

# 機械学習を用いた点欠陥解析と 表面物性予測

清 原 慎\*

## 1. 研究背景

実用に供される材料中には、無数の格子欠陥が含まれている。格子欠陥とは、母相(以降バルクと呼称)の周期性に従わない領域であり、点欠陥に代表されるように原子一つレベルのものから、表面のように nm~m スケールのものでさまざまな種類が存在する。それらに共通する特徴として、バルクとは異なる原子・電子状態を有することが挙げられる。この特異的な原子・電子状態は、時にバルクが持ちえない機能を材料に付与する。

本稿では、筆者の最新の結果である、1. アモルファス中の点欠陥の解析と 2. 酸化物表面の物性予測に関する研究を紹介する。

## 2. アモルファス中の点欠陥の解析

### (1) 研究背景

酸化物材料において、酸素空孔は非常にありふれた点欠陥であり、材料の機能に大きな影響を与えることが知られている。多くの酸化物の中性酸素空孔では、電子が空孔に局在した電子構造をとることが知られている<sup>(1)-(13)</sup>。しかし、いくつかの酸化物においては結晶構造や構成するカチオンに由来して電子が結晶全体に広がったような電子状態をとるという報告も存在する<sup>(5)(6)(11)</sup>。このように結晶に対してはこれまで多くの研究が行われてきており、理解もかなり進んでいる。一方で、電子材料や光学材料として非常に重要である酸化物アモルファス中の酸素空孔に関する研究は数が限られている。しかし、これらの限られた研究によりアモルファス中

では酸素空孔が特異的なふるまいをすることが示唆されている。例えば、アモルファス  $\text{Al}_2\text{O}_3$  中の酸素空孔には、最安定状態と準安定状態が存在し、これらの遷移エネルギーが非常に小さいことがわかっている<sup>(14)</sup>。

本研究では、第一原理計算と機械学習を用いて、アモルファス  $\text{SnO}_2$  中の酸素空孔の解析を行った。結晶のスズ酸化物では  $\text{SnO}(\text{Sn}^{+2})$  と  $\text{SnO}_2(\text{Sn}^{+4})$  が一般的であり、 $\text{SnO}$  中の Sn は Sn 5p 軌道に由来する孤立電子対(lone-pair)を有する。 $\text{SnO}_2$  に中性酸素空孔を導入した場合、残された 2 つの電子が Sn まわりに局在して lone-pair 構造をとることが期待されるが、そのようなふるまいは確認されていない<sup>(2)</sup>。

### (2) アモルファス $\text{SnO}_2$ の酸素空孔の第一原理計算

108個のスズ原子、216の酸素原子を含むセルに対して、経験的なポテンシャルを用いた分子動力学計算を行った。急冷後の構造モデルを第一原理計算により構造緩和を行った。結晶の  $\text{SnO} \cdot \text{SnO}_2$  の Sn の配位数は、それぞれ 4 個と 6 個である。一方で、今回構築したアモルファス  $\text{SnO}_2$  の Sn 配位数は、5 個(5.5%)、6 個(80.5%)、7 個(14%)であった。

構築したアモルファス  $\text{SnO}_2$  モデル内の 216 個のすべての酸素サイトに対して、酸素空孔を導入し第一原理計算による構造緩和計算を行った。詳細な計算条件は文献(15)を参照されたい。計算が収束した 112 サイトに対して(結果的に古典的な取り扱いと量子力学的な取り扱いで構造が大きく変わらないサイトに対して)、electron localization function<sup>(16)</sup>を解析した結果の中で 2 つの典型的な電子状態を図 1(a, b)に示す。酸素空孔の有無にかかわらず酸素には電子が局在しているが、酸素空孔を導入したことにより、Sn に電子が異方的に局在していることがわかる(図 1(a)白矢印)。この異方

\* 東北大学金属材料研究所; 講師(〒980-0814 仙台市青葉区片平 2-1-1)

Point Defects Analysis and Surface Property Prediction by Machine Learning; Shin Kiyohara (Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai)

Keywords: *point defects, amorphous, surface, first-principles calculation, machine learning*

2024年12月2日受理[doi:10.2320/materia.64.184]

