1} として生成するように構

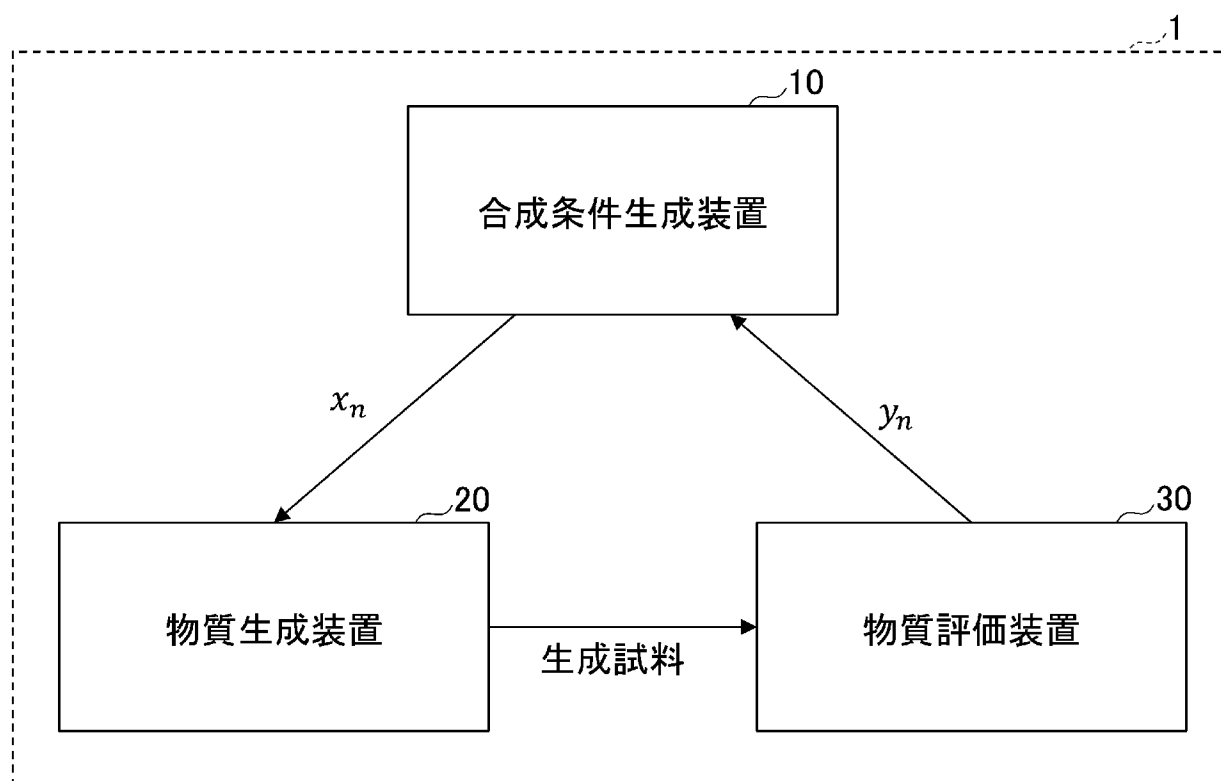
成されている生成部と、
を有する合成条件生成装置。

