

令和 5 年 5 月 25 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20H04241

研究課題名（和文）情報科学・理論・実験の融合によるネットワークガラスの高次多体相関解析

研究課題名（英文）High-order many body correlation analysis of network forming glass based on comprehensive integration of experimental, theoretical and data sciences

研究代表者

志賀 元紀 (Shiga, Motoki)

東北大学・未踏スケールデータアナリティクスセンター・教授

研究者番号：20437263

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,900,000円

研究成果の概要（和文）：シリカガラスに代表されるネットワーク形成ガラスの構造モデル（原子配置データ）の構造秩序解析の開発に取り組んだ。まず、手法の検証のために、分子動力学・逆モンテカルロ法・量子化学理論計算に基づく大規模構造モデルを構築した。そして、ネットワークに含まれるリングの形状および局所的な多体相関に基づく構造秩序解析法を提案し、様々なガラスや結晶の構造秩序を定量的に評価した。また、電子顕微鏡などの計測データから構造秩序を直接評価するアプローチに取り組んだ。

研究成果の学術的意義や社会的意義

物質・材料科学において、機械学習などのデータ科学に基づく、データ駆動型の材料設計・探索に対する期待が高まっている。しかしながら、非晶質材料に対しては、構造秩序の研究が発展段階であるため、データ駆動型アプローチで必要となる有効な構造記述子の設計が困難であった。本課題で取り組んだ研究および成果は、ネットワーク形成ガラスの構造記述子の選択肢を増やし、また、計測データ解析を通じて新しい構造記述子の設計に関する方向性を見出せるものとなっている。したがって、本研究課題の成果は、ガラス材料の設計や探索の加速に寄与できると考えている。

研究成果の概要（英文）：We worked on the structural order analysis of network-forming glassy materials such as silica glass. First, large-scale structural models of glassy materials were constructed using based on molecular dynamics, inverse Monte Carlo, and quantum chemistry. Next, we developed a structural order analysis method based on the shape of rings in the networks and local spatial correlations around rings and then quantitatively evaluated the structural order in silica glasses and crystals. We also worked on approaches for evaluating structural order directly from microscopic measurement data such as electron microscopy.

研究分野：マテリアルズ・インフォマティクス

キーワード：ガラス 中距離秩序 機械学習 量子化学 大規模系計算

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

実材料の構造(原子配置)は、結晶と非晶質(アモルファス)に大別される。結晶は、規則的な原子配置パターンが無数に反復され、長距離秩序をもつ構造である。一方、非晶質は原子配置に明確な規則性が存在しないランダム系であるものの、化学結合などの拘束による中距離秩序をもつと考えられ、その証拠は X 線回折などの実計測から示されてきた。非晶質物質は実用材料として非常に重要であり、例えば、窓ガラス、光ファイバー、スマートフォンの液晶パネル(IGZO パネル等)のように身の回りで様々に使われている。しかしながら、非晶質はその原子配置が単純でないためボトムアップなアプローチでの物性の理解が難しく、研究者の経験や勘に頼る材料設計が行われてきた。今後、効率的な非晶質材料の設計を行うために未解明な問いは、「非晶質物質に内在する秩序をどのように記述すべきか?」、「非晶質構造の物性に寄与する構造秩序は何か?」である。これらの問いに対して正確に答えるには統計解析の精度を高める必要があり、そのために大規模かつ厳密な構造モデルを構築する手法の開発が重要な課題とされてきた。

### 2. 研究の目的

非晶質材料は電池材料や液晶パネル等の実用材料として必要不可欠である。しかしながら、その不規則な原子配置のために、結晶に用いられる構造記述子を用いることができず、データ駆動型アプローチに基づく物性予測や高性能材料の合理的な設計が困難である。こうした問題点を解決するために、構造モデル(原子配置データ)から非晶質材料の構造秩序を解析する手法を開発することを本研究課題の目的とした。特に、シリカガラスに代表されるネットワーク形成ガラスに焦点を絞り、構造秩序解析法の研究に取り組んだ。

