

令和 6 年 5 月 31 日現在

機関番号：13302
研究種目：基盤研究(C) (一般)
研究期間：2019～2023
課題番号：19K05029
研究課題名(和文) 分子理論・計算科学・データ科学の融合によるハマカー定数の自律型予測モデルの開発

研究課題名(英文) Automated prediction system of Hamaker constants based on molecular theory and simulations associated with data science

研究代表者
本郷 研太 (Hongo, Kenta)
北陸先端科学技術大学院大学・情報社会基盤研究センター・准教授

研究者番号：60405040
交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：ハマカー定数のハイスループット算定を実現するための機械学習モデルを構築した。各種フィンガープリントを説明変数として、ハマカー定数を目的変数として直接回帰する機械学習モデル(直接モデル)は、ブラックボックス的であり、その予測性能改善の方針を立てづらい。分子理論に基づき、ハマカー定数を構成する種々の分光パラメータの機械学習モデルに還元し、それらを統合することで、直接モデルの予測性能を改善できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義
近年、第一原理計算を活用した「マテリアルズ・インフォマティクス(MI)」研究が急速に進展している。MI研究の主流は機械学習に基づく物性予測・探索だが、対象物性は電子物性とフォノン物性に限定される。本研究は分子理論と第一原理計算を活用して、液体プロセス設計に重要なハマカー定数の算定にMIを導入する初の試みである。従来のMI研究を超え、材料プロセス設計分野にMI研究を拡げるといった波及をもたらす。

研究成果の概要(英文)：We developed a machine learning model to achieve high-throughput estimation of the Hamaker constant. Since "Direct" regression models taking various molecular fingerprints as explanatory variables and the Hamaker constant as the target variable are black boxes, it is difficult to establish how to improve their performance. Instead of relying on the direct approach, we focus on four spectroscopic parameters constituting the Hamaker constant based on the Lifshitz theory. These parameters can be evaluated by using a combination of first-principles simulations and several molecular theories. We constructed four machine learning models for these parameters and then integrated them. We have found that the resultant machine learning gives a better prediction than the direct model.

研究分野：材料工学

キーワード：濡れ性 ハマカー定数 リフシツ理論 密度汎関数法 機械学習 分子記述子

1. 研究開始当初の背景

ハマカー定数[1]は、産業応用上、濡れ性や自己組織化などの分散力支配現象を利用した液体プロセスにおける定量的設計指針を与える。しかしながら、網羅的なハマカー定数のデータベースは存在せず(既知データ数は百未満)、液体プロセス設計に向けた溶媒選定は経験と勘に頼らざるを得ず、プロセス設計の定量的最適化を阻害していた。ハマカー定数の算定自体は、リフシッツ理論に基づき、簡単な分光実験から容易に得られる。しかしながら、入手困難/高額な試薬、毒性や分解性のある試薬の分光実験は容易ではない。当該問題に対しては、計算科学的アプローチであれば、溶媒試薬の希少性・安全性・安定性などの実験に伴う諸問題を気にせず、系統的にハマカー定数の評価が可能である。

ハマカー定数は、分子間力の遠方での漸近的挙動から直接算定可能である。実際に、応募者は、分子間力の高精度再現に信頼性の高い第一原理拡散量子モンテカルロ(DMC)法によりハマカー定数評価スキームを確立していた[2]。しかしながら、DMC法は非常に計算コストの高い手法であり、ハマカー定数の網羅的算定には不向きである。応募者は、リフシッツ理論に基づくハマカー定数評価に必要となる巨視的物性量に対して、種々の分子理論を用いれば、より計算コストの低い従来第一原理計算手法で代替可能であることに気づいた。実際、従来法によるハマカー定数の算定値は、従来第一原理手法である密度汎函数(DFT)法を用いても、定量的にも十分な精度を実現することがわかった[3]。この分子理論に基づく計算科学的アプローチは、計算コストを大幅に削減するものの、依然として計算コストは高く、実用性の観点から、溶媒候補選定のための網羅的算定方法としては不適切であった。

