

令和 3 年 5 月 31 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2017～2019

課題番号：17H02930

研究課題名（和文）第一原理計算と実験・計測のデータ同化による物質構造探索手法の開発と実証

研究課題名（英文）Development and demonstration of a material structure exploration method based on data assimilation of first-principles calculations and experiments

研究代表者

常行 真司 (Tsuneyuki, Shinji)

東京大学・大学院理学系研究科（理学部）・教授

研究者番号：90197749

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 14,800,000円

研究成果の概要（和文）：第一原理計算とデータ科学的手法を組み合わせることにより、実測データを活かして物質の結晶構造解析を可能にするデータ同化構造探索手法の開発を行った。X線粉末回折実験データと原子位置から計算される粉末回折データとの差異によってペナルティ関数を定義し、このペナルティ関数を原子位置で決まるポテンシャルエネルギー関数に加えてコスト関数とする。このコスト関数の大局的な最安定点を探索することにより、局所的な構造や物性の予測を得意とする第一原理計算と、秩序を反映した波数空間でのデータ取得を得意とする実験の、両方の利点を活かした構造探索を実現した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

物質の化学組成から結晶構造を予測することは、物質科学における重要かつ極めて困難な課題である。本研究では、実験データだけでは結晶構造決定ができない場合、その不十分な実験データを利用して結晶構造シミュレーションを大幅に加速し結晶構造探索を可能にする、データ同化手法を開発した。これにより、従来捨てられていたような実験データを活かして、新物質の結晶構造を解析することが可能となり、新結晶・新物質の探索を加速することができる。

研究成果の概要（英文）：Combining first-principles calculations with data science methods, we have developed a data-assimilative structure exploration method that enables us to analyze the crystal structure of materials using measured data. We defined a penalty function based on the difference between the experimental X-ray powder diffraction data and the powder diffraction data calculated from the atomic positions, and added this penalty function to the potential energy function calculated for the atomic positions to obtain a cost function. By searching for the global minimum of this cost function, we have realized a structure search that takes advantage of both first-principles calculations, which are good at predicting local structures and properties, and experiments, which are good at obtaining data in wavenumber space reflecting order.

研究分野：計算物質科学

キーワード：物質構造探索 データ同化 第一原理計算 結晶構造解析

1. 研究開始当初の背景

「データ同化(data assimilation)」とは、地球科学分野で気象予報などの計算機シミュレーションに観測値を逐次取り入れることで、より現実に近い答えを出すために用いられる手法である。観測値は限られた地点でしか得られないため、それらを内挿して得られた初期値だけではシミュレーションが不正確になるが、時間とともに増えていく観測値を取り込む(同化する)ことで、シミュレーションの信頼性を向上させることができる。

物性現象の時間スケールにくらべ、電子論や原子論に基づくミクロな物性シミュレーションには桁違いに時間がかかるため、計測データを逐次取り入れてそのあとの時間発展を予測することはできない。しかしながら、分子動力学法を見ればわかるように、計算機は実空間における局所的な構造や物性の予測を得意とするのに対し、実験は長距離秩序や波数空間(逆格子空間)でのデータ取得を得意としており、両者は相補的に利用できると期待される。本研究では、時間発展に限定せず、計測データを取り入れることで物性シミュレーションの信頼性を向上させる手法の開発を目指し、これを「物性データ同化シミュレーション」と呼ぶこととする。

先行研究には、良質な粉末 X 線回折データを使って結晶構造を決定する際に、原子芯間の斥力とイオン間のクーロン斥力のみを考慮した簡単なモデルポテンシャルを補助的に用いて結晶構造決定を早める手法(パレート最適化の一種)がある[1]。これに対して本研究が目指すのは、超高压下の物質や表面・界面、材料特性を決める結晶粒界、ガラスなど、実測データが圧倒的に不足する場合にも、その実測データを生かして構造決定できる、新しい計算機シミュレーション手法の開発と実証である。

