

# 基于机器学习与第一性原理计算的 高居里温度 Janus 预测\*

刘兆圣<sup>1)</sup> 张桥<sup>1)</sup> 宁勇祺<sup>1)</sup> 符秀交<sup>1)</sup>  
邹代峰<sup>1)</sup> 王俊年<sup>1)</sup> 赵宇清<sup>1)2)†</sup>

1) (湖南科技大学物理与电子科学学院, 智能传感器与新型传感器材料湖南省重点实验室, 湘潭 411201)

2) (中国科学院半导体研究所, 超晶格国家重点实验室, 北京 100083)

(2025 年 8 月 1 日收到; 2025 年 9 月 12 日收到修改稿)

二维 Janus 磁性体系因空间反演对称性破缺, 易产生较大的 DMI 作用项 (Dzyaloshinskii Moriya interaction), 为探索磁拓扑结构及发展新一代赛道级磁存储器件提供了理想的平台. 在该研究领域中, 寻找具有高居里温度的体系至关重要, 这直接关系到材料在实际高温环境下的磁性能稳定性与应用潜力. 本研究基于已有文献报道与开源数据库, 构建了包含 16880 种 ABC 型二维材料的数据集. 以材料的化学计量比、元素固有属性及电子结构特征为描述符, 分别采用随机森林、梯度提升决策树、极端梯度提升和极端随机树 4 种机器学习模型, 对二维材料的居里温度展开预测训练, 并通过十折交叉验证评估模型的学习性能. 研究表明, 极端梯度提升模型对居里温度的预测精度最高且具备最优的泛化能力. 基于最优模型, 对 4024 种尚未探索的二维 Janus 结构材料进行了居里温度预测, 最终筛选出 54 种同时具备热稳定性、高磁矩、高居里温度的二维 Janus 材料. 为验证预测结果的可靠性, 研究进一步结合第一性原理计算与海森伯模型, 对随机选取的 4 种候选 Janus 体系进行了理论验证. 本研究为加速发掘兼具稳定性与高居里温度的二维 Janus 磁性材料提供了新的技术途径, 对推动二维磁性材料在信息存储等领域的应用具有重要意义.

**关键词:** 机器学习, 二维磁性 Janus 材料, 居里温度, 第一性原理计算

**PACS:** 02.70.Uu, 71.15.Mb, 75.30.Kz, 75.50.-y

**DOI:** 10.7498/aps.74.20251026

**CSTR:** 32037.14.aps.74.20251026

## 1 引言

自 2004 年以来, 超薄二维 (2D) 材料 (如石墨烯<sup>[1]</sup>、过渡金属硫化物 (TMDs)<sup>[2]</sup>、过渡金属碳化物/氮化物 (MXenes)<sup>[3]</sup> 及二维金属卤化物钙钛矿<sup>[4]</sup>) 相继被发现<sup>[5]</sup>. 这类材料为谷电子学、自旋电子学及铁电性<sup>[6-8]</sup> 等新奇物理特性的研究提供了广阔平台, 同时在光电、传感、非易失性铁电与铁磁存

储领域引发了广泛关注.

铁磁材料作为一类重要的智能材料, 在现代科技领域应用广泛. 其中, 居里温度 (Curie temperature,  $T_c$ ) 高于室温是铁磁材料实现工业化应用的关键前提. 然而遗憾的是, 目前已发现的  $T_c$  高于室温的候选铁磁材料数量有限. 为满足信息技术的发展需求, 近年来众多研究者通过多种方法尝试合成高  $T_c$  铁磁材料<sup>[9-11]</sup>.

二维 Janus 结构的上下表面为不同元素构成

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12204166)、湖南省自然科学基金 (批准号: 2024JJ5132)、湖南省重点研发计划 (批准号: 2025AQ2024)、湖南科技大学科研启动基金 (批准号: E51996)、湖南省教育厅优秀青年基金 (批准号: 23C0260)、湖南省研究生科研创新项目 (批准号: LXBZZ2024281) 和湖南科技大学卓越学子计划 (批准号: SY2406) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yqzhao@hnu.edu.cn

的原子层, 由于两层原子的电负性存在差异, 材料在垂直方向形成了较大的内建电场, 这一特性打破了空间反演对称性, 使材料在物理与化学性质上呈现出不对称性. 此外, 厚度仅为几个至十几个原子层的二维 Janus 材料, 还表现出明显的量子限域效应; 这种典型的量子效应与材料的组成、结构、化学键及电子结构等因素密切相关<sup>[12-15]</sup>. 凭借独特的结构优势, 二维 Janus 材料在压电传感器、催化剂<sup>[16]</sup>、生物医学及能源存储等领域展现出广阔的应用前景<sup>[17,18]</sup>. 尤其值得关注的是, 具有大磁晶各向异性、高磁矩与本征磁拓扑特性的磁性 Janus 体系, 已成为发展新一代赛道级磁存储技术的重要候选材料<sup>[2,6,19-22]</sup>.

传统实验试错法在新材料探索过程中存在成本高、耗时长的问题. 基于第一性原理计算的高通量筛选虽能缩短实验周期、降低研发成本, 但面对结构复杂的大体系时, 仍面临算力需求高、时间成本大的瓶颈<sup>[23,24]</sup>. 近年来, 随着机器学习 (ML) 在凝聚态物理与微电子研究领域的兴起<sup>[25,26]</sup>, 研究者可通过模型从海量未知体系中快速筛选出满足目标物理性质的体系, 大幅缩短研发周期并降低实验成本; 随后再通过第一性原理计算开展理论研究, 验证模型预测结果的准确性.

