研究課題名

研究者氏名（所属機関・部署・役職）

（H29-H32年度）

研究領域「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」
（研究総括：常行真司，H27年度発足）

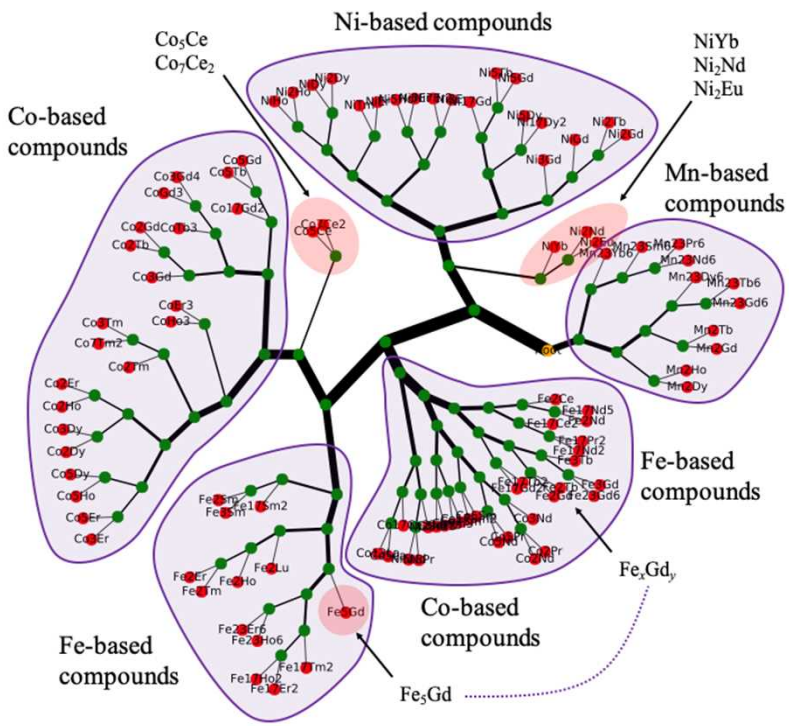
研究の概要

本研究では，人間の理解と創造性を支えるデータ科学手法の開発と，新しい物質や物理現象を発見する過程で人間が介入できるデータ科学機構の開発に焦点を当てます． 本研究では，計算材料科学，先端データ科学，および構造解析技術を統合することによって，磁気特性の発揮するメカニズムの解明と並行して，新しい結晶性磁性材料の設計技術を開発する．さらに，物理化学的現象を理解するための実験的，計算的，およびデータ駆動的アプローチを統合する基盤と，研究者が物質科学の研究開発を助ける説明可能なAI技術の開発を目指しています．

本研究は材料の記述，材料間の類似性評価，そしてデータからの材料に関する科学的知識の獲得， 3つの基本的な問題を首尾一貫した手法の開発を行っている．

研究の成果

1. 解釈可能な物質記述子の開発：我々は，原子軌道と結晶場の情報を取り入れることによって，多元素を含んだ複雑な物質の構造と性質を記述できる Orbital Field Matrix を開発しました[1，2]．
2. 物理的性質を考慮した材料類似性尺度：特定の物理的性質に関して材料間の類似性を測る回帰解析を基にしたの類似度評価方法を開発した[3].
3. データ駆動アプローチの出力を解釈するためのスキーム：遷移金属と希土類元素からなる二元合金のキュリー温度を予測するたデータ駆動アプローチの出力を解釈するための直接的なで頑健な解析スキームを確立した[4].



強磁性体のキュリー温度に注目した物質間の類似度評価による遷移金属と希土類元素からなる二元合金の階層グループ構造

参考文献・リンク

[1] T. L. Pham and *H. C. Dam et al., STAM, 18, 1, 756-765 (2017).
[2] T. L. Pham and *H. C. Dam et al., J. Chem. Phys., 148, 20, 204106 (2018).
[3] D. N. Nguyen and *H. C. Dam et al., IUCrJ, 5, 6, 830-840 (2018).
[4] H. C. Dam and H. Kino et al., J. Phys. Soc. Jpn., 87, 113801 (2018).

（注1）募集要項第7章「戦略目標」をご参照ください．