

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

2022 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

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拠点 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』と、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』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、ホイスラー合金等の広大な材料空間を効率体探索する。

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、自律探索アルゴリズムの高度化を行った。材料探索空間を適切に設計することにより、自律探索の大幅な効率化を可能とした<sup>1)</sup>。

『実空間自律探索 AI』を開発する実験グループでは、ホイスラー合金を中心とする組成傾斜薄膜から高いスピン分極率や異常ネルンスト特性を有する材料を自律的に探索するシステム構築を進めた。異方性磁気抵抗効果(AMR)はフェルミ準位近傍の電子バンドに由来する特性をハイスループットに評価する手法として有望であるため、 $\text{Co}_2\text{FeGa}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$  薄膜における AMR を系統的に評価し、ハーフメタル性と相関に関する知見を深めた<sup>2)</sup>。さらに、 $\text{Co}_2\text{MnGe}$  においては、低温熱処理でも高いスピン分極率を示すことを実証した<sup>3)</sup>。

『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。計算と情報と成膜の融合によって、高磁気異方性材料を発見し、その起源が Fe と Co の軌道磁気モーメントにあることを明らかにできた<sup>4)</sup>。また大規模スペクトルデータの機械学習手法を開発した<sup>5,6)</sup>。

『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た。さらに本手法を蓄電池や高分子化学の実データ解析に展開した<sup>7,8)</sup>。

### 【代表的な原著論文情報】

1) Y. Iwasaki, H. Jaekyun, Y. Sakuraba, M. Kotsugi, Y. Igarashi “Efficient autonomous material search method combining ab initio calculations, autoencoder, and multi-objective Bayesian optimization” *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* 2, 1, 365-371 (2022)

2) V. K. Kushwaha, et al., *Phys. Rev. Mater.* 6, 064411 (2022).

V. K. Kushwaha, S. Kokado, S. Kasai, Y. Miura, T. Nakatani, R. Kumara, H. Tajiri, T. Furubayashi, K. Hono and Y. Sakuraba “Prediction of half-metallic gap formation and Fermi level position in Co-based Heusler alloy epitaxial thin films through anisotropic magnetoresistance effect” *Phys. Rev. Mater.* 6, 064411 (2022).

3) V. K. Kushwaha, Y. Sakuraba, T. Nakatani, T. Sasaki, Ivan Kurniawan, Y. Miura, H. Tajiri, K. Hono “High L21-atomic ordering and spin-polarization in  $\text{Co}_2\text{MnZ}$  ( $Z = \text{Ge}, \text{Sn}$ ) Heusler thin films with low-temperature annealing process” *APL Materials* 10, 091119 (2022).

4) D. Furuya, T. Miyashita, Y. Miura, M. Kotsugi\*, “Autonomous synthesis system integrating theoretical, informatics, and experimental approaches for large-magnetic-anisotropy materials”, *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, 2, 280–293, (2022)

5) T. Nishio, M. Yamamoto, T. Ohkochi, D. Nanasawa, A. Foggiatto, M. Kotsugi\* “High-throughput

analysis of magnetic phase transition by combining table-top sputtering, photoemission electron microscopy, and Landau theory” *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, 2, pp 345-354, (2022)

6) A. Yoshinari, Y. Iwasaki, M. Kotsugi, S. Sato, N. Nagamura, “Skill-agnostic analysis of reflection high-energy electron diffraction patterns for Si(111) surface superstructures using machine learning” *Science and Technology of Advanced Materials: Methods*, Vol. 2, No. 1, 162–174, (2022)

7) K. Obinata et al. "Data integration for multiple alkali metals in predicting coordination energies based on Bayesian inference." *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* 2.1: 355-364, (2022)

K. Obinata et al. *STAM:Methods* 2.1 355-364 (2022).

8) K. Hatakeyama-Sato et al. "Quantum circuit learning as a potential algorithm to predict experimental chemical properties." *Digital Discovery* 2, 165 (2023).