

令和 6 年 6 月 18 日現在

機関番号：82108

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K05070

研究課題名（和文）結晶データベースと第一原理計算によるデータ駆動型新規磁気冷凍材料の合成

研究課題名（英文）Data-driven search for magnetocaloric materials with help of crystal structure data and first principles calculations

研究代表者

寺嶋 健成（TERASHIMA, Kensei）

国立研究開発法人物質・材料研究機構・ナノアーキテクトニクス材料研究センター・主任研究員

研究者番号：20551518

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：データ駆動型アプローチから、ターゲットである水素液化温度近傍で高い磁気熱量効果を示すHoB2を見出し、その元素置換効果も明らかとした。また作成した機械学習モデルは個々の物質に対する予測だけでなく、モデルの解析から、作成したモデルの知見が物質探索の指針に活かせることを示した。合成した物質を同定するためのX線回折パターンから、不純物を複数含む試料の解析を外部結晶構造データベースと接続し自動で行うソフトウェア開発公開を行った。またニューラルネットワークを用いることで、非線形な変化を示す予備データの補間が精度良く行え測定中に本測定の条件検討ができるソフトウェア公開を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

データ駆動型の物質探索が、ただの提案にとどまらず合成および実験検証まで行い、磁気冷凍材料という機能性材料を実際に見出すに至ることを示す例となった。機械学習モデルの知見を探索指針に活かす具体的方法と、合成物をX線回折から自動で特定する手段、および予備データを非線形補間することで本測定をシミュレートし効率測定を行う手段を開発提示するなど、合成探索を行うユーザー側の視点からのツール開発を行い公開した。

研究成果の概要（英文）：Using a data-driven approach, we identified HoB2 as a material exhibiting significant magnetocaloric effects near hydrogen liquefaction temperatures. Additionally, we clarified the impact of elemental substitution on this material. The machine learning model we developed not only predicts properties of individual materials but also provides insights through model analysis that can guide the search for new materials. To identify synthesized materials, we developed and released software that automates the analysis of X-ray diffraction patterns. This software connects to an external crystal structure database to efficiently analyze samples containing multiple impurities. Moreover, we leveraged neural networks to accurately interpolate preliminary data exhibiting nonlinear changes. This capability allows for real-time optimization of measurement conditions during experiments. We have published these softwares as well.

研究分野：データ駆動型機能性材料探索

キーワード：磁気冷凍材料 データ駆動型物質探索

1. 研究開始当初の背景

機能性物質の物質探索では、従来研究者のアイデアや経験に基づく指針が重要な役割を果たしてきた。一方で、近年結晶データベースの充実化と計算機の普及により、物質設計指針を第一原理的に求めることが現実的視野に入ってきている。例えば物質材料研究機構の AtomWorks3、デューク大などの AFLOW、カリフォルニア大の MaterialsProject は安定構造だけでも十万~数十万の結晶構造データを公開している。また Quantum Espresso など無償・有償の第一原理計算コードや、各種機械学習ライブラリの普及から、実験を主とする者でも一定の近似・精度下で電子状態計算や物性予測が可能となってきた。

このためデータ駆動型の物質探索は予測結果が過多となっており、予測の妥当性も不明のまま実験による検証までを行うものは少ない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、実際の合成評価までを含めた、結晶データベースと計算によるデータ駆動型物質開発の手法確立と、その具体的適用例としての磁気冷凍材料に適する新物質開拓を行う。

3. 研究の方法

効率的なスクリーニングのため、機械学習を行う。目的変数として磁気冷凍材料の性能を表す物理量の1つである磁場下でのエントロピー変化 $|\Delta S|$ を用い、説明変数として化合物の含有元素、およびそれが含む個々の原子の物理量を XenonPy パッケージから得る。有望と判断した化合物には第一原理計算による電子状態や固定スピンモーメント計算を用いたメタ磁性不安定性の評価、そして実験により合成を試みる。物性測定後有望な物質には、部分置換効果を調べ磁気冷凍性能の向上を図る。