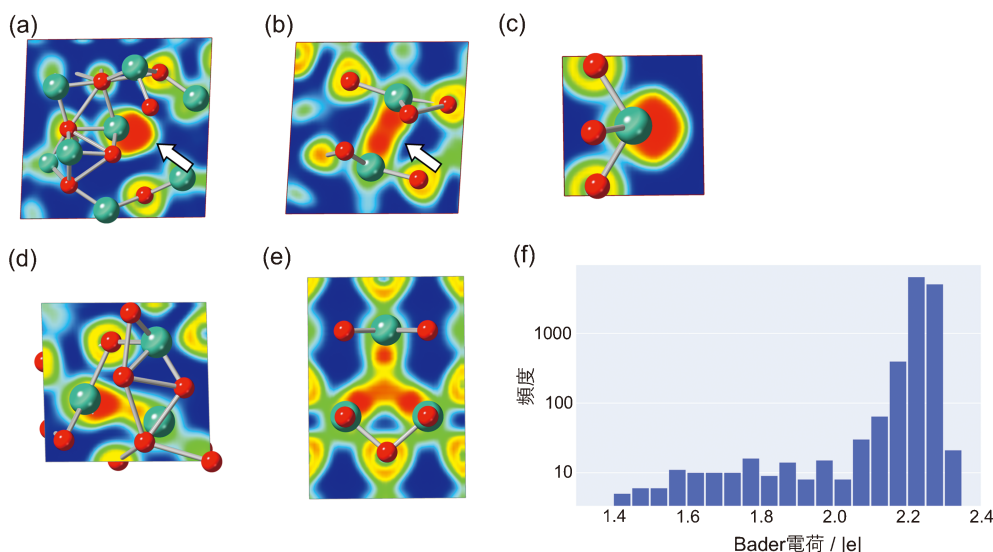


図1 酸素空孔周辺の Electron localization function と Bader 電荷分布. (a) アモルファス  $\text{SnO}_2$  における lone-pair 構造, (b) アモルファス  $\text{SnO}_2$  における Sn-Sn の dimer 構造, (c) 結晶  $\text{SnO}$  における lone-pair 構造, (d) 結晶  $\text{SnO}_2$  における酸素空孔, (e) アモルファス  $\text{SnO}_2$  における lone-pair 構造と dimer 構造の中間構造. 緑と赤の球はそれぞれ Sn 原子と O 原子を示す. 等値面は0.65に設定されている. (f) アモルファス  $\text{SnO}_2$  の112酸素空孔モデルにおける Sn の Bader 電荷分布. (オンラインカラー)

的な局在状態は  $\text{SnO}$  中の lone-pair 電子構造に非常に似ていることがわかる(図1(c)). また, 図1(b)のように2つの Sn を橋渡しするように電子が局在している状態も見られた. このような dimer 構造はアモルファス  $\text{SiO}_2$  や  $\text{GeO}_2$  でも報告されている<sup>(17)-(19)</sup>. 一方で, 酸素空孔を導入した結晶  $\text{SnO}_2$  では3つの Sn 原子にまたがるように電子が局在する振る舞いが見られた(図1(e)).

続いて, 局在した電子量を定量化するために Bader 電荷<sup>(20)-(23)</sup>を計算した(図1(f)). 酸素空孔から遠い Sn の Bader 電荷が  $2.1-2.3|e|$  である一方, lone-pair 構造を有している Sn の Bader 電荷は  $1.4|e|$  であった. また dimer 構造を有する Sn の Bader 電荷は  $1.8|e|$  であった. 一方, 図1(f)から  $1.6|e|$  ほどの Bader 電荷を有する Sn があることがわかる. この Sn まわりの電子構造を図1(e)に示す. この電子構造は, lone-pair と dimer 構造の中間のような電子構造をしていることがわかる. 以上のことから, Bader 電荷が電子状態の識別するうえで有効な指標であることがわかった.

### (3) 機械学習を用いた原子構造-電子構造相関性解析

2.(2)節での解析により Bader 電荷と電子構造には相関性があることがわかった. 続いて, 機械学習を用いて原子構造-電子構造相関性解析を行った.

原子構造を記述子化(ベクトル化)するために, ここでは smooth overlap of atom positions(SOAP)<sup>(24)</sup>を用いた. 結晶  $\text{SnO} \cdot \text{SnO}_2$ , 酸素空孔を導入したアモルファス  $\text{SnO}_2$  の Sn 周りの原子構造から SOAP を計算し, さらに t-SNE<sup>(25)</sup>により2次元に次元圧縮した. 詳細なプロセスは文献(15)を参照されたい.

