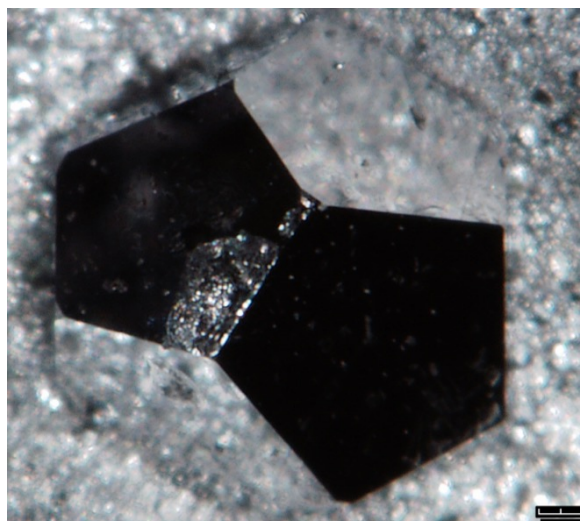


# 統計的機械学習による新規準結晶の探索:現状と課題

劉 暢

ものづくりデータ科学研究センター 特任助教

## ➤ Introduction



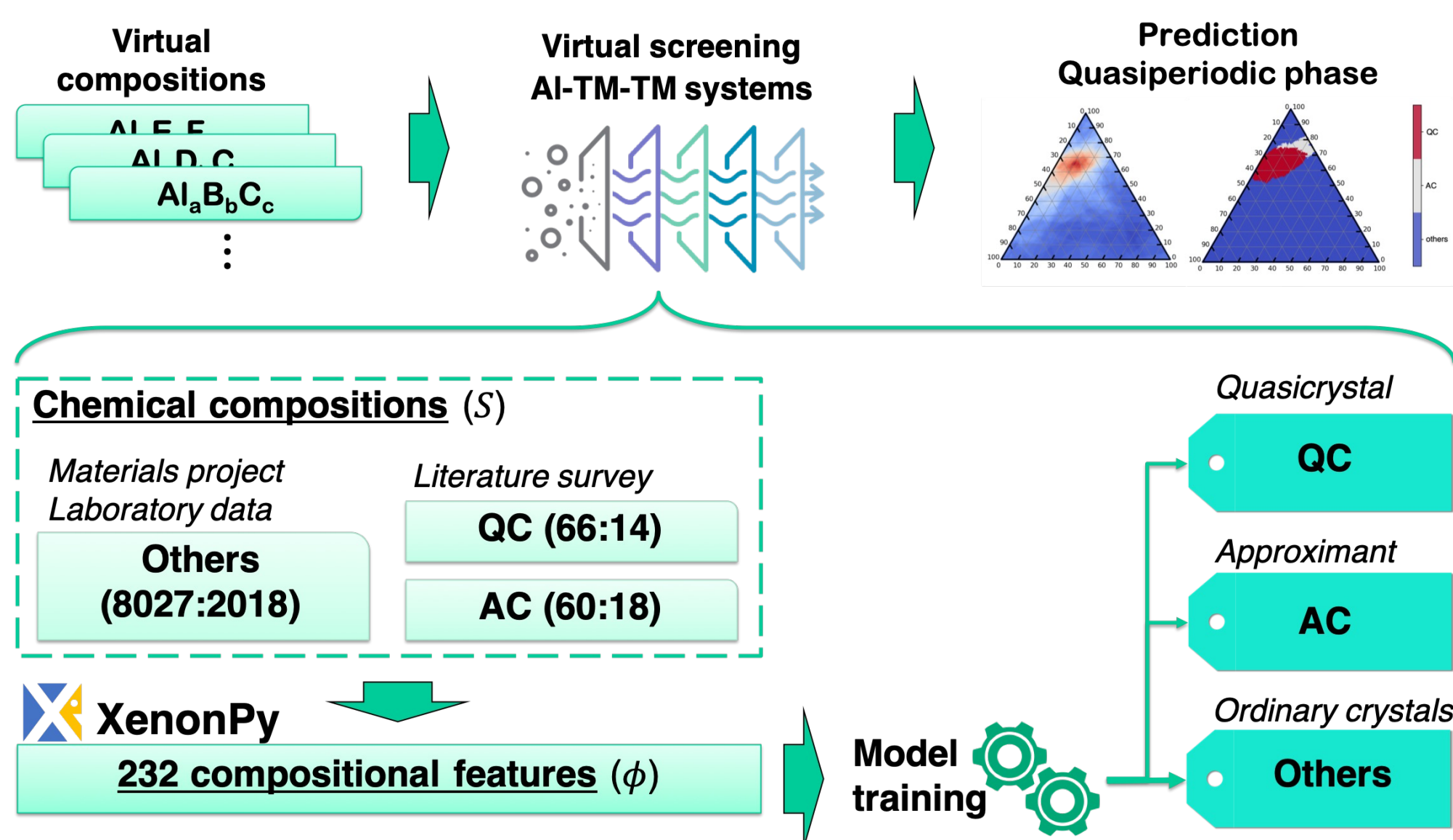
東北大学 亀岡研

準結晶 (Quasicrystal) は1984年にSchechtman教授より発見された。まだ明確な定義がないが、準結晶の多くは、長距離秩序があり、周期結晶では認められない回転対称性を持つ物質として認識されている。

