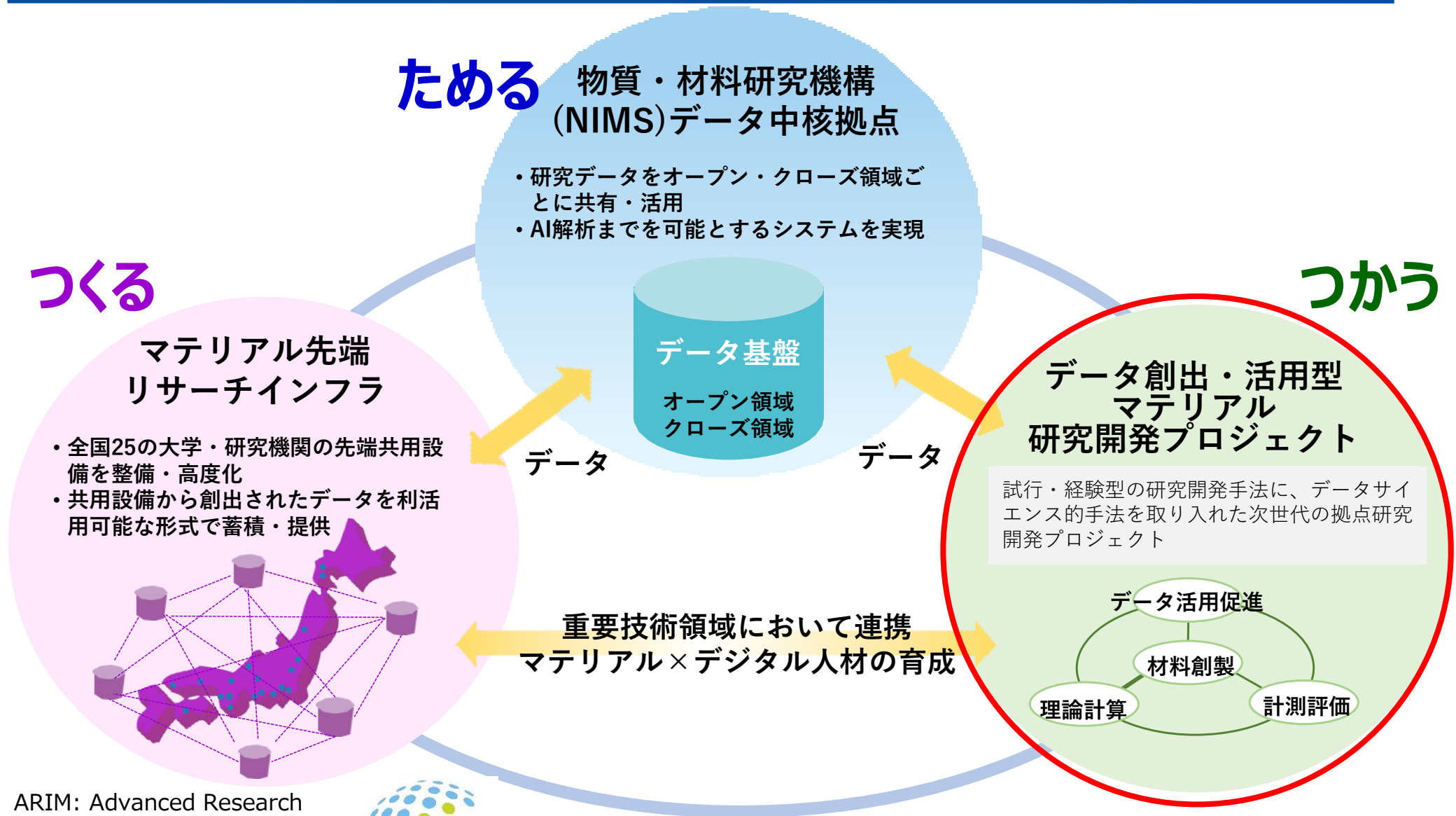




データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト (DxMT) の取組

令和5年12月1日 ナノテクノロジー・材料科学技術委員会

DxMT PD 栗原和枝



ARIM: Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan



マテリアル先端リサーチインフラ ホームページから一部加工
< <https://www.nanonet.go.jp/pages/arim/JPN/gaiyou.html> >



