

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 6 年 9 月 12 日現在

機関番号：13903

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20H02436

研究課題名（和文）データ科学に基づく新しい組成・構造を有するセラミックス材料の探索

研究課題名（英文）Discovering Ceramic Materials with Novel Compositions and Structures Based on Data Science

研究代表者

中山 将伸（Nakayama, Masanobu）

名古屋工業大学・工学（系）研究科（研究院）・教授

研究者番号：10401530

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 11,900,000円

研究成果の概要（和文）：機械学習を用いた物性予測は、様々な報告がされているが、多くの研究では記述子に構造情報を含んでいる。しかし、構造情報を使用することで必然的に新材料探索領域がデータベース上のみに限られてしまう。本研究では、既存のデータベースに記載されていない、全くの新組成を有する材料を新たに発見することを目標とし、データサイエンスに基づく以下の2つの方法論を構築した。（1）組成情報のみを用いて機械学習による予測を行い材料合成の可能性を評価するスキームおよび（2）深層学習により組成・構造の情報を緯度・経度情報に2次元可視化した材料地図を製作するスキームである。

研究成果の学術的意義や社会的意義

無機化合物のうち三元系では、16%のみが発見されている状態であり、4元系では0.6%しか調査されていないことが推定されており、未知材料（結晶構造データベースに未掲載）の探索空間は膨大である。このような新しい材料には、既存の物性限界を突破し、新しいデバイスの創出などが期待される。しかしながら、新しい結晶性材料の探索、すなわち物質が合成可能かどうかの探索は、これまでのところ研究者の経験・知識に基づく直感や単純な理論に頼ってきた。本研究成果によって、研究者と連携して系統的・効率的に新しい材料組成を提案することが可能になり、新材料探索の効率化が期待される。

研究成果の概要（英文）：Recent data science aided approach enables materials property predictions. However, structural descriptors are often included for above prediction procedure, which inevitably limits the search for new materials to existing databases. This study aims to discover new materials not listed in existing databases by developing two data science-based methodologies: (1) a scheme for evaluating the potential for material synthesis using machine learning predictions based only on composition information, and (2) a scheme for creating a materials map using deep learning to visualize composition and structural information in two dimensions (latitude and longitude).

研究分野：無機固体化学、材料シミュレーション、材料インフォマティクス

キーワード：セラミックス 材料インフォマティクス 新組成 材料地図

## 1. 研究開始当初の背景

近年、材料科学計算と情報科学を融合させるマテリアルズ・インフォマティクスが注目されている。例えば、リチウムイオン電池材料の探索に多くの研究が報告されている。従来のアプローチは、Inorganic Crystal Structure Database (ICSD) や crystallography open database (CoD) などのデータベースを利用していた。また、The Materials Project、Aflow、The Open Quantum Materials Database (OQMD) なども利用可能で、経済的・時間的コストの削減が期待される。文献[1]によれば、無機化合物のうち三元系では 16%、四元系では 0.6%しか発見されていない。未知材料の探索空間は広大であり、マテリアルズ・インフォマティクスは効率的な材料探索と学術的飛躍をもたらすが、既存データベース外の物質予見には技術的困難がある。

## 2. 研究の目的

本研究の大きな目標は、既存材料データベース外の材料に対して、データサイエンスに基づいて合成可能性を合理的かつ高速に評価することである。本研究では以下の 2 つのアプローチを検討した。

### 研究 1) 組成情報からの予測

多くのマテリアルズ・インフォマティクスでは、化合物を正確に表現する記述子が必要である。しかし、未知化合物に対しては構造データベースがないため、相安定性の予測が難しい。我々は、元素特性をヒストグラム化した組成記述子を用い、二値分類法で任意の組成に対する相安定性を予測した。

### 研究 2) 材料地図の作成

研究者とデータ科学が連携して新材料を発見する手段として「材料地図」の概念を提案する。従来、新材料の探索は研究者の経験と知識に依存していたが、オートエンコーダを用いて組成と構造の情報を低次元化し、目的物性に特化した材料地図を作成することを目指した。この地図により、既知材料と未探索材料の範囲を明確にする。