研究代表者はこれまで経験パラメータを用いない第一原理に基づく物性シミュレーション手法(以下、第一原理計算)の開発に取り組んできた。シミュレーション手法やコンピュータのハードウェアの進歩により、信頼性が向上し適用範囲が大きく広がった第一原理計算は、物性研究、材料研究において重要な役割を果たすようになってきている。一方で、化学組成から物質の結晶構造や界面構造を予測することや、緩和の遅いガラス構造のシミュレーションは、成功例はあるものの、いまだに困難な課題である。そこに突破口を開く手法として、物性データ同化を着想するに至った。

2. 研究の目的

高精度スペクトロスコーピーや顕微観察手法、オペランド計測手法などの実験・計測手法や、電子論に基づく計算機シミュレーションの著しい発展により、複雑な材料組織や原子配列、精密な電子状態や化学反応の動力学など、これまで手の届かなかった物質・材料に関する詳細な情報が得られるようになりつつある。一方で、複雑な系の構造や物性を定量的に解析し解釈するためには、実験・計測と計算機シミュレーションを適切に組み合わせた、総合的なデータ解析手法が求められている。そこで本研究では、非経験的な電子論に基づく計算機シミュレーションにデータ科学的手法を組み合わせることにより、実測データを活かして物質の精緻な構造解析を可能にする、物性データ同化シミュレーション手法の開発を行う。

3. 研究の方法

物性データ同化のための評価関数 $F(R)$ を次のように定義する。

$$F(R) \equiv E(R) + D(R)$$

ここで R はシミュレーションセルに含まれる全原子座標、 $E(R)$ は原子座標 R から計算されるポテンシャルエネルギー、 $D(R)$ は実測された粉末回折実験データと R から計算される粉末回折の計算値のずれによって与えられる何らかのペナルティ関数であり、両者が一致すればその値はゼロで、ズレが大きくなるほど大きな正の値をとるように定義する。我々が知りたい正しい結晶構造では、 $E(R)$ と $D(R)$ がともに最小(もしくは極小)となる。

この評価関数 $F(R)$ の大局的な最安定点を探索することにより、局所的な構造や物性の予測を得意とする第一原理計算と、秩序を反映した波数空間でのデータ取得を得意とする実験の、両方の利点を活かした構造探索を実現する。そのために最適な評価関数の検討、評価関数の最安定点探索手法の検討、手法の汎用化を行い、第一原理計算を用いた実証計算を行う。

4. 研究成果

(1) ベイズの定理による定式化

手法開発をすすめるにあたり、評価関数 $F(R)$ を用いるアイデアを、以下で述べるようにベイズの定理を用いて定式化した。

粉末回折実験データを $I_{exp}(\theta)$ 、全原子座標 R から計算される粉末回折データの計算値を

$I_{calc}(\theta; R)$ とシンボリックに書くことにする。これらは回折角 θ の関数である。有限温度での原子の分布関数を $\rho(R)$ 、 I_{exp} の分布関数を $\rho(I_{exp})$ 、実験から I_{exp} が与えられたときの原子の分布関数を $\rho(R|I_{exp})$ 、逆に R がわかったとき I_{exp} が観測される確率分布を $\rho(I_{exp}|R)$ とすると、これらの間にはベイズの定理により

$$\rho(R|I_{exp}) = \rho(I_{exp}|R)\rho(R)/\rho(I_{exp})$$

という関係が成り立つ。有限温度 T でのカノニカル分布を考えると、右辺の $\rho(R)$ は、ポテンシャルエネルギー $E(R)$ と温度の逆数 $\beta = 1/k_B T$ を用いて、

$$\rho(R) \propto \exp[-\beta E(R)]$$

と書ける。 $\rho(I_{exp}|R)$ を考える際には、 θ の関数である $I_{calc}(\theta; R)$ が $I_{exp}(\theta)$ からずれるにつれてその確からしさが減ると考え、ずれが大きいほど大きなペナルティーを与えるようなエネルギーの次元をもった汎関数 $D[I_{exp}, I_{calc}]$ を導入して、

