機械学習による高 T_c 超伝導物質探索 — 軽元素の効果

Search for higher Tc superconductors by machine learning - Effect of light elements

°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

超伝導物質の臨界温度 T_c の予測や探索は現在でも大変難しい問題である。初期の研究として, T_c の実験値と物質パラメータとの相関を電子濃度 e/a（e:価電子の総数，a:総原子数）で探る Matthias の価電子則 [1]や, 化合物の T_c を価電子数，軌道半径，電気陰性度等の差の平均値で分類する方法，あるいは現代的手法として，ブリリアンゾーンと状態密度の特徴（指紋）から T_c を分類する手法などがある。

本研究では, 超伝導データベースと機械学習に基づく T_c 予測モデル [3]によって, 探索されることのなかった多元素系物質探索空間にその範囲を広げ，高 T_c を示す新超伝導物質群を見出すことを目指している。これまで 3 元系物質群に焦点を当て, 機械学習を用いた研究によって T_c が高い精度で予測できることを示してきた。ここで今後の開発方針を検討するため, BCS 理論の T_c の表式を振り返ると, 状態密度, 電子–格子相互作用，デバイ温度等が制御パラメータとして付随することに気づく。状態密度に注目したのが Matthias であり，デバイ温度（一般に軽元素系のデバイ温度が高い）に注目したのが LaH_{10} [3] や MgB_2 であろう。

そこで本研究では, デバイ温度の高い軽元素を含む 3 元物質系に関して機械学習によって T_c 分布を網羅的に調べてみたので報告する。

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。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 [4] を利用した。今回は MgB_2 を含む 3 元系超伝導物質 2000 個を選択し，材料データベースから，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，電子状態，等々の 53 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。

III. Results and Discussion

x-y-z 3 元系において，x を特定の元素に固定し，y，z 元素を種々取り換えた場合の最大 T_c を網羅的に計算して調べた。なお，各系における最大 T_c 値は，組成を 231 個の点に分割して T_c 分布を求めたのちに決定した。実施例として，図 1 に x=B（ボロン）という軽元素に固定して網羅的な予測を行ったときの最大 T_c の分布図を示す。B を含む 3 元系の T_c は高く，30 K を超える物質群が多数存在する。また，大きな T_c の周期的変動が出現し，高 T_c 領域が原子番号 10, 20, 38 近傍の 3 か所に表れるのが特徴である。T_c の周期的変動は Matthias の価電子則におけるふるまいに似ており興味深い。

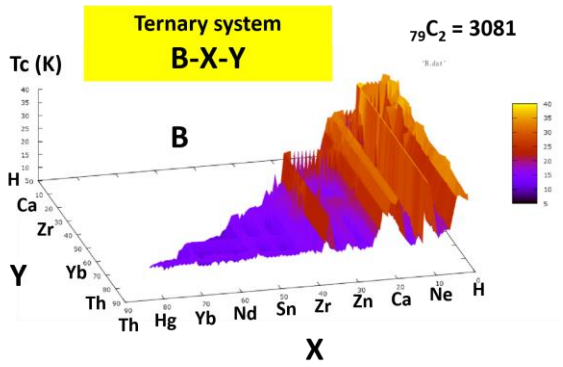

図 1　機械学習によって求めた B-x-y 系における T_c 分布図

References

1) B. Matthias, Phys. Rev. 97, 74 (1955).
2) K. Matsumoto, T. Horide, APEX, 2019.
3) M. Somayazulu et al., Phys. Rev. Lett. 122, 027001 (2019).
4) 超伝導データベース: http://supercon.nims.go.jp/