

2024 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、仮想空間自律探索 AI によって、高いキュリー温度を持つ新規合金 (fcc-CoAuIr)¹⁾ や、B2 構造の新規ハーフメタル合金 (B2-Co_{1.0}Mn_{0.8}Al_{0.2})²⁾ や、新規高磁気異方性材料 (L10-FePtEr)³⁾ などが提案された。特に L10-FePtEr は実際の材料合成にも成功し、その高い材料特性を確認した。

『実空間自律探索 AI』を開発する実験グループでは、組成傾斜膜の異常ホール効果ハイスループット計測システムを用いて、重元素を置換した Fe,Co,Ni 薄膜の異常ホール測定を行った。ベイズ最適化による効率的な組成最適化や、NIMO によるコンビネーション成膜レシピの自動生成手法を構築した。これらの実験の結果、Fe₃Co-Ta や Fe_{44.9}Co_{27.9}Ni_{12.1}Ta_{3.3}Ir_{11.7} 系において、最大で一般的な Fe や Co よりも 2 桁近く大きなおよそ 10 μΩcm の異常ホール抵抗率を観測することに成功した。

『マルチスケール・マルチモーダル計測・解析手法』を実施する計測グループでは、Co₂MnGe_xGa_{1-x} 合金における結晶構造および電子状態の変化を、XPS および光電子ホログラフィーを用いてマルチスケール・マルチモーダルで解析した。得られた大規模データに網羅的相関解析を実施し、スピン偏極低下に関わる欠陥構造を同定した。特に、特定の構造欠陥がスピン偏極率に与える影響を直接明らかにした。

『科学者拡張 AI』を開発する情報グループでは、少量データ下のスパースモデリングで抽出される特徴量の不安定性を評価し、信頼度付きモデルを得る手法を開発した⁴⁻⁷⁾。これにより、膨大な特徴空間でも計算量爆発を抑制しつつ、不確かさ評価を実現し、信頼性の高い知見抽出が可能となった。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Y. Iwasaki et al. “Autonomous search for half-metallic materials with B 2 structure”, *Sci. Adv. Technol. Mater. Meth.* **4**, 1, 2403966 (2024)
- 2) Y. Iwasaki et al. “Autonomous search for materials with high Curie temperature using ab initio calculations and machine learning”, *Sci. Adv. Technol. Mater. Meth.* **4**, 1, 2399494 (2024)
- 3) Y. Iwasaki et al. “Autonomous materials search using machine learning and ab initio calculations for L10-FePt-based quaternary alloys”, *Sci. Adv. Technol. Mater. Meth.* **5**, 1, 2470114 (2025)
- 4) K. Obinata et al. “Confidence evaluation for feature selection in expanded feature space based on density of states”, *APL machine learning* **3**, 1, 2025
- 5) K. Hatakeyama-Sato et al. “Semiautomated experiment with a robotic system and data generation by foundation models for synthesis of polyamic acid particles”, *Polym. J.* **56**, 977-986 (2024)
- 6) D. Suzuki et al. “Machine-learning-assisted prediction of the size of microgels prepared by

- aqueous precipitation polymerization”, *Chem. Commun.* **61**, 13678-13681 (2024)
- 7) N. Yamane et al. “Extraction of physicochemical laws by symbolic regression using a Bayesian information criterion”, *Sci. Technol. Adv. Mater. Meth.* **4**, 1, 2420658 (2024)