机器学习与第一性原理计算的结合<sup>[27-29]</sup>, 显著提升了材料研究的效率与精度, 为新材料的快速发现和开发提供了有力支撑. 目前, 国内外科研人员已采用“机器学习+第一性原理计算”的方法, 对 Janus 材料及其异质结的物理、化学性质开展研究: Huang 等<sup>[30]</sup>通过机器学习结合密度泛函理论, 探究了 Janus 材料活性位点的局部偶极矩对单原子催化剂催化活性的显著影响, 发现局部偶极矩是调节催化活性的关键因素, 为设计高性能催化剂提供了新策略; Chaney 等<sup>[31]</sup>利用密度泛函理论与机器学习方法, 研究了 Janus 异质结 Mo/WXY ( $X, Y = S, Se, Te$ ) 表面锂的吸附与扩散行为, 分析了二维 Janus 过渡金属硫化物的结构不对称性对电子性质的影响, 并对比了 Janus 结构与常规 TMDs 结构的差异, 为锂的吸附与扩散机制提供了机理解释; Yan 等<sup>[32]</sup>通过替换不同过渡金属, 制备了二维铁磁 Janus MXenes 材料, 研究表明其基态铁磁性源于磁性原子 d 轨道电子的直接交换作用; 同时, 他们基于机器学习方法筛选出具有铁磁性的材料, 为自旋电子器件的开发提供了新方向. Xin 等<sup>[33]</sup>

利用机器学习框架对 2417 种二维材料进行计算筛选, 成功预测了 60 种新型二维铁磁候选材料 (其中 13 种具有高磁矩  $>7 \mu\text{B}$ , 并包含  $\text{Os}_2\text{Cl}_8$  铁磁半导体、 $\text{Fe}_3\text{GeSe}_2$  铁磁金属和  $\text{Mn}_4\text{N}_3\text{S}_2$  铁磁半金属等典型代表), 意外发现了多铁性候选材料  $\text{Cr}_2\text{NF}_2$ , 并将计算时间缩短了一个数量级以上. Jung 等<sup>[34]</sup>的研究表明, 通过结合系统的特征分析与梯度提升框架构建的机器学习模型, 在仅利用材料化学成分信息进行铁磁性  $T_c$  预测上取得了较高的精度 ( $R^2 \approx 0.92$ ,  $\text{MAE} \approx 41 \text{ K}$ ,  $\text{RMSE} \approx 80 \text{ K}$ ), 展现出高效筛选室温铁磁材料候选并预测磁相的潜力.

尽管上述研究通过机器学习在 Janus 材料性质挖掘方面取得了重要进展, 但针对六角晶系 Janus 磁性结构的居里温度预测仍有待深入探索; 此外, 如何通过特征工程与超参数优化进一步提升模型准确性, 也仍是当前面临的挑战. 因此, 研发适用于六角晶系 Janus 磁性体系的高效、准确的居里温度预测模型, 不仅能为拓展二维铁磁材料体系提供平台, 还将为凝聚态物理、微电子等领域带来新突破, 对自旋电子器件的发展具有重要意义.

本研究以化学计量、元素属性统计及电子结构信息为基础构建特征描述符, 建立了 4 种 Janus 磁性材料的居里温度预测模型, 并筛选出居里温度高于室温的 Janus 铁磁材料. 并通过对上述模型的优化, 显著提升了模型的回归精度与泛化能力. 之后, 基于表现性能最优的极端梯度提升模型, 对之前文献已预测的 4024 种具有高磁矩和热稳定性的 Janus 结构进行了训练, 得到了 54 种居里温度超过室温的结构<sup>[35]</sup>. 最后, 通过第一性原理计算进一步验证了模型筛选结果的可靠性. 本研究为高温稳定磁性 Janus 材料的筛选提供了高效手段, 加速了室温铁磁二维材料的发现进程, 对未来磁性材料研究具有重要支持作用.

## 2 数据及研究方法

本文结合机器学习与第一性原理计算, 对室温下具备本征磁性的 Janus 结构进行筛选, 其具体流程如图 1 所示, 主要分为 3 个阶段. 首先, 进行机器学习训练, 以优化预测模型; 随后, 采用递进式筛选策略, 逐步筛选符合条件的材料; 最后, 通过第一性原理计算验证筛选结果的准确性.

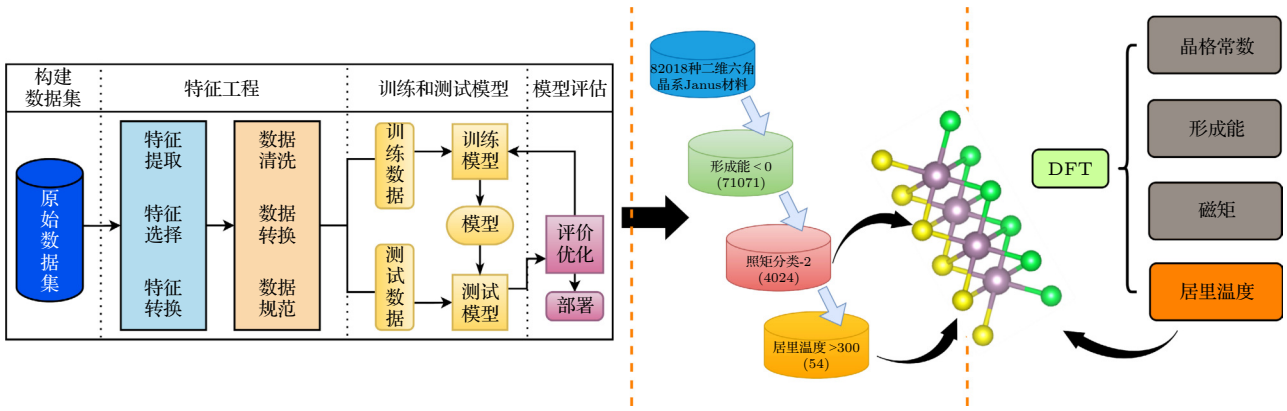


图 1 三步筛选室温本征磁性 Janus 步骤

Fig. 1. Three-step screening room-temperature intrinsic magnetic Janus procedure.

