

令和 6 年 6 月 19 日現在

機関番号：12601

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2019～2023

課題番号：19H05787

研究課題名（和文）情報科学による機能コア計算設計

研究課題名（英文）Computational design of functional core using informatics approaches

研究代表者

溝口 照康（Mizoguchi, Teruyasu）

東京大学・生産技術研究所・教授

研究者番号：70422334

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 100,000,000円

研究成果の概要（和文）：本計画班は機械学習を活用した手法開発や解析に関する成果を達成した。まず、機械学習ポテンシャルを用いて計算・解析効率を数万倍向上させ、公募班と連携し、結晶構造の探索やシリコンの熱機能コアの研究に寄与した。また、格子欠陥の構造機能相関を解明し、効率的な物性予測手法を開発した。さらに、イオン機能コアの高精度解析手法を確立し、プロセス班および公募班と連携して、機能コアを活用した新材料のデータ駆動型探索を実現した。加えて、公募班や計測班と連携して計測インフォマティクス分野を進展させた。本計画班で開発したコードおよびデータベースは広く公開した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、機械学習ポテンシャルを用いた材料開発の効率化により、迅速な材料発見と環境負荷の低減という社会的課題の解決に寄与している。計測インフォマティクス手法の開発を通じて、精度の高いデータ解析が可能となり、材料分析が加速された。公開されたデータベースやコードは多くの研究者に利用され、イノベーションを促進することが期待される。さらに、機械学習ポテンシャルの開発により、格子欠陥の構造機能相関を明らかにし、高精度なイオン機能コア解析手法やデータ駆動型の新材料探索手法が確立された。これにより、学術界の研究手法の高度化と新しい機能コア学理の構築に貢献した。

研究成果の概要（英文）：We have achieved significant results in the development and analysis of methods utilizing machine learning. First, we improved computational and analytical efficiency by tens of thousands of times using machine learning potentials, contributing to the exploration of crystal structures and the study of silicon thermal function cores in collaboration with other teams. Additionally, we elucidated the structure-function correlation of lattice defects and developed efficient property prediction methods. Furthermore, we established high-precision analysis methods for ion functional cores, enabling data-driven exploration of new materials using functional cores in collaboration with the other teams. Moreover, we advanced the field of measurement informatics in cooperation with the other teams. The codes and databases developed by us have been widely released, providing valuable resources to the research community and promoting further advancements in functional-core materials science.

研究分野：材料科学

キーワード：機械学習 機能コア 格子欠陥 界面 転位 第一原理計算 計測インフォマティクス マテリアルズインフォマティクス

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)

### 1. 研究開始当初の背景

本新学術領域では、格子欠陥に局在して機能発現に大きく関与する領域を「機能コア」と定義し、シミュレーション、計測、プロセスから機能コアのメカニズム解明とその設計指針を確立することを目的としている。特に、格子欠陥に局在化した機能コアの物性への影響を理解し、物性設計モデルを構築するためには、格子欠陥の構造と物性を系統的に決定することが不可欠である。一方で、格子欠陥が持つ幾何学的な自由度は高く、さらに光、熱や電場等の外場の下では原子構造の変化や移動(拡散)が伴い、機能コア構造の自由度はさらに高くなる。このような格子欠陥の解析スピードは、幾何学的自由度により決まる構造空間の中から最安定構造を探索する過程が律速しているといつて過言ではない。一方で、情報科学では膨大な自由度の組み合わせから最適解を探索することが可能であることから、材料科学と情報科学を組み合わせることで材料開発を効率化する「マテリアルズインフォマティクス」が近年注目を集めている。

そのような状況の中で、研究代表者の溝口らは、機械学習を活用することで結晶界面の原子配列を、精度を落とすことなく数百倍から数万倍高速に決定する手法の開発に成功した。さらに、研究分担者の世古、豊浦、柴田らは、第一原理計算とはほぼ同じ精度を保ちつつ数千倍以上高速な計算が可能な、高精度機械学習ポテンシャルを作成したり、原子拡散経路計算を大幅に軽減する手法を開発したり、機械学習を計測に組み込んだ計測インフォマティクスに関する分野を切り開いてきた。

### 2. 研究の目的

本新学術領域では、粒界、転位、表面といった格子欠陥近傍に形成される「機能コア」に注目している。機能コアは格子欠陥が持つ幾何学的な自由度と外場の影響に伴う構造変化の自由度のため、その構造機能相関を理解することは容易ではない。本計画班は情報科学手法を活用した手法開発により機能コア開発を加速させる役割を担う。

具体的には、情報科学手法(ニューラルネットワークやベイズ最適化など)を活用した機能コアの構造探索法、高精度機械学習ポテンシャル、拡散経路探索法、計測データ解析手法を開発する。さらに、得られた知見をデータベース化し、解析することで機能コアの物性予測設計モデルを構築する。本計画班の研究により、様々な材料の機能コアの構造と物性を効率的に決定することが可能となり、機能コアの理解が格段に加速されると期待される。

以上のように、本計画研究は機能コア開発を加速するための情報科学手法の開発と応用という「機能コアインフォマティクス」ともいふべき役割を担う。

### 3. 研究の方法

本計画班の構成メンバーが開発してきた手法をさらに高度化し、複雑な構造と機能発現機構を示す機能コア開発を加速させるための手法開発を行う。本計画班では、特に候補数が膨大となる、機能コアの構造決定と原子移動経路決定に関する手法を開発する。本計画班で開発した手法を活用し、他班と連携することで機能コアの構造と物性を効率的かつ系統的に決定する。機能コアに関するすべての情報をデータベース化し解析することで、機能コアの物性設計モデルを構築する。本計画班で行う研究内容と役割分担は以下のようになっている。

(1) 情報科学手法を活用した機能コア構造・物性決定法の開発

(1-1) 機能コア構造の効率的決定方法の開発(溝口, 柴田, 大学院生)

(1-2) 機能コア構造計算のための高精度機械学習ポテンシャル開発(世古, 大学院生)

(1-3) 機能コアにおける原子拡散特性の効率的計算法の開発(豊浦, 大学院生)

(2) 機能コア物性設計モデルの構築(溝口, 豊浦, 世古, 柴田, 大学院生)

まず、上記(1-1)(1-2)では、情報科学手法を活用し、界面・転位・表面における機能コアの原子構造を決定する手法を開発する。開発した手法を活用し、他班と連携することで機能コアの構造を効率的かつ系統的に決定する。(1-3)では、候補数が膨大になる機能コアの原子拡散物性にフォーカスし、効率的な原子拡散経路探索法を開発する。同手法を活用しプロセス班と連携することで高機能材料開発を目指す。

さらに(2)では、機能コアに関するシミュレーション、計測およびプロセス結果をデータベース化、解析することで機能コアの物性設計モデルを構築する。構築された機能コア物性設計モデルを他班にフィードバックすることで、組成や構造、プロセス条件を試行錯誤的に決めるのではなく、同モデルに基づいた合理的な機能コア開発の実現を目指す。

### 4. 研究成果

本研究の成果として(1)機能コア解析のための機械学習ポテンシャルの作成と応用、(2)格子欠陥の構造機能相関の解明、(3)機能コアを利用した材料開発、(4)計測インフォマティ

クスの促進，( 5 ) 各種手法の開発と公開があげられる．それぞれに関する研究成果は以下となっている．

#### ( 1 ) 機能コア解析のための機械学習ポテンシャルの作成と応用

本研究計画班は，機械学習を活用して計算・解析効率を数万倍向上させる手法を開発した．第一原理計算と情報科学の技法を組み合わせ，高精度な機械学習原子間ポテンシャル ( MLIP ) を構築した．本研究期間において，計 48 種の単体と 120 種の合金を対象とした高精度な MLIP を開発し公開した．それぞれの系において数万のモデル構造について第一原理計算を行い，その構造特徴量とエネルギーの関係を回帰分析により推定した．その応用として，結晶構造探索を行った．Decision Diagram を用いた制約を満たす結晶構造列挙手法を応用して，Special quasi-random structure の探索手法を開発した．

また，ここで開発された機械学習ポテンシャルは大規模かつ高精度なシミュレーションを高速に実施できるという特徴を利用し，シリコンの熱機能コアに関する研究を進めた．具体的には公募班と連携しシリコンの結晶粒界における粒界エネルギーや格子熱伝導の予測を行った．その結果，界面構造と熱伝導との相関性を明らかにした．また，シリコン粒界における高温下構造相転移の研究も進めた．その結果，シリコン多結晶で多く存在していることが知られている界面においても，高温化で構造変化し，新たな機能を示す可能性が示された．これらの研究から，界面と熱との相互作用により生じる熱機能コアの新たな可能性を示すことが出来た．

#### ( 2 ) 格子欠陥の構造機能相関の解明

機能コアでは，界面や表面などの格子欠陥の機能発現に注目している．一方で，それらをモデリングし，構造を決定することは容易ではない．そこで，本研究では機械学習を利用して格子欠陥の構造を決定せずに，完全結晶だけから取得可能な情報を記述子として利用し，界面や表面の物性を予測する手法を開発した．その結果，バルク構造から得られる記述子のみで，界面物性 ( 欠陥形成挙動等 ) や表面物性 ( 吸着挙動等 ) を定量的に予測することに成功した．本成果により，格子欠陥の構造を決定する必要がなくなるため，より効率的に機能コアの機能予測が可能になった．

また，界面の構造をモデリングするための手法およびそれらを実装したコードも開発・公開した．まず，結晶界面の構造決定のためには，相対する結晶同士の剛体変位を決定する必要がある．一方で，剛体変位の探索スペースは結晶界面の種類にも依存するが，ねじり粒界の場合は数万個の候補構造を要する場合もある．そこで，界面を構成する結晶構造から，最小な探索空間を決定する Cell of non-identical displacement ( CNID ) を計算するコードを開発・公開した．CNID は古くからその理論が示されてきたが，それを実装したコードは無かった．同手法を用いることで，数百～数千分の 1 程度にまで探索空間を削減することが可能になる．また，同コードはすべての結晶系の界面モデリングすることが可能であり，広く使用され始めている．

#### ( 3 ) 機能コアを利用した材料開発

まず，イオン機能コア計算手法として，固体内拡散の高精度かつ高効率な解析手法を開発した．この手法は，拡散原子のポテンシャルエネルギー曲面 ( PES ) をガウス過程に基づく統計モデル構築とマスター方程式に基づく拡散係数の数値解法を結び付けることで実現した．また，サポートベクターマシンに基づく領域分割を用いて，結晶内の PE 極小点を効率的に列挙する手法も開発した．また，プロセス班や公募班と連携し，イオン伝導体の探索や，ドーパント効果，インターカレーションメカニズムの解明などの研究を行った．

さらに，手法開発として，大域最適化アルゴリズム DIRECT と勾配法による局所最適化を融合した決定論的な大域的構造探索手法を開発した．また，分子動力学 ( MD ) 法に基づいた固体内原子拡散評価手法を新たに開発した．これは，原子の平均二乗変位から拡散係数を見積もる従来のやり方ではなく，加速 MD 法のひとつである metadynamics 法を活用したものである．metadynamics 法では結晶内における拡散原子の自由エネルギー曲面を獲得することができ，これを遷移状態理論に繋げることで原子ジャンプ頻度や拡散係数を見積もることができる．本提案手法では，バイアスポテンシャルがホスト結晶の対称性を満たすようガウス型ポテンシャルを複数同時に堆積する戦略をとることで，拡散経路に関する事前知識が不要な高効率拡散評価を実現した．

さらに，公募班と連携し，イオンが格子間サイトにインターカレーションした化合物に関してデータ駆動型の材料探索を行った．9000 種類のインターカレーション材料に関して第一原理計算を実施し，データ駆動型手法をもとにその安定性を予測する物理 ( 数式 ) を導いた．同数式を用いることで，新規な安定化合物を予測出来，その中で特異的な電子構造を示す物質を発見することが出来た．

#### ( 4 ) 計測インフォマティクスの促進

また、公募班や計測班とも連携し、計測インフォマティクスに関する研究も進めた。計測データの解析にも機械学習を利用し、スペクトルとは相関しないと考えられてきた物性との相関性を明らかにした。具体的には 10 万スペクトルの C-K 端を計算し、公開している。同スペクトルデータベースを利用し、スペクトル生成の物理を超える試みを実施した。具体的には本来はスペクトルとの関係性が不明瞭な、原子量（質量）や内部エネルギーとの相関性を明らかにすることが出来た。また、実際の測定データにも使用され、ガラス材料の相分離や、界面局所熱膨張係数の定量など、計算と計測、さらには機械学習も融合した解析を行った。