4. 研究成果

(1). 磁気冷凍材料 HoB_2 の発見と部分元素置換：

データ駆動型の磁気冷凍に適する材料の物質探索を行うために、磁性体データおよび磁気冷凍材料に欠かせない磁気熱量効果指標として、磁場下でのエントロピー変化の大きさのデータ収集を行った。スクリーニングとして収集したデータをもとに、物質の組成を入力として、磁気エントロピー変化の大きさに対する教師あり学習を行い、機械学習モデルを作成した。次に作成したモデルを用いて磁場下でのエントロピー変化の大きさが未報告な磁性体約 800 に対し、モデルによる予測を行い、所望の転移温度の範囲に含まれる、毒性元素を含まない、安定、予測値が比較的高いという基準でスクリーニングを行い合成候補を選出した。

候補に上がった物質を実際に合成し、磁化や比熱などの測定を行い候補物質が示すエントロピー変化の大きさを実験的に求めたところ、候補物質 HoB_2 が、5T の磁場を用いた場合 15 K で $40 \text{ J/kg} \cdot \text{K}$ と巨大なエントロピー変化を示すことを見出した。これは水素の液化温度(約 20 K)近傍ではバルク材料で最大クラスで、水素の液化や液化した水素の低温保持などに有用と考えられる。

さらに部分置換効果を実験的に調べ、Ho を一部 Dy または Gd で置換した場合、エントロピー変化が大きくなる温度を部分置換により制御しうることや、エントロピー変化の温度依存性が変化しより広い温度範囲をある程度のエントロピー変化量を保ちつつカバーしうることを報告した。

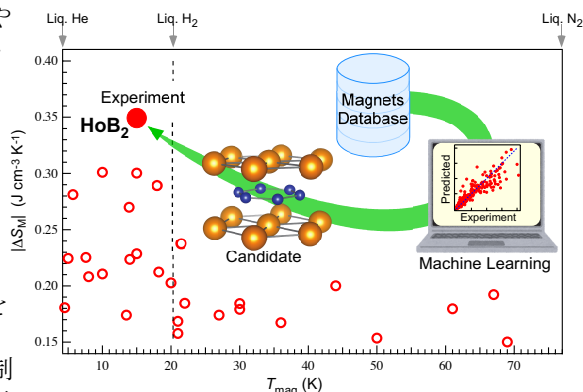


図 1 磁気冷凍材料の磁気エントロピー変化量とピーク温度。既知の物質データ(白抜き赤丸)をもとに HoB_2 を見出した。

(2). 合成物質の X 線回折パターンを用いた自動同定ソフトウェアの開発：

データ駆動型物質探索で候補物質を実際に合成する上でまっさきにボトルネックとなるのが、合成初期は文献に依ったとしても合成に最適な条件は不明で、すぐさま単相が得られることは非常に少ない点である。その際不純物相の特定が重要となる。このため結晶構造データベースを用いて、あり得る候補の X 線回折パターンを網羅的に取得・計算し、スペクトル類似度と python ベースに公開されている Rietveld 解析を組み合わせることで、複数不純物相を含む場合でもその相の同定と質量比を算出するソフトウェア XERUS(X-ray Estimation and Refinement Using

Similarity)を開発公開した。この XERUS は、その他同時期に公開されているニューラルネットワークを用いた相の分類に比べると同程度の精度(ベンチマークデータでの正答率約 9 割)で、かつ対象とする元素種がより広範で、かつ学習コストが抑えられる利点がある。このツールが、単相の目的物質を合成する上で適する条件を試行錯誤するのに有用であると示した。