[請求項7] コンピュータに、請求項 1 乃至 5 の何れか一項に記載の合成条件生成方法を実行させるためのプログラム。

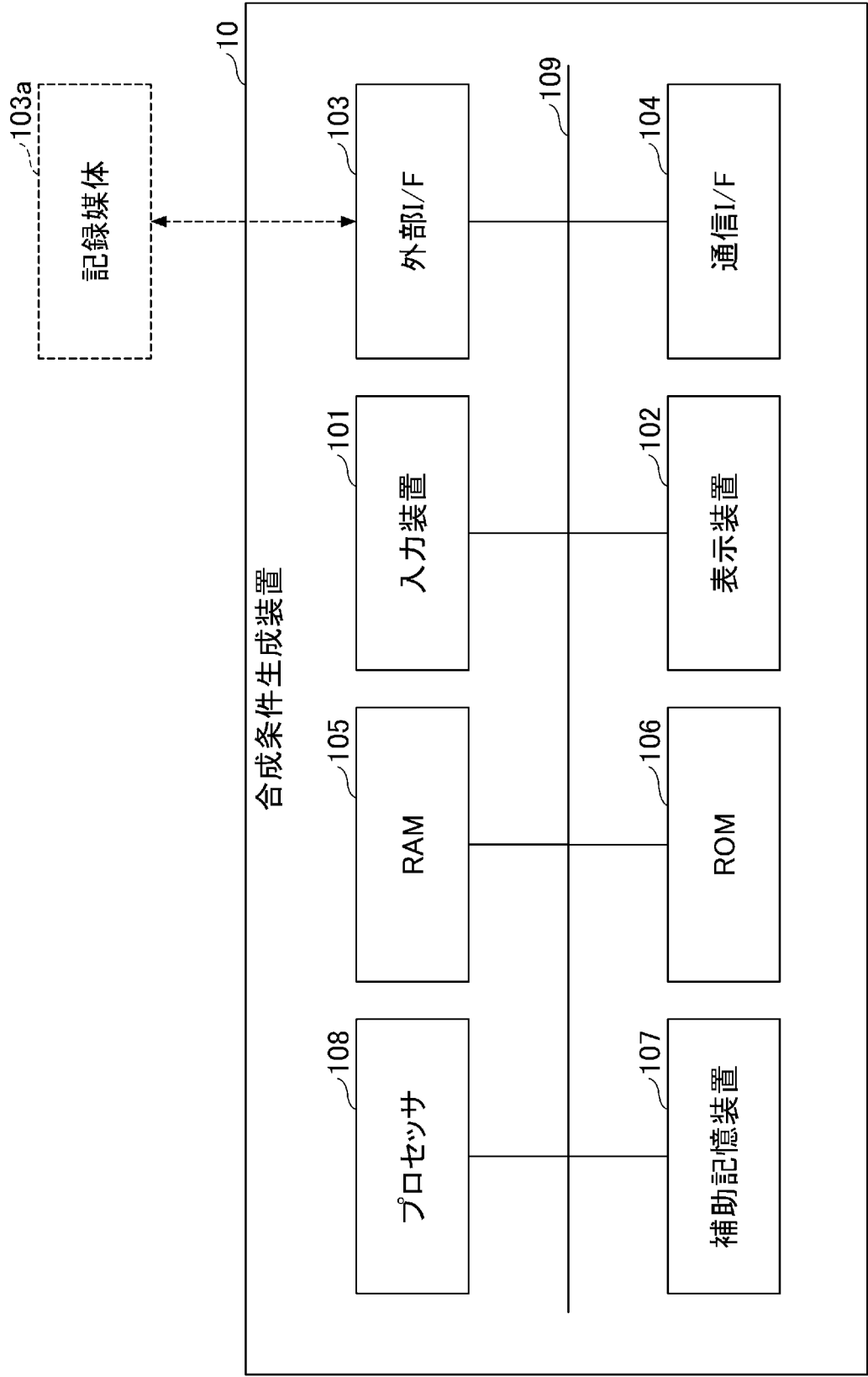
[図1]