## 3. 研究の方法

上述した 2 つの方法の詳細を以下に記す。これらの手法は研究成果論文[2,3]として発表されている。

### 研究 1) 組成情報から予測

本研究では、化合物の組成情報を統一フォーマットでベクトル化し、ヒストグラム記述子を採用した。詳細は論文[4]で発表されており、生成スクリプトは Github 上に公開している[5]。データは Materials Project から取得し、85000 件のデータを使用。相安定性は DE (decomposition energy) として評価し、 $0.01 \text{ eV atom}^{-1}$  以下を合成可能、以上を合成不可として二値分類予測を行った。6 つの機械学習アルゴリズムを評価し、ROC 曲線と AUC を用いて精度を評価した。

### 研究 2) 材料地図

本研究では、次世代電池として注目される全固体電池の固体電解質候補材料に対する材料地図作成手法を検証する。高いリチウムイオン伝導性が求められる固体電解質材料について

て、711 件の Li-O 系無機固体材料のシミュレーションデータを使用。データは The Materials Project から取得し、特定の元素を含む化合物を選定。Bond Valence 力場を用いた独自のリチウムイオンの移動エネルギー (ME) 評価法で ME 値を算出した[6]。組成情報と構造情報をヒストグラム記述子としてベクトル化し、それぞれ 1782 次元と 858 次元にスケールリングした。オートエンコーダで次元を圧縮し、2 次元地図として表示。コーディング層と ME を関連付ける中間層を導入し、ME と関連した材料地図を作成した。具体的なニューラルネットワークモデルは図 1 に示す。

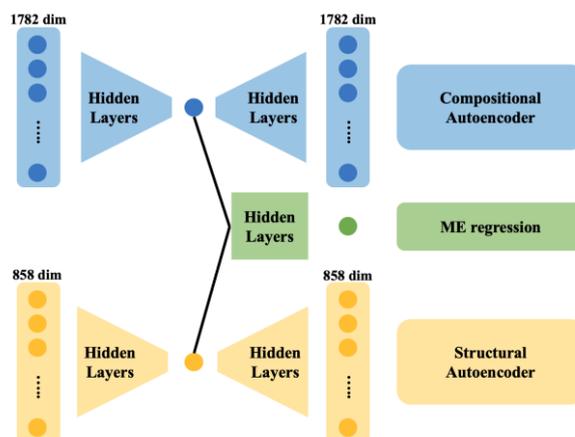


図 1. 材料地図作成のためのオートエンコーダの構造[3]

#### 4. 研究成果

##### 研究 1) 組成情報からの予測

組成記述子を用いて DE 値に基づく二値分類分析を行った。図 2 は 6 つの予測モデルの合成可否予測の AUC を示す。LightGBM 分類器が AUC=0.91 と最高値を示し、分類モデルとして十分な精度を達成したことが示唆された。その他の分類精度の指標として Recall が 0.830、Precision が 0.804 であり、いずれも高い精度を示している。結果は、既存の研究に比べても高いスコアを得た[7-9]が、データベースや方法の違いにより直接比較は困難である。

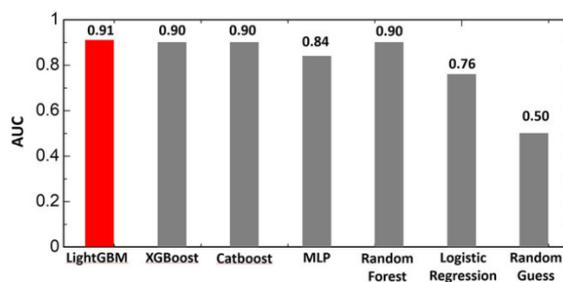


図 2 テストデータにおける相安定性の AUC を、6 つの機械学習アルゴリズムとランダム推測で比較した結果[2]

