

マテリアル分野におけるデータ基盤 蓄積から活用に向けた課題

NIMS

技術開発・共用部門長

出村雅彦

文部科学省マテリアルDXプラットフォーム事業の全体像

* マテリアル革新力強化戦略

内閣府統合イノベーション戦略推進会議決定

2021年4月27日

基本方針2：データ駆動型研究開発基盤の整備

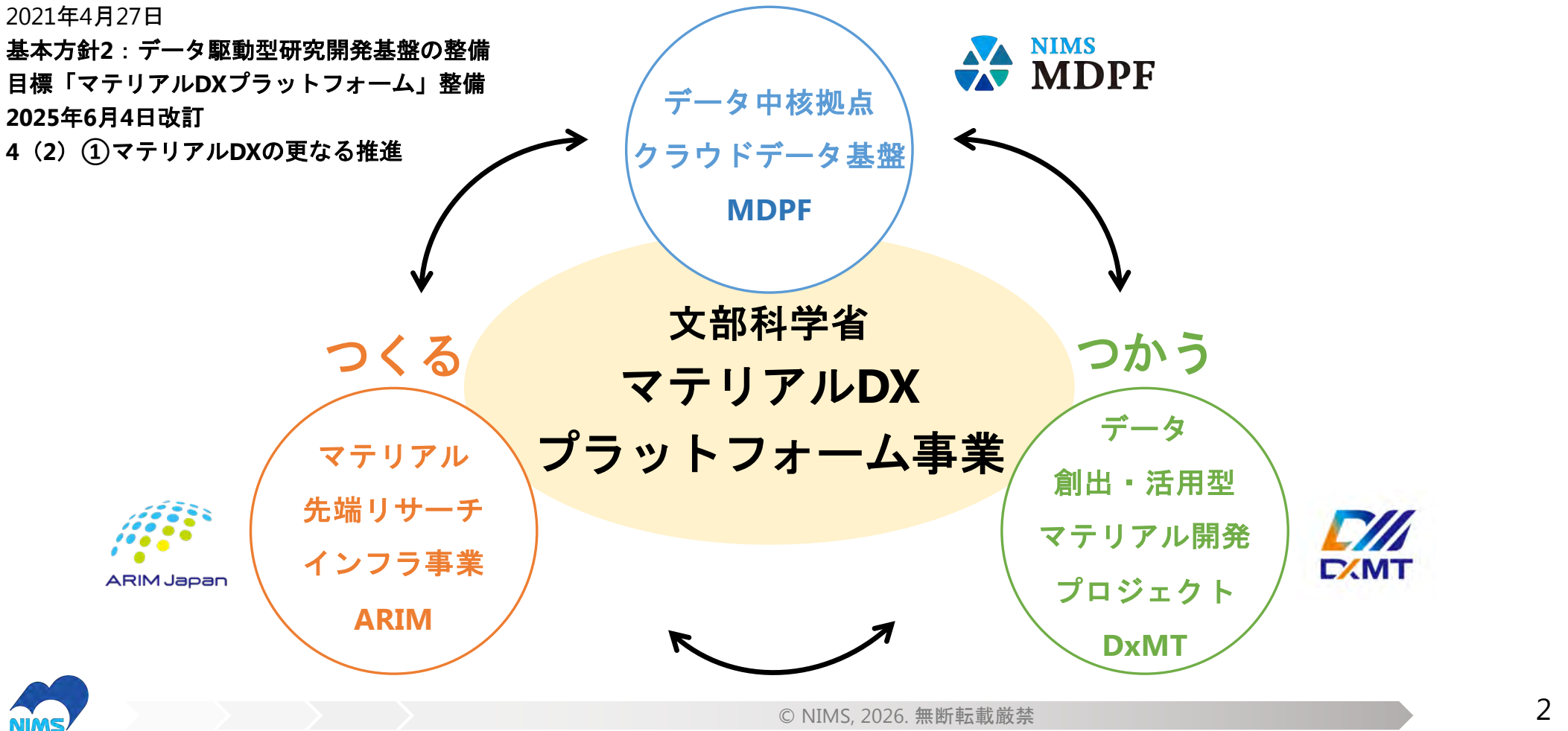
目標「マテリアルDXプラットフォーム」整備

2025年6月4日改訂

4 (2) ① マテリアルDXの更なる推進

ためる

蓄積したデータの活用ステージへ



NIMSにおけるデータ蓄積の取り組み：世界最大級の材料データベース構築

ユーザ 8,921 総アクセス 36,779,247 2023.1.17~2026.3.31

専門家がキュレーション
学術論文から

無機材料

 **世界最大**
無機材料データベース



結晶構造	状態図	特性
409,723	49,650	568,195



高分子

 ポリマー 31,160