#### （ 5 ）各種手法の開発と公開

上述した機械学習ポテンシャルや、界面モデリングコード、スペクトルデータベース以外にも様々な手法やデータベースを開発してきた。以下には、本計画班において開発してきたコードやデータベース（一部公開）を示す。

1. Polynomial machine learning potential repository（機械学習ポテンシャルDB）  
<http://cms.mtl.kyoto-u.ac.jp/seko/mlp-repository/index.html>  
J. Appl. Phys. 133, 011101 (2023)
2. pypolymlp（ポテンシャル作成，ポテンシャルによる計算）  
<https://github.com/sekocha/pypolymlp>
3. lammps-polymlp（ポテンシャルによる計算 using lammps）  
<https://github.com/sekocha/lammps-polymlp-package>
4. symfc（力定数推定）  
<https://github.com/sekocha/symfc>
5. recommender（推薦システムによる無機化合物予測データ）  
<https://github.com/sekocha/recommender>
6. MASTEQ（マスター方程式に基づいて拡散係数を算出）  
<https://github.com/KazuakiToyoura/MASTEQ>
7. PoNPs（Poisson-Nernst-Planck 方程式の数値解析プログラム）  
<https://github.com/KazuakiToyoura/PoNPs>
8. tDIRECT（分子・結晶構造探索の決定論的手法）  
K. Kanayama et al., Phys. Rev. E 108, 035303
9. H<sup>+</sup>-PES データベース（プロトン伝導体探索用 DB．すでに有望系を 50 以上発見）  
To be published
10. Interface\_master（すべての結晶系の結晶界面モデリングが可能．近似 CLS も探索）  
[https://github.com/nmdl-mizo/interface\\_master](https://github.com/nmdl-mizo/interface_master)
11. cnidcal（界面の効率的な探索を実現する CNID をコード化）  
<https://github.com/nmdl-mizo/cnidcal>  
Comp. Phys. Comm. 273 (2022) 108260
12. ELNES/XANES スペクトルデータベース（11 万個の炭素 K 端データベース）  
Scientific Data volume 9, Article number: 214 (2022)
13. 化学結合データベース（全元素間の結合強度，距離，フェルミ準位，磁性に関する DB）  
Data in Brief, Volume 36, June 2021, 106968.
14. LCAO\_net（電子構造を加味した Graph neural network モデル）  
<https://github.com/nmdl-mizo/lcaonet>
15. aims\_ChemBond（FHI-aims を用いて COOP diagram を作成するコード）  
Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2024, in press
16. 層間化合物データベース（約 9000 種類の層間化合物の構造と安定性に関する DB）  
J. Phys. Chem. C 2023, 127, 20, 9833
17. 層間化合物バンド構造データベース（上記 DB のバンド構造に関する手法と結果の DB）  
To be published

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計80件（うち査読付論文 80件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 39件）

|   |                           |
|---|---------------------------|
| 1. 著者名<br>YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>250               |
| 2. 論文標題<br>A defect formation mechanism induced by structural reconstruction of a well-known silicon grain boundary | 5. 発行年<br>2023年           |
| 3. 雑誌名<br>Acta Mater.   | 6. 最初と最後の頁<br>118827-1-11 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.actamat.2023.118827   | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|   |                       |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名<br>Y. Hata, YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>131           |
| 2. 論文標題<br>A guideline for searching for stable grain boundary structure by utilizing crystallographic information: a method based on non-identical termination | 5. 発行年<br>2023年       |
| 3. 雑誌名<br>J. Ceram. Soc. Jpn.   | 6. 最初と最後の頁<br>738-745 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.2109/jcersj2.23019   | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|   |                       |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名<br>YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>131           |
| 2. 論文標題<br>Tensile strength of a transverse grain boundary in a single-walled carbon nanotube | 5. 発行年<br>2023年       |
| 3. 雑誌名<br>J. Ceram. Soc. Jpn.   | 6. 最初と最後の頁<br>621-627 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>N. Kawaguchi, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>127             |
| 2. 論文標題<br>Possible New Graphite Intercalation Compounds for Superconductors and Charge Density Wave Materials: Systematic Simulations with Various Intercalants Using a van der Waals Density Functional Method | 5. 発行年<br>2023年         |
| 3. 雑誌名<br>J. Phys. Chem. C   | 6. 最初と最後の頁<br>9833-9843 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1021/acs.jpcc.3c01073   | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>PY. Chen, K. Shibata, K. Hagita, T. Miyata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>14              |
| 2. 論文標題<br>Prediction of the Ground State Electronic Structure from Core-loss Spectra of Organic Molecules by Machine Learning | 5. 発行年<br>2023年         |
| 3. 雑誌名<br>J. Phys. Chem. Lett.   | 6. 最初と最後の頁<br>4858-4865 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1021/acs.jpcllett.3c00142   | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|   |                           |
|---|---------------------------|
| 1. 著者名<br>A Talmantaite, Y Xie, A Cohen, PK Mohapatra, A Ismach, T Mizoguchi, SJ Clark, BG Mendis   | 4. 巻<br>107               |
| 2. 論文標題<br>Twist-induced interlayer charge buildup in a WS2 bilayer revealed by electron Compton scattering and density functional theory | 5. 発行年<br>2023年           |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. B  | 6. 最初と最後の頁<br>235424-1-10 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>Y. Lee, S. Song, H. Kim, K. Nomoto, H. Kim, X. Sun, S. Hori, K. Suzuki, N. Matsui, M. Hirayama, T. Mizoguchi, T. Saito, T. Kamiyama, and R. Kanno | 4. 巻<br>381         |
| 2. 論文標題<br>A lithium superionic conductor for millimeter-thick battery electrode  | 5. 発行年<br>2023年     |
| 3. 雑誌名<br>Science   | 6. 最初と最後の頁<br>50-53 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1126/science.add7138   | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康                         | 4. 巻<br>Vol.58, 11月号  |
| 2. 論文標題<br>機械学習を活用した界面および表面の構造解析と物性予測  | 5. 発行年<br>2023年       |
| 3. 雑誌名<br>セラミックス                       | 6. 最初と最後の頁<br>732-736 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|  |                        |
|--|------------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康                         | 4. 巻<br>Vol.97,12月号    |
| 2. 論文標題<br>機械学習を利用した電子・X線分光からの物性予測     | 5. 発行年<br>2023年        |
| 3. 雑誌名<br>科学と工業                        | 6. 最初と最後の頁<br>357-364. |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有             |
| オープンアクセス<br>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<br>-              |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>Dong-Hwan Yang, Yu-Seong Chu, Odongo Francis Ngome Okello, Seung-Young Seo, Gunho Moon, Kwang Ho Kim, Moon-Ho Jo, Dongwon Shin, Teruyasu Mizoguchi, Sejung Yang, Si-Young Choi | 4. 巻<br>11            |
| 2. 論文標題<br>Full automation of point defect detection in transition metal dichalcogenides through a dual mode deep learning algorithm   | 5. 発行年<br>2024年       |
| 3. 雑誌名<br>Mater. Horizon,  | 6. 最初と最後の頁<br>747-757 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1039/D3MH01500A   | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>O. Okello, SY. Seo, J. Park, DH. Yang, D. Shin, YS. Chu, S. Yang, T. Mizoguchi, MH. Jo; SY. Choi | 4. 巻<br>18              |
| 2. 論文標題<br>Atomistic Probing of Defect-Engineered 2H-MoTe2 Monolayers                                      | 5. 発行年<br>2024年         |
| 3. 雑誌名<br>ACS Nano   | 6. 最初と最後の頁<br>6927-6935 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1021/acsnano.3c08606  | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Nishio, K. Shibata, and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>17               |
| 2. 論文標題<br>Lightweight and high-precision materials property prediction using pre-trained Graph Neural Networks and its application to small dataset | 5. 発行年<br>2024年          |
| 3. 雑誌名<br>Appl. Phys. Exp.   | 6. 最初と最後の頁<br>037002-1-5 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.35848/1882-0786/ad2a06  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|   |                        |
|---|------------------------|
| 1. 著者名<br>H. Masai, M. Koshimizu, H. Kawamoto, S. Maruyama, Y. Matsumoto, C. Takahashi, H. Setoyama, and T. Mizoguchi | 4. 巻<br>14             |
| 2. 論文標題<br>Combinatorial characterization of metastable luminous silver cations                                       | 5. 発行年<br>2024年        |
| 3. 雑誌名<br>Scientific Reports  | 6. 最初と最後の頁<br>4638-1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有             |
| オープンアクセス<br>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<br>-              |

|  |                  |
|--|------------------|
| 1. 著者名<br>K. Nishio, K. Shibata, and T. Mizoguchi                                    | 4. 巻<br>2402     |
| 2. 論文標題<br>LCAONet: Message-passing with physically optimized atomic basis functions | 5. 発行年<br>2024年  |
| 3. 雑誌名<br>arXiv  | 6. 最初と最後の頁<br>11 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし   | 査読の有無<br>有       |
| オープンアクセス<br>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<br>-        |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>H. Huang, T. Miyata, Y. Sato, T. Mizoguchi, H. Jinnai, and K. Yoshida  | 4. 巻<br>180               |
| 2. 論文標題<br>Microscopic Chemical Characterization of Epoxy Resin with Scanning Transmission Electron Microscopy & Electron Energy-Loss Spectroscopy | 5. 発行年<br>2024年           |
| 3. 雑誌名<br>Micron   | 6. 最初と最後の頁<br>103623-1-10 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.micron.2024.103623   | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|   |                         |
|---|-------------------------|
| 1. 著者名<br>T. Miyata, Y. Sato, HF, Wang, A. Kumagai, Y. Kawagoe, K. Shirasu, S. Kinoshita, K. Yoshida, HH Huang, T. Okabe, M. Mizukami, K. Hagita, T. Mizoguchi, and H. Jinnai | 4. 巻<br>15              |
| 2. 論文標題<br>Effect of inorganic material surface chemistry on structures and fracture behaviours of epoxy resin  | 5. 発行年<br>2024年         |
| 3. 雑誌名<br>Nature Comm   | 6. 最初と最後の頁<br>1898-1-12 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |



|   |                       |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名<br>H. Wakai, A. Seko, I. Tanaka  | 4. 巻<br>131           |
| 2. 論文標題<br>Efficient global crystal structure prediction using polynomial machine learning potential in the binary Al-Cu alloy system | 5. 発行年<br>2023年       |
| 3. 雑誌名<br>J. Ceram. Soc. Japan  | 6. 最初と最後の頁<br>762-766 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.2109/jcersj2.23053   | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>T. Naruse, A. Seko, I. Tanaka  | 4. 巻<br>131           |
| 2. 論文標題<br>Global structure optimization following imaginary phonon modes accelerated by machine learning potentials in Cu, Ag, and Au | 5. 発行年<br>2023年       |
| 3. 雑誌名<br>J. Ceram. Soc. Japan   | 6. 最初と最後の頁<br>746-750 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.2109/jcersj2.23056  | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>A. Seko, Tutorial:   | 4. 巻<br>133         |
| 2. 論文標題<br>Systematic development of polynomial machine learning potentials for elemental and alloy systems, | 5. 発行年<br>2023年     |
| 3. 雑誌名<br>J. Appl. Phys.   | 6. 最初と最後の頁<br>11101 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1063/5.0129045  | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Kanayama, A. Seko, K. Toyoura   | 4. 巻<br>108               |
| 2. 論文標題<br>Structure search method for atomic clusters based on the dividing rectangles algorithm, | 5. 発行年<br>2023年           |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. E   | 6. 最初と最後の頁<br>035303-1-13 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevE.108.035303  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>K. Toyoura, T. Takahashi   | 4. 巻<br>131           |
| 2. 論文標題<br>A kinetic Monte Carlo study for Haven ratio of proton transport in perovskite ceramics, | 5. 発行年<br>2023年       |
| 3. 雑誌名<br>J. Ceram. Soc. Jpn.  | 6. 最初と最後の頁<br>731-737 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.2109/jcersj2.23020  | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Toyoura  | 4. 巻<br>108              |
| 2. 論文標題<br>Multihill strategy in metadynamics for interstitial diffusion in crystals, | 5. 発行年<br>2023年          |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. B  | 6. 最初と最後の頁<br>134113-1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.108.134113                               | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                            |
|--|----------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>4                  |
| 2. 論文標題<br>Quantification of the Properties of Organic Molecules Using Core-Loss Spectra as Neural Network Descriptors | 5. 発行年<br>2022年            |
| 3. 雑誌名<br>Advanced Intelligent Systems   | 6. 最初と最後の頁<br>2100103-1-10 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1002/aisy.202100103   | 査読の有無<br>有                 |
| オープンアクセス<br>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<br>-                  |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>273              |
| 2. 論文標題<br>A brute-force code searching for cell of non-identical displacement for CSL grain boundaries and interfaces | 5. 発行年<br>2022年          |
| 3. 雑誌名<br>Comp. Phys. Comm.  | 6. 最初と最後の頁<br>108260-1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.cpc.2021.108260  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>S. Kiyohara, *K. Kikumasa, K. Shibata, and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>233              |
| 2. 論文標題<br>Determination of the Spectrum&structure Relationship by Tree Structure-based Unsupervised and Supervised Learning | 5. 発行年<br>2022年          |
| 3. 雑誌名<br>Ultramicroscopy  | 6. 最初と最後の頁<br>113438-1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.ultramic.2021.113438   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 柴田基洋                   | 4. 巻<br>Vol49       |
| 2. 論文標題<br>人工知能を利用した界面物性および表面物性の予測     | 5. 発行年<br>2022年     |
| 3. 雑誌名<br>セラミックデータブック 2021/2022        | 6. 最初と最後の頁<br>37-42 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|   |                           |
|---|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Y. Miyazaki, T. Yokouchi, K. Shibata, Y. Chen, H. Arisawa, T. Mizoguchi, E. Saitoh, and Y. Shiomi | 4. 巻<br>4                 |
| 2. 論文標題<br>Quantum Oscillations from Fermi arc Surface States in Cd3As2 Nanowires                           | 5. 発行年<br>2022年           |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. Res.   | 6. 最初と最後の頁<br>L022002-1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevResearch.4.L022002   | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|   |                         |
|---|-------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Shibata, K. Kikumasa, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi          | 4. 巻<br>9               |
| 2. 論文標題<br>Simulated carbon K edge spectral database of organic molecules | 5. 発行年<br>2022年         |
| 3. 雑誌名<br>Scientific Data   | 6. 最初と最後の頁<br>214-1-11. |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|  |                        |
|--|------------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 梅野宜崇                   | 4. 巻<br>Vol. 74, No. 5 |
| 2. 論文標題<br>深層学習モデリング活用によるナノ材料シミュレーション  | 5. 発行年<br>2022年        |
| 3. 雑誌名<br>機械の研究                        | 6. 最初と最後の頁<br>329-336  |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有             |
| オープンアクセス<br>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<br>-              |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>K. Matsunaga, M. Yoshiya, N. Shibata, H. Ohta, and T. Mizoguchi | 4. 巻<br>100         |
| 2. 論文標題<br>Ceramic Science of Crystal Defect Cores                        | 5. 発行年<br>2022年     |
| 3. 雑誌名<br>J. Ceram. Soc. Jpn  | 6. 最初と最後の頁<br>25-30 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.2109/jcersj2.22080                         | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Nakazawa, Y. Tsukada, S. Amma, K. Shibata, and T. Mizoguch  | 4. 巻<br>4                |
| 2. 論文標題<br>Multimetastability effect on the intermediate stage of phase separation in BaO-SiO <sub>2</sub> glass | 5. 発行年<br>2022年          |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. Res.  | 6. 最初と最後の頁<br>033052-1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevResearch.4.033052   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>世古敦人, 豊浦和明, 柴田基洋, 溝口照康       | 4. 巻<br>Vol. 61, No. 10 |
| 2. 論文標題<br>機能コア解析のためのソフトウェア開発と応用       | 5. 発行年<br>2022年         |
| 3. 雑誌名<br>まてりあ                         | 6. 最初と最後の頁<br>634-639   |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|   |                        |
|---|------------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 柴田基洋                    | 4. 巻<br>Vol. 40, No. 4 |
| 2. 論文標題<br>STEM-EELSを用いた局所原子配位環境と熱膨張の計測 | 5. 発行年<br>2022年        |
| 3. 雑誌名<br>ファインセラミックスレポート                | 6. 最初と最後の頁<br>146-153  |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし          | 査読の有無<br>有             |
| オープンアクセス<br>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<br>-              |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>15          |
| 2. 論文標題<br>interface_master: Python package building CSL and approximate CSL interfaces of any two lattices & an effective tool for interface engineers | 5. 発行年<br>2022年     |
| 3. 雑誌名<br>arxiv   | 6. 最初と最後の頁<br>10-15 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|   |                      |
|---|----------------------|
| 1. 著者名<br>K. Shibata, E. Suzuki, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>36           |
| 2. 論文標題<br>Dataset on structure and physical properties of stable diatomic systems based on van der Waals density functional method | 5. 発行年<br>2021年      |
| 3. 雑誌名<br>Data in Brief   | 6. 最初と最後の頁<br>106968 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>三石和貴, 中澤克昭, 溝口照康, 佐川隆亮, 山崎裕一 | 4. 巻<br>56          |
| 2. 論文標題<br>ピクセル型STEM検出器によるタイコグラフィーの初歩  | 5. 発行年<br>2021年     |
| 3. 雑誌名<br>顕微鏡                          | 6. 最初と最後の頁<br>31-37 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>E. Suzuki, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>14               |
| 2. 論文標題<br>Accurate prediction of bonding properties by a machine learning-based model using isolated states before bonding | 5. 発行年<br>2021年          |
| 3. 雑誌名<br>Appl. Phys. Exp.  | 6. 最初と最後の頁<br>085503-1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.35848/1882-0786/ac083b   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>I. Takahara and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>5                |
| 2. 論文標題<br>First principles study on formation and migration energies of sodium and lithium in graphite | 5. 発行年<br>2021年          |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. Mater.   | 6. 最初と最後の頁<br>085401-1-7 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevMaterials.5.085401   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>H. Tsurusawa, N. Nakanishi, K. Kawano, Y. Chen, B. V. Leer, T. Mizoguchi                                | 4. 巻<br>11               |
| 2. 論文標題<br>Robotic fabrication of high-quality lamellae for aberration-corrected transmission electron microscopy | 5. 発行年<br>2021年          |
| 3. 雑誌名<br>Scientific Reports  | 6. 最初と最後の頁<br>21599-1-12 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>M. Tsubaki and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>17              |
| 2. 論文標題<br>Quantum Deep Descriptor: Physically Informed Transfer Learning from Small Molecules to Polymers | 5. 発行年<br>2021年         |
| 3. 雑誌名<br>J. Chem. Theory Comput.  | 6. 最初と最後の頁<br>7814-7821 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし   | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|   |                           |
|---|---------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Liao, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>21                |
| 2. 論文標題<br>Nanoscale Investigation of Local Thermal Expansion at SrTiO <sub>3</sub> Grain Boundaries by Electron Energy Loss Spectroscopy | 5. 発行年<br>2021年           |
| 3. 雑誌名<br>Nano Letters  | 6. 最初と最後の頁<br>10416-10422 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|  |                            |
|--|----------------------------|
| 1. 著者名<br>K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>4                  |
| 2. 論文標題<br>Quantification of the Properties of Organic Molecules Using Core-Loss Spectra as Neural Network Descriptors | 5. 発行年<br>2022年            |
| 3. 雑誌名<br>Advanced Intelligent Systems   | 6. 最初と最後の頁<br>2100103-1-10 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1002/aisy.202100103   | 査読の有無<br>有                 |
| オープンアクセス<br>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<br>-                  |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>YS. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>273              |
| 2. 論文標題<br>A brute-force code searching for cell of non-identical displacement for CSL grain boundaries and interfaces | 5. 発行年<br>2022年          |
| 3. 雑誌名<br>Comp. Phys. Comm.  | 6. 最初と最後の頁<br>108260-1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>S. Kiyohara, *K. Kikumasa, K. Shibata, and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>233              |
| 2. 論文標題<br>Determination of the Spectrum-structure Relationship by Tree Structure-based Unsupervised and Supervised Learning | 5. 発行年<br>2022年          |
| 3. 雑誌名<br>Ultramicroscopy  | 6. 最初と最後の頁<br>113438-1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 柴田基洋                   | 4. 巻<br>49          |
| 2. 論文標題<br>人工知能を利用した界面物性および表面物性の予測     | 5. 発行年<br>2022年     |
| 3. 雑誌名<br>セラミックデータブック 2021/2022        | 6. 最初と最後の頁<br>37-42 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                      |
|--|----------------------|
| 1. 著者名<br>K. Shinohara, A. Seko, T. Horiyama, I. Tanaka                                | 4. 巻<br>5            |
| 2. 論文標題<br>Finding well-optimized special quasirandom structures with decision diagram | 5. 発行年<br>2021年      |
| 3. 雑誌名<br>Phys. Rev. Materials   | 6. 最初と最後の頁<br>113803 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevMaterials.5.113803                          | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|  |                      |
|--|----------------------|
| 1. 著者名<br>S. Fujii, A. Seko,   | 4. 巻<br>204          |
| 2. 論文標題<br>Structure and lattice thermal conductivity of grain boundaries in silicon by using machine learning potential and molecular dynamics, | 5. 発行年<br>2022年      |
| 3. 雑誌名<br>Comput. Mater. Sci.  | 6. 最初と最後の頁<br>111137 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.commatsci.2021.111137  | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>世古敦人                                       | 4. 巻<br>91巻2号       |
| 2. 論文標題<br>第一原理計算と機械学習による原子間相互作用のモデリングと構造探索          | 5. 発行年<br>2022年     |
| 3. 雑誌名<br>応用物理                                       | 6. 最初と最後の頁<br>77-81 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.11470/oubutsu.91.2_77 | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |



|   |                           |
|---|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Liao Kunyen, Masuno Atsunobu, Taguchi Ayako, Moriwake Hiroki, Inoue Hiroyuki, Mizoguchi Teruyasu                  | 4. 巻<br>11                |
| 2. 論文標題<br>Revealing Spatial Distribution of Al-Coordinated Species in a Phase-Separated Aluminosilicate Glass by STEM-EELS | 5. 発行年<br>2020年           |
| 3. 雑誌名<br>The Journal of Physical Chemistry Letters   | 6. 最初と最後の頁<br>9637 ~ 9642 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1021/acs.jpcllett.0c02687  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>Tsubaki Masashi, Mizoguchi Teruyasu  | 4. 巻<br>125              |
| 2. 論文標題<br>Quantum Deep Field: Data-Driven Wave Function, Electron Density Generation, and Atomization Energy Prediction and Extrapolation with Machine Learning | 5. 発行年<br>2020年          |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review Letters  | 6. 最初と最後の頁<br>206401-1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevLett.125.206401   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                         |
|--|-------------------------|
| 1. 著者名<br>Nakazawa K., Amma S., Mizoguchi T.   | 4. 巻<br>200             |
| 2. 論文標題<br>In situ observation of the dynamics in the middle stage of spinodal decomposition of a silicate glass via scanning transmission electron microscopy | 5. 発行年<br>2020年         |
| 3. 雑誌名<br>Acta Materialia  | 6. 最初と最後の頁<br>720 ~ 726 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.actamat.2020.09.036  | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|   |                               |
|---|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Kiyohara Shin, Mizoguchi Teruyasu   | 4. 巻<br>89                    |
| 2. 論文標題<br>Radial Distribution Function from X-ray Absorption near Edge Structure with an Artificial Neural Network | 5. 発行年<br>2020年               |
| 3. 雑誌名<br>Journal of the Physical Society of Japan  | 6. 最初と最後の頁<br>103001 ~ 103001 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.7566/JPSJ.89.103001  | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|  |                               |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Nakazawa K., Mitsuishi K., Shibata K., Amma S., Mizoguchi T.   | 4. 巻<br>217                   |
| 2. 論文標題<br>Local thickness and composition measurements from scanning convergent-beam electron diffraction of a binary non-crystalline material obtained by a pixelated detector | 5. 発行年<br>2020年               |
| 3. 雑誌名<br>Ultramicroscopy  | 6. 最初と最後の頁<br>113077 ~ 113077 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.ultramic.2020.113077   | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|  |                               |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Yamagata Shingo, Takahara Izumi, Wang Mengqiao, Mizoguchi Teruyasu, Yagi Shunsuke          | 4. 巻<br>846                   |
| 2. 論文標題<br>EQCM analysis of intercalation species into graphite positive electrodes for Al batteries | 5. 発行年<br>2020年               |
| 3. 雑誌名<br>Journal of Alloys and Compounds  | 6. 最初と最後の頁<br>156469 ~ 156469 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1016/j.jallcom.2020.156469  | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|   |                      |
|---|----------------------|
| 1. 著者名<br>Kiyohara Shin, Tsubaki Masashi, Mizoguchi Teruyasu                                | 4. 巻<br>6            |
| 2. 論文標題<br>Learning excited states from ground states by using an artificial neural network | 5. 発行年<br>2020年      |
| 3. 雑誌名<br>npj Computational Materials   | 6. 最初と最後の頁<br>68-1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1038/s41524-020-0336-3                                       | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Liao Kunyen, Haruta Mitsutaka, Masuno Atsunobu, Inoue Hiroyuki, Kurata Hiroki, Mizoguchi Teruyasu                    | 4. 巻<br>3                 |
| 2. 論文標題<br>Real-Space Mapping of Oxygen Coordination in Phase-Separated Aluminosilicate Glass: Implication for Glass Stability | 5. 発行年<br>2020年           |
| 3. 雑誌名<br>ACS Applied Nano Materials   | 6. 最初と最後の頁<br>5053 ~ 5060 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1021/acsnm.0c00196  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|  |                      |
|--|----------------------|
| 1. 著者名<br>Mizoguchi Teruyasu, Kiyohara Shin              | 4. 巻<br>69           |
| 2. 論文標題<br>Machine learning applications for ELNES/XANES | 5. 発行年<br>2020年      |
| 3. 雑誌名<br>Microscopy                                     | 6. 最初と最後の頁<br>92~109 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1093/jmicro/dfz109        | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>R. Otani, S. Kiyohara, K. Shibata and T. Mizoguchi  | 4. 巻<br>13               |
| 2. 論文標題<br>Prediction of interface and vacancy segregation energies at silver interfaces without determining interface structures | 5. 発行年<br>2020年          |
| 3. 雑誌名<br>Applied Physics Express   | 6. 最初と最後の頁<br>065504-1-6 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 清原慎                             | 4. 巻<br>38          |
| 2. 論文標題<br>データ駆動型内殻電子励起分光スペクトル (ELNES/XANES) 解析 | 5. 発行年<br>2020年     |
| 3. 雑誌名<br>日本化学会情報化学部会誌                          | 6. 最初と最後の頁<br>16-19 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし                  | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>大谷龍剣, 清原慎, 溝口照康              | 4. 巻<br>59            |
| 2. 論文標題<br>結晶界面インフォマティクス: 構造決定と構造機能相関  | 5. 発行年<br>2020年       |
| 3. 雑誌名<br>あたりあ                         | 6. 最初と最後の頁<br>134-138 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 清原慎, 大谷龍剣               | 4. 巻<br>62          |
| 2. 論文標題<br>機械学習を利用した結晶界面構造決定と構造機能相関     | 5. 発行年<br>2020年     |
| 3. 雑誌名<br>触媒                            | 6. 最初と最後の頁<br>35-41 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし          | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Toyoura Kazuaki, Fujii Takeo, Kanamori Kenta, Takeuchi Ichiro  | 4. 巻<br>101               |
| 2. 論文標題<br>Sampling strategy in efficient potential energy surface mapping for predicting atomic diffusivity in crystals by machine learning | 5. 発行年<br>2020年           |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B  | 6. 最初と最後の頁<br>26823-26830 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.101.184117  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Toyoura Kazuaki, Kanayama Kansei   | 4. 巻<br>102               |
| 2. 論文標題<br>Machine-learning-based sampling method for exploring local energy minima of interstitial species in a crystal | 5. 発行年<br>2020年           |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B  | 6. 最初と最後の頁<br>174105/1-15 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.102.174105  | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|  |                      |
|--|----------------------|
| 1. 著者名<br>Seko Atsuto, Ishiwata Shintaro   | 4. 巻<br>101          |
| 2. 論文標題<br>Prediction of perovskite-related structures in $ACuO_{3+x}$ (A = Ca, Sr, Ba, Sc, Y, La) using density functional theory and Bayesian optimization | 5. 発行年<br>2020年      |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B  | 6. 最初と最後の頁<br>134101 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.101.134101  | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|   |                             |
|---|-----------------------------|
| 1. 著者名<br>Suzuki Kota, Ohura Kosei, Seko Atsuto, Iwamizu Yudai, Zhao Guowei, Hirayama Masaaki, Tanaka Isao, Kanno Ryoji | 4. 巻<br>8                   |
| 2. 論文標題<br>Fast material search of lithium ion conducting oxides using a recommender system                             | 5. 発行年<br>2020年             |
| 3. 雑誌名<br>Journal of Materials Chemistry A  | 6. 最初と最後の頁<br>11582 ~ 11588 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1039/D0TA02556A  | 査読の有無<br>有                  |
| オープンアクセス<br>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<br>-                   |

|  |                               |
|--|-------------------------------|
| 1. 著者名<br>Shinohara Kohei, Seko Atsuto, Horiyama Takashi, Ishihata Masakazu, Honda Junya, Tanaka Isao                      | 4. 巻<br>153                   |
| 2. 論文標題<br>Enumeration of nonequivalent substitutional structures using advanced data structure of binary decision diagram | 5. 発行年<br>2020年               |
| 3. 雑誌名<br>The Journal of Chemical Physics  | 6. 最初と最後の頁<br>104109 ~ 104109 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1063/5.0021663  | 査読の有無<br>有                    |
| オープンアクセス<br>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<br>-                     |

|  |                      |
|--|----------------------|
| 1. 著者名<br>Nishiyama Takayuki, Seko Atsuto, Tanaka Isao   | 4. 巻<br>4            |
| 2. 論文標題<br>Application of machine learning potentials to predict grain boundary properties in fcc elemental metals | 5. 発行年<br>2020年      |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review Materials  | 6. 最初と最後の頁<br>123607 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevMaterials.4.123607  | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|  |                      |
|--|----------------------|
| 1. 著者名<br>Seko Atsuto  | 4. 巻<br>102          |
| 2. 論文標題<br>Machine learning potentials for multicomponent systems: The Ti-Al binary system | 5. 発行年<br>2020年      |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B  | 6. 最初と最後の頁<br>174104 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>10.1103/PhysRevB.102.174104                                    | 査読の有無<br>有           |
| オープンアクセス<br>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<br>-            |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>清原慎, 溝口照康                    | 4. 巻<br>62            |
| 2. 論文標題<br>機械学習を用いた物質界面構造の高速決定         | 5. 発行年<br>2019年       |
| 3. 雑誌名<br>表面と真空                        | 6. 最初と最後の頁<br>130-135 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|   |                     |
|---|---------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 宮田智衆, 清原慎, 中澤克昭, 杉森悠貴           | 4. 巻<br>54          |
| 2. 論文標題<br>走査透過型電子顕微鏡法によるガラス, イオン液体, および気体の構造解析 | 5. 発行年<br>2019年     |
| 3. 雑誌名<br>セラミックス                                | 6. 最初と最後の頁<br>66-71 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし                  | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|   |                         |
|---|-------------------------|
| 1. 著者名<br>W. Olovsson, T. Mizoguchi, M. Magnuson, S. Kontur, A. Togo, O. Hellman, I. Tanaka, and C. Draxl | 4. 巻<br>C 123           |
| 2. 論文標題<br>Vibrational Effects in X-ray Absorption Spectra of 2D Layered Materials                        | 5. 発行年<br>2019年         |
| 3. 雑誌名<br>J. Phys. Chem.  | 6. 最初と最後の頁<br>9688-9692 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有              |
| オープンアクセス<br>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<br>-               |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Y. Sugimori, T. Miyata, H. Hashiguchi, E. Okunishi, and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>9                 |
| 2. 論文標題<br>Atomic-scale investigation of the heterogeneous structure and ionic distribution in an ionic liquid using scanning transmission electron microscopy | 5. 発行年<br>2019年           |
| 3. 雑誌名<br>RSC Advances   | 6. 最初と最後の頁<br>10520-10527 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし   | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |

|   |                          |
|---|--------------------------|
| 1. 著者名<br>S. Kiyohara, M. Tsubaki, Kunyen Liao, and T. Mizoguchi                            | 4. 巻<br>2                |
| 2. 論文標題<br>Quantitative estimation of properties from core-loss spectrum via neural network | 5. 発行年<br>2019年          |
| 3. 雑誌名<br>J. Phys.: Materials   | 6. 最初と最後の頁<br>024003-1-9 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし  | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                          |
|--|--------------------------|
| 1. 著者名<br>H. Oda, S. Kiyohara and T. Mizoguchi   | 4. 巻<br>2                |
| 2. 論文標題<br>Machine learning for structure determination and investigating the structure-property relationships of interfaces | 5. 発行年<br>2019年          |
| 3. 雑誌名<br>J. Phys.: Materials,   | 6. 最初と最後の頁<br>034005-1-8 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし   | 査読の有無<br>有               |
| オープンアクセス<br>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<br>-                |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>清原慎, 溝口照康                    | 4. 巻<br>34巻 3号        |
| 2. 論文標題<br>機械学習を活用した界面構造探索とスペクトル解析     | 5. 発行年<br>2019年       |
| 3. 雑誌名<br>人工知能                         | 6. 最初と最後の頁<br>345-350 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|   |                       |
|---|-----------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 清原慎                                       | 4. 巻<br>54            |
| 2. 論文標題<br>EELSと第一原理計算によるエキシトン, 原子振動および van derWaals 力の解析 | 5. 発行年<br>2019年       |
| 3. 雑誌名<br>セラミックス  | 6. 最初と最後の頁<br>456-463 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし                            | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 清原慎                    | 4. 巻<br>764         |
| 2. 論文標題<br>機械学習を活用したスペクトル解析            | 5. 発行年<br>2019年     |
| 3. 雑誌名<br>Isotope News                 | 6. 最初と最後の頁<br>20-23 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康                         | 4. 巻<br>88            |
| 2. 論文標題<br>機械学習を活用した結晶界面研究             | 5. 発行年<br>2019年       |
| 3. 雑誌名<br>応用物理学会誌                      | 6. 最初と最後の頁<br>745-749 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有            |
| オープンアクセス<br>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<br>-             |

|  |                     |
|--|---------------------|
| 1. 著者名<br>溝口照康, 清原慎                    | 4. 巻<br>74          |
| 2. 論文標題<br>機械学習を活用した結晶界面構造決定           | 5. 発行年<br>2019年     |
| 3. 雑誌名<br>錯体学会誌                        | 6. 最初と最後の頁<br>59-62 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし         | 査読の有無<br>有          |
| オープンアクセス<br>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<br>-           |

|  |                           |
|--|---------------------------|
| 1. 著者名<br>Toyoura Kazuaki, Fujii Takeo, Kanamori Kenta, Takeuchi Ichiro  | 4. 巻<br>101               |
| 2. 論文標題<br>Sampling strategy in efficient potential energy surface mapping for predicting atomic diffusivity in crystals by machine learning | 5. 発行年<br>2020年           |
| 3. 雑誌名<br>Physical Review B  | 6. 最初と最後の頁<br>26823-26830 |
| 掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)<br>なし   | 査読の有無<br>有                |
| オープンアクセス<br>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<br>-                 |