図 3 の結果は、Materials Project に登録された化合物からランダムに選択した 10% をテストデータとし、分類器の予測能を評価したものだが、これらは主に内挿空間に属する。しかし、未知化合物の多くは外挿空間に存在するため、外挿空間の評価が重要である。二元系・三元系・四元系化合物に関する人工的な外挿空間を生成し、予測精度を評価した。結果、外挿空間がスパースになるにつれて予測精度は低下したが、AUC は二元系で 0.88、三元系で 0.82、四元系で 0.74 と高い予測精度を示した。

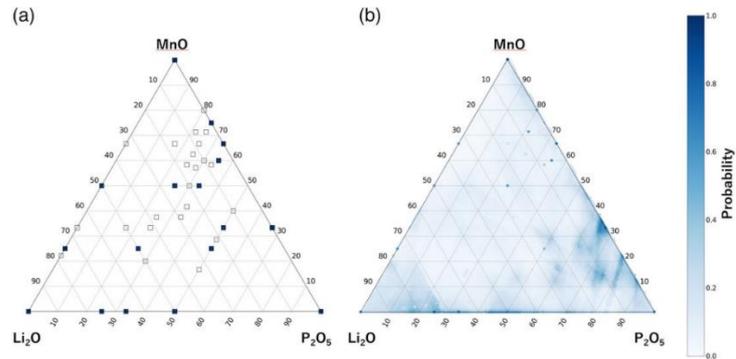


図3 LightGBM 分類器による擬三元系  $\text{Li}_2\text{O-MnO-P}_2\text{O}_5$  の合成可能性の予測[2]

## 2) 材料地図

オートエンコーダによる組成・構造記述子の復元および ME 回帰分析を検証したところ、組成・構造記述子の復元に関して、診断プロットの決定係数は 0.8 以上で、入力と出力の一致性が高い。一方、ME 回帰予測の決定係数は 0.29 と低いが、正の相関は確認することができた。

図 4 に得られた材料地図を示す。横軸は組成記述子 (1782 次元) を 1 次元に圧縮した軸、縦軸は構造記述子 (858 次元) を 1 次元に圧縮した軸である。各軸はオートエンコーダが生成したもので、明確な化学的意味はない。図のカラーはイオン伝導性の指標である ME [eV] を示し、プロットは実測値 (計算結果)、背景色は予測値である。ME が大きい材料は濃い赤色、小さい材料は濃い青色で表示され、リチウムイオン伝導性が高い材料が青色で示される。プロットがクラスター状の領域は類似組成・構造の材料が多く報告されている領域であり、点が過疎な領域は研究例が少ない領域である。未知領域は合成できない材料の可能性も高い。このような地図の生成により、研究者は自身の材料の立ち位置を理解し、既存のデータを参照しながら新材料探索の戦略を練ることが期待される。また、図中の任意の一点を指定すると、記述子を復元でき、組成などを特定することができる。主成分分析 (PCA)、t-SNE、UMAP などの次元削減法があるが、本手法は目的とする材料物性との相関を考慮できる点が特徴である。これにより、材料地図の任意の箇所に対する機能予測と記述子復元が可能である。以上、本研究では 1) 組成情報からの合成可能性予測や、2) 材料地図の作成の 2 手法について検討し、最終目的である新材料の発見スキームに貢献する手法を開発した。報告書中で述べたように、成果は論文あるいはスクリプトを公開するなどして発信している。