$$\rho(I_{exp}|R) \propto \exp(-\beta D[I_{exp}, I_{calc}])$$

と書く。これらをベイズの定理の式に代入すると、

$$\rho(R|I_{exp}) \propto \exp\{-\beta(E(R) + D[I_{exp}, I_{calc}])\}$$

が得られる。構造シミュレーションの各ステップでの R がわかればその構造に対する $I_{calc}(\theta; R)$ が計算され、そこからペナルティー $D[I_{exp}, I_{calc}]$ も決まるので、 $D[I_{exp}, I_{calc}]$ を明示的に $D(R)$ と書くことにしよう。結果的に我々が欲しい $\rho(R|I_{exp})$ は、仮想的なポテンシャルエネルギー関数（コスト関数）

$$F(R) \equiv E(R) + D(R)$$

のもとでの原子分布関数であることがわかる。構造探索のもっとも簡単な手法の一つである除冷法(Simulated Annealing, SA)では、 $E(R)$ で相互作用しながら運動する原子のシミュレーションを融点より高い温度で開始し、絶対零度まで徐々に温度を下げていくことで最安定構造を探す。回折ピークに関して何らかの情報がある場合には、 $E(R)$ に替えて $F(R)$ を使ったSAを行えば、その情報を利用できるわけである。

このことをもう少し直感的に示したのが、図1である。第一原理シミュレーションで得られる $E(R)$ は、一般に非常に複雑な多谷構造をもち、SAなどの手法で最安定構造を見つけようとしても準安定構造にトラップされて構造探索に失敗する。ペナルティー $D(R)$ はこれとは異なる多谷構造を持つと考えられるが、最安定構造(図1の星印)は $E(R)$ と $D(R)$ に共通の安定構造なので、両者をたしあわせた $F(R)$ ではその安定性が強調され、探索が容易になる。

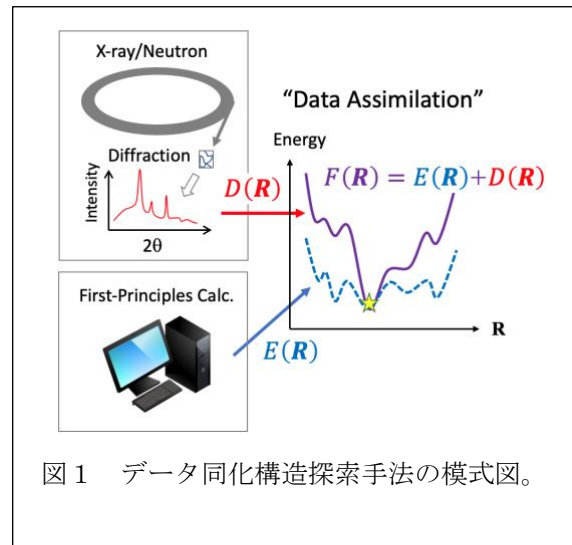


図1 データ同化構造探索手法の模式図。

(2) ペナルティ関数の検討

ペナルティ関数は人為的なものなので、様々な選び方がある。本研究では2つのペナルティ関数を定義し、その有効性を調べた。

第1は、次式で定義されるような、結晶化度 λ を用いた定義である[2]。

$$D(R) = D[I_{exp}(\theta), I_{calc}(\theta; R)] = \alpha N(1 - \lambda),$$

$$\lambda = \frac{\sum_{\theta_{obs}} \int_{\theta_{obs}-\delta}^{\theta_{obs}+\delta} I_{calc}(\theta; R) d\theta}{\int_{\theta_{min}}^{\theta_{max}} I_{calc}(\theta; R) d\theta}$$

ここで α はエネルギーの次元を持つ定数で、データ同化の重みを決めるコントロールパラメータ、 N はシミュレーションセルに含まれる原子数である。2行目の式で定義される λ の分母は、実験で計測された角度範囲 $\theta_{min} < \theta < \theta_{max}$ で $I_{calc}(\theta; R)$ を角度積分したもので、規格化因子に相当する。分子は同じく $I_{calc}(\theta; R)$ の積分であるが、積分範囲は実験で回折ピークが観測される角度 θ_{obs} の近傍(幅 2δ)にのみ限定する。こうすれば常に $0 \leq \lambda \leq 1$ であり、 $\theta_{min} < \theta < \theta_{max}$ に観測され

たすべての回折ピークの回折角が（強度を別にして）計算値と一致すれば、 $\lambda = 1$ （すなわち $D = 0$ ）となる。ポテンシャルエネルギーに対するペナルティーの重みを決めるパラメータ α は、何らかの原理により決めることができないが、経験的には融点の熱エネルギーの10倍程度でうまくいくようである。

