

# NIMSにおけるマテリアルデータ戦略



物質・材料研究機構 理事長

橋本 和仁

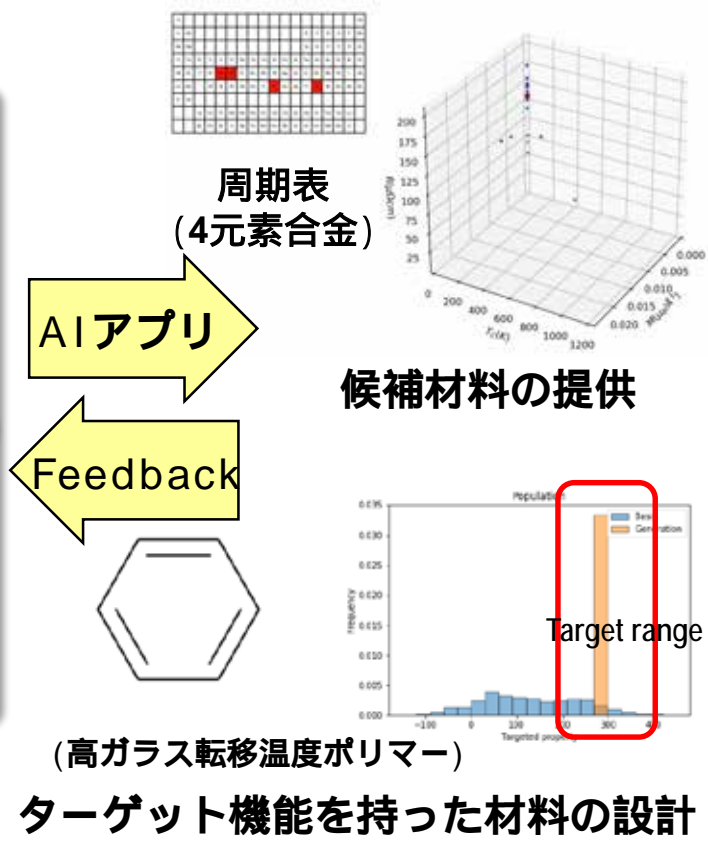
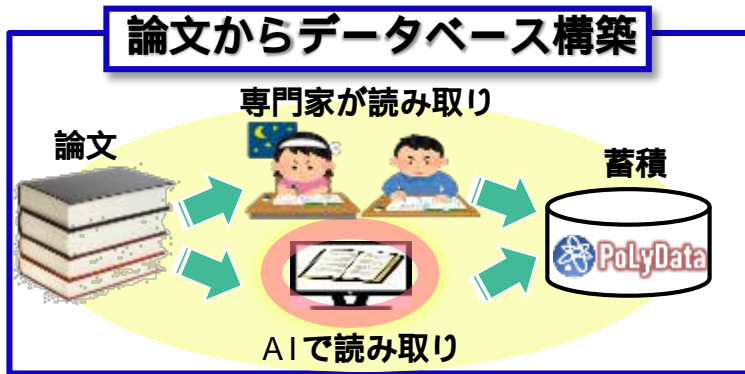
# マテリアルデータプラットフォーム事業

研究所の特性を活かしたプラットフォーム戦略

データをつくる

データをためる

データをつかう



平成29年度 (2017)	平成30年度 (2018)	令和元年度 (2019)	令和2年度 (2020)	令和3年度 (2021)	令和4年度 (2022)
概念設計	詳細設計	版 (所内公開)	版 (所外公開)	公開検証	サービスイン



