

## 小規模データのマテリアルズインフォマティクスで挑む有機機能材料の探索と性能向上

(慶大理工) ○緒明 佑哉

Exploration and Enhanced Performances of Functional Organic Materials by Small-Data-Driven Materials Informatics (*Faculty of Science and Technology, Keio University*) ○Yuya Oaki

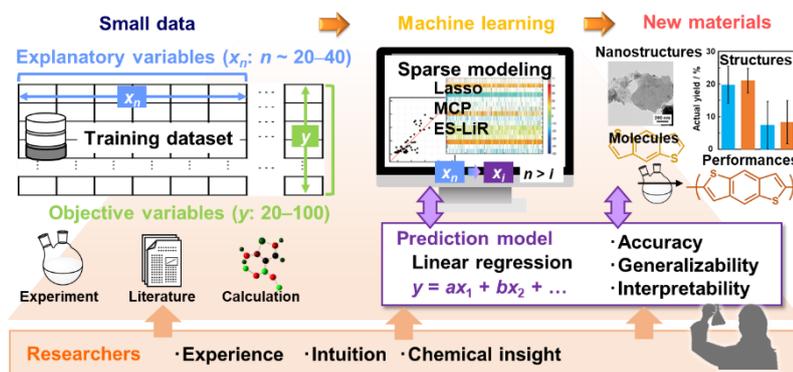
Our group has developed materials informatics combining sparse modeling and chemical insight for small data to optimize processes and explore new materials. I introduce the method of sparse modeling for small data (SpM-S) and its case studies to explore new functional organic materials for energy-related applications, such as battery and electrocatalyst.

*Keywords* : Small Data; Materials Informatics; Sparse Modeling; Conjugated Polymers; Energy-related Applications

マテリアルズインフォマティクス(MI)が注目されてから約10年が経ち、広く化学・材料への適用が進んでいる。MIを活用した有機機能材料の研究も盛んに行われている。近年では、ロボットやフロープロセスの利用、クローズドループの生成による自律自動化が急速に進んでいる。一方、有機機能材料創製へのMIの適用は、依然として様々な課題が存在する。例えば、データ量や質が十分でないことが多いこと、分子から材料に至る階層的なスケールの構造と機能の相関が複雑なこと、意外性と妥当性を両立した新規材料の提示と創出が難しいこと、研究者の熟練と経験が融合しにくいことなどが挙げられる。実験化学者である我々は、典型的な実験系のラボで得られる程度の小規模データをもとにプロセス最適化や物質探索を効率的に行うため、スパースモデリングと研究者の考察を融合した小規模データ向けMIを開拓してきた(Fig. 1)<sup>1)</sup>。本発表では、その手法およびエネルギー関連材料を中心とした有機機能材料への適用事例について紹介する。

我々は、20–100個

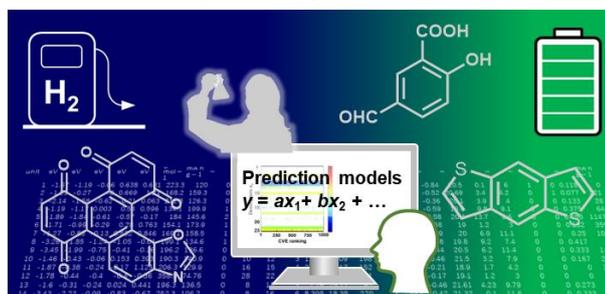
程度の目的変数を含む小規模なデータを対象としてきた<sup>1-12)</sup>。目的変数は、収率等の合成<sup>2,3,6)</sup>、サイズ等の構造<sup>4,5)</sup>、容量や反応電位等の機能<sup>7-11)</sup>に関するパラメータとする。目的変数と相関があると考えられる説明変数を、研究者の経験や考察等をもとに挙げ、訓練データセットを作成する。続いて、機械学習を活用したスパースモデリングにより、寄与が大きな説明変数を記述子候補として抽出する。さらに、研究者の経



**Fig. 1.** Schematic illustration of our materials informatics combining machine learning and chemical insight for small data.<sup>1)</sup>

