

令和 6 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19H00818

研究課題名（和文）原子分解能“振動”計測法の開発と革新的材料創製

研究課題名（英文）Materials design via atomic resolution vibrational analysis

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） 34,700,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では電子エネルギー損失分光（EELS）と高度なスペクトル計算および機械学習を組み合わせ、物質の局所的な原子振動に関わる情報（熱および原子拡散）を高い空間分解能で取得する手法を開発した。特に高温下での局所領域における熱物性や相分離挙動の実験的解析に成功した。また、機械学習を用いたスペクトル解析手法の開発により、従来よりも高速かつ高精度な解析を実現し、スペクトル生成の物理を超えた新たな物性予測にも使用できることが示された。これらの成果は、新しい耐熱材料や光学材料の開発に大いに寄与することが期待される。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究の学術的意義は、電子エネルギー損失分光と高度なスペクトル計算技術および機械学習を組み合わせることで、熱や拡散などの、局所的な原子振動情報を高い空間分解能で取得する新たな手法を確立した点にある。特に、高温下での熱物性や相分離挙動の解析に成功し、これまでの静止した構造観察の限界を超えた動的情報を得ることができた。さらに社会的意義として、本研究で開発された手法が新しい耐熱材料や光学材料の開発に大きく貢献する点や、機械学習を用いたスペクトルインフォマティクスの分野を切りひらいたという点でも意義があったといえる。本研究で開発した手法が今後のデバイスや素材の開発に寄与することが期待される。

研究成果の概要（英文）：In this study, we developed a method that combines electron energy loss spectroscopy (EELS) with advanced spectral calculations and machine learning to obtain high spatial resolution information on local atomic vibrations (related to heat and migration) in materials. We successfully performed experimental analysis of thermal properties and phase separation behavior in local regions under high temperatures. Additionally, the development of a spectral analysis method using machine learning enabled faster and more accurate analysis than conventional methods, and it was shown to be applicable for new property predictions. These achievements are expected to greatly contribute to the development of new heat-resistant and optical materials.

研究分野：材料設計

キーワード：EELS XAFS 原子振動 第一原理計算 機械学習 熱膨張 相分離 透過型電子顕微鏡

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

人類社会の持続的発展には、新機能および高性能な材料を継続的に開発する必要がある。そのためには、様々な材料機能が発現するメカニズムを解明し、迅速に材料開発することが不可欠である。今世紀に入り、個々の原子を分析する原子レベル計測が達成され、機能発現メカニズムの解明が進んでいる。つまり、近代の材料科学の発展において、原子レベル計測は重要な役割を果たしてきた。申請者らも、原子レベル計測手法を用いて、セラミックスや人工超格子、ガラスや液体、気体などの様々な物質の構造解析を行い、様々な知見を得ることに成功してきた。

一方で、最新の原子レベル計測においても、原子の静止した構造を観察しているという課題がある。物質は気体、液体、固体の全ての状態において、静止した球ではなく、振動を伴って存在している。これまでの原子分解能計測は原子を“静止した球”として近似しており、振動に伴う様々な物性、例えば高温下における熱膨張や原子移動、さらに原子の集団移動に伴う相分離を高い空間分解能で解析することは達成できていない。

そのような高温下における局所領域における原子振動などのダイナミクスは様々な物性と密接に関係している。たとえば、固体界面における原子振動の伝達挙動は、界面における熱膨張・熱伝導と直結しており、熱遮蔽コーティングの耐熱衝撃性等を決める重要な因子となる。また有機溶液内のイオンダイナミクスは、溶質の溶解挙動や各種反応性などと相関している。

