

令和 2 年 6 月 4 日現在

機関番号：13302

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K17762

研究課題名(和文) 界面局所構造のナノモデリングに基づく濡れ性接触角の第一原理電子状態計算評価

研究課題名(英文) Computational study of contact angles in wettability based on nano-modelings of local structures at interfaces

研究代表者

本郷 研太 (Hongo, Kenta)

北陸先端科学技術大学院大学・情報社会基盤研究センター・准教授

研究者番号：60405040

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)：本研究では、銅表面上の水の濡れ性接触角を密度汎関数法に基づく第一原理計算により算定した。従来の単一整合格子モデルを超えて、局所界面構造を複数のクラスターモデルで表現する局所構造名のモデリングを行い、そのアンサンブル平均を取ることで、実験値に近い結果が得られた。本研究では構造モデリングの検証に加えて、第一原理計算手法自体のアーティファクト要因について検証した結果、特に、交換相関汎関数への依存性が大きく、第一原理計算における他の電子物性算定と同様、適切な手法選択が必要であることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

表面の濡れ性制御は、工学の様々な分野で活用される重要な課題である。身近な例としては、衣料の防水加工や自動車のフロントガラスやボディの撥水処理などが挙げられる。工業的な観点からは、プリント基板上でのんだ付けや、近年では、電気化学反応における濡れ性と触媒活性との関係を示す報告もなされ、単に濡れ性現象の工業的応用のみならず、他の機能との関係性からも、濡れ異性現象の理解は重要な意義を持つ。本研究で濡れ性接触角の第一原理算定スキームを確立できれば、対象固体表面に元素置換を施した表面系を幅広く計算し、所望の表面系を探索可能になると期待される。

研究成果の概要(英文)：Wettability is a macroscopic quantity, which is thought of as impossible to be evaluated by ab initio simulations. But recently, ab initio attempts have been made on evaluating the energies by modeling the interface between water and solid surfaces. Such previous studies, however, considered few interface models for semiconductors and oxides. In this project we investigate wettability of copper-water interface as a typical meta-water one, and establish a new structure modeling considering a number of cluster sizes and structures to model the interface considering local structures. We applied density functional theory (DFT) simulations to evaluate the energies in the approximated Young's equation and take the Boltzmann average over the cluster to give an ensemble value of contact angle. Our "ab initio" contact angle was found to agree well with the experiments. We should be able to apply our established "nano-modeling" scheme to explore interfaces appropriate for desirable wettability.

研究分野：マテリアルズ・インフォマティクス

キーワード：表面・界面物性 濡れ性 シミュレーション工学 化学物理 第一原理計算 モデリング

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

表面の濡れ性制御は、様々な工学分野の重要な課題である[1]。身近な例としては、防水加工を施した衣料品や、自動車のフロントガラスやボディの撥水処理などが挙げられる。工業的な観点からは、プリント基板上ではんだ付けや、近年では、電気化学反応における濡れ性と触媒活性との関係を示す報告[2]もなされ、単に濡れ性現象の工業的応用のみならず、他の機能との関係性からも、濡れ異性現象の理解は重要な意義を持つ。特に、固体表面上の濡れ性の中でも金属表面上と水の濡れ性は非常に重要であり、電気化学や不均一触媒など幅広い分野に関わってくる。

計測技術の進歩に加え、近年実用性を増す計算科学との協働により、濡れ性の現象理解と制御可能性が大いに進展している。濡れ性シミュレーションは分子動力学計算[3]が主体であったが、ごく最近、半導体や金属酸化物における水の濡れ性接触角の第一原理電子状態評価が報告され、実験と非常に良い一致が見られた[4, 5]。当該研究は、固液界面を形成する特徴的な分子配置に着目し、その局所構造にのみ第一原理計算を適用して界面相互作用を算出して接触角を近似評価する。当該アプローチで得られた接触角の結果は、界面局所構造に限定したナノモデリングが巨視的濡れ性現象の本質を記述する可能性を示唆するが、他に先行事例のない当該手法の汎用性は未知である。特に、先行研究で取り扱っている液体は水であり、界面局所構造として固体構造としての「氷」を仮定した構造モデリングとなっていた。当該論文では、氷と表面金属酸化物で格子パラメータの不整合が小さく、現実の固体表面の吸着サイトと氷の秩序構造の整合性が良いため、局所構造ナノモデルに基づく接触角算定の成功につながったものと考えられる。しかしながら、一般的な固液界面系では、固体表面と氷の格子パラメータの整合性を期待することはできず、より柔軟な局所構造のモデリングが必要であると考えられる。