図2(a)に可視化した SOAP と Bader 電荷を示す. この図から Bader 電荷が小さな点(小さな Bader 電荷をもつ Sn 周

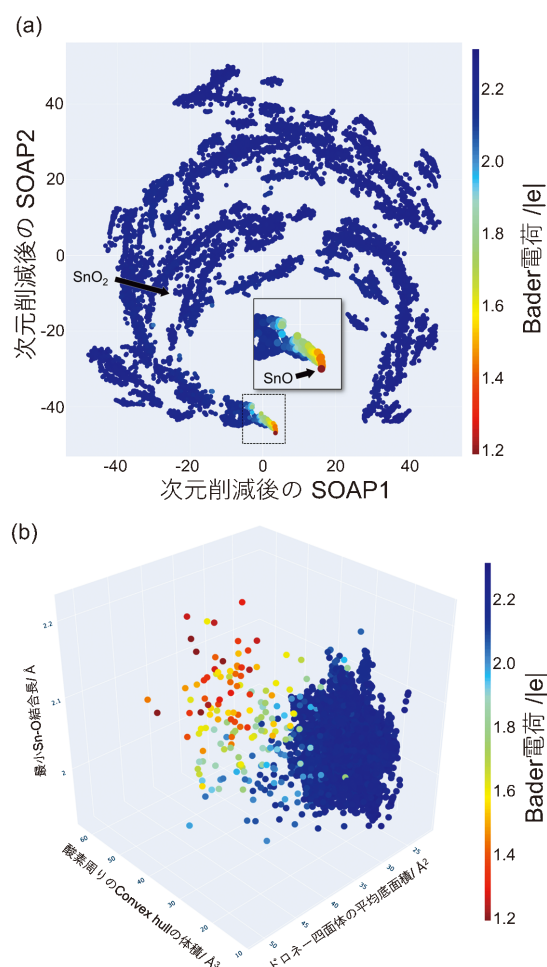


図2 原子構造-Bader 電荷の分布. (a) 次元削減後の SOAP と Bader 電荷の分布 (b) 3種類の構造記述子と Bader 電荷の分布. (オンラインカラー)

りの原子構造)が同じ場所に集まっていることがわかる。さらに、SnO から遠ざかるにつれて、点の色は赤から青へと徐々に変化しており、Bader 電荷が大きくなっている。この特徴は、局所的な原子構造を記述する SOAP が、Bader 電荷とよく相関していることを示している。

SOAP が Bader 電荷と相関していることから、局所的な原子構造と Bader 電荷が相関していると考えられる。しかし、どのような局所構造、例えば結合長と相関しているかを SOAP から直接解析することは困難である。そこで、解釈しやすい原子構造情報を用いてランダムフォレスト回帰を行い、Bader 電荷がどのような原子構造情報と相関しているかを解析した。その結果、「酸素周りの Convex hull の体積」、「最小 Sn-O 結合長」、「ドロネー四面体の平均底面積」が Bader 電荷と相関していることが分かった(図 2(b))。「酸素周りの Convex hull の体積」と「ドロネー四面体の平均底面積」が大きいほど Bader 電荷が小さいということから、Sn まわりの空間が大きいと電子が局在しやすいと解釈することができる。また、電子が局在すると Sn-O の距離が大きくなるが、これはまさに「最小 Sn-O 結合長」として現れている。

### 3. 酸化物表面の物性予測

#### (1) 研究背景

非金属固体のイオン化ポテンシャル(IP)と電子親和力(EA)は、それぞれ真空準位を基準とした価電子帯最大(VBM)と伝導帯最小(CBM)のエネルギー準位として定義される。これらは、電子の放出や受容のしやすさだけでなく、物質の相対的なバンド位置に関する情報も示している。光触媒、光起電力、その他あらゆるヘテロ構造電子・光電子デバイスを含む表面やヘテロ界面を利用した材料やデバイスの理解、設計、開発において、このようなバンドの相対的な位置関係は極めて重要な役割を担っている<sup>(26)-(31)</sup>。

現在では、第一原理計算により高精度に IP・EA が定量化可能である。しかし、IP と EA の正確なハイスループットな計算は、膨大な計算コストを必要とする。この理由として以下の 2 点が挙げられる。標準的な交換相関汎関数を用いた密度汎関数計算では、価電子帯上端(VBM)や伝導帯下端(CBM)の位置に大きな誤差が生じるため、ハイブリッド汎関数や多体摂動論に基づく GW 近似など、より精巧で計算量の多いアプローチを用いる必要がある<sup>(32)-(39)</sup>。さらに、表面はミラー指数であらわされるように様々な自由度、結果として様々な原子構造を有する。そこで本研究では、機械学習を用いて様々な酸化物の表面における IP と EA を予測する手法を構築した。