### 3. 研究の方法

研究目標を達成するために、本研究課題では、実験・計測分野の研究者(小原、平田、小野寺)、量子化学の理論計算分野の研究者(小林)、データ科学分野の研究者(志賀)という異分野の研究者がグループを編成して、3つの課題(1)ネットワーク形成ガラスの大規模な構造モデルの構築、(2)大規模系のための高速な量子化学理論計算法の開発、(3)ネットワーク形成ガラスのための構造秩序解析法の開発、に取り組んだ。以下に取り組んだ内容をそれぞれ述べる。

(1)中距離秩序をもつ非晶質の構造解析をするためには、大きなサイズの構造モデルを生成することが必要不可欠である。例えば、シリカ( $\text{SiO}_2$ )ガラスにおける中距離構造秩序が約 10 となることを考えると、従来研究で生成された一辺 20 から 30 の立方体サイズの構造モデルでは、統計的な意味で十分な精度の解析をできない。こうした課題に対して、計測データや厳密な理論計算を組み合わせ、大規模かつ精密な構造モデルを生成する取り組みを行なった。

#### (2)大規模系のための高速な量子化学理論計算法の開発

第一原理量子化学計算の通常的手法は、計算コストがボトルネックとなり 100 原子くらいの構造しか作成できないため、非晶質構造の統計的な多体相関解析をするために十分な大きさのモデルを生成できない。この問題を解決するため、分割統治(DC)法に基づく大規模量子化学計算手法とその高速な並列計算プログラムの開発、また、既存の計算結果を機械学習の教師ありモデルに流用する手法の研究に取り組んだ。

(3)ネットワーク形成ガラスの大規模な構造モデルを用いて、多体(複数の原子)の間の構造秩序を統計的に解析するアプローチの開発に取り組んだ。従来の解析において、化学結合より構成されるネットワークのトポロジー解析が数多くなされ、特にネットワークに含まれるリング(閉路)解析が主流であった。最近では、原子を点群としてとらえ、その空隙を解析するパーシステントホモロジーによる解析が注目を集めている。前者の解析は複数原子間の距離の情報を用いない、一方、後者は化学結合の情報を用いない、といった特徴があり、一長一短である。本研究では、リングに含まれる原子配置情報を用いるアプローチに取り組み、2つの従来法の利点を取り入れる試みを行なった。

### 4. 研究成果

(1)温度と圧力を精密に制御して合成した永久高密度化シリカガラスに対して、SPring-8、海外の原子炉・パルス中性子源を利用して測定した量子ビーム実験・計測をして、それらの計測デ

ータを厳密に再現する大規模な構造モデルを作成した。量子ビーム実験と、位相的データ解析やネットワークトポロジー解析を駆使することによって、高密度化メカニズムおよび永久高密度化ガラスの構造秩序を明らかにした。(Y. Onodera, et al., NPG Asia Mater., 12, 85(2020))

(2) 分割統治に基づく DC-DFTB 法では元素ペアに対するパラメータが必要であり、複雑な組成を持つガラスには不適であったので、簡単な単元素パラメータで計算可能な GFN-xTB 法に DC 法を適用した DC-xTB 法の開発を行い、さらに、周期的な構造を取り扱えようにした。これらの計算結果を訓練データとして、構造エネルギーや原子にかかる力を高速に計算するために機械学習モデルの開発に取り組んだ。DC-DFTB 計算に対して、全エネルギーを構成原子に割り当てるエネルギー密度解析を用いて、学習データを高効率的に収集することが可能となった。こうして生成された訓練データに対して、原子配置に関する記述子を入力として、機械学習モデルを構築し、予測性能を検証した。今後、その性能を十分に検証するとともに、分子動力学計算などのシミュレーションに応用するのが課題である。(H. Nakai, et al., J. Phys. Chem. A, 127, 589-618 (2023))

(3) ネットワーク形成ガラス材料の構造秩序では、化学結合からなるネットワークの全てのリングを列挙し、さまざまな構造のリングサイズ分布が比較される。本研究では、より詳細に構造秩序を評価するために、リング形状の評価指標(真円度および歪み度)を新たに開発した。また、リング周りの局所的な構造秩序解析をする新しい手法を提案した。これらを用いて、様々な条件で合成されたシリカガラスや結晶の中距離構造秩序の解析に応用した。(P.S. Salmon, et al., Phys. Rev. B 107, 144203, (2023), M. Shiga, et al., arXiv:2209.12116 (2022))