物性 568,950

金属・合金

 金属500種+機械的性質・クリープ・疲労：158,380
 CT曲線図: 214; 硬度: 2213; 金属組織図: 627

基盤的計算データベース

- 計算状態図データベース 
- 電子構造計算データベース 

目的に応じたデータベースの新規開発



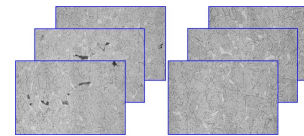
電池材料データベース
(AtomWork-Battery)

- 固体電解質 3,728
- 正極材料 1,634
- バッテリーセル 2,228



Starrydata 104,000+試料・205,000プロット

熱電材料・電池材料・磁石材料・・・



- 金属組織写真データ群



- 高温熱物性データベース
JAXA提供データ

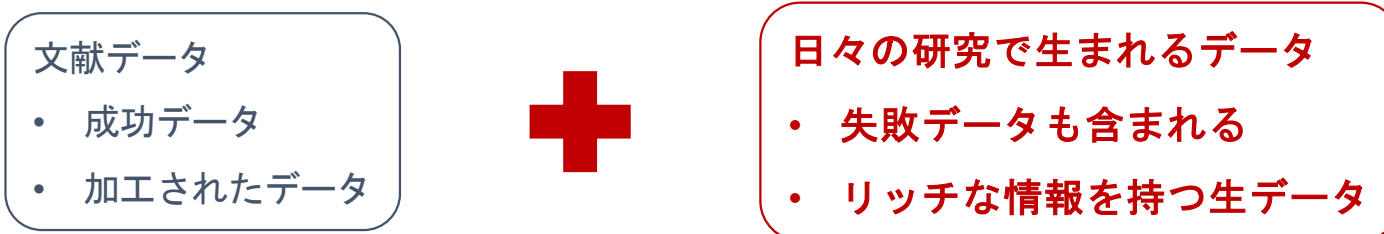
- PhononDB: 高精度フォノン計算DB 10,000+
- ホイスラ合金電子計算DB 51,000+