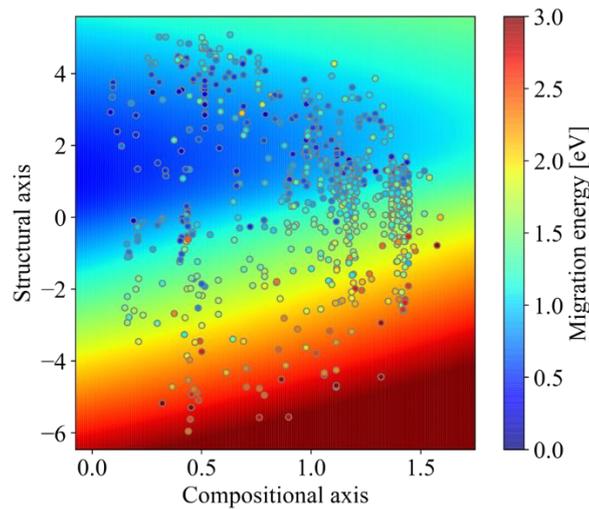


図 4 Li-O 系材料における、イオン伝導体のための材料地図[3]

#### 文献

- [1] P. Villars, S. Iwata, PAULING FILE verifies/reveals 12 principles in materials science supporting four cornerstones given by Nature, *Chem. Met. Alloy.* (2013) 81–108.
- [2] T. Atsumi, K. Sato, Y. Yamaguchi, M. Hamaie, R. Yasuda, N. Tanibata, H. Takeda, M. Nakayama, M. Karasuyama, I. Takeuchi, Chemical Composition Data-Driven Machine-Learning Prediction for Phase Stability and Materials Properties of Inorganic Crystalline Solids, *Phys. Status Solidi Basic Res.* (2022). <https://doi.org/10.1002/pssb.202100525>.
- [3] Y. Yamaguchi, T. Atsumi, K. Kanamori, N. Tanibata, H. Takeda, M. Nakayama, M. Karasuyama, I. Takeuchi, Drawing a materials map with an autoencoder for lithium ionic conductors, *Sci. Rep.* 13 (2023) 16799. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-43921-1>.
- [4] R. Jalem, M. Nakayama, Y. Noda, T. Le, I. Takeuchi, Y. Tateyama, H. Yamazaki, A general representation scheme for crystalline solids based on Voronoi-tessellation real feature values and atomic property data, *Sci. Technol. Adv. Mater.* 19 (2018) 231–242. <https://doi.org/10.1080/14686996.2018.1439253>.
- [5] T. Koyama, M. Nakayama, compositional-histogram-descriptor, (n.d.). <https://github.com/NakayamaLab-NITech/compositional-histogram-descriptor>.
- [6] M. Nakayama, M. Kimura, R. Jalem, T. Kasuga, Efficient automatic screening for Li ion conductive inorganic oxides with bond valence pathway models and percolation algorithm, *Jpn. J. Appl. Phys.* 55 (2016) 5–9. <https://doi.org/10.7567/JJAP.55.01AH05>.
- [7] B. Meredig, A. Agrawal, S. Kirklin, J.E. Saal, J.W. Doak, A. Thompson, K. Zhang, A. Choudhary, C. Wolverton, Combinatorial screening for new materials in unconstrained composition space with machine learning, *Phys. Rev. B* 89 (2014) 94104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.094104>.
- [8] A. Seko, H. Hayashi, I. Tanaka, Compositional descriptor-based recommender system for the materials discovery, *J. Chem. Phys.* 148 (2018) 241719. <https://doi.org/10.1063/1.5016210>.
- [9] C.J. Bartel, A. Trewartha, Q. Wang, A. Dunn, A. Jain, G. Ceder, A critical examination of compound stability predictions from machine-learned formation energies, *Npj Comput. Mater.* 6 (2020) 97. <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00362-y>.
- [10] M. Hamaie, M. Nakayama, Recommender.py, (n.d.). <https://github.com/NakayamaLab-NITech/Recommender>.