### 2.1 数据获取、分析及预处理

本文使用的数据来源于已发表的实验文献和相关开源数据库, 构建了包含 16880 种 ABC 型二维材料的数据集, 按 8:2 的比例划分为训练集和测试集. 并采用 66 种 ABC 型 Janus 材料作为独立验证集, 这部分数据仅包含材料的化学成分信息 (元素组成、化学计量比) 及居里温度值. 训练集和测试集涵盖 16880 种化合物, 包含约 4610 种不同的化学组成. 在数据处理阶段, 对于训练集和测试集中包含的约 4610 种不同化学组成 (对应 16880 种化合物样本), 若同一化学式因重复测量或样本差异存在多个居里温度值, 本研究通过计算这些温度值的中位数, 确定该化学组成的代表居里温度.

这是因为在实验测量中, 居里温度值可能会受

到多种因素干扰而产生异常值, 比如测量仪器的精度差异、实验环境的细微变化等. 如果使用均值来代表该化学组成的居里温度, 这些异常值会对结果产生较大影响, 使均值无法准确反映数据的集中趋势, 而中位数具有独特的优势. 中位数对异常值的敏感度低, 能够更稳健地代表数据的集中趋势. 采用中位数作为代表值, 可使后续的模型训练和分析更加可靠. 在本研究中, 这能让模型训练聚焦于化学组成与居里温度的核心关系, 有效避免异常值干扰, 进而增强模型的稳定性和泛化能力.

### 2.2 特征提取与处理

图 2 展示了 ABC 型二维材料的  $T_c$  分布及元素丰度分析结果. 可以观察到  $T_c$  的分布情况, 其

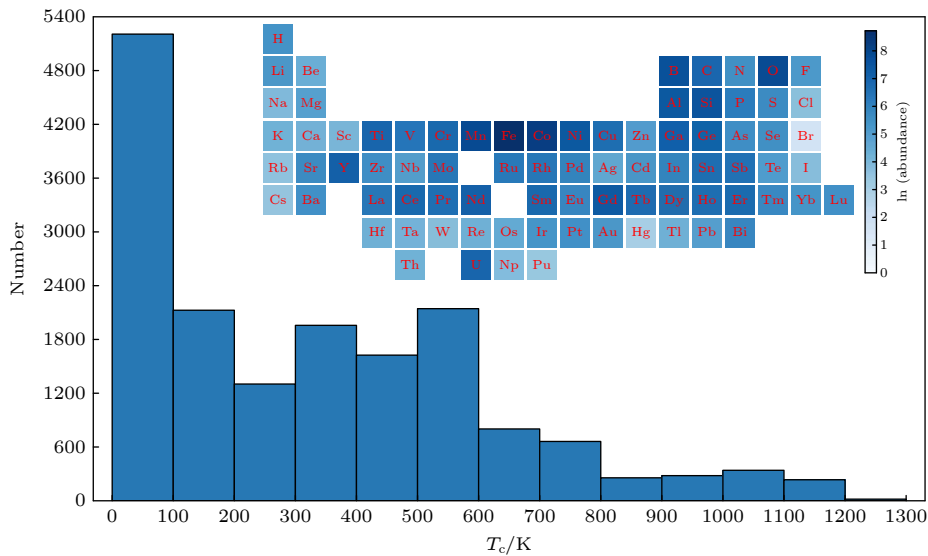


图 2 居里温度分布及元素丰度热力图

Fig. 2. Heat map of Curie temperature distribution and elemental abundance.

中大多数材料的居里温度集中在较低的范围, 在 0—600 K 之间, 且在该区间内有显著的峰值. 图中还展示了元素的丰富度信息, 显示了各元素在样本中的分布情况, 大多数元素的丰富度较低, 少数元素则具有较高的丰富度. 这一信息为我们理解化学计量特征和元素属性统计特征与  $T_c$  之间的关系提供了直观的线索. 具体而言, 材料的元素组分信息, 如元素的化学成分和配比, 可能直接影响材料的磁性特征. 因此, 本研究通过多种特征提取器对材料的元素组分和物理性质进行全面建模描述.

首先, 利用 Ward 等<sup>[36]</sup>的 ElementProperty 特征提取器获取元素的基本物理化学属性; 接着, 通过 ElementFraction 和 TMetalFraction 计算各元素及过渡金属的质量分数, 以反映其在材料中的相对含量; 此外, 使用 Stoichiometry 提取了材料的化学计量特征, 描述了元素的比例关系, 而 BandCenter 提供了材料带隙中心的信息, 反映了电子结构特性. 再引入筛选高磁矩 Janus 体系里特征提取工作中所得的元素间相互作用特征的 198 种特征, 共计得到 441 种特征, 通过整合这些特征, 构建了全面的多维特征表示.

为避免特征冗余, 在训练过程中应用了基于模型的特征选择方法, 意在从众多特征里挑出对模型性能影响大的子集, 提升模型效率、准确性与泛化能力. 这种方法基于训练好的模型计算的特征重要性评分来进行特征选择, 确保只保留对目标变量预测最有贡献的特征, 首先通过评估各特征在模型训练中的重要性评分, 在获得特征的重要性评分后, 特征按其重要性降序排列, 并通过计算累计重要性来确定保留的特征. 通过设置阈值 (本文中研究设置为累积重要性达到 95%) 筛选出重要性达到这一累计阈值的特征, 从而减少无关或冗余特征对模型性能的影响.

图 3 呈现了在居里温度预测任务中表现最佳模型 (即 XGBoost 模型) 的前 10 个最重要特征. 这些特征有助于揭示二维 Janus 材料内部磁相互作用的本质, 对于深入理解二维 Janus 材料的磁性有着至关重要的意义. 上述特征重要性分析中, 采取了特征简化操作: 对表示元素相互作用的特征矩阵名进行了合并, 当特征名含“matrix”时, 提取其首部分作为简化名, 如“Number\_matrix\_1”简化为“Number”, 去除“matrix”及后续后缀, 保留关键基础信息.