### 2. 研究の目的

本研究は、濡れ性現象のエナジेटクス記述に本質的な界面の局所構造を切り出すナノモデリングに基づき、巨視的な濡れ性現象を規定する接触角を定量評価するための第一原理算定スキームを確立することを目的とする。特に、界面における液体側の局所構造をどのようにモデル化するかに注力する。先行研究では、固体表面における水の局所的な界面構造のモデルとして、氷の結晶中に形成される秩序構造の基本単位である環状クラスターのみを採用していたが、ある表面系で成功した局所構造ナノモデルが他の表面系でも妥当であるという保証はなく、他の固体表面への適用可能性/汎用性までは検証されていない。特に、先行研究の対象表面系は、半導体と酸化物だけであり、金属表面系での適用事例は報告されていない。

本研究では、そのような局所構造をひとつだけ採用するという恣意性を排除して、種々の水クラスターモデルから構成される界面局所構造のアンサンブル平均を考慮することで、より汎用性の高い界面局所構造ナノモデリングを確立する。本研究スキームを確立することができれば、ハイスループットな計算機実験を通じて、表面元素置換による濡れ性制御への展開が可能になると期待される。本研究では、具体的な固液界面系として、接触角の実験結果[6, 7]が利用可能な銅表面上の水の濡れ性を検証対象とする。

### 3. 研究の方法

本研究は、固液界面系として Cu(111) 表面上の水を対象とする。当該系では、接触角の実験値[XX]を参照可能であるだけでなく、触媒活性に関連した研究として水分子吸着に関する先行研究も多数報告されており、金属表面系のベンチマークとして最適である。本研究は、固液界面の局所構造モデリングを通じて第一原理算定可能な物性量を用いることで、巨視的な物理量である濡れ性接触角を評価する。種々のエネルギー算定に利用する第一原理計算手法自体に近似に伴う系統誤差や数値計算上の誤差等、各種アーティファクトが存在するため、(1) ナノ構造モデリングの妥当性検証と、(2) エネルギー評価における第一原理手法の選択の妥当性検証を切り分けて行う必要がある。

#### (1) ナノ構造モデリング

濡れ性を規定する接触角は、次のヤングの式として与えられる：

$$\cos\theta = \frac{\gamma_{SG} - \gamma_{SL}}{\gamma_{LG}}$$

$\gamma_{SG}$ ,  $\gamma_{SL}$ ,  $\gamma_{LG}$  はそれぞれ、固体の表面エネルギー、液体の表面エネルギー、固液界面エネルギーである。これらのエネルギーは熱力学的な巨視的の量であり、固体の場合を除いて、第一原理計算による「丸ごと」シミュレーションで計算することは不可能である。そこで、液体表面と固液界面に対する構造モデリングを行い、第一原理算定可能なエネルギー値にて近似して、接触角を第一原理算定する。近年、シリコン表面[4]や希土類酸化物表面[4]と水の界面構造モデリングが構築され、密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算から接触角を算定した。当該研究では共に、ヤングの式の分子に、水を氷代用し、界面部分に氷と固体の吸着エネルギーを、分母に氷の表面エネルギーで近似している。当該近似の根拠は、氷の表面エネルギーが水の表面エネルギーと近いという実験事実[8]に依拠している。以下で、Lange ら[4]の方法を示し、