実際にこのデータ同化手法を用いてシリコンの構造探索を行った時の構造およびそこから計算されるX線回折データの変化の様子と、その過程で計算された $E(R)$ （破線）と $F(R)$ （実線）を、図2に示す。この計算は原子数64個の周期セルと原子間力モデル[3]を用い、古典MDのプログラムパッケージLAMMPS[4]を使って初期温度5000Kから0Kまで5psかけてSAを行った。左下図の横軸は結晶化度 λ である。SAの時間発展は概ね左から右に進み、この例では最終的に $\lambda = 1$ となって完全結晶にたどりついている。データ同化に使ったのは、回折角60度以下に見られる3本のピーク位置のみである。初期構造はランダムなので、回折ピークは周期的境界条件が許すすべての角度に現れる。時間が経つにつれて、データ同化に使った3箇所の正しい回折ピーク（×印のついた線）と同じ角度のピークが成長し、正しい結晶構造が得られる。この過程で、 $E(R)$ の変化を見ると活性障壁を超えているように見えるが、計算に使った $F(R)$ の方は単調に減少しており、これにより $E(R)$ を使うSAよりも短時間で結晶構造に到達したことがわかる。シリコンは結晶構造が簡単だが、それでも通常のSAでこれほど急冷してしまうと、結晶構造を得るのは容易ではない。対してデータ同化で正しい結晶構造が得られる確率（成功率）は、ほぼ100%であった。

結晶化度を用いたペナルティーでは、回折実験で得られた回折角の情報のみを持ちており、ピークの大きさはあらわに用いない。そのため、層状物質や有機物結晶でしばしば見られる選択配向（preferred orientation）により、粉末回折ピークの強度比が理論値からずれる場合にも、データ同化が可能になるという利点がある。また、回折角という最低限の情報を用いてデータ同化により得られた構造の回折強度が実測値とよく一致していれば、シミュレーション結果が妥当であることがわかるのも、この手法の利点である。

一方で、回折強度自体を使っていないことから、せつかくの実験データを十分に利用できないのは、結晶化度の残念な点である。さらに実験データのノイズが大きく、小さな回折ピークとノイズの区別が困難な場合には、結晶化度の定義自体が困難になってしまうという問題がある。そこでこれらの問題を回避するために、次のような相関関数型のペナルティー関数を定義した。

$$D = \alpha N \left[1 - \frac{\int I_{\text{calc}}(\theta; R) \cdot I_{\text{exp}}(\theta) d\theta}{\sqrt{\int |I_{\text{calc}}(\theta; R)|^2 d\theta} \sqrt{\int |I_{\text{exp}}(\theta)|^2 d\theta}} \right]$$

式中の積分は $\theta_{\min} < \theta < \theta_{\max}$ で行う。いくつかの既知の結晶で試した結果、実験データの強度情報まで利用する相関関数型のペナルティー関数を用いたデータ同化構造探索は、結晶化度を用いる場合に比べて、押し並べて成功率が高い（たとえば2体力ポテンシャルモデルを用いたSiO₂ coesiteの結晶構造探索では、結晶化度による成功率が2%程度であるのに対し、相関関数型では100%近い成功率であった）。

(3) ケーススタディによる有効性の検証

本研究では、データ同化構造探索がどの程度汎用性のある手法かを明らかにするため、ケーススタディとして、以下のようなさまざまな既知の結晶構造の探索を行なった。

- Si（ダイヤモンド構造）、C（グラファイト）
- SiO₂の多形である low-quartz, low-cristobalite, coesite
- Nd₂Fe₁₇（磁性体）

