様　式　C－１９、F－１９－１、Z－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　３ 年　 ４ 月　 ７ 日現在

機関番号：１０１０１
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2017～2020
課題番号：１７Ｋ１４８０３

研究課題名（和文）機械学習と第一原理計算を併用した新規機能性人工結晶の創出

研究課題名（英文）Designing novel functional cluster-assembled materials via machine learning and first principle calculations

研究代表者
高橋　啓介（Takahashi, Keisuke）

北海道大学・理学研究院・准教授

研究者番号：８０７５９４８１

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,400,000円

研究成果の概要（和文）：原子クラスターは原子数個からなるバルク・ナノ粒子とは全く異なる物性・構造を持つ材料である。本研究では原子クラスターを原子1つとし、人工結晶の設計を行った。人工結晶を設計するときの課題はバインダー(原子クラスター同士を接着する)を探すことが最大の難関であるが、第一原理ハイスループット計算を併用することにより酸化カリウム(K30)クラスターが最適なバインダーであることを突き止め、六員環構造を持つ[Cu12FeK30]6の創出に成功した。また機械学習を使うことにより、銀原子の成長の予測にも成功した。本研究で得られた技術は2次元材料や触媒科学にも展開することができ、大きな進展があった。

研究成果の学術的意義や社会的意義
これまでの材料設計では原子1つ基本に材料設計がおこなわれてきたが、数個の原子からなる特異な物性を持つ原子クラスターを原子1つとしてとらえることにより、材料設計の可能性が膨大に広がることを示した。さらにハイスループット計算や機械学習など触媒科学や2次元材料の設計につながる基盤技術も確立されたため、今後の展開が期待される。

研究成果の概要（英文）：Atomic clusters consist of a few to tens of atoms and are found to have significantly different structures and properties when compared to their bulk and nanoparticle states. Atomic clusters are treated as building blocks for the design of artificial crystals. The difficulty of creating such crystals often lies upon finding suitable binders. High throughput first principle calculations are carried out and determine that K30 cluster acts as a good binder. As a result, the artificial crystal [Cu12FeK30]6 is designed. In addition, implementation of machine learning unveils the growth of silver clusters where the thresholds between silver clusters, nanoparticles, and bulk are determined. Lastly, techniques used in this research are expanded towards the design of functional two- dimensional materials and towards catalysts development. Hence, major advancement was achieved where one's understanding of clusters is greatly expanded.

研究分野：マテリアルズインフォマティクス

キーワード：マテリアルズインフォマティクス　原子クラスター　人工結晶　機械学習　触媒　データ科学　材料　ナノ材料

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９（共通）
研究課題名:機械学習と第一原理計算を併用した新規機能性人工結晶の創出
若手研究(B)： 17K14803
研究代表:髙橋啓介

１．研究開始当初の背景
現在社会の急速な発展により、更なる機能性材料の発見が要求されている。しかし新規材料の発見には10 年から15 年かかるのが現実問題である。そこで申請者は密度汎関数理論を基盤に材料ビッグデータを構築し、人工知能の1 つである機械学習を導入し新規機能性材料の設計・探索の高速化を行ってきた。特に申請者は無機材料において、自然界に存在する結晶構造だけでは十分な探索空間が得られないとか考え、原子クラスターを原子1 つととらえ周期的に配置し、人工的な結晶構造の設計を行ってきた。原子クラスターは原子数個からなる原子の集合体でバルクやナノ粒子とは全く異なる特性を持ち、特性は原子数と構造に強く依存する。申請者はこれまで原子クラスターの構造を最適化する手法の開発を第一原理計算と併用し、原子クラスターのデータベースの構築をしてきた。