データ利用者の認証

研究データ  
収集 ~ 高付加価値化

研究データ  
蓄積 ~ 管理

研究データ  
共用 ~ 公開

材料データベース  
公知データベース



装置等、共通マスターの管理システム



材料辞書MatVoc



高速解析クラス

ハードウェア基盤

VM基盤

アクセスログの統合管理・監視・利用モニタリングシステム

# 実験データの自動収集事例

測ったそばから**使える形**でためる

現在110台に設置済み



**成膜装置:**  
新材料の合成



**XRF:**  
元素組成の分析



**XRD:**  
結晶構造の分析



**AFM:**  
表面形状の分析



**XPS:**  
化学種の分析

**データ構造化・登録システム**

様々な実験装置からのデータを一覧

検索やフィルタで絞り込み

実験データ  
説明情報

タグ付

電子顕微鏡写真

スペクトル

解析も

# NIMSデータ構造化済の装置リスト(18機種)

	装置一般名称	装置メーカー	機種
1	電子プローブ微小部分析	日本電子	XM15003-0003
	電子プローブ微小部分析	日本電子	XM809001-0001
2	走査型オージェ電子顕微鏡	日本電子	JAMP-9500F
3	グロー放電質量分析法	VG	VG9000
4	FIB-SEM	FEI	Helios G4UX & 650
5	高精度自動四探針シート抵抗計測器	ナプソン	Model RT-3000(S)/RG-80N
6	薄膜X線回折装置	BRUKER	D8-GADDS
7	蛍光X線組成分析装置	島津製作所	uEDX1400
8	DART-MS 質量分析	島津製作所	MSIR03
9	高速分注装置	ガイガー	CERTUS
10	X線回折装置	リガク	SmartLab
11	大気中光電子分光装置	理研計器	AC-5
12	硬 線光電子分光法 ( SPring-8 BL15XU)	Scienta Omicron, Inc.	HEA-4MS249
13	X線光電子分光法 ( SPring-8 BL23)	Scienta Omicron, Inc.	EA125 ( VAMASフォーマットで出力されたデータを構造化 )
14	X線光電子分光法	Thermo Fisher Scientific	Sigma Probe
15	走査透過電子顕微鏡	Thermo Fisher Scientific	Titan
16	X線光電子分光法、反射電子エネルギー損失分光法	ULVAC-PHI	ESCA5500
17	X線光電子分光法	ULVAC-PHI	Quantum2000
	X線光電子分光法	ULVAC-PHI	QuanteraSXM
18	X線吸収分光法 ( SPring-8 BL14B2)	SPring-8 JASRI	検出系はJASRIによって構築