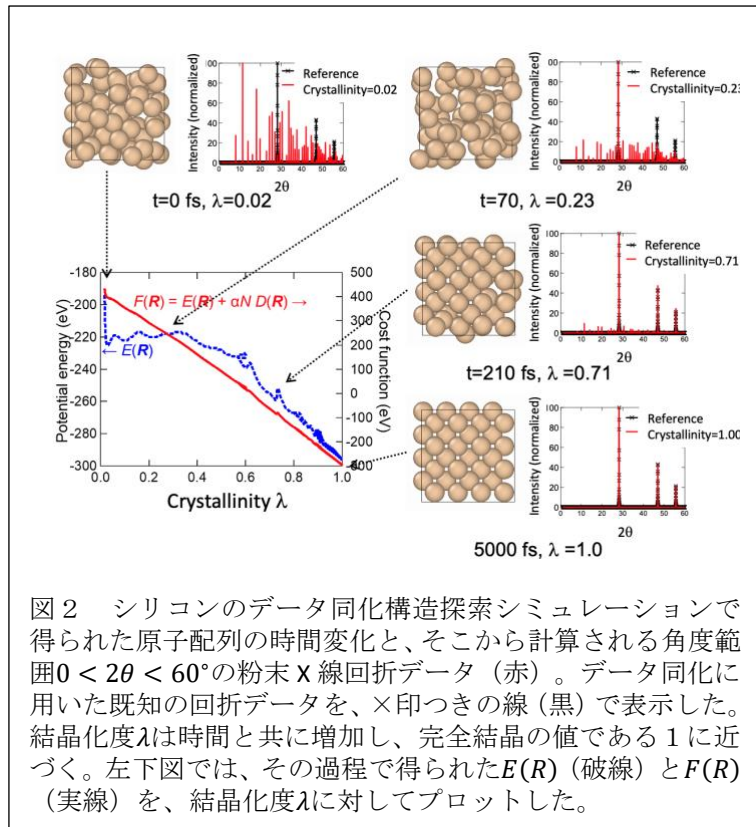


図2 シリコンのデータ同化構造探索シミュレーションで得られた原子配列の時間変化と、そこから計算される角度範囲 $0 < 2\theta < 60^\circ$ の粉末X線回折データ（赤）。データ同化に用いた既知の回折データを、×印付きの線（黒）で表示した。結晶化度 λ は時間と共に増加し、完全結晶の値である1に近づく。左下図では、その過程で得られた $E(R)$ （破線）と $F(R)$ （実線）を、結晶化度 λ に対してプロットした。

H₃S (超高压下で得られる高温超伝導体)

Y₂CH₂ (層状物質)

このうち、Si、C、SiO₂では既報のモデルポテンシャルを用い、またNd₂Fe₁₇、H₃S、Y₂CH₂では第一原理計算を用いてポテンシャルエネルギー $E(R)$ を計算した。

データ同化の効果は、ペナルティ関数のタイプ、コントロールパラメータ α の大きさ、SAの初期温度やどのくらいゆっくりと温度を下げるかによって変わる。化学組成や原子間相互作用のタイプ、構造の複雑さ、実験データの質と量にも依存している。したがって、未知物質の構造探索を行う場合、条件設定のためある程度の試行錯誤は避けられない。しかしながらテストを行なったいずれの場合も、データ同化によって構造探索の成功率が大きく向上することが確認された。多少なりとも回折実験データがあるならば、データ同化構造探索を行なってみる価値は大いにあると言って良いだろう。

(4) 構造探索手法

本研究ではコスト関数 $F(R)$ を用いた構造探索を行うためにSAを用いた。 $F(R)$ を使うことで、もとのポテンシャルエネルギー $E(R)$ よりも構造探索が容易になるとはいえ、複雑な構造をもつ物質では構造探索成功率が数%以下ということもあり、構造探索手法自体の改善も必要である。幸い、構造探索手法としてこれまで開発されてきたさまざまな手法、たとえば遺伝的アルゴリズムや粒子群アルゴリズムなどは、 $E(R)$ を $F(R)$ に置き換えるだけで、そのまま利用することができる。これは本手法の利点の一つである。

一方、別の考え方として、 $E(R)$ と $D(R)$ が同じ R で最小(極小)になるということを利用して、両者を足し合わせずに独立なままで利用する構造探索を考えることも可能である。我々はそのような全く新しい手法として、Combined Optimization Method (COM)を開発した。COMの目的は2つの関数を同時最適化するという意味でパレート最適化に似ているが、2つの関数が同一の最小(極小)点を持つことを使って探索を加速する手法であり、パレート最適化とは異なるものである。

