

DFT 計算と機械学習による低再配向エネルギー分子の設計

(明大院理工¹・パナソニック²) ○山本 統久¹・安藤 達人²・清水 直斗¹・松澤 伸行²・前嶋 宏行²・金子 弘昌¹

Design of low reorientation energy molecules using DFT calculations and machine learning (¹Graduate School of Science and Technology, Meiji University, ²Panasonic) ○Norihiisa Yamamoto,¹ Tatsuhito Ando,² Naoto Shimizu,¹ Nobuyuki Matsuzawa,² Hiroyuki Maeshima,² Hiromasa Kaneko¹

Materials exhibiting higher mobilities than conventional organic semiconducting materials such as fullerenes and fused thiophenes are in high demand for applications in printed electronics. To discover new molecules showing improved charge mobility, design of molecules with low reorganization energy was performed by combining density functional theory (DFT) methods and machine learning techniques. DFT calculated values of 165 molecules are used as an initial training dataset for constructing Gaussian process regression (GPR) model, and cycles of molecular designs by applying the GPR model and the validation with DFT calculations were executed for 5 times. As a result, the total number of molecules explored in this study was 269, which is a very small number compared to the previous study, and we could discover molecules that are expected to have a higher mobility than the supervised data. The characteristics of the structures of the high mobility materials explored in this study are consistent with those of previous studies and confirming the effectiveness of machine learning techniques in the search for high mobility materials.

Keywords : Semiconductor; Reorganization energy; Density functional theory; Bayesian optimization; Machine learning

プリントドエレクトロニクスや有機太陽電池の分野で、フラーレンや縮環チオフェンなどの高移動度の有機半導体材料が求められている。本研究では計算コストの観点から移動度と負の相関を持つ再配向エネルギーをターゲットに、密度汎関数法(DFT)による物性値計算と機械学習(ML)の技術を駆使して高移動度材料の高効率探索を試みた。

先行研究にて発見された高移動度材料 165 分子の DFT 計算値を教師データとしてガウス過程回帰モデルを構築し、大量の候補構造を ML モデルでスクリーニングして DFT 計算で検証する、というベイズ最適化のサイクルを 5 回実施した。結果として、総探索分子数が 269 分子という先行研究¹⁾と比較して非常に少ない数で、教師データを超える移動度を持つことが期待される分子を発見することができた。本研究にて探索した高移動度材料の構造の特徴はこれまでの知見からも妥当であり、ベイズ最適化の中で機械学習がその特徴を適切に学習したこと、および高移動度材料の探索における機械学習技術の有効性が確認された。

1) Marques, G.; Leswing, K.; Robertson, T.; Giesen, D.; Halls, M. D.; Goldberg, A.; Marshall, K.; Staker, J.; Morisato, T.; Maeshima, H.; Arai, H.; Sasago, M.; Fujii, E.; Matsuzawa, N. N. De Novo Design of Molecules with Low Hole Reorganization Energy Based on a Quarter-Million Molecule DFT Screen. *J. Phys. Chem. A*. **2021**, 125, 7331-7343.