

## 機械学習を活用した強誘電体・圧電体の研究

### Research on Ferroelectric and Piezoelectric Materials Using Machine Learning

○保科 拓也

Tokyo Tech.

E-mail: hoshina.t.aa@m.titech.ac.jp

近年、データ科学を活用して効率的に材料開発を行うマテリアルインフォマティクスやプロセスインフォマティクスが様々な材料に対して適用されている。我々は、誘電体・強誘電体・圧電体を主とする無機機能性材料の合成、物性評価、デバイス試作などを専門しているが、それらの分野でもデータ科学を活用する場面が増えてきた。本講演では、我々がこれまで取り組んできた機械学習を活用した強誘電体・圧電体に関する研究の中から幾つかの事例について紹介する。

#### 【研究事例① ペロブスカイト型酸化物の強誘電性決定因子の解明】

ペロブスカイト型酸化物の強誘電性の支配要因を明らかにするために、同化合物の構造パラメータや自発分極値を網羅的に計算し、機械学習を実行した。第一原理計算によって得られた自発分極値 ( $P_s$ ) について、ランダムフォレストで学習したところ、自発分極を  $R^2=0.819$  の精度で予測することができた。自発分極を決定する上で最も重要な因子は、カチオン-アニオン間の電気陰性度差であることが明らかになった。

#### 【研究事例② 複合アニオン化合物強誘電体の探索】

従来のペロブスカイト型強誘電体は酸化物にほぼ限定されていたが、酸化物イオン以外のアニオンを含む複合アニオン化合物も新たな強誘電体として探索対象となりうる。特に【研究事例①】の結論を踏まえると、 $O^{2-}$ よりも  $N^{3-}$ 、 $S^{2-}$ 、 $Se^{2-}$ などのアニオンを含む系の方が高い強誘電性を示す可能性がある。そこで、 $ABXX_2$  で表される複合アニオン化合物を対象とし、様々なスクリーニング条件を作成して、有望な強誘電体を探索した。71万の候補から最終的に200種類の化合物が熱力学的に安定な強誘電体であると判定された。200の化合物には、酸化物、窒化物、酸窒化物が多く、 $O^{2-}$ や  $N^{3-}$ 以外のアニオンを含む化合物は多くなかった。 $S^{2-}$ 、 $Se^{2-}$ などのアニオンを含む系でペロブスカイト型強誘電体を創成するのは難しいことが明らかになった。

#### 【研究事例③ 機械学習を用いた非線形逆圧電応答の制御】

鉛系圧電体に代表される大きな圧電定数を有する圧電体は一般的に圧電定数に非線形性があるため、これらを使った圧電素子の非線形応答を精密に制御することは簡単ではない。本研究では、背景にある物理モデル等はブラックボックス化し、機械学習を用いて非線形逆圧電応答が精密制御できるかを検証した。市販の圧電アクチュエータを利用し、様々な波形の電界を印加した際の歪波形を歪ゲージで記録した。この出力を多層ニューラルネットワークで学習し、所望の波形が出力できるようになるか検証した。我々が採用した方法を使うと、正弦波の重ね合わせで記述されるような波形は非常に高い精度で出力できることがわかった。また、メトロポリス・ヘイスティング法や遺伝的アルゴリズムを用いると、複雑な出力に対しても有効であることが示された。