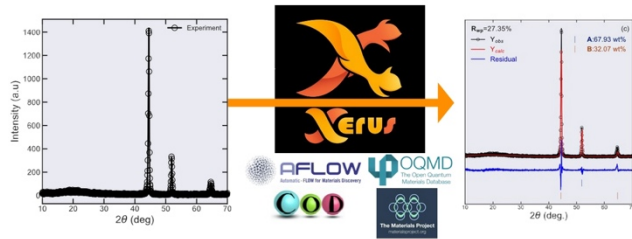


図 2 XERUS 概念図。XRD データを input とし、候補となる相の組み合わせを output として得る。

(3). 機械学習を用いた非線形補間による、予備データや過去文献値の物質探索への有効活用：

目的の物理量である磁気エントロピーは材料の温度と磁場に大きく依存し、その評価には一連の磁化測定と Maxwell の関係式に基づく算出がしばしば用いられる。この Maxwell の関係式は測定した磁化の微分・積分を含むため、特に本研究のターゲットに含まれる、試料の磁化が温度と磁場で急峻に変化する一次転移の磁性体では、磁気エントロピー評価には適切な温度・磁場測定ステップの設定を要する。従来はそのステップは試行錯誤により設定されていた。我々はデータ点の粗い予備データまたは先行研究や文献などを学習した全結合フィードフォワード型の比較的単純なニューラルネットワークモデルが、学習範囲での温度・磁場測定ステップを変えた際に期待される非線形な磁化の補間を精度良くかつ高速で行うことができ、それに従い算出される磁気エントロピーに与える影響をシミュレートできることを見出した。学習は市販の PC で数分で終わるため測定中に次の測定計画を立てることが可能で、この仕組みを公開した。

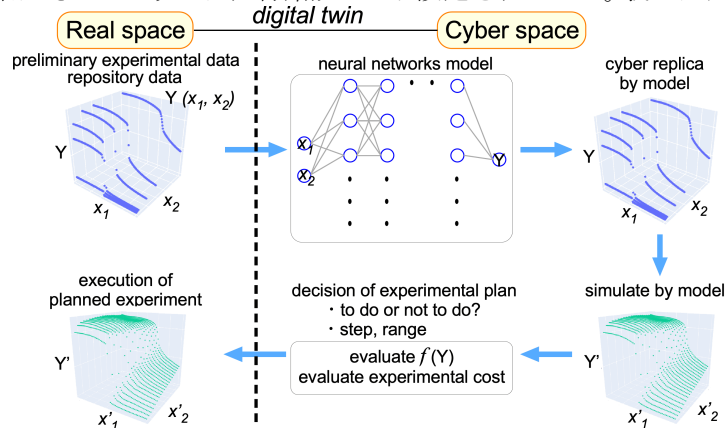


図 3 予備測定データのニューラルネットワーク学習を用いた測定シミュレートの概念図。

(4). 作成した機械学習モデルの知見を活かした物質探索指針の抽出：

成果 1 で構築した磁気冷凍材料に対する機械学習モデルは、組成を入力すると物性予測値を出力するが、モデルがデータをどう理解しているかは不明であった。その見通しを改良するため、Shapley Additive exPlanations (SHAP)を用いた解析を行った。これは各エントリーの予測値に対する個々の記述子の貢献度を算出することができる。組成記述子を用いた今回の場合、この SHAP 解析により、モデルの理解を可視化し、高いターゲット値(磁気エントロピー変化量)を達成するために有利な元素の組み合わせが得られる。すなわち機械学習モデルの知見を活かし、次なる物質探索の指針が得られることを示した。

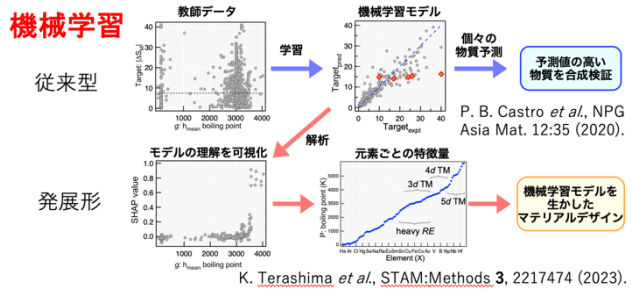


図 4 データ駆動型物質探索の従来型アプローチ(上)と SHAP 解析を用いた機械学習モデルの活用(下)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計33件（うち査読付論文 33件 / うち国際共著 6件 / うちオープンアクセス 6件）

