

2024 年度年次報告書

トランススケールな理解で切り拓く革新的マテリアル

2023 年度採択研究代表者

谷口 卓也

早稲田大学 データ科学センター

准教授

機械学習を活用した有機固相転移の計画的創出

研究成果の概要

本年度は、機械学習を基盤に有機固体の構造相転移を予測・解析するためのワークフロー構築を進めた。まず、Materials Project で学習した機械学習ポテンシャル CHGNet が有機結晶の体積を過大評価する問題を解決すべく、PFP の出力をソフトターゲットとして用いる知識蒸留を実施した。安定構造の体積誤差を 13.7 %から 2.0 %に低減することができ、弾性率の予測精度も向上した。ハードターゲット損失を抑えた条件で損失曲線が交差することが学習成功の鍵であり、少量データから高精度 NNP を効率的に構築し、構造予測と物性スクリーニングを加速する手法を確立した(原著論文 1)。次に、空間群と結晶密度を機械学習で予測して結晶構造の探索範囲を絞り込み、NNP で構造緩和を行う結晶構造予測(CSP)ワークフローを開発した。その結果、20 種の有機結晶で CSP 成功率を 40 %から 80 %に倍増させた。さらに、機械学習ポテンシャルを用いてギブズ自由エネルギーを計算するワークフローを構築し、多形が既知の有機結晶で相転移を再現するエネルギー挙動を得た。今後は 上記 CSP とギブズ自由エネルギー計算を統合した一貫したワークフローを構築する予定である。加えて、光駆動有機結晶の力を最大化するため、LASSO 回帰とベイズ最適を構築した。LASSO 回帰によりヤング率に寄与する官能基を抽出してサリチリデンアミン誘導体を合成した。8 種の結晶についてサイズと光強度をベイズ最適化で探索した結果、37.0 mN の発生力を達成し、従来のグリッドサーチと比べて実験効率を 73 倍に向上させた(原著論文 2)。以上の成果により、機械学習を活用した相転移探索と機能向上において重要な進展が得られた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) T. Taniguchi, Knowledge distillation of neural network potential for molecular crystals, *Faraday Discussions*, **256**, 139-155 (2025).
- 2) K. Ishizaki, T. Asahi, T. Taniguchi, Machine Learning-Driven Optimization of Output Force in Photo-Actuated Organic Crystals, *Digital Discovery*, Advance Article (2025).