２．研究の目的
人工的な結晶を網羅的に探索・設計し、新機能性人口結晶の設計を目的とする。人工的な2 次元材料だけでなく、原子クラスターを1 次元に配列したものやヘリックス構造にした結晶、また原子クラスターを周期的に3 次元に設計したものを対象とする。しかしながら設計可能な人口結晶の探索空間は膨大であり、第一原理計算を用いたとしても膨大な時間を要する。そこで本研究では人工知能の1 つである機械学習を導入し、人工結晶の構造を決定づける「材料遺伝子(記述子)」を明らかにし、人口結晶の設計を行う。

３．研究の方法
本研究では独自に開発するハイスループット計算により原子クラスターの安定構造、原子クラスターを接着するバインダーの探索を行う。原子クラスターの構造探索では独自開発したベイシンホッピン法(モンテカルロ・メトロポリス法を併用)これにより材料探索が同時に行われるだけでなく、機械学習を使った材料設計・メカニズムの解明につなげる。

４．研究成果
　銀クラスターの成長をデータ科学により解明した。これまで原子クラスターとナノ粒子の境界の判断はあいまいであり、さらにナノ粒子がどこでバルクとしての物性を持つかは長年の大きな課題であった。そこで銀クラスターを対象とし、データ科学を用いて「クラスター、ナノ粒子、バルク」の成長を解明に挑戦した(図1 参照)。教師なし学習の適用により、銀クラスターと銀ナノ粒子の境界を突き止めただけでなく、クラスターとナノ粒子の中間的なセミクラスター領域も発見した。さらに教師あり学習と第一原理計算を組み合わせることによりナノ粒子がバルクに変化する原子数の推定に成功した。

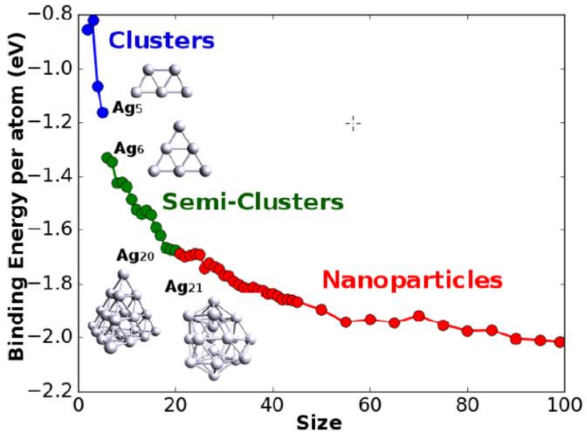

図 1 銀クラスターの成長[1]

特筆べき成果に、銅と鉄の 2 元素クラスターを用いた人工結晶の創造がある。対象とした原子クラスターはコア（鉄）シェル（銅）構造を持つ Cu12Fe クラスターを原子 1 つと扱い人工結晶を創出した。人工結晶を設計するときの課題はバインダー（原子クラスター同士を接着する）を探すことが最大の難関であるが、第一原理ハイスループット計算を併用することにより酸化カリウム（K3O）クラスターが最適なバインダーであることを突き止めた。Cu12Fe クラスターと K3O クラスターを組み合わせることにより、六員環構造を持つ[Cu12FeK3O]6 の創出に成功した。この[Cu12FeK3O]6 はナノポーラス構造を持っているため、ガス貯蔵などの応用が期待される。

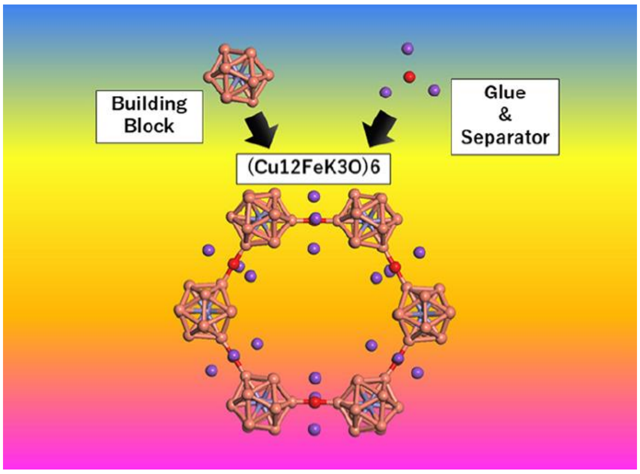

図 2 コア(鉄)シェル(銅)構造を持つ Cu12Fe クラスターを原子 1 つと扱い人工結晶[2]

