

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

岩崎 悠真(産業技術総合研究所 NEC-産総研量子活用テクノロジー連携研究ラボ 特定集中研究専門員)

3. 事後評価結果

コンビナトリアル実験およびハイスループット第一原理計算により多量の材料データを蓄積し、それらデータの高精度ホワイトボックス型機械学習(独自開発したスパース区分線形回帰やシンボリック回帰)によりモデルを立て、最後にそれらモデルを材料学(物理・化学)の知見から解析し、新規材料の創製につなげるという一連のマテリアルズインフォマティクスのシステムを、個人研究者として構築した。このシステムを用いて、熱電デバイスへの応用が期待されている異常ネルンスト効果に優れた、新しい高性能なスピン熱電材料を複数発見することに成功した。

簡単な薄膜合成手法によるコンビナトリアル実験の範囲ではあるが、膨大に可能性のある化学組成の中から、既報の記録を塗り替える高性能材料を含む実用化にむけて有望な材料が見つかることは、特筆すべき成果であろう。本研究はマテリアルズインフォマティクス手法が材料開発を加速できることを示した端的な例を示す成果である。