

分子記述子を用いた機械学習による固相転移の分子スクリーニング

(早大データ科学¹・早大院先進理工²) ○谷口 卓也¹・高木 大輔²・石崎 一輝²・朝日 透²

Molecular screening of solid-solid phase transition by machine learning using molecular descriptor (¹Center for Data Science, Waseda University, ²Graduate School of Advanced Science and Engineering, Waseda University) ○Takuya Taniguchi,¹ Daisuke Takagi,² Kazuki Ishizaki,² Toru Asahi²

The solid-solid phase transition is an important phenomenon in the functional manifestation of molecular crystals, but its occurrence is difficult to predict. In this study, we screened molecules that can induce the solid-solid phase transition by machine learning using molecular descriptors. We constructed our own phase transition database, and the learned classifiers suggested candidate molecules that could undergo solid-state transitions, and we confirmed that solid-state transitions occur in some of them.

Keywords : Phase Transition; Molecular Descriptor; Machine Learning

固相転移を発現する有機結晶は、センサやアクチュエータなどの新規材料として応用が期待されている。相転移を発現する未知の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。また現状では、理論計算による予測も困難である。そこで本研究では、分子記述子を用いた機械学習により構造相転移の発現傾向を探索した(図1)。固相転移データセットを自ら作成し、相転移の報告がない結晶についてはケンブリッジ結晶構造データベースから収集したのち、相転移の発現可能性を予測する分類モデルを構築した。分子スクリーニングの結果、相転移の報告がない分子のうち相転移の発現可能性が高い6分子を見出し、このうち少なくとも2分子は固相転移を発現することが確認できた。また、転移温度と転移エンタルピーについて回帰の有効性を検討した結果、分子構造が転移温度に影響を与えることが分かり、Mordred記述子のどの次元が影響しているかを明らかにした。

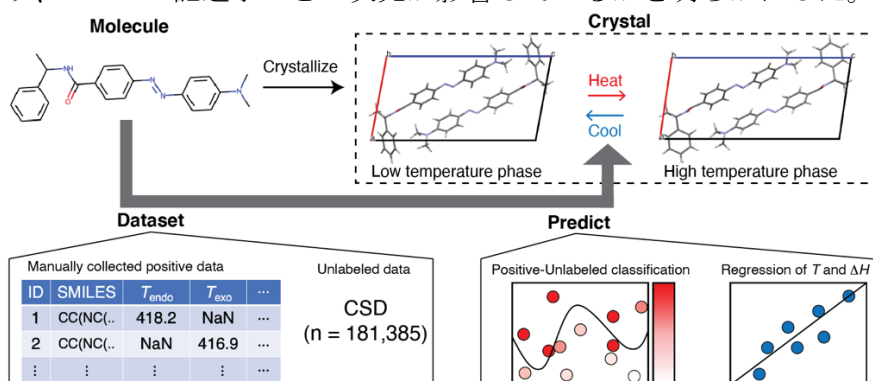


図1. 分子記述子を用いた固相転移の分類と回帰

1) D. Takagi, K. Ishizaki, T. Asahi, T. Taniguchi, *ChemRxiv*, 10.26434/chemrxiv-2022-8z976-v2 (2022).