

機械学習を活用した分子結晶における構造相転移の発現傾向の探索

(早大院先進理工¹・早大データ科学センター²) ○高木 大輔¹・朝日 透¹・谷口 卓也²

Exploration of hidden trend of structural phase transitions in molecular crystals using machine learning (¹Graduate School of Advanced Science and Engineering, Waseda University, ²Center for Data Science, Waseda University) ○Daisuke Takagi,¹ Toru Asahi,¹ Takuya Taniguchi²

Some crystals change their structures due to external stimuli such as heat or pressure. This structural change is called a phase transition. The major method to explore new crystals with phase transition is the experimental approach. However, this approach requires hands-on exploration with many trials and errors, so it takes a lot of time and cost. If machine learning tells some tendency of structural phase transitions, it allows for the development of materials with little effort. This work aims to find such tendency.

From tens of papers, we collected the data of crystals with phase transition, including molecular crystal structures and thermal properties. We performed machine learning for classification task to classify whether a phase transition occurs or not.

Keywords : Machine learning; Structural phase transition; Molecular crystal; Materials informatics

結晶の中には、外部刺激により相転移を起こし、様々な電氣的・力学的機能を発現する結晶がある。新たな相転移結晶を探索するためには、手あたり次第に実験を行う必要があり、多くの費用と時間を要する。本研究では、既存の材料データに機械学習を適応させ、構造相転移の発現傾向を探索した。

熱刺激によって構造相転移を発現する分子結晶に関して報告した論文から、発熱および吸熱時の転移温度、転移エンタルピーなどの相転移に関する物性値を抽出した。さらに結晶の密度や分子構造に関する情報を加え、相転移結晶をまとめたデータセットを構築した。構築したデータセットを用いて、相転移の発現の有無を分類する機械学習モデルを作成した。モデルの分類結果について、説明変数を用いて議論する予定である。

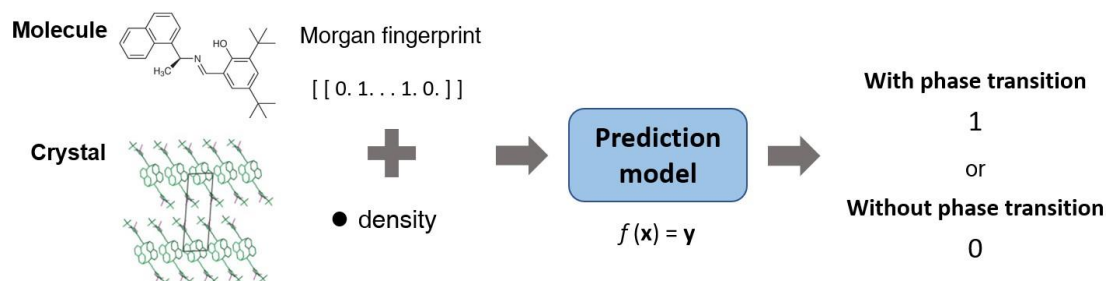


図 1. 本研究の概要