

結晶構造データベースと機械学習による新超伝導物質探索

New superconductor search by crystal structure database and machine learning

徳永暁久、○松本 要、堀出朋哉 (九工大)

Akihisa Tokunaga, ○Kname Matsumoto, Tomoya Horie (Kyushu Inst. Technol.)

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

I. Introduction

臨界温度 T_c が室温に迫る水素化物超伝導体の研究が進んでいる。しかし超高压下と言う付帯条件は、現時点では、水素化物超伝導体のデバイス応用を困難なものとしている。一方経験的に発見された非 BCS 型の高 T_c 銅酸化物超伝導体は長尺線材化が進み、工学的な応用展開が始まっている。しかし工学応用においては、冷却コスト低減のため、室温超伝導物質への潜在的な要求が常に存在する。超高压下室温超伝導が実現した今、常圧下において銅酸化物の T_c を超える新たな高温超伝導物質を探索する機運が高まっている。そのような高 T_c 超伝導物質はこれまで探索されたことのない多元系物質や、未知の自然超格子、デザインされた人工超格子の中に存在する可能性がある。「新物質探索空間」は極めて広大である。われわれはこの課題に挑戦するため超伝導データベースに基づく機械学習による超伝導 T_c 予測手法を開発してきた。今回は、「多元系物質探索空間」を想定し、合成可能な公開されている結晶構造データベース中の物質群について、本手法で開発した機械学習 T_c 予測技術を適用し候補物質を見出すことを行った。

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。¹⁾ 今回は多元系物質探索のため、既知物質と T_c の関係について NIMS の SuperCon データベース²⁾に記載されている有機系物質系を除くすべてのデータを学習に利用した。そのため、銅酸化物系や鉄系などに関連する超伝導物質の T_c 予測も可能となっている。また予測精度を高めるため、報告されている非超伝導物質³⁾やバンドギャップが 1 eV 以上の半導体・絶縁体群も $T_c=0$ K の物質群として機械学習に取り込んだ (総 26,450 個)。 T_c の予測においては予測精度の高い「ランダムフ

ォレスト」による回帰手法を採用した。得られた学習モデルの R^2 決定係数は 0.92 であった。今回は、合成可能な物質群を探索するため、公開されている結晶構造データベース Crystallography Open Database (COD) に掲載されている現時点でのすべての 6 元系までの物質群 (244,551 個) を対象とした。

III. Results and Discussion

Fig. 1 に 244,551 個の結晶構造データベース記載の物質群に対するランダムフォレスト回帰モデルによる予測 T_c を示す。最高 T_c は 87.6 K で銅酸化物であったが、銅酸化物以外で高い T_c が期待される新物質として、CoGaO₄Yb (47.4 K), Co_{0.5}Ga_{0.5}O₂Yb_{0.5} (47.4 K), As₃Eu₃OTa (45.9 K), Al₁₂Dy₃Fe₄Mg₅Si₆ (45.8 K), Eu₂Ge₆O₁₈Sr₃ (45.4 K) など 20 K 以上の T_c を有する 100 個以上の候補物質が示唆された。今後これら候補物質群に関する CIF データ等を元に第一原理計算による電子構造の調査を行うとともに、機械学習を用いて、周辺組成の物質群に関する T_c 予測を行って、実際に物質合成ステップに進むための検討を行う予定である。

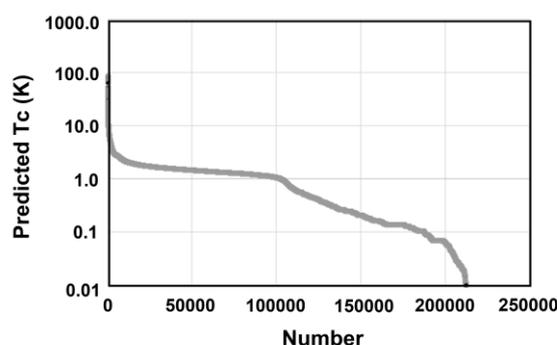


Fig. 1 COD 結晶構造データベースに記載された物質群に対する機械学習による予測 T_c 。

References

- 1) K. Matsumoto and T. Horie: *Appl. Phys. Exp.* **12**, 073003 (2019).
- 2) 超伝導データベース: <http://supercon.nims.go.jp/>
- 3) H. Hosono *et al.*, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **16**, 033503 (2015).