Data x Materials → DxMT

<https://dxmt.mext.go.jp/>

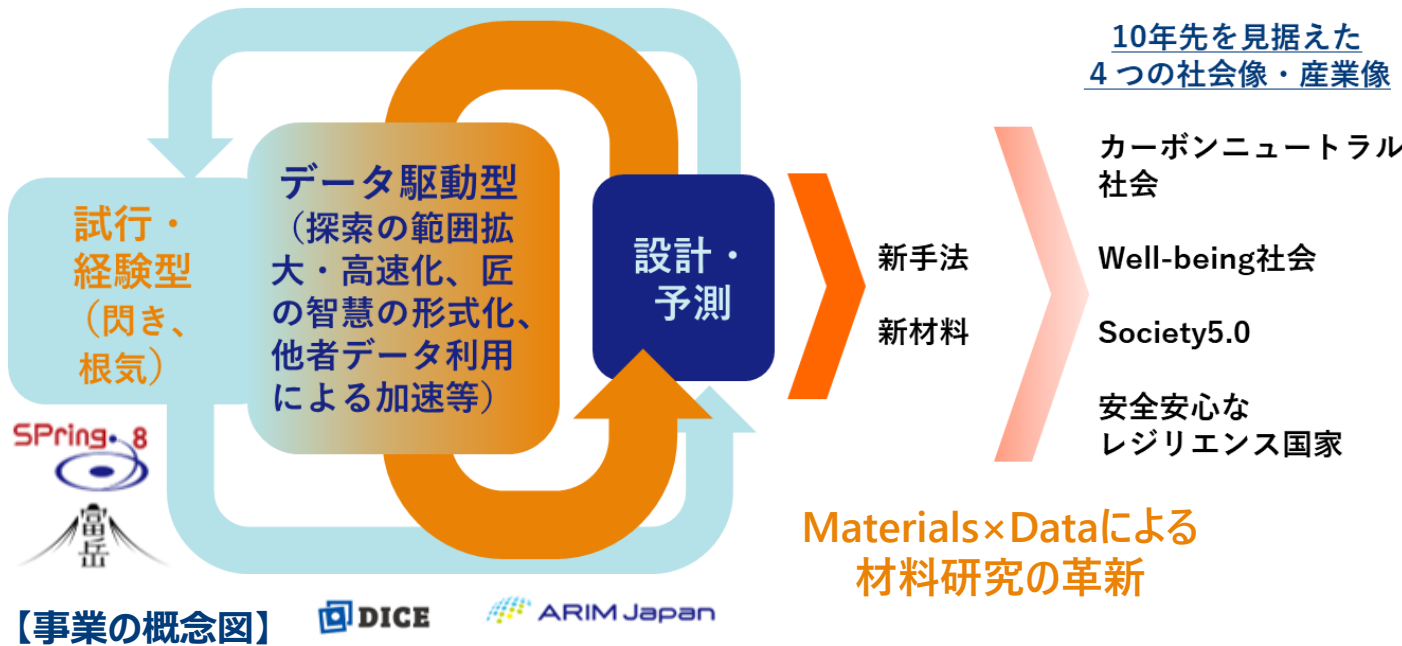
<https://mat-dacs.dxmt.mext.go.jp/>

背景・課題

鉱物資源やエネルギー資源の大半を他国からの輸入に依存する我が国では、世界市場シェアが大きい素材産業とその基盤技術が重要。**高度な機能を持つマテリアルをいかに効率的に創出し、迅速に社会実装できるかが我が国の生命線**となる。
 マテリアル革新力強化戦略を踏まえ、我が国が世界に誇る計算基盤や研究データベース、先端共用施設群や大型研究施設等のポテンシャルと強みを相乗的に活かす**世界を先導する価値創造の核となる「マテリアルDXプラットフォーム」の構築**が進められており、①データ創出から、②データ統合・管理、③**データ利活用まで一気通貫した研究のDXを推進**している。

事業概要

研究DXプラットフォーム構想の下、**材料研究の革新のため、データを有効に活用し、迅速に社会実装につなげるモデルを確立し、拠点外・事業外へ展開**する。従来の試行・経験型研究スタイルに**マテリアルDXプラットフォームをフルに活かすデータ駆動型研究を取り入れた次世代の研究手法の構築**とともに、10年先を見据えた4つの社会像・産業像に貢献する5つの材料分野における実践で、**革新的機能を有するマテリアルの創出**を目指す。
 また、拠点の横串活動や事業外連係を担う「データ連携部会」を設置することで、より効率的で開かれた事業運営を図る。



年度	R4	R5	R6	R7	R8	R9	R10	R11	R12
フェーズ	拠点研究テーマのDX			拠点内DXによる成果創出			拠点横断データ利活用による成果創出		

本格実施 研究拠点

マテリアル革新力強化戦略に基づく4つの社会像の実現に貢献するマテリアル分野の英知が結集した拠点にて、データ駆動型研究を強力に推進。

社会像	カーボンニュートラル		Society 5.0	国土強靱化	Well-Being社会
対象	蓄電・水電解触媒	磁性材料	半導体	構造材料	バイオアダプティブ
拠点名	再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点 	データ創出・活用型磁性材料研究拠点 	智慧とデータが拓くエレクトロニクス新材料開発拠点 	極限環境対応構造材料研究拠点 	バイオ・高分子ビッグデータ駆動による完全循環型バイオアダプティブ材料の創出拠点 
代表機関	東京大学		東京工業大学	東北大学	京都大学
代表研究者	杉山 正和 先端科学技術研究センター教授 	大久保 忠勝 磁性・スピントロニクス材料研究拠点副拠点長 	神谷 利夫 教授 元素戦略MDX研究センター センター長 	吉見 享祐 工学研究科教授 	沼田 圭司 教授 JST ERATO 研究総括 
研究課題	<ul style="list-style-type: none"> 汎用元素機能最大型蓄電池 多様な水環境に適合する水電解材料システム 固体活用型 新規電気化学デバイス 	<ul style="list-style-type: none"> 新規機能性磁性物質探索・材料設 AI駆動型オンデマンド永久磁石開発 データ駆動型最適設計に基づく軟磁性材料・デバイス開発 	<ul style="list-style-type: none"> 革新的MDX システムの開発と半導体材料創製 格子空間制御による革新的誘電体・圧電体材料創製 	<ul style="list-style-type: none"> 高強度耐水素材料 耐疲労表面硬化材 超耐熱材料 	<ul style="list-style-type: none"> 地球に優しい循環型バイオアダプティブ材料の創出 人に優しいQOLバイオマテリアルの創出 完全炭素循環を実現するバイオアダプティブ材料の創出
産業界からのコミットメント	大手素材、電池、電気等 5社		素材、自動車等 15社	鉄鋼、重工等 8社	素材、化学等 7社