最近ではIoT (Internet of Things) デバイスの開発や人工知能の実現など、半導体やセンサーの微細化と高機能化が急速に進んでいる。そのような最先端デバイスにおいては、微小領域の原子振動、つまり熱の理解と制御の重要性が増している。つまり、材料中の原子振動に関わる諸現象を高い空間分解能で取得することができれば、これまで理解が不十分であった材料特性の理解が深まり、これまでにない革新的な材料の開発につながることを期待される。しかしながら従来の振動計測法である赤外分光や X 線非弾性散乱は、試料全体の平均的な情報しか得ることができなかった。

2. 研究の目的

以上のような背景のなか、研究代表者および分担者の研究グループは、透過型電子顕微鏡で計測される電子エネルギー損失分光 (EELS) と高度なスペクトル計算技術を複合利用することで、固体、気体、液体の局所的な原子の振動情報をも取得できることを明らかにしてきた。本研究では、申請者が独自開発してきた EELS とスペクトル計算を組み合わせた計測法を進展させ、原子の振動情報やダイナミクスに関する情報を計測するための手法を開発する。具体的には、高い空間分解能における基盤を構築し、同手法を界面やアモルファスなどの様々な材料に利用することで局所領域における各種現象を理解し、耐熱材料や光学材料などの材料開発に活用することを目的としている。

3. 研究の方法

これまでに入射エネルギーを高分解能化するモノクロメーターを利用して、赤外領域の EELS を測定し、原子や分子の振動情報に関する情報を計測する報告は世界的に行われており、重要な成果が出ている。一方で、高い空間分解能を実現できるはずの高エネルギー EELS を用いた振動解析は、非常に少ない。これは高エネルギー EELS を振動解析に利用するためには高度なスペクトル計算技術が不可欠なためである。さらに同手法を表面や界面、気体、液体に利用するためには、高度なモデリング技術が必要となる。

つまり、本研究目標を達成するためには以下の 3 つの項目、1) EELS の理論解析、2) 高温下における EELS 計測、3) 格子欠陥モデリングを高いレベルで実施する必要がある。そこで、本研究においても同 1) ~ 3) の項目に取り組んだ。

具体的には 1) 振動を加味した第一原理計算を実施することによりスペクトルに重畳した振動情報の抽出を試みる。さらに、同解析の計算コストを削減することを目的として、機械学習を利用するスペクトルインフォーマティクスに関する手法も開発する。2) 高い空間分解能を実現できる高温ホルダーを利用し、高温下における計測を実施した。高温下における局所領域の熱物性や、材料の相分離挙動など、原子のダイナミクスに関する情報の実験的な抽出を試みた。3) 格子欠陥のモデリングを効率的に実施するためのコード開発を行った。

以上の研究を通し、高温下における原子振動に関わる情報 (熱物性や相分離など) を高い空間分解能で解析し、材料開発における知見を得た。

4. 研究成果

研究開始当初 (2019 ~ 2020) においては、上記 1) に関連するスペクトル解析に関する手法開発を行った。まず、スペクトル計算には励起状態と基底状態を別々に計算する必要があるため計

算時間を要する。そこで、1 電子計算に関しては機械学習を利用した手法開発を行った。さらに、多電子計算においては制限活性空間自己無撞着場計算 (RASSCF) に基づいて波動関数を最適化することで電子相関の効果をより精密に取り入れたスペクトル多電子計算法の検討を行った。多配置摂動理論と組み合わせることで遷移エネルギーに改善が見られた。

また、同時期において上記 2) に関連する計測実験も行った。まず、原子ダイナミクスの可視化を目的とし、室温下における有機塩中の原子のダイナミクスや相分離挙動を調べた。液体の非常に薄い試料を作製することで、ダイナミクスの領域が制限され、原子が振動したりジャンプしたりする動いたりする姿を実時間で観察することに成功した。

また、高温下における計測を電子顕微鏡内で実施した。具体的には、光学材料として利用されているガラス材料の組成や振動、構造の挙動を調べた。その結果、構造相転移や相分離などの原子ダイナミクスに関する挙動をリアルタイム・リアルスケールで可視化することに成功した。また、画像解析により、高温下において原子がどのような経路を伝って集団移動して相分離が進行するのかということも明らかにした。

