

## 機械学習を用いた四元ホイスラー合金の物性予測

### Prediction of Physical Properties of Quaternary Heusler Alloys using Machine Learning

東北大通研<sup>1</sup>, 東北大 CSRN<sup>2</sup>, 東北大 WLRCS<sup>3</sup>

○(M2) 金村 卓郎<sup>1</sup>, (P) Tufan Roy<sup>1</sup>, 辻川 雅人<sup>1,2</sup>, 白井 正文<sup>1,2,3</sup>

RIEC, Tohoku Univ.<sup>1</sup>, CSRN, Tohoku Univ.<sup>2</sup>, WLRCS, Tohoku Univ.<sup>3</sup>,

○Takuro Kanemura<sup>1</sup>, Tufan Roy<sup>1</sup>, Masahito Tujikawa<sup>1,2</sup>, Masafumi Shirai<sup>1,2,3</sup>

E-mail: kanemura@riec.tohoku.ac.jp

Co 基ホイスラー合金はハーフメタル性を示すと予想される材料が多く存在し、磁性トンネル接合の強磁性層に応用され、低温で非常に高いトンネル磁気抵抗(TMR)比を示すことが報告されている。しかし、これらのホイスラー合金において低温で得られる高い TMR も室温では消失する。よって、デバイスが室温で動作する必要性から高キュリー温度かつ高スピン偏極率を持つホイスラー合金の開発が必要である。近年、多くの LiMgPdSn 型四元ホイスラー合金についてもハーフメタル性を示す合金が報告されている[1]。本研究においても LiMgPdSn 型四元ホイスラー合金 (XX'YZ) を対象に材料の探索を行う。しかしながら、X,X',Y サイトを占める元素を 24 種類の遷移金属元素 (Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au) に、Z サイトを占める原子を 7 種類の典型元素 (Al, Si, Ga, Ge, In, Sn, Sb) に限定した場合でも、合金の探索範囲は約 10 万通り存在する。このような組み合わせが非常に多い四元ホイスラー合金に対しデータベースを構築し機械学習と併せた効率的な材料探索を行った。

我々は前述した遷移金属元素と典型元素から、材料の探索空間に偏りが生じないようにランダムに 4 種類の原子を選択し、立方晶と正方晶に対してそれぞれスピン偏極率とキュリー温度を第一原理計算により導出し、約 5000 個の四元ホイスラー合金の物性値を収録するデータベースを構築した。学習器に Random Forest (RF) および Support Vector Machine (SVM) を使用し、構築したデータベースを学習器に学習させることで約 10 万通りの材料から高性能材料を効率的にスクリーニングした。本研究では特に安定性の二値分類とキュリー温度の回帰予測に取り組み、RF での安定性の予測において正答率 87%、キュリー温度の回帰予測では相関係数 0.76 を得て、高精度な物性の予測が可能であることを確認した。図にはキュリー温度の回帰予測の結果の一部を示した。本研究は、JST CREST (JPMJCR17J5)の支援を受けたものである。

[1] X. Dai, *et al.*, Solid State Commun. 140, 533 (2006).

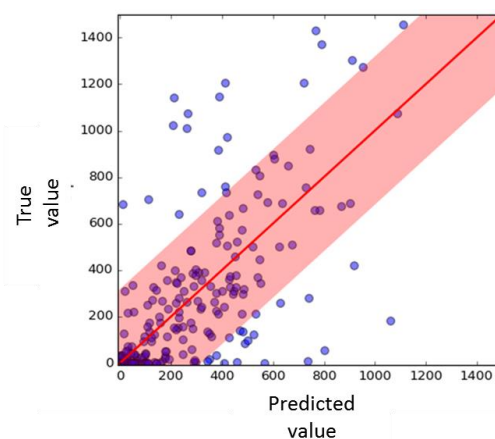


Fig1. The correlation between the curie temperature predicted by machine learning and that recorded in the database for LiMgPdSn Heusler alloys.