〔学会発表〕 計190件（うち招待講演 86件 / うち国際学会 52件）

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>機械学習と分光法を用いた物質解析  |
| 3. 学会等名<br>第194回電子セラミック・プロセス研究会, TKPガーデンシティPREMIUM名古屋駅前, 名古屋（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Application of Machine Learning for Nano-Characterization    |
| 3. 学会等名<br>NanoKorea 2023, KINTEX, Seoul, Republic of Korea（招待講演）（国際学会） |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                  |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いたXAFS/EELS解析と表面物性予測            |
| 3. 学会等名<br>第61回オーロラセミナー, 北海道大学触媒科学研究所, 北海道（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2023年                                  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いたXAFS/EELS解析と表面物性予測                     |
| 3. 学会等名<br>第17回固体イオニクスセミナー第5回若手勉強会, 山形ルーセントタカミヤ, 山形（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                            |
| 2. 発表標題<br>次世代放射光 × 情報科学                   |
| 3. 学会等名<br>東大が導く次世代放射光サイエンス，東京大学弥生講堂（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2023年                            |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用したXAFSスペクトルからの情報抽出                    |
| 3. 学会等名<br>第9回SPring-8先端放射光技術による化学イノベーション研究会，品川AP（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                             |
| 2. 発表標題<br>機械学習と原子分解能計測，第一原理計算を複合利用したナノ構造解析 |
| 3. 学会等名<br>東レセミナー，オンライン（招待講演）               |
| 4. 発表年<br>2023年                             |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi                               |
| 2. 発表標題<br>Unlocking the power of EELS via machine learning |
| 3. 学会等名<br>ICAE 2023, Jeju, Korea（招待講演）（国際学会）               |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Materials Characterization using DFT simulation, STEM-EELS, and machine learning |
| 3. 学会等名<br>Dong-A University Seminar , Busan, Korea (招待講演) (国際学会)                           |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                  |
| 2. 発表標題<br>情報科学が拓くEELS解析のフロンティア                  |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会シンポジウム・関東支部会講演会, 高崎, 群馬 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年                                  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi                     |
| 2. 発表標題<br>Artificial Intelligence for EELS/XAFS  |
| 3. 学会等名<br>PRICM 2023 , Jeju, Korea (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2023年                                   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                |
| 2. 発表標題<br>一次元記述子と機械学習による表面とスペクトル解析            |
| 3. 学会等名<br>第46回ケモインフォマティクス討論会, 中央大学, 東京 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>CASTEPを利用したELNES/XANESデータベースの作成と機械学習を活用したスペクトル解析 |
| 3. 学会等名<br>BIOVIA ユーザーズグループミーティング, 品川, 東京 (招待講演)            |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                          |
| 2. 発表標題<br>金属ナノクラスター設計のための電子状態密度の特徴解析と予測 |
| 3. 学会等名<br>日本MRS-J, 横浜, 神奈川 (招待講演)       |
| 4. 発表年<br>2023年                          |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                       |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算と電子顕微鏡, 情報科学を用いた物質研究 |
| 3. 学会等名<br>東京理科大学特別講義, 葛飾, 東京 (招待講演)  |
| 4. 発表年<br>2023年                       |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Machine learning for functional core characterization           |
| 3. 学会等名<br>Materials Research Meeting (MRM) 2023, 京都国際会館, 京都 (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                |
| 2. 発表標題<br>機械学習と理論計算によるEELSからの情報抽出             |
| 3. 学会等名<br>顕微インフォマティクス研究会第5回研究会, 駒場, 東京 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                             |
| 2. 発表標題<br>機械学習と第一原理計算, 原子分解能計測を活用した無機材料解析  |
| 3. 学会等名<br>固体化学フォーラム, 京都大学桂キャンパス, 京都 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2024年                             |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                           |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算と機械学習による物質探索とナノ構造解析      |
| 3. 学会等名<br>RIST材料系ワークショップ, 秋葉原, 東京 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2024年                           |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用した物質の分析と探索                   |
| 3. 学会等名<br>分析イノベーション交流会, 東京たま未来メッセ, 八王子 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2024年                                |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>Y. Lee, N. Kawaguchi, Y. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi                             |
| 2 . 発表標題<br>First-principles study on moir & ionics: Ion intercalation in twisted bilayer graphene |
| 3 . 学会等名<br>Workshop on Functional Materials Science (FMS2023), Busan, Korea ( 国際学会 )              |
| 4 . 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>I. Takahara, K. Shibata, and T. Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>Implementation of Code to Calculate Crystal Orbital overlap population (COOP) and its Application to the Chemical-Bonding Analysis in Li-intercalated Layered Materials |
| 3 . 学会等名<br>FHI-aims developer ' s meeting, 2023, Hamburg, Germany ( 国際学会 )   |
| 4 . 発表年<br>2023年  |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>Y. Lee, K. Shibata, and T. Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>First principles calculation of electron energy-loss near edge structure of twisted 2D van der Waals structures |
| 3 . 学会等名<br>International Microscopy Congress (IMC20), Busan, Korea. I. Takahara, K. Shibata, and T. Mizoguchi ( 国際学会 )     |
| 4 . 発表年<br>2023年  |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>I. Takahara, K. Shibata, and T. Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>Data-Driven Approach for the Prediction of Ground State Electronic Density of States with Electron Energy Loss Spectroscopy |
| 3 . 学会等名<br>International Microscopy Congress (IMC20), 2023, Busan, Korea. ( 国際学会 )   |
| 4 . 発表年<br>2023年  |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>K. Shibata and T. Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Database construction and machine learning prediction of site specific carbon K edge core-loss spectra |
| 3 . 学会等名<br>International Microscopy Congress (IMC20), 2023, Sep. 13, Busan, Korea. (国際学会)                         |
| 4 . 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>N. Kawaguchi, Kiyou Shibata, Teruyasu Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Extracting Physics from Database with Systematic DFT Calculations: Intercalation Energies of Layered Intercalation Compounds with Various Ions |
| 3 . 学会等名<br>2023 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA, USA,2023 (国際学会)   |
| 4 . 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>K. Nishio, Kiyou Shibata, Teruyasu Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Prediction of forces and energy based on rotational invariant spherical representations |
| 3 . 学会等名<br>2023 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA, USA,2023 (国際学会)                            |
| 4 . 発表年<br>2023年  |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>N. Kawaguchi, Kiyou Shibata, Teruyasu Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>Design of Intercalant-Induced Function of Layered Intercalation Compounds via DFT Simulation and Machine Learning |
| 3 . 学会等名<br>MRM 2023, Kyoto, Japan, 2023 (国際学会)   |
| 4 . 発表年<br>2023年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>PY. Chen, Kiyou Shibata, Teruyasu Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Exploring Ground State Electronic Structure of materials through ELNES/XANES Spectra or SMILES Strings via machine learning |
| 3. 学会等名<br>MRM 2023, Kyoto, Japan, 2023 (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Kiyou Shibata, Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Message Passing Neural Network for Predicting Dipole Moment Dependent Core Electron Excitation Spectra |
| 3. 学会等名<br>NeurIPS AI4Mat workshop, New Orleans, LA, USA, 2023 (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康                     |
| 2. 発表標題<br>基底関数を最適化したグラフニューラルネットワークによる回転不変物性の予測 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京           |
| 4. 発表年<br>2023年                                 |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康            |
| 2. 発表標題<br>物質の逆設計に向けた深層生成モデルの開発       |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                       |



|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>Yebin Lee, 柴田基洋, 溝口照康      |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算によるモアレイオニクスの開拓       |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                       |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>福沢源, 高原泉, 川口直登, 柴田基洋, 溝口照康 |
| 2. 発表標題<br>インターカレーション化合物の化学結合解析       |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                       |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>中川諒紀, 高原泉, 西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康 |
| 2. 発表標題<br>化学結合データベースの作成と機械学習による予測     |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京  |
| 4. 発表年<br>2023年                        |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Poyen Chen, 柴田基洋, 溝口照康                   |
| 2. 発表標題<br>機械学習を利用したELNES/XANESおよびSMILESに基づく電子構造の予測 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京               |
| 4. 発表年<br>2023年                                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>川口直登, 柴田基洋, 溝口照康                    |
| 2. 発表標題<br>層間化合物のデータベース構築とインターカラントを機能コアとした物質設計 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京          |
| 4. 発表年<br>2023年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>柴田基洋, 柴田基洋, 溝口照康                       |
| 2. 発表標題<br>炭素K端スペクトルのデータベース構築とグラフニューラルネットワークによる予測 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京             |
| 4. 発表年<br>2023年                                   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康                             |
| 2. 発表標題<br>事前学習済みグラフニューラルネットワークを活用した小規模データセットに対する材料物性予測 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2023年秋季大会, 富山大学, 富山                    |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康                         |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いた内殻電子励起スペクトルからの基底状態原子・電子構造解析法の開発 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2023年秋季大会, 富山大学, 富山               |
| 4. 発表年<br>2023年                                    |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康              |
| 2. 発表標題<br>結晶構造の生成モデリングおよびメトリクスの検討      |
| 3. 学会等名<br>ケモインフォマティクス討論会2023, 中央大学, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                         |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Yebin Lee, 柴田基洋, 溝口照康                       |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算を用いたねじれ二層グラフェンにおけるイオンインターカレーションに関する研究 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2024春季大会, 東京理科大学, 東京                  |
| 4. 発表年<br>2024年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>柴田基洋, 溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>異方性を考慮したグラフニューラルネットワークの開発: 異方的ELNES/XANESスペクトル予測への利用 |
| 3. 学会等名<br>応用物理学会2024春季大会, 東京都市大学, 東京                           |
| 4. 発表年<br>2024年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康                     |
| 2. 発表標題<br>拡散モデルを用いた回転に対する同変・不変量の同時生成による結晶構造生成 |
| 3. 学会等名<br>応用物理学会2024春季大会, 東京都市大学, 東京          |
| 4. 発表年<br>2024年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                  |
| 2. 発表標題<br>一次元記述子を用いた表面・分子物性の予測                  |
| 3. 学会等名<br>表面真空学会・関東支部会講演会，オンライン，4/15，2022（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2022年                                  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Data-driven approaches for EELS  |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会学術講演会・Thailand-Japan international sympo. 2022, 5/13, 郡山市，福島県（招待講演）（国際学会） |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Kiyou. Shibata   |
| 2. 発表標題<br>In Situ TEM Measurement of Magnetic and Thermal Dynamic Process of Nano-Scale Structures |
| 3. 学会等名<br>2022 MRS Spring Meeting & Exhibit, Online, May 25, 2022（招待講演）（国際学会）                      |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用した格子欠陥における構造機能相関の理解                       |
| 3. 学会等名<br>第2回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム．2022，5/29，オンライン（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>原子と電子で生産技術, 最近インフォマティックス                         |
| 3. 学会等名<br>駒場リサーチキャンパス公開講演会, 駒場リサーチキャンパス, 6/11, 2022 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Data-driven spectral analysis for materials characterization |
| 3. 学会等名<br>CIMTEC 2022, Perugia, Italy, 6/23, 2022 (招待講演) (国際学会)        |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>データ駆動型XAFS解析と機械学習を活用したXANES計算の高速化                   |
| 3. 学会等名<br>第11回SPring-8データ科学研究会, ニチイ学館, 神戸市, 8/30, 2022 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                   |
| 2. 発表標題<br>MIを活用した界面・表面の構造決定と物性の予測                |
| 3. 学会等名<br>化学フェスタ2022, 船堀, 東京, 10/19, 2022 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年                                   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>第一部:機械学習と第一原理計算を活用した界面・表面の構造解析と物性予測         |
| 3. 学会等名<br>JFCC材料計算セミナー, JFCC, 名古屋, 10/26, 2022 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>第二部:機械学習と第一原理計算によるEELS/XAFSスペクトル解析          |
| 3. 学会等名<br>JFCC材料計算セミナー, JFCC, 名古屋, 10/26, 2022 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Machine learning approach for interface and surface   |
| 3. 学会等名<br>International Symposium on Noble and Nano Materials (ISNNM2022), Jeju, Korea, 11/14, 2022 (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Application of AI for EELS                                   |
| 3. 学会等名<br>Kamakura 2022, Kamakura, Kanagawa, 11/21, 2022 (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                 |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用したEELS解析の高度化                  |
| 3. 学会等名<br>分析電子顕微鏡討論会，オンライン，Dec. 9, 2022 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年                                 |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                 |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算と電子顕微鏡，情報科学を用いた物質研究            |
| 3. 学会等名<br>分析電子顕微鏡討論会，オンライン，Dec. 9, 2022 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2022年                                 |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>STEM-EELSやXAFSを用いた局所分析の基礎 (第一部)                        |
| 3. 学会等名<br>ニューガラスフォーラム2022年度第一回評価技術研究会，オンライン，Jan. 25, 2023 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>STEM-EELSやXAFSを用いたガラスの局所分析 (第二部)                       |
| 3. 学会等名<br>ニューガラスフォーラム2022年度第一回評価技術研究会，オンライン，Jan. 25, 2023 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>XAFSおよびSTEM-EELSを用いたガラスの局所分析の基礎と応用             |
| 3. 学会等名<br>弘前大学理工学部物質創生化学科セミナー，弘前大学，March 22, 2023 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>原子・電子レベルシミュレーション，計測，データ科学のその先に                                  |
| 3. 学会等名<br>革新的シミュレーションセンターシンポジウム・「力学の未来」，東京大学生産技術研究所，March 30, 2023 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>K. Shibata, and T. Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Prediction of Carbon K Edge Spectra of Organic Molecules Using a Graph Neural Network |
| 3. 学会等名<br>2022 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA, USA, 2022/12/1. (国際学会)                   |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Izumi Takahara, Poyen Chen, Kiyoh Shibata, Teruyasu Mizoguchi               |
| 2. 発表標題<br>Prediction of Electronic Density of States at Ground State from ELNES/XANES |
| 3. 学会等名<br>2022 MRS Fall Meeting & Exhibit, Boston, MA, USA, 2022/12/1. (国際学会)         |
| 4. 発表年<br>2022年  |