さらに、同時期において、新たな共通機器 (4D-STEM) を利用した実験も行った。その結果、本来は分離することが困難な試料の厚さと組成に関する情報を分離する手法を開発することが出来た。また、同環境下における EELS 測定も行った。EELS の低エネルギー領域における振動スペクトルを測定し、そのスペクトルと構造との相関性を明らかにした。また、理論計算を組み合わせることで、ガラスを構成する原子の配位環境を可視化することに成功した。

研究中期 (2020~2021) においては、上記項目 1) と 2) に関連する内容として、局所的な原子振動挙動を調べるための手法開発を進めた。その研究を通し、界面における構造と振動との相関性を明らかにすることができた。また、上記項目 3) のモデリングに関する内容も実施し、界面構造のモデリングとシミュレーションにより、種々の界面構造を作製し、熱振動と構造との相関性を調べた。ここで開発した界面モデリングコードに関しては、後に GitHub に公開し、広く使用できる環境を整えている。

さらに、構造とスペクトル形状との相関性も調べてきた。例えば、仮想的に構造をひずませたモデルを多数構築し、スペクトル形状との相関性も調べた。結果的に、教師なし学習で使用される樹形図からその相関性を明らかにすることができ、振動情報抽出において有効な解析手法を開発することができた。同手法を用いることで、スペクトルから振動情報を自動で検出することが可能になる。また、上記 1) と関連して、1 粒子計算に加えて多電子計算においても解析を進めた。その結果、励起状態におけるエネルギー局面を描くことが可能になった。

また同時期の成果として特筆すべき点は、実験的に界面の熱振動をナノレベルの高い空間分解能で直接計測することに成功した点である。本申請研究で導入した各種計測装置と計算機を用いて計測と理論計算を実施し、界面の局所的な熱振動に関わる物性 (熱膨張) を決定することに成功した。さらに、3) で開発したモデリング手法を活用し、界面構造を詳細に調べた。その結果、熱膨張を決定する構造因子を特定することができた。

つまり、本申請研究の目的である「高い空間分解能での振動計測」と「振動制御のための指針確立」という目的をおおむね達成することができた。同成果は、ハイインパクトな Journal に掲載され、プレスリリースも行った。

研究後期 (2021~2022) においては、前期に引き続き光学材料として利用されているガラス材料の高温下における原子ダイナミクス挙動の詳細な解析を進めた。これまでに複数の組成で相分離挙動を調べ、相分離が起こる直前において共通の像変化があらわれることが明らかとなっていたが、その起源は不明であった。実験的に得られた組成・温度の時間経過に関するデータと、相分離シミュレーションのデータを用いた双子実験を行った。その結果、同前駆現象について、ガラスにおいて原子位置に様々な準安定位置が存在しており、その準安定構造を経由する原子ダイナミクスが、前駆現象の起源であることを突き止めた。

また、1) の項目に関して機械学習の応用も進めた。特に、機械学習をするためのデータベースの構築を行った。結果的に、10 万個以上のスペクトルを含むデータベースを作成し公開することができた。また、階層型クラスタリングと決定木を利用したデータ駆動型の自動スペクトル解析法を開発した。また、前述のデータベースを利用し、スペクトルから 10 種類以上の物性を直接予測するという手法の開発も行った。その結果、本来のスペクトル生成の物理とは異なる情報、具体的には分子量や内部エネルギーなど、の情報を抽出可能であることが示された。

以上、本基盤研究では、計測とシミュレーション、さらに機械学習も高度に複合利用することで、「高い空間分解能での原子振動およびそれに関わる物性の計測」と「原子振動制御のための指針確立」を達成することが出来た。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計28件（うち査読付論文 27件／うち国際共著 2件／うちオープンアクセス 16件）