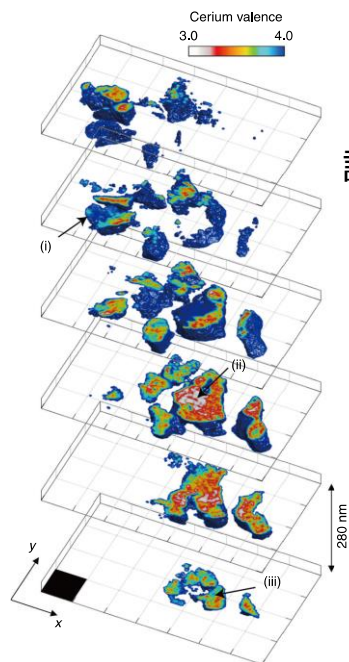
東大拠点



放射光X線タイコグラフィとデータ科学の連携による材料機能の可視化

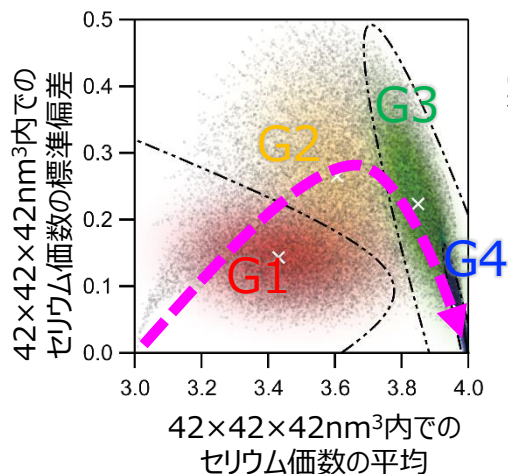
高橋（東北大）

実空間：
多次元イメージング



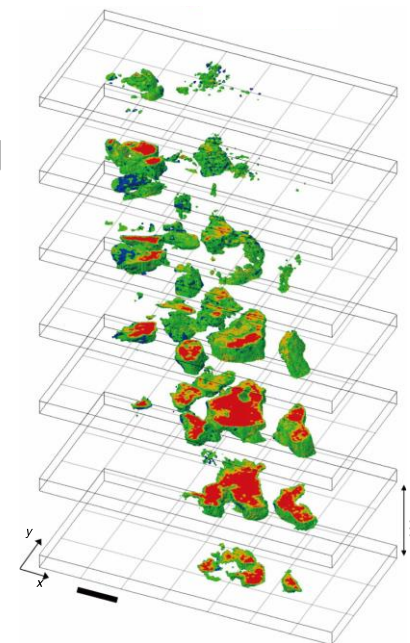
研究者が理解不能
データベース

記述子空間：
教師なし学習による分類



主観・先入観を排除した解析
により、ボクセル間に潜む
未知の相関性の発掘

実空間：
未知の相関性の可視化



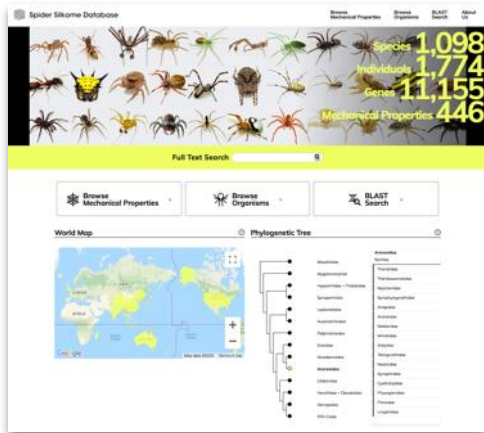
研究者の理解できる
イメージに転換

- 膨大な多次元データ → 材料研究者の気づきにつながりにくい
- 材料の背景を持たない（センスの良い）データ科学者の介在 → 未知の相関性を発掘，材料研究者の気づきにつなげる

研究拠点の最近の成果 (2)

京大拠点  DX-Poly

世界最大の構造タンパクデータベース
SPIDER SILKOME DB



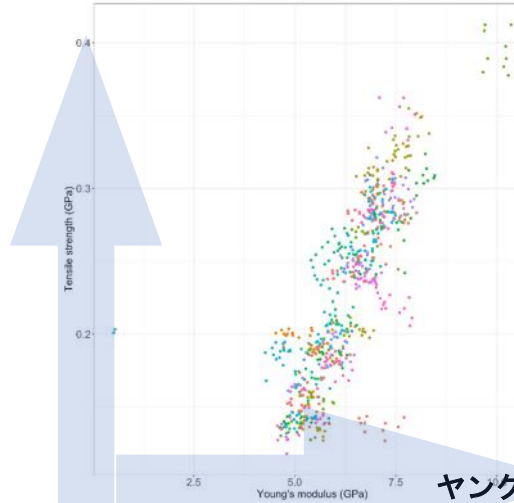
Arakawa et al. (2022) Science Adv.

 Spiber

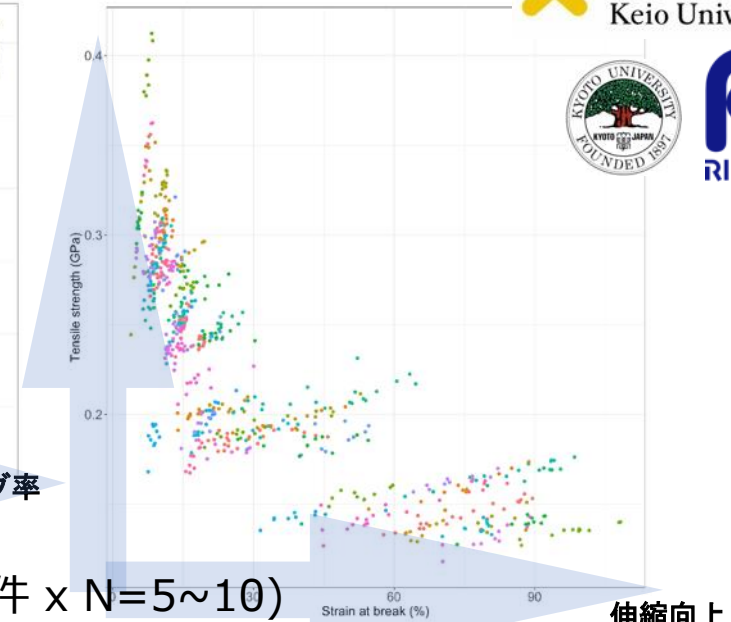
 慶應義塾
Keio University



強度向上



強度向上

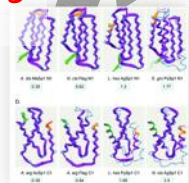


ヤング率

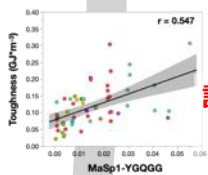
伸縮向上

733 データポイント (17分子 x 5条件 x N=5~10)