黄色表示

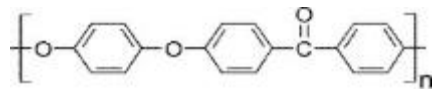
装置のデータ情報、データ形式公開に同意している装置メーカー及び機種

# データ駆動型の新規材料設計・合成

約5,000個のデータで学習

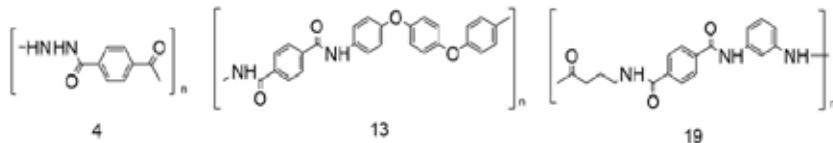


**Properties (Y)**



**Structure (S)**

多数の候補分子から塗布性や合成容易性を考慮して新規分子選択



**合成実験**

**無機材料並み新規ポリマー**

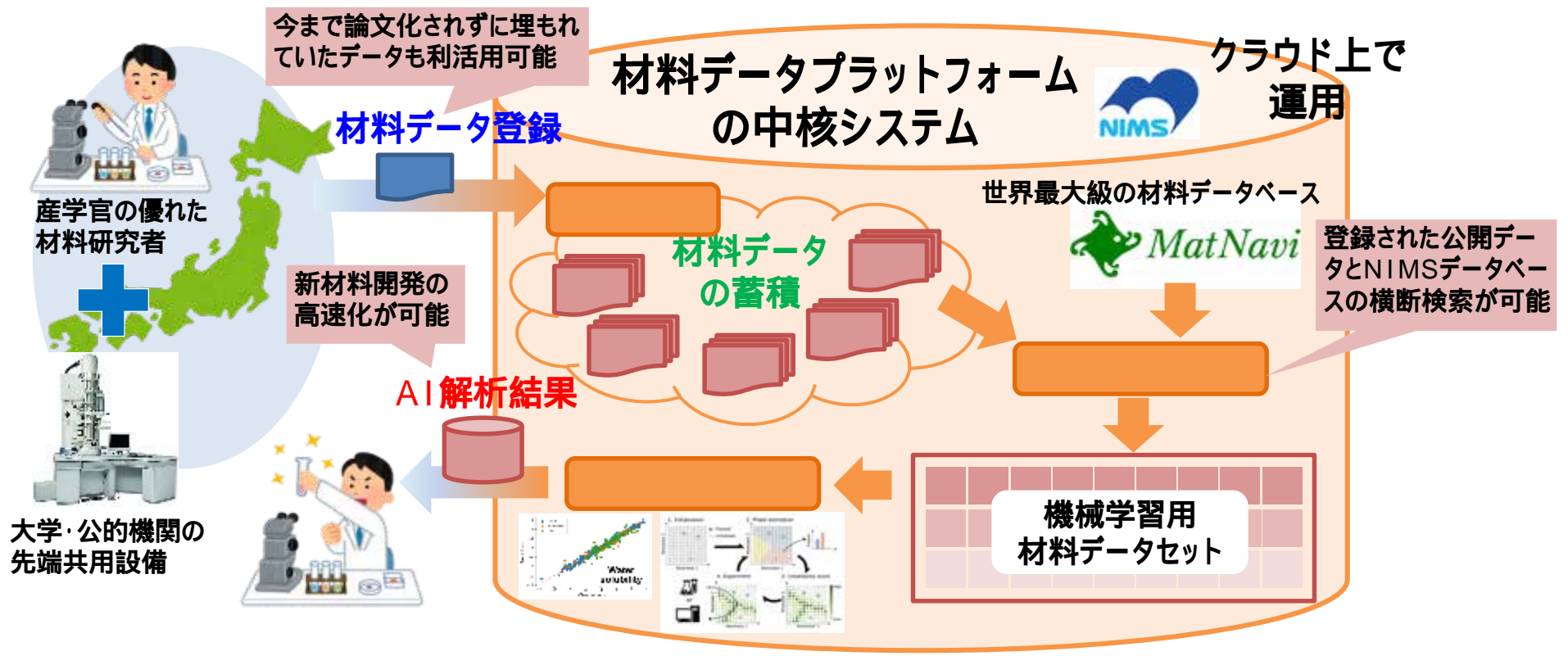