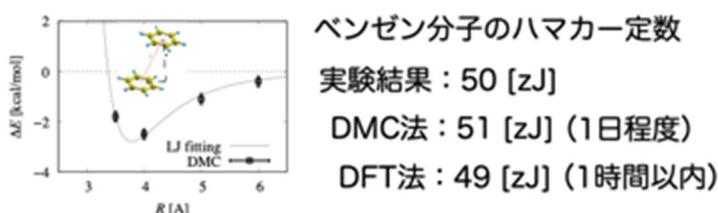


図 1. 計算科学的アプローチによるハマカー定数の算定例(ベンゼン分子)。ハマカー定数は、高精度第一原理計算手法である DMC 法により、ベンゼン二量体の相互作用エネルギーの分子間距離依存性の漸近的挙動から直接算定されるが、リフシッツ理論によれば、分子理論を活用することで、DFT 法による分光パラメータ評価から間接的に評価することができる。分子理論と DFT 計算の活用により、計算精度は同程度で計算コストの大幅な削減が可能となり、本研究の目的である機械学習モデル構築のための学習データの生成が可能となる。

2. 研究の目的

本研究は、ハマカー定数のハイスループット算定を実現する方策として、機械学習を用いたハマカー定数の予測モデルを構築し、実験に依らない溶媒スクリーニング技術を開発することを目的とする。近年、データ科学と材料科学の融合としてマテリアルズ・インフォマティクス(MI)研究が盛んに行われており、特に第一原理計算データを活用した機械学習モデルを利用した物質探索が行われている。データ生成の容易さから、対象物性は第一原理計算で直接算定可能な電子物性とフォノン物性が殆どである。本研究で対象とするハマカー定数は、実験データ自体が少なく、学習データとしては分子理論を活用した計算科学で生成した物性データを利用した。また、液体プロセスとして利用される溶媒種としては、機械学習モデルの汎化性能を担保するために、多様な化合物系(炭化水素/エーテル/エステル/ケトン/アルデヒド/ニトリル/アミン/アルコール)を対象とした(図 2)。

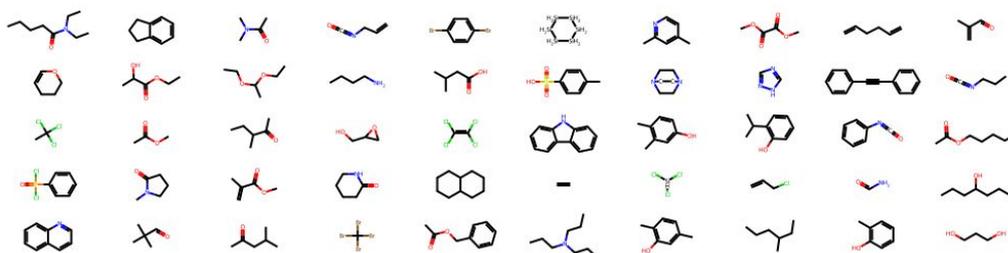


図 2. 本研究の機械学習の訓練データに含まれる化合物の例(50 個をランダムに表示)。C/N/O/S 元素からなる典型的な有機低分子 668 個を学習データとしている。

3. 研究の方法

DFT 計算により、対象分子の動的分極率 $\alpha(\omega)$ 、双極子モーメント μ 、IR スペクトル振動数 ω_{IR} 、モンテカルロ (MC) 計算により分子体積 V が得られる。これらの微視的物性量は、Lorentz-Lorentz の式/Onsager の式/Cauchy の式といった分子理論から、動的屈折率 $n(\omega)$ 、比誘電率 ϵ_r 、UV スペクトル振幅 C_{UV} / 振動数 ω_{UV} 、IR スペクトル振幅 C_{IR} といった巨視的物性量に変換され、誘電率 $\epsilon(i\omega)$ が得られる。リフシツ理論によれば、この誘電率の汎関数としてハマカー定数が得られる (図 3)。本研究は、こうして得られたハマカー定数を予測する機械学習モデルを構築する。当該機械学習のアルゴリズムとしては、カーネルリッジ (KR) 回帰、LASSO 回帰、エラスティックネット (EN) 回帰、サポートベクトル (SVR) 回帰、ランダムフォレスト (RF) 回帰、勾配ブースティング (LightGBM) 回帰を採用し、説明変数としては、種々のフィンガープリント記述子 (Morgan/RDKit/MACCS) を採用した。学習データの総数は七百分子程度で、量子化学計算パッケージ Gaussian16 を用いて、B3LYP/aug-cc-pVDZ 計算レベルで算定された結果である。