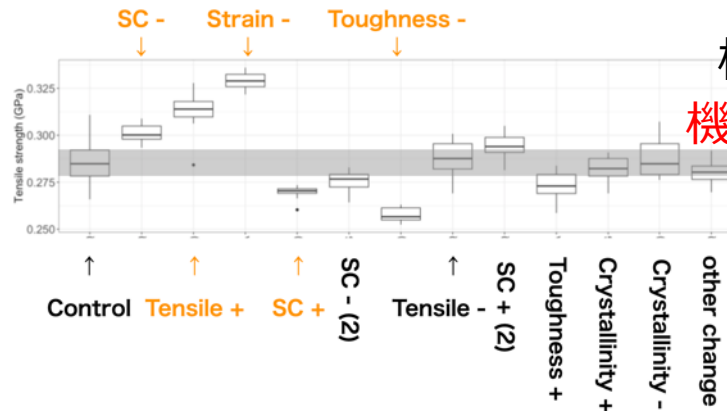
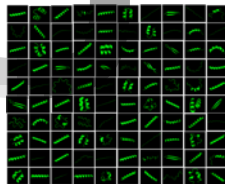
ビッグデータの多変量解析から
目的の物性・特性に関する
モチーフを抽出



計算科学 (主にMD) を
利用した非現実的配列
の削除・クリーニング



機械学習によるモチーフの
構造・物性予測



構造タンパク質スピドロインモチーフ改変
機械学習による予測に則した改変を実現!



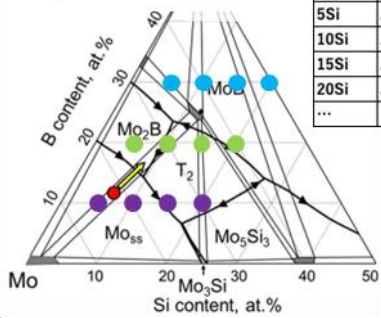
POW4442, PRT410_SAAtoSA (20) MeOH で4倍延伸したポビン



POW4415, PRT410 水中で4倍延伸したポビン

コンビナトリアル材料合成 (モシブチック合金)

Mo-Si-B 合金設計 (Input system)



Nominal	Condition	Phase constitution	Vf of Moss	Strength	...
0Si	As PS	---	---	---	---
5Si	As PS	Moss, T2, TIC, Mo2C	xx	zzz	---
10Si	As PS	Moss, T2, TIC, Mo2C, Mo3Si	yy	---	---
15Si	As PS	---	---	---	---
20Si	As PS	---	---	---	---
...	...	---	---	---	---

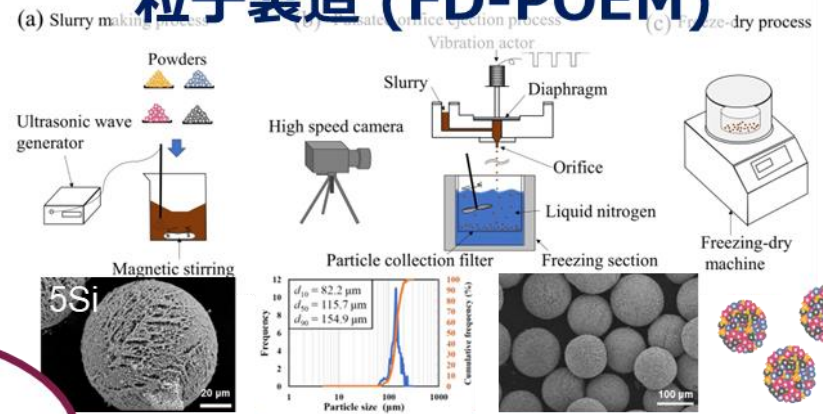
材料特性に及ぼす
Mo, Si, B組成の
影響を迅速調査

データ入力 ← 再設計

多組成
少量生産
溶融不要

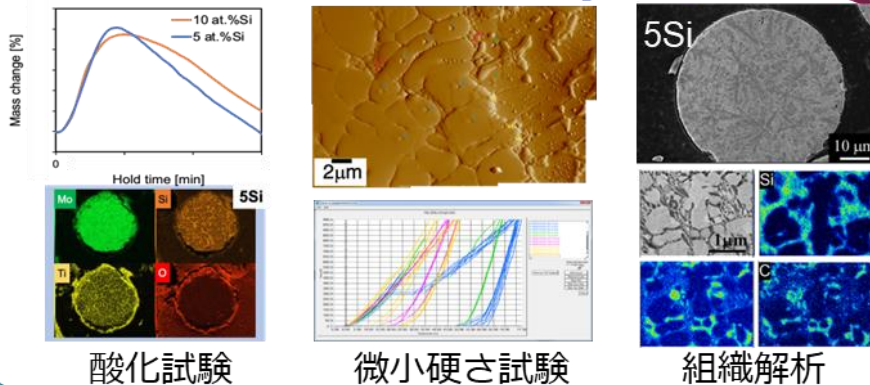
DB構築
MIツール活用

粒子製造 (FD-POEM)



少量溶解

合金特性 (Output)