本研究が当該手法で改善した構造モデルについて示す。

先行研究では、構造モデルの簡素化のために、表面に第一水分子層のみを吸着させたモデルを使用し、各種表面エネルギーを以下のように評価している：

$$\gamma_{SG} - \gamma_{SL} = -E_{ads}^{ice}/A$$

ここで、 $E_{ads}^{ice}$  は表面上の氷に対する吸着エネルギーで、 $A$  で  $E_{ads}^{ice}$  で規定される吸着面の面積である。気液表面エネルギー  $\gamma_{LG}$  については、

$$\gamma_{LG} = -\gamma_{ice}$$

として、第一原理算定の可能な氷の表面エネルギー  $\gamma_{ice}$  で評価する。上記の近似式をヤングの式に代入して、接触角を得る：

$$\cos\theta = \frac{-E_{ads}^{ice}}{\gamma_{ice}A}$$

ここで、 $E_{ads}^{ice}$  の第一原理算定を行うために、系を構成する要素ごとのエネルギーで表記すると、

$$E_{ads}^{ice} = E_{tot} - E_{ice}^{onSurf} - E_{Cu-Slab}$$

となる。 $E_{tot}$  は氷が表面に吸着した系の全エネルギー、 $E_{ice}^{onSurf}$  は表面上に吸着した氷の構造を仮定して計算した氷のエネルギー、氷が吸着していない  $E_{Cu-Slab}$  は銅表面スラブの全エネルギーである。次に、氷の表面エネルギー  $\gamma_{ice}$  は、

$$\gamma_{ice} = \frac{E_{ice}(n; Slab) - E_{ice}(n; Bulk)}{2A_{ice}}$$

となり、 $E_{ice}(n; Slab)$ 、 $E_{ice}(n; Bulk)$  はそれぞれ、 $n$  分子からなる氷スラブ（表面積  $A_{ice}$ ）と氷バルクの  $n$  分子あたりのエネルギーである。

先行研究[4, 5]では、固体表面の構造と整合する氷のバルク結晶構造のみを扱っているが、当該結晶構造が任意の固体表面に整合するわけではなく、その結果生じる格子の不整合が第一原理接触角算定の近似性能に大きな影響を与えると考えられる。本研究では、水分子の銅表面への最安定吸着サイトであるオントップサイトに限定し、逆に、そのような安定サイトに整合する水クラスター（多量体）を複数考慮して、局所界面構造に対する柔軟な構造モデリングを提案し、その妥当性検証を行う。本研究で考慮した水クラスターは、不整合の生じる五量体（一部の水分子の位置が銅原子の直上から外れる）を除き、単量体 (monomer)、二量体 (dimer)、三量体 (trimer)、四量体 (tetramer)、六量体 (hexamer) を対象とした（全 14 種類）。特に、先行研究の内容を超えて、三量体に加え四量体についてもそれぞれ環状構造と鎖状構造を比較検証している点が、先行研究[4, 5]との大きな違いである。これらの各構造モデルから得られた接触角につき、最終的な算定結果としては、ボルツマン平均として評価する。実験結果との比較のため、本研究では室温 297K としている。

## (2) 第一原理計算

本研究の DFT 計算は、電子間相互作用の多体効果を記述する交換相関汎関数として、GGA-PBE 汎関数[9]を採用し、計算手法におけるアーティファクト検証を目的として、分散力補正 (TS 法[10]/DFT-D 法[11]) を適用している。表面系モデル切り出しに伴うアーティファクトを補正する目的で、双極子補正の必要性を検証している[12, 13]。系の電子・イオン間相互作用としては、ノルム保存型擬ポテンシャルを採用している。本研究の DFT 計算は全て CASTEP[14] を利用して、本学既設の並列計算機を利用して実施した。

## 4. 研究成果

本研究提案の第一原理濡れ性接触角算定スキームの性能評価を行い、より汎用性の高い算定スキームを確立することを目的としている。第一原理接触角の誤差要因としては、採用した局所界面構造モデルに起因するものと、そのエネルギー評価に使用した第一原理計算手法に導入される種々のアーティファクト（近似）があり、これらを切り分けて議論する必要がある。

### (1) 局所界面構造ナノモデリングに関する検証

本研究では、先行研究における氷と固体表面の格子整合に限定した構造モデリングを超えて、複数の局所界面モデル、すなわち、銅表面上に置いた水クラスターを複数考慮して、局所構造モデルと呼応する接触角の分布を調べた。図 1 は、各水クラスターモデルに対する接触角を水クラスターの表面被覆率（表面積に比例）に対してプロットしたものである。クラスター構造の違い（鎖状/環状）によって表面被覆率は変化するため、クラスターサイズが同じであっても、接触角が異なる。図 1 より、このようなクラスターサイズ・構造の違いによって、接触角の値は 15 度程度の範囲に分布していることがわかった。当初の計画では、接触角の構造モデル依存性はそれほど大きくないと想定していたため、最適な構造モデルを選択する方針自体を検討していなかった。モデル選択の指標として、実際の固液界面構造についての実験事実なども検討したが、そのような方針でのモデル選択は難しく、本研究では方針を変更して、最適な構造モ