また、計測データ解析から直接構造秩序を発見する研究にも取り組んだ。ビーム電子回折実験を計算機において仮想的に行うヴァーチャルビーム電子回折法を開発し、計算ホモロジーおよび分子動力学法と組み合わせることで、代表的な金属ガラスである Pd-Si のトポロジ的な秩序領域から得られる電子回折の特徴を調べた。その結果、トポロジ的な秩序領域では 1nm 以上にわたり方向の揃った擬格子面が形成されており、これに対応して回折パターン中に強い強度のスポットが出現することがわかった。(A. Hirata, et al., Commun. Mater., 1, 98 (2020))

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 9件）

1. 著者名 Hirata Akihiko	4. 巻 6
2. 論文標題 Virtual Angstrom-Beam Electron Diffraction Analysis for Zr80Pt20 Metallic Glasses	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Quantum Beam Science	6. 最初と最後の頁 28 ~ 28
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/qubs6040028	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 小野寺陽平, 平田秋彦	4. 巻 35
2. 論文標題 量子ビームの相補利用によるガラス・アモルファス材料の構造物性研究	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 放射光	6. 最初と最後の頁 274 ~ 284
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 -
1. 著者名 Kimoto Koji, Shiga Motoki, Kohara Shinji, Kikkawa Jun, Cretu Ovidiu, Onodera Yohei, Ishizuka Kazuo	4. 巻 12
2. 論文標題 Local structure analysis of disordered materials via contrast variation in scanning transmission electron microscopy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 095219 ~ 095219
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0104798	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 志賀 元紀、武藤 俊介	4. 巻 57
2. 論文標題 低カウントのスペクトラムイメージ解析のための機械学習法	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 顕微鏡	6. 最初と最後の頁 65 ~ 69
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.11410/kenbikyo.57.2_65	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 Nakai Hiromi, Kobayashi Masato, Yoshikawa Takeshi, Seino Junji, Ikabata Yasuhiro, Nishimura Yoshifumi	4. 巻 127
2. 論文標題 Divide-and-Conquer Linear-Scaling Quantum Chemical Computations	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 589 ~ 618
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.2c06965	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 Salmon Philip S., Zeidler Anita, Shiga Motoki, Onodera Yohei, Kohara Shinji	4. 巻 107
2. 論文標題 Ring compaction as a mechanism of densification in amorphous silica	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 144203
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.107.144203	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 Kohara Shinji, Shiga Motoki, Onodera Yohei, Masai Hirokazu, Hirata Akihiko, Murakami Motohiko, Morishita Tetsuya, Kimura Koji, Hayashi Kouichi	4. 巻 11
2. 論文標題 Relationship between diffraction peak, network topology, and amorphous-forming ability in silicon and silica	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 22180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-00965-5	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 該当する

1. 著者名 武藤 俊介, 志賀 元紀	4. 巻 26
2. 論文標題 次元削減法とそのスペクトル解析への応用	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ふえらむ	6. 最初と最後の頁 434-442
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 オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Hirata Akihiko	4. 巻 70
2. 論文標題 Local structure analysis of amorphous materials by angstrom-beam electron diffraction	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Microscopy	6. 最初と最後の頁 171 ~ 177
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/jmicro/dfaa075	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 Hirata Akihiko, Wada Tomohide, Obayashi Ippei, Hiraoka Yasuaki	4. 巻 1
2. 論文標題 Structural changes during glass formation extracted by computational homology with machine learning	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 98
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-020-00100-3	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 Onodera Yohei, et al.	4. 巻 12
2. 論文標題 Structure and properties of densified silica glass: characterizing the order within disorder	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 NPG Asia Materials	6. 最初と最後の頁 85
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41427-020-00262-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 該当する

〔学会発表〕 計38件 (うち招待講演 26件 / うち国際学会 8件)

