XRD・XRFを活用したオートメーションシステム
―材料開発から品質管理まで―

大渕　敦司*・上村　奨平**・笠利　実希***

近年，科学計測機器は測定の高速化・高精度化に加え，解析ソフトウェアやロボット技術との連携により，試料搬送から測定，解析，データ出力までを自動化した「データ生成装置」としてAI駆動科学の重要な要素技術として注目されている．本稿では，特にX線分析装置を用いたオートメーションシステムを，材料開発向けラボラトリーオートメーションシステムと，品質管理向け自動分析システムに大別し，それぞれの特長と導入効果について概説する．材料開発分野では，AIや機械学習と連携した自動・自律実験により，実験計画の効率化や開発期間の短縮，材料探索空間の拡張が期待される．一方，品質管理分野では，X線回折（XRD）分析による結晶相管理および蛍光X線（XRF）分析による元素組成管理を自動化することで，原料ばらつきの早期検知，工程判断の迅速化，人的ミスの低減，トレーサビリティの向上が可能となる．これらのシステムは，研究開発および製造現場における分析業務の省人化と高度化を実現する有効な手段である．

1.　はじめに

近年における分析装置の技術進歩は目覚ましく，その中でもX線回折装置では多彩な光学系，半導体検出器の利用により，非常に短時間で高品質な測定データが取得できるようになってきた．さらに測定・制御ソフトも進歩しており，測定データの取得だけではなく，解析，出力までを自動で行うことができる．このような機能を利用して，X線分析装置のオートメーション化が急速に進んでいる．

オートメーションシステムに関する研究は古くからあるが，コンピューターを用いた自動測定とシステム論に言及したのは大阪大学の南茂夫教授であろう[1),(2)]．南教授は，自身の背景である分光計測を物理分析機器としてシステム的に俯瞰してオートメーションシステムを論じている．そこでは，ラボラトリーオートメーションとファクトリーオートメーションの本質的差異についても論じられているが詳細は文献を参照してほしい．

オートメーションシステムは，材料開発用のラボラトリーオートメーションシステムと，品質管理用の品質管理自動分析システム（インダストリーオートメーションシステム）に大別できる．両システムに共通することとして，人間が担っていた装置への試料搬送，測定開始，データ解析・出力を自動化することで，人間はより創造的な仕事に従事する時間が生まれる．試料搬送はロボットが担い，測定から解析とデータ出力は分析装置が行う．また，試料前処理装置を組み合わせれば，試料調製から自動化することも可能である．これは，ユーザーの目的に合わせて，自動化レベルを選択できることを意味している．ここでは，ラボラトリーオートメーションシステムと，品質管理向け自動分析システムのそれぞれについて解説する．

2.　材料開発向けラボラトリーオートメーションシステム

近年，新規材料開発向けの自動・自律型ラボラトリーオートメーションシステムの普及が急速に進んでいる[3)]．自動化とは，人が決めた手順を装置・ロボットが自動で実行することである．一方，自律化とは，AIが測定結果を基に次の実験条件を判断・提案し，実験サイクルを継続することである．日本ではAI for Scienceが国家戦略として推進され，スパコンなどの研究基盤とAIを掛け合わせ，創薬や材料開発などの研究プロセスを飛躍的に加速させる取り組みだけではなく，科学研究方法そのものを変革することを目指した取り組みが進行中である[4)]．また，世界に目を向けると，アメリカではGenesis Mission[5)]が，欧州ではHorizon Europe[6)]がそれぞれ日本同様にAIによる科学研究の方法論そのものの変革，及び科学研究機器の進化を含めた材料開発戦略として推進されている．“ラボラトリーオートメーションシステム”はこれらの研

*株式会社リガクプロダクト本部　XRD
**株式会社リガクプロダクト本部　XRF
***株式会社リガクアプリケーションラボ　XRD分析グループ

© 2026 Rigaku Corporation.