材料組成から結晶構造の予測は材料科学において長年の大きな不可思議である。そこで結晶構造と材料組成の関係を明らかにするためデータ科学を導入して挑戦した。教師なし学習では原子数が増えるにつれ結晶構造が複雑化するということが認識され、さらに教師あり学習では結晶構造を決定する 8 個の記述子の特定に成功した。8 個の記述子と教師あり学習を用いることにより、「結晶構造から組成の組み合わせの推定」という従来とは真逆のプロセスに成功した。応用として、酸化レニウム（VI）（ReO3）構造を持つ材料は数点しか見つかっていないが、この学習機を用いることにより、ReO3 構造を取りうる多くの未発見材料が推定され、第一原理計算による安定性評価と組み合わせ、多くの ReO3 構造を取りうる未発見材料を発見した。

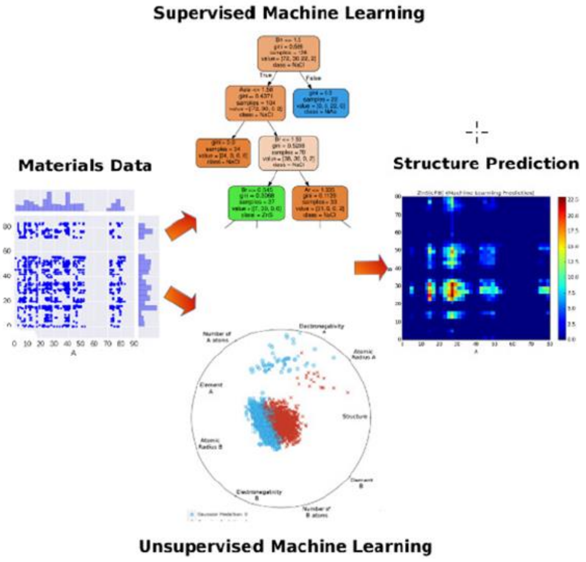

図 3 機械学習による結晶構造の予測 [3]

グラフェンと 2 次元窒化ホウ素をそれぞれ 2 レイヤーにした材料に対して、各レイヤー間に原子クラスターを挟めた人工結晶の設計に成功した。この研究では周期表の元素を網羅的に配置したため、挿入する元素によりグラフェンと 2 次元窒化ホウ素の電気特性・磁気特性がチューニング可能ということを突き止めた。同じように原子クラスターを異なる 2 次元材料の間に埋め込むことによりバンドギャップの制御ができることも発見した[5]。

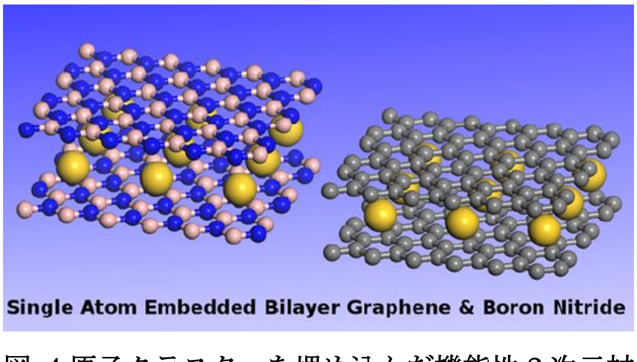

図 4 原子クラスターを埋め込んだ機能性 2 次元材料[4]

このように本研究では原子クラスターを原子 1 つとしてとらえることにより、多くの未発見人工結晶の設計に成功した。また機械学習を使った原子クラスターの成長の解明や結晶構造の解明も達成された。最後本研究で得られた。ハイスループット計算や機械学習など触媒科学や 2 次元材料の設計につながる基盤技術も確立されたため、今後の展開が期待される。