1. 発表者名 A. Hirata
2. 発表標題 Medium-range order in amorphous materials
3. 学会等名 Hierarchical Structure of Materials 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 S. Kohara
2. 発表標題 Very sharp diffraction peak in oxide glasses and liquids
3. 学会等名 26th International Congress on Glass - ICG 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Kohara
2. 発表標題 Structure and dynamics in densified silica glass
3. 学会等名 16th International Conference on the Physics of Non-Crystalline Solids (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 S. Kohara, Y. Shuseki
2. 発表標題 "Probing order within disorder in glasses and liquids by X-ray and neutron diffraction"
3. 学会等名 International Congress on Pure & Applied Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小原真司
2. 発表標題 単成分酸化ガラスの短・中距離構造
3. 学会等名 日本セラミックス協会2022年秋季シンポジウム
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林正人
2. 発表標題 量子化学計算: 大規模系への展開とこれから
3. 学会等名 日本コンピュータ化学会 20周年記念シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Kobayashi
2. 発表標題 Large-scale quantum chemical calculations based on divide-and-conquer (DC) method: Recent developments and future prospects
3. 学会等名 T2CoMSA monthly talk (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林正人
2. 発表標題 大規模量子化学計算法divide-and-conquer法の現在と展望
3. 学会等名 2022年度第1回計算科学フォーラム (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 M. Kobayashi
2. 発表標題 Toward large-scale quantum chemical calculations with annealers: Divide-and-conquer (DC) and annealing + Bayesian-optimization configuration interaction (ABCI) methods
3. 学会等名 10th conference of the Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry (APATCC-10) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年



