

機械学習を活用した様々なヤング率のサリチリデンアミン結晶の設計と作製

(早大院先進理工¹・早大データ科学センター²) ○石崎一輝¹・朝日透¹・谷口卓也²
 Design and fabrication of salicylideneamine crystals with various Young's modulus using machine learning (¹ Graduate School of Advanced Science and Engineering, Waseda University, ² Center for Data Science, Waseda University) ○Kazuki Ishizaki,¹ Toru Asahi,¹ Takuya Taniguchi²

Photomechanical crystals are expected as the novel actuation materials, due to control remotely by light irradiation. In our previous work, the generated force of the photomechanical salicylideneamine crystals was about 8 mN even under optimal conditions. To increase the generated force, it is necessary to explore the optimal condition in a wide range. In this research, for this aim, we designed and prepared the photomechanical crystals with various Young's moduli based on machine learning. Data of molecular structures and Young's moduli was accumulated from the published papers for machine learning. Using the dataset, LASSO regression identified the substituents that correlate with the Young's modulus. Based on the tendency between the substituents and the Young's moduli, several salicylideneamine molecules were synthesized and crystallized. The Young's moduli of the obtained crystals were measured by nanoindentation.

Keywords : Machine learning; Young's modulus; Salicylideneamine crystal; Generated force

光駆動結晶は、光照射による遠隔操作が可能であることから新しいアクチュエータ材料として期待されている。我々の既報研究により、作製した光駆動サリチリデンアミン結晶の発生力が最適な実験条件でも 8mN 程度しか出力しないことを見出した¹⁾。発生力の向上を達成するために広い範囲での条件探索をし、最適な条件を見出す必要がある。そこで本研究では発生力向上を最終的な目標とし、機械学習を活用して様々なヤング率のサリチリデンアミン結晶の設計と作製を行った。

ヤング率を多様化させる方針を見出すために、過去の論文から分子構造とヤング率を網羅的にまとめ、機械学習に必要なデータセットを構築した。構築したデータセットに対して LASSO 回帰を行い、ヤング率に相関のある置換基を特定した (表 1)。機械学習により得られた分子設計指針をもとに複数の光反応性サリチリデンアミン分子を合成し、結晶作製した。ナノインデンテーションによりヤング率を測定することで、機械学習による分子設計の妥当性を検証した。

表 1. LASSO 回帰の結果

官能基	LASSO回帰における係数
ヒドロキシ基	1.394
ニトロ基	1.013
ハロゲン	-0.307
ベンゼン環	-1.628

1) Kazuki Ishizaki, Ryota Sugimoto, Yuki Hagiwara, Hideko Koshima, Takuya Taniguchi, Toru Asahi, *CrystEngComm*, **2021**, 23, 5839-5847.