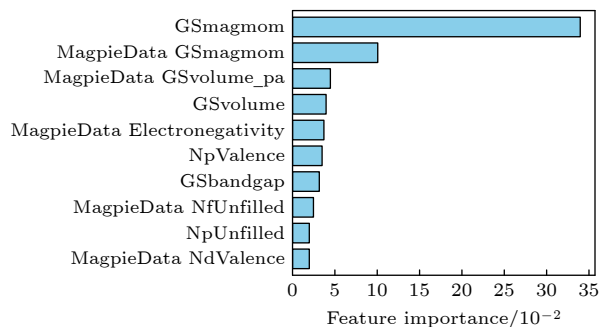


图 3 XGB 排名前 10 的特征

Fig. 3. Top 10 features of XGB ranking.

## 2.3 机器学习模型、超参数优化及训练

### 2.3.1 模型选择

本文选用了 4 种机器学习算法, 包括 Sklearn<sup>[37]</sup> 库的随机森林 (random forest, RF)、梯度提升决策树 (gradient boosting decision tree, GBDT)、极端随机树 (extremely randomized trees, ET) 以及基于专用的 XGBoost<sup>[38]</sup> 库的极端梯度提升算法 (XGBoost, XGB). 其中, XGB 作为高效的梯度提升法, 拥有分块训练、自动处理缺失值、正则化防过拟合等特性, 在大规模数据处理中表现优异. 这 4 种算法均能高效处理高维数据, 捕捉复杂特征交互, 学习能力强. 它们计算速度快、预测精度高, 为研究提供了可靠的模型选择, 有助于探索室温铁磁 Janus 结构.

### 2.3.2 超参数优化

在机器学习中, RF, GBDT, XGB 和 ET 等集成算法的性能高度依赖超参数调整. 尽管这些算法共享相似的基础结构 (如树的数量、深度等), 但分类与回归任务的目标差异导致参数调整策略显著不同. 对于上述 4 种算法, 树的数量 ( $N_c$ )、最大深度 ( $D_{max}$ ) 和最大特征数 ( $F_{max}$ ) 是共通的关键参数, 通过控制模型容量与复杂度影响全局性能. 在分类任务中, 较大的  $D_{max}$  值更易捕捉类别边界, 但需结合最小样本数 ( $L_{min}$ ) 及内部节点再划分所需的最小样本数 ( $S_{min}$ ) 抑制噪声过拟合; 回归任务则需限制树的最大深度以避免连续值波动的过拟合, 并通过  $F_{max}$  调整预测平滑性. 任务专属参数中, 分类侧重提升泛化能力, 如 GBDT/XGB 的样本子集比例 (Sub) 降低样本相关性, 最小化损失的增益 ( $\gamma$ ) 限制分裂增益; 而回归强调误差控制,

如 GBDT/XGB 的学习率 ( $L_r$ ) 与树的数量 ( $N_e$ ) 反向联动平衡收敛速度, 每棵树所采样的特征比例 ( $C_b$ ) 防止特征依赖. 参数间协同同样特别关键, 例如分类任务中低 Sub 需搭配浅层树 ( $D_{\max}$ ), 回归任务中低  $L_r$  需增加树的数量以充分拟合. 最终, 分类任务以优化决策边界为核心目标, 回归任务则以最小化预测误差为核心目标. 两者均通过参数间的协同作用, 在模型复杂度与泛化能力之间寻求动态平衡.

本研究采用贝叶斯超参数搜索技术<sup>[39]</sup>, 在超参数优化过程中, 每次迭代都基于贝叶斯统计预测各参数组合的潜在性能, 优先评估那些最有可能提升模型表现的参数组合. 这种策略通过持续更新概率模型, 并根据获得的性能数据优化搜索策略, 有效地识别出最佳参数配置. 通过在十折交叉验证中综合评估各参数组合的性能, 最终选择表现最优的超参数配置, 显著提升了模型的预测精度和泛化能力. 4 种算法模型的最优超参数见表 1.

表 1 4 种算法模型的最优超参数

Table 1. Optimal hyperparameters of four algorithmic models.

模型	超参数
RF	$D_{\max} = 16, F_{\max} = 0.20, N_e = 150,$ $L_{\min} = 2, S_{\min} = 6$
GBDT	$L_r = 0.04006057, N_e = 400, D_{\max} = 9,$ $Sub = 0.8, L_{\min} = 6, S_{\min} = 4$
XGB	$L_r = 0.01, D_{\max} = 14, N_e = 550,$ $Sub = 0.72422896, \gamma = 0.4, C_b = 0.15$
ET	$D_{\max} = 15, F_{\max} = 0.46545387, N_e = 200,$ $L_{\min} = 3, S_{\min} = 5$

### 2.3.3 模型测试与评估

模型评估是衡量模型性能的重要环节. 在建模初期, 数据集通常被划分为训练集和测试集. 训练集用于模型的“学习”, 模型通过训练集掌握数据的内在规律; 测试集则用于评估模型在实际应用中的表现. 模型评估通过比较已训练模型在测试集上的预测值与真实值, 从而判断模型的准确性及其泛化能力. 若模型在测试集上的表现良好, 表明其具有较强的泛化能力和实际应用价值; 反之, 则需对模型进行调整和优化, 以提高其性能.

上述 4 种算法使用均方误差 (mean squared error, MSE) 作为损失函数, 并通过拟合优度 ( $R^2$ )、平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 和均

方根误差 (root mean squared error, RMSE) 来评估其性能. 本文研究分别采用 4 种机器学习模型 (RF, GBDT, XGB 和 ET) 进行训练, 将训练完成的模型应用于提前划分出来的测试数据集与独立的验证数据集中, 便可完成模型的评估.