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計36件（うち査読付論文 36件 / うち国際共著 4件 / うちオープンアクセス 30件）

1. 著者名 Yang Zijian, Nakayama Masanobu	4. 巻 91
2. 論文標題 Materials Simulation for the Modulated Arrangement in A-Site Deficient Perovskite-Type Lithium Doped Lanthanum Niobate as Solid Electrolytes for All Solid-State Li Ion Batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 091010-1 ~ 11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.091010	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 Fukuma Ryutaro, Harada Maho, Zhao Wenwen, Sawamura Miho, Noda Yusuke, Nakayama Masanobu et al.	4. 巻 8
2. 論文標題 Unexpectedly Large Contribution of Oxygen to Charge Compensation Triggered by Structural Disorder: Detailed Experimental and Theoretical Study on a Li <sub>3</sub> NbO <sub>4</sub> -NiO Binary System	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Central Science	6. 最初と最後の頁 775 ~ 794
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acscentsci.2c00238	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
1. 著者名 Nakayama Masanobu, Nakano Koki, Harada Maho, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Noda Yusuke, Kobayashi Ryo, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro, Kotobuki Masashi	4. 巻 58
2. 論文標題 Na superionic conductor-type LiZr <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> as a promising solid electrolyte for use in all-solid-state Li metal batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 9328 ~ 9340
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2CC01526A	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 Miyakawa Shuntaro, Matsuda Shogo, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Saito Takaya, Fukuchi Svetlana	4. 巻 12
2. 論文標題 Computational studies on defect chemistry and Li-ion conductivity of spinel-type LiAl <sub>5</sub> O <sub>8</sub> as coating material for Li-metal electrode	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 16672-1 ~ 11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-022-20289-2	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 Tanibata Naoto, Takimoto Shuta, Aizu Shin, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu	4. 巻 10
2. 論文標題 Applying the HSAB design principle to the 3.5 V-class all-solid-state Li-ion batteries with a chloride electrolyte	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 20756 ~ 20760
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2TA05152D	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 Takeda Hayami, Fukuda Hiroko, Nakano Koki, Hashimura Syogo, Tanibata Naoto, Nakayama Masanobu, Ono Yasuharu, Natori Takaaki	4. 巻 3
2. 論文標題 Process optimisation for NASICON-type solid electrolyte synthesis using a combination of experiments and bayesian optimisation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Advances	6. 最初と最後の頁 8141 ~ 8148
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2MA00731B	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 Fukuda Hiroko, Kusakawa Shunya, Nakano Koki, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro, Natori Takaaki, Ono Yasuharu	4. 巻 12
2. 論文標題 Bayesian optimisation with transfer learning for NASICON-type solid electrolytes for all-solid-state Li-metal batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 30696 ~ 30703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2RA04539G	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 Aizu Shin, Takimoto Shuta, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Kobayashi Ryo	4. 巻 106
2. 論文標題 Screening chloride Li ion conductors using high throughput force field molecular dynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of the American Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 3035 ~ 3044
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/jace.18991	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 Zhang Yanjia, Sawamura Miho, Harada Maho, Noda Yusuke, Nakayama Masanobu, Goto Masato, Kan Daisuke, Shimakawa Yuichi, Louis Camp?on Beno?t Denis, Shibata Daisuke, Ohta Toshiaki, Yabuuchi Naoaki	4. 巻 127
2. 論文標題 Partially Reversible Anionic Redox for Lithium-Excess Cobalt Oxides with Cation-Disordered Rocksalt Structure	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2194 ~ 2203
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c08005	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