#### (2) 酸化物表面のハイスループット計算

完全に占有されている、もしくは空の状態である原子軌道から構成された127の非金属二元系酸化物を対象として(41種類の元素が含まれる)、日沼らが開発した表面作成手法<sup>(40)</sup>を用いて2,195種類の非極性表面を構築した。これらの表面

スラブモデルに対して第一原理計算を用いて構造緩和計算を行った。さらにそれぞれに対応するバルク構造に対して、比較的計算コストかつバンドギャップが正確に計算可能な Non-self-consistent hybrid functional 法<sup>(41)(42)</sup>を用いて VBM・CBM を計算した。最後に、以下の式に従い、IP と EA を算出した。

$$IP = (\epsilon_{\text{vac}}^{\text{surface}} - \epsilon_{\text{ref}}^{\text{surface, far}}) - (\epsilon_{\text{VBM}}^{\text{bulk}} - \epsilon_{\text{ref}}^{\text{bulk}}) \quad (1)$$

$$EA = (\epsilon_{\text{vac}}^{\text{surface}} - \epsilon_{\text{ref}}^{\text{surface, far}}) - (\epsilon_{\text{CBM}}^{\text{bulk}} - \epsilon_{\text{ref}}^{\text{bulk}}) \quad (2)$$

$\epsilon_{\text{vac}}^{\text{surface}}$  と  $\epsilon_{\text{ref}}^{\text{surface, far}}$  はそれぞれ真空レベルと表面から遠いバルク領域の参照静電レベルである。 $\epsilon_{\text{VBM}}^{\text{bulk}}$ ,  $\epsilon_{\text{CBM}}^{\text{bulk}}$ ,  $\epsilon_{\text{ref}}^{\text{bulk}}$  はそれぞれバルクの VBM, CBM, 参照静電レベルである。スラブモデル・バルクモデルともに参照レベルには酸素のコアポテンシャルを使用した。詳細な計算条件は文献(43)を参照されたい。

対象とした2,195個の表面の IP・EA を図 3(a)に占めす。図 3(a)の横軸は構成するカチオンを表しており、同じカチオンであっても、いくつかの多形の様々な表面を含んでいる。IP と EA の値はカチオンの種類に大きく依存するが、結晶と表面の原子構造が多様であるため、平均値から $\pm 1$  eV のずれが生じる。図 3(b)に実験値と本研究の計算値を比較した結果を示す。実験的な IP と EA は、表面の詳細な原子構造や実験条件にかなり敏感であるが、実験と理論との間には、全体として十分な一致が認められる。これだけ膨大かつ正確な表面のデータベースは本研究が世界初である。

#### (3) ニューラルネットワークを用いた IP・EA の予測

構築したデータベースを基に、ニューラルネットワークによる学習を行った。原子情報の記述子には、2.(3)節と同様に SOAP を使用した。対象とする系に複数の元素が含まれる場合、一般的にはそれぞれの元素のペアで SOAP (ここでは element-pair SOAP と呼ぶ)を計算し、それらの連結を考える。しかし本研究では、41種類の元素を考慮するため、SOAP は数万次元に達する。記述子の次元数を減らし、過学習を防ぐため、SOAP を計算する際に40種のカチオンを同一種として扱い、酸素をアニオンとして扱った結果、図 4(a)の上部に示すように、カチオン-カチオン、カチオン-アニオン、アニオン-アニオンの組み合わせの3組の SOAP (以下、cation-anion-pair SOAP と呼ぶ)を考慮した。スラブ内の各原子サイトについて cation-anion-pair SOAP を計算後、それらの平均をニューラルネットワークの入力とした(以降 Simple-NN と呼称する)。この際、表面近傍の情報が IP と EA にとって重要であると仮定し、日沼らにより開発された手法<sup>(44)</sup>により特定した表面原子の SOAP の平均を用いた。

結果、IP・EA 共に高精度に予測することができた(IP:  $R^2: 0.90$ , RMSE: 0.31 eV, MAE: 0.22 eV, EA:  $R^2: 0.90$ , RMSE: 0.32 eV, MAE: 0.23 eV)。図 3(a)に示すように、構成カチオンにより IP・EA は大きく変化する。この誤差は同じ物質内の異なる面方位の IP・EA 差を大まかに判断可能な精度である。それぞれの cation-anion-pair SOAP を