リファレンス
データ

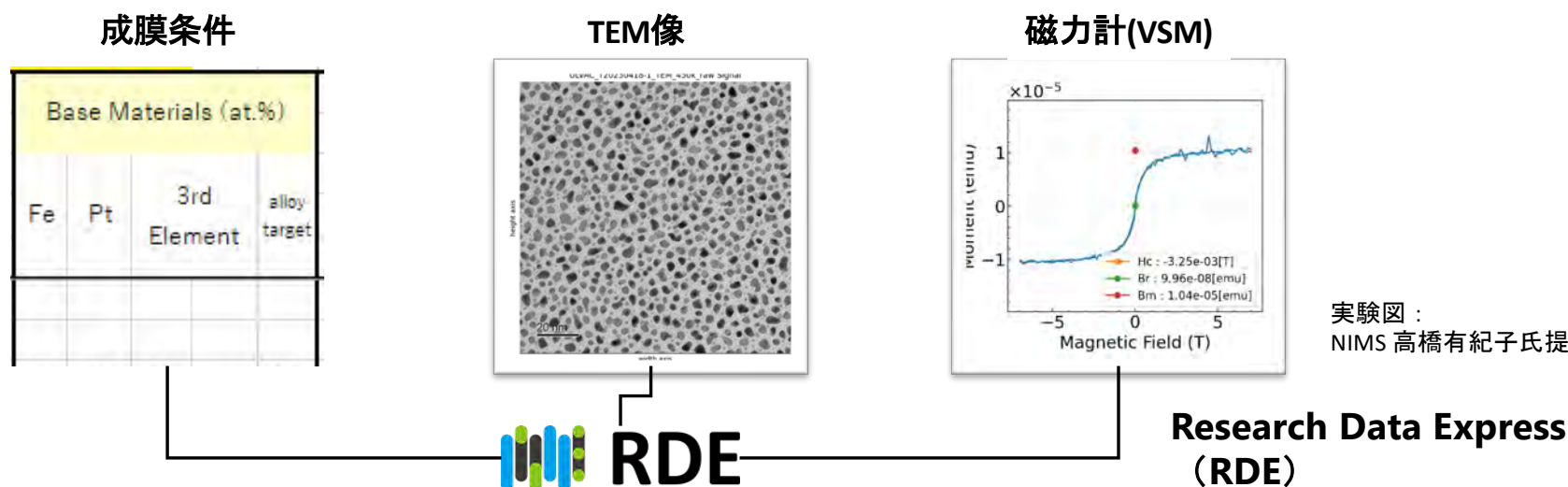


世界を先導する取り組み：文献からだけでなく、日々の研究からデータを直接蓄積

材料データをめぐる国際競争が激化：学会、出版社等 >> 研究機関の特長を活かした戦略へ



NIMSは独自にデータ構造化・収集システムを開発



RDE : マテリアルの多様な実験データを構造化する

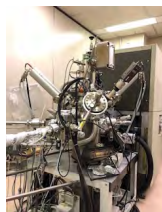
2023.1.17
リリース

装置・研究ワークフロー毎に構造化のためのテンプレートを設計



<https://dice.nims.go.jp/services/RDE/>

装置



生ファイル



カスタムした
入力フォーム



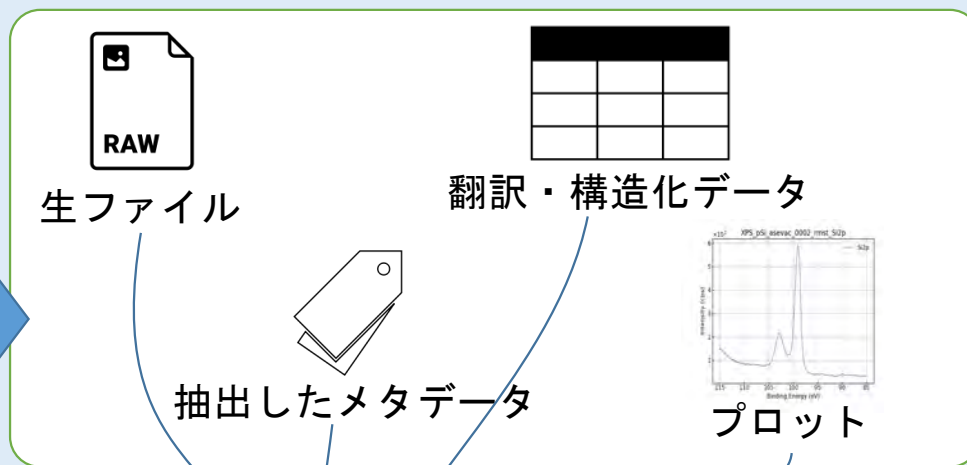
プロセス条件
実験条件
...

