

2023 年度年次報告書

未踏探索空間における革新的物質の開発

2021 年度採択研究代表者

岩崎 悠真

物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター
主任研究員

科学者の能力を拡張する階層的自律探索手法による新材料の創製

主たる共同研究者:

五十嵐 康彦 (筑波大学 システム情報系 准教授)

小嗣 真人 (東京理科大学 先進工学部 教授)

桜庭 裕弥 (物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究センター グループリーダー)

研究成果の概要

本研究では、第一原理計算と機械学習の組み合わせた『仮想空間自律探索 AI』と、ロボティクスと機械学習を組み合わせた『実空間自律探索 AI』と、先端光源等を活用した『マルチスケール・マルチモーダル計測・解析手法』と、材料科学の理解に重きを置いて解析を進める『科学者拡張 AI』を開発し、広大な材料空間を効率体に探索する。

本年度『仮想空間自律探索 AI』を開発する計算グループでは、アンサンブルニューラルネットワークと転移学習を活用した新たな仮想空間自律探索 AI を開発し、複数の自律探索 AI が連携しながら動作することで、より効率的に材料探索を行うことを可能にした¹⁾。

『実空間自律探索 AI』を開発する実験グループでは、組成傾斜薄膜の異方性磁気抵抗効果の簡便な測定から高いスピン分極率を評価し得ることを、非局所スピバルブ素子による精密評価との比較によって実証した²⁾。また FeCoIr 組成傾斜膜において Ir の異常ホール・ネルンスト効果に与える影響を緻密に解析し、Ir が外因性気候により異常ホール抵抗率を大幅に増大させることを解析的に示した。³⁾

『マルチスケール・マルチモーダル計測・解析手法』を開発する計測グループでは、放射光による磁気円二色性解析を実行し、磁気機能発現メカニズムを解析した。計算班と実験班が発見した FeCoIr について、複数のビームラインを用いて包括的な MCD 解析を実施した。またフェルミ面の自動解析の一環として、ミクロなフェルミ面とマクロな物性をデータ空間で接続することを試みた。

『科学者拡張 AI』を開発する情報グループでは、量子機械学習や、ベイズモデル平均化 (BMA) によって特徴量 (材料記述子) の確からしさを評価する枠組みを提案し、本手法を蓄電池材料、金属フリーの水素発生反応 (HER) 用電極触媒といった、少数の化学実データに応用した。^{4,5)} また、大規模言語モデルによる説明変数の意味を踏まえた機械学習モデル設計による科学者拡張 AI の展開を行った⁶⁾。

【代表的な原著論文情報】

- 1) J. Hwang, Y. Iwasaki, Improving efficiency of autonomous material search via transfer learning from nontarget properties, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods Volume 3*, 2023 - Issue 1
- 2) R. Toyama, V.K. Kushwaha, T. Sasaki, Y. Iwasaki, T. Nakatani, Y. Sakuraba, Combinatorial optimization for high spin polarization in Heusler alloy composition-spread thin films by anisotropic magnetoresistance effect, *APL Mater.* 11, 101127 (2023)
- 3) R. Toyama, W. Zhou, Y. Sakuraba, Extrinsic contribution to the anomalous Hall effect and Nernst effect in Fe₃Co single-crystal thin films by Ir doping, *Phys. Rev. B* 109, 054415 – Published 12 February 2024
- 4) H. Tobita, Y. Namiuchi, T. Komura, H. Imai, K. Obinata, M. Okada, Y. Igarashi, Y. Oaki, Capacity-prediction models for organic anode-active materials of lithium-ion batteries: advances in predictors using small data, *Energy Advances Volume 2, Issue 7*, 13 July 2023, Pages 1014-1021
- 5) W. Hamada, M. Hishida, R. Sugiura, H. Tobita, H. Imai, Y. Igarashic, Y. Oaki, Efficient design

and synthesis of an amorphous conjugated polymer network for a metal-free electrocatalyst of hydrogen evolution reaction, *Journal of Materials Chemistry A*, 2024,12, 3294-3303

- 6) K. Hatakeyama-Sato, S. Watanabe, N. Yamane, Y. Igarashi, K. Oyaizu, Using GPT-4 in parameter selection of polymer informatics: improving predictive accuracy amidst data scarcity and 'Ugly Duckling' dilemma, *Digital Discovery*, 2023,2, 1548-1557