$$= 0.41 \text{ W / m} \cdot \text{K}$$



# 全国のマテリアルデータ集約へ

## データ駆動型研究による日本の新材料開発を加速

### ⇒ マテリアル・イノベーション創出



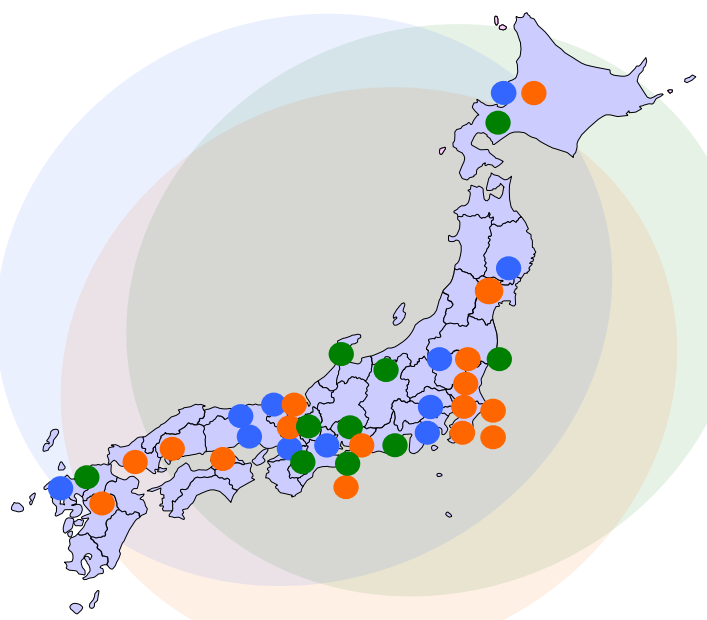
# マテリアル先端リサーチインフラ（データ創出）

R3年度開始

【文科省既存事業】

## ナノテクプラットフォーム

3つの技術分野に対応したプラットフォームを形成し、設備共用を実施