デルの選択という方針をやめ、統計力学的なアンサンブル平均（ボルツマン平均）として取り扱う方針に変更した。ボルツマン平均の結果は、78 度となり、実験値（86 度[6], 75 度[7]）に近い結果を与えることがわかった。この値を基準として図 1 を改めて眺めると、単量体や二量体は、この平均値からの外れ値が目立つのに対して、クラスターサイズが大きくなると分散が小さくなる傾向がある。すなわち、ある程度のクラスターサイズで、局所界面の記述性に十分なクラスターサイズが存在すると推測される。本研究では、そのようなクラスターサイズの同定までは行っていないため、アンサンブルとしての局所構造の選択に恣意性は残るものの、平均操作自体には恣意性はなく、接触角算定スキームとして実用性に耐える結果が得られた。

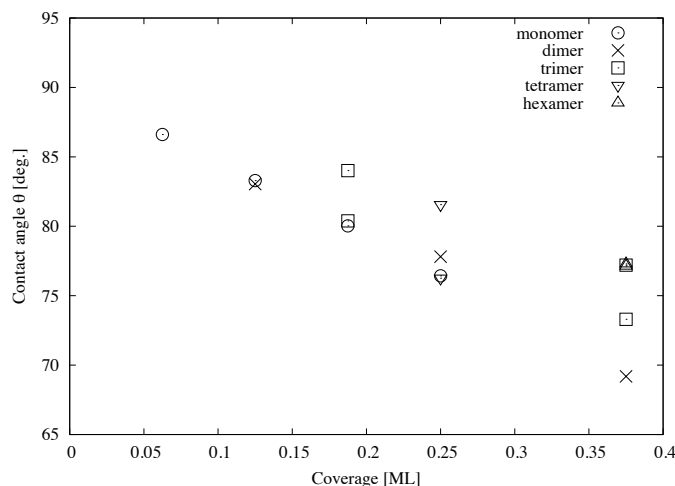


図 1 接触角  $\theta$ （単位は「deg.」）と水クラスターの表面被覆率（単位は「ML」）。五量体を除く、単量体から六量体で、構造異性体を含めて 14 種類のクラスター構造に対する結果を示している。

## (2) 第一原理計算手法に関する検証

(1) で示した結果は、DFT における交換相関汎関数として GGA-PBE を採用して得られた結果であり、分散力補正交換相関汎関数の選択や表面における双極子相互作用補正などのアーティファクト要因が考えられる。分散力補正を行う DFT-D 法では、水クラスターの吸着エネルギーが増加するため、得られる接触角は 10 度程度過小評価されるのに対して、双極子補正を加えると 1 度程度過大評価されることがわかった。水・銅表面系の実験値における 10 度程度の差と同程度であることを勘案すると、それほど悪い結果ではないと考えられるが、より信頼性の高い接触角の算定結果を得るためには、交換相関汎関数選定が重要であることが確認できた。本研究課題で対象とした「水と金属の界面系」である銅表面系に対して、分散力補正の必要性はそれほど多くないと考えられるが、汎関数の違いにより、算定接触角がどの程度外れるか、という点について検証しておくことは有用であると考えられる。

## (3) まとめと今後の展開

本研究では、銅表面上の水の濡れ性接触角を密度汎関数法に基づく第一原理計算により算定した。従来の単一整合格子モデルを超えて、局所界面構造を複数のクラスターモデルで表現し、そのアンサンブル平均を取ることで、実験値に近い接触角の算定結果が得られた。本研究では構造モデリングの検証に加えて、第一原理計算手法自体のアーティファクト要因について検証した結果、特に、交換相関汎関数への依存性が大きく、第一原理計算における他の電子物性算定と同様、適切な手法選択が必要であることがわかった。本研究で得られた研究成果については、現在、原著論文に取りまとめている。本研究課題では、濡れ性接触角に注目しているが、濡れ性に関しては、溶媒系のハマカー定数の算定も濡れ性制御に必要となる物性量である。本研究で得られた関連する知見を活用することで、その計算科学・データ科学的高速評価手法についての研究課題（課題番号：19K05029）へとつながっている。

