

2024年10月15日

報道機関 各位

国立大学法人東北大学

## 材料発見を大幅にスピードアップできる AI モデルを開発

—新しいエネルギー材料や量子材料の迅速な設計が可能に—

### 【発表のポイント】

- 物質の物性予測に適した新しい AI モデル「GNNOpt (Graph Neural Network for Optical Spectra)」を開発しました。
- GNNOpt は、量子シミュレーションと比較して 100 万倍の速度で、しかも高精度な光学スペクトル予測を行うことができました。
- 本成果によって、光学や量子力学による新規材料開発を大幅に加速させることが期待されます。

### 【概要】

エネルギー応用に最適な物質を設計する上で、固体材料の構造と物性の関係を理解することは極めて重要です。これまでは、材料構造から物性を予測するための強力なツールとしてグラフニューラルネットワーク (GNN)<sup>(注1、2)</sup> が活用されてきました。しかし、材料の立体構造をコンピューター上で表現するのが難しいため、従来の GNN で多くの複雑な材料の特性を予測することは依然として困難です。そこで、このボトルネックを克服するための新しい GNN モデルが提案されています。

東北大学学際科学フロンティア研究所のグエン タン フン (Nguyen Tuan Hung) 助教は、米マサチューセッツ工科大学 (MIT) のミンダ・リ(李明达, Mingda Li)教授、岡部遼太郎氏 (博士課程学生)、アピチャトメティ・チョトラッタナピトウク (Abhijatmedhi Chotrattanapituk) 氏 (博士課程学生) と共同で、GNN モデルに「普遍的な」アンサンブル埋め込み層を使用した新たな AI モデル「GNNOpt」を開発しました。この埋め込み層は、従来の予測力を向上させるための最適な表現と材料を自動的にマッチングさせる機能を持ち、GNNOpt は結晶構造のみを基にした光学スペクトルの精密な予測と、従来の量子シミュレーション<sup>(注3)</sup> の最大 100 万倍の速さでの計算が可能です。

今後、GNNOpt は光起電力材料や量子材料<sup>(注4)</sup> の開発を大幅に加速させることが期待されます。

本成果は 9 月 12 日、学術誌 Advanced Materials に掲載されました。

## 【詳細な説明】

### 研究の背景

材料の光学スペクトルを理解することは、LED、太陽電池、光検出器、フォトニック集積回路（PIC）などの光電子デバイスの開発において非常に重要です。これらのデバイスは、現代の半導体産業の成長をけん引する上でも極めて重要な役割を果たしています。学术界と産業界は、光学的用途に適した材料を選別するための方法の確立に高い関心を示しています。しかし、量子シミュレーションは複雑で時間がかかるため、大規模なハイスループットスクリーニングや広範な材料の網羅的サンプリングの課題となっています。

近年、ハイスループットな物性予測を通じて材料探索を加速するため、機械学習手法の材料研究への導入が進んでいます。成功した手法のひとつが、結晶構造から材料特性を直接予測できるグラフニューラルネットワーク（GNN）です。しかし、機械学習モデルは、材料特性の予測において成功を収めているものの、光学スペクトルを効果的に予測するモデルの開発には依然として課題が残っています。この課題を克服することにより、新しい光起電力材料の発見や、光学スペクトルを通じた材料の基礎物理学のさらなる理解が期待されます。

### 今回の取り組み

研究グループは、材料の結晶構造から周波数依存の光学スペクトルを直接予測できる革新的なグラフニューラルネットワーク（GNN）モデル「GNNOpt」の開発に成功しました。このモデルは、自動的に入力情報の埋め込み表現を最適化することで、従来の固定された埋め込み手法を大きく上回り、予測精度を飛躍的に向上させました。このアプローチにより、比較的少ない 944 件のデータセットでも高品質な光学スペクトルの予測が可能となりました。