究開発戦略を支える基盤技術として，材料開発を加速度的に推進させることができる．

ラボラトリーオートメーションシステムの概念図を図1に示す．ラボラトリーオートメーションシステムは，将来的には材料開発の無人化を目指しており，前述したように分析装置が担う測定，解析は自動化が進んでいる．一つの課題として試料搬送が挙げられるが，協働ロボット技術の普及により，解決できるようになってきた．これまでは装置内部に試料を搬送するのは人間が行っていたが，使用時に防護柵などの設置が不要な協働ロボットにより，多様な試料形状への対応が可能となっている．例えばウェハ試料や数cm角の小片に切り出したクーポン試料，粉末を圧縮成型したペレット試料などである．測定後はロボットが試料を自動で装置から搬出し，所定の場所に戻すことができる．

ラボラトリーオートメーションシステムでは自動化された試料前処理装置，複数の分析装置を連携させ，正しい順序で実行し，システム全体を統括するためのオーケストレーションソフトウェアが利用されている．異なるメーカー間の装置やロボットをシームレスに接続し，複数の実験タスクのタイミングを調整，装置稼働率を最大化することができる．

ラボラトリーオートメーションにAIを利用することで，装置・ロボットが担う自動化とAIが担う自律化のそれぞれの要素を組み合わせ，自動・自律実験として材料開発を行うことが盛んに研究されている[7]．AIには機械学習，ベイズ最適化，生成AIなど様々な手法があり，実験条件最適化に機械学習が広く利用されている．その用途としては自動測定により生成する膨大な数の測定データを学習し，学習した成果に基づいて未知のデータの予測や判断を行うことである．例えば，材料特性の向上を目的として，リートベルト解析から得られる結晶相比や結晶子サイズなどを目的関数として設定したとする．AIは測定データを学習し，これらの目的関数を最適化する次の実験条件を提案することができる．

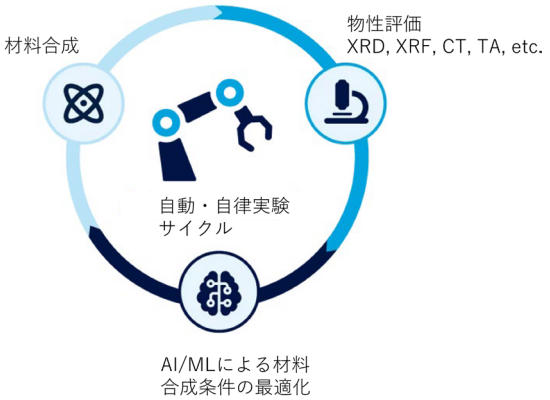


図1. ラボラトリーオートメーションシステムの概念図.

日本分析機器工業会(JAIMA)を中心に2024年に実験データフォーマットであるMaiML(Measurement Analysis Instrument Markup Language)がJIS規格として発行された[8]．MaiMLは，分析・計測データの共通記述形式として開発され，JIS K 0200:2024として工業標準化されたXMLベースのデータフォーマットである．従来の装置固有フォーマットでは困難だった，異なるメーカー・異なる分析装置間でのデータ共有を実現し，自動・自律実験と非常に親和性が高いデータフォーマットである．MaiMLの特長として，

・異なる分析機器間で利用可能な共通フォーマット
・計測分析プロセスの再現性
・測定データと実験条件(メタデータ)の表現
・計測分析のトレーサビリティ
・AIの活用
・改竄検知機能
・FAIR原則への対応[9]

が挙げられる．

MaiMLでは測定データに加え，試料情報，測定条件，前処理，解析条件，使用装置，操作者，履歴などを一つのファイルに記述でき，実験の再現性やトレーサビリティを確保できる構造となっている．また，装置固有フォーマットを共通形式で表現するため，異なる装置メーカー・異なる分析法のデータを統一的に扱える．MaiMLは単なる分析データフォーマットではなく，「AI・ロボット・分析装置が共通の言語で実験情報を共有するための共通基盤」である．これにより，実験計画，測定，解析，次実験へのフィードバックまでをデジタルに接続し，自律実験を支えるデータインフラとして機能する．MaiMLはこのような特長を有しており，自律実験と親和性が高い．