図3 第一原理計算による二元系酸化物のIP・EAの分布と実験との比較. (a) 第一原理計算による二元系酸化物のIP・EAの分布 (b) 実験値との比較. オレンジと緑の実線は、それぞれ実験的に報告されたIPとEAであり、破線は実験的なIPまたはEAと実験的なバンドギャップを組み合わせ導出したものである。(オンラインカラー)

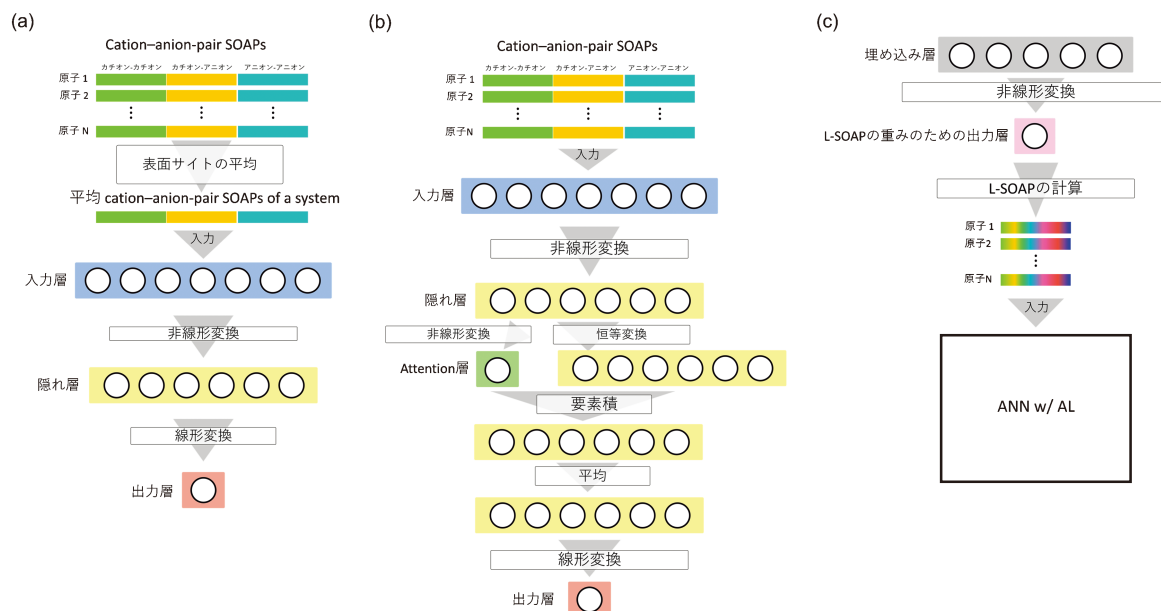


図4 ニューラルネットワークの構造. (a) Simple-ANN, (b) ANN w/AL, (c) ANN w/L-SOAP. (オンラインカラー)

用いたため明示的にはカチオンの種類に関する情報は考慮できていないにもかかわらず高精度な予測ができたことは、カチオンの違いを構造から学習したと推察される。

Cation-anion-pair SOAPを使用した Simple-NN は高精度の性能を示したが、一方で、表面の原子を指定する必要がある、任意性が残る。そこでこれらを自動的に考慮するため

に Attention 層<sup>(45)(46)</sup>を考慮したニューラルネットワークを構築した(図4(b), 以降 ANN w/AL と呼称する)。ANN w/AL では、Simple-NN とは異なり、スラブモデルすべての原子の SOAP を入力とする。ニューラルネットワークによる非線形変換を行いつつ、Attention 層で、各原子の重みを計算し、最終層直前で重み平均をとる(図4(b))。結果、