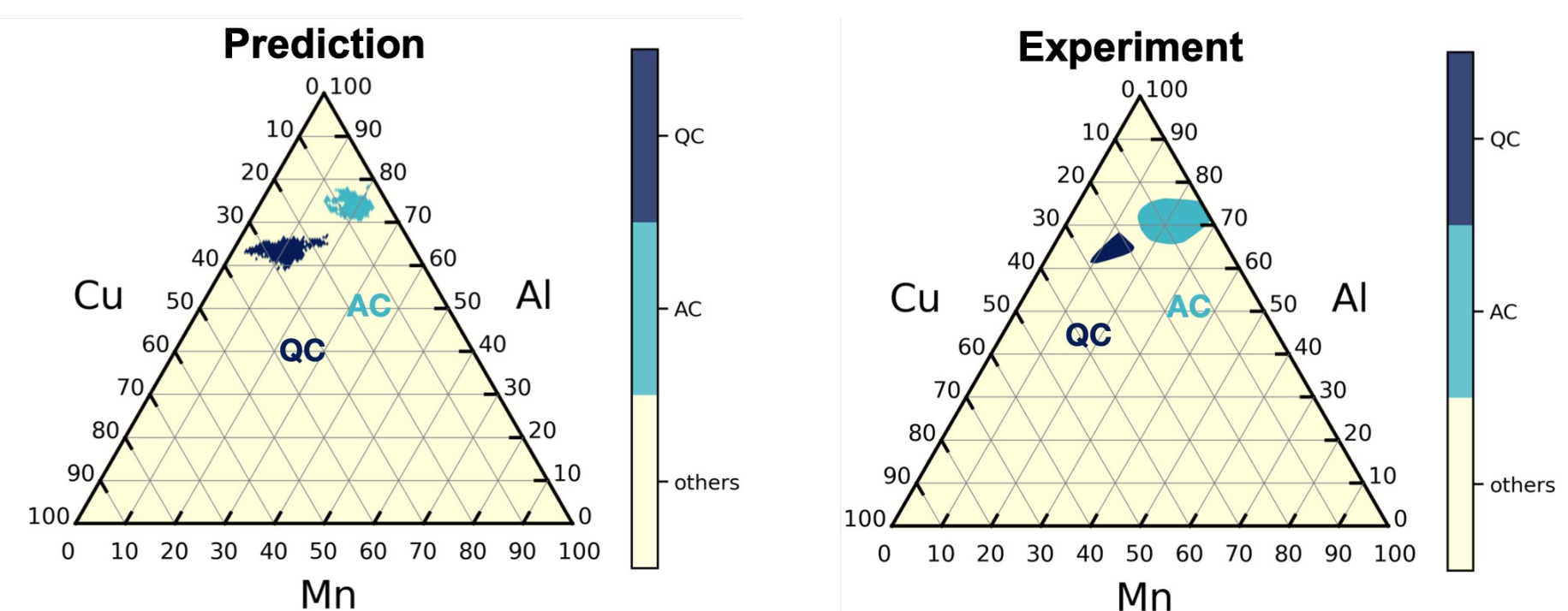
本研究は、統計的機械学習による新規準結晶の探索を加速する。現段階では以下の成果を得ている。

1. C. Liu *et al.*, "Machine learning to predict quasicrystals from chemical compositions," (in press), Feb. 2021. doi: [10.21203/rs.3.rs-240290/v1](https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-240290/v1)
2. Uryu, H. et al. Exploration of new quasicrystals and approximants by using machine learning. *Acta Crystallogr A Found Adv* 77, C1059–C1059 (2021).