験や考察等も含めて妥当な記述子を選定し、最終的に少数の本質的な記述子から構成される線形回帰の予測モデルを構築する。本手法では、説明変数の準備や記述子選定の際に、研究者の経験や考察を適度に融合することで、他の手法と比べて予測精度、汎化性(過学習の抑制)、解釈性を適度に両立した予測モデルの構築が可能となる<sup>1,12)</sup>。得られた予測モデルを用い、検討したい条件や候補となる物質に対して予測に基づく仮想スクリーニングを行うことで、実験数を減らすことができる。

前述の手法、小規模データに対するスパースモデリング(Sparse modeling for small data (SpM-S))を利用し、リチウムイオン二次電池の有機正・負極活物質の探索および水電解による水素発生のためのメタルフリー電極触媒の探索を行った<sup>7-11)</sup>。実験や文献から分子構造と反応電位・容量・エネルギー密度、水素発生過電圧などの性能値20~40個を目的変数として取得し、軌道準位や電解液との親和性などの20個前後の説明変数を準備した。SpM-Sによって正極の電位・容量・エネルギー密度<sup>9)</sup>、および負極の容量<sup>7,8,10)</sup>、水素発生過電圧の予測モデルを構築した<sup>11)</sup>。構築した予測モデルをもとに、候補となりうる低分子化合物の性能を予測した上で実験数を削減して実験を行った。その結果、いずれの系においても、既報と比較して優れた性能を示す新規化合物を見出すことができた (Fig. 2)。本手法は自前の小規模データに向いていることから、我々が進めている様々な新規の二次元・高分子機能材料への適用も期待できる<sup>13-16)</sup>。



**Fig. 2.** Exploration of new anode active materials and metal-free electrocatalysts using SpM-S.<sup>7,8,11)</sup>

- 1) Y. Oaki, Y. Igarashi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2021**, *94*, 2410 (Account). 2) G. Nakada, Y. Igarashi, H. Imai, Y. Oaki, *Adv. Theory Simul.* **2019**, *2*, 1800180. 3) K. Noda, Y. Igarashi, H. Imai, Y. Oaki, *Adv. Theory Simul.* **2020**, *3*, 2000084. 4) R. Mizuguchi, Y. Igarashi, H. Imai, Y. Oaki, *Nanoscale* **2021**, *13*, 3853. 5) Y. Haraguchi, Y. Igarashi, H. Imai, Y. Oaki, *Adv. Theory Simul.* **2021**, *4*, 2100158. 6) K. Noda, Y. Igarashi, H. Imai, Y. Oaki, *Chem. Commun.* **2021**, *57*, 5921. 7) H. Numazawa, Y. Igarashi, K. Sato, H. Imai, Y. Oaki, *Adv. Theory Simul.* **2019**, *2*, 1900130. 8) T. Komura, K. Sakano, Y. Igarashi, H. Numazawa, H. Imai, Y. Oaki, *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, *5*, 8990. 9) K. Sakano, Y. Igarashi, H. Imai, S. Miyakawa, T. Saito, Y. Takayanagi, K. Nishiyama, Y. Oaki, *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, *5*, 2074. 10) H. Tobita, Y. Namiuchi, T. Komura, H. Imai, K. Obinata, M. Okada, Y. Igarashi, Y. Oaki, *Energy Adv.* **2023**, *2*, 1014. 11) W. Hamada, M. Hishida, R. Sugiura, H. Tobita, H. Imai, Y. Igarashi, Y. Oaki, *J. Mater. Chem. A* **2024**, in press (DOI: 10.1039/D3TA06447F). 12) Y. Haraguchi, Y. Igarashi, H. Imai, Y. Oaki, *Digital Discovery* **2022**, *1*, 26. 13) J. Suzuki, A. Ishizone, K. Sato, H. Imai, Y. J. Tseng, C. H. Peng, Y. Oaki, *Chem. Sci.* **2020**, *11*, 7003. 14) M. Nakamitsu, K. Oyama, H. Imai, S. Fujii, Y. Oaki, *Adv. Mater.* **2021**, *33*, 200875. 15) N. Ono, R. Seishima, K. Okabayashi, H. Imai, S. Fujii, Y. Oaki, *Adv. Sci.* **2023**, *10*, 2206097. 16) N. Shioda, R. Kobayashi, S. Katsura, H. Imai, S. Fujii, Y. Oaki, *Mater. Horiz.* **2023**, *10*, 2237.