1. 著者名 Terashima Kensei, Baptista de Castro Pedro, Saito Akiko Takahashi, Yamamoto Takafumi D, Matsumoto Ryo, Takeya Hiroyuki, Takano Yoshihiko	4. 巻 3
2. 論文標題 Experimental exploration of ErB ₂ and SHAP analysis on a machine-learned model of magnetocaloric materials for materials design	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 2217474
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2023.2217474	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 Matsumoto Ryo, Yamane Kazuki, Mizuguchi Yoshikazu, Ishikawa Rikuya, Takae Kyohei, Kurita Rei, Usui Hidetomo, Ohkuma Masahiro, Terashima Kensei, Takano Yoshihiko	4. 巻 983
2. 論文標題 Pressure-induced superconductivity and robust T _c against external pressure in (Ge,Sn,Pb)Te	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 173906 ~ 173906
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2024.173906	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 Matsumoto Ryo, Yamamoto Sayaka, Terashima Kensei, Yamane Kazuki, Takano Yoshihiko	4. 巻 93
2. 論文標題 Electrical Transport Properties of van der Waals Insulator CrGeTe ₃ under Extremely High Pressure up to 52 GPa	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 44710
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.93.044710	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 Sakakibara Hirofumi, Ochi Masayuki, Nagata Hibiki, Ueki Yuta, Sakurai Hiroya, Matsumoto Ryo, Terashima Kensei, Hirose Keisuke, Ohta Hiroto, Kato Masaki, Takano Yoshihiko, Kuroki Kazuhiko	4. 巻 109
2. 論文標題 Theoretical analysis on the possibility of superconductivity in the trilayer Ruddlesden-Popper nickelate La ₄ Ni ₃ O ₁₀ under pressure and its experimental examination: Comparison with La ₃ Ni ₂ O ₇	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 144511
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.109.144511	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 Foppiano Luca, Mato Tomoya, Terashima Kensei, Ortiz Suarez Pedro, Tou Taku, Sakai Chikako, Wang Wei-Sheng, Amagasa Toshiyuki, Takano Yoshihiko, Ishii Masashi	4. 巻 3
2. 論文標題 Semi-automatic staging area for high-quality structured data extraction from scientific literature	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 2286219
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2023.2286219	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 Terada Noriki, Mamiya Hiroaki, Saito Hiraku, Nakajima Taro, Yamamoto Takafumi D., Terashima Kensei, Takeya Hiroyuki, Sakai Osamu, Itoh Shinichi, Takano Yoshihiko, Hase Masashi, Kitazawa Hideaki	4. 巻 4
2. 論文標題 Crystal electric field level scheme leading to giant magnetocaloric effect for hydrogen liquefaction	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Communications Materials	6. 最初と最後の頁 13
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s43246-023-00340-z	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 Yamamoto Takafumi D., Saito Akiko T., Takeya Hiroyuki, Terashima Kensei, Numazawa Takenori, Takano Yoshihiko	4. 巻 935
2. 論文標題 Tunable magnetic and magnetocaloric properties by thermal annealing in ErCo ₂ atomized particles	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 168040 ~ 168040
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2022.168040	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 Abbas Fysol Ibna, Nakahira Yuki, Yamashita Aichi, Kasem Md. Riad, Yoshida Miku, Goto Yosuke, Miura Akira, Terashima Kensei, Matsumoto Ryo, Takano Yoshihiko, Moriyoshi Chikako, Mizuguchi Yoshikazu	4. 巻 7
2. 論文標題 Estimation of the Gruneisen Parameter of High-Entropy Alloy-Type Functional Materials: The Cases of RE _{0.7} Fe _{0.3} BiS ₂ and MTe	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 34 ~ 34
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/condmat7020034	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 Yamamoto Takafumi D., Baptista de Castro Pedro, Terashima Kensei, Saito Akiko T., Takeya Hiroyuki, Takano Yoshihiko	4. 巻 562
2. 論文標題 Magnetic, thermal, and magnetocaloric properties of the holmium trialuminide HoAl ₃ with polytypic phases	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 169801 ~ 169801
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2022.169801	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 Tanaka Masashi, Kataoka Noriyuki, Kobayashi Haruya, Fujioka Masaya, Oda Masaru, Yamamoto Aishi, Terashima Kensei, Nishii Junji, Tanaka Hiromi, Yokoya Takayoshi	4. 巻 153
2. 論文標題 Modification of the synthesis of layered titanium chloride nitride	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Research Bulletin	6. 最初と最後の頁 111896 ~ 111896
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.materresbull.2022.111896	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 H. Fujiwara, K. Terashima, J. Otsuki, N. Takemori, H. O. Jeschke, T. Wakitai, Y. Yano, W. Hosoda, N. Kataoka, A. Teruya, M. Kakihana, M. Hedo, T. Nakama, Y. Onuki, K. Yaji, A. Harasawa, K. Kuroda, S. Shin, K. Horiba, H. Kumigashira, Y. Muraoka, T. Yokoya	4. 巻 106
2. 論文標題 Anomalously large spin-dependent electron correlation in the nearly half-metallic ferromagnet CoS ₂	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 85114