|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Poyen Chen, Kiyou Shibata, Teruyasu Mizoguchi                                     |
| 2. 発表標題<br>Ground state electronic structure prediction from ELNES/XANES by machine learning |
| 3. 学会等名<br>The 4th East-Asia Microscopy Conference (EAMC4), Online, 2022/12/4 (国際学会)         |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Y. Hata, Y. S. Xie, K. Shibata, and T. Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Development of a systematic and efficient method for searching for the most stable grain boundary structures: A method based on non-identical termination combination |
| 3. 学会等名<br>2022 MRS Fall Meeting & Exhibit, Online, 2022/12/7. (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Xie Yaoshu, 柴田基洋, 溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>Development and application of software for effective crystal interface modeling |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会秋季シンポジウム, 福岡工業大学, 福岡 2022/9/8  |
| 4. 発表年<br>2022年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>畑勇気, Xie Yaoshu, 柴田基洋               |
| 2. 発表標題<br>非等価な端面組合せに基づく体系的かつ効率的な粒界構造探索        |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会秋季シンポジウム, 福岡工業大学, 福岡 2022/9/8 |
| 4. 発表年<br>2022年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康, 畑勇気, Xie Yaoshu, 柴田基洋                |
| 2. 発表標題<br>組み合わせ最適化による界面構造の決定                         |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム, 徳島大学, 徳島 2022/9/15 |
| 4. 発表年<br>2022年                                       |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>川口直登, 柴田基洋, 溝口照康                           |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算を用いた層間化合物の安定性に関する理解                  |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会第35回秋季シンポジウム, 徳島大学, 徳島 2022/9/15 |
| 4. 発表年<br>2022年                                       |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>川口直登, 柴田基洋, 溝口照康                     |
| 2. 発表標題<br>層間化合物のデータベース構築と安定性に関する理解             |
| 3. 学会等名<br>第16回 物性科学領域横断研究会, online, 2022/11/25 |
| 4. 発表年<br>2022年                                 |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>柴田基洋, 溝口照康                                    |
| 2. 発表標題<br>有機高分子材料分析に向けた機械学習による炭素K吸収端ELNES/XANESの形状予測の検討 |
| 3. 学会等名<br>第70回応用物理学会 春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023/3/18       |
| 4. 発表年<br>2023年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>西尾健人、柴田基洋、溝口照康                          |
| 2. 発表標題<br>グラフエン上の多様な結合種を予測可能な機械学習モデルの開発           |
| 3. 学会等名<br>第70回応用物理学会 春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023/3/18 |
| 4. 発表年<br>2023年                                    |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>川口直登, 柴田基洋, 溝口照康                        |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算による新規黒鉛層間化合物超伝導体の探索               |
| 3. 学会等名<br>第70回応用物理学会 春季学術講演会, 上智大学, 東京, 2023/3/18 |
| 4. 発表年<br>2023年                                    |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康                     |
| 2. 発表標題<br>基底関数を最適化したグラフニューラルネットワークによる回転不変物性の予測 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京           |
| 4. 発表年<br>2023年                                 |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康            |
| 2. 発表標題<br>物質の逆設計に向けた深層生成モデルの開発       |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                       |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>Yebin Lee, 柴田基洋, 溝口照康      |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算によるモアレイオニクスの開拓       |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                       |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>福沢源, 高原泉, 川口直登, 柴田基洋, 溝口照康 |
| 2. 発表標題<br>インターカレーション化合物の化学結合解析       |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                       |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>中川諒紀, 高原泉, 西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康 |
| 2. 発表標題<br>化学結合データベースの作成と機械学習による予測     |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京  |
| 4. 発表年<br>2023年                        |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Poyen Chen, 柴田基洋, 溝口照康                   |
| 2. 発表標題<br>機械学習を利用したELNES/XANESおよびSMILESに基づく電子構造の予測 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京               |
| 4. 発表年<br>2023年                                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>川口直登, 柴田基洋, 溝口照康                    |
| 2. 発表標題<br>層間化合物のデータベース構築とインターカラントを機能コアとした物質設計 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京          |
| 4. 発表年<br>2023年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>柴田基洋, 柴田基洋, 溝口照康                       |
| 2. 発表標題<br>炭素K端スペクトルのデータベース構築とグラフニューラルネットワークによる予測 |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会, 東京             |
| 4. 発表年<br>2023年                                   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>西尾健人, 柴田基洋, 溝口照康                             |
| 2. 発表標題<br>事前学習済みグラフニューラルネットワークを活用した小規模データセットに対する材料物性予測 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2023年秋季大会, 富山大学, 富山                    |
| 4. 発表年<br>2023年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康                         |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いた内殻電子励起スペクトルからの基底状態原子・電子構造解析法の開発 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2023年秋季大会, 富山大学, 富山               |
| 4. 発表年<br>2023年                                    |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康              |
| 2. 発表標題<br>結晶構造の生成モデリングおよびメトリクスの検討      |
| 3. 学会等名<br>ケモインフォマティクス討論会2023, 中央大学, 東京 |
| 4. 発表年<br>2023年                         |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Yebin Lee, 柴田基洋, 溝口照康                        |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算を用いたねじれ二層グラフェンにおけるイオンインターカレーションに関する研究" |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2024春季大会, 東京理科大学, 東京                   |
| 4. 発表年<br>2024年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>柴田基洋, 溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>異方性を考慮したグラフニューラルネットワークの開発: 異方的ELNES/XANESスペクトル予測への利用 |
| 3. 学会等名<br>応用物理学会2024春季大会, 東京都市大学, 東京                           |
| 4. 発表年<br>2024年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>高原泉, 柴田基洋, 溝口照康                     |
| 2. 発表標題<br>拡散モデルを用いた回転に対する同変・不変量の同時生成による結晶構造生成 |
| 3. 学会等名<br>応用物理学会2024春季大会, 東京都市大学, 東京          |
| 4. 発表年<br>2024年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Kunyen Liao, Kiyou Shibata, and T. Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Nano-meter scale Observation of Atomistic Vibration in Silicate Glass by Monochromated EELS |
| 3. 学会等名<br>International Conference on Ceramics (ICC) (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Katsuaki Nakazawa, K. Mitsuishi, Kiyou Shibata, and T. Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Simultaneous Assessment of Thickness and Composition of Non-crystalline Silicate Glass by High-speed pixelated detector |
| 3. 学会等名<br>International Conference on Ceramics (ICC) (国際学会)   |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi, Kiyou Shibata, Eiki Suzuki, and Kakeru Kikumasa                                |
| 2. 発表標題<br>Data-driven Approaches for Materials Characterization: Core-loss Spectroscopy & Surface Adsorption |
| 3. 学会等名<br>The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS9) (国際学会)                                  |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>中澤克昭, 三石和貴, 安間伸一, 柴田基洋, 溝口照康    |
| 2. 発表標題<br>ガラス材料中バイノーダル型相分離過程のSTEM内高温その場観察 |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会                         |
| 4. 発表年<br>2021年                            |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Kunyen Liao, 柴田基洋, 溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>Measurement of Local Thermal Expansion in Ceramics with Valence EELS |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会  |
| 4. 発表年<br>2021年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>清原慎, 菊政翔, 柴田基洋, 溝口照康                   |
| 2. 発表標題<br>ニューラルネットワークの感度解析に基づいたELNES/XANES解釈法の開発 |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会                                |
| 4. 発表年<br>2021年                                   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>柴田基洋, 清原慎, 菊政翔, 溝口照康           |
| 2. 発表標題<br>ニューラルネットワークによる内殻励起スペクトルからの物性予測 |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会                        |
| 4. 発表年<br>2021年                           |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>柴田基洋, 鈴木勲輝, 溝口照康                    |
| 2. 発表標題<br>化学結合についての結合状態データベースの作成と機械学習を用いた結合予測 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会秋季大会                          |
| 4. 発表年<br>2021年                                |



|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Kunyen Liao, 柴田基洋, 溝口照康           |
| 2. 発表標題<br>電子エネルギー損失分光法による酸化物セラミック中熱膨張率の局所解析 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会秋季大会                        |
| 4. 発表年<br>2021年                              |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>畑勇氣, Yaoshu Xie, 柴田基洋, 溝口照康      |
| 2. 発表標題<br>対称傾角粒界データベースの構築と情報科学手法による構造予測の検討 |
| 3. 学会等名<br>電子材料研究討論会                        |
| 4. 発表年<br>2021年                             |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康, 畑勇氣, 柴田基洋                     |
| 2. 発表標題<br>機械学習, 第一原理計算および電子顕微鏡を活用した材料の構造・物性解析 |
| 3. 学会等名<br>電子材料研究討論会                           |
| 4. 発表年<br>2021年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>金山 侃生, 豊浦 和明, 宇田 哲也                    |
| 2. 発表標題<br>DiRect アルゴリズムに基づいた大域的最適化手法の開発と構造探索への応用 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2022年春季講演大会                      |
| 4. 発表年<br>2022年                                   |

|                               |
|-------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康               |
| 2. 発表標題<br>データ駆動型EELSスペクトル解析  |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会学術講演会（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2021年               |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                      |
| 2. 発表標題<br>機械学習を利用したスペクトル解析          |
| 3. 学会等名<br>応用物理学会 光波センシング技術研究会（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2021年                      |

|                                      |
|--------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                      |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算と電子顕微鏡，情報科学を用いた物質研究 |
| 3. 学会等名<br>東京理科大学特別講義（招待講演）          |
| 4. 発表年<br>2021年                      |

|                                  |
|----------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                  |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用した機能コア解析       |
| 3. 学会等名<br>第15回物性科学領域横断研究会（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2021年                  |

|                               |
|-------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康               |
| 2. 発表標題<br>EELSの基礎と解釈         |
| 3. 学会等名<br>分析電子顕微鏡研究討論会（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2021年               |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>In-situ STEM observation of heterogeneous structure in glass and ionic liquid |
| 3. 学会等名<br>PacificChem 2021（招待講演）（国際学会）  |
| 4. 発表年<br>2021年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                         |
| 2. 発表標題<br>機械学習，第一原理計算，ナノ計測を活用した物質の構造解析 |
| 3. 学会等名<br>ニューガラスフォーラム（招待講演）            |
| 4. 発表年<br>2021年                         |