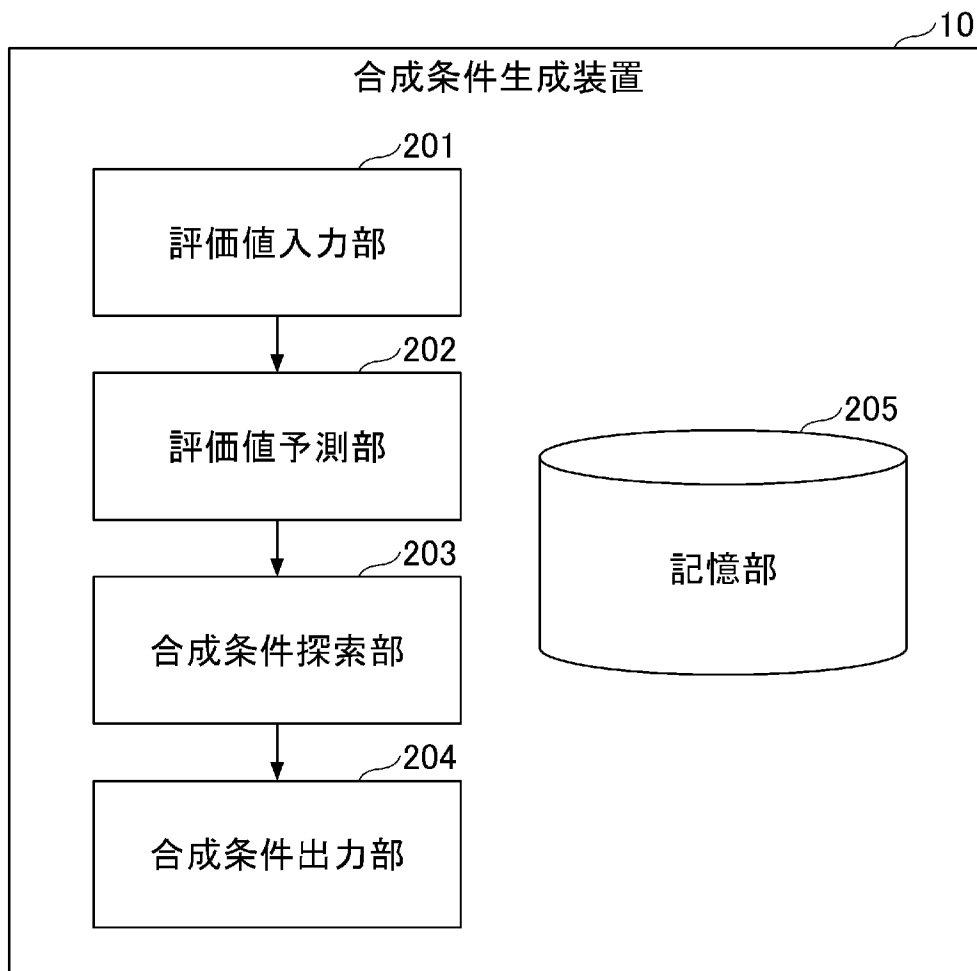
[図2]