1. 発表者名 藤原孝太郎, 西田勲倫, 小林正人, 武次徹也
2. 発表標題 DC-xTB法: 複合欠陥を含む超大規模系の量子化学計算手法の開発
3. 学会等名 第24回理論化学討論会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小林正人, 宮越洸二, 斉田謙一郎, 小野寺陽平, 志賀元紀, 小原真司, 武次徹也
2. 発表標題 準安定結晶構造探索とパーシステント・ホモロジー解析によるアモルファス構造と結晶構造の橋渡し
3. 学会等名 シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア2022」
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤原孝太郎, 西田勲倫, 小林正人, 武次徹也
2. 発表標題 DC-xTB-MD法: 複合欠陥を含む超大規模系の量子分子動力学計算手法の開発
3. 学会等名 化学系学協会北海道支部2023年冬季研究発表会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 志賀元紀
2. 発表標題 ガラスの構造秩序解析のためのデータマイニング技術
3. 学会等名 第16回物性科学領域横断研究会(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 志賀元紀
2. 発表標題 微細構造計測データ解析のための統計的機械学習
3. 学会等名 第37回分析電子顕微鏡討論会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 平田秋彦
2. 発表標題 非晶質の隠れた秩序のオンGSTロームビーム電子回折法による観察
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平田秋彦
2. 発表標題 オンGSTロームビーム電子回折による 非晶質材料の局所構造解析
3. 学会等名 電気学会・電子材料研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平田秋彦
2. 発表標題 オンGSTロームビーム電子回折による非晶質材料の局所構造解析
3. 学会等名 NIMS先端計測シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 平田秋彦
2. 発表標題 電子回折と数理モデリングに基づく アモルファス構造解析
3. 学会等名 材料分野における情報計測クラスタ会議（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小原真司
2. 発表標題 非晶質物質の中距離構造
3. 学会等名 日本セラミックス協会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小原真司
2. 発表標題 高温高圧下におけるシリカガラスの中距離構造変化
3. 学会等名 第62回高圧討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小原真司
2. 発表標題 量子ビーム回折でガラスを見る
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masato Kobayashi
2. 発表標題 Automated Reaction Path Search and Informatics
3. 学会等名 EU-Japan Workshop on HPC-Based Material Sciences (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀
2. 発表標題 微細構造計測データ解析のための統計的機械学習
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 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀, 武藤俊介
2. 発表標題 分光スペクトル解析のための統計的機械学習
3. 学会等名 日本顕微鏡学会 第77回学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀
2. 発表標題 スペクトルイメージング解析のための統計的機械学習
3. 学会等名 第6回兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス講演会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀
2. 発表標題 微細構造計測データ解析のための統計的機械学習
3. 学会等名 第12回材料系ワークショップ（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀, 平田秋彦, 小野寺陽平, 正井博和, 小原真司
2. 発表標題 リング形状に基づくネットワーク形成ガラスの構造秩序解析
3. 学会等名 第62回ガラスおよびフォトニクス材料に関する研究討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀
2. 発表標題 理論・実験・情報科学の融合によるガラスの構造秩序解析
3. 学会等名 第35回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 志賀元紀
2. 発表標題 物質構造解析のためのインフォマティクス技術
3. 学会等名 第69回応用物理学会春季学術講演会 シンポジウム「応用物理におけるインフォマティクス応用の最前線」（招待講演）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 小原真司, 志賀元紀, 小野寺陽平, 正井博和, 平田秋彦, 木村耕治, 林 好一
2. 発表標題 非晶質物質の中距離構造
3. 学会等名 日本セラミックス協会2022年年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 平田秋彦
2. 発表標題 パーシステントホモロジーと機械学習を用いたガラス形成における局所構造変化の抽出
3. 学会等名 日本応用数理学会第17回 研究部会連合発表会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 平田秋彦
2. 発表標題 オンクストロームビーム電子回折による非晶質物質の構造解析
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S. Kohara
2. 発表標題 Understanding diffraction patterns of glassy, liquid and amorphous materials via persistent homology analyses.
3. 学会等名 THERMEC'2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小原 真司, 小野寺 陽平, 脇原 徹, 正井博和, 増野敦信, 志賀元紀, 大林一平
2. 発表標題 永久高密度アモルファスシリカライトのトポロジー解析
3. 学会等名 日本セラミックス協会2021年年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮越洸二, 小林正人, 斉田謙一郎, 小野寺陽平, 志賀元紀, 小原真司, 武次徹也
2. 発表標題 SiO <sub>2</sub> 結晶のパーシステント・ホモロジー・データベース - ガラス構造との比較
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮越洸二, 小林正人, 斉田謙一郎, 小野寺陽平, 志賀元紀, 小原真司, 武次徹也
2. 発表標題 パーシステンス・ダイヤグラムを用いた準安定結晶とガラスの「穴」の比較
3. 学会等名 第23回理論化学討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀元紀, 平田秋彦, 小原真司, 小野寺陽平
2. 発表標題 化学結合トポロジーに基づく非晶質の多体相関解析
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 志賀元紀
2. 発表標題 スペクトラムイメージデータのノイズ処理と信号抽出の最近の進展
3. 学会等名 顕微鏡計測インフォマティクス研究部会第2回研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 Chapter 3: S. Kohara, L. Pusztai (Editor: Jincheng Du, Alastair N. Cormack)	4. 発行年 2022年
2. 出版社 Wiley-American Ceramic Society	5. 総ページ数 531
3. 書名 Atomistic Simulations of Glasses: Fundamentals and Applications	

1. 著者名 29. 1節 志賀元紀, 青柳里果（日本表面真空学会編）	4. 発行年 2021年
2. 出版社 朝倉書店	5. 総ページ数 576
3. 書名 図説 表面分析ハンドブック	

〔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
研究分担者	小原 真司  (Kohara Shinji)  (90360833)	国立研究開発法人物質・材料研究機構・先端材料解析研究拠点・独立研究者   (82108)	



6. 研究組織（つづき）

	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
研究分担者	小林 正人 (Kobayashi Masato)  (40514469)	北海道大学・理学研究院・准教授  (10101)	
研究分担者	平田 秋彦 (Hirata Akihiko)  (90350488)	早稲田大学・理工学術院・教授（任期付）  (32689)	
研究分担者	小野寺 陽平 (Onodera Yohei)  (20531031)	京都大学・複合原子力科学研究所・助教  (14301)	

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			
英国	University of Bath	Rutherford Appleton Laboratory		
フランス	Institut Laue-Langevin			
米国	Oak Ridge National Laboratory			