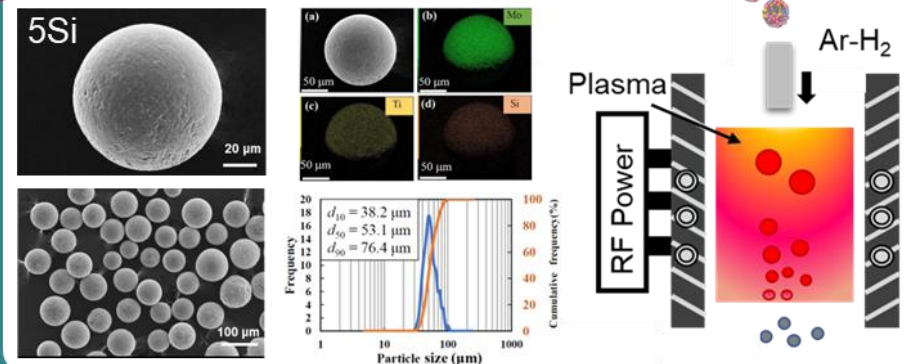
酸化試験

微小硬さ試験

組織解析

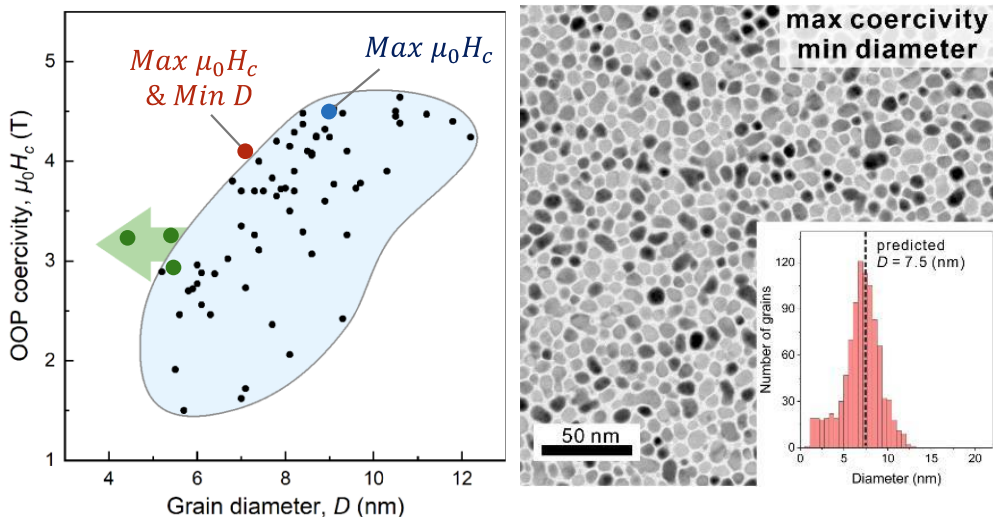
凝固組織

粒子緻密化 (PS処理)



研究拠点の最近の成果 (4)

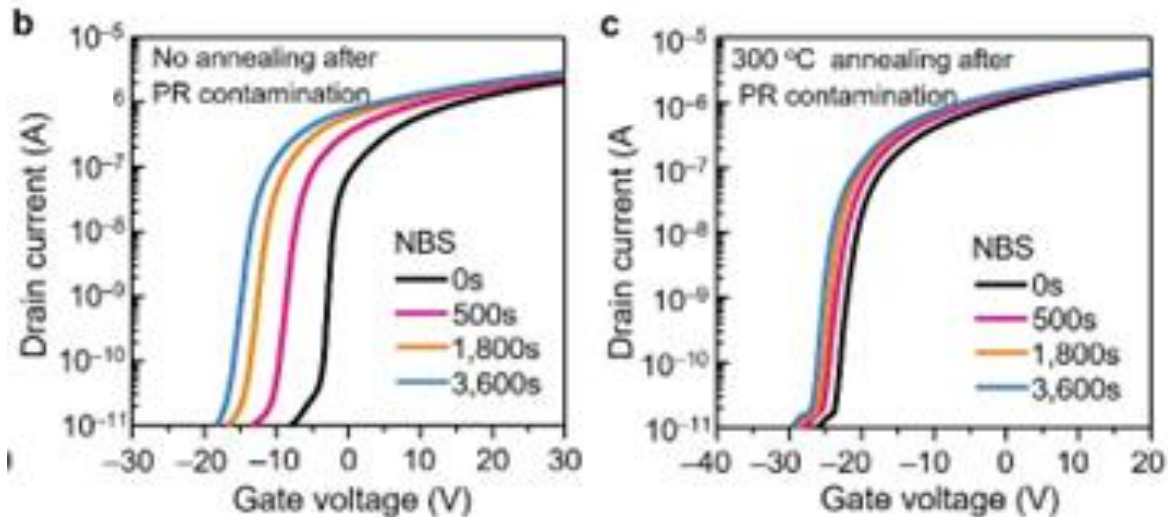
NIMS拠点



機械学習による磁気記録媒体成膜プロセス最適化

東工大拠点

情報端末用高性能半導体
高移動度・高安定なIn-Sn-ZnO TFTの開発



半導体に付着したCO関連の不純物を除去することで、
移動度 $70\text{cm}^2/(\text{Vs})$ かつ高安定なTFT特性を得た

研究拠点の取組

人材育成

- ・各種講習会・セミナーの開催（全拠点）
- ・実施機関本体での取組との連携
 - 例：NIMS・連携拠点推進制度
 - 東工大・物質・情報卓越教育院との教育連携
 - 東北大・京大・学内の教育プログラムとの連携
 - 京大・博士進学予定の修士学生へのRA制度を実施
- ・若手研究者からの研究課題提案の募集（東大）

産業界との連携

- ・一般公開の各種講習会・セミナーの開催（東大等）
- ・産業界からのアドバイザー招聘（東大）
- ・企業との共同研究（東工大、NIMS）
- ・会員制フォーラム・協議会
 - 例：東工大・エレクトロニクスD²材料開発フォーラム
 - 東北大・極限環境対応構造材料 データ活用産学連携協議会
- ・実施機関本体での取組との連携
 - 例：NIMS・磁性MOP（コンソーシアム）での個別共同研究および多社間水平連携
- ・NEDOプロジェクト等との連携の検討（京大）