## 3 结果与讨论

### 3.1 居里温度

本文分别采用 RF, GBDT, XGB 和 ET 这 4 种算法训练 Janus 材料居里温度的预测模型, 并对模型性能进行了评估. 在模型评估环节, 运用十折交叉验证法, 记录 MAE, RMSE 和  $R^2$  等指标. 相关平均评估指标结果见表 2, 为各模型性能评估提供量化依据. 评价指标显示, XGB 模型表现最优异, 具有最低的 MAE, RMSE 及最高的  $R^2$  评分, 其中 MAE 为 33.5953, RMSE 为 76.5587,  $R^2$  为 0.9285. 较低的 MAE 数值表明该模型的预测误差相对稳定且较小, 能够较为精准地逼近真实值. 而 RMSE 对较大误差更为敏感, XGB 模型的 RMSE 值最低, 这进一步证明了该模型在应对复杂数据和潜在异常值时, 能够有效控制误差, 避免预测结果出现较大的波动.  $R^2$  作为衡量模型拟合优度的关键指标, XGB 模型的高分表明其能够解释数据中 92.85% 的变异, 这意味着模型对数据的拟合程度极高, 能够捕捉到数据背后的复杂模式和规律, 从而准确地预测居里温度. 与之相比, 其他 3 种模型 (RF, GBDT, ET) 在这些指标上表现相对逊色, 说明它们在预测精度、误差控制和数据拟合能力方面存在一定的提升空间.

表 2 居里温度预测: 4 种机器学习模型的评价指标

Table 2. Curie temperature prediction: Evaluation metrics for four machine learning models.

模型	MAE	RMSE	$R^2$
RF	39.9912	82.2442	0.9175
GBDT	36.5400	79.1969	0.9235
XGB	33.5953	76.5587	0.9285
ET	40.7323	81.8218	0.9184

为了更好地展示 XGB 模型在未知数据上的表现, 图 4(a) 展示了最优模型 XGB 在十折交叉验证中样本集上所有真实值与预测值拟合程度的散点图; 图 4(b) 展示了 XGB 在独立验证集上的误差

残差分析图. 图 4(c), (d); (e), (f); (g), (h) 分别展示了 ET, GBDT 和 RF 模型在十折交叉验证中的预测值与真实值拟合散点图 (左列) 以及在独立验证集上的误差残差分析图 (右列).

从图 4(a) 可见, 十折交叉验证样本集上, 代表训练样本的蓝色散点与代表测试样本的橙色散点紧密分布在对角线附近. 这表明 XGB 模型在训练集与测试集上拟合效果良好, 预测值和真实值偏

差小, 直观体现出模型在交叉验证中稳定性与准确性高, 能有效捕捉数据潜在规律, 精准预测样本真实值. 图 4(b) 中蓝点代表实验测得的居里温度 (experimental  $T_c$ ), 橙点代表模型预测的居里温度 (predicted  $T_c$ ), 两点的距离直观呈现二者差异, 预测值与真实值之间的 MAE 为 65.01 K. 可以看出, 虽有误差, 但大部分偏差在可接受范围, 残差分布分散, 无明显系统性偏移, 表明模型误差随

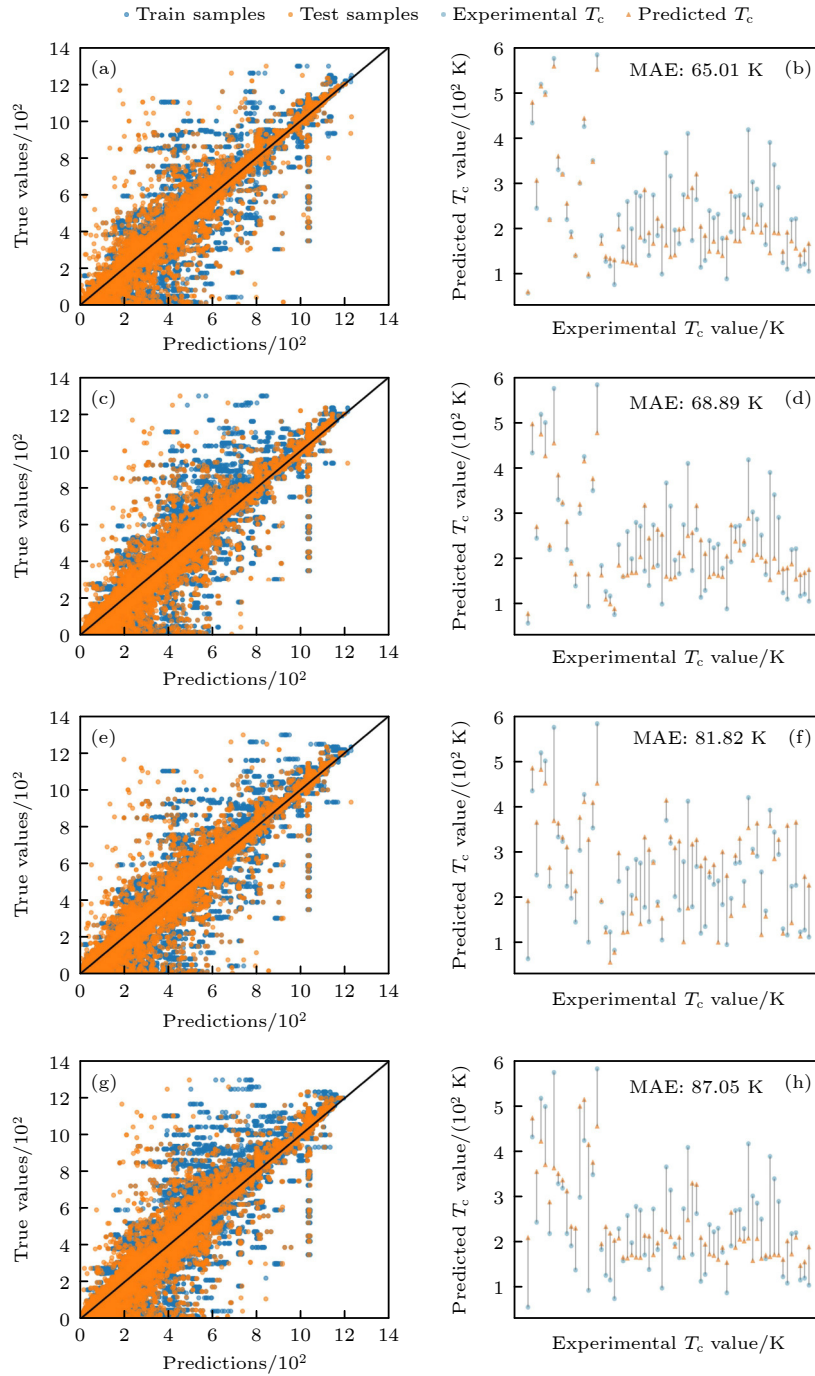


图 4 各模型的散点图和误差残差分析图 (a), (b) XGB 模型; (c), (d) ET 模型; (e), (f) GBDT 模型; (g), (h) RF 模型

Fig. 4. Scatter plots and error residual analysis plots of different model: (a), (b) XGB model; (c), (d) ET model; (e), (f) GBDT model; (g), (h) RF model.