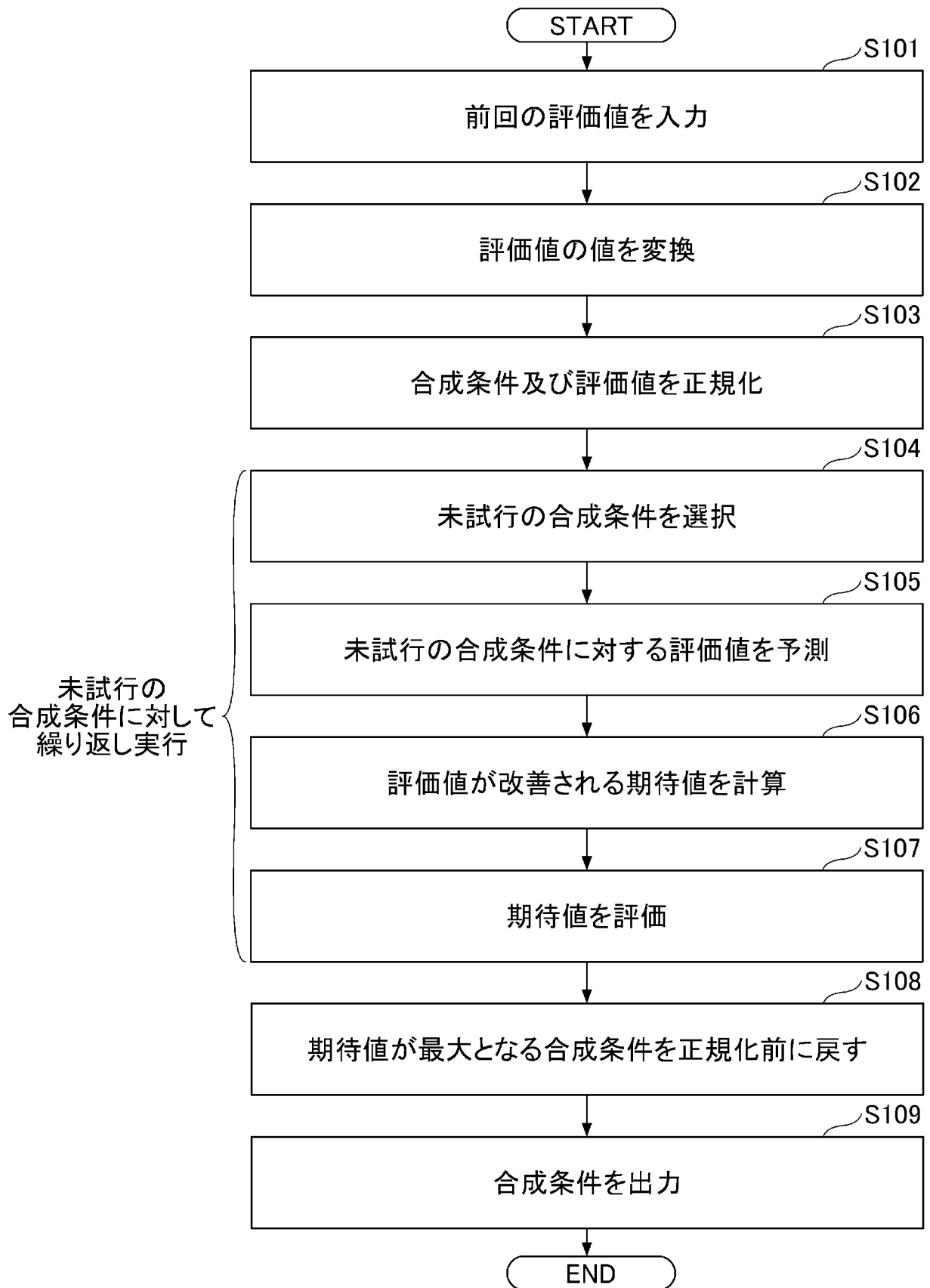
[図3]



