

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書

岩崎 悠真

日本電気(株)システムプラットフォーム研究所
主任

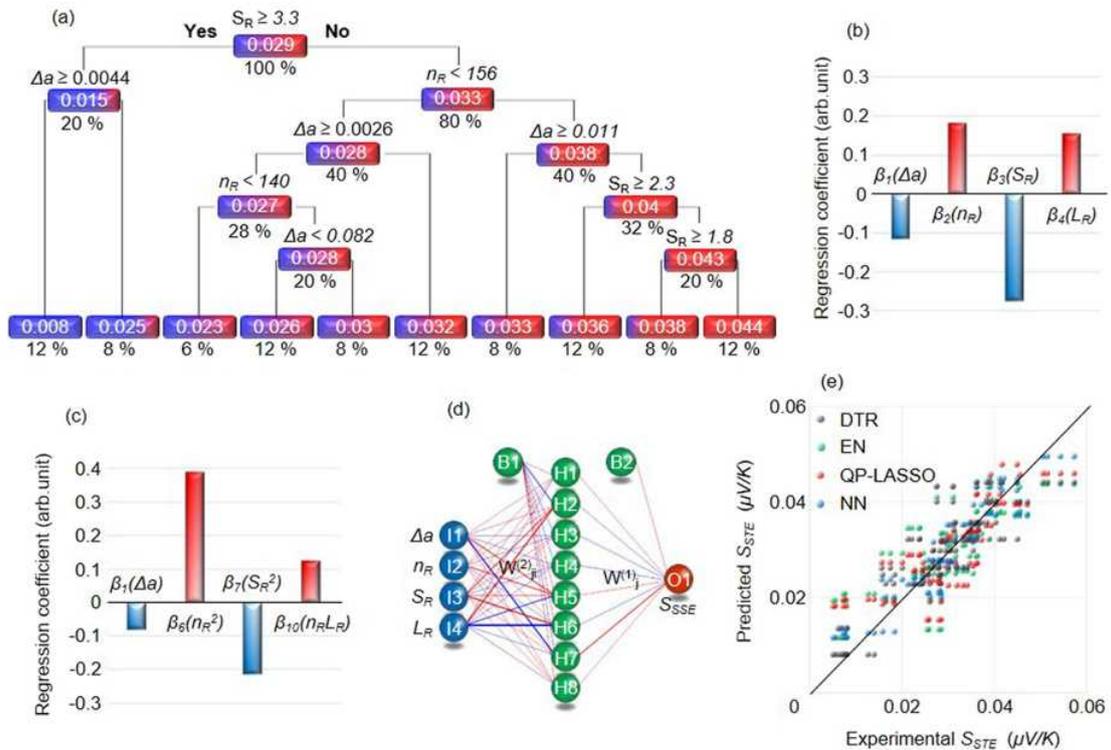
材料開発に特化した高精度ホワイトボックス型機械学習手法の開発と、そのス
ピン熱電材料開発への応用

§ 1. 研究成果の概要

スピンを活用した熱電材料(スピン熱電材料)の開発に機械学習を応用し、新規スピン熱電合金材料を開発した。

具体的には、まず、スピンゼーベック効果を利用したスピン熱電材料(Pt/R:YIG)のデータから、決定木、エラスティックネット、LASSO、ニューラルネットワーク等の機械学習によってモデルを構築し(図を参照)、そのモデルを人間が解釈することで、材料開発に関わる知見を抽出した。その後、ここで得られた知見を基に、別のスピン熱電材料(異常ネルンスト効果を利用したスピン熱電材料)の開発を行い、熱電効率を向上させた。

(Y. Iwasaki et al. *Scientific Reports*, **9**, 2751 (2019))



§ 2. 研究実施体制

- ① 研究者:岩崎 悠真 (日本電気(株)システムプラットフォーム研究所 主任)
- ② 研究項目
 - ・コンビナトリアル実験
 - ・ハイスループット第一原理計算
 - ・機械学習