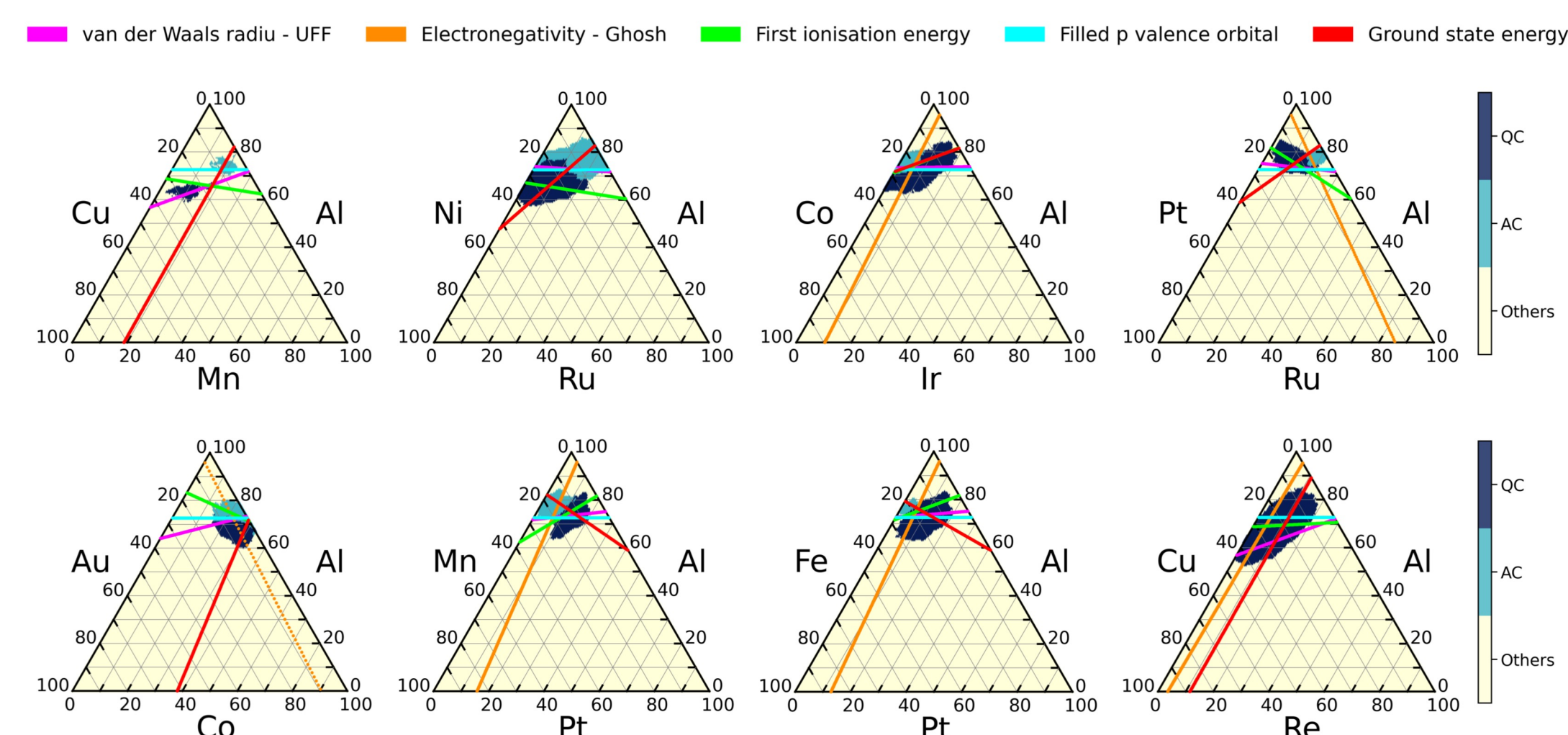
## ➤ Workflow



- 準結晶 (QCs), 近似結晶 (ACs) と他 (Others) の3分類モデルを訓練する
- 訓練したモデルを用いて、選ばれたAl-TM-TM (遷移金属) の三元系, 合計1,080個の系でスクリーニングを行う
- 有望な候補を合成実験に投入する  
*全体的に予測と実験相図に良好な一致を示す*



