第一原理計算と機械学習によるペロブスカイト型酸化物の強誘電性の予測システムの構築と重要な特徴量の探索

Prediction system and feature importance for ferroelectricity of perovskite type oxides using first-principles calculation and machine learning

東工大物質理工　○西山 準二，高橋 拓也，武田 博明，鶴見 敬章，保科 拓也

Tokyo Tech., ○Junji Nishiyama, Takuya Takahashi, Hiroaki Takeda,

Takaaki Tsurumi, Takuya Hoshina

E-mail: thoshina@ceram.titech.ac.jp

近年，マテリアルズ・インフォマティクスにより材料設計を加速化させる取り組みが注目されている．しかし，強誘電体に関する報告は少なく，強誘電体の物性・構造パラメータ（自発分極値や正方歪 *c*/*a*，イオンの変位など）を予測するための特徴量や予測モデルが確立されていない．本研究では，代表的な強誘電体を多く有するペロブスカイト型酸化物に注目し、第一原理計算を用いてペロブスカイト型酸化物の計算結果データベースを構築した．そして，強誘電体の物性パラメータを予測するのに重要な特徴量を機械学習により探索し，予測システムを構築した．

本研究で用いた，ペロブスカイト型酸化物の物性予測に用いたデータベースの構築の流れを Fig. 1 に示す．強誘電体として広く知られる，$BaTiO_3$，$PbTiO_3$ 及び $KNbO_3$ に着目し，これらをベースに元素置換を行い，17000 個以上の計算用モデル（2×2×2 スーパーセル）を作成した．そこから無作為にモデルを抽出し，空間群が *P4mm*（正方晶）であるモデルは VASP コードに搭載されているアルゴリズムを用いて構造最適化を行った．*P4mm* でないモデルは VASP コードによりイオン緩和を行い，ベイズ最適化により格子定数を求めた．ベイズ最適化を行うには探索範囲を決めておく必要があるが，これには *P4mm* であるモデルの構造最適化後のデータを利用して，サポートベクトル回帰を行い，その予測値を利用した．得られた最適化後の構造を利用して，バンド計算及び密度汎関数摂動論に基づく計算（DFPT 計算）を行った．また，より計算コストの低い立方晶の構造における計算も行い，これらのデータも特徴量にした．機械学習には，より低コストの計算から得られる特徴量を利用した．*a* 軸長の予測では，幾何的な特徴量のみが重要であったのに対し，*c* 軸長の予測では，化学的な特徴量も重要であった．詳細については当日報告する．

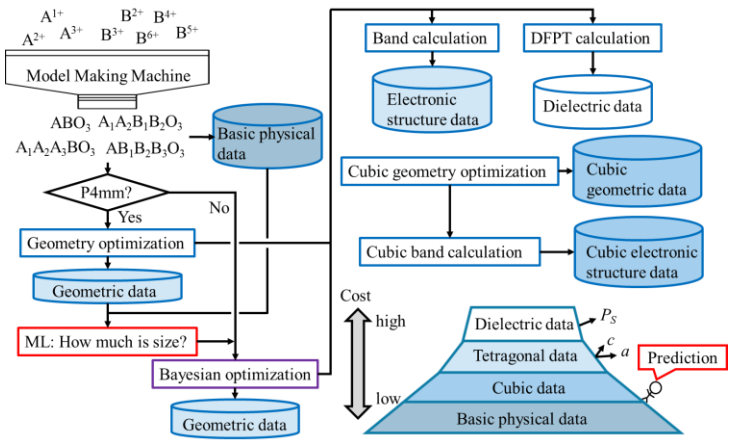

Fig. 1 Flow of the database construction for perovskite type oxides (ABO_3, $A_1A_2A_3BO_3$, $AB_1B_2B_3O_3$, $A_1A_2B_1B_2O_3$). The red frame and blue frame mean machine learning and calculation using VASP-code, respectively. The prediction of various values used other data which were obtained by lower cost calculation.