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.106.085114	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 Abbas Fysol Ibna, Hoshi Kazuhisa, Yamashita Aichi, Nakahira Yuki, Goto Yosuke, Miura Akira, Moriyoshi Chikako, Kuroiwa Yoshihiro, Terashima Kensei, Matsumoto Ryo, Takano Yoshihiko, Mizuguchi Yoshikazu	4. 巻 91
2. 論文標題 Lattice Anharmonicity in BiS ₂ -Based Layered Superconductor RE(O,F)BiS ₂ (RE = La, Ce, Pr, Nd)	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 74706
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/jpsj.91.074706	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 Yamamoto Takafumi D., Takeya Hiroyuki, de Castro Pedro Baptista, Saito Akiko T., Terashima Kensei, Numazawa Takenori, Takano Yoshihiko	4. 巻 58
2. 論文標題 Effect of Non-Stoichiometry on Magnetocaloric Properties of HoB2 Gas-Atomized Particles	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 IEEE Transactions on Magnetics	6. 最初と最後の頁 1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1109/tmag.2022.3167087	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 Saito Yoshito, Maruyama Kazuhiro, Oda Kazuhito, Nagao Masanori, Adachi Shintaro, Terashima Kensei, Tanaka Isao, Takano Yoshihiko	4. 巻 61
2. 論文標題 Growth and characterization of Bi2Sr2Ca1-xYxCu2O8+ single-crystal whiskers	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 063001 ~ 063001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/ac6a35	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 Meng Yan, Xing Xiangzhuo, Yi Xiaolei, Li Bin, Zhou Nan, Li Meng, Zhang Yufeng, Wei Wei, Feng Jiajia, Terashima Kensei, Takano Yoshihiko, Sun Yue, Shi Zhixiang	4. 巻 105
2. 論文標題 Protonation-induced discrete superconducting phases in bulk FeSe single crystals	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 134506
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevb.105.134506	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 Terashima Kensei, Baptista de Castro Pedro, Esparza Echevarria Miren Garbi?e, Matsumoto Ryo, Yamamoto Takafumi D., Saito Akiko T., Takeya Hiroyuki, Takano Yoshihiko	4. 巻 2
2. 論文標題 Neural networks for a quick access to a digital twin of scanning physical property measurements	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Digital Discovery	6. 最初と最後の頁 339 ~ 345
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D2DD00124A	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 R. Matsumoto, K. Terashima, S. Nakano, K. Nakamura, S. Yamamoto, T.D. Yamamoto, T. Ishikawa, S. Adachi, T. Irifune, M. Imai, Y. Takano	4. 巻 61
2. 論文標題 High-Pressure Synthesis of Superconducting Sn ₃ S ₄ Using a Diamond Anvil Cell with a Boron-Doped Diamond Heater br	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 INORGANIC CHEMISTRY	6. 最初と最後の頁 4478
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.2c00013	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 P. B. de Castro, K. Terashima, M.G. Esparza-Echevarria, H. Takeya, Y. Takano	4. 巻 5
2. 論文標題 XERUS: An Open-Source Tool for Quick XRD Phase Identification and Refinement Automation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ADVANCED THEORY AND SIMULATIONS	6. 最初と最後の頁 2100588
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adts.202100588	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 B. Ozcelik, G. Cetin, M. Gursul, C. Ozcelik, T. Depci, M. A. Madre, A. Sotelo, H. Ando, K. Terashima, Y. Takano	4. 巻 278
2. 論文標題 Low temperature thermoelectric properties of Na-substituted Bi ₂ Ca ₂ Co ₂ O _y ceramics fabricated via LFZ technique	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS	6. 最初と最後の頁 125673
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.matchemphys.2021.125673	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 S. Iwasaki, T. D. Yamamoto, P. B. de Castro, K. Terashima, H. Takeya, Y. Takano	4. 巻 342
2. 論文標題 Al substitution effect on magnetic properties of magnetocaloric material HoB ₂	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SOLID STATE COMMUNICATIONS	6. 最初と最後の頁 114616
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssc.2021.114616	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. Yamamoto, R. Matsumoto, S. Adachi, K. Terashima, H. Tanaka, T. Irifune, H. Takeya, Y. Takano	4. 巻 334
2. 論文標題 Pressure-induced superconductivity in TiGeTe6	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SOLID STATE COMMUNICATIONS	6. 最初と最後の頁 114363
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssc.2021.114363	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. D. Yamamoto, H. Takeya, A. T. Saito, K. Terashima, P. B. de Castro, T. Numazawa, Y. Takano	4. 巻 127
2. 論文標題 Gas-atomized particles of giant magnetocaloric compound HoB2 for magnetic hydrogen liquefiers	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING	6. 最初と最後の頁 301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00339-021-04458-0	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 Luca Foppiano, Sae Dieb, Akira Suzuki, Pedro Baptista de Castro, Suguru Iwasaki, Azusa Uzuki, Miren Garbine Esparza Echevarria, Yan Meng, Kensei Terashima, Laurent Romary, Yoshihiko Takano & Masashi Ishii	4. 巻 1