1. 著者名 K. Shibata, E. Suzuki, and T. Mizoguchi	4. 巻 36
2. 論文標題 Dataset on structure and physical properties of stable diatomic systems based on van der Waals density functional method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Data in Brief	6. 最初と最後の頁 106968
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 H. Tsurusawa, N. Nakanishi, K. Kawano, Y. Chen, B. V. Leer, T. Mizoguchi	4. 巻 11
2. 論文標題 Robotic fabrication of high-quality lamellae for aberration-corrected transmission electron microscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 21599-1-12
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 M. Tsubaki and T. Mizoguchi	4. 巻 17
2. 論文標題 Quantum Deep Descriptor: Physically Informed Transfer Learning from Small Molecules to Polymers	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 J. Chem. Theory Comput.	6. 最初と最後の頁 7814-7821
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 K. Liao, K. Shibata, and T. Mizoguchi	4. 巻 21
2. 論文標題 Nanoscale Investigation of Local Thermal Expansion at SrTiO ₃ Grain Boundaries by Electron Energy Loss Spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 10416-10422
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

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

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

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

1. 著者名 *溝口照康, 柴田基洋	4. 巻 49
2. 論文標題 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 2022年
3. 雑誌名 セラミックデータブック 2021/2022	6. 最初と最後の頁 37-42
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 F.M.F. de Groot, H. Elnaggar, Federica Frati, R. Wang, M.U. Delgado-Jaime, M. van Veenendaal, J. Fernandez-Rodriguez, M. W. Haverkort, R.J. Green, G. van der Laan, Y. Kvashnin, A. Hariki, H. Ikeno, M. Lundberg, O. Kuhn, A. Tanaka	4. 巻 249
2. 論文標題 2p x-ray absorption spectroscopy of 3d transition metal systems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena	6. 最初と最後の頁 147061
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.elspec.2021.147061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 溝口照康, 清原慎, 大谷龍剣	4. 巻 62
2. 論文標題 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 2020年
3. 雑誌名 触媒	6. 最初と最後の頁 35-41
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Mizoguchi and S. Kiyohara	4. 巻 69
2. 論文標題 Machine learning applications for ELNES/XANES (Invited review)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Microscopy	6. 最初と最後の頁 92-109
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/jmicro/dfz109	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 大谷龍剣, 清原慎, 溝口照康	4. 巻 59
2. 論文標題 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 2020年
3. 雑誌名 あたりあ	6. 最初と最後の頁 134-138
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

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

1. 著者名 K. Liao, M. Haruta, A. Masuno, H. Inoue, H. Kurata, and T. Mizoguchi	4. 巻 3
2. 論文標題 Real-Space Mapping of Oxygen Coordination in Phase-Separated Aluminosilicate Glass: Implication for Glass Stability	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Applied Nano Materials	6. 最初と最後の頁 5053-5060
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnm.0c00196	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Kiyohara, M. Tsubaki, and T. Mizoguchi	4. 巻 6
2. 論文標題 Learning excited states from ground states by using an artificial neural network	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 npj Comp. Mater.	6. 最初と最後の頁 68-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41524-020-0336-3	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 S. Yamagata, I. Takahara, M. Wang, T. Mizoguchi, and S. Yagi	4. 巻 846
2. 論文標題 EQCM Analysis of Intercalation Species into Graphite Positive Electrodes for AI Batteries	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Alloy and Comp.	6. 最初と最後の頁 156469-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Nakazawa, K. Shibata, K. Mitsuishi, S. Amma, and T. Mizoguchi	4. 巻 217
2. 論文標題 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 2020年
3. 雑誌名 Ultramicroscopy	6. 最初と最後の頁 113077-1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 S. Kiyohara and T. Mizoguchi	4. 巻 89
2. 論文標題 Radial distribution function from X-ray absorption near edge structure with an artificial neural network	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Soc. Jpn (Letter)	6. 最初と最後の頁 103001-1-4
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 K. Nakazawa, S. Amma, and T. Mizoguchi	4. 巻 200
2. 論文標題 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 2020年
3. 雑誌名 Acta Mater.	6. 最初と最後の頁 720-726
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 M. Tsubaki and T. Mizoguchi	4. 巻 125
2. 論文標題 Quantum Deep Field: Data-Driven Wave Function, Electron Density Generation, and Atomization Energy Prediction and Extrapolation with Machine Learning	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Lett.	6. 最初と最後の頁 206401-1-6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 K. Liao, A. Masuno, A. Taguchi, H. Moriwake, H. Inoue, and T. Mizoguchi	4. 巻 11
2. 論文標題 Revealing Spatial Distribution of Al-Coordinated Species in a Phase-Separated Aluminosilicate Glass by STEM-EELS	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. Lett.	6. 最初と最後の頁 9637-9642
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 溝口照康, 清原慎	4. 巻 38
2. 論文標題 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 2020年
3. 雑誌名 日本化学会情報化学部会誌	6. 最初と最後の頁 16-19
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