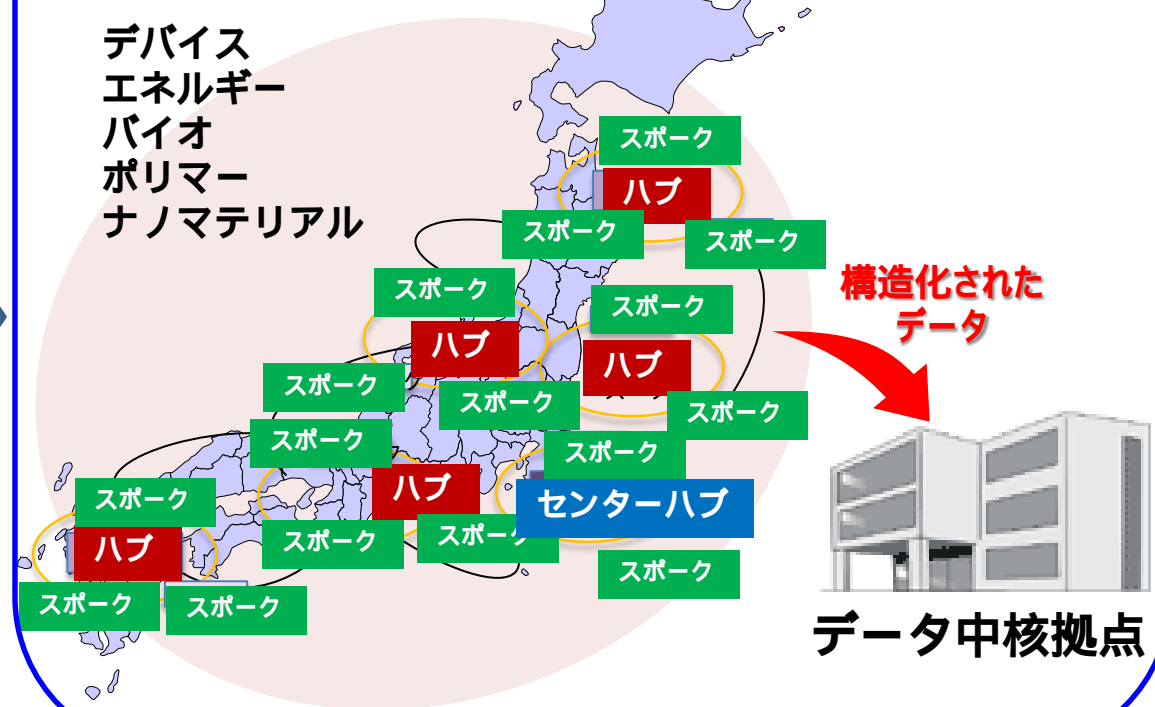
【文科省新規事業】

## マテリアルリサーチインフラ

重要技術領域ごとにネットワークを形成

ナノプラの共用設備で創出されるデータを収集・集積・構造化

デバイス  
エネルギー  
バイオ  
ポリマー  
ナノマテリアル

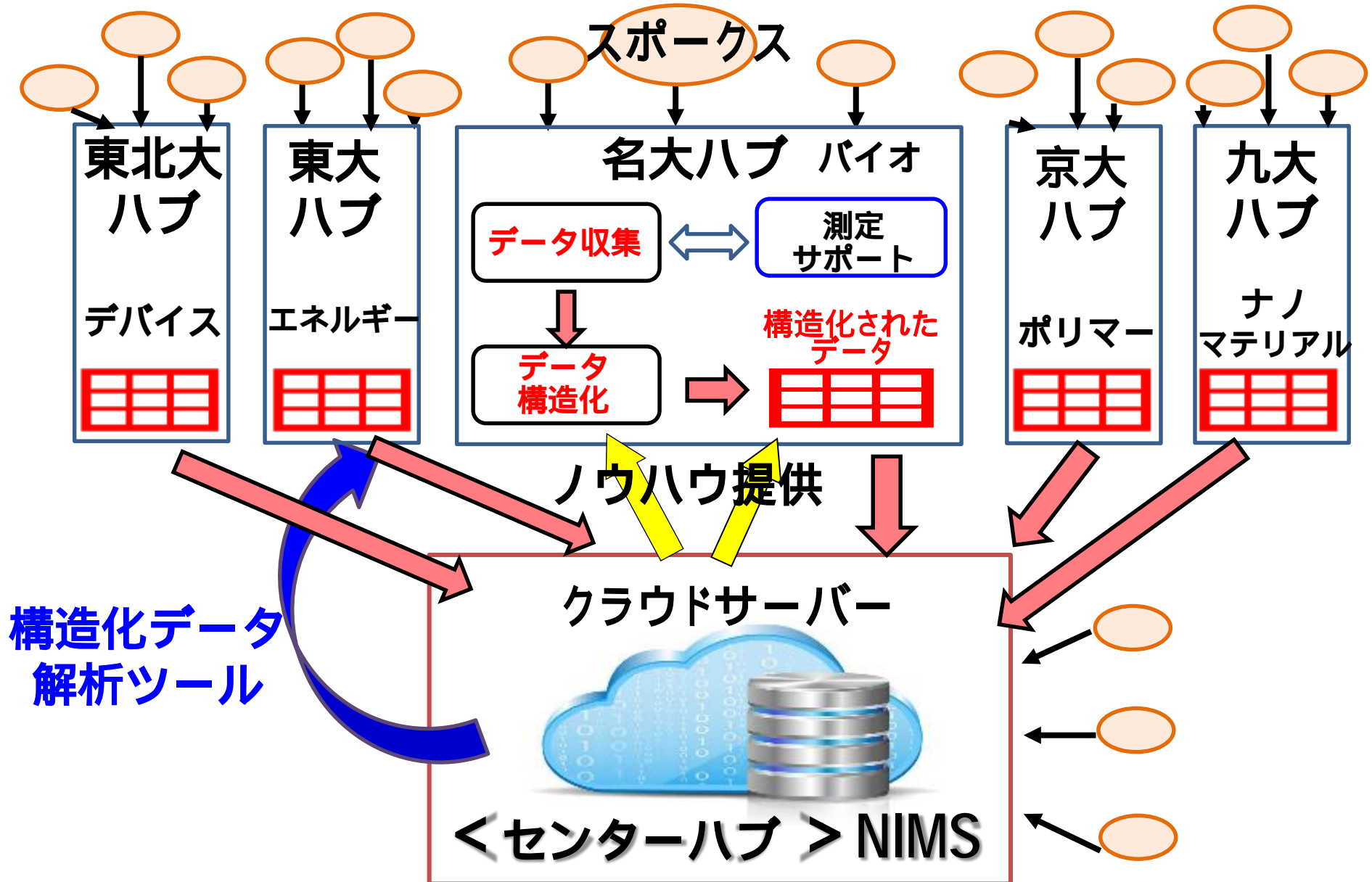


公募審査の結果、25法人（大学、国研）による体制が決定  
センターハブ  
ハブ（5機関）  
物質材料研究機構NIMS)  
東北大学、東京大学、名古屋大学、九州大学、京都大学