2. 論文標題 SuperMat: construction of a linked annotated dataset from superconductors-related publications	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Science and Technology of Advanced Materials: Methods	6. 最初と最後の頁 34
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1080/27660400.2021.1918396	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 Saito Yoshito, Adachi Shintaro, Matsumoto Ryo, Nagao Masanori, Fujita Shuma, Hayama Ken, Terashima Kensei, Takeya Hiroyuki, Kakeya Itsuhiro, Takano Yoshihiko	4. 巻 14
2. 論文標題 THz emission from a Bi2Sr2CaCu2O8+ cross-whisker junction	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 033003 ~ 033003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/abe166	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 Matsumoto Ryo, Einaga Mari, Adachi Shintaro, Yamamoto Sayaka, Irifune Tetsuo, Terashima Kensei, Takeya Hiroyuki, Nakamoto Yuki, Shimizu Katsuya, Takano Yoshihiko	4. 巻 33
2. 論文標題 Electrical transport measurements for superconducting sulfur hydrides using boron-doped diamond electrodes on beveled diamond anvil	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Superconductor Science and Technology	6. 最初と最後の頁 124005 ~ 124005
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6668/abbdc5	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 Yamamoto Takafumi D., Takeya Hiroyuki, Terashima Kensei, Iwasaki Suguru, Baptista de Castro Pedro, Numazawa Takenori, Takano Yoshihiko	4. 巻 513
2. 論文標題 Adiabatic temperature change in ErAl ₂ /metal PIT wires: A practical method for estimating the magnetocaloric response of magnetocaloric composites	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Magnetism and Magnetic Materials	6. 最初と最後の頁 167207 ~ 167207
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jmmm.2020.167207	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 Pugliese G. M., Paris E., Capone F. G., Stramaglia F., Wakita T., Terashima K., Yokoya T., Mizokawa T., Mizuguchi Y., Saini N. L.	4. 巻 22
2. 論文標題 The local structure of self-doped BiS ₂ -based layered systems as a function of temperature	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 22217 ~ 22225
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0cp03974h	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 Terada Noriki, Terashima Kensei, de Castro Pedro Baptista, Colin Claire V., Mamiya Hiroaki, Yamamoto Takafumi D., Takeya Hiroyuki, Sakai Osamu, Takano Yoshihiko, Kitazawa Hideaki	4. 巻 102
2. 論文標題 Relationship between magnetic ordering and gigantic magnetocaloric effect in HoB ₂ studied by neutron diffraction experiment	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 094435 ~ 094435
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.094435	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 Matsushita Tomohiro, Muro Takayuki, Yokoya Takayoshi, Terashima Kensei, Kato Yukako, Matsui Hirotsuke, Maejima Naoyuki, Hashimoto Yusuke, Matsui Fumihiko	4. 巻 257
2. 論文標題 Theory for High Angular Resolution Photoelectron Holograms Considering the Inelastic Mean Free Path and the Formation Mechanism of Quasi Kikuchi Band	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2000117 ~ 2000117
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202000117	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 Paris E., Joseph B., Marini C., Terashima K., Wakita T., Yokoya T., Mizuguchi Y., Mizokawa T., Saini N. L.	4. 巻 101
2. 論文標題 High-pressure x-ray absorption and diffraction study of the self-doped superconductor EuFBiS2	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 214526 ~ 214526
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.214526	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 Adachi Shintaro, Matsumoto Ryo, Yamamoto Sayaka, Yamamoto Takafumi D., Terashima Kensei, Saito Yoshito, Esparza Echevarria Miren, Baptista de Castro Pedro, Song Peng, Iwasaki Suguru, Takeya Hiroyuki, Takano Yoshihiko	4. 巻 116
2. 論文標題 Demonstration of electric double layer gating under high pressure by the development of field-effect diamond anvil cell	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 223506 ~ 223506
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0004973	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 Castro Pedro Baptista de, Terashima Kensei, Yamamoto Takafumi D, Hou Zhufeng, Iwasaki Suguru, Matsumoto Ryo, Adachi Shintaro, Saito Yoshito, Song Peng, Takeya Hiroyuki, Takano Yoshihiko	4. 巻 12
2. 論文標題 Machine-learning-guided discovery of the gigantic magnetocaloric effect in HoB2 near the hydrogen liquefaction temperature	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 NPG Asia Materials	6. 最初と最後の頁 35 ~ 35
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41427-020-0214-y	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 Okazaki Hiroyuki, Terashima Kensei, Billington David, Iwata Keiji, Wakita Takanori, Tanaka Masashi, Takano Yoshihiko, Muraoka Yuji, Yokoya Takayoshi	4. 巻 32
2. 論文標題 Change in the electronic structure of the bismuth chalcogenide superconductor CsBi ₄ -xPbxTe ₆ by dissociation of the bismuth dimers	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Physics: Condensed Matter	6. 最初と最後の頁 145501 ~ 145501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-648X/ab5e1a	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