リガクでは，測定・解析ソフトウェアや自動化ハードウェアを統合した自動・自律実験のワークフローを構築・運用するためのモジュール式統合プラットフォームLabLinc Studioを提供しており，XRD・XRF装置と連携して自動測定・解析を実現できる．概要を図2に示す．また，装置共通自動化インターフェースソフトウェアとしてRAI(Rigaku Automation Interface)を提供しており，上位システムとリガク製品を繋ぐ共通インターフェースとして使用できる．



図2. LabLinc Studioの概要.

© 2026 Rigaku Corporation.

SmartLab を例に，リガクが提供する自動化システムの概要を図3に示す．上位システム(Host)とRAIが通信し，図の青枠内はリガク製品の範囲として試料の自動測定・自動解析を行う．ここで試料搬送ロボットは，リガク製品内で操作させることも，ユーザー側で操作することもできる．上位システムからは，Python スクリプトによってRAIにコマンドを送ることができる．SmartLab Studio II ソフトウェア上で予め測定シーケンスを組み，コマンドを送ることで上位から試料の分析を自動実行する．さらに，解析テンプレートを予め組むことで，測定データの自動解析の実行，解析結果の自動出力も可能である．ここではXRD装置を例に説明したが，XRD装置，XRF装置の両方を自動・自律実験用途として組み込むこともできる．

このような自動・自律実験を目的としたシステムとして，東京大学で薄膜試料を対象としたシステムが既に実用化されており[10),(11)]，SmartLabがシステムに組み込まれている．その装置の外観を図4に示す．本自動・自律実験システム用のSmartLabでは，10 mm×10 mm, 厚さ0.5 mmの薄膜試料を分析する．SmartLabには試料搬送用の自動扉が付いており，プロセス上流に組み込まれた薄膜合成システムで作製された試料が試料置台まで搬送された後に，COBOTTA PRO 900(株式会社デンソーウェーブ)が薄膜試料を掴み，自動扉を通してSmartLab内部に試料を搬送する．搬送された試料は吸着試料ホルダ上に置かれ，自動的に真空引きされ試料ホルダ上に吸着・固定する．その後，測定が自動で実行され，上位システムに測定データを送信する．究極的には人間が担うのは，薄膜合成用の試料ホルダーを補充するだけであり，24時間フル稼働することで，材料空間の探索を飛躍的に加速することができる．

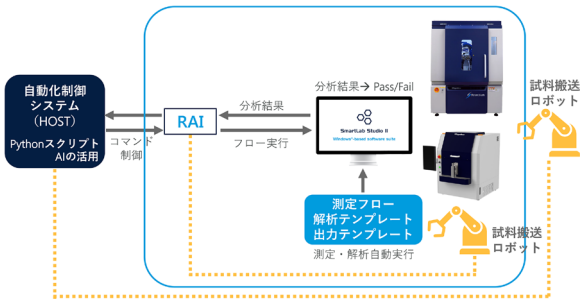


図3. AI駆動型材料探索ループへのX線分析装置の組み込み．



図4. 試料搬送用自動扉付きSmartLabの外観．

このような材料開発向けのラボラトリーオートメーションは徐々に普及しており，アカデミアだけではなく，産業界での活用も期待されている．

3. 品質管理向け自動分析システム

近年の製造業を取り巻く環境は，グローバル競争の激化，各国規制の強化，ならびに人材不足といった複合的な課題に直面している．これらの状況下において，製品品質の維持および向上は企業競争力の根幹を成す要素であり，従来にも増して高度かつ再現性の高い品質管理体制が求められている．特に，製品品質は製造工程のみならず原料段階のばらつきに大きく依存するため，品質管理の上流工程へのオートメーションシステムの適用が重要性を増している．