## <引用文献>

- [1] Advances in Contact Angle, Wettability and Adhesion Vol. 1 (2013), Vol. 2 (2015), (ed Mittal, K. L.), Wiley.
- [2] K. A. Stoerzinger, W. T. Hong, G. Azimi, L. Giordano, Y. L. Lee, E. J. Crumlin, M. D. Biegalski, H. Bluhm, K. K. Varanasi, and Y. Shao-Horn, *J. Phys. Chem. C* 119, 18504 (2015).
- [3] Y. Nakamura, A. Carlson, G. Amberg, and J. Shiomi, *Phys. Rev. E* 88, 033010 (2013).
- [4] B. Lange, R. Posner, K. Pohl, C. Thierfelder, G. Grundmeier, S. Blankenburg, and W. G. Schmidt, *Surf. Sci.* 603, 60, (2009).
- [5] G. Carchini, M. García-Melchor, Z. Łodziana, and N. López, *ACS Appl. Mater. Inter.* 8, 152 (2016).

- [6] J. Park, H.S. Han, Y.C. Kim, J.P. Ahn, M.R. Ok, K.E. Lee, J.W. Lee, P.R. Cha, H.K. Seok, and H. Jeon, *Sci. Rep.* 5, 18150 (2015).
- [7] M. Voinea, C. Vladuta, C. Bogatu, and A. Duta, *Mater. Sci. Eng. B: Solid State Mater. Adv. Tech.* 152, 76 (2008).
- [8] C. J. Van Oss, R. F. Giese, R. Wentzek, J. Norris, and E.M. Chuvilin, *J. Adhes. Sci. Tech.* 6, 503 (1992).
- [9] J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865 (1996).
- [10] A. Tkatchenko and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.* 102, 6 (2009).
- [11] S. Grimme, *J. Comput. Chem.* 27, 1787 (2006).
- [12] I. C. Yeh and M. L. Berkowitz, *J. Chem. Phys.* 111, 3155 (1999).
- [13] J. Neugebauer and M. Scheffler, *Phys. Rev. B* 46, 16067 (1992).
- [14] S. J. Clark, M. D. Segall, C. J. Pickard, P. J. Hasnip, M. I. J. Probert, K. Refson, M. C. Payne, *Z. Kristallogr. Cryst. Mater.* 220, 567 (2005).

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計14件（うち査読付論文 14件 / うち国際共著 7件 / うちオープンアクセス 12件）

1. 著者名 Takagishi Hideyuki, Masuda Takashi, Shimoda Tatsuya, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 123
2. 論文標題 Method for the Calculation of the Hamaker Constants of Organic Materials by the Lifshitz Macroscopic Approach with Density Functional Theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 8726 ~ 8733
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.1021/acs.jpca.9b06433	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 Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 13
2. 論文標題 A Computational Scheme To Evaluate Hamaker Constants of Molecules with Practical Size and Anisotropy	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Chem. Theory Comput.	6. 最初と最後の頁 5217 ~ 5230
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jctc.6b01159	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ichibha Tom, Hongo Kenta, Motochi I., Makau N.W., Amolo G.O., Maezono Ryo	4. 巻 81
2. 論文標題 Adhesion of electrodes on diamond (111) surface: A DFT study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Diamond & Related Materials	6. 最初と最後の頁 168 ~ 175
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.diamond.2017.12.008	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計24件（うち招待講演 21件 / うち国際学会 11件）

