

ベイズ最適化を用いた高磁気異方性材料の効率的探索 High Through-put Exploration of Large Magnetic Anisotropy Materials Using Bayesian Optimization

東理大基礎工¹, 物質・材料研究機構²

○(B)古矢 大悟¹, (M2)宮下 拓也¹, (M2)熊谷 卓也¹, (M1)中尾 太一¹,
(M1)齋藤 彪我¹, 三浦良雄², 小嗣真人¹

Tokyo Univ.of Science¹, NIMS²

○(B)Daigo Furuya¹, (M2)Takuya Miyashita¹, (M2)Takuya Kumagai¹, (M1)Nakao Taichi¹
(M1)Hyuga Saito¹, Yoshio Miura², Masato Kotsugi¹

E-mail: 8217084@ed.tus.ac.jp

Society5.0の実現に向けて、省電力且つ超高速の磁気メモリの開発に国際的な期待が高まっている。磁気異方性エネルギー(MAE)はこれらのデバイス機能を支える重要な磁気特性であり、構成元素や多層膜構造の探索が行われてきた^[1]。L1₀型規則合金は、2種類の元素を2原子層毎に交互積層した超構造として広く知られているが^[2]、元素種や多層膜の周期構造を拡張した際、組み合わせ爆発が起こることから、人力で網羅的な磁気機能の探索を行うのは極めて困難となる。

そこで本研究では機械学習の代表例である「ベイズ最適化」に着目し、高いMAEを有する磁性多層膜の効率的な探索手法を開発した。ベイズ最適化はBlack-Box関数最適化手法の一つであり、データ収集の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。開発では非レアアース金属である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、ベイズ最適化を用いて多層膜構造の探索を行った。

本研究では、Quantum ESPRESSO (QE)を用いた第一原理計算を行い、構造と磁気異方性を算出した。MAEは、高精度のエネルギー計算が可能なPAW法を用いて、磁化の向きが[100]と[001]の全エネルギーの差から算出した^[3]。膜構成の予測にはベイズ最適化を用いた。元素数と周期数から得られる最大の候補数4⁴個から、c軸方向の対称性を考慮し、候補数を予め55個に絞った。この中で学習データは4種類の純金属{(Fe)₄, (Co)₄, (Ni)₄, (Cu)₄}とし、残りの51個にベイズ最適化を行った。最適化におけるパラメータの依存性を比較し、ベイズ最適化の有用性を検証した。

51個の候補にベイズ最適化を行った結果をFig.1に示す。なお、比較のためランダムサンプリングの結果を合わせて示す。ベイズ最適化による予測では6回目の試行で、最大のMAEを有する膜構成を発見できた。また二番目に高いMAEも9回目の試行で発見できており、いずれもランダムサンプリングより飛躍的に少ない試行数であった。このことから、ベイズ最適化による多層膜の探索は有効であることが示唆される。

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

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

[3] Y. Miura *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter 25, 106005,(2013)

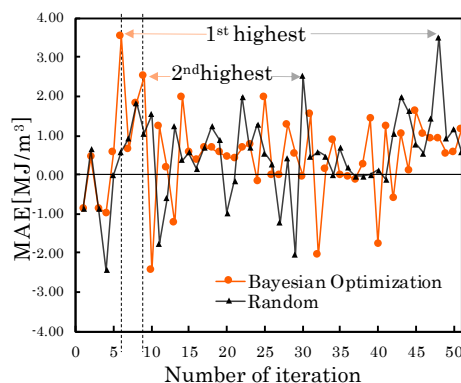


Fig.1 Differences in the order of candidates by prediction method. (Orange) Bayesian optimization, (Black) Random sampling