リフシツ理論：ハマカー定数は誘電率の汎関数

$$\epsilon(i\nu) = 1 + \frac{C_{\text{UV}}}{1 + (\nu/\omega_{\text{UV}})^2} + \frac{C_{\text{IR}}}{1 + (\nu/\omega_{\text{IR}})^2}$$

誘電率：分光パラメータの関数 → 分子理論と第一原理の融合で算出可能

- Lorentz-Lorentz の式 $\{\alpha(\omega), V\} \rightarrow n(\omega): \frac{n^2(\omega)-1}{n^2(\omega)+2} = \frac{2\pi\alpha(\omega)}{3V}$
- Onsager の式 $\{\mu, n(0), V\} \rightarrow \epsilon_r: \frac{(\epsilon_r - n^2)(2\epsilon_r + n^2)}{\epsilon_r(n^2 + 2)^2} = \frac{N_A\mu^2}{9\epsilon_0 k_B T V}$
- Cauchy の式 $\{\mu, n(0), \epsilon_r, V\} \rightarrow \{C_{\text{UV}}, \omega_{\text{UV}}, C_{\text{IR}}\}: n^2(\omega)-1 = \frac{(n^2(0)-1)\omega^2}{\omega_{\text{UV}}^2} + C_{\text{UV}} + C_{\text{IR}} + C_{\text{UV}} + 1 = \epsilon_r$

図 3. 本研究におけるハマカー定数の計算科学的算定スキーム。リフシツ理論によれば、ハマカー定数は誘電率の汎関数として定式化され、4 つの分光パラメータで記述される。これらの分光パラメータは、**DFT** 法に基づく双極子モーメント計算、**UV-vis** 計算、振動数計算から直接算定される物性量と各種分子理論を組み合わせることで算定可能である。

4. 研究成果

本研究で採用した各種機械学習モデルの予測性能の結果を図 4 に示す。これらの予測モデルの中で、決定係数最大の結果は、ランダムフォレストと RDKit 記述子を採用したモデルであり、 $R^2 = 0.75$ であった。この結果は、溶媒探索のハイスループットスクリーニングを目的とする、濡れ性や接着性の定量評価としては不十分な予測性能であり、より予測性能の高いモデルの構築が必要である。しかしながら、ハマカー定数を直接学習する機械学習では、モデル自体がブラックボックスとなっており、モデル解釈が困難であるため、その改善指針を立てることが難しい。本研究では、リフシツ理論に登場する 4 つの光学パラメータに着目し、それらの機械学習モデルへと還元することで、詳細な解析を行った。得られた研究成果については、現在、原著論文を執筆し、投稿に向けた最終調整を行っている。