1. 発表者名 本郷 研太
2. 発表標題 第一原理計算とベイズ統計を融合したデータ駆動型物質探索
3. 学会等名 一般社団法人近畿化学協会 エレクトロニクス部会 平成30年度第1回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 本郷 研太
2. 発表標題 物性データ生成エンジンとしての第一原理計算
3. 学会等名 Mi2iチュートリアルセミナー 第8回 ~基礎から応用まで~ 第一原理計算ベース「ハイスループット計算のすべて」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Recent Advances in Ab Initio Materials Informatics
3. 学会等名 5th International Conference on Nanoscience and Nanotechnology (ICONN2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Materialas simulations for data generation in materials informatics
3. 学会等名 WOS AOARD/seminar on Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 本郷 研太
2. 発表標題 ベイズ統計に基づくデータ駆動型材料設計
3. 学会等名 九州大学情報基盤研究開発センターセミナー「マテリアルズインフォマティクス技法とそれを支える真の第一原理計算」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 第一原理計算屋のマテリアルズ・インフォマティクス研究
3. 学会等名 第6会MI2Iコンソーシアムイベント（日本、東京）（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 第一原理計算とベイズ統計に基づく新規物質探索
3. 学会等名 近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演会（第99会例会）「マテリアルズインフォマティクスの最近の動向」（日本、大阪）（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 A New Molecular Design Based on Bayesian Inference and First- Principles Simulations
3. 学会等名 International Workshop on Advanced Methods for Nano Materials Design (Satellite session of Nano Korea 2017 Symposium)（韓国、ソウル）（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Fixed-node diffusion Monte Carlo study of molecular crystal polymorphism
3. 学会等名 CECAM workshop Theoretical Chemistry for Extended Systems: systematically improvable electronic structure methods（フランス、トゥールーズ）（国際学会）
4. 発表年 2017年



1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 スパコンシミュレーション!の素 ~クイズ・三つの扉~
3. 学会等名 平成29年度第1回 co-cafe@JAIST (日本、金沢市) (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kenta Hongo and Ryo Maezono
2. 発表標題 Ab initio Evaluations of Hamaker Constants
3. 学会等名 The 9th Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science(ACCMS-9) (マレーシア、クアラルンプール) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 本郷研太、前園涼
2. 発表標題 濡れ性制御に向けたハマカー定数の第一原理算定
3. 学会等名 第11回分子科学討論会 (日本、宮城)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 本郷 研太
2. 発表標題 材料計算科学・情報学の発展と最近の研究
3. 学会等名 横浜市立大学・量子物理化学セミナー (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Bayesian approach combined with first-principles simulations toward computational materials design
3. 学会等名 The 12th (Last) General Meeting of ACCMS-V0 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 本郷 研太
2. 発表標題 材料計算科学者のインフォマティクス利用
3. 学会等名 第10回スーパーコンピューティング技術産業応用シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Recent Advances in Materials Simulations and Informatics
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (ICPAC) 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kenta Hongo, Ryo Maezono
2. 発表標題 Computational approach to evaluation of Hamaker constants
3. 学会等名 255th ACS National Meeting & Exposition (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 本郷 研太
2. 発表標題 第一原理計算の進展とインフォマティクスとの融合展開
3. 学会等名 異分野融合ワークショップ「データ科学との融合による化学の新展開」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Ab Initio Materials Informatics for Computational Materials Design
3. 学会等名 The 23rd International Annual Symposium on Computational Science and Engineering: Expanding Your Mind(ANSCSE23) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Computational materials design from ab initio simulations to ab initio materials informatics
3. 学会等名 The 10th International Conference of the Asian Consortium on Computational Materials Science (ACCMS-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Data-driven approach to molecular design
3. 学会等名 The 5th International Conference on Molecular Simulation 2019 (ICMS 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 機械学習による機能性材料の設計・探索法の基礎
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会2020 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 計算材料設計：材料計算科学から材料情報学への展開
3. 学会等名 日本物理学会第75回日本物理学会シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 計算科学とデータ科学の協働による物質探索の進展
3. 学会等名 「凝縮系の理論化学2020」研究会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 本郷研太	4. 発行年 2019年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 463(62-69)
3. 書名 マテリアルズ・インフォマティクスによる材料開発と活用集	

〔産業財産権〕

〔その他〕

本郷研究室 研究室ガイド  
<https://www.jaist.ac.jp/areas/ee/laboratory/hongo.html>  
北陸先端科学技術大学院大学 研究者総覧  
[https://www.jaist.ac.jp/profiles/info.php?profile\\_id=601](https://www.jaist.ac.jp/profiles/info.php?profile_id=601)

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
--	---------------------------	-----------------------	----