測定と同時に
アップロード

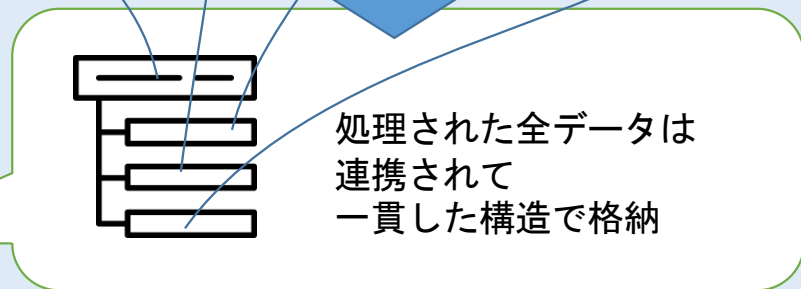
データセット
テンプレート

アクセス制限

柔軟に共用範囲を
設定可能

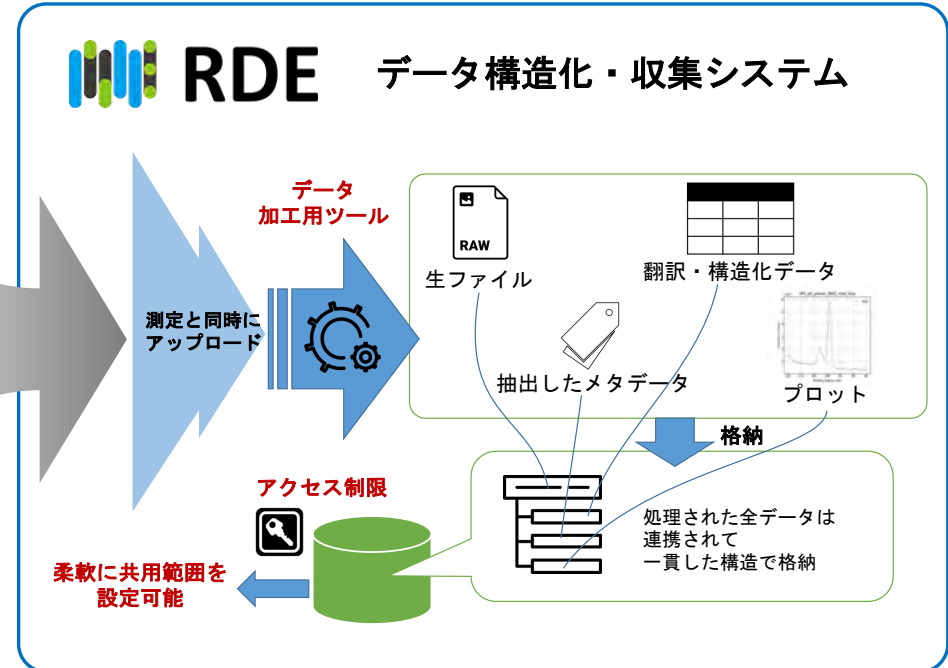
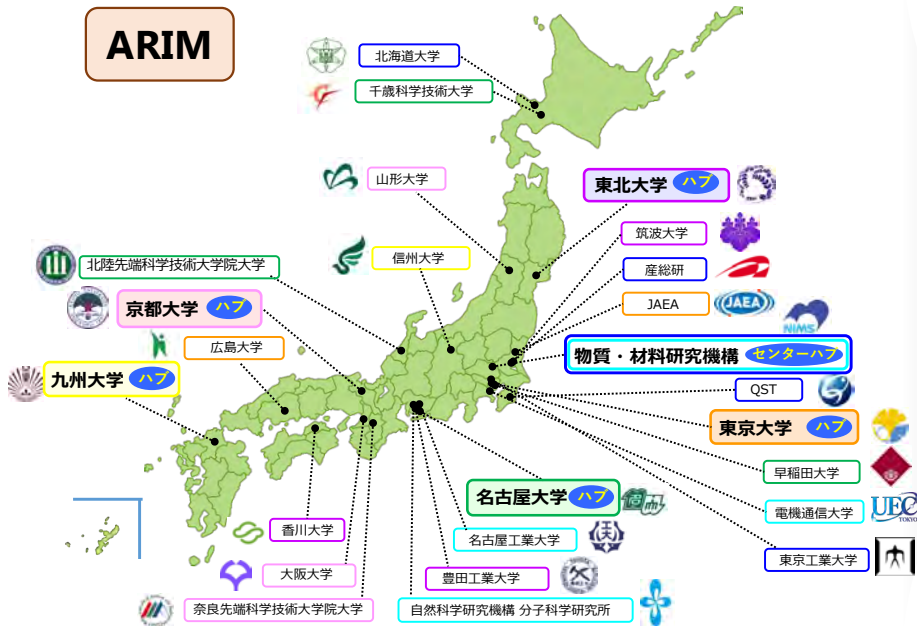