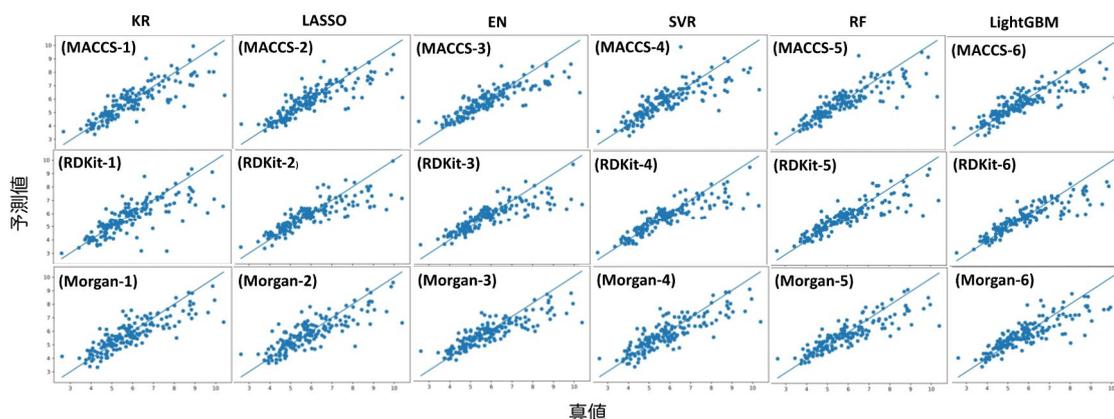


図 4. ハマカー定数を直接学習した機械学習モデルの予測値と真値の散布図：記述子は、(上段) **MACCS**、(中段) **RDKit**、(下段) **Morgan** であり、各番号の機械学習モデルは、**1/カーネルリッジ (KR) 回帰**、**2/LASSO 回帰**、**3/エラスティックネット (EN) 回帰**、**4/サポートベクトル回帰 (SVR)**、**5/ランダムフォレスト (RF) 回帰**、**6/勾配ブースティング (LightGBM) 回帰** である。

5. 参考文献

- [1] J.N.イスラエルアチヴィリ著「分子間力と表面力」(第3版)
- [2] K. Hongo *et al.*, J. Chem. Theory Comput. **3**, 5217 (2017).
- [3] H. Takagishi *et al.*, J. Phys. Chem. A **123**, 8726 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計39件（うち査読付論文 39件 / うち国際共著 22件 / うちオープンアクセス 34件）