文献

[1] Keisuke Takahashi
“First-Principles Design of Cu_{12}shellFecore Core-Shell Clusters Assembled with K_3O into Hexameric Rings: Implications for Gas-Storage Materials ″
ACS Applied Nano Materials (2020) 3 (1), pp 55-58
[2] Keisuke Takahashi, Lauren Takahashi,
“Data Driven Determination in Growth of Silver from Clusters to Nanoparticles and Bulk″
The Journal of Physical Chemistry Letters (2019) 10 (14), pp 4063-4068
[3] Keisuke Takahashi, Lauren Takahashi,
“Creating Machine Learning-Driven Material Recipes Based on Crystal Structure ″
The Journal of Physical Chemistry Letters (2019) 10 (2), pp 283-288,
[4] Keisuke Takahashi, Lauren Takahashi,
“Functionalized Single-Atom-Embedded Bilayer Graphene and Hexagonal Boron Nitride ″
ACS Applied Electronic Materials (2019) 1 (1), pp 2-6,
[5] Itsuki Miyazato, Tanveer Hussain, Keisuke Takahashi
“Transition of wide-band gap semiconductor h-BN(BN)/P heterostructure via single-atom-embedding† ″
Journal of Materials Chemistry C (2020) 8, 9755-9762

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計33件（うち査読付論文　33件／うち国際共著　4件／うちオープンアクセス　0件）