格納



RDEの利用実績：研究データ登録の日本全国への広がり

データ中核拠点 



データ構造化対応装置

26機関 **1030**台

ARIM・DxMT・GteX等
国プロ事業で活用

▶ ユーザー数：5,956
データファイル：4,112,336

2026-3-31時点

RDE活用例：磁性材料の合成実験レシピと種々の計測データの集約

NIMS 高橋有紀子氏よりの資料提供

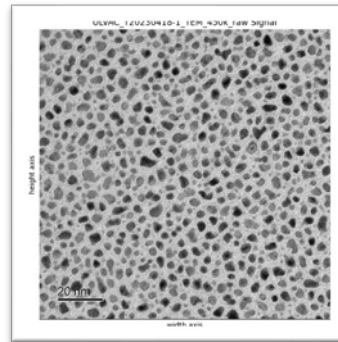
- ✓ 膜合成条件と各種評価を紐づけて管理
- ✓ 解析の自動処理で研究効率向上

成膜条件

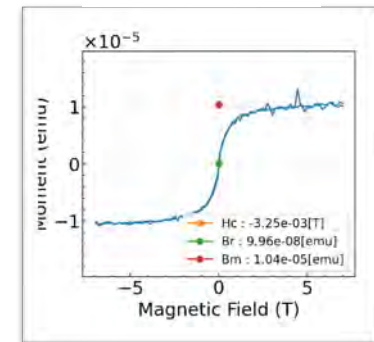
Base Materials (at.%)			
Fe	Pt	3rd Element	alloy target



TEM像



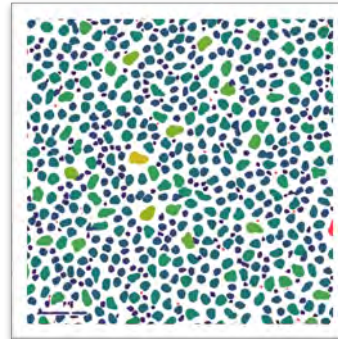
磁力計(VSM)



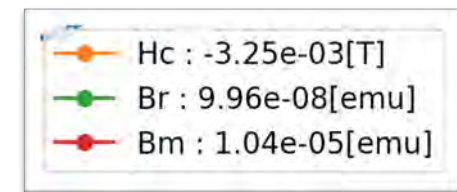
テンプレート化された電子ラボノート

登録者、サンプル名、到達真空度、基板、コメント、ガス種、ターゲット、プロセスパラメータ(レーヤー名・カソード・温度・保持時間・ガスMFC#、ガス流量、ガス圧、DF&RFパワー、成膜レート、時間、膜厚)などの記録

自動でセグメント



自動で特徴量抽出



XRD, SQUID, VSM, TEMのデータをRDEサーバーへ転送し、各データを関連付けて蓄積

磁化曲線を可視化し、保磁力(Hc)、残留磁化(Br)、最大磁束密度(Bm)を自動的に求めて記録

マテリアルDXプラットフォームが目指すデータエコシステム

エンバーゴ期間（2年）後、広域シェア



データ構造化対応装置
26機関 1030台
マテリアル
先端リサーチインフラ
ARIM



機械学習に向けた
形式でデータを登録

データを登録し、
様々なデータと共に
データ駆動開発!