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

1. 著者名 溝口照康, 清原慎	4. 巻 54
2. 論文標題 "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 2019年
3. 雑誌名 セラミックス	6. 最初と最後の頁 456-463
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

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

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

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

1. 著者名 H. Ikeno and M. Urasaki	4. 巻 -
2. 論文標題 "Reduced-Shifted Conjugate-Gradient Method with Seed Switching for Calculating X-ray Absorption Spectra"	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計48件（うち招待講演 27件 / うち国際学会 16件）

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

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

1. 発表者名 Teruyasu Mizoguchi, Kiyou Shibata, Eiki Suzuki, and Kakeru Kikumasa
2. 発表標題 Data-driven Approaches for Materials Characterization:Core-loss Spectroscopy & Surface Adsorption
3. 学会等名 The 9th International Symposium on Surface Science (ISS9) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 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 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 日本顕微鏡学会
4. 発表年 2021年

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

1. 発表者名 清原慎, 菊政翔, 柴田基洋, 溝口照康
2. 発表標題 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 日本顕微鏡学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 柴田基洋, 清原慎, 菊政翔, 溝口照康
2. 発表標題 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 日本顕微鏡学会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 柴田基洋, 鈴木勲輝, 溝口照康
2. 発表標題 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 日本金属学会秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kunyen Liao, 柴田基洋, 溝口照康
2. 発表標題 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 日本金属学会秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 畑勇気, Yaoshu Xie, 柴田基洋, 溝口照康
2. 発表標題 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 電子材料研究討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 溝口照康, 畑勇気, 柴田基洋
2. 発表標題 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 電子材料研究討論会
4. 発表年 2021年

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

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 機械学習を利用したスペクトル解析
3. 学会等名 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 2021年

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 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 東京理科大学特別講義（招待講演）
4. 発表年 2021年

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

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

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

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 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 ニューガラスフォーラム (招待講演)
4. 発表年 2021年

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

1. 発表者名 Teruyasu Mizoguchi
2. 発表標題 Vibrational and coordinational structures in glass investigated by STEM-EELS
3. 学会等名 Online Symposium of Glass Science and Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 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 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 2022年

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 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 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 2022年

