

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

2021 年度 年次報告書
------------------

岩崎 悠真

物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門  
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

## § 1. 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によって材料組成・構造空間を自律的に探索する『仮想空間自律探索 AI』、ロボティクスと機械学習の組み合わせによって材料プロセス空間を自律的に探索する『実空間自律探索 AI』、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』、および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、ホイスラー合金等の広大な材料空間を効率的に探索する。

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、ハーフメタル性を有するホイスラー合金の自律探索を行う AI を開発した。本 AI では、グリーン関数法をベースとした第一原理計算 (KKR-CPA) と機械学習 (ベイズ最適化、オートエンコーダ等) を組み合わせることで、スピント極率が高く、かつハーフメタリックギャップが大きいホイスラー合金を自律的に探索することが可能である。『実空間自律探索 AI』を開発する実験グループでは、本研究でのメイン合成装置となる 10 元クラスター型自動コンビナトリアル成膜装置の導入を完了した。さらに、組成傾斜膜を微細加工することでスピントバルブデバイスを作製し、セミオートプローバを駆使してスピント極率の組成依存性を高効率に評価することが可能な手法を構築した。『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、教師なし学習によるスペクトル自動解析手法を開発した。本手法により、数万本の XAS スペクトルの高速一括解析が可能であることを示した。『科学者拡張 AI』を開発する情報グループでは、スパースモデリングによる超解像技術を SEM や TEM 等の材料開発の画像データに応用することを可能とした。さらに、機械学習によって記述子を定量的に評価する技術や、スペクトルに含まれるノイズ成分を推定する技術を開発した。

## § 2. 研究実施体制

### (1) 岩崎グループ(計算)

① 研究代表者:岩崎 悠真

(物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 主任研究員)

② 研究項目

- ・探索可能物性値の多様化・高度化
- ・探索空間の拡大
- ・2種の自律探索 AI 間の連動

### (2) 桜庭グループ(実験)

① 主たる共同研究者: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拠点 グループリーダー)

② 研究項目

- ・実空間自律探索 AI の構築
- ・高性能デバイス創製への拡張

### (3) 小嗣グループ(計測)

① 主たる共同研究者:小嗣 真人

(東京理科大学 先進工学部 マテリアル創成工学科 教授)

② 研究項目

- ・マルチスケール・マルチモーダル解析
- ・拡張型エネルギーモデル

### (4) 五十嵐グループ(情報)

① 主たる共同研究者:五十嵐 康彦

(筑波大学 システム情報系コンピュータサイエンス専攻 准教授)

② 研究項目

- ・材料科学用機械学習手法の開発
- ・階層的自律探索 AI への展開