

量子ドットの光物性における強化学習逆設計手法の応用

Inverse design of colloidal quantum dots optical property via reinforcement learning

電通大 i-PERC&基盤理工¹, 東大先端研², 株)グリッド³

°(M2) 吉田 響¹, 坂本 克好¹, 山口 浩一¹, 沈 青¹, 岡田 至崇², 曾我部 東馬^{1,2,3}

¹Univ. of Electro-Comm., ²The Univ. of Tokyo, ³Grid inc.

E-mail : sogabe@uec.ac.jp

はじめに 近年、第一原理計算による信頼性の高い計算を行うことが可能になったことにより、量子ドットの物性を計算により予測できるようになった。[1]しかし、第一原理計算による予測は計算コストが高いため、ごく小規模の分子の計算に限られた。また、機械学習モデルによる予測により、第一原理計算を超える精度の結果が報告されている。[2]本研究は量子ドットの光物性の予測及び量子ドットの逆設計のため、第一原理計算、機械学習、最適化手法と強化学習を融合した AI 逆設計手法の構築を目指す。(図 1)

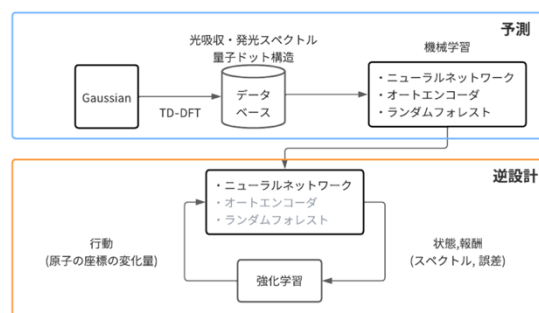


図 1 量子ドットの AI 逆設計の仕組み

実験結果 図 2 は、機械学習モデルと強化学習による逆設計の結果を示している。量子ドットは Cd, Se, Te から構成される様々な大きさの量子ドットを作成した。量子ドットの光吸収・発光スペクトルの計算は Gaussian16 の TD-DFT/CAM-B3LYP を用いて行った。構造データと TD-DFT により計算された光吸収・発光スペクトルのデータを用いて、機械学習モデルによる光吸収・発光スペクトルを予測した。学習済みの機械学習モデルと強化学習、粒子群最適化手法を用いて構造逆設計を行った。図 2(a)は本研究での目標の構造と吸収スペクトルである。図 2(b),(c)は学習済みの機械学習モデルと強化学習を用いて逆設計された吸収スペクトルと学習曲線の結果である。今後、機械学習による予測の精度や逆設計の際の強化学習、最適化手法のアルゴリズムについて検証を行い、会議の際にその結果について報告する。

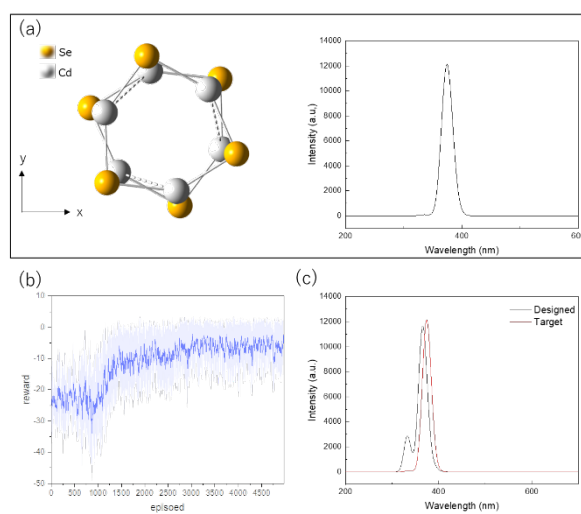


図 2(a)逆設計の目標のスペクトルとその構造,(b)強化学習のリワードカーブ, (c)逆設計された吸収スペクトル

[1] Kocevski, Vancho, et al. *Scientific reports* 5 (2015): 10865.

[2] Faber, Felix A., et al. *Journal of chemical theory and computation* 13.11 (2017): 5255-5264.