# データ収集システム

R3年度整備開始



# 装置メタデータ自動翻訳に関する進め方

## 《ハブ機関の役割》

NIMSの実績 18機種

内容 翻訳スクリプトの作成。

目安 1ハブで2021年度2機種分（6ハブ×2機種＝12機種を目標に）

期日 今年度末（2022/3末）

## 《センターハブ機関の役割》

2021年度中にデータ構造化のためのシステムを開発

2022年4月からシステムに翻訳スクリプトを実装開始

2週間/1機種を目安に秋までに12機種の実装完了を目標

## 補足説明

自動翻訳 装置のファイルに書かれているメタデータをプログラム抽出。**装置メーカーに情報提供を協力して頂く必要あり。**

プログラム言語 python（ハブ機関でデータ構造化コードを共有することを想定。基本言語を統一することで共有や学び合いがしやすくなる）

2022年度は当該12種類についてIoT（別資料）を介したデータ転送試験

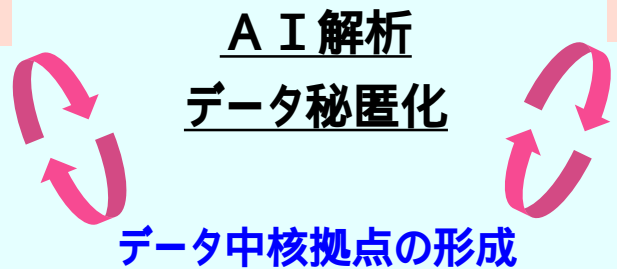
# マテリアルデータからマテリアル・イノベーションへ

データ基盤の整備と並行して、データ流通を促進し、産学における、マテリアルデータを活用した研究開発の高速化、迅速な社会実装に向けた取組みが必須。

データ流通の推進	<u>データ構造の標準化</u> や <u>データ秘匿化</u> など
データ解析の高速化	<u>AI解析の構築</u> など
データ駆動型研究の促進	<u>産学を巻き込んだ研究開拓の推進</u> など