机分布, 非系统性误差, 进一步证明其在独立验证集泛化能力佳, 在未知数据上也能保持一定预测精度, 不会过拟合.

### 3.2 高通量材料生成及第一性原理计算

在基于极端梯度提升模型 (XGB) 筛选出的 54 种同时具备热稳定性、高磁矩和高居里温度的 Janus 材料中, 我们随机选取了其中 4 种采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 第一性原理计算 [40,41] 方法进行验证. 通过维也纳从头算模拟包 (Vienna *ab initio* simulation package, VASP) 进行结构优化和静态计算. 交换关联泛函采用广义梯度近似 (GGA) 的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 型描述. 布里渊区中采用  $12 \times 12 \times 1$   $K$  点网格进行优化和自洽, 平面波截断能量设置为 500 eV, 为了避免周期性原子层之间的相互作用, 在  $c$  轴上引入了大于 15 Å 的真空层厚度. 每个原子上所受力的收敛标准设置为  $-0.02$  eV/Å, 能量收敛标准为  $1 \times 10^{-8}$  eV. 为了描述局域化电子之间的库仑排斥力, 对含有  $d$  轨道电子的强关联体系设置了有效场库仑相互作用参数 Hubbard  $U$  (具体见补充材料图 S1 (online)). 构建  $2 \times 1 \times 1$  的超胞, 以设置铁磁态与反铁磁态, 计算交换关联常数.

二维磁学的磁交换相互作用通常由海森伯模型描述, 通过基于经典蒙特卡罗 (CMC) 模拟的 MCSOLVER 程序, 计算候选 Janus 结构的  $T_c$ . 构建了  $128 \times 128 \times 2$  二维六角晶格, 以实现周期性边界条件, 在每个温度下进行 60000 次扫描以获得系统热平衡, 并从 840000 次扫描中提取磁矩随温度变化的数据, 如图 5 所示. 并且将 4 种材料计算的居里温度大小与预测值进行比较 (图 6), EuFeO 和 GdKTi 符合 XGB 模型预测居里温度的 MAE;

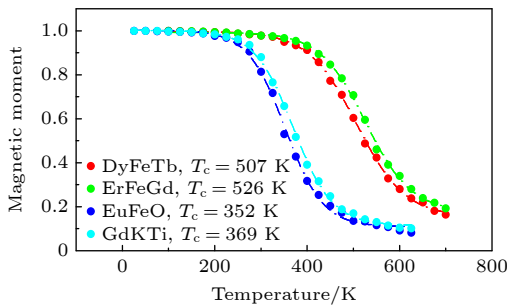


图 5 随机选取的 4 种 Janus 材料的磁矩随温度变化曲线  
Fig. 5. Magnetic moment versus temperature curves for four randomly selected Janus materials.

DyFeTb 和 ErFeGd 的 MAE 偏差较大, 但所计算得到的居里温度均高于室温.

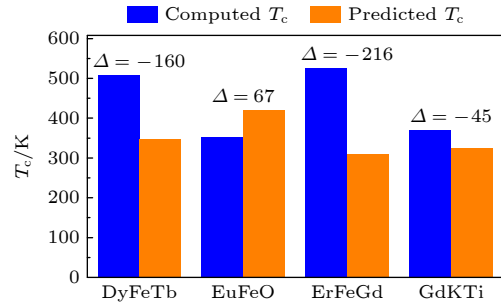


图 6 居里温度计算值与预测值柱状图  
Fig. 6. Bar chart of computed and predicted Curie temperatures.

## 4 结论

本文通过机器学习的训练并结合第一性原理的计算, 发掘具有高居里温度的二维 Janus 磁性体系. 基于文献实验数据及相关开源数据库, 构建了包含 16880 种 ABC 型二维材料的数据集作为训练和测试集, 并选取 66 种 ABC 型 Janus 材料作为独立验证集. 以化学计量、元素属性统计和电子结构等信息为特征描述符, 建立了能预测居里温度的随机森林、梯度提升决策树、极端梯度提升和极端随机树 (RF, GBDT, XGB, ET) 4 种机器学习模型, 并采用十折交叉验证法对模型可靠性进行了评估. 结果表明, 极端梯度提升模型 (XGB) 在居里温度预测方面表现最佳, 具备最高的精度和泛化能力 (MAE 和 EMSE 最低值分别为 33.5953, 76.5587,  $R^2$  最高为 0.9285). 基于该模型, 对 4024 种未被探索的 Janus 结构进行预测, 最终筛选出 54 种同时具备热稳定性、高磁矩和高居里温度的 Janus 材料. 最后, 基于第一性原理的海森伯模型, 采用蒙特卡罗的方法对随机选取的 4 种单元素磁矩的 Janus 结构进行了进一步验证, 得到的居里温度均高于室温 (GdKTi: 369 K, ErFeGd: 526 K, DyFeTb: 507 K, EuFeO: 352 K). 本研究为二维 Janus 材料的居里温度预测和高通量筛选构建了高效的机器学习模型, 对加速发掘室温下二维 Janus 磁体系提供了新方案.