日本全国の
大学・企業

SIP・GteX等
重要国家PJ
にて活用

先端
装置

計測
データ



データ創出・活用型
マテリアル研究開発
プロジェクト
DxMT

AI解析結果

研究データ

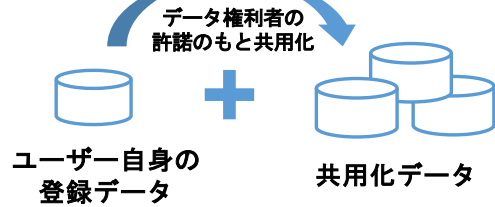
データ中核拠点 MDPF

登録ファイル数

RDE 4,112,336

収録データ数

MatNavi 2,805,703
NIMS Materials Database



2025.12一般公開

pinax クラウド上で材料データ解析と機械学習を実行

<p>1 材料データ</p> <p>NIMSが蓄積した高品質な 材料データを活用 自分の研究データとの組み合わせも可能</p>	<p>2 解析環境</p> <p>仮想デスクトップ環境を利用 環境構築なしですぐに解析開始</p>	<p>3 来歴管理</p> <p>どのデータを、どんな手順で 学習したかを記録・可視化 再現可能な知見に変える</p>	<p>4 共有</p> <p>個人 → グループ → 他グループ → 全体へ段階的に共有 安全に再利用・継承</p>
---	---	---	--

pinax

Minamoto et al. STAM: Methods **6**, 2629051 (2026). doi:10.1080/27660400.2026.2629051.

2026年3月31日時点



広域シェアサービス：世界初、論文にない実験データを提供



ARIMデータ共用サービス 2025年9月30日リリース

https://nanonet.go.jp/data_service/

世界初 リアル実験データ	AIフレンドリー データ構造化済み	豊富なメタデータ
11万件@9/30 継続的データ拡充 +数十万件/年	データセット DOI付与	多様な マテリアルデータ 先端計測から半導体まで



お試しの
オープンデータも！

ライセンス	公共・アカデミア	一般
シングル	12,000円/年	24,000円/年
グループ (5人以上)	60,000円/年	120,000円/年

データ利用の成果物は
利用者帰属







NIMSデータ：リファレンス・論文・ワーキングの三層構造

2026年3月31日時点

質・系統性		多様性					
リファレンス(実験)		リファレンス(計算)		論文抽出データ		研究ワーキングデータ	
Kinzoku (金属材料)	特性データ数 158,380	CompES-X (電子構造計算)	データ数 55,839	AtomWork-Adv (無機材料)	結晶構造 409,723	RDE データファイル数 4,112,336	
NIMS構造材料 データシート	258 冊	CPDDB (計算状態図) <small>*Digital-CPDDB 含</small>	データ数 1,226	AtomWork-Battery (電池材料)	材料 5,362 物質 1,117		
CCTD (CCT線図)	CCT曲線図 214	HeuslerDB (ホイスラ合金 電子計算)	データ数 51,373	Starrydata (材料物性)	試料 104,000+		
Thermophysical Property (高温熱物性)	特性データ数 385	MDR phonon calculation database (フォノン計算)	データ数 10,034	Kakusan (拡散)	データ数 31,375		
MDR XAFS DB (XAFSスペクトル)	スペクトル数 2,264	MDR lattice thermal conductivity calculation database (格子熱伝導率計)	データ数 4,811	MDR SuperCon Datasheet (超伝導材料)	レコード数 26,321		
				PoLyInfo (高分子)	ポリマー数 31,160		