(5) データ同化の意義と今後の展望

本手法と関連する手法は、過去にもいくつか提案されている。粉末回折実験データから結晶構造を決めるという意味で最も近いのは、PutzらによるCombined methodである[1]。彼らは理論的に結晶構造を探索するというより、粉末回折実験データから逆問題を解いて結晶構造を決める際に、粗い原子間相互作用モデルを使って探索範囲を絞り、構造探索を加速することを目的としていた。我々の手法[2,5]では、第一原理計算等で得られる信頼性の高いポテンシャルエネルギーを利用し、そこに粉末回折実験データを同化することで、情報不足のために構造決定に役立たないとして捨てられていた実験データでさえ有効利用し、シミュレーションによる構造探索を加速する。つまりデータ同化により、理論と実験のコラボレーションが可能になるのである。

本研究で開発したデータ同化構造探索手法がとくに有用であると思われるのは、次のような場合である。

- (i) ダイヤモンドアンビルセルを用いた高压実験のように、粉末回折実験で観測できる回折角の範囲が制限され、実験的な構造解析ができない場合
- (ii) 試料の質が悪かったり量が少なかったりして、小さな回折ピークがノイズに埋もれている場合(たとえばコンビナトリアル合成実験の傾斜組成試料)
- (iii) X線では見えづらい水素原子が含まれており、中性子回折実験ができるほどの試料の量がない場合

こういった結晶構造の探索に加え、相関関数型のペナルティを用いれば、アモルファス構造の決定にもデータ同化構造探索は有用であろう。

本研究では、X線粉末回折実験データを用いてデータ同化を行なったが、それ以外にも原子座標 R から簡単に計算できる物理量の実験データがあれば、データ同化に利用することができると考えられる。たとえばRHEED、LEED、LEPD、STMといった表面構造情報を与える実験データを用いた再構成表面の構造決定や、STEMの画像データを利用した結晶粒界構造の決定は、比較的取り組みやすい応用先である。中性子やX線の小角散乱データを使って、ナノスケール構造を探索することも、おそらくは可能であろう。それに比べて、赤外分光やラマン分光で得られる振動スペクトルや、XAFS、XANESのデータの利用はやや難易度が高く、今後の検討を要する課題である。

文献

- [1] H. Putz, J. C. Schon and M. Jansen, J. Appl. Cryst. 32, 864 (1999).
- [2] N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo and S. Tsuneyuki, Phys. Rev. Materials 2, 053801 (2018).
- [3] T. Kumagai, S. Izumi, S. Hara, and S. Sakai, Comput. Mater. Sci., 39(2), 457 (2007).
- [4] S. Plimpton, J Comp Phys, 117, 1 (1995).
- [5] D. Adachi, N. Tsujimoto, R. Akashi, S. Todo and S. Tsuneyuki, Comp. Phys. Comm. 241, 92 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Adachi Daiki, Tsujimoto Naoto, Akashi Ryosuke, Todo Synge, Tsuneyuki Shinji	4. 巻 241
2. 論文標題 Search for common minima in joint optimization of multiple cost functions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 92 ~ 97
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2019.02.004	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 藤堂 眞治, 常行 真司	4. 巻 62
2. 論文標題 X線回折実験とシミュレーションのデータ同化による 結晶構造解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 日本結晶学会誌	6. 最初と最後の頁 51 ~ 55
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5940/jcrsj.62.51	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 N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo and S. Tsuneyuki	4. 巻 2
2. 論文標題 Crystal structure prediction supported by Insufficient experimental data	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Phys. Rev. Materials	6. 最初と最後の頁 053801-1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.2.053801	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24件（うち招待講演 14件/うち国際学会 7件）