[学会発表] 計13件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 寺嶋 健成, 王 威勝, 高野義彦
2. 発表標題 固体合金試料自動合成システム建設の試み
3. 学会等名 2023年 第84回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 寺嶋 健成, 董 拓, 高野 義彦
2. 発表標題 部分置換試料の超伝導転移温度グラフニューラルネットワーク学習
3. 学会等名 2024年 第71回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 寺嶋 健成, Baptista de Castro Pedro, 齋藤 明子, 山本 貴史, 松本 凌, 竹屋 浩幸, 高野 義彦
2. 発表標題 組成記述子ベース機械学習モデルのSHAP 解析
3. 学会等名 2023年 第70回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名	寺嶋 健成、Baptista de Castro Pedro、Esparza Echevarria Miren Garbine、松本 凌、山本 貴史、竹屋 浩幸、高野 義彦
2. 発表標題	レボジトリ/予備物性測定データ効率利用のためのニューラルネットワーク学習堅牢化・高速化
3. 学会等名	2022年 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年	2022年

1. 発表者名	寺嶋健成, P. B. Castro, M.G.Esparza Echevarria, 山本貴史, 松本凌, 竹屋浩幸, 高野義彦
2. 発表標題	物性/分光測定を効率化するニューラルネットワーク学習
3. 学会等名	第76回日本物理学会
4. 発表年	2022年