無機
・
金属

高分子

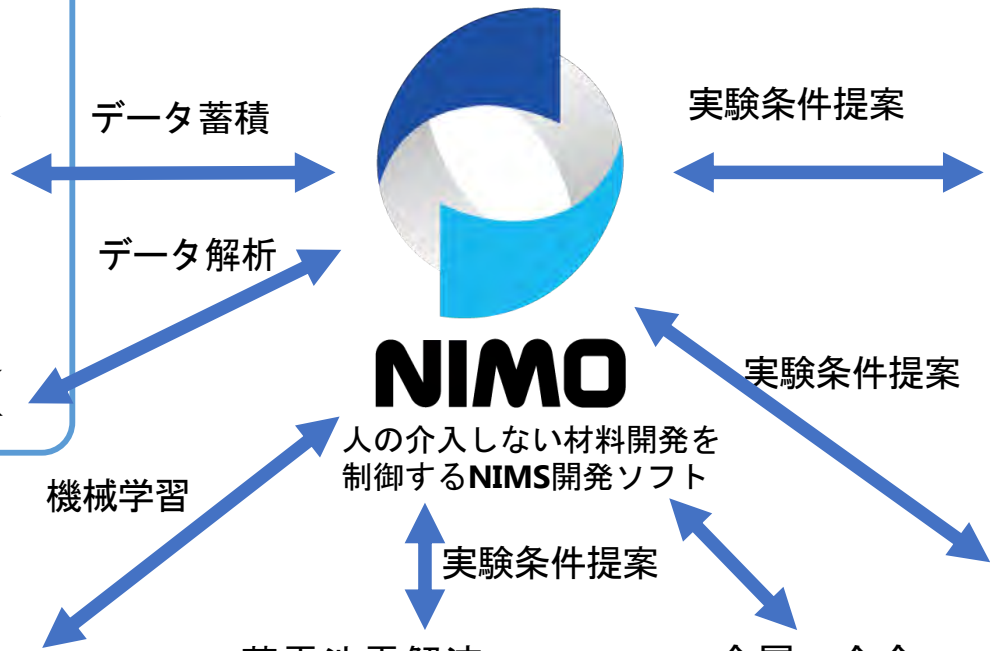
-  フルオープン
-  有償
-  閲覧のみ無償/要登録 (MatNavi) :
-  広域シェア



リファレンスデータの革新：自動自律実験の拡充

中枢システム

 **MDPF**
 データ蓄積システム
 **RDE**
 AI解析基盤
 **Pinax**



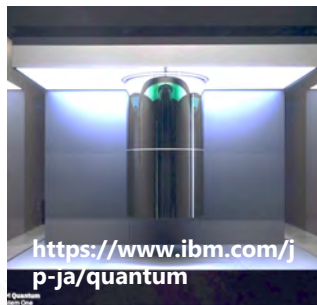
磁性・半導体薄膜



ポリマー・分子合成



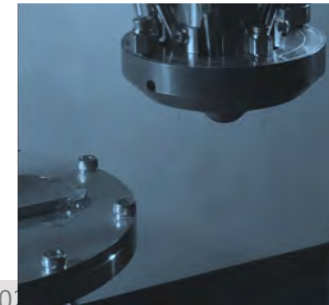
量子計算技術



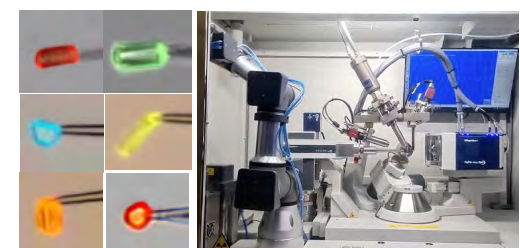
蓄電池電解液



金属・合金



セラミックス粉体



AI時代における研究データの価値変化

時代変遷	データの主用途	主な利用形態	データ価値
データ時代以前	人による参照	検索・閲覧	研究開発の補助情報
データ時代	AI解析・機械学習	データセット	AI学習資源
AI for Science時代	AIによる知識生成	AI・知識提供	戦略資源