1. 著者名 Teranishi Takashi, Kozai Kaisei, Yasuhara Sou, Yasui Shintaro, Ishida Naoyuki, Ishida Kunihiro, Nakayama Masanobu, Kishimoto Akira	4. 巻 494
2. 論文標題 Ultrafast charge transfer at the electrode/electrolyte interface via an artificial dielectric layer	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Power Sources	6. 最初と最後の頁 229710 ~ 229710
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jpowsour.2021.229710	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 Nakayama Masanobu, Nishii Katsuya, Watanabe Kentaro, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Itoh Takanori, Asaka Toru	4. 巻 1
2. 論文標題 First-principles study of the morphology and surface structure of LaCoO <sub>3</sub> and La <sub>0.5</sub> Sr <sub>0.5</sub> Fe <sub>0.5</sub> Co <sub>0.5</sub> O <sub>3</sub> perovskites as air electrodes for solid oxide fuel cells	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 24 ~ 33
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2021.1909871	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 Yang Zijian, Ward Robyn E., Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Kobayashi Ryo	4. 巻 366-367
2. 論文標題 Exploring the diffusion mechanism of Li ions in different modulated arrangements of La(1-x)/3Li <sub>x</sub> NbO <sub>3</sub> with fitted force fields obtained via a metaheuristic algorithm	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Solid State Ionics	6. 最初と最後の頁 115662 ~ 115662
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssi.2021.115662	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 Nakano Koki, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Kobayashi Ryo, Nakayama Masanobu, Watanabe Naoki	4. 巻 125
2. 論文標題 Molecular Dynamics Simulation of Li-Ion Conduction at Grain Boundaries in NASICON-Type LiZr <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub> Solid Electrolytes	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 23604 ~ 23612
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c07314	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 Ishida Kunihiro, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Teranishi Takashi, Watanabe Naoki	4. 巻 in press
2. 論文標題 Density Functional Theory and Machine Learning Based Analyses for Improved Surface Stability of a BaTiO <sub>3</sub> Coated LiCoO <sub>2</sub> Positive Electrode Material	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2100526 ~ 2100526
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100526	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 Sakai Yusuke, Urushihara Daisuke, Asaka Toru, Fukuda Koichiro, Yang Zijian, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu	4. 巻 in press
2. 論文標題 Octahedral Tilting and Modulation Structure in Perovskite Related Compound La <sub>1/3</sub> NbO <sub>3</sub>	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2100561 ~ 2100561
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100561	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 Iwasaki Rinon, Ishida Kunihiro, Yasuda Risa, Nakano Koki, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Watanabe Naoki	4. 巻 in press
2. 論文標題 Density Functional Theory Studies on Li Metal Electrode/Garnet Type Li <sub>7</sub> La <sub>3</sub> Zr <sub>2</sub> O <sub>12</sub> Solid Electrolyte Interfaces for Application in All Solid State Batteries	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2100546 ~ 2100546
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100546	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 Atsumi Taruto, Sato Kosei, Yamaguchi Yudai, Hamaie Masato, Yasuda Risa, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro	4. 巻 in press
2. 論文標題 Chemical Composition Data Driven Machine Learning Prediction for Phase Stability and Materials Properties of Inorganic Crystalline Solids	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2100525 ~ 2100525
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100525	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 NAKAYAMA Masanobu	4. 巻 129
2. 論文標題 Materials informatics for discovery of ion conductive ceramics for batteries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Ceramic Society of Japan	6. 最初と最後の頁 286 ~ 291
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2109/jcersj2.21030	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 Urushihara Daisuke, Asaka Toru, Fukuda Koichiro, Nakayama Masanobu, Nakahira Yuki, Moriyoshi Chikako, Kuroiwa Yoshihiro, Forslund Ola K., Matsubara Nami, M?nsson Martin, Papadopoulos Konstantinos, Sassa Yasmine, Ohishi Kazuki, Sugiyama Jun, Matsushita Yoshitaka, Sakurai Hiroya	4. 巻 60
2. 論文標題 Structural Transition with a Sharp Change in the Electrical Resistivity and Spin?Orbit Mott Insulating State in a Rhenium Oxide, Sr3Re2O9	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 507 ~ 514
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c02750	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 Yang Zijian, Suzuki Shinya, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Efficient Experimental Search for Discovering a Fast Li-Ion Conductor from a Perovskite-Type Li <sub>x</sub> La(1-x)/3NbO <sub>3</sub> (LLNO) Solid-State Electrolyte Using Bayesian Optimization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 152 ~ 160
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c08887	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 Tanibata Naoto, Kato Masashi, Takimoto Shuta, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Sumi Hirofumi	4. 巻 1
2. 論文標題 High Formability and Fast Lithium Diffusivity in Metastable Spinel Chloride for Rechargeable All Solid State Lithium Ion Batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Energy and Sustainability Research	6. 最初と最後の頁 2000025 ~ 2000025
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/aesr.202000025	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 Kobayashi Ryo, Miyaji Yasuhiro, Nakano Koki, Nakayama Masanobu	4. 巻 8
2. 論文標題 High-throughput production of force-fields for solid-state electrolyte materials	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 081111 ~ 081111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0015373	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 Harada Maho, Takeda Hayami, Suzuki Shinya, Nakano Koki, Tanibata Naoto, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Bayesian-optimization-guided experimental search of NASICON-type solid electrolytes for all-solid-state Li-ion batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 15103 ~ 15109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0TA04441E	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 Yang Zijian, Ward Robyn E., Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Asaka Toru	4. 巻 124
2. 論文標題 Arrangement in La <sub>1</sub> /3NbO <sub>3</sub> Obtained by First-Principles Density Functional Theory with Cluster Expansion and Monte Carlo Simulation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 9746 ~ 9754
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c01350	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 Nakano Koki, Noda Yusuke, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Kobayashi Ryo, Takeuchi Ichiro	4. 巻 8
2. 論文標題 Exhaustive and informatics-aided search for fast Li-ion conductor with NASICON-type structure using material simulation and Bayesian optimization	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 041112 ~ 041112
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0007414	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 Nakayama Masanobu, Horie Takuya, Natsume Ryosuke, Hashimura Shogo, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Maeda Hirota, Kotobuki Masashi	4. 巻 127
2. 論文標題 Reaction Kinetics of Carbonation at the Surface of Garnet-Type Li7La3Zr2012 as Solid Electrolytes for All-Solid-State Li Ion Batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 7595 ~ 7601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c08588	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