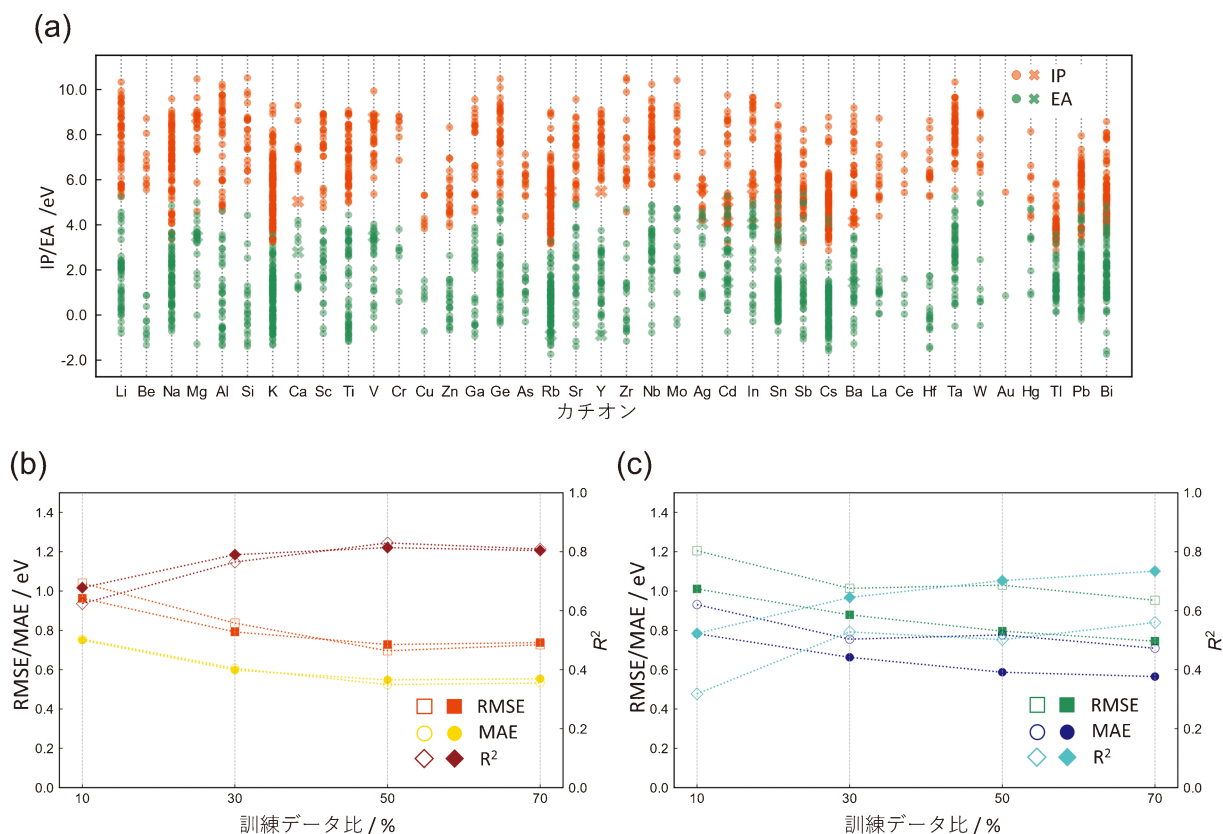


図5 第一原理計算による三元系酸化物のIP・EAの分布と転移学習の結果. (a) IP・EAの分布 (b, c) IP・EAに対する転移学習の結果. (オンラインカラー)

Simple-NNとは異なり、表面の原子であるという情報を与えていないにもかかわらず、Simple-NNよりも予測精度が向上した(IP:  $R^2$ : 0.90, RMSE: 0.29 eV, MAE: 0.21 eV, EA:  $R^2$ : 0.93, RMSE: 0.27 eV, MAE: 0.19 eV)。

続いて、718個の三元系酸化物表面(図5(a))に対して構築した予測モデルを転移学習した。その結果を(図5(b, c))に示す。横軸は転移学習の学習に用いた三元系酸化物の比率(718個に対する)を表している。この結果から、IPに関しては、70%では $R^2$ が0.8に達することがわかる(図5(b)白抜きマーカー)。一方EAでは、70%のデータを用いても $R^2$ が0.6を下回った(図5(b)塗りつぶしマーカー)。EAでの予測精度があまり向上しない原因として、今回使用したcation-anion-pair SOAPでは、同じスラブ内のカチオンを区別できないため、カチオン間の相互作用を考慮できないことが原因と考えられる。

そこで本研究では、新たなSOAPを開発した(L-SOAPと呼称)。通常、SOAPを計算する際、原子配位を球(三次元のガウス関数)の和として表現する。本研究では、原子種に依存した重みガウス関数にかけ合わせることで、原子配位に元素種の情報を反映させた。さらにこの過程をANN w/ALにつなげ、一つのネットワークの見なすことで、上述の重みを自動的に学習する手法を考案した(ANN w/L-SOAP)。