１．著者名 Takahashi Keisuke、Takahashi Lauren	４．巻 10
２．論文標題 Data Driven Determination in Growth of Silver from Clusters to Nanoparticles and Bulk	５．発行年 2019年
３．雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	６．最初と最後の頁 4063～4068
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpclett.9b01394	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Itsuki Miyazato、Sevil Sarikurt、 Keisuke Takahashi、 Fatih Ersan	４．巻 55
２．論文標題 Controlling electronic structure of single-layered HfX3 (X=S , Se) trichalcogenides through systematic Zr doping	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Journal of Materials Science volume	６．最初と最後の頁 660～669
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 Takahashi Lauren、Takahashi Keisuke	４．巻 10
２．論文標題 Visualizing Scientists’ Cognitive Representation of Materials Data through the Application of Ontology	５．発行年 2019年
３．雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	６．最初と最後の頁 7482～7491
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpclett.9b02976	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Nguyen Thanh Nhat、Nhat Thuy Tran Phuong、Takimoto Ken、Thakur Ashutosh、Nishimura Shun、Ohyama Junya、Miyazato Itsuki、Takahashi Lauren、Fujima Jun、Takahashi Keisuke、Taniike Toshiaki	４．巻 10
２．論文標題 High-Throughput Experimentation and Catalyst Informatics for Oxidative Coupling of Methane	５．発行年 2019年
３．雑誌名 ACS Catalysis	６．最初と最後の頁 921～932
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acscatal.9b04293	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Takahashi Keisuke	4．巻 3
2．論文標題 First-Principles Design of Cu12shellFecore Core?Shell Clusters Assembled with K30 into Hexameric Rings: Implications for Gas-Storage Materials	5．発行年 2020年
3．雑誌名 ACS Applied Nano Materials	6．最初と最後の頁 55～58
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acsanm.9b02555	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1．著者名 Miyazato Itsuki、Nishimura Shun、Takahashi Lauren、Ohyama Junya、Takahashi Keisuke	4．巻 11
2．論文標題 Data-Driven Identification of the Reaction Network in Oxidative Coupling of the Methane Reaction via Experimental Data	5．発行年 2020年
3．雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6．最初と最後の頁 787～795
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpclett.9b03678	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1．著者名 Monteiro Rafael、Miyazato Itsuki、Takahashi Keisuke	4．巻 124
2．論文標題 Rising Sun Envelope Method: An Automatic and Accurate Peak Location Technique for XANES Measurements	5．発行年 2020年
3．雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6．最初と最後の頁 1754～1762
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpca.9b11712	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1．著者名 Ohyama Junya、Nishimura Shun、Takahashi Keisuke	4．巻 11
2．論文標題 Data Driven Determination of Reaction Conditions in Oxidative Coupling of Methane via Machine Learning	5．発行年 2019年
3．雑誌名 ChemCatChem	6．最初と最後の頁 4307～4313
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cctc.201900843	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1．著者名 Miyazato Itsuki、Takahashi Lauren、Takahashi Keisuke	4．巻 4
2．論文標題 Automatic oxidation threshold recognition of XAFS data using supervised machine learning	5．発行年 2019年
3．雑誌名 Molecular Systems Design & Engineering	6．最初と最後の頁 1014～1018
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/C9ME00043G	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Takahashi Keisuke、Takahashi Lauren、Miyazato Itsuki、Fujima Jun、Tanaka Yuzuru、Uno Takeaki、Satoh Hiroko、Ohno Koichi、Nishida Mayumi、Hirai Kenji、Ohyama Junya、Nguyen Thanh Nhat、Nishimura Shun、Taniike Toshiaki	4．巻 11
2．論文標題 The Rise of Catalyst Informatics: Towards Catalyst Genomics	5．発行年 2019年
3．雑誌名 ChemCatChem	6．最初と最後の頁 1146～1152
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cctc.201801956	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Takahashi Keisuke、Takahashi Lauren	4．巻 10
2．論文標題 Creating Machine Learning-Driven Material Recipes Based on Crystal Structure	5．発行年 2019年
3．雑誌名 The Journal of Physical Chemistry Letters	6．最初と最後の頁 283～288
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpclett.8b03527	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Takahashi Keisuke、Takahashi Lauren、Miyazato Itsuki、Fujima Jun、Tanaka Yuzuru、Uno Takeaki、Satoh Hiroko、Ohno Koichi、Nishida Mayumi、Hirai Kenji、Ohyama Junya、Nguyen Thanh Nhat、Nishimura Shun、Taniike Toshiaki	4．巻 11
2．論文標題 The Rise of Catalyst Informatics: Towards Catalyst Genomics	5．発行年 2019年
3．雑誌名 ChemCatChem	6．最初と最後の頁 1146～1152
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cctc.201801956	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Takahashi Keisuke、Takahashi Lauren	４．巻 1
２．論文標題 Functionalized Single-Atom-Embedded Bilayer Graphene and Hexagonal Boron Nitride	５．発行年 2018年
３．雑誌名 ACS Applied Electronic Materials	６．最初と最後の頁 2～6
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acsaelm.8b00036	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Nguyen Duong-Nguyen、Pham Tien-Lam、Nguyen Viet-Cuong、Ho Tuan-Dung、Tran Truyen、Takahashi Keisuke、Dam Hieu-Chi	４．巻 5
２．論文標題 Committee machine that votes for similarity between materials	５．発行年 2018年
３．雑誌名 IUCrJ	６．最初と最後の頁 830～840
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1107/S2052252518013519	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Takahashi Keisuke、Miyazato Itsuki	４．巻 39
２．論文標題 Rapid estimation of activation energy in heterogeneous catalytic reactions via machine learning	５．発行年 2018年
３．雑誌名 Journal of Computational Chemistry	６．最初と最後の頁 2405～2408
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/jcc.25567	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Takahashi Keisuke、Miyazato Itsuki、Nishimura Shun、Ohyama Junya	４．巻 10
２．論文標題 Unveiling Hidden Catalysts for the Oxidative Coupling of Methane based on Combining Machine Learning with Literature Data	５．発行年 2018年
３．雑誌名 ChemCatChem	６．最初と最後の頁 3223～3228
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cctc.201800310	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名	４．巻
Takahashi Lauren、Miyazato Itsuki、Takahashi Keisuke	58
２．論文標題 Redesigning the Materials and Catalysts Database Construction Process Using Ontologies	５．発行年 2018年
３．雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	６．最初と最後の頁 1742～1754
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jcim.8b00165	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名	４．巻
Takahashi Keisuke	19
２．論文標題 Uncovering Periodicity and Hidden Trends Responsible for Predicting the Magnetic Moment of Body Centered Cubic Crystal	５．発行年 2018年
３．雑誌名 ChemPhysChem	６．最初と最後の頁 1593～1598
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cphc.201800141	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名	４．巻
Takahashi Keisuke	In Press
２．論文標題 Uncovering periodicity and hidden trends responsible for predicting the magnetic moment of body centered cubic crystal	５．発行年 2018年
３．雑誌名 ChemPhysChem	６．最初と最後の頁 In Press
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/cphc.201800141	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名	４．巻
Takahashi Lauren、Takahashi Keisuke	1
２．論文標題 Tuning the Electronic Structure of an Aluminum Phosphide Nanotube through Configuration of the Lattice Geometry	５．発行年 2018年
３．雑誌名 ACS Applied Nano Materials	６．最初と最後の頁 501～504
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acsanm.7b00403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Itsuki Miyazato, Yuzuru Tanaka, Keisuke Takahashi	4．巻 30
2．論文標題 Accelerating the discovery of hidden two-dimensional magnets using machine learning and first principle calculations	5．発行年 2018年
3．雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6．最初と最後の頁 06LT01
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-648X/aaa471	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1．著者名 Takahashi Keisuke、Takahashi Lauren、Miyazato Itsuki、Tanaka Yuzuru	4．巻 5
2．論文標題 Searching for Hidden Perovskite Materials for Photovoltaic Systems by Combining Data Science and First Principle Calculations	5．発行年 2018年
3．雑誌名 ACS Photonics	6．最初と最後の頁 771～775
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acsphotonics.7b01479	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1．著者名 Takahashi Keisuke	4．巻 123
2．論文標題 Designing a tunable magnet using cluster-assembled iron	5．発行年 2018年
3．雑誌名 Journal of Applied Physics	6．最初と最後の頁 015102～015102
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.5010963	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1．著者名 Miyazato Itsuki、Takahashi Keisuke	4．巻 691
2．論文標題 Revealing the multi hydrogen bonding state within iron doped amorphous carbon	5．発行年 2018年
3．雑誌名 Chemical Physics Letters	6．最初と最後の頁 122～125
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.cplett.2017.10.063	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