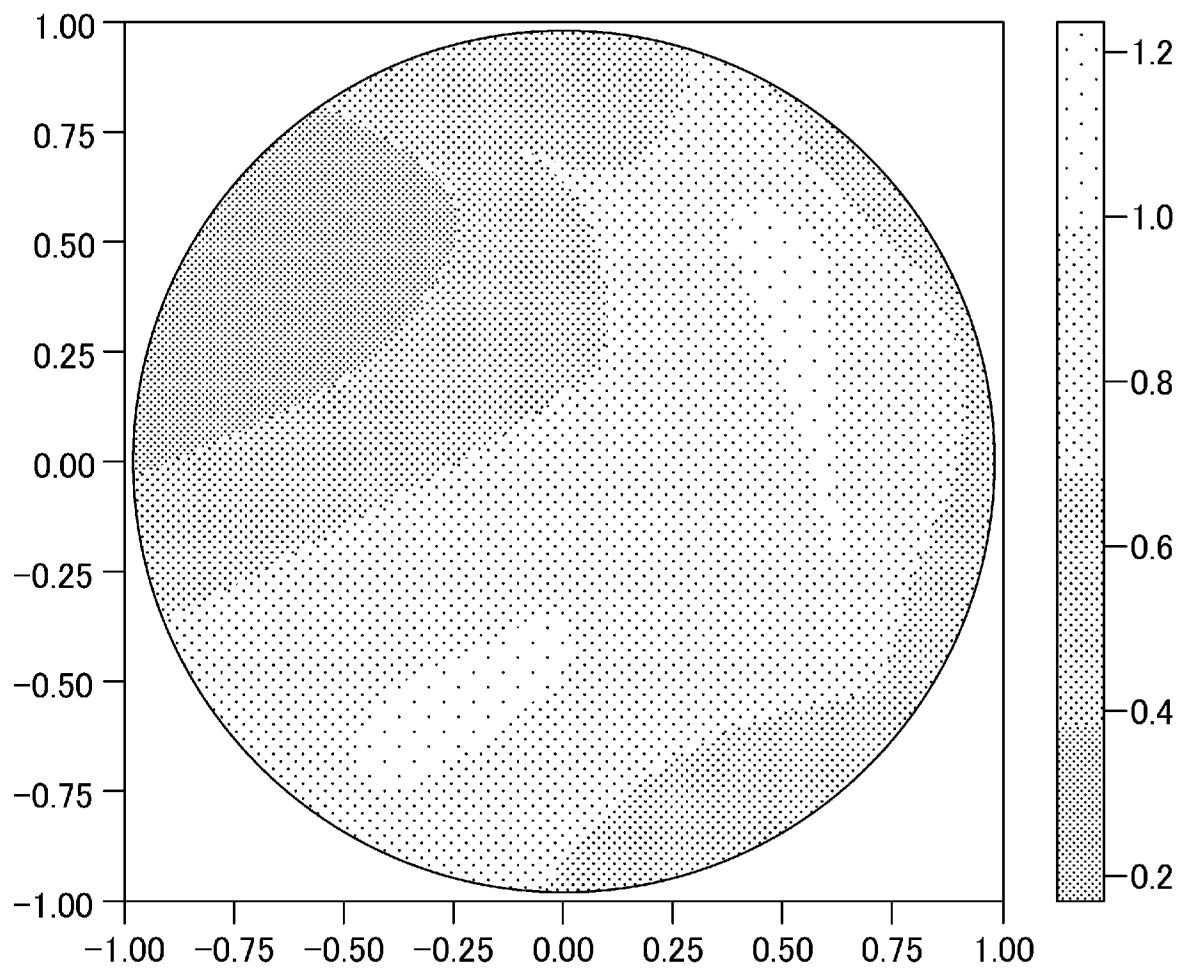
[図4]



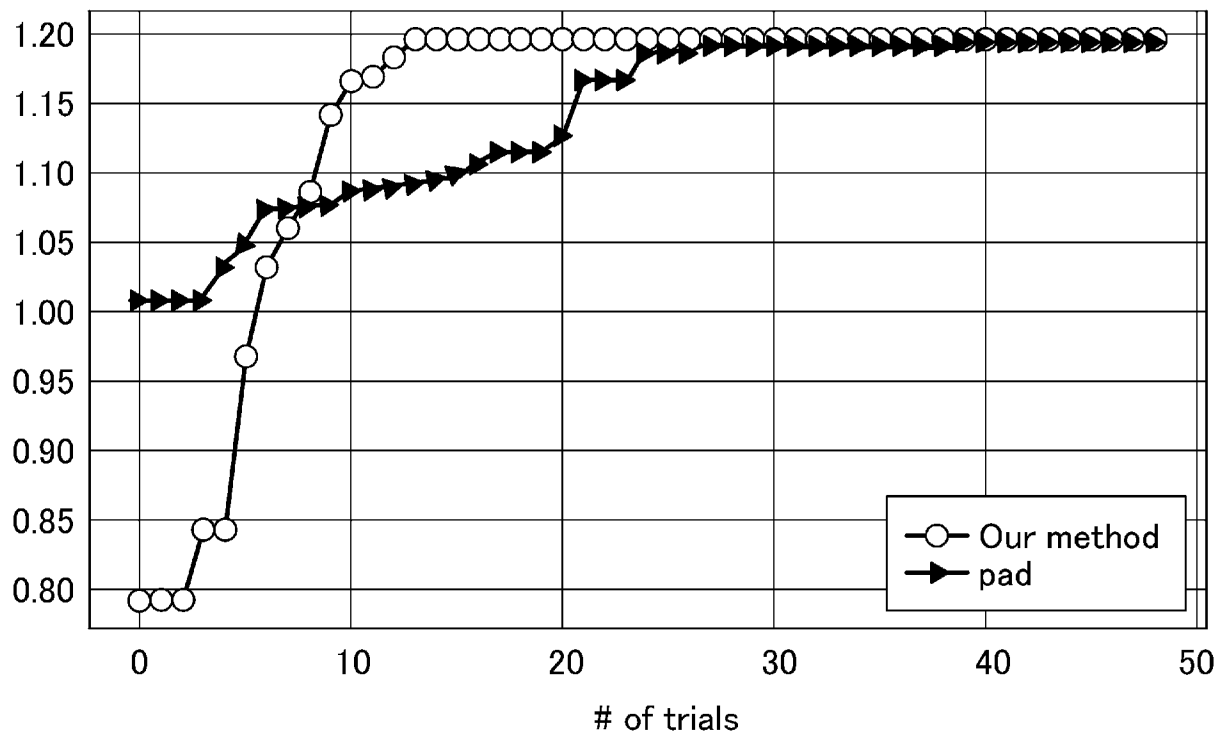
[図5]