このような背景のもと，“品質管理向け自動分析システム”は，品質管理の高度化と省人化を同時に実現する有力なソリューションとして注目されている．センサー，分析装置，制御システム，データ管理基盤を統合したオートメーションシステムは，リアルタイムで取得した品質データを製造条件へ反映し，原料配合比やプロセス条件を自動的に最適化することで，工程内品質保証の実現に寄与する．

本稿では，XRDおよびXRFを中核とした品質・原料管理に焦点を当て，これらを品質管理向け自動分析システムに組み込む効果とその実例について概説する(図5)．あわせて，導入時の留意点および今後の展望についても考察する．

3.1. XRDによる結晶相管理と自動化

XRDは，原料や製品中に存在する結晶相に関する情報を取得できる代表的な分析手法である．結晶相とは，特定の原子配列および結晶構造によって特徴づけられる相を指す．同一の元素組成を有する物質であっても，結晶構造が異なれば発現する材料特性も異なる

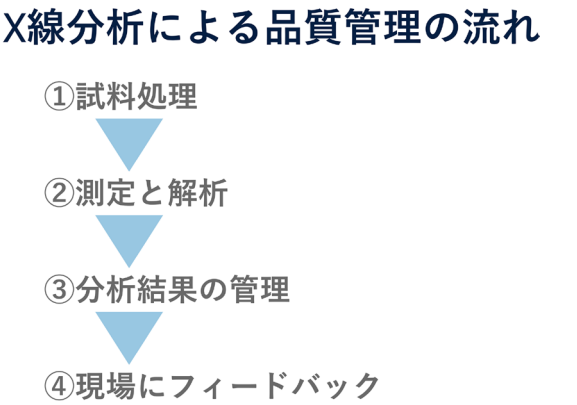


図5. X線分析を用いた品質管理フロー．

© 2026 Rigaku Corporation.

ため，品質管理において原料や製品の結晶相を評価することは重要である．XRD では，結晶相の同定や定量分析に加え，結晶子サイズや結晶化度の評価を行うことができる．

例えば，セメント分野では材料特性が含有する結晶相の組成比に大きく依存することが知られており，早期強度の発現や水和熱の抑制など，用途や要求性能に応じて適切な結晶相比に調整する必要がある[12]．また，電池分野では，構成材料中に存在する不純物相が充放電サイクル特性の低下を引き起こすことや，結晶子サイズが電池容量に影響を及ぼすことが報告されている[13]．以上のように，XRD は材料中の結晶学的情報を評価できる手法であり，品質管理において重要な役割を担っている．

3.1.1 品質管理用途における XRD の特長

XRD が品質管理に適している理由は，以下の点に集約される．

・結晶相情報の取得

元素の含有量を評価する元素分析法とは異なり，結晶相を直接分析できるため，材料特性と結晶相の関係を評価しやすい．

・少量試料での簡便な非破壊測定

少量の試料で分析でき，試料調製も容易である．また，試料を非破壊で測定できるため，測定後も試料をそのまま利用可能である．

・幅広い試料形態への適用

粉末試料だけでなく，バルク材やスラリー試料など，多様な試料形態に対応できる．

・試薬不要による低ランニングコスト

測定に試薬を使用しないため，試薬管理や廃液処理が不要である．

これらの特長により，XRD は結晶相に関する情報を簡便に取得できる品質管理ツールとして，多様な工業分野で利用されている．

3.1.2 品質管理用途に有用な XRD の機能

品質管理業務において有用な XRD の機能を以下に示す．

・テンプレート機能を用いた自動解析

測定対象材料ごとに解析条件を設定したテンプレートを作成しておくことで，測定終了後に解析処理を自動実行することが可能である．さらに，解析結果に対する演算処理も設定可能であり，例えば複数の結晶相の定量値の合計値や比率を自動的に算出できる．この機能により，オペレーターによる解析作業の負荷軽減および解析条件の標準化が図られる．

