

# マテリアルズインフォマティクス(MI)を用いた 新規有機半導体材料の構造探索

データ駆動型アプローチから高効率に新材料の候補を提案可能です

測定法 : 計算科学・データ解析

製品分野 : 太陽電池、照明、ディスプレイ、医薬品、化粧品、日用品、その他(有機半導体)

分析目的 : その他(材料特性評価)

## 概要

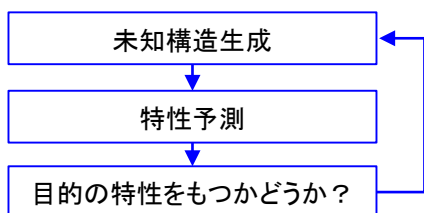
有機材料に限っても、存在し得る化合物構造の組み合わせは膨大であり、従来の特性を超える新材料の多くは未知の状態にあるといえます。このような膨大な組み合わせから有効な特性を持つ新材料の探索には、機械学習を用いたアプローチが適しています。本資料では、実際に課題の設定から達成まで、インフォマティクスを活用した事例を紹介します。化合物データセット、目的の特性をお客様の課題に合わせて設定することにより、同様のアプローチでインフォマティクスによる化合物探索が実施可能です。

## データ

### ■事例紹介 ～ マテリアルズインフォマティクスの実践 ～

「ルブレンより高い電荷移動度、深いHOMOを持つ分子の探索」をデモ課題とし、構造探索を実施しました。

#### ■1. 構造探索の流れ



上記のサイクルを繰り返すことで、  
▶ 「目的の特性を持つ未知の化合物は何か？」  
という逆問題を解くことが可能です。

#### ■2. Marcus理論における電荷移動反応

再配向エネルギー

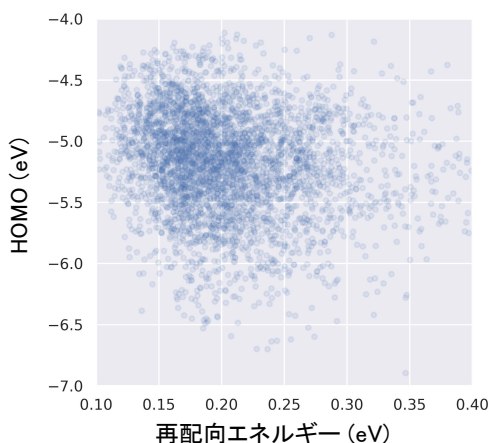
$$\lambda = (E_+^* - E_+) + (E_0^* - E_0)$$

	中性状態	カチオン状態
中性構造	$E_0$	$E_+^*$
カチオン構造	$E_0^*$	$E_+$

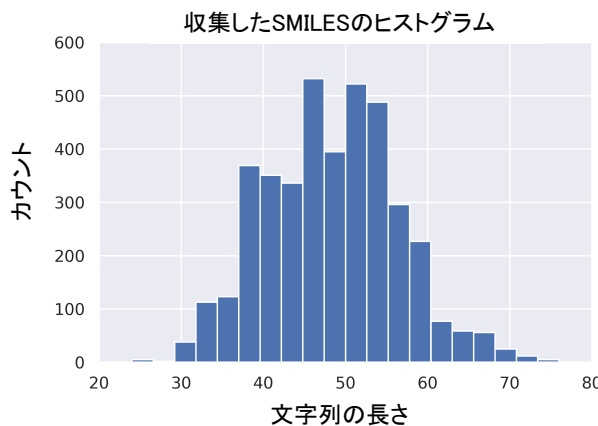
▶ 再配向エネルギーが低いほど、電荷移動度が  
高くなると仮定し、低い再配向エネルギーを持つこと  
を探索条件としました。

#### ■3-1. 教師データの作成

1. 公開データを元に有機半導体材料に関連する化合物のSMILES(※)を収集しました。
2. SMILESを元に初期構造を生成し、量子化学計算から、再配向エネルギー、HOMOを計算しました。



教師データセット



※化合物の構造を1行の文字列で表記したもの

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人  
**MIST** 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp  
URL : <https://www.mst.or.jp/>

