

機械学習に向けた $L1_0$ 系規則合金の磁気異方性データベースの構築

Search for functional $L1_0$ based magnetic materials by machine learning

東理大基礎工¹, 物質・材料研究機構² ○(B)宋皓同¹, 三浦良雄², 小嗣真人¹

Tokyo Univ. of Science¹, NIMS², ○Haotong Song¹, Yoshio Miura², Masato Kotsugi¹

E-mail: 8215097@ed.tus.ac.jp

1. 緒言

人工知能やロボット産業の発展などによって懸念される情報爆発を支える情報記録デバイスとして、高密度磁気メモリへの期待が急速に高まっている。磁気メモリの記録密度向上には磁気異方性(MAE)の向上が極めて重要であり、また昨今の元素戦略的な観点から、レアメタルフリーであることも求められている。 $L1_0$ -FeNi 規則合金はこれらの要求を満足する磁性材料の一つであり、近年高い注目を集めている。これまで理論および実験の両面から $L1_0$ -FeNi 系合金における元素種および膜構成の調査が行われてきた^[1,2]。しかし、最適な膜構成の探索は研究者の経験と直観に大きく依存し、膨大な時間が費やされているのが現状である。そこで、我々は第一原理計算と機械学習を組み合わせ、高い MAE を有する $L1_0$ 構造を効率的に予測することを創案した。研究では、第一原理計算ソフト AkaiKKR を用いて MAE のデータベースを構築し、ベイズ最適化による最適な膜構成の探索を試みた。

2. 実験方法

第一原理計算には、グリーン関数法(KKR 法)を用い、交換相関項として一般化勾配近似を採用し、FeNi、FeCo、CoNi の MAE を計算した。MAE は $L1_0$ 構造の磁化容易軸と磁化困難軸の全エネルギーの差として算出した^[2]。格子定数 a と格子ひずみ c/a はそれぞれ範囲を決定し、格子の全エネルギーが最小となる値を適用した。計算コストと収束性を考慮し、 k 点を 4 とした。また、計算値と文献値を比較し、計算結果の妥当性を検証した。

結果及び考察

FeNi、FeCo、CoNi の計算結果及び文献値を Table.1 に示す。ここで FeNi、CoNi の文献値は KKR 法で算出された値であり、FeCo は PAW 法で算出された値である。格子定数 a と c 軸方向の格子ひずみ c/a は格子の形成エネルギーが最小の組み合わせを適用している。

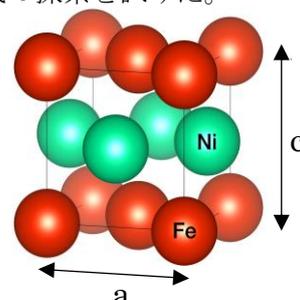


Table.1 $L1_0$ 合金の磁気異方性

	計算値			文献値		
	FeNi	FeCo	CoNi	FeNi ^[3]	FeCo	CoNi ^[3]
$a(\text{\AA})$	3.6	3.7	3.5	3.65	3.67	3.49
c/a	1.00	0.91	1.04	0.98	0.90	1.03
MAE(MJ/m ³)	0.73	5.08	1.19	0.77	6.56	1.35

Table.1 によると磁気異方性や格子定数は参考値と比較的良好一致を示している。このことから、AkaiKKR のみで行った計算結果及び構造最適化は妥当と考えられる。FeCo の磁気異方性が参考値と比べて 1 以上の差異を示しているが、これは第一原理計算における基底関数のモデルやポテンシャルの設定、相対論効果等の違いによるものと考えられる。

3. 結言

本研究では $L1_0$ 型機能性材料の機械学習の予測に向けたデータベースの作成のための磁気異方性の計算法を確立した。また、AKAIKKR のみで行った構造最適化に成功した。

4. 参考文献

- [1] Masahiro Saito, *et al* Applied Physics Letters **114** (2019) 072404
- [2] Y Miura, *et al* J. Phys.: Condens. Matter **25** (2013) 106005
- [3] Alexander Edström, *et al* PHYSICAL REVIEW B **90** 014402 (2018)