・リートベルト解析における定量値校正機能

あらかじめ他分析手法による測定値とリートベルト解析による定量値との相関関係を近似式として設定しておくことで，リートベルト解析の結果に対して補正を適用することが可能である．本機能により，既存分析法との整合性確保や，装置更新時における分析値の一貫性維持が容易となる．

・品質管理向けプラグイン EasyX

EasyX は品質管理用途に特化したソフトウェアプラグインであり，テンプレート機能と連携することで，測定，解析および結果出力の一連の処理を簡略化できる．また，分析結果の推移を時系列で表示するトレンドチャート機能を備えており，測定値の経時変化を容易に把握できる．そのため，工程異常や品質変動の早期検知に有効である．

これらの機能により，XRD を用いた品質管理業務の自動化および標準化が促進され，分析作業の効率化と測定結果の再現性向上が期待される．

3.2. XRF による元素組成管理と自動化

XRF は，材料中の元素組成を非破壊かつ迅速に評価できる分析手法として，製造業の品質管理で広く活用されてきた．特に原料受入検査や工程内管理，最終製品検査において，主成分から微量成分までを同一装置で定量可能である点は，他の分析手法にはない大きな特長である．

多くの製造プロセスでは，製品品質は原料中の化学成分比に強く依存する．したがって，元素組成の変動を早期に検知し，製造条件や原料配合へ即座に反映させることが，安定品質の実現に不可欠である．XRF はこうした工程内品質管理（in-process QC）を支える分析技術として重要な役割を担っている[14],[15]．

3.2.1. 品質管理用途における XRF の特長

XRF が品質管理に適している理由は，以下の点に集約される．

・迅速な分析

数分以内で分析結果が得られるため，工程判断を遅らせることなく品質管理が可能である．

・非破壊分析

試料を非破壊で測定でき，再測定やトレーサビリティ確保に有利である．

・幅広い濃度範囲への対応

ppm レベルから mass% レベル領域まで，一貫した分析手法で評価できる．

・試薬不要による低ランニングコスト

化学分析と比較して，試薬管理や廃液処理が不要である．

これらの特長により，「高精度分析」と「現場適用性」を両立する品質管理ツールとして，多くの工業分野で採用されている[15],[16]．

3.2.2. XRF 自動化による品質管理への効果

XRF を品質管理向け自動分析システムに組み込むことで，以下のような効果が得られる．

・原料組成のばらつきの早期検知による工程安定化

© 2026 Rigaku Corporation.

・分析から判定までの時間短縮による製造ロス削減
・人的ミスの低減と属人性の排除
・大量試料を対象とした定常的品質監視の実現

これらの効果により，XRF が工程制御に必要な情報を提供する品質管理インフラへと役割を拡張している[14),15),17)]．

3.3. 品質管理向け自動分析システムとの統合

XRD 装置と XRF 装置をオートメーションシステムに組み込んだ例を図 6 に示す．図 6 のように試料搬送ロボットを中心に配置し，その周囲に試料調製機および各種分析装置を配置したシステムが挙げられる．現在，品質管理向け自動分析に対応した XRD 装置としては，MiniFlex XpC, XRF 装置としては，ZSX Primus シリーズと Simultix 15 がある．

XRD および XRF における分析誤差の要因として，試料の粒径が大きいことや試料表面の粗さなどが考えられるため，前処理装置として粉砕機やプレス機が使用されている．試料は各前処理工程を経た後，試料搬送ロボットおよびベルトコンベアにより X 線分析装置へ搬送される．搬送された試料は X 線分析装置の自動ローディング機能により測定位置へ配置され，その後の測定と解析は自動で実行される．

X 線分析装置は上位の制御システムより測定指示を受け，測定および解析の完了後，分析結果を CSV ファイルやテキストファイル形式で上位 PC まで転送することが可能である（図 7）．これにより，作業者の習熟度に依存しない，高い再現性と信頼性を持つ品質管理が可能となる．