# マテリアルズインフォマティクス(MI)を用いた 新規有機半導体材料の構造探索

データ駆動型アプローチから高効率に新材料の候補を提案可能です

測定法 : 計算科学・データ解析

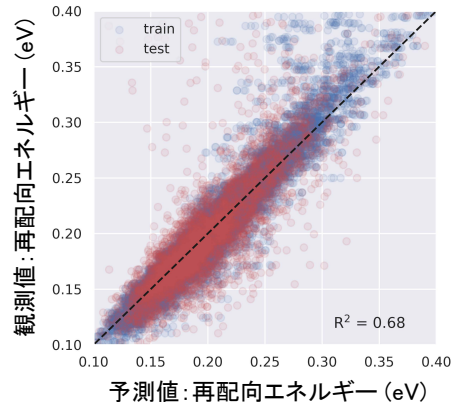
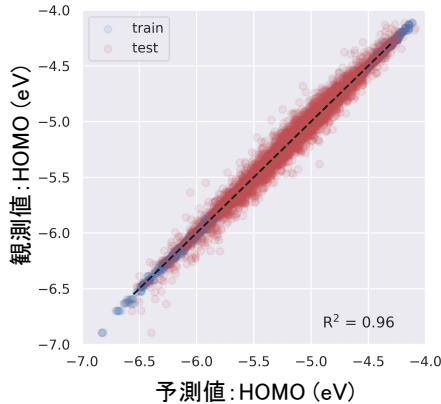
製品分野 : 太陽電池、照明、ディスプレイ、医薬品、化粧品、日用品、その他(有機半導体)

分析目的 : その他(材料特性評価)

## データ

### ■3-2. 特性予測モデルの作成

教師データ、勾配ブースティング法、クロスバリデーションを使い予測モデルの作成、評価を行いました。



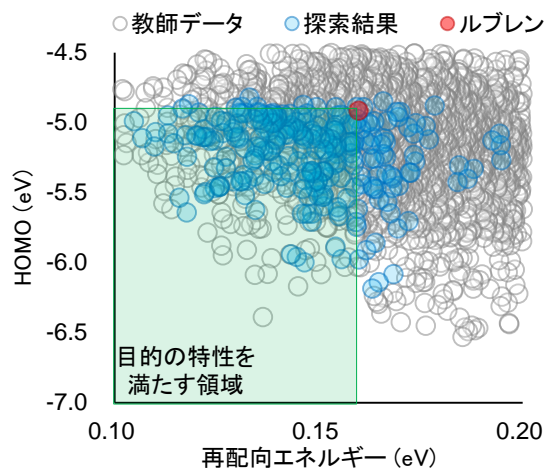
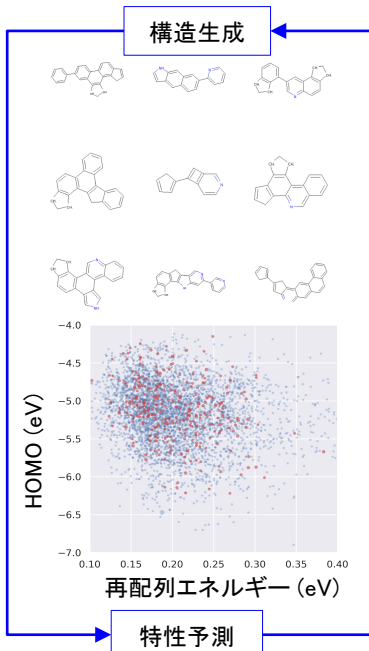
特性予測モデル

### ■3-3. 未知構造生成モデルの作成

教師データのSMILESに対し、自然言語処理アルゴリズムを適用し、未知構造生成モデルを構築しました。

### ■3-4. 新規化合物の構造探索

構造生成→特性予測→構造生成→……のサイクルを回し、目的の特性を持つ未知化合物を探索しました。



構造探索の結果、332種の新規化合物が候補として挙げられました。量子化学計算により、候補の探索化合物の特性を確認した結果、191種の新規化合物が目的の特性を満たすことが確認できました。

最終結果を解析することで、特性に影響の与える構造の考察など、新たな知見を得ることも可能です。



Point

✓ 設計、開発、実行まで、インフォマティクスによる探索モデルを、お客様の課題に合わせてご提案します。

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人  
**MIST** 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp  
URL : <https://www.mst.or.jp/>