1. 発表者名 S. Tsuneyuki
2. 発表標題 Crystal Structure Prediction by Assimilating Incomplete Powder Diffraction Data
3. 学会等名 The 18th International Conference on Density Functional Theory and its Applications (DFT2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 R. Sato, T. Sato, T. Honda, T. Otomo, S. Orimo, S. Tsuneyuki
2. 発表標題 Crystal Structure Prediction of Li(CB9H10) by XRD-assisted molecular dynamic simulation
3. 学会等名 1st International Symposium "Hydrogenomics" combined with 14th International Symposium Hydrogen & Energy (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 不完全な実験データを用いたデータ同化結晶構造探索
3. 学会等名 早稲田大学材研オープンセミナー (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 計算物質科学の立場からの新物質開発について
3. 学会等名 第9回電子光技術シンポジウム「機能性マテリアルの設計と実証ー電子・光デバイスのイノベーション開拓に向けて (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S. Tsuneyuk
2. 発表標題 Crystal structure prediction by assimilating incomplete powder diffraction data
3. 学会等名 Conference on a Fair Data Infrastructure for Materials Genomics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 不完全な粉末回折実験データを用いたデータ同化結晶構造探索
3. 学会等名 787th ASRC Seminar, (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 S. Tsuneyuki
2. 発表標題 First-principles material simulation and beyond
3. 学会等名 MANA International Symposium 2021 Jointly with ICYS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 計測とシミュレーションの水素データ同化
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 マテリアルズインフォマティクスの近況について
3. 学会等名 物性研究所研究会「物性科学におけるデータ科学の今と未来」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 計測とシミュレーションの水素データ同化
3. 学会等名 日本化学会第101春季年会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Seiji Yoshikawa, Naoto Tsujimoto, Daiki Adachi, Ryosuke Akashi, Synge Todo and Shinji Tsuneyuki
2. 発表標題 Crystal structure simulation by assimilating incomplete powder diffraction data: First application to magnetic material
3. 学会等名 3rd International Symposium on Research and Education of Computational Science (RECS2018)（国際学会）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 辻本直人、足立大樹、明石遼介、藤堂眞治、常行真司
2. 発表標題 化学組成比と結晶構造を決定するためのデータ同化シミュレーション手法
3. 学会等名 日本物理学会2018年秋季大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 吉川誠司、辻本直人、足立大樹、明石遼介、藤堂眞治、常行真司
2. 発表標題 不完全な粉末回折データを用いたデータ同化による結晶構造探索
3. 学会等名 第12回物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 データ科学と計算・実験の連携による材料研究への期待
3. 学会等名 第24期日本学術会議 第3部化学委員会 材料化学分科会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 物質中の水素は計算機でどう ” 見える ” か？
3. 学会等名 第1回ヒドリドイオニクス研究会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 データ科学と計算・実験の連携による物質・材料研究
3. 学会等名 2018年表面真空学会学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 データ科学と計算・実験の連携による物質・材料研究
3. 学会等名 第24回電子デバイス界面テクノロジー-研究会-材料・プロセス・デバイス特性の物理-（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 常行真司
2. 発表標題 物質と材料の計算科学
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 (2019年) シンポジウム「計算物理学への誘い」(招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo and S. Tsuneyuki
2. 発表標題 Crystal structure prediction supported by Incomplete diffraction data
3. 学会等名 The Tenth International Conference on the Science and Technology for Advanced Ceramics (STAC10) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 N. Tsujimoto, D. Adachi, R. Akashi, S. Todo and S. Tsuneyuki
2. 発表標題 Crystal structure prediction supported by Insufficient experimental data
3. 学会等名 International Symposium on Research and Education in Computational Science (RECS) 2017 (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 辻本直人, 足立大樹, 明石遼介, 藤堂眞治, 常行真司
2. 発表標題 不完全な回折実験データを利用した結晶構造予測
3. 学会等名 ポスト「京」プロジェクト課題7「共通基盤シミュレーション手法」研究会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 辻本直人, 足立大樹, 明石遼介, 藤堂眞治, 常行真司
2. 発表標題 不完全な回折実験データを利用した結晶構造予測
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 辻本直人, 足立大樹, 明石遼介, 藤堂眞治, 常行真司
2. 発表標題 不完全な実験データを利用した結晶構造予測
3. 学会等名 第3回CDMSI (ポスト「京」重点課題(7))シンポジウム
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 辻本直人
2. 発表標題 不完全な実験データを利用した結晶構造予測
3. 学会等名 2017年度SPRUC高压物質科学研究会 (招待講演)
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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	藤堂 眞治 (Todo Synge) (10291337)	東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・教授 (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
---------	---------