## 参考文献

[1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. 2004 *Science* 306 666

- [2] Zhang Z W, Lang Y F, Zhu H P, Li B, Zhao Y Q, Wei B, Zhou W X 2024 *Phys. Rev. Appl.* **21** 064012
- [3] Liu B, Feng X X, Long M Q, Cai M Q, Yang J L 2022 *Phys. Rev. Appl.* **18** 054036
- [4] Xiong X J, Zhong F, Zhang Z W, Chen F, Luo J L, Zhao Y Q, Zhu H P, Jiang S L 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 137101 (in Chinese) [熊祥杰, 钟防, 张资文, 陈芳, 罗婧澜, 赵宇清, 朱慧平, 蒋绍龙 2024 物理学报 **73** 137101]
- [5] Zhao Y Q, Liu Z S, Nie G Z, Zhu Z H, Chai Y F, Wang J N, Cai M Q, Jiang S L 2021 *Appl. Phys. Lett.* **118** 173104
- [6] Lang Y F, Zou D F, Xu Y, Jiang S L, Zhao Y Q, Ang Y S 2024 *Appl. Phys. Lett.* **124** 052903
- [7] Liao C S, Ding Y F, Zhao Y Q, Cai M Q 2021 *Appl. Phys. Lett.* **119** 182903
- [8] Tan W, Zhang Z W, Zhou X Y, Yu Z L, Zhao Y Q, Jiang S L, Ang Y S 2024 *Phys. Rev. Mater.* **8** 094414
- [9] Lu X B, Fei R X, Yang L 2019 *Phys. Rev. B* **100** 205409
- [10] Jiang Z, Wang P, Jiang X, Zhao J 2018 *Nanoscale Horiz.* **3** 335
- [11] Sanvito S, Oses C, Xue J, Tiwari A, Zic M, Archer T, Tozman P, Venkatesan M, Coey M, Curtarolo S 2017 *Sci. Adv.* **3** e1602241
- [12] Zhang S Q, Xu R Z, Luo N N, Zou X L 2021 *Nanoscale* **13** 1398
- [13] Dai C Y, He P, Luo L X, Zhan P X, Guan B, Zheng J 2023 *Sci. China Mater.* **66** 859
- [14] Wang P, Zong Y X, Wen H Y, Xia J B, Wei Z M 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 026801
- [15] Ren K, Wang K, Zhang G 2022 *ACS Appl. Electron. Mater.* **4** 4507
- [16] Peng Z L, Huang J X, Guo Z G 2021 *Nanoscale* **13** 18839
- [17] Zhang L, Yang Z J F, Gong T, Pan R K, Wang H D, Guo Z N, Zhang H, Fu X 2020 *J. Mater. Chem. A* **8** 8813
- [18] Vafaeezadeh M, Thiel W R 2022 *Angew. Chem. Int. Edit.* **61** e202206403
- [19] Mukherjee T, Kar S, Ray S 2022 *J. Mater. Res.* **37** 3418
- [20] Li C Q, An Y K 2022 *Phys. Rev. B* **106** 115417
- [21] Zhang L, Zhao Y, Liu Y Q, Gao G Y 2023 *Nanoscale* **15** 18910
- [22] Xu L J, Wan W H, Peng Y R, Ge Y F, Liu Y 2024 *Ann. Phys.* **536** 2300388
- [23] Gao Z Y, Mao G Y, Chen S Y, Bai Y, Gao P, Wu C C, Gates I D, Yang W J, Ding X L, Yao J X 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 3460
- [24] Liu H, Sun J T, Liu M, Meng S 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 6709
- [25] Nelson J, Sanvito S 2019 *Phys. Rev. Mater.* **3** 104405
- [26] Belot J F, Taufour V, Sanvito S, Hart G L 2023 *Appl. Phys. Lett.* **123** 042405
- [27] Miyazato I, Tanaka Y, Takahashi K 2018 *J. Phys.: Condens. Matter* **30** 06LT01
- [28] Lu S H, Zhou Q H, Guo Y L, Zhang Y H, Wu Y L, Wang J L 2020 *Adv. Mater.* **32** 2002658
- [29] Ma X Y, Lü H Y, Hao K R, Zhao Y M, Qian X F, Yan Q B, Su G 2021 *Sci. Bull.* **66** 233
- [30] Huang T, Yang Z X, Li L, Wan H, Leng C, Huang G F, Hu W Y, Huang W Q 2024 *J. Phys. Chem. Lett.* **15** 2428
- [31] Chaney G, Ibrahim A, Ersan F, Çakır D, Ataca C 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 36388
- [32] Yan X H, Zheng J M, Zhao X, Zhao P J, Guo P, Jiang Z Y 2024 *Phys. Status Solidi Rapid Res. Lett.* **18** 2300468
- [33] Xin C, Yin Y, Song B, Fan Z, Song Y, Pan F 2023 *Chip* **2** 100071
- [34] Jung S G, Jung G, Cole J M 2024 *J. Chem. Inf. Model.* **64** 6388
- [35] Zhang Q, Tan W, Ning Y Q, Nie G Z, Cai M Q, Wang J N, Zhu H P, Zhao Y Q 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 230201 (in Chinese) [张桥, 谭薇, 宁勇祺, 聂国政, 蔡孟秋, 王俊年, 朱慧平, 赵宇清 2024 物理学报 **73** 230201]
- [36] Ward L, Dunn A, Faghaninia A, Zimmermann N E, Bajaj S, Wang Q, Montoya J, Chen J, Bystrom K, Dylla M, Chard K, Asta M, Persson K A, Snyder G J, Foster I, Jain A 2018 *Comp. Mater. Sci.* **152** 60
- [37] Pedregosa F, Varoquaux G, Gramfort A, Michel V, Thirion B, Grisel O, Blondel M, Prettenhofer P, Weiss R, Dubourg V, Vanderplas J, Passos A, Cournapeau D, Brucher M, Perrot M, Duchesnay E 2011 *J. Mach. Learn. Res.* **12** 2825
- [38] Ester M, Kriegel H P, Xu X 2023 *Geogr. Anal.* **55** 207
- [39] Wu J, Chen X Y, Zhang H, Xiong L D, Lei H, Deng S H 2019 *J. Electron. Sci. Technol.* **17** 26
- [40] Ma Q Y, Wan W H, Ge Y F, Li Y M, Liu Y 2022 *J. Magn. Magn. Mater.* **605** 172314
- [41] Yin W J, Tan H J, Ding P J, Wen B, Li X B, Teobaldi G, Liu L M 2021 *Mater. Adv.* **2** 7543