3.4. 品質管理向け自動分析システム導入による効果

近年の製造現場では，人材不足への対応や品質保証レベルの向上が求められている．特にセメント，鉄鋼，電池材料などの分野では，多数の試料を継続的に分析する必要があり，従来の手作業による品質管理では大きな負担となる．

品質管理向け自動分析システムを導入することで，試料前処理から搬送，測定，解析，結果出力までの一連の作業を自動化できる．その結果，

・分析業務の省人化
・夜間を含めた 24 時間品質監視
・人的ミスや判定のばらつきの低減
・製造工程への分析結果の迅速なフィードバック
・トレーサビリティの向上

が期待できる．

また，リガクの分析ソフトウェアでは分析結果の自動判定や統計処理，トレンド監視機能が搭載されている．測定結果が管理基準値から外れた場合には自動的に異常を検知できるため，品質異常の早期発見と迅速な工程改善に繋げることが可能である．

3.5. 適用事例：セメント工場における品質管理

セメント製造では，原料受入からクリンカ製造，最終製品出荷までの各工程で品質管理のための分析が実施されている（図 8）．製品性能は原料組成およびクリンカ鉱物組成に大きく依存するため，工程全体を通じた継続的な分析が必要となる．

元素組成管理には XRF が利用されている．例えば，高炉スラグなどの原料について，SiO_2, CaO, Al_2O_3 などの主要成分を短時間で分析することができる．分析結果は自動的に上位制御ソフトへ送信され，原料配合や製造条件の調整に利用される．

一方，クリンカ品質の管理には XRD が利用される．XRD とリートベルト解析を組み合わせることで，エーライト，ビーライトなどの鉱物組成を定量的に評価できる．測定から解析までを自動化することで，焼成条件の変化や品質異常を迅速に検知することが可能となる．

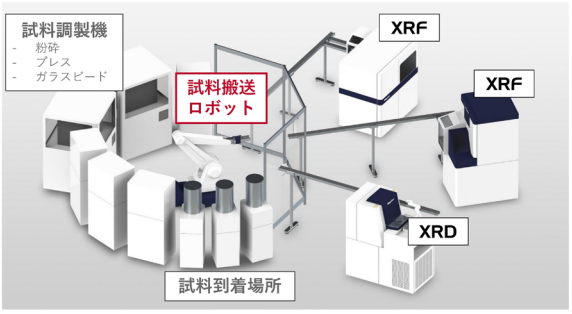


図 6. 品質管理向け自動分析システムの例．

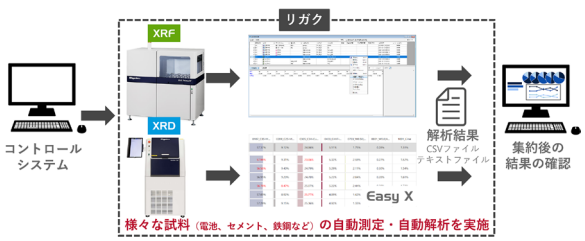


図 7. リガクオートメーションシステム利用時の一連流れ．

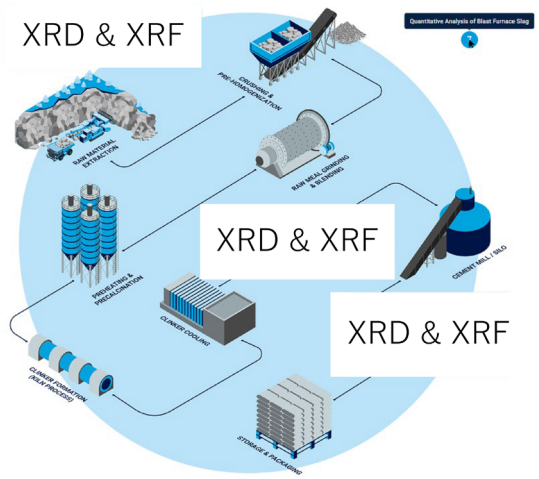


図 8. セメント工場での導入事例．

© 2026 Rigaku Corporation.

