

計算科学とデータ科学の融合による高温超伝導水素化合物の探索

Search for high- T_c superconducting hydrogen compounds by integration approach of computational and data sciences

国立研究開発法人物質・材料研究機構 石河孝洋

室温超伝導の実現は物性物理学における大きな研究目標のひとつである。2015年に155万気圧まで圧縮した硫黄水素化合物で203 Kの、2018年には190万気圧まで圧縮したランタン水素化合物で260 Kの高温超伝導が観測された。これらの超伝導転移温度は銅酸化物系で記録されたこれまでの最高値を大きく塗り替えて室温まであと一歩のところまで迫っており、他の水素化合物でも同様の高温超伝導が得られるか大変注目されている。高压縮水素化合物における超伝導の実験は技術的に困難な部分が多いため、第一原理計算による候補物質の予測は研究を効率良く進めるためにも重要となる。しかし、3元系以上になると構成元素の組み合わせは膨大な数に上るため風潰しに計算を実行する方法は実際問題として不可能であり、候補を絞り込む必要がある。そこで、進化的アルゴリズムの遺伝的アルゴリズム及び遺伝的プログラミングを活用して計算科学とデータ科学とを融合させた、物質探索を効率化する独自の方法を構築し、超伝導水素化合物の探索に応用した。まず、遺伝的アルゴリズムを用いて水素化合物の結晶構造や化学組成を予測し、種々の物性データを収集してデータベースに集約する。そして、遺伝的プログラミングを用いた機械学習を実行してデータから超伝導性予測器を作成し、準備しておいた3元系化合物のデータセットを予測器に代入して得られる評価値から高温超伝導の候補を決定する。このサイクルを回すことによって、選定物質の第一原理的検証、データベースの強化、予測器の修正が行われるため可能性の高い物質を優先的に調べることが可能となる。

まず、超伝導化が第一原理計算で予測されている23種類の2元系水素化合物に関する物性データを論文から収集してデータベースを準備した。次に、圧力、空間群、質量、水素含有量、電子間クーロン斥力定数 μ^* をパラメータとする関数(超伝導性予測器)をランダムに作成して、データベースから取り出したデータをこれらのパラメータに代入して得られる値(超伝導性評価値)が超伝導転移温度と強い相関を示すようになるまで予測器を遺伝的プログラミングで進化させた。次に、プログラムを使って網羅的に作成した3元系水素化合物のデータセット(空間群を三斜晶(No. 1)、圧力を100 GPa、 μ^* を0.13に固定)を予測器に代入して超伝導性評価値を求めた。これを基に高温超伝導の候補物質を帰納的に探索したところ、 H_4FP 、 $H_3C_4Mo_2$ などの化合物が高温超伝導の候補として選出された。これらの物質を第一原理的に検証した結果、超伝導転移温度は H_4FP で27 K(300万気圧)、 $H_3C_4Mo_2$ で15 K(20万気圧)となり、硫黄水素化合物やランタン水素化合物に匹敵するような高温超伝導とはならなかったが、新たな超伝導物質の発見に繋がった。現在は、超伝導性予測器の精度を更に向上させるためにデータベース中の2元系水素化合物を62種類まで増加させて再探索に取り組んでいる。講演では、その最新の結果も合わせて報告する。

【参考文献】

- ・石河孝洋, 「進化論的手法による超伝導水素化合物の探索」, 高圧力の科学と技術, 27巻3号 213-221 (2017).
- ・石河孝洋, “第4章 第10節 進化的アルゴリズムを活用したマテリアルズ・インフォマティクスと水素系超伝導体探索への応用”, 「マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集」(技術情報協会)(2019年1月31日) pp. 162-169.