

機械学習アルゴリズムによる高 T_c 物質探索の加速手法

Acceleration method of high T_c material search by machine learning algorithm

○松本 要、堀出朋哉 (九工大)

°Kaname Matsumoto, Tomoya Horie (Kyushu Inst. Technol.)

E-mail: matsu@post.matsc.kyutech.ac.jp

I. Introduction

従来の超伝導材料の発見は、その多くが偶然の発見によるものが多い。一方、近年の計算機パワーや計算アルゴリズムの進展に伴って、第一原理計算や従来の実験結果に基づいて、ハイスループットで新奇な超伝導物質を見出せる可能性が出てきている。そこで本研究では、機械学習による物質スクリーニングによって、従来探索されることのなかった 3 元系、4 元系、5 元系、等々の多元系物質探索空間にその探索範囲を広げ、高 T_c を示す新しい超伝導物質を見いだすことを目的とする。

II. Method

機械学習は統計解析手法を大量データに適用し、データ間に存在する有用な規則や分類を抽出する方法である。超伝導体の臨界温度 T_c を機能 F とする場合、膨大な材料データの探索空間から、訓練セットとして既知の F とそれに付随した結晶構造や構成元素の特徴を $x_1, x_2, \dots, x_n$ という n 個のパラメータ(記述子)として選択し、計算機に $F = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ の関係を学習させる。その結果を探索空間の他の物質に適用して T_c を予測し、最適な T_c を持つ物質を選び出すことができる。

本研究では、既知物質と T_c の関係について NIMS の超伝導材料データベース¹⁾を利用した。今回は 3 元系超伝導物質群を対象とし、金属系超伝導体 (AlB_2 , シェブレル, A15, スピネル, NaCl, スクッテルダイト型)を 1120 個選択し、Materials Project のデータベース等²⁾から、原子番号、原子量、電気陰性度、電子親和力、原子半径、イオン半径、イオン化ポテンシャル等の約 100 個の付随する記述子を収集してデータセットを作成した。このデータセットを訓練データと検証用のテストデータに 80 : 20 の比率で分割し機械学習を繰り返して行った。各学習モデルの評価には R^2 スコアを用いた。

III. Results and Discussion

2018 年春の応物で報告したように、本研究グループでは公開されている超伝導材料データベースを基に、 T_c を目的変数とし構成元素の物性パラメータ群を記述変数とした機械学習によって、未知の多元系物質の臨界温度を予測するアルゴリズムをすでに作成済みである。この場合、機械学習の R^2 決定係数は 90 - 95% に達しており、十分高い精度で未知物質の T_c を予測することができる。この手法を Mg-B-Ti 系および Mg-B-Li 系等の 3 元系に適応した例を、対応する 3 元系状態図とともに図 1 に示す。Mg-B-Ti 系においては、40 K に達する T_c が MgB_2 組成の近傍に偏在しているが、Mg-B-Li 系ではより広い範囲で高 T_c の領域が広がっているのが分かる。高 T_c 領域に必ずしも安定な相が存在するとは限らないが、有望領域に高压合成や準安定相の合成などの手法で実験的な検証を試みることで、高スループットで新奇な高 T_c 超伝導物質を見出せる可能性がある。詳細については当日報告する。

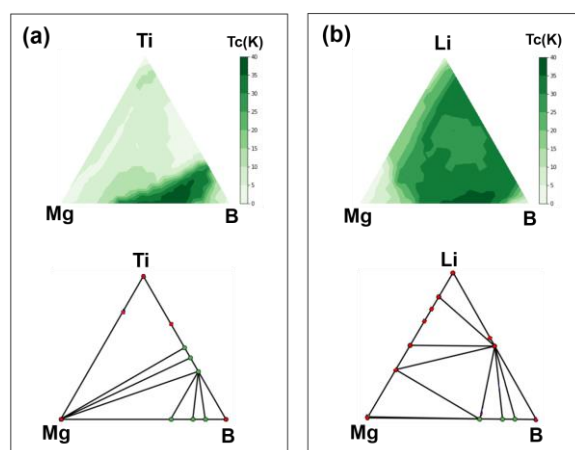


図 1 機械学習によって求めた Mg-B-Ti 系および Mg-B-Li 系における T_c 分布図と状態図

References

- 1) 超伝導データベース: <http://supercon.nims.go.jp/>
- 2) Materials Project: <https://materialsproject.org/>