1. 著者名 Utimula Keishu, Yano Masao, Kimoto Hiroyuki, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 6
2. 論文標題 Feature Space of XRD Patterns Constructed by an Autoencoder	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2200613 ~ 2200613
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202200613	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 Murono Takahiro, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 34
2. 論文標題 Ab-initio-based interface modeling and statistical analysis for estimate of the water contact angle on a metallic Cu(111) surface	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Surfaces and Interfaces	6. 最初と最後の頁 102342 ~ 102342
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.surfin.2022.102342	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 Qian Yixiao, Song Bin, Jin Junteng, Prayogo Genki I., Utimula Keishu, Nakano Kousuke, Maezono Ryo, Hongo Kenta, Zhao Gaoling	4. 巻 105
2. 論文標題 Ab initio molecular dynamics simulation of structural and elastic properties of SiO ₂ -P2O ₅ -Al ₂ O ₃ glass	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the American Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 6604 ~ 6615
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1111/jace.18614	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する
1. 著者名 Prayogo Genki Imam, Tirelli Andrea, Utimula Keishu, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Nakano Kousuke	4. 巻 62
2. 論文標題 SHRY: Application of Canonical Augmentation to the Atomic Substitution Problem	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Chemical Information and Modeling	6. 最初と最後の頁 2909 ~ 2915
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jcim.2c00389	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yoshimoto Yuki, Toma Takahiro, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 14
2. 論文標題 Computational Design to Suppress Thermal Runaway of Li-Ion Batteries via Atomic Substitutions to Cathode Materials	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 23355 ~ 23363
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.2c01607	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 Hermawan Angga, Hanindriyo Adie Tri, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 126
2. 論文標題 Impact of Surface Faceting on Gas Sensing Selectivity of NiO: Revealing the Adsorption Sites of Organic Vapors on the {111} Facet	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 8037 ~ 8046
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.2c00092	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ichibha Tom, Neufeld Verena A., Hongo Kenta, Maezono Ryo, Thom Alex J. W.	4. 巻 105
2. 論文標題 Making the most of data: Quantum Monte Carlo postanalysis revisited	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 045313:1-14
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.105.045313	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Nikaido Yutaka, Ichibha Tom, Hongo Kenta, Reboledo Fernando A., Kumar K. C. Hari, Mahadevan Priya, Maezono Ryo, Nakano Kousuke	4. 巻 126
2. 論文標題 Diffusion Monte Carlo Study on Relative Stabilities of Boron Nitride Polymorphs	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 6000 ~ 6007
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c10943	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Dahule Rohit, Singh Chetan C., Hongo Kenta, Maezono Ryo, Panda Emila	4. 巻 10
2. 論文標題 Anomalies in the bulk and surface electronic properties of SnS: effects of native defects	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 5514 ~ 5525
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1TC04738H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Peng, Hou Zhufeng, Baptista de Castro Pedro, Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo	4. 巻 126
2. 論文標題 High-pressure Mg-Sc-H phase diagram and its superconductivity from first-principles calculations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2747 ~ 2755
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c08743	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Hanindriyo Adie Tri, Yadav Amit Kumar Singh, Ichibha Tom, Maezono Ryo, Nakano Kousuke, Hongo Kenta	4. 巻 24
2. 論文標題 Diffusion Monte Carlo evaluation of disiloxane linearisation barrier	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3761 ~ 3769
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP01471D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Peng, Hou Zhufeng, de Castro Pedro Baptista, Nakano Kousuke, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 5
2. 論文標題 The Systematic Study on the Stability and Superconductivity of Y Mg H Compounds under High Pressure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2100364 ~ 2100364
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202100364	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Dahule Rohit, Singh Chetan C., Hongo Kenta, Maezono Ryo, Panda Emila	4. 巻 10
2. 論文標題 Anomalies in the bulk and surface electronic properties of SnS: effects of native defects	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 5514 ~ 5525
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1TC04738H	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Peng, Hou Zhufeng, Baptista de Castro Pedro, Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo	4. 巻 126
2. 論文標題 High-Pressure Mg?Sc?H Phase Diagram and Its Superconductivity from First-Principles Calculations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 2747 ~ 2755
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c08743	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Hanindriyo Adie Tri, Yadav Amit Kumar Singh, Ichibha Tom, Maezono Ryo, Nakano Kousuke, Hongo Kenta	4. 巻 24
2. 論文標題 Diffusion Monte Carlo evaluation of disiloxane linearisation barrier	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 3761 ~ 3769
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CP01471D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Ichibha Tom, Zhang Yunwei, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Reboredo Fernando A.	4. 巻 104
2. 論文標題 Candidate structure for the H ₂ -PRE phase of solid hydrogen	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214111:1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.104.214111	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Peng, Hou Zhufeng, de Castro Pedro Baptista, Nakano Kousuke, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 5
2. 論文標題 The Systematic Study on the Stability and Superconductivity of Y Mg H Compounds under High Pressure	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2100364:1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202100364	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Song Peng, Hou Zhufeng, Castro Pedro Baptista de, Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Takano Yoshihiko, Maezono Ryo	4. 巻 33
2. 論文標題 High Tc superconducting hydrides formed by the cage structures LaH ₂₄ and YH ₂₄ as basic blocks	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 9501 ~ 9507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c02371	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Kitagawa Yuuki, Ueda Jumpei, Fujii Kotaro, Yashima Masatomo, Funahashi Shiro, Nakanishi Takayuki, Takeda Takashi, Hirotsuki Naoto, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Tanabe Setsuhisa	4. 巻 33
2. 論文標題 Site-selective Eu ³⁺ Luminescence in Monoclinic Phase of YSiO ₂ N	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 8873 ~ 8885
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c03139	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 Prayogo Genki I., Shin Hyeondeok, Benali Anouar, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 6
2. 論文標題 Importance of Van der Waals Interactions in Hydrogen Adsorption on a Silicon-carbide Nanotube Revisited with vdW-DFT and Quantum Monte Carlo	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 24630 ~ 24636
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.1c03318	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Yoshio Satoshi, Hongo Kenta, Nakano Kousuke, Maezono Ryo	4. 巻 125