データがAI学習資源になったことで、
バルクデータそのものが競争力を持つ時代に

NIMSでの対応例

- ・ スクレイピング制限
- ・ ライセンス提供
- ・ 広域シェア

AI時代の研究データ共有：「広域シェア」という第三の領域

全世界 オープン

- 学術基盤
 - 国際貢献
- ベンチマークデータ
→ 一部を抽出して
オープン化
 - 計算データ

広域シェア

- 認証・利用管理
 - 産学官コミュニティ共有
- 研究ワーキングデータ
→ エンバーゴ後
 - 登録・認証制
 - AI研究利用

機関・企業内 クローズド

- 競争力源泉
 - 知財保護
- 製造ノウハウ
 - 高付加価値化データ
 - 国家戦略領域

「全面公開」か「全面非公開」ではなく、
産学官共有・一部ベンチマーク化など戦略的共有が重要

多くの研究者がデータ活用の恩恵を受けるために：データ提供から知識提供へ

世界有数の材料データ基盤を整備

利用ハードルの高さ

- 専門知識・ツール操作習得コストが高い
- 探索・前処理・解析の負担が大きい

探索空間の広大さとデータの偏在

- データの蓄積は進んでいる。
- しかし材料設計空間は極めて広大
- 目的条件に直接一致するデータは限定的

次の段階としてAIによる知識活用へ

AIエージェントによる利用支援

- 自然言語でデータ検索・解析支援
- 利用プロセス自動化・簡便化

マテリアル基盤モデルによる知識活用

- 広範な材料データを横断学習した基盤モデルにより、未観測領域の特性を推定

AI支援によって「誰もが使える材料データ基盤」へ

AI for Materials構想 : Data x AI x 自動実験 = 革新的材料創出

持続可能性の確保

強靱性の確保

経済安全保障の確保

ウェルビーイング・豊かさの実現

革新的材料の創出

構造材料

超耐熱
耐水素脆化
高耐久インフラ
自己修復
AM

磁性材料

磁性熱動体
磁気記録
モーター磁石
磁気抵抗メモリ
磁気冷凍

半導体材料

二次元半導体
ニューロモーフィック
パワー半導体
有機半導体
高周波通信

ソフト材料

リサイクルポリマー
センサー・アクチュエータ
バイオアダプティブ
導電性
接着・コーティング

エネルギー材料

蓄電池材料
有機ペロブスカイト
水素製造
超伝導材料
原子力・核融合

光機能・電子材料

蛍光体材料
ダイヤモンド量子材料
光電変換
光触媒
光通信

サイバー AI-nativeデータ・ツール群



マテリアルAIプラットフォーム

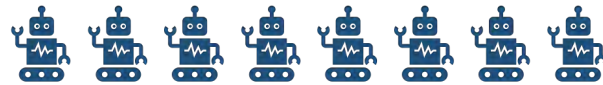
操作

データ

操作

データ

AIエージェント



マテリアル基盤モデル



操作

データ

操作

データ

フィジカル 自動自律・先端計測・材料創製



大規模汎用基盤モデル

AI for Materials時代に向けたNIIへの期待

NIMS

マテリアル 分野

- 材料データ創出
- 材料データ蓄積
- 実験・研究現場
- データ構造化
- ドメイン知識
- 材料特化AI

学術基盤としてのNIIへの期待

分野横断 データ連携

- メタデータ連携
- 知識グラフ
- 学術知識統合

AI知識基盤 技術

- マルチモーダル
基盤モデル構築
- AIEージェント
- 知識提供基盤

データ基盤・ 信頼保証技術

- 認証・認可
- データ処理性能
- 柔軟なデータ管
理技術

求められるデータベース技術の例

これまでのRDE：設備中心＋カスタマイズ

- 共用設備：構造化を標準化
- 研究室：カスタマイズで多様な事例へ

新戦略：より柔軟に多くの研究室での活用へ

- 後から構造化で最小労力で蓄積
- Lakehouse系技術を検討

まとめ：AI時代に向けたマテリアルデータ基盤の課題と方向性

- データ蓄積から知識活用へ
 - リファレンス・論文抽出・研究ワーキングデータの三層構造で世界有数の材料データ基盤整備
 - AI時代には「データ提供」から「知識提供」への転換が重要
- フルオープンとクローズドの間として「広域シェア」・「一部ベンチマーク化」
 - AI時代には学習資源としてのデータ価値増大
 - 産学官コミュニティの中での戦略的シェア
 - 一部ベンチマーク化による戦略的オープン
- AI for Scienceに向けた次世代基盤へ
 - AIエージェント・マテリアル基盤モデル
 - AI技術・認証認可・データベース技術でNIIとの連携期待

柔軟なデータ蓄積・戦略的オープン&クローズド・AI知識化を統合した
次世代研究基盤が研究力を左右する時代へ