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

1. 発表者名 Kakeru Kikumasa, Shin Kiyohara, Kiyou Shibata, and T. Mizoguchi
2. 発表標題 Quantitative Prediction of Properties of Organic Molecules from ELNES via Artificial Neural Network
3. 学会等名 Microscopy and Microanalysis (M&M) 2020（国際学会）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kunyen Liao, Kiyohara, and T. Mizoguchi
2. 発表標題 Nanometer Scale Observation of Local Network Structure in Aluminosilicate Glass via Vibrational EELS
3. 学会等名 Microscopy and Microanalysis (M&M) 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shin Kiyohara, Kiyohara, and T. Mizoguchi
2. 発表標題 Prediction of ELNES and quantification of structural properties using artificial neural network
3. 学会等名 Microscopy and Microanalysis (M&M) 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kakeru Kikumasa, Shin Kiyohara, Kiyohara, and T. Mizoguchi
2. 発表標題 Neural Network Approach for Predicting Organic Molecular Properties from Core-Loss Spectroscopy
3. 学会等名 Materials Research Society (MRS) Fall meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Eiki Suzuki, Kiyohara, and T. Mizoguchi
2. 発表標題 Prediction of Change of DOS Associated with Bond Formation Using Machine Learning
3. 学会等名 Materials Research Society (MRS) Fall meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kunyen Liao, Kiyu Shibata, and T. Mizoguchi
2. 発表標題 Probing Thermal Expansion Coefficient of SrTiO ₃ Grain Boundaries by In-Situ STEM-EELS
3. 学会等名 Materials Research Society (MRS) Fall meeting 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木勲輝, 柴田基洋, 溝口照康
2. 発表標題 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 応用物理学会秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 菊政翔, 清原慎, 柴田基洋, 溝口照康
2. 発表標題 有機分子におけるスペクトル 物性相間
3. 学会等名 応用物理学会秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 鈴木勲輝, 柴田基洋, 溝口照康
2. 発表標題 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 日本セラミックス協会
4. 発表年 2021年

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

1. 発表者名 Teruyasu Mizoguchi
2. 発表標題 "Data-Driven Approach for Crystalline Interface and Spectrum"
3. 学会等名 3rd Functional Materials Symposium (FMS) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 "データ駆動型XANES解析"
3. 学会等名 Photon factory (PF)研究会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Teruyasu Mizoguchi
2. 発表標題 Keynote "Bridging atomic-resolution experiment and computation using machine learning"
3. 学会等名 Materials Research Meeting (MRM) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

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

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 "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 化学フェスタ2019 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 "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 JSTインテリジェント計測講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

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

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 (基調講演) "機械学習を活用した機能コア解析"
3. 学会等名 日本金属学会2019年度秋季大会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 中澤克昭, 安間伸一, 溝口照康
2. 発表標題 "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 顕微鏡学会学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 "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 顕微鏡学会学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

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

1. 発表者名 溝口照康
2. 発表標題 "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 表面真空学会実用顕微評価技術セミナー（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池野豪一, 宮本直幸
2. 発表標題 X線吸収スペクトルの機械学習（招待講演）
3. 学会等名 第22回XAFS討論会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 池野豪一
2. 発表標題 「機械学習による X 線吸収スペクトルの新規解析手法」(招待講演)
3. 学会等名 日本化学会第100春季年会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Ikeno
2. 発表標題 "DFT-CI calculations for RIXS and RIXS-MCD" (invited)
3. 学会等名 Frontier of theoretical approaches in x-ray spectroscopies (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計2件

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

1. 著者名 Teruyasu Mizoguchi	4. 発行年 2020年
2. 出版社 Royal Society of Chemistry publication	5. 総ページ数 20
3. 書名 Machine Learning in Chemistry: The Impact of Artificial Intelligence	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>東京大学生産技術研究所・ナノ物質設計工学研究室（溝口研究室）ホームページ http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp/ 大阪公立大学・工学研究科 計算材料科学研究グループ（池野研究室）ホームページ http://mtr1.osakafu-u.ac.jp/cms/ 東京大学生産技術研究所・ナノ物質設計工学研究室（溝口研究室）ホームページ http://www.edge.iis.u-tokyo.ac.jp/ 大阪公立大学・工学研究科 計算材料科学研究グループ（池野研究室）ホームページ http://mtr1.osakafu-u.ac.jp/cms/</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	池野 豪一 (Ikeno Hidekazu) (30584833)	大阪公立大学・大学院工学研究科 准教授 (24405)	

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			
スウェーデン	Linköping University			
オランダ	Utrecht University			