従来は，試料搬送や測定開始，結果確認を作業者が行っていたが，品質管理向け自動分析システムの導入によって，試料投入後は測定から解析結果出力までが自動で実行される．異常値が検出された場合には即座に工程へフィードバックされるため，不良品発生や製造ロスの抑制に寄与する．

4. おわりに

本稿では，X線分析装置を用いたオートメーションシステムについて，材料開発向けラボラトリーオートメーションシステムと，品質管理向け自動分析システムの観点から概説した．近年のX線分析装置は，測定の高速化・高精度化に加え，解析ソフトウェア，ロボット，試料前処理装置，上位制御ソフトと連携することで，試料調製から搬送，測定，解析，判定までを一連の流れとして自動化することが可能となっている．

材料開発分野では，AIや機械学習と組み合わせた自動・自律化実験により，実験計画の効率化や開発期間の短縮が期待される．また，AIだけでなくデータ標準化（MaiML）やロボット，クラウドを統合したデジタルラボが研究開発・品質管理双方の基盤となると考えられる．品質管理分野では，XRDによる結晶相管理およびXRFによる元素組成管理を自動化することで，工程判断の迅速化，人的ミスの低減，トレーサビリティの向上に寄与する．今後，分析装置，ロボット，データ管理統合ソフト，AIの連携が進むことで，X線分析装置は研究開発および製造現場におけるオートメーション化の中核技術として，さらに重要性を増していくと考えられる．

参 考 文 献

（1） 南　茂夫：精密機械，**50**（9）（1984），1–7.
（2） 南　茂夫：分光研究，**67**（2）（2018），66–69. JIS K 0200：2024 計測分析装置の分析データフォーマット，（2024）.
（3） CRDS-FY2025-WR-01：俯瞰ワークショップ報告書“材料研究開発における自動自律化の現在と将来，”（2025）
（4） The White House: Science: A New Golden Age, July 2026.
（5） Genesis Mission: https://www.energy.gov/undersecretaryforscience/genesis-mission/genesis-mission
（6） Horizon Europe: https://research-and-innovation.ec.europa.eu/funding/funding-opportunities/funding-programmes-and-open-calls/horizon-europe_en
（7） Gary, T.: *Chem. Rev.*, **124**（2024），9633－9732.
（8） JIS K 0200：2024 計測分析装置の分析データフォーマット，（2024）.
（9） Wilkinson, M. D., Dumontier, M., Aalbersberg, I. J., Appleton, G., Axton, M., Baak, A., ... and Mons, B.: *Scientific Data*, **3**（1）（2016），1–9.
（10） 相場　諒，西尾和記，一杉太郎：リガクジャーナル，**56**（2025），1–5.
（11） K. Nishio, A. Aiba, K. Takihara, Y. Suzuki, R. Nakayama, S. Kobayashi, A. Abe, H. Baba, S. Katagiri, K. Omoto, K. Ito, R. Shimizu, and T. Hitosugi: *Digit. Discov.*, **4**（2025），1734–1742.
（12） H. F. W. Taylor: Cement Chemistry 2nd Ed., Thomas Telford,（1997），pp. 1–3.
（13） J. Zhu, K. Yoo, A. Denduluri, W. Hou, J. Guo, D. Kisailus: *J. Mater. Res.*, **30**（2015），286–294.
（14） West, M.: *J. Process Control*, **20**（2010），735–741.
（15） Wagner, T., Mittermayr, F.: *Cement Int.*, **12**（2014），52–59.
（16） ASTM E1621: Standard Guide for Elemental Analysis by WDXRF.
（17） Qin, J.: *IEEE Trans. Ind. Info.*, **12**（2016），134–147.

© 2026 Rigaku Corporation.