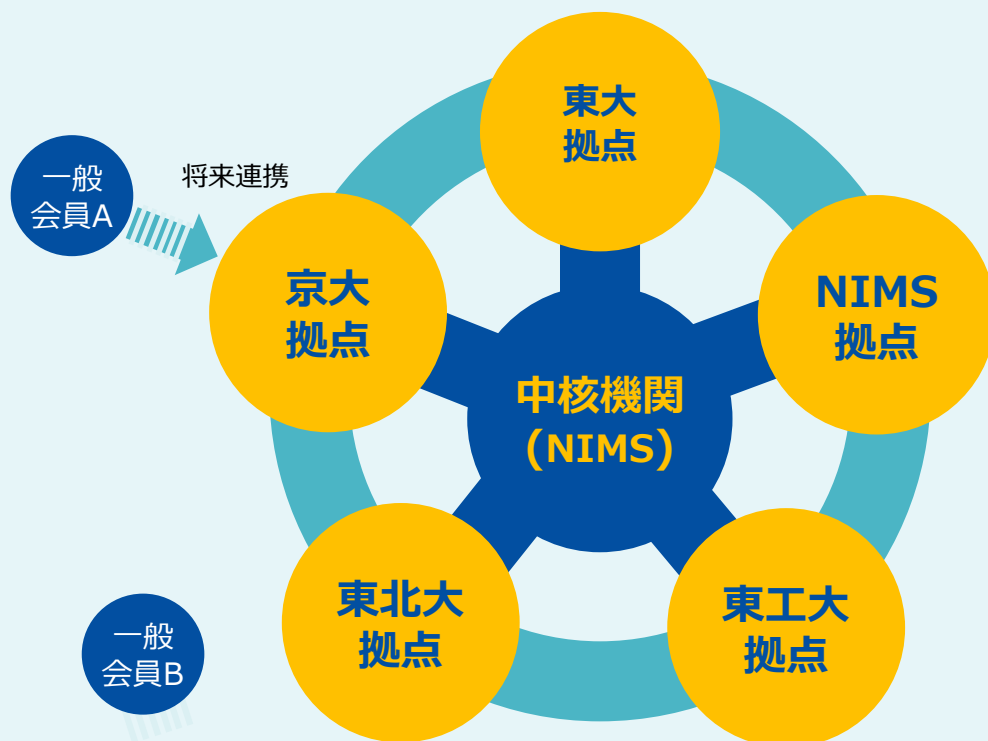
「データ連携部会」の役割

本事業においては、各拠点が取り組むマテリアル研究開発を支える高度な基盤技術に関して、様々なステークホルダーと課題を共有し発展させることによって、効率的な成果創出を目指すため、**中核機関を中心として全機関が参画する横串活動を行うための「データ連携部会」を設置。**

データ連携部会

- 研究手法及び研究ツールの共同開発、共用化及び普及活動
- 理論計算グループ間・計測評価グループ間の領域横断活動

- データの共用
- 知的財産の取り扱いや経済安全保障に関わる課題への対応
- マテリアル×データ人材の中長期的な育成



普及・展開

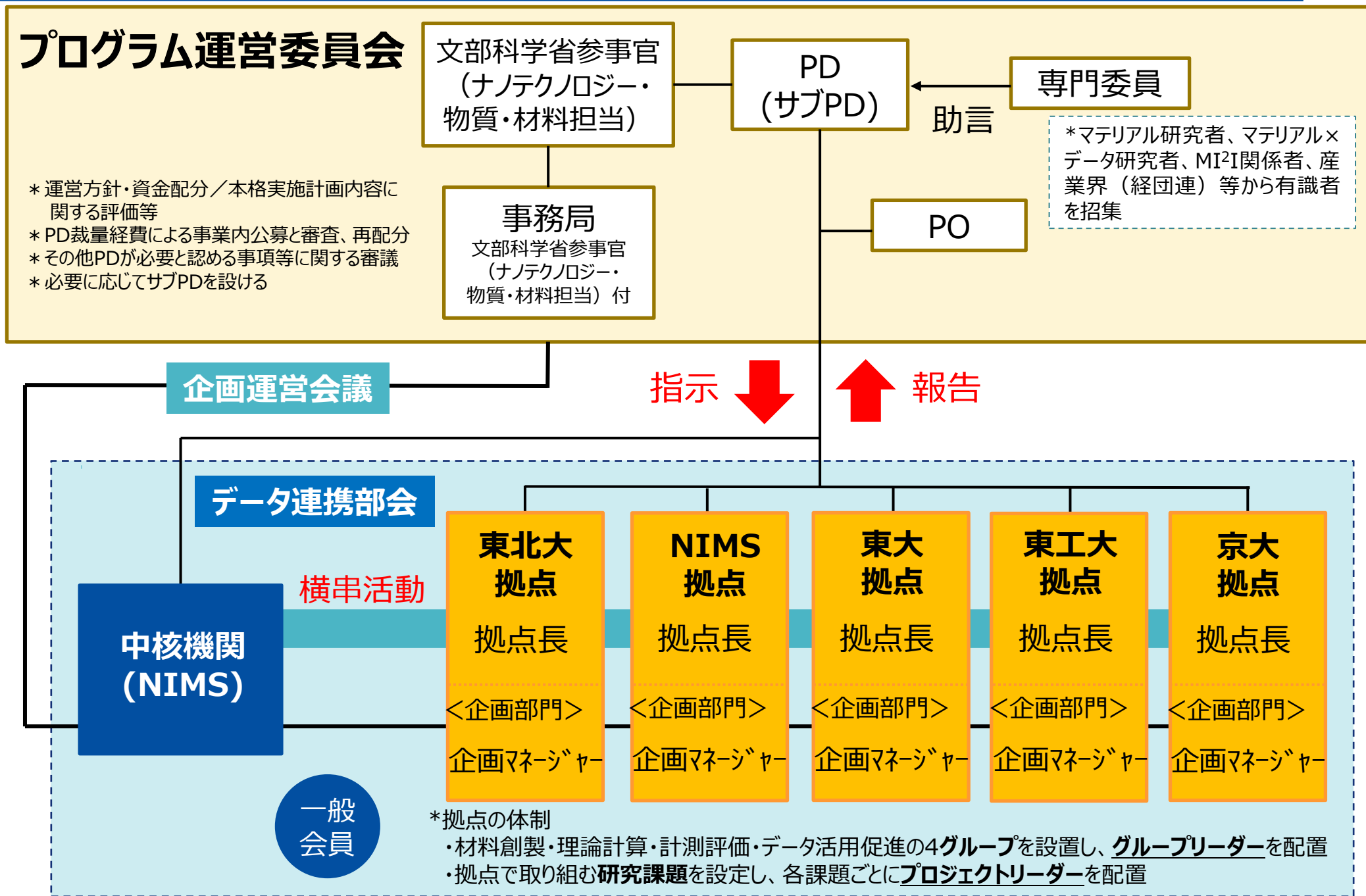
内外の機関、研究者、学生
→開発された手法・ツールに関する研究会やセミナー開催
→大学院・社会人教育プログラム

連携

MDX三事業、関連する協議会、大型先端施設
→シンポジウム等の開催

内閣府・経済産業省事業→「データ駆動型マテリアル研究開発の推進と成果の社会実装実現に向けた連携の場」との連携も予定

DxMTの事業体制 (2023.11月版)