さらに、クラマース・クローニッヒの関係式<sup>(注5)</sup>を活用し、誘電関数の実数部または虚数部のいずれかから、吸収係数、屈折率、反射率など、周波数依存のすべての光学スペクトルを抽出しました。この手法を 5,281 件の未知の結晶構造に適用し、太陽電池に適した高性能材料のリストを特定することに成功しました。

加えて、f-総和則<sup>(注6)</sup>を適用することで、GNNOpt モデルは量子性の高い量子材料を複数同定し、材料の量子特性を評価する能力を示しました。図 1 には、GNNOpt のワークフローが示されています。結晶構造が入力され、その結果として得られる全ての光学スペクトルが太陽電池材料や量子材料の同定に使用されます。

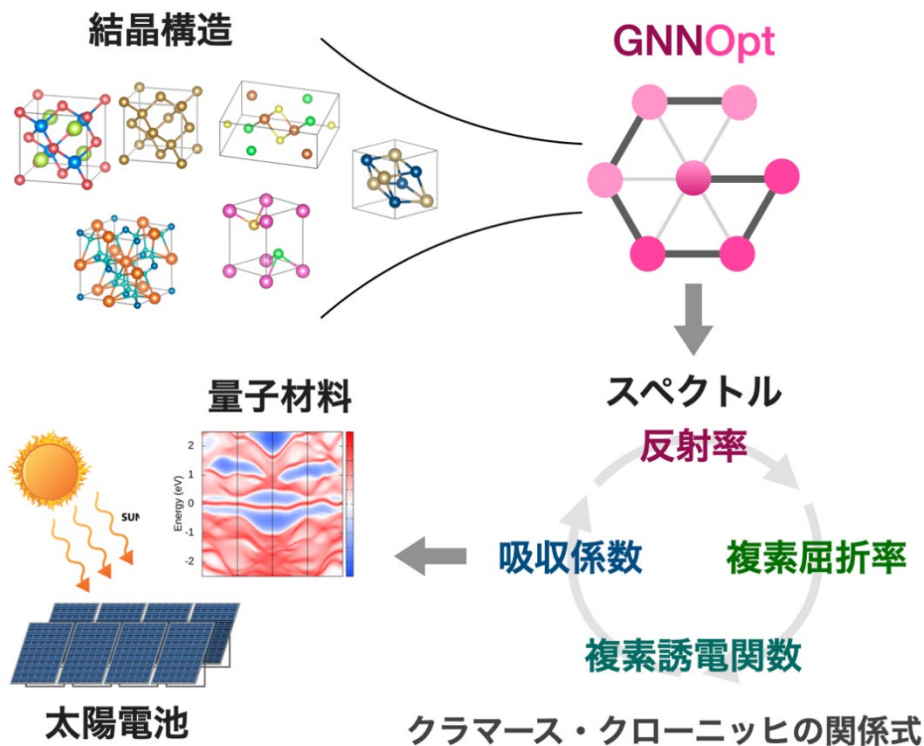


図 1. 結晶構造から光学スペクトルを予測する GNNOpt のワークフロー。結晶構造を入力とし、全ての光学スペクトルを出力として、太陽電池材料や量子材料を同定します。

### 波及効果

アンサンブル埋め込み法は、ニューラルネットワークの構造を変更することなく、あらゆるニューラルネットワークモデルに汎用できる普遍的な埋め込み層です。これにより、ユニバーサルエンベッディング<sup>(注7)</sup>はあらゆる機械学習アーキテクチャに容易に組み込むことができ、データサイエンスに大きなインパクトを与える可能性があります。

さらに、高い量子性を持つ新しい量子材料や高性能太陽電池材料の発見は、GNNOpt が多様な材料や用途にわたって光学スペクトルを正確に予測できる可能性を明確に示しています。

### 今後の展開

本研究のメカニズムおよび AI モデルは、他の材料特性にも応用できる可能性があります。将来的には、機械的特性や磁気的特性など、さまざまな材料特性に対する新しいデータベースを構築し、結晶構造のみから多様な材料特性を予測できる AI モデルの性能をさらに向上させていく予定です。