1. 著者名 Bekaert Lieven, Akatsuka Suzuno, Tanibata Naoto, De Proft Frank, Hubin Annick, Mamme Mesfin Haile, Nakayama Masanobu	4. 巻 127
2. 論文標題 Assessing the Reactivity of the Na3PS4 Solid-State Electrolyte with the Sodium Metal Negative Electrode Using Total Trajectory Analysis with Neural-Network Potential Molecular Dynamics	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 8503 ~ 8514
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c02379	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

1. 著者名 Matsunoshita Koki, Yamaguchi Yudai, Hamaie Masato, Horibe Motoki, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Kobayashi Ryo	4. 巻 3
2. 論文標題 Optimization of force-field potential parameters using conditional variational autoencoder	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 2253713
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2023.2253713	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 Yamaguchi Yudai, Atsumi Taruto, Kanamori Kenta, Tanibata Naoto, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu, Karasuyama Masayuki, Takeuchi Ichiro	4. 巻 13
2. 論文標題 Drawing a materials map with an autoencoder for lithium ionic conductors	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 16799
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-023-43921-1	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 Hashimura Shogo, Yamaguchi Yudai, Takeda Hayami, Tanibata Naoto, Nakayama Masanobu, Niizeki Naohiro, Nakaya Takayuki	4. 巻 127
2. 論文標題 Materials Informatics for Thermistor Properties of Mn-Co-Ni Oxides	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 21665 ~ 21674
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.3c03114	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 AIZU Shin, TANIBATA Naoto, TAKEDA Hayami, NAKAYAMA Masanobu	4. 巻 91
2. 論文標題 Characterization of a Novel Chloride Li-ion Conductor Li <sub>2</sub> LuCl <sub>5</sub>	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Electrochemistry	6. 最初と最後の頁 117004 ~ 117004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5796/electrochemistry.23-00063	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 Tanibata Naoto, Matsunoshita Koki, Takeuchi Hirokazu, Akatsuka Suzuno, Koga Misato, Takeda Hayami, Nakayama Masanobu	4. 巻 11
2. 論文標題 Fast Na-diffusive tin alloy for all-solid-state Na-based batteries	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry A	6. 最初と最後の頁 25859 ~ 25864
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D3TA02787B	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 Usami Takeshi、Tanibata Naoto、Takeda Hayami、Nakayama Masanobu	4. 巻 11
2. 論文標題 Analysis of ion conduction behavior of Nb- and Zr-doped Li3InCl6-based materials via material simulation	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 APL Materials	6. 最初と最後の頁 121107
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0167817	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 Tanibata Naoto、Nonaka Naoki、Makino Keisuke、Takeda Hayami、Nakayama Masanobu	4. 巻 14
2. 論文標題 Chloride electrode composed of ubiquitous elements for high-energy-density all-solid-state sodium-ion batteries	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 2703
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-024-53154-5	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 Makino Keisuke、Tanibata Naoto、Takeda Hayami、Nakayama Masanobu	4. 巻 in press
2. 論文標題 Computational studies on Mg ion conductivity in Mg <sub>2</sub> xHf <sub>1-x</sub> Nb(P <sub>04</sub> ) <sub>3</sub> using neural network potential	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Solid State Electrochemistry	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) 10.1007/s10008-024-05862-1	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 Usami Takeshi、Tanibata Naoto、Takeda Hayami、Nakayama Masanobu	4. 巻 in press
2. 論文標題 Influence of atmospheric moisture on the gas evolution tolerance of halide solid electrolytes	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Solid State Electrochemistry	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) 10.1007/s10008-024-05880-z	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 -