プログラム運営委員会の構成員（2023.11月現在）

（専門委員の先生方は50音順）

PD	栗原 和枝 東北大学未来科学技術共同研究センター 教授
SPD	伊藤 聡 公益財団法人計算科学振興財団 チーフコーディネータ
PO	中山 智弘 科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター 企画運営室 室長
	宅間 裕子 文部科学省 参事官（ナノテクノロジー・物質・材料担当）
専門委員	永野 智己 科学技術振興機構研究開発戦略センター 総括ユニットリーダー
専門委員	岡島 博司 トヨタ自動車株式会社先進技術統括部 主査
専門委員	片岡 一則 公益財団法人川崎市産業振興財団 副理事長／ナノ医療イノベーションセンター センター長
専門委員	菅野 了次 東京工業大学科学技術創成研究院 全固体電池研究センター長・特命教授
専門委員	木場 祥介 ユニバーサルマテリアルズインキュベーター株式会社 代表取締役パートナー
専門委員	瀬戸山 亨 三菱ケミカル株式会社 イノベーション所管イノベーション本部 エグゼクティブフェロー
専門委員	常行 真司 東京大学大学院理学系研究科 教授
専門委員	濱川 聡 産業技術総合研究所材料・化学領域長
専門委員	吉田 亮 統計数理研究所ものづくりデータ科学研究センター センター長
専門委員	渡邊 孝信 早稲田大学理工学術院 教授

1. 本事業では、従来の試行・経験型の研究にデータサイエンス的手法を取り入れたデータ駆動型の先進的な研究手法を開発し、実践することで、革新的な機能を持つマテリアルを効率的に創出することを目指す。
2. 事業体制として、社会ビジョン実現のために特定のテーマを推進する5研究拠点に加え、NIMSを中核機関とするデータ連携部会を設置し、データベースの作成やデータ活用のための共通課題の解決等の横串的活動を行っている。各研究拠点には、我が国トップの研究者に結集しており、独自性の高い汎用的な手法や革新的な材料の創出が期待される。
3. 本事業において開発する従来にない新しい研究手法は、拠点内での実践に加えて、拠点外・事業外の研究者にも活用されるよう、全国展開のため、オープンセミナーの実施、研究手法紹介サイトの運営、新たな研究者が参画する仕組の構築等を行っている。
4. 本格実施も2年目に入り、各拠点はデータを着実に蓄積し、データ駆動による物質探索をはじめとする研究の推進が見られ、本事業の期待する成果が出始めてきた。今後は、データ連携部会での活動を通し、拠点間での連携並びに効果的・効率的な事業運営により、拠点横断のデータ活用の事例が早く創出されるように、事業運営していく。
5. 本プロジェクトは、独創と共創、そして協働がともに重要な新しい形のチームリサーチである。PDの役割を担うことになり、チャレンジができる良い連携が進むよう、お手伝いしたいと考えている。

再生可能エネルギー最大導入に向けた電気化学材料研究拠点

代表機関：東京大学



杉山正和拠点長

研究連携機関：物質・材料研究機構、東京理科大学、早稲田大学、横浜国立大学、理化学研究所、北海道大学、山梨大学、大阪公立大学、東京農工大学、東北大学、名古屋工業大学

拠点概要

2050年にカーボンニュートラルを達成するためには、再エネ発電の大量導入と水素による化石燃料代替が必須であり、そのためには超大容量、低コストの蓄電池と水電解装置を、レアメタルを使わず安価な材料で実現することが求められます。DX-GEMでは、東大と11研究連携機関が協力し、データサイエンス的手法を取り入れたデータ駆動型の先進的な研究手法を開発し、これらの革新的材料を効率的に創出していきます。

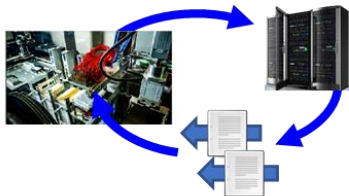


計測／データ創出

ARIM東大ハブ
NanoTerasu 等



自律実験ロボット
× 巨大空間の機械学習



データ駆動型材料創製

次世代電気化学材料創製の
効率化・高度化

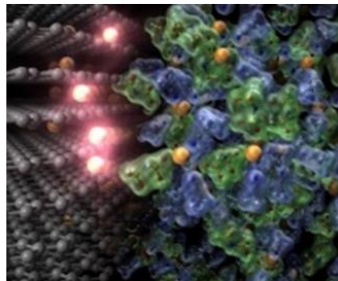
データ利活用

計算／データ創出・利活用

富岳 NIMS MDR

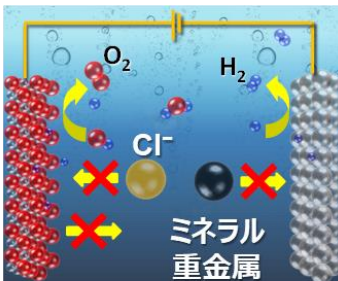


①蓄電池



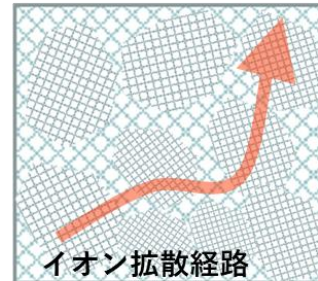
汎用元素で社会インフラ
に適する超長寿命化

②水電解



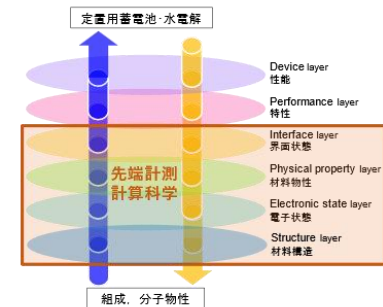
汎用元素で
多様な水環境に適合

③界面科学・固体活用



電気化学材料界面の
制御と固体活用デバイス

多階層の解釈可能AI



拠点概要:

データ創出・活用型磁性材料研究において、①.データ創出から、②.データ統合・管理、③.データ利活用まで、一気通貫した材料研究のDXを推進し、世界を先導する価値創造の核となる「材料研究DXプラットフォーム(PF)」を構築、その材料DX・PFを通じて革新的な磁性材料を創製し、カーボンニュートラル、Well-Being、Society5.0、レジリエンス国家に貢献する

DXMagビジョン:

①データ蓄積の推進

②データ活用手法の確立

③社会に貢献できる
材料開発

④マテリアル×
デジタル人材育成

⑤異分野連携の推進

研究課題:

課題1:新規機能性磁性物質探索・材料設計(PL:AIST 三宅隆)

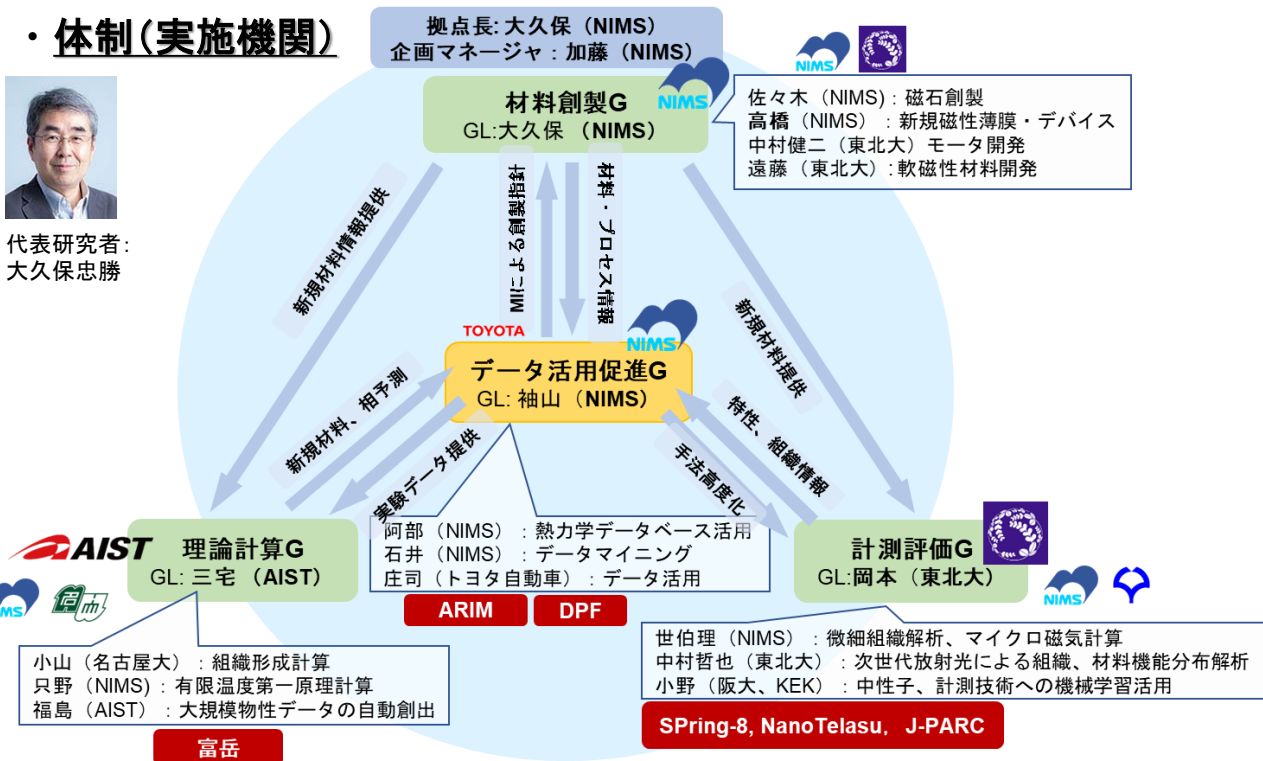
課題2:AI駆動型オンデマンド永久磁石開発(PL:NIMS 高橋有紀子)

課題3:データ駆動型最適設計に基づく軟磁性材料・デバイス開発(PL:東北大 岡本聡)

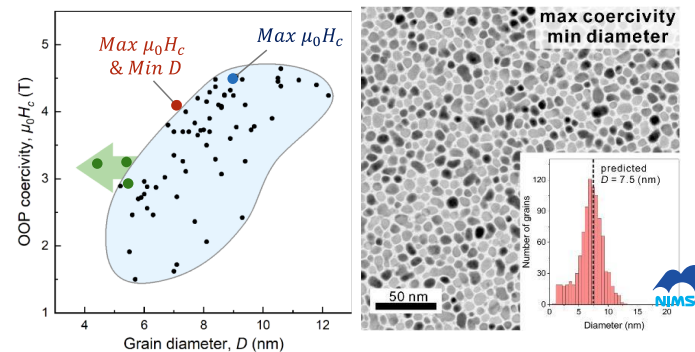
体制(実施機関)



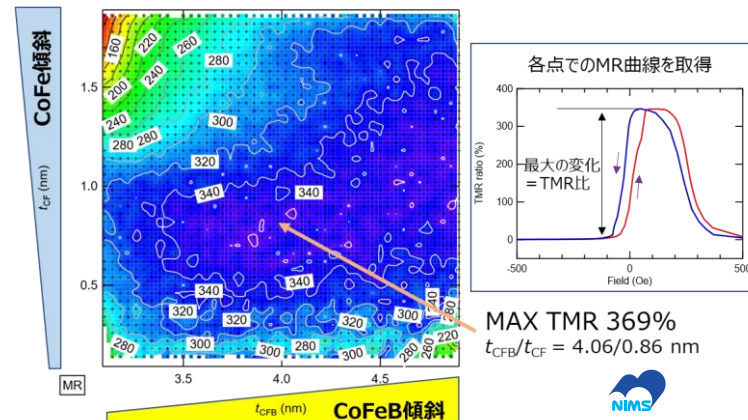
代表研究者:
大久保忠勝



成果:



機械学習による磁気記録媒体成膜プロセス最適化



拠点概要

材料科学・データ活用に研究者の智慧を加えて、今までの延長線