2. 論文標題 High-throughput evaluation of discharge profiles in LiNi1-xXxO2 by ab initio calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14517 ~ 14524
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.0c11589	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Zhang Jiaqi, Ishizuka Keisuke, Tomitori Masahiko, Arai Toyoko, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Tosatti Erio, Oshima Yoshifumi	4. 巻 21
2. 論文標題 Peculiar Atomic Bond Nature in Platinum Monatomic Chains	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 3922 ~ 3928
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.1c00564	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 Dahule Rohit, Raghav Abhishek, Hanindriyo Adie Tri, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Panda Emila	4. 巻 4
2. 論文標題 Surface study of Cu2SnS3 using first-principles density functional theory	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2000315:1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202000315	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Ghaffar Abdul, Ganeriwala Mohit D., Hongo Kenta, Maezono Ryo, Mohapatra Nihar R.	4. 巻 6
2. 論文標題 Insights into the Mechanical and Electrical Properties of a Metal/Phosphorene Interface: An Ab Initio Study with a Wide Range of Metals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 7795 ~ 7803
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c06255	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Nikaido Yutaka, Ichihara Tom, Nakano Kousuke, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 11
2. 論文標題 GaN bandgap bias caused by semi-core treatment in pseudopotentials analyzed by the diffusion Monte Carlo method	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 025225 ~ 025225
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0035047	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 Yoshida Tomohiro, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 4
2. 論文標題 Exploring Heat-Shielding Nanoparticle-Based Materials via First-Principles Calculations and Transfer Learning	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Nano Materials	6. 最初と最後の頁 1932 ~ 1939
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsnm.0c03298	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 Gu Zhanyong, Cui Zhitao, Wang Zijing, Sinkou Qin Ken, Asakura Yusuke, Hasegawa Takuya, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 393
2. 論文標題 Intrinsic carbon-doping induced synthesis of oxygen vacancies-mediated TiO ₂ nanocrystals: Enhanced photocatalytic NO removal performance and mechanism	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Catalysis	6. 最初と最後の頁 179 ~ 189
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcat.2020.11.025	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 Pavan Kumar Naik Sugali, Iwasa Yuki, Kuramochi Kenta, Ichihara Yoshihisa, Kishio Kohji, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Nishio Taichiro, Ogino Hiraku	4. 巻 60
2. 論文標題 Synthesis, Electronic Structure, and Physical Properties of Layered Oxypnictides Sr ₂ ScCrAsO ₃ and Ba ₃ Sc ₂ Cr ₂ As ₂ O ₅	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 1930 ~ 1936
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.0c03404	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 Hermawan Angga, Hanindriyo Adie Tri, Ramadhan Erland Rachmad, Asakura Yusuke, Hasegawa Takuya, Hongo Kenta, Inada Miki, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 7
2. 論文標題 Octahedral morphology of NiO with (111) facet synthesized from the transformation of NiOHCl for the NOx detection and degradation: experiment and DFT calculation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry Frontiers	6. 最初と最後の頁 3431 ~ 3442
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0QI00682C	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 Oshima Takayoshi, Ichibha Tom, Oqmhula Kenji, Hibino Keisuke, Mogi Hiroto, Yamashita Shunsuke, Fujii Kotaro, Miseki Yugo, Hongo Kenta, Lu Daling, Maezono Ryo, Sayama Kazuhiro, Yashima Masatomo, Kimoto Koji, Kato Hideki, Kakahana Masato, Kageyama Hiroshi, Maeda Kazuhiko	4. 巻 59
2. 論文標題 Two Dimensional Perovskite Oxynitride K ₂ LaTa ₂ O ₆ N with an H ⁺ /K ⁺ Exchangeability in Aqueous Solution Forming a Stable Photocatalyst for Visible Light H ₂ Evolution	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 9736 ~ 9743
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202002534	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 Nakamura Masashi, Oqmhula Kenji, Utimula Keishu, Eguchi Miharuru, Oka Kengo, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Maeda Kazuhiko	4. 巻 15
2. 論文標題 Light Absorption Properties and Electronic Band Structures of Lead Vanadium Oxyhalide Apatites Pb ₅ (VO ₄) ₃ X (X=F, Cl, Br, I)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry - An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 540 ~ 545
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201901692	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 Gu Zhanyong, Cui Zhitao, Wang Zijiang, Qin Ken Sinkou, Asakura Yusuke, Hasegawa Takuya, Tsukuda Satoshi, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Yin Shu	4. 巻 279
2. 論文標題 Carbon vacancies and hydroxyls in graphitic carbon nitride: Promoted photocatalytic NO removal activity and mechanism	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Catalysis B: Environmental	6. 最初と最後の頁 119376 ~ 119376
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apcatb.2020.119376	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 Hasegawa Takuya, Shigee Atsushi, Nishiwaki Yoshinori, Nagasako Makoto, Hanindriyo Adie Tri, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Ueda Tadaharu, Yin Shu	4. 巻 56
2. 論文標題 New layered perovskite family built from [CeTa2O7]- layers: coloring mechanism from unique multi-transitions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 8591 ~ 8594
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0CC03466E	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 Oqmhula Kenji, Hongo Kenta, Maezono Ryo, Ichibha Tom	4. 巻 5
2. 論文標題 Ab Initio Evaluation of Complexation Energies for Cyclodextrin-Drug Inclusion Complexes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 19371 ~ 19376
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c01059	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 Yoshida Tomohiro, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 5
2. 論文標題 Synergy of Binary Substitutions for Improving the Cycle Performance in LiNiO2 Revealed by Ab Initio Materials Informatics	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 13403 ~ 13408
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.0c01649	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 Utimula Keishu, Hunkao Rutchapon, Yano Masao, Kimoto Hiroyuki, Hongo Kenta, Kawaguchi Shogo, Suwana Sujin, Maezono Ryo	4. 巻 3
2. 論文標題 Machine Learning Clustering Technique Applied to Powder X Ray Diffraction Patterns to Distinguish Compositions of ThMn12 Type Alloys	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Theory and Simulations	6. 最初と最後の頁 2000039 ~ 2000039
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202000039	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Toma Takahiro, Maezono Ryo, Hongo Kenta	4. 巻 3
2. 論文標題 Electrochemical Properties and Crystal Structure of Li+/H+ Cation-Exchanged LiNiO2	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 ACS Applied Energy Materials	6. 最初と最後の頁 4078 ~ 4087
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsaem.0c00602	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 Hanindriyo Adie Tri, Sridar Soumya, Kumar K.C. Hari, Hongo Kenta, Maezono Ryo	4. 巻 180
2. 論文標題 Ab initio thermodynamic properties of certain compounds in Nd-Fe-B system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109696 ~ 109696
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2020.109696	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