|                               |
|-------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康               |
| 2. 発表標題<br>スペクトルを記述子とした物性予測   |
| 3. 学会等名<br>JST 情報計測 講演会（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2021年               |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>ibrational and coordinational structures in glass investigated by STEM-EELS |
| 3. 学会等名<br>Online Symposium of Glass Science and Technology (招待講演) (国際学会)              |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                           |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用した構造機能相関およびスペクトル機能相関の解析 |
| 3. 学会等名<br>ダイナミックアライアンス合同分科会 (招待講演)       |
| 4. 発表年<br>2022年                           |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                              |
| 2. 発表標題<br>放射光およびTEMで測定される内殻電子励起スペクトルの情報科学解析 |
| 3. 学会等名<br>日本学術振興会R026委員会第8回研究会 (招待講演)       |
| 4. 発表年<br>2022年                              |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Prediction of materials properties from core-loss spectrum using neural network |
| 3. 学会等名<br>Americal Physical Society (APS) Spring Meeting 2022 (招待講演) (国際学会)               |
| 4. 発表年<br>2022年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>豊浦 和明                       |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いたポテンシャルエネルギー曲面の高効率探索 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2021年秋期講演大会（招待講演）     |
| 4. 発表年<br>2021年                        |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>世古 敦人                               |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算と機械学習を用いた原子間相互作用のモデリングと結晶構造探索 |
| 3. 学会等名<br>第5回固体化学フォーラム研究会（招待講演）               |
| 4. 発表年<br>2021年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>世古 敦人                               |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算と機械学習を用いた原子間相互作用のモデリングと結晶構造探索 |
| 3. 学会等名<br>MRM Forum 2021 tutorial（招待講演）（国際学会） |
| 4. 発表年<br>2021年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>E. Suzuki, K. Shibata and T. Mizogichi,   |
| 2. 発表標題<br>Prediction of Change of DOS Associated with Bond Formation Using Machine Learning |
| 3. 学会等名<br>2020 MRS Fall Meetings & Exhibits（国際学会）   |
| 4. 発表年<br>2020年  |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>K. Nakazawa, K. Mitsuishi, S. Amma, K. Shibata and T. Mizoguchi,   |
| 2 . 発表標題<br>Non-spectroscopic method for simultaneous determinations of thickness and composition of amorphous materials via 4D-STEM |
| 3 . 学会等名<br>Microscopy & Microanalysis(M&M2020) ( 国際学会 )   |
| 4 . 発表年<br>2020年   |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>K. Liao, K. Shibata, T. Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>Probing Thermal Expansion Coefficient of SrTiO3 Grain Boundaries by In-Situ STEM-EELS |
| 3 . 学会等名<br>2020 MRS Fall Meetings & Exhibits ( 国際学会 )  |
| 4 . 発表年<br>2020年  |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>K. Liao, A. Masuno, H. Inoue, T. Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Nano-meter Scale Observation of Local Network Structure in Aluminosilicate Glass via Vibrational EELS |
| 3 . 学会等名<br>Microscopy and Microanalysis(M&M2020) ( 国際学会 )  |
| 4 . 発表年<br>2020年  |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata and T. Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Quantitative prediction of organic molecular properties from ELNES via artificial neural network |
| 3 . 学会等名<br>Microscopy & Microanalysis (M&M2020) ( 国際学会 )  |
| 4 . 発表年<br>2020年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>K. Kikumasa, S. Kiyohara, K. Shibata and T. Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Neural Network Approach for Predicting Organic Molecular Properties from core-loss spectroscopy |
| 3. 学会等名<br>2020 MRS Fall Meetings & Exhibits (国際学会)  |
| 4. 発表年<br>2020年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>中澤克昭, 安間伸一, 溝口照康             |
| 2. 発表標題<br>4D-STEMを用いた非晶質の組成・試料厚同時マッピング |
| 3. 学会等名<br>公益社団法人日本顕微鏡学会第76回学術講演会       |
| 4. 発表年<br>2020年                         |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康                  |
| 2. 発表標題<br>ニューラルネットワークを用いた炭素K端ELNES/XANESからの物性予測 |
| 3. 学会等名<br>第67回応用物理学会春季学術講演会                     |
| 4. 発表年<br>2020年                                  |

|                                  |
|----------------------------------|
| 1. 発表者名<br>鈴木勲輝, 柴田基洋, 溝口照康      |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いた原子結合及び状態密度の予測 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会                |
| 4. 発表年<br>2020年                  |

|                                     |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>鈴木勲輝、柴田基洋、溝口照康           |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いた結合形成に伴う状態密度変化の予測 |
| 3. 学会等名<br>第81回応用物理学会秋季学術講演会        |
| 4. 発表年<br>2020年                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>謝耀枢, 溝口照康, 柴田基洋   |
| 2. 発表標題<br>ダイヤモンド型構造における安定・準安定粒界相の探索 (Determination of Stable and Meta-stable Grain Boundary Phases in Diamond-structured Materials) |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2020年秋期講演大会   |
| 4. 発表年<br>2020年  |

|                                 |
|---------------------------------|
| 1. 発表者名<br>菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康 |
| 2. 発表標題<br>有機分子におけるスペクトル 物性相関   |
| 3. 学会等名<br>第81回応用物理学会秋季学術講演会    |
| 4. 発表年<br>2020年                 |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>中澤克昭, 三石和貴, 安間伸一, 安間伸一, 溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>4D-STEMによる非晶質材料の組成・試料厚計測       |
| 3. 学会等名<br>公益社団法人日本セラミックス協会, 第33回秋季シンポジウム |
| 4. 発表年<br>2020年                           |



|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>K. Liao, A. Masuno, H. Inoue, T. Mizoguchi                            |
| 2. 発表標題<br>Real-space analysis of Al and O distribution in Aluminosilicate Glass |
| 3. 学会等名<br>Fall Meeting of The Ceramic Society of Japan                          |
| 4. 発表年<br>2020年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>世古敦人                             |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算と機械学習による原子間ポテンシャルおよび結晶構造探索 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会 第33回秋季シンポジウム          |
| 4. 発表年<br>2020年                             |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>廖クン硯, 柴田基洋, 溝口照康               |
| 2. 発表標題<br>電子エネルギー損失分光法によるセラミック中熱膨張率の局所解析 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会2021年年会              |
| 4. 発表年<br>2021年                           |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>謝耀枢, 柴田基洋, 溝口照康                |
| 2. 発表標題<br>ダイヤモンド構造材料の対称傾角粒界における準安定構造の相転移 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会2021年年会              |
| 4. 発表年<br>2021年                           |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>菊政翔、清原慎、柴田基洋、溝口照康                |
| 2. 発表標題<br>炭素 K 端 ELNES/XANES を記述子とした分子物性予測 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会2021年年会                |
| 4. 発表年<br>2021年                             |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>鈴木勲輝、柴田基洋、溝口照康                |
| 2. 発表標題<br>結合前の電子状態から結合物性を予測する機械学習モデルの開発 |
| 3. 学会等名<br>日本セラミックス協会2021年年会             |
| 4. 発表年<br>2021年                          |

|                                 |
|---------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                 |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用したXAFSスペクトル解析 |
| 3. 学会等名<br>第23回XAFS研究会（招待講演）    |
| 4. 発表年<br>2020年                 |

|                                       |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                       |
| 2. 発表標題<br>EELSを用いたガラスの配位数および原子振動の計測" |
| 3. 学会等名<br>第56回X線分析討論会（招待講演）          |
| 4. 発表年<br>2020年                       |

|                                     |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                     |
| 2. 発表標題<br>単色化 EELS を用いたガラスの局所構造解析  |
| 3. 学会等名<br>第63回日本顕微鏡学会シンポジウム (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2020年                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                    |
| 2. 発表標題<br>EELS/XAFSインフォーマティクス～機械学習によるスペクトル解析の刷新～  |
| 3. 学会等名<br>国際ナノテクノロジー総合展・技術会議 nanotech 2021 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2020年                                    |

|                                   |
|-----------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                   |
| 2. 発表標題<br>人工知能による格子欠陥の内挿的学習      |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会格子欠陥フォーラム (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2020年                   |

|                           |
|---------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康           |
| 2. 発表標題<br>格子欠陥とアート       |
| 3. 学会等名<br>インスピ #1 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2021年           |

|                                  |
|----------------------------------|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                  |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いたEELSスペクトルの解析  |
| 3. 学会等名<br>NIMS先端計測シンポジウム (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2021年                  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                  |
| 2. 発表標題<br>Data-driven analysis of XAFS and EELS |
| 3. 学会等名<br>日本化学会春季大会 (招待講演)                      |
| 4. 発表年<br>2021年                                  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Machine learning and DFT simulation for XAFS/EELS                                 |
| 3. 学会等名<br>The 1st Workshop of Reaction Infography (R-ing) Unit, June 11, 2019 (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>人工知能技術と量子化学計算を用いたスペクトルからの情報抽出                 |
| 3. 学会等名<br>表面真空学会実用顕微評価技術セミナー、東京、小柴ホール、6/13, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                               |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算および機械学習を用いたELNES/XANES解析     |
| 3. 学会等名<br>顕微鏡学会学術講演会, 名古屋, 6/18, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                               |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>中澤克昭, 安間伸一, 溝口照康                   |
| 2. 発表標題<br>ガラスにおける相分離構造の高温その場観察               |
| 3. 学会等名<br>顕微鏡学会学術講演会, 名古屋, 6/17, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                               |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                     |
| 2. 発表標題<br>機械学習, 原子分解能電子顕微鏡, 第一原理計算による材料分析          |
| 3. 学会等名<br>東レリサーチセンター講演会, 大津, 滋賀, 6/25, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>シミュレーションと機械学習による格子欠陥評価                        |
| 3. 学会等名<br>日本学術振興会第166委員会研究会, 虎ノ門, 東京, 7/26, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                |
| 2. 発表標題<br>機械学習を利用した結晶界面構造決定と物性の予測             |
| 3. 学会等名<br>応用数理学会2019年度年会，駒場，東京，9/5，2019（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2019年                                |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康（基調講演）                               |
| 2. 発表標題<br>機械学習を活用した機能コア解析                          |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2019年度秋季大会，岡山大学，岡山，9/12，2019（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2019年                                     |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                      |
| 2. 発表標題<br>結晶界面インフォマティクスの最近の進展                       |
| 3. 学会等名<br>日本物理学会格子欠陥フォーラム，豊田工業大学，愛知，9/15，2019（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2019年                                      |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>清原慎，楢真史，溝口照康                               |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いたELNES/XANESスペクトル解析手法の開発            |
| 3. 学会等名<br>応用物理学会2019年度秋季大会，北海道大学，北海道，9/21，2019（招待講演） |
| 4. 発表年<br>2019年                                       |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>中澤克昭, 溝口照康                                   |
| 2. 発表標題<br>ガラスにおける相分離現象の高温その場観察                         |
| 3. 学会等名<br>新学術領域研究「機能コア」若手の会, 浜松, 静岡, 9/24, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                    |
| 2. 発表標題<br>第一原理計算計算, 透過型電子顕微鏡および機械学習を活用した物質の構造解析   |
| 3. 学会等名<br>豊橋技術科学大学特別講義, 豊橋, 愛知, 10/4, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                                    |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>機械学習を利用した結晶界面構造の最適化とスペクトル解析                 |
| 3. 学会等名<br>JSTインテリジェント計測講演会, 本郷, 東京, 10/7, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                      |
| 2. 発表標題<br>EELS/XAFSの第一原理計算とマテリアルズインフォマティクス          |
| 3. 学会等名<br>JFEテクノリサーチ講演会, 川崎, 神奈川, 10/9, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                                      |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                    |
| 2. 発表標題<br>人工知能と第一原理計算による高速・高精度なデータ解析～分光法への応用～     |
| 3. 学会等名<br>化学フェスタ2019, 八丁堀, 東京, 10/17, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                                    |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Machine learning for crystalline interface and core-loss spectrum |
| 3. 学会等名<br>TSMC-UTokyo workshop, Taiwan, 11/1, 2019 (招待講演) (国際学会)            |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                       |
| 2. 発表標題<br>シミュレーションと機械学習による格子欠陥評価                     |
| 3. 学会等名<br>日本学術振興会第161委員会講演会, 名古屋, 11/18, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                                       |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Bridging atomic-resolution experiment and computation using machine learning |
| 3. 学会等名<br>Materials Research Meeting (MRM) 2019, 横浜, 神奈川, 12/11, 2019 (招待講演) (国際学会)    |
| 4. 発表年<br>2019年   |



