

## ベイズ最適化による高磁気異方性材料の予測と創製

○(M1)古矢 大悟<sup>1</sup>, (M2)中尾 太一<sup>1</sup>, (M2)齋藤 彪我<sup>1</sup>,  
(M2)宇田 皓一, 三浦 良雄<sup>2</sup>, 小嗣 真人<sup>1</sup>  
東理大先進工<sup>1</sup>, 物質・材料研究機構<sup>2</sup>

### Prediction and Fabrication of Large Magnetic Anisotropy Materials by Bayesian Optimization

○(M1)Daigo Furuya<sup>1</sup>, (M2)Nakao Taichi<sup>1</sup>, (M2)Hyuga Saito<sup>1</sup>,  
(M2)Koichi Uda<sup>1</sup>, Yoshio Miura<sup>2</sup>, Masato Kotsugi<sup>1</sup>

Tokyo Univ.of Science<sup>1</sup>, NIMS<sup>2</sup>

E-mail: 8221546@ed.tus.ac.jp

高磁気異方性材料は、省電力且つ超高速の磁気メモリの実現を支える重要な磁気特性である。これまでの材料創製では、様々な構成元素や積層構造を人力で探索してきた。しかし多元系では組み合わせ爆発が起きることから、膨大な数の候補を網羅的に作製する事が困難だった。そこで我々は機械学習の代表例である「ベイズ最適化」を活用し、高い異方性を有する磁性多層膜の効率的な探索手法を開発した<sup>[1]</sup>。ベイズ最適化は Black-Box 関数最適化手法の一つであり、データ収集コストが高い分野においても、少ない試行数で最適解を得られる等の利点がある。本研究ではベイズ推定に基づいて高磁気異方性材料を予測し、そこで予測された材料の創製を行なった結果について報告する。

膜構成の予測では、Fe, Co, Ni, Cu の 4 種類の元素と 4 周期までの超周期構造を対象にし、第一原理計算とベイズ最適化を融合した材料探索を行った。ベイズ推定の探索方針は、異方性の期待改善度が高い点を次の候補とする獲得関数 EI を用いた。またデータ同士の類似度を表すカーネル関数には Matern52 を用いた。実験ではベイズ最適化により予測した 2 種類の候補物質 (Fe/Cu/Co/Cu)<sub>13</sub>, (Fe/Co/Fe/Ni)<sub>13</sub> について、PLD 装置を用いた単原子交互積層によって 52ML の薄膜を成膜した。表面の結晶性は反射高速電子回折、表面平坦性は原子間力顕微鏡、結晶構造は X 線回折、磁気特性評価は超伝導量子干渉磁力計を用いて行なった。

(Fe/Cu/Co/Cu)<sub>13</sub> では、飽和磁化  $M_s$  と磁気異方性エネルギー  $K_u$  は 906.4 emu/cc,  $1.44 \times 10^6$  erg/cc と算出された。また Fig.1 に示した (Fe/Co/Fe/Ni)<sub>13</sub> の磁化曲線から  $M_s$  と  $K_u$  は 1312.9 emu/cc,  $3.74 \times 10^6$  erg/cc と算出され、非常に高い磁気特性を示した。この結果は我々の先行研究の  $L1_0\text{FeNi}$ <sup>[2]</sup>,  $L1_0\text{FeCo}$ <sup>[3]</sup> を超える値であり、ベイズ最適化を用いて高磁気異方性材料の予測と創製を実現したと言える。

[1]古矢大悟 他, 第 68 回応用物理学会春季学術講演会,  
19a-Z32-9, (2021)

[2] H. Ito et.al., AIP Adv., 9, 045307, (2019)

[3] M. Saito et.al., Appl.Phys.Lett. 114, 072404, (2019)

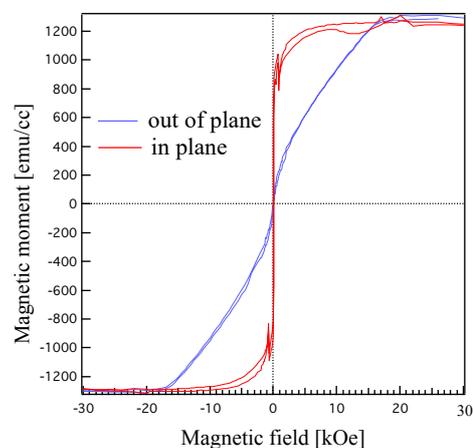


Fig.1 Magnetization curve of (Fe/Co/Fe/Ni)<sub>13</sub> deposited on room temperature.