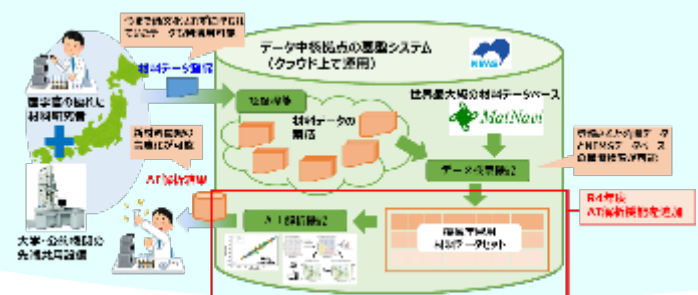
大学等への展開

データ駆動型研究の  
先導的成果の創出



産業界への展開

産業界とアカデミアを結ぶ  
オープンプラットフォームの形成



# 世界トップレベルの物質・材料研究リーダー国際公募

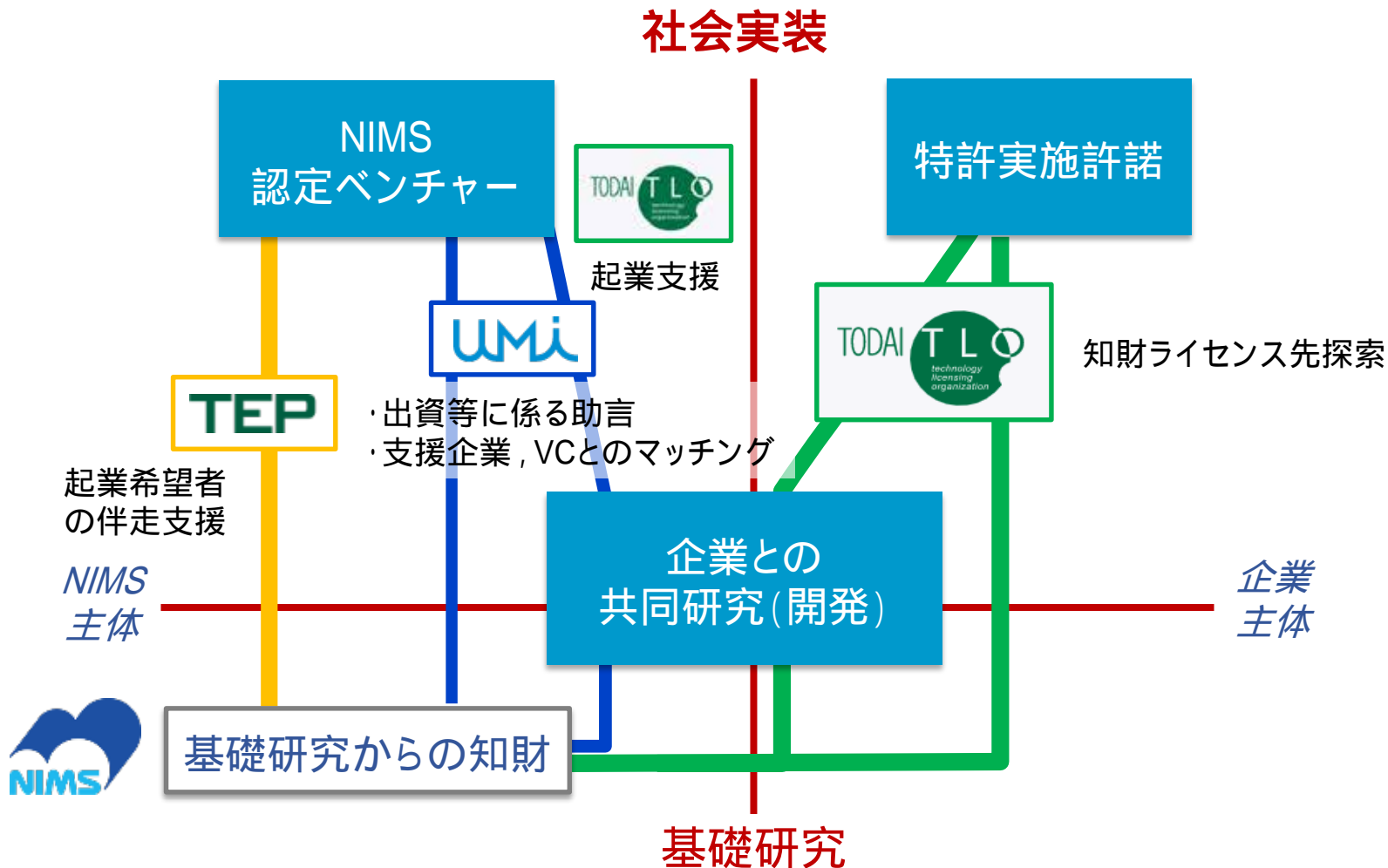
1. スタートアップ資金として初年度最大1億円の研究費を配分。その後も状況に応じた特別な予算措置の配慮あり。
2. 研究室スペースを優先的に配分。
3. 新規グループ立ち上げのため、着任時又は着任後に**NIMS外より定年制職員1名の採用枠を付与**。加えて、NIMS内の定年制職員を参画させることも可能。
4. **NIMS連携大学院の教員\***になることで、大学院生を受け入れることが可能。  
( \*別途審査が必要 )
5. 給与 定年制職員給与規程に基づき、業績・経験等に応じて理事長裁量により決定。
6. 任期 なし。定年は国家公務員の定年に従う。但し特命研究員**65歳\***、フェローは**70歳\***までグループ継続可能。( \*別途審査有り )

NIMS公式ウェブサイト トップページ



# 研究成果の事業化に関する外部との連携

NIMS研究成果の社会実装の促進のため、技術移転機関（TLO）、ベンチャーキャピタルを含む支援機関との連携体制の構築を推進。



(一社)TXアントレプレナーパートナーズ

ユニバーサル・マテリアル・インキュベーター(株)

(株)東京大学TLO