# Prediction of high Curie temperature Janus materials based on machine learning and first-principles calculations\*

LIU Zhaosheng<sup>1)</sup> ZHANG Qiao<sup>1)</sup> NING Yongqi<sup>1)</sup> FU Xiujiào<sup>1)</sup>  
 ZOU Daifeng<sup>1)</sup> WANG Junnian<sup>1)</sup> ZHAO Yuqing<sup>1)2)†</sup>

1) (*Hunan Provincial Key Laboratory of Intelligent Sensors and New Sensor Materials, School of Physics and Electronics, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China*)

2) (*State Key Laboratory of Superlattices, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

( Received 1 August 2025; revised manuscript received 12 September 2025 )

## Abstract

Magnetic skyrmions, characterized by their topological properties, serve as core components for developing next-generation non-volatile memory devices that demand high density, high speed, and low power consumption. Two-dimensional Janus magnetic materials inherently break spatial inversion symmetry, and easily generate strong DMI, providing an ideal platform for skyrmion generation and novel racetrack memory applications. Identifying high Curie temperature ( $T_c$ ) materials is essential for ensuring magnetic stability and high-temperature application viability. This study integrates literature and open-source databases to construct a dataset of 16880 ABC-type two-dimensional materials. By utilizing stoichiometric ratios, intrinsic elemental properties, and electronic structure features as descriptors, four machine learning models, i.e. random forest (RF), gradient boosting decision tree (GBDT), extreme gradient boosting (XGBoost), and extra trees (ET) are employed for  $T_c$  prediction. Model performance is evaluated via ten-fold cross-validation, revealing that the XGBoost model exhibits superior prediction accuracy and generalization capability. Leveraging this model,  $T_c$  is predicted for 4024 unexplored two-dimensional Janus materials. This screening identifies 54 promising candidates possessing thermal stability, high magnetic moment, and a  $T_c$  exceeding 300 K. To verify reliability, four candidate systems (EuFeO, GdKTi, DyFeTb, ErFeGd) are randomly chosen for theoretical validation by using first-principles calculations combined with the Heisenberg model. For systems exhibiting strong correlation effects (containing d-orbital electrons), the Hubbard  $U$  parameter is included to describe on-site Coulomb repulsion. Exchange coupling constants are derived using the VASP software package. Subsequently,  $T_c$  values are calculated via classical Monte Carlo simulations performed using the MCSOLVER program. The research results show that the mean absolute error (MAE) of the predicted  $T_c$  is in good agreement with the model calculations for EuFeO and GdKTi, while larger deviations are observed for DyFeTb and ErFeGd. Nevertheless, the calculated  $T_c$  values for all four candidates exceed room temperature. This work establishes a new computational framework for the efficient screening of high-performance two-dimensional Janus magnetic materials, contributing to the advancement of magnetic storage technologies.

**Keywords:** machine learning, two-dimensional magnetic Janus materials, Curie temperature, first-principles calculations

**PACS:** 02.70.Uu, 71.15.Mb, 75.30.Kz, 75.50.-y

**DOI:** 10.7498/aps.74.20251026

**CSTR:** 32037.14.aps.74.20251026

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12204166), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 2024JJ5132), the Key Research and Development Program of Hunan Province, China (Grant No. 2025AQ2024), the Scientific Research Start-up Fund of Hunan University of Science and Technology, China (Grant No. E51996), the Research Foundation of Education Bureau of Hunan Province, China (Grant No. 23C0260), the Postgraduate Scientific Research Innovation Project of Hunan Province, China (Grant No. LXBZZ2024281), and the Student Excellence Talent Initiative Program of Hunan University of Science and Technology, China (Grant No. SY2406).

† Corresponding author. E-mail: yqzhao@hnu.edu.cn

基于机器学习与第一性原理计算的高居里温度Janus预测

刘兆圣 张桥 宁勇祺 符秀交 邹代峰 王俊年 赵宇清

Prediction of high Curie temperature Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

LIU Zhaosheng ZHANG Qiao NING Yongqi FU Xiujiao ZOU Daifeng WANG Junnian ZHAO Yuqing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 220201 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20251026

CSTR: 32037.14.aps.74.20251026

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251026>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

基于机器学习和第一性原理计算的Janus材料预测

Prediction of magnetic Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

物理学报. 2024, 73(23): 230201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241278>

基于材料组分信息的高居里温度铁磁材料预测

Prediction of ferromagnetic materials with high Curie temperature based on material composition information

物理学报. 2023, 72(18): 180202 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230382>

单层Janus MoSSe在不同手性角单轴拉伸应变下力学性质的第一性原理研究

First-principles study of mechanical properties of Janus monolayer MoSSe under uniaxial tensile strains at different chiral angles

物理学报. 2025, 74(16): 166201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250437>

二维材料 $XTe_2$  ( $X = Pd, Pt$ )热电性能的第一性原理计算

Thermoelectric transport properties of two-dimensional materials  $XTe_2$  ( $X = Pd, Pt$ ) via first-principles calculations

物理学报. 2021, 70(11): 116301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201939>

原子尺度构建二维材料的第一性原理计算研究

First-principles calculation of two-dimensional materials at an atomic scale

物理学报. 2021, 70(2): 027301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201636>

外加电磁场下周期性体系的第一性原理计算方法

First-principles calculation method for periodic system under external electromagnetic field

物理学报. 2023, 72(23): 237102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231313>