1. 発表者名	K. Terashima, P. B. Castro, T. D. Yamamoto, Z. Hou, H. Takeya, and Y. Takano
2. 発表標題	Machine-learning-aided exploration of magnetocaloric materials
3. 学会等名	MRM2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名	K. Terashima, P. B. Castro, T. D. Yamamoto, Z. Hou, H. Takeya, and Y. Takano
2. 発表標題	Magnetic refrigeration and machine-learning-aided discovery of HoB2: A promising candidate for working material
3. 学会等名	IWAMSN2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年	2021年

1. 発表者名 寺嶋健成、Pedro Baptista de Castro、山本貴史、Miren Garvine Esparza Eshevarria、松本凌、竹屋浩幸、高野義彦
2. 発表標題 ニューラルネットワークによる磁気冷凍材料の物性測定条件学習・予測
3. 学会等名 2021年第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kensei Terashima, Pedro Baptista de Castro, Takafumi D Yamamoto, Zhufeng Hou, Suguru Iwasaki, Noriki Terada, Claire V. Colin, Hideaki Kitazawa, Hiroyuki Takeya and Yoshihiko Takano
2. 発表標題 Magnetocaloric properties of HoB2
3. 学会等名 Thermag IX (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寺嶋健成、Pedro Baptista de Castro、山本貴史、齋藤明子、松本凌、安藤寛、竹屋浩幸、高野義彦
2. 発表標題 ErB2の磁気熱量効果：機械学習予測との比較
3. 学会等名 2021年第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 寺嶋健成、Pedro Baptista de Castro、山本貴史、竹屋浩幸、高野義彦、Hou Zhufeng、岩崎秀
2. 発表標題 機械学習による高性能磁気冷凍材料HoB2の発見
3. 学会等名 2020年度秋季低温工学・超電導学会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺嶋健成、P. B. Castro、山本貴史、岩崎秀、寺田典樹、C. V. Colin、北澤英明、竹屋浩幸、高野義彦
2. 発表標題 HoB2における二段の磁気転移と巨大磁気熱量効果の観測
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺嶋健成、P. B. Castro、Z. Hou、山本貴史、岩崎秀、竹屋浩幸、高野義彦
2. 発表標題 機械学習を指針とした磁気冷凍材料HoB2の発見
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計0件

〔取得〕 計1件

産業財産権の名称 磁気冷凍材料、これを用いたAMRベッド、および、磁気冷凍装置	発明者 高野義彦/竹屋浩幸/ 寺嶋健成/カストロベ ドロ/山本貴史/齋藤	権利者 国立研究開発法 人物質・材料研 究機構
産業財産権の種類、番号 特許、7210072	取得年 2023年	国内・外国の別 国内

〔その他〕

当初予定の最終年度に研究室が火事被災したため、研究期間の延長を行った

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