

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

H28 年度採択研究者

2018 年度 実績報告書

森 寛敏

お茶の水女子大学基幹研究院

准教授

特定混合比で発現する特異物性を利用した新材料創成のための
第一原理分子シミュレーションと機械学習の連携

§ 1. 研究成果の概要

研究3年度は、研究構想で述べた3つのサブテーマの内、①混合溶媒・冷媒の構成候補となる有機分子フラグメントの電子状態 DB の拡大を進めつつ、②有機混合液体の熱力学物性実験データを正解情報とした「共沸の有無」予測方法の開発に具体的に取り組み、③低環境負荷(低GWP)で高効率な共沸混合冷媒の迅速設計へと研究を移行予定であった。だが、サブテーマ③を確実に実施するには、これまでに②で得てきた共沸物性予測器の精度向上を図ることが先決である。そこで、混合物の共沸物性のテーマを一旦単純化する方向に舵を切り、「純物質の沸点・融点」予測精度の向上に取り組むこととした。

1000 を超える化合物の沸点・融点の実験データベースを取りまとめ、分子の幾何構造と電子状態を特徴量として、それらの機械学習に取り組んだところ、沸点については分子構造の情報のみから 8 [K] の絶対平均誤差での推算を実現した。融点については、従来、分子構造の情報のみからは不可能であったが、27 [K] の絶対平均誤差での推算を実現した。融点についてはまだ精度改善の余地が残されているが、沸点については、混合冷媒の共沸特性を調査するにあたり十分な精度向上を実現できた。また関連して、冷媒候補物質の超臨界状態について、ns 秒オーダーの第一原理計算を、僅か一台の PC で数日間のシミュレーションできる技術(有効フラグメントポテンシャル分子動力学計算)を実現した。本成果については、*J. Phys. Chem. B* 誌の注目論文としてカバーアートにも採択され(Kuroki & Mori, *J. Phys. Chem. B*, 2019, 123 (1), pp 194-200, DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b07446)、さらには2019年1-3月期間の most read articles (Top 20) となった。



§ 2. 研究実施体制

①研究者: 森 寛敏 (お茶の水女子大学基幹研究院 准教授)

②研究項目

・有機混合液体の熱力学物性実験データを正解情報とした「共沸物性」予測方法の開発