

機械学習による新物質探索マップの作成

Maps for New Materials Search Generated by Machine Learning

東大新領域¹、物材機構²、東北大金研³、京大⁴

○(M2) 稲田 祐樹¹, 桂 ゆかり^{1,2}, 森戸 春彦³, 熊谷 将也⁴, 木村 薫¹

Univ. of Tokyo¹, National Inst. for Materials Science², Tohoku Univ.³, Kyoto Univ.⁴,

°Yuki Inada¹, Yukari Katsura^{1,2}, Haruhiko Morito³, Masaya Kumagai⁴, Kaoru Kimura¹

E-mail: inada@phys.mm.t.u-tokyo.ac.jp

【緒言】材料科学のブレイクスルーは、新規無機化合物の発見によって牽引される。しかし、周期表から闇雲に元素を選んで合成を試みるだけでは、未反応や既知化合物の生成で終わりやすい。近年、データ科学によって材料科学研究を効率化する Materials Informatics(MI)が注目されている。そこで本研究では、結晶構造データベースの機械学習によって、新規化合物のできる元素の組み合わせの提案を試みた。化合物ができる元素の組み合わせを正例、化合物が報告されていない元素の組み合わせを負例とみなして教師データを用意し、分類問題として化合物生成可能性を予測した。この機械学習モデルを用いて、三元系で化合物を作ることができる可能性を図示した、化合物探索マップを作成した。この探索マップを参考として、新規無機化合物の探索実験を行った。

【研究方法】Materials Project[1]上に存在する化合物データから、三元系以下の安定化合物が存在する元素の組み合わせ 14,099 件を得た。このうち 12,000 件をランダムに抽出し、正例の教師データとした。データの存在しなかった残りの元素の組み合わせから 12,000 件をランダムに選んで、負例の教師データとした。入力として 3 つの元素を選択後、それらの元素の特徴を独自の元素記述子[2]に基づいて入力ベクトルに変換し、ニューラルネットワークによる機械学習を行った。80×80×80 元素の組み合わせについて、化合物の生成可能性を 0~1 の値で予測し、それを 80 枚のヒートマップに図示した。ここから、先行研究が少なく新物質の生成可能性が高く予測された材料系として M-Al-Ge 系に着目し、新物質探索実験を行った。原料元素粉末を所定のモル比で混合して BN るつぽに充填後、金属管に密閉して固相反応を行った。得られた試料の粉末 XRD パターンから未知相の存在を検出し、単結晶 X 線回折により順次構造同定を試みた。

【結果】今回作成した機械学習モデルでは、正例と負例に対する正答率はそれぞれ 68.9%、69.1% となった。このモデルを用いて作成したヒートマップには、教師データ上に存在しない元素の組み合わせでも、正例と予測された部分が多く存在した。そこで、これらの予測結果によって提案された元素の組み合わせで実験を行ったところ、32 種類の元素の組み合わせにおいて未知ピークを持つ化合物が得られた。現在、これらの結晶構造の同定に取り組んでいる。

【結言】機械学習によって作成した 80 枚の新物質探索マップと、それに基づく新物質探索実験によって、多数の新規化合物と考えられる物質の合成に成功した。

【参考文献】[1] A. Jain. *et al.*, *APL Materials*, **1(1)**, 011002 (2018). [2] 稲田 祐樹, 桂 ゆかり, 熊谷 将也, 木村 薫, 「配位構造に着目した新規元素記述子の作成」、日本金属学会 2020 年秋季講演大会.