１．著者名 Miyazato Itsuki、Takahashi Keisuke	４．巻 122
２．論文標題 Electronic structure of boron based single and multi-layer two dimensional materials	５．発行年 2017年
３．雑誌名 Journal of Applied Physics	６．最初と最後の頁 104302～104302
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.4991033	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Baran Jakub D.、Eames Christopher、Takahashi Keisuke、Molinari Marco、Islam M. Saiful、Parker Stephen C.	４．巻 29
２．論文標題 Structural, Electronic, and Transport Properties of Hybrid SrTiO3-Graphene and Carbon Nanoribbon Interfaces	５．発行年 2017年
３．雑誌名 Chemistry of Materials	６．最初と最後の頁 7364～7370
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.chemmater.7b02253	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 Takahashi Keisuke、Takahashi Lauren、Baran Jakub D.、Tanaka Yuzuru	４．巻 146
２．論文標題 Descriptors for predicting the lattice constant of body centered cubic crystal	５．発行年 2017年
３．雑誌名 The Journal of Chemical Physics	６．最初と最後の頁 204104～204104
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/1.4984047	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 Takahashi Keisuke, Tanaka Yuzuru	４．巻 95
２．論文標題 Unveiling descriptors for predicting the bulk modulus of amorphous carbon	５．発行年 2017年
３．雑誌名 Physical Review B	６．最初と最後の頁 54110
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.95.054110	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Munoz-Castro Alvaro、Takahashi Keisuke	4．巻 121
2．論文標題 Toward Two-Dimensional Superatomic Honeycomb Structures. Evaluation of [Ge9(Si(SiMe3))3] as Source of Ge9 Cluster Building Blocks for Extended Materials	5．発行年 2017年
3．雑誌名 Journal of Physical Chemistry C	6．最初と最後の頁 1934～1940
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.jpcc.6b10251	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1．著者名 Takahashi Keisuke, Tanaka Yuzuru	4．巻 95
2．論文標題 Role of descriptors in predicting the dissolution energy of embedded oxides and the bulk modulus of oxide-embedded iron	5．発行年 2017年
3．雑誌名 Physical Review B	6．最初と最後の頁 14101
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.95.014101	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Takahashi Lauren、Nakagawa Tessui、Takahashi Keisuke	4．巻 なし
2．論文標題 Electronic structure of octagonal boron nitride nanotubes	5．発行年 2017年
3．雑誌名 International Journal of Quantum Chemistry	6．最初と最後の頁 e25542～e25542
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1002/qua.25542	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Takahashi Lauren、Takahashi Keisuke	4．巻 46
2．論文標題 Structural stability and electronic properties of an octagonal allotrope of two dimensional boron nitride	5．発行年 2017年
3．雑誌名 Dalton Transactions	6．最初と最後の頁 13
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1039/C7DT00372B	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

