

ErB₂の磁気熱量効果：機械学習予測との比較

Magnetocaloric effect of ErB₂:

comparison between experiment and machine-learning prediction

物材機構¹, 筑波大², °寺嶋健成¹, Pedro Baptista de Castro^{1,2}, 山本貴史¹, 齋藤明子¹,

松本凌¹, 安藤寛¹, 竹屋浩幸¹, 高野義彦^{1,2}

NIMS¹, Univ. of Tsukuba², °Kensei Terashima¹, Pedro B. Castro^{1,2}, Takafumi D. Yamamoto¹,

Akiko T. Saito¹, Ryo Matsumoto¹, Hiroshi Ando¹, Hiroyuki Takeya¹, and Yoshihiko Takano^{1,2}

E-mail: TERASHIMA.Kensei@nims.go.jp

物質が外部磁場の変化に応じて示す磁気エントロピー変化(ΔS_M)は、気体冷凍に代替する高効率な冷凍サイクルを得る手段として期待されている。 ΔS_M は物質と温度に大きく依存するため、所望の温度域で大きな ΔS_M を示す磁気冷凍材料探索が必要である。我々はこれまでに報告された磁気冷凍材料の材料データを収集し、これに基づき磁気冷凍材料の ΔS_M に対する機械学習モデルを構築した[1,2]。 ΔS_M が未報告な磁性体に対し、このモデルの適用結果を探索指針とすることで、強磁性転移温度 15 K の磁性体 HoB₂における巨大な磁気熱量効果の発見に至った[1]。

HoB₂と同じAlB₂型結晶構造のRB₂(Rは希土類元素)は他にR = Gd, Tb, Dy, Er, Tm, Ybが存在し、このうち上記の結果を含めErB₂以外の全ての安定な強磁性体で ΔS_M が実験的に確かめられている。一方、我々が機械学習モデル作成時に使用した教師データはこの系を1つも含んでいない。そこで我々はErB₂多結晶の磁気熱量効果を実験的に確かめることで、作成した機械学習モデルの、未見の系に対する適用度合いを検討した。

図1(a)に、磁場 0-5 T での磁化測定から得た ErB₂ の $|\Delta S_M|$ の温度依存性を示す。 $|\Delta S_M|$ は約 15 K で最大を示し、その大きさ($|\Delta S_M^{\max}|$)は約 26 (J kg⁻¹ K⁻¹)であった。図1(b)に、RB₂系の $|\Delta S_M^{\max}|$ に対する機械学習予測と実験値の比較を示す。両者は定量的には合致しないが、R 依存性の傾向には対応が見られた。より多くの系で要検証ではあるが、本モデルの物質探索への有用性が示唆される。

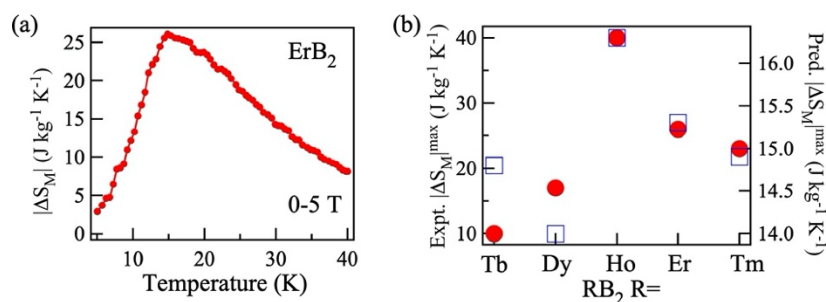


Fig. 1 (a) $|\Delta S_M|$ of ErB₂ under magnetic field change of 0-5 T, evaluated from experimental magnetization curves. (b) Comparison of rare-earth dependence of $|\Delta S_M^{\max}|$ between experimental values (red circle, left axis) and predicted values by machine-learned model (blue square, right axis).

[1] P. B. Castro *et al.*, NPG Asia Materials, 12:35 (2020).

[2] P. B. Castro 他、2020 年応用物理学会秋季学術講演会 10a-Z09-5