

機械学習支援による有機半導体結晶構造解析**Machine learning assisted crystal structure analysis of organic semiconductors**

東大新領域¹, 筑波大数物², 豊橋技科大³, NEC⁴, CONFLEX⁵ °新津 直幸¹, 沢辺 千鶴¹, 三谷 真人¹, 石井 宏幸², 小林 伸彦², 後藤 仁志³, 広瀬 賢二⁴, 小畑 繁昭⁵, 中山 尚史⁵, 渡邊 峻一郎¹, 岡本 敏宏¹, 竹谷 純一¹

Univ. of Tokyo¹, Univ. of Tsukuba², Toyohashi Univ. of Tech.³, NEC⁴, CONFLEX⁵,

°Naoyuki Niitsu¹, Chizuru Sawabe¹, Masato Mitani¹, Hiroyuki Ishii², Nobuhiko Kobayashi²,

Hitoshi Goto³, Kenji Hirose⁴, Shigeaki Obata⁵, Naofumi Nakayama⁵, Shun Watanabe¹,

Toshihiro Okamoto¹, Jun Takeya¹

E-mail: n-niitsu@edu.k.u-tokyo.ac.jp

単結晶有機半導体材料において、その分子間配置は特性に大きく影響を及ぼす。そのため、分子が結晶中でどのような配置をとり得るかという情報を早期に知することは、単結晶有機半導体材料の開発において非常に重要であるといえる。近年では、数値計算による結晶構造予測技術の発展により、与えられた分子が取り得る結晶構造を網羅的に算出することができるようになってきた。しかし、多くの結晶多形の候補の中から現実を反映したものを選び出すことは容易ではない。また実験的には、一般に単結晶 X 線回折を用いた結晶構造解析が用いられるが、新規材料の単結晶作製には多くの時間を要してしまう。粉末 X 線回折は、有機結晶では結晶構造解析が非常に困難であることが知られているが、単結晶化を必要としないため比較的容易に測定が可能であり、早期の判断に適していると考えられる。

有機結晶は格子が大きく対称性が低いことから粉末 X 線回折パターン内で複数のピークが重なって現れており、これが結晶構造解析の困難さの要因の 1 つとなっている。我々はこれまでに機械学習のテクニックを用いることにより、計算により算出された粉末 X 線回折パターンに含まれるピーク位置の抽出を試み、高い確度での抽出が可能であることを示してきた[1]。

本研究では適用範囲拡大のため学習データや学習手法を改良することで、実験で測定されたデータへの対応を試みた。学習には 3 層の順伝播型ニューラルネットワークを用い、入力したスペクトル中のピークを抽出するモデルを構築した。さらに応用として、モデルによって抽出されたピーク位置の粉末 X 線構造解析への適用を試みた。講演では、これらの結果について報告する。

[1] 新津直幸 他, “機械学習による有機半導体の構造研究 II”, 日本物理学会秋季大会(2018)