1．著者名 Takahashi Lauren、Takahashi Keisuke	4．巻 1
2．論文標題 Designing Mg7 cluster-assembled two dimensional crystal	5．発行年 2017年
3．雑誌名 FlatChem	6．最初と最後の頁 57～59
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.flatc.2016.11.002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

〔学会発表〕　計7件（うち招待講演　7件／うち国際学会　1件）

1．発表者名 高橋啓介
2．発表標題 マテリアルズインフォマティクス:材料設計の実例と触媒化学への展開
3．学会等名 日本化学会 講演会「マテリアルズインフォマティクスを用いたものづくり最先端」（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 高橋啓介
2．発表標題 データ科学を用いた材料・触媒設計の実例:ペロブスカイト太陽電池とメタン酸化カップリング触媒
3．学会等名 第9回CSJ化学フェスタ2019（招待講演）
4．発表年 2019年

1．発表者名 Keisuke Takahashi
2．発表標題 The Rise of Materials Informatics: Concept and Applications in Photovoltaics and Catalysts
3．学会等名 The 20th RIES-HOKUDAI International Symposium（招待講演）（国際学会）
4．発表年 2019年

１．発表者名
1)髙橋啓介

２．発表標題
キャタリストインフォマティクスの動向とメタン酸化触媒への適用

３．学会等名
第4回キャタリストインフォマティクスシンポジウム（招待講演）

４．発表年
2018年～2019年

１．発表者名
髙橋啓介

２．発表標題
マテリアルズインフォマテイックスの概要と２次電池・太陽電池材料開発への応用

３．学会等名
第71回光機能材料研究会講演会「データサイエンス・マテリアルズインフォマティクス・人工知能の進展と機能材料創製」（招待講演）

４．発表年
2018年～2019年

１．発表者名
髙橋啓介

２．発表標題
マテリアルズインフォマティクスによる材 料設計の実例と触媒科学への展開と挑戦

３．学会等名
第121回触媒討論会 特別シンポジウム（招待講演）

４．発表年
2018年～2019年

１．発表者名
髙橋　啓介

２．発表標題
マテリアルズインフォマティクスによ る材料設計の実例と触媒科学への 展開と挑戦

３．学会等名
第121回触媒討論会（招待講演）

４．発表年
2018年

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

触媒インフォマティクスプロジェクト
http://catalystinfo.eng.hokudai.ac.jp/
触媒インフォマティクス プロジェクト
http://catalystinfo.eng.hokudai.ac.jp/

6．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考

7．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計0件

8．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関