〔学会発表〕 計16件（うち招待講演 16件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 データサイエンスを利用した全固体電池材料の効率的探索
3. 学会等名 光触媒第87回講演会「データサイエンス」（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 高速力場計算を用いたLiイオン導電性材料の評価と探索
3. 学会等名 第116回 新電池構想部会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 データベースの外を探すマテリアルズ・インフォマティクス
3. 学会等名 信州大学先鋭材料研究所 講演会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Computational and informatics studies on NASICON-type Li ion conductor
3. 学会等名 Bunsen Colloquium New Horizons in Solid State Ionics on the occasion of the 68th birthday of Manfred Martin（招待講演）（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 全固体電池材料探索のための材料インフォマティクス
3. 学会等名 日本セラミックス協会関西支部 2021 年度支部セミナー（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 NASICON型Liイオン導電性酸化物の安定性、イオン伝導、界面イオン交換
3. 学会等名 第182回電子セラミック・プロセス研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 Liイオン導電性 NASICON型材料の固固界面構造と材料計算
3. 学会等名 第1回計算イオニクス研究会（第78回固体イオニクス研究会）（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 蓄電固体界面の材料シミュレーションとインフォマティクス
3. 学会等名 日本セラミックス協会 第33回秋季シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 材料インフォマティクスを活用した蓄電池材料の効率的な最適化と発見
3. 学会等名 CAE POWER 2020 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Analysis and optimization for Li conductive NASICON-type $\text{LiZr}_2(\text{PO}_3)_4$ solid electrolytes
3. 学会等名 45th International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山将伸
2. 発表標題 第一原理計算を用いた無秩序岩塩型酸化物における固体内酸素レドックス反応解析
3. 学会等名 日本化学会第101回春季年会 併催シンポジウム 新学術領域研究「蓄電固体界面科学」成果報告会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 蓄電池材料インフォマティクス
3. 学会等名 日本セラミックス協会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 MIによる未知材料探索 ~蓄電池セラミックス研究を例として
3. 学会等名 令和5年度日本接着学会中部支部講演会(招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Masanobu Nakayama
2. 発表標題 Computational Studies on Electrode/Electrolyte Interface in Battery
3. 学会等名 International Conference on Surface Engineering (ICSE2023)(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 計算科学・インフォマティクスの未来展望
3. 学会等名 第63回 電気化学セミナー 蓄電池の未来 -学術・技術・人材育成の展望- (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 中山 将伸
2. 発表標題 ニューラルネットワーク力場を活用した蓄電池研究
3. 学会等名 第59回 熱測定討論会(招待講演)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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