

# 計算科学とデータ科学の連携による 実験データ高度解析手法の社会実装

Experimental data analysis coordinated with computational science

## 概要

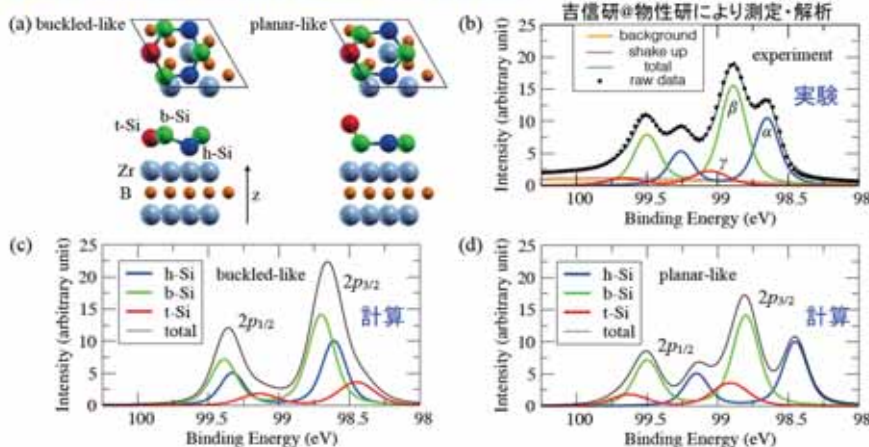
先端実験装置から出力される物質・材料データを、シミュレーション手法とデータ科学的手法の連携により解析するスキームを産業界や実験家などに紹介し、講習会等も実施して社会実装を図る。  
We investigated a scheme to analyze the material data output from advanced experimental apparatuses by the cooperation between simulation methods and data scientific methods.

## 研究実施例

### Research Examples

#### 内殻電子の絶対束縛エネルギーの計算手法開発とシリセンの構造決定

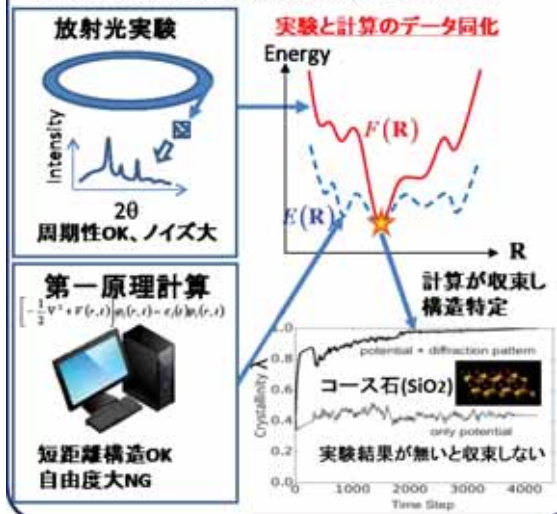
構造モデル(左上図)、実験XPS(右上図)、buckled-likeモデルに対する計算XPS(左下図)、planar-likeモデルに対する計算XPS(右下図)。実験と理論の比較から、planar-likeモデルの構造が実験的に生成されていることが明らかとなった。



C.-C. Lee et al., Phys. Rev. B 95, 115437 (2017); T.Ozaki and C.-C. Lee, Phys. Rev. Lett. 118, 026401 (2017).

#### 複雑物質の構造探索

◆実験と計算の強みを活かした構造探索  
⇒ 収束困難な計算の効率を飛躍的に向上!



## 最先端物質科学シミュレーション手法とデータ駆動型材料探索手法のエコシステム

Scheme for ECOSYSTEM of computational and data driven materials science