まずANN w/L-SOAPを二元系酸化物に適用した。その結果、cation-anion-pair SOAPの三分の一の次元数にもか

かわらず、ANN w/ALと同程度の予測精度を示した。さらに本手法を三元系酸化物に適用した結果、IPに関しては、cation-anion-pair SOAPを使用したANN w/ALと同程度の予測精度を示した。IPはVBM由来の値であり、酸化物のVBMは一般に酸素の2p軌道由来である。ANN w/L-SOAPではcation-anion-pair SOAPと異なり酸素の情報を明示的に与えていない。それにもかかわらず、L-SOAPはcation-anion-pair SOAPと同程度の予測精度を示した。またEAでは、L-SOAPは10%のデータ使用率で、cation-anion-pair SOAPの70%のデータ使用率結果と同程度の予測精度であった。また、70%のデータを使用することで $R^2$ は0.75程度に達した。これは、L-SOAPがカチオン間の相互作用を自動的に学習したことを示している。今後は、より精度を増す手段の一つとして、結晶の異方性や電子状態の情報を追加した予測を行う予定である。

#### 4. 結 論

本稿では、第一原理計算と機械学習を用いて、アモルファス中の空孔解析および表面物性予測に関する研究を紹介した。機械学習を格子欠陥解析に適用するには、時に、バルクと異なる要素を考慮する必要がある。しかし、適切な処理や条件を追加することで、同様の手法はバルク材料と同等に強力なアプローチとなる。今後、格子欠陥解析における機械学