## ➤ New rules and new quasicrystals



Diffraction pattern of new discovered decagonal quasicrystal



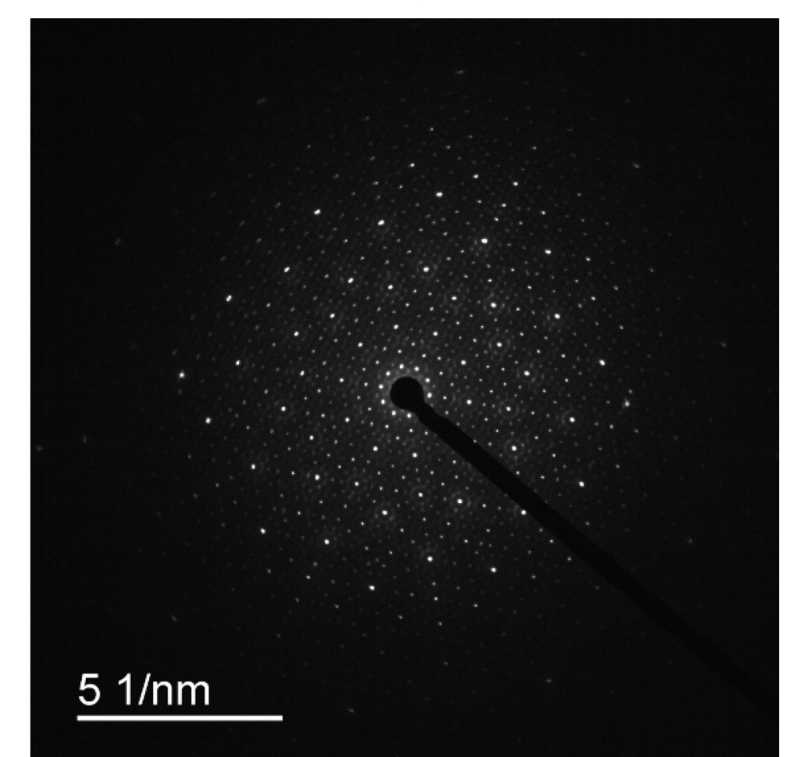
◆ Prof. Kaoru Kimura, University of Tokyo

- 2 new quasicrystals
- Several approximants



◆ Prof. Ryuji Tamura, Tokyo University of Science

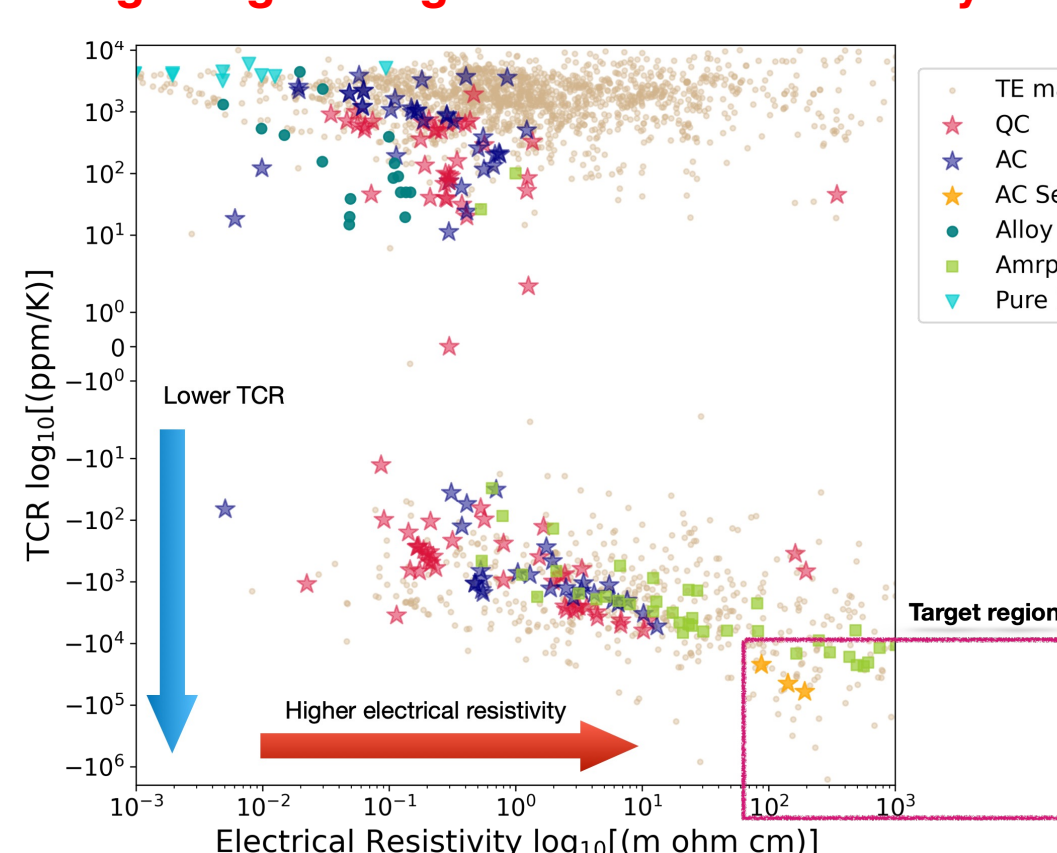
- 2 new quasicrystals
- 10 approximants



Provided by Prof. Kaoru Kimura

## ➤ Discovery of new QC/AC semiconductor

Target region: higher electrical resistivity and lower TCR



Composition  $A_a B_b C_c \dots$

XenonPy  
Descriptor

- QC or AC
  - Higher is better
  - Must be negative
  - Low is better
- Virtual screening