|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>データ駆動型XANES解析                                       |
| 3. 学会等名<br>Photon factory (PF)研究会, つくば, 茨木, 12/17, 2019 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Teruyasu Mizoguchi  |
| 2. 発表標題<br>Data-Driven Approach for Crystalline Interface and Spectrum                       |
| 3. 学会等名<br>3rd Functional Materials Symposium (FMS) 2019, 札幌, 北海道, 12/19, 2019 (招待講演) (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>ELNESインフォマティクス  |
| 3. 学会等名<br>顕微鏡計測インフォマティクス第一回シンポジウム, 名古屋大学, 愛知, 1/25, 2020 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2020年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康                                       |
| 2. 発表標題<br>機械学習と先端電子顕微鏡によるナノ構造解析                      |
| 3. 学会等名<br>NIMS先端計測シンポジウム, NIMS, 茨木, 3/2, 2020 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2020年                                       |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>Machine learning and DFT simulation for core-loss spectroscopy |
| 3. 学会等名<br>日本化学会春季大会, 東京理科大野田キャンパス, 千葉, 3/24, 2020 (招待講演)                 |
| 4. 発表年<br>2020年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>豊浦 和明                            |
| 2. 発表標題<br>酸化物中におけるプロトン拡散の原子論的理解            |
| 3. 学会等名<br>第76回固体イオニクス研究会, 2019/12/5 (招待講演) |
| 4. 発表年<br>2019年                             |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>T. Miyata and T. Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Observation of Single Atoms and Nano Structures in Liquid using Scanning Transmission Electron Microscopy                      |
| 3. 学会等名<br>6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019 (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>K. Nakazawa and T. Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>In-situ Observation of Spinodal Decomposition Process in Silicate Glass  |
| 3. 学会等名<br>6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019 (国際学会) |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>K. Liao, A. Masuno, H. Inoue, and T. Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>Probing Nanoscale Phase Separation in Aluminosilicate Glass with Electron Energy Loss Spectroscopy                             |
| 3 . 学会等名<br>6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019 (国際学会) |
| 4 . 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>S. Kiyohara and T. Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>Machine learning for Core-loss spectrum: Automated interpretation via both supervised and unsupervised learning                |
| 3 . 学会等名<br>6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019 (国際学会) |
| 4 . 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>R. Otani, S. Kiyohara, Y. Sugimori, and T. Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>Machine Learning for Structure Property Relationship of Crystalline Interface  |
| 3 . 学会等名<br>6th International symposium on advanced microscopy and theoretical calculations (AMTC6), Nagoya, Aichi, June 14th, 2019 (国際学会) |
| 4 . 発表年<br>2019年   |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>R. Otani, S. Kiyohara, and T. Mizoguchi   |
| 2 . 発表標題<br>"Crystalline interface property prediction without the interface structure via machine learning |
| 3 . 学会等名<br>Toronto University-University of Tokyo workshop, Tronto, Canada, June 27th, 2019 (国際学会)         |
| 4 . 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>R. Otani, S. Kiyohara, K. Shibata, and T. Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Comprehension of interfacial structure and property relationship via machine learning            |
| 3 . 学会等名<br>Pacific Rim conference on ceramics society (PacRIM2019), Ginowan, Okinawa, Oct.28, 2019 ( 国際学会 ) |
| 4 . 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>Kun-Yen Liao, A. Masuno, H. Inoue, and T. Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Nanoscale Investigation on Crack-resistant Aluminosilicate Glasses with STEM EELS                |
| 3 . 学会等名<br>Pacific Rim conference on ceramics society (PacRIM2019), Ginowan, Okinawa, Oct.28, 2019 ( 国際学会 ) |
| 4 . 発表年<br>2019年   |

|   |
|---|
| 1 . 発表者名<br>Kazuaki Toyoura   |
| 2 . 発表標題<br>Potential energy surface mapping by machine learning for characterizing atomic diffusion in crystals              |
| 3 . 学会等名<br>The 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM13), Ginowan, Okinawa, Oct.28, 2019 ( 招待講演 ) ( 国際学会 ) |
| 4 . 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1 . 発表者名<br>Kun-Yen Liao, A. Masuno, H. Inoue, and T. Mizoguchi  |
| 2 . 発表標題<br>Nanoscale Investigation on Crack-resistant Aluminosilicate Glasses with STEM EELS                      |
| 3 . 学会等名<br>National Taiwan University (NTU)-Univeristy of Tokyo (UT) workshop, Hongo, Tokyo, Dec.9, 2019 ( 国際学会 ) |
| 4 . 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Shin Kiyohara, M. Tsubaki, and T. Mizoguchi   |
| 2. 発表標題<br>Data-driven approach for core-loss spectroscopy: Prediction of spectra and Quantification of properties |
| 3. 学会等名<br>Materials Research Society (MRS 2019), Boston, USA, Dec 5, 2019 (国際学会)                                  |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>清原慎, 椿真史, 溝口照康                            |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いたELNESの予測と物性定量化                    |
| 3. 学会等名<br>日本顕微鏡学会学術講演会, 名古屋国際会議場, 名古屋, June18, 2019 |
| 4. 発表年<br>2019年                                      |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>豊浦 和明, 藤井 健雄, 畑田 直行, 韓 東麟, 宇田 哲也      |
| 2. 発表標題<br>プロトン伝導性BaZrO <sub>3</sub> 中のキャリア間相互作用 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2019年秋期講演大会, 2019/9/12          |
| 4. 発表年<br>2019年                                  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>大谷龍剣, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康                  |
| 2. 発表標題<br>構造決定を伴わない粒界物性予測                        |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2019年度秋季大会, 岡山大学, 岡山, 9/18, 2019 |
| 4. 発表年<br>2019年                                   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Liao Kunyen, 増野敦信, 井上博之, 溝口照康                                     |
| 2. 発表標題<br>STEM-EELS Analysis on Local Structures of Aluminosilicate Glasses |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会2019年度秋季大会, 岡山大学, 岡山, 9/18, 2019                            |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>Yaoshu Xie, 大谷龍剣, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康   |
| 2. 発表標題<br>Database Generation and Machine Learning Application in Grain Boundary Structure and Properties |
| 3. 学会等名<br>新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019   |
| 4. 発表年<br>2019年  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Liao Kunyen, 増野敦信, 井上博之, 柴田基洋, 溝口照康  |
| 2. 発表標題<br>Probing Cation Local Coordination and Vibration Modes at Silicate Glass with STEM EELS |
| 3. 学会等名<br>新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019  |
| 4. 発表年<br>2019年   |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康                |
| 2. 発表標題<br>機械学習を利用した ELNES/XANES スペクトル解析       |
| 3. 学会等名<br>新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019 |
| 4. 発表年<br>2019年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>鈴木勲輝, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康               |
| 2. 発表標題<br>吸着反応の理解に向けた情報科学的手法による表面構造解析         |
| 3. 学会等名<br>新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019 |
| 4. 発表年<br>2019年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>大谷龍剣, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康               |
| 2. 発表標題<br>完全結晶の原子配列を用いた結晶界面物性の予測              |
| 3. 学会等名<br>新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019 |
| 4. 発表年<br>2019年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>中澤克昭, 溝口照康                          |
| 2. 発表標題<br>4D-STEMを用いた相分離・結晶化過程のその場観察          |
| 3. 学会等名<br>新学術領域「機能コア」若手の会, 鷺津, 静岡, 9/24, 2019 |
| 4. 発表年<br>2019年                                |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康                  |
| 2. 発表標題<br>ニューラルネットワークを用いた炭素K端ELNES/XANESからの物性予測 |
| 3. 学会等名<br>応用物理学会春季大会, 上智大学, 東京, 3/14, 2020      |
| 4. 発表年<br>2020年                                  |

|   |
|---|
| 1. 発表者名<br>Yaoshu Xie, 柴田基洋, 溝口照康             |
| 2. 発表標題<br>網羅的粒界構造決定アルゴリズムの開発とSi非対称粒界構造解析への利用 |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会春季大会, 東工大, 東京, 3/18, 2020    |
| 4. 発表年<br>2020年                               |

|  |
|--|
| 1. 発表者名<br>鈴木勲輝, 柴田基洋, 溝口照康                |
| 2. 発表標題<br>機械学習を用いた原子結合及び状態密度の予測           |
| 3. 学会等名<br>日本金属学会春季大会, 東工大, 東京, 3/18, 2020 |
| 4. 発表年<br>2020年                            |

〔図書〕 計3件

|   |                 |
|---|-----------------|
| 1. 著者名<br>T.Mizoguchi   | 4. 発行年<br>2020年 |
| 2. 出版社<br>Royal Society of Chemistry publication  | 5. 総ページ数<br>20  |
| 3. 書名<br>Machine Learning in Chemistry: The Impact of Artificial Intelligence Prof. Hugh M Cartwright (Oxford Univ.) edited |                 |

|                               |                 |
|-------------------------------|-----------------|
| 1. 著者名<br>東京大学工学教程編纂委員会、馬渡 和真 | 4. 発行年<br>2020年 |
| 2. 出版社<br>丸善出版                | 5. 総ページ数<br>114 |
| 3. 書名<br>基礎系 化学 分析化学II:分光分析   |                 |



|  |                 |
|--|-----------------|
| 1. 著者名<br>A. Seko, H. Hayashi, H. Kashima, and I. Tanaka   | 4. 発行年<br>2020年 |
| 2. 出版社<br>Springer   | 5. 総ページ数<br>20  |
| 3. 書名<br>Recommender Systems for Materials Discovery in “Machine Learning Meets Quantum Physics” |                 |

〔産業財産権〕

〔その他〕

|   |
|---|
| <p>1. Polynomial machine learning potential repository (機械学習ポテンシャルDB), <a href="http://cms.mtl.kyoto-u.ac.jp/seko/mlp-repository/index.html">http://cms.mtl.kyoto-u.ac.jp/seko/mlp-repository/index.html</a>, J. Appl. Phys. 133, 011101 (2023)</p> <p>2. pypolymIp (ポテンシャル作成・計算), <a href="https://github.com/sekocha/pypolymIp">https://github.com/sekocha/pypolymIp</a></p> <p>3. lammps-polymIp (ポテンシャル for lammps), <a href="https://github.com/sekocha/lammps-polymIp-package">https://github.com/sekocha/lammps-polymIp-package</a></p> <p>4. symfc (力定数推定), <a href="https://github.com/sekocha/symfc">https://github.com/sekocha/symfc</a></p> <p>5. recommender (推薦システム) <a href="https://github.com/sekocha/recommender">https://github.com/sekocha/recommender</a></p> <p>6. MASTEQ (マスター方程式に基づいて拡散係数を算出), <a href="https://github.com/KazuakiToyoura/MASTEQ">https://github.com/KazuakiToyoura/MASTEQ</a></p> <p>7. PoNPs (Poisson-Nernst-Planck方程式の数値解析プログラム), <a href="https://github.com/KazuakiToyoura/PoNPs">https://github.com/KazuakiToyoura/PoNPs</a></p> <p>8. tDIRECT (分子・結晶構造探索の決定論的手法), K. Kanayama et al., Phys. Rev. E 108, 035303</p> <p>9. Interface_master (結晶界面モデリング), <a href="https://github.com/nmdl-mizo/interface_master">https://github.com/nmdl-mizo/interface_master</a></p> <p>10. cnidcal (CNIDをコード化), <a href="https://github.com/nmdl-mizo/cnidcal">https://github.com/nmdl-mizo/cnidcal</a>, Comp. Phys. Comm. 273 (2022) 108260,</p> <p>11. 11万個の炭素K端データベース, Scientific Data volume 9, Article number: 214 (2022)</p> <p>12. 化学結合データベース, Data in Brief, Volume 36, June 2021, 106968</p> <p>13. 電子構造を加味したGNNモデル, <a href="https://github.com/nmdl-mizo/lcaonet">https://github.com/nmdl-mizo/lcaonet</a></p> <p>14. COOP diagramを作成するコード, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2024, in press</p> <p>15. 層間化合物データベース, ACS Phys. Chem Au 2024, 4, 3, 281.</p> <p>16. 層間化合物バンド構造データベース, submitted.</p> |
|---|

## 6. 研究組織

|       | 氏名<br>(ローマ字氏名)<br>(研究者番号)                    | 所属研究機関・部局・職<br>(機関番号)          | 備考 |
|-------|--|--------------------------------|----|
| 研究分担者 | 世古 敦人<br>(Seko Atsuto)<br><br>(10452319)     | 京都大学・工学研究科・准教授<br><br>(14301)  |    |
| 研究分担者 | 豊浦 和明<br>(Toyoura Kazuaki)<br><br>(60590172) | 京都大学・工学研究科・准教授<br><br>(14301)  |    |
| 研究分担者 | 柴田 基洋<br>(Shibata Kiyou)<br><br>(40780151)   | 東京大学・生産技術研究所・助教<br><br>(12601) |    |

## 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              |  |  |  |
|---------|----------------------|--|--|--|
| 中国      | 蘇州大学                 |  |  |  |
| ノルウェー   | オスロ大学                |  |  |  |
| 韓国      | POSTECH              |  |  |  |
| スウェーデン  | Linkoping University |  |  |  |
| 英国      | Durham University    |  |  |  |