習の重要性はますます高まると期待される。

## 文 献

- (1) W.-J. Yin, S.-H. Wei, M. M. Al-Jassim and Y. Yan: Appl. Phys. Lett., **99**(2011), 142109.
- (2) J. Buckeridge, C. R. A. Catlow, M. R. Farrow, A. J. Logsdail, D. O. Scanlon, T. W. Keal, P. Sherwood, S. M. Woodley, A. A. Sokol and A. Walsh: Phys. Rev. Mater., **2**(2018), 054604.
- (3) C. Linderälv, A. Lindman and P. Erhart: J. Phys. Chem. Lett., **9**(2018), 222–228.
- (4) P. Deák, B. Aradi and T. Frauenheim: Phys. Rev. B, **86**(2012), 195206.
- (5) N. Tsunoda, Y. Kumagai and F. Oba: Phys. Rev. Mater., **3**(2019), 114602.
- (6) D. Muñoz Ramo, J. L. Gavartin, A. L. Shluger and G. Bersuker: Phys. Rev. B, **75**(2007), 205336.
- (7) M. Gerosa, C. E. Bottani, L. Caramella, G. Onida, C. Di Valentin and G. Pacchioni: J. Chem. Phys., **143**(2015), 134702.
- (8) P. Rinke, A. Schleife, E. Kioupakis, A. Janotti, C. Rödl, F. Bechstedt, M. Scheffler and C. G. Van De Walle: Phys. Rev. Lett., **108**(2012), 126404.
- (9) M. Burbano, D. O. Scanlon and G. W. Watson: J. Am. Chem. Soc., **133**(2011), 15065–15072.
- (10) N. Tsunoda, Y. Kumagai, M. Araki and F. Oba: Phys. Rev. B, **99**(2019), 060103.
- (11) A. Janotti, J. B. Varley, M. Choi and C. G. Van De Walle: Phys. Rev. B, **90**(2014), 085202.
- (12) Y. Kumagai, N. Tsunoda, A. Takahashi and F. Oba: Phys. Rev. Mater., **5**(2021), 123803.
- (13) F. Oba and Y. Kumagai: Appl. Phys. Express, **11**(2018), 060101.
- (14) H. Momida and T. Ohno: Appl. Phys. Lett., **117**(2020), 103504.
- (15) S. Kiyohara, D. Mora-Fonz, A. Shluger, Y. Kumagai and F. Oba: J. Phys. Chem. C, **126**(2022), 18833–18838.
- (16) B. Silvi and A. Savin: Nature, **371**(1994), 683–686.
- (17) E. P. O'Reilly and J. Robertson: Phys. Rev. B, **27**(1983), 3780–3795.
- (18) H. Imai, K. Arai, H. Imagawa, H. Hosono and Y. Abe: Phys. Rev. B, **38**(1988), 12772–12775.
- (19) T. Tamura, G.-H. Lu, R. Yamamoto and M. Kohyama: Phys. Rev. B, **69**(2004), 195204.
- (20) R. F. W. Bader, Atoms in Molecules: A Quantum Theory, Clarendon Press, (1990).
- (21) W. Tang, E. Sanville and G. Henkelman: J. Phys. Condens. Matter, **21**(2009), 084204.
- (22) E. Sanville, S. D. Kenny, R. Smith and G. Henkelman: J. Comput. Chem., **28**(2007), 899–908.
- (23) G. Henkelman, A. Arnaldsson and H. Jónsson: Comput. Mater. Sci., **36**(2006), 354–360.
- (24) A. P. Bartók, R. Kondor and G. Csányi: Phys. Rev. B-Condens. Matter Mater. Phys., **87**(2013), 184115.
- (25) L. Van Der Maaten and G. Hinton: J. Mach. Learn. Res., **9**(2008), 2579–2605.
- (26) S. J. A. Moniz, S. A. Shevlin, D. J. Martin, Z.-X. Guo and J. Tang: Energy Environ. Sci., **8**(2015), 731–759.
- (27) D. O. Scanlon, C. W. Dunnill, J. Buckeridge, S. A. Shevlin, A. J. Logsdail, S. M. Woodley, C. R. A. Catlow, M. J. Powell, R. G. Palgrave, I. P. Parkin, G. W. Watson, T. W. Keal, P. Sherwood, A. Walsh and A. A. Sokol: Nat. Mater., **12**(2013), 798–801.
- (28) Z. Zhang and J. T. Yates: Chem. Rev., **112**(2012), 5520–5551.
- (29) A. Polman, M. Knight, E. C. Garnett, B. Ehrler and W. C. Sinke: Science, **352**(2016), aad4424.
- (30) M. A. Green and S. P. Bremner: Nat. Mater., **16**(2017), 23–34.
- (31) J. Chen and N.-G. Park: ACS Energy Lett., **5**(2020), 2742–2786.
- (32) V. Stevanović, K. Hartman, R. Jaramillo, S. Ramanathan, T. Buonassisi and P. Graf: Appl. Phys. Lett., **104**(2014), 211603.
- (33) W. Chen and A. Pasquarello: Phys. Rev. B, **90**(2014), 165133.
- (34) P. G. Moses, M. Miao, Q. Yan and C. G. Van de Walle: J. Chem. Phys., **134**(2011), 084703.
- (35) H.-P. Komsa, P. Broqvist and A. Pasquarello: Phys. Rev. B, **81**(2010), 205118.
- (36) Y. Hinuma, A. Grüneis, G. Kresse and F. Oba: Phys. Rev. B, **90**(2014), 155405.
- (37) F. Oba and Y. Kumagai: Appl. Phys. Express, **11**(2018), 060101.
- (38) A. Grüneis, G. Kresse, Y. Hinuma and F. Oba: Phys. Rev. Lett., **112**(2014), 096401.
- (39) Y. Ping, D. Rocca and G. Galli: Chem. Soc. Rev., **42**(2013), 2437.
- (40) Y. Hinuma, Y. Kumagai, F. Oba and I. Tanaka: Comput. Mater. Sci., **113**(2016), 221–230.
- (41) Y. Hinuma, Y. Kumagai, I. Tanaka and F. Oba: Phys. Rev. B, **95**(2017), 075302.
- (42) F. Tran: Phys. Lett. A, **376**(2012), 879–882.
- (43) S. Kiyohara, Y. Hinuma and F. Oba: J. Am. Chem. Soc., **146**(2024), 9697–9708.
- (44) Y. Hinuma, T. Kamachi and N. Hamamoto: Trans. Mater. Res. Soc. Japan, **45**(2020), 115–120.
- (45) R. E. A. Goodall and A. A. Lee: Nat. Commun., **11**(2020), 1–9.
- (46) A. Y. T. Wang, S. K. Kauwe, R. J. Murdock and T. D. Sparks: Npj Comput. Mater., **7**(2021), 1–10.



清原 慎

★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★  
2019年 東京大学大学院工学系研究科博士課程修了  
2019年10月–2022年6月 東京工業大学科学技術創成  
研究院(学振研究員)  
2022年7月–2024年8月 東北大学金属材料研究所助  
教  
2024年9月– 現職  
専門分野: マテリアルズインフォマティクス  
◎マテリアルズインフォマティクスを用いた材料開  
発・解析手法の開発に従事。  
★★★★★★★★★★★★★★★★★★★★