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

〔学会発表〕 計19件 (うち招待講演 15件 / うち国際学会 10件)

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 データ駆動型アプローチに基づく物質探索とキャラクタリゼーション
3. 学会等名 第71回高分子討論会 (招待講演)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 計算材料科学と材料情報学による材料設計
3. 学会等名 JST-CREST「革新的触媒」触媒インフォマティクス研究会 2021, オンライン(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 XRD スペクトルピークの機械学習的識別
3. 学会等名 新物質研究会 2022~ハイエントロピー効果や機械学習を取り入れた物質開発~(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 計算材料科学からマテリアルズ・インフォマティクスへの研究展開
3. 学会等名 第19回凝縮系理論コロキウム(招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 機械学習によるXRDパターン認識
3. 学会等名 日本セラミックス協会 2022年 年会, オンライン
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Autoencoder-based feature space of XRD peak patterns
3. 学会等名 APS March Meeting 2022,online (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 First-principles modeling of water-metal wettability
3. 学会等名 ACS March Meeting 2022,online (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Computational materials design from materials simulations to informatics
3. 学会等名 2nd International Conference on Materials Genome, ACCMS Theme Meeting,ハイブリッド(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 Ab initio materials informatics approach to materials design and characterization
3. 学会等名 JAIST創立30周年記念 マテリアルズインフォマティクス国際シンポジウム(国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 材料情報学的アプローチによる物質設計
3. 学会等名 日本物理学会 第76回年次大会 (2021年) (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 Computational materials design based on materials simulations and informatics
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会(2021) アジア国際シンポジウム (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

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

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

1. 発表者名 Kenta Hongo
2. 発表標題 Data-driven approach to computational materials design
3. 学会等名 20th International Union of Materials Research Societies International Conference in Asia (IUMRS-ICA) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

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

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

1. 発表者名 本郷研太
2. 発表標題 Computational materials design using materials simulations and informatics
3. 学会等名 日本化学会 第100春季年会 アジア国際シンポジウム(2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

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

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

〔図書〕 計3件

1. 著者名 本郷研太 他	4. 発行年 2022年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 738
3. 書名 二次電池の材料に関する最新技術開発【NO. 2163】	

1. 著者名 本郷研太 他	4. 発行年 2022年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 484
3. 書名 量子技術の実用化と研究開発業務への導入方法【No. 2183】	

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

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科本郷研究室ホームページ http://www.jaist.ac.jp/is/labs/maezono-lab/homepage2019/_source_rst/00Member.html#hongo-group 北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科本郷研究室ホームページ http://www.jaist.ac.jp/is/labs/maezono-lab/homepage2019/_source_rst/00Member.html#hongo-group</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

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