2023 年度年次報告書

トランススケールな理解で切り拓く革新的な材料

2023 年度採択研究代表者

谷口 卓也

早稲田大学 データ科学センター

准教授

機械学習を活用した有機固相転移の計画的創出

研究成果の概要

機械学習を活用して構造相転移を探索するために、今年度は以下のことを実施した。まず、分子結晶におけるグラフ表現を比較した(原著論文 1)。バンドギャップを目的変数としてグラフニューラルネットワークで回帰分析した結果、予測精度に対する結晶グラフと分子グラフの寄与を定量評価することができた。次に、分子性結晶における機械学習ポテンシャルを検証した。Matlantis で提供される機械学習ポテンシャル (PFP) と Materials Project のデータで学習された CHGNet を比較した結果、PFP の方が分子性結晶における体積再現率が高いことがわかった(原著論文 2)。PFP を活用し、分子結晶の弾性率をスクリーニングすることができた。さらに、機械学習ポテンシャルを活用した分子動力学シミュレーションを行った。既知の熱応答性構造相転移について、機械学習ポテンシャルを用いた MD シミュレーションの再現性を確認した。熱応答構造相転移の MD 計算では、温度が平衡状態になるまでアンサンブルを繰り返す等温等圧 (NPT) アンサンブルにより構造変化を計算し、相転移を再現できる系と再現できない系を見出した。それらの違いや計算条件の修正は今後実施する予定である。また、機械学習ポテンシャル (PFP) を活用した結晶構造予測を行い、水素結合を形成する分子では結晶構造の予測が比較的容易である一方で、弱い分子間相互作用(ファンデルワールス力など)では結晶構造の予測が難しい場合があることがわかった。最後に、機械学習による有機無機ペロブスカイト材料のエネルギー変換効率の予測を行い、各プロセス条件の貢献度を定量評価した(原著論文 3)。

【代表的な原著論文情報】

- 1) T. Taniguchi, M. Hosokawa, T. Asahi, Graph Comparison of Molecular Crystals in Band Gap Prediction Using Neural Networks, *ACS Omega*, **8**, 39481-39489 (2023).
- 2) T. Taniguchi, Exploration of elastic moduli of molecular crystals via database screening by pretrained neural network potential, *CrystEngComm*, **26**, 631-638 (2024).
- 3) R. Fukasawa, T. Asahi, T. Taniguchi, Effectiveness and limitation of the performance prediction of perovskite solar cells by process informatics, *Energy Advances*, Advance Article (2024).