## 【謝辞】

本研究は、東北大学学際科学フロンティア研究所、東北大学若手リーダー海外派遣プログラム研究員制度, U.S. Department of Energy (DOE), Office of Science (SC), Basic Energy Sciences (BES), Award No. DE-SC0021940, Science Foundation (NSF) Designing Materials to Revolutionize and Engineer the Future (DMREF) Program with Award No. DMR-2118448, NSF ITE-2345084, the Class of 1947 Career Development Chair and the support from R. Wachnik の支援により実施されました。

## 【用語説明】

- 注1. グラフニューラルネットワーク (Graph Neural Networks、GNN) : グラフ構造データを扱うための深層学習技術です。ちなみにグラフ構造とは、考察する対象を頂点(ノード)で表し、対象と対象の関係を辺(エッジ)で結んで図で表示した構造です。ネットワーク分析や最適化問題、アルゴリズム、データ構造など、さまざまな分野で広く利用されている数学的概念です。
- 注2. 同変グラフニューラルネットワーク : GNN の一種で、空間的な変換に対して同変性 (equivariance) を持つモデルです。特に、対称性や物理法則に基づいた問題において重要です。
- 注3. 量子シミュレーション : 原子の種類と位置の情報を入力して固体の電子状態を計算する計算手法。正式には第一原理計算と呼ばれます。その手法は多岐に渡り、第一原理計算を行うパッケージとしても製品版、無料版など各種公開されています。
- 注4. 量子材料 : 量子力学の効果を示す材料。超伝導やトポロジーといった特殊な性質を持つ材料の一種です。
- 注5. クラマース・クローニヒの関係式 (Kramers-Kronig relations) : 因果律 (causality) と線形応答理論に基づく数学的な関係で、ある物理系の周波数領域における複素関数の実部と虚部との関係を示すものです。これは、物理現象における因果性が成り立つ場合に適用され、例えば光の吸収や屈折、電気伝導、誘電率などの分光測定データの解析に頻繁に用いられます。
- 注6. f-総和則 (f-sum rule) は、量子力学や固体物理学において、電子の遷移に関するエネルギー保存則や遷移確率を記述する重要な法則です。この法則は、光子による電子の励起や遷移に関する遷移確率 (オシレーター強度、f 値) に関連しています。特に、分光学や固体物理学で、電子遷移や吸収スペクトルの解析に使用されます。
- 注7. ユニバーサルエンベディング (universal embedding) : 機械学習のレイヤーは、埋め込み機能を最適化することができます。

**【論文情報】**

タイトル : Universal Ensemble-Embedding Graph Neural Network for Direct Prediction of Optical Spectra from Crystal Structures

著者 : Nguyen Tuan Hung\*, Ryotaro Okabe, Abhijatmedhi Chotrattanapituk, Mingda Li\*

\*責任著者 : 東北大学学際科学フロンティア研究所 助教 Nguyen Tuan Hung  
マサチューセッツ工科大学 准教授 Mingda Li

掲載誌 : Advanced Materials

DOI: [10.1002/adma.202409175](https://doi.org/10.1002/adma.202409175)

URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/adma.202409175>

**【問い合わせ先】**

(研究に関すること)

東北大学学際科学フロンティア研究所

助教 Nguyen Tuan Hung

TEL: 022-795-5755

Email: [nguyen.tuan.hung.e4@tohoku.ac.jp](mailto:nguyen.tuan.hung.e4@tohoku.ac.jp)

(報道に関すること)

東北大学学際科学フロンティア研究所

企画部

特任講師 児山 洋平(こやま ようへい)

TEL: 022-795-4353

Email: [yohei.koyama.e2@tohoku.ac.jp](mailto:yohei.koyama.e2@tohoku.ac.jp)