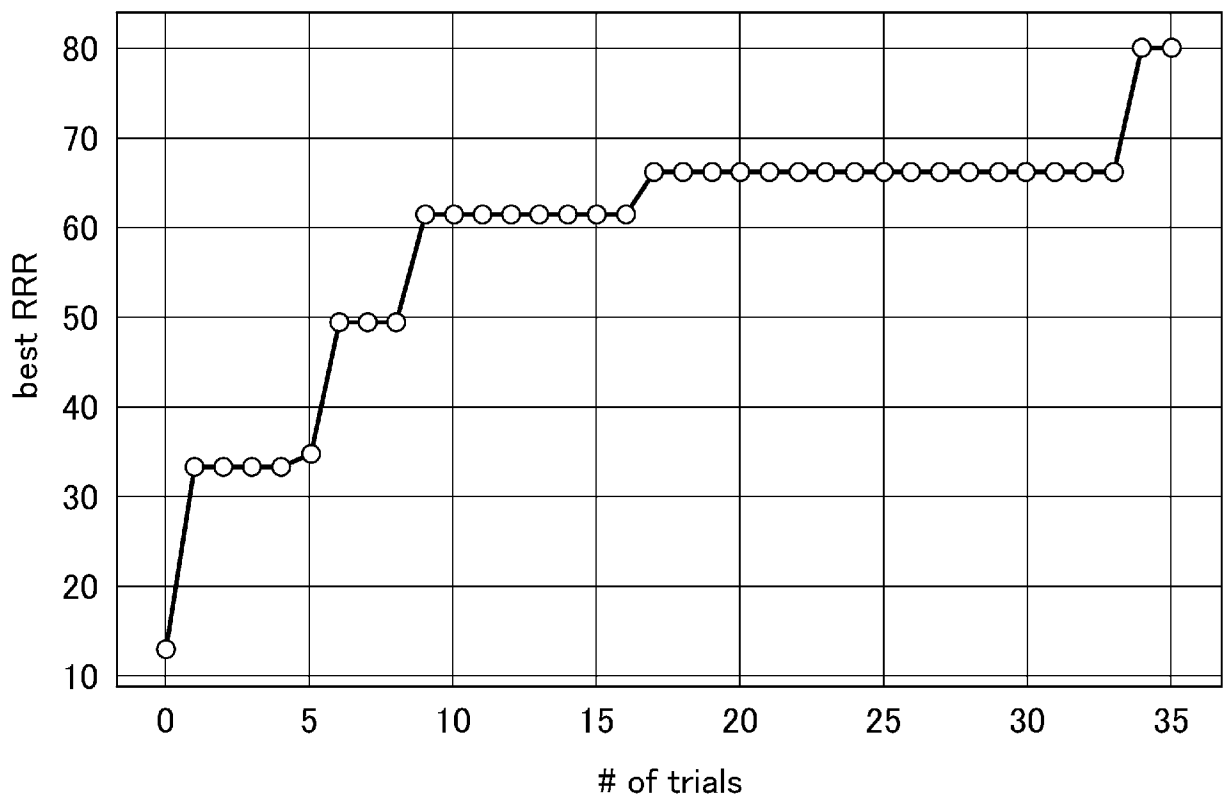
[図6]



[図7]



[図8]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/007265

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**G06N 99/00**(2019.01)i

FI: G06N99/00 180

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G06N99/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996

Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022

Registered utility model specifications of Japan 1996-2022

Published registered utility model applications of Japan 1994-2022

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	WAKABAYASHI, Yuki K. OTSUKA, Takuma. KROCKENBERGER, Yoshiharu. SAWADA, Hiroshi. TANIYASU, Yoshitaka. YAMAMOTO, Hideki. Machine-learning-assisted thin-film growth: Bayesian optimization in molecular beam epitaxy of SrRuO ₃ thin films. arXiv.org [online]. 02 August 2019, [retrieval date 10 May 2022], Internet<URL: https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1908/1908.00739.pdf >	1, 2, 4-7
A	II. EXPERIMENT, fig. 1	3
Y	JP 2020-027370 A (TOSHIBA CORP. KIOXIA CORP) 20 February 2020 (2020-02-20) paragraphs [0062]-[0064]	1, 2, 4-7
A	paragraphs [0062]-[0064]	3
A	JP 2020-187642 A (FUJITSU LTD) 19 November 2020 (2020-11-19) paragraphs [0001]-[0013]	1-7

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

10 May 2022

Date of mailing of the international search report

17 May 2022

Name and mailing address of the ISA/JP

Japan Patent Office (ISA/JP)
 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
 Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/007265

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
JP	2020-027370	A	20 February 2020	US	2020/0050717	A1	
				paragraphs [0078]-[0080]			
JP	2020-187642	A	19 November 2020	US	2020/0364594	A1	
				paragraphs [0001]-[0007]			
				EP	3739494	A2	
				CN	111951901	A	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G06N 99/00(2019.01)i FI: G06N99/00 180		
B. 調査を行った分野		
調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G06N99/00		
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2022年 日本国実用新案登録公報 1996-2022年 日本国登録実用新案公報 1994-2022年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	Yuki K. Wakabayashi, Takuma Otsuka, Yoshiharu Krockenberger, Hiroshi Sawada, Yoshitaka Taniyasu and Hideki Yamamoto, Machine-learning-assisted thin-film growth: Bayesian optimization in molecular beam epitaxy of SrRuO ₃ thin films, arXiv.org [online], 2019.08.02, [検索日 2022.05.10], インターネット<URL: https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1908/1908.00739.pdf > 「II. EXPERIMENT」及び「FIG. 1」	1, 2, 4-7
A	「II. EXPERIMENT」及び「FIG. 1」	3
Y	JP 2020-027370 A（株式会社東芝、キオクシア株式会社）20.02.2020（2020-02-20） 段落 [0062] - [0064]	1, 2, 4-7
A	段落 [0062] - [0064]	3
A	JP 2020-187642 A（富士通株式会社）19.11.2020（2020-11-19） 段落 [0001] - [0013]	1-7
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的な技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日 10.05.2022		国際調査報告の発送日 17.05.2022
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 川▲崎▼ 博章 5B 5284 電話番号 03-3581-1101 内線 3545

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/007265

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP	2020-027370	A	20.02.2020	US 2020/0050717 A1 段落 [0 0 7 8] - [0 0 8 0]	
JP	2020-187642	A	19.11.2020	US 2020/0364594 A1 段落 [0 0 0 1] - [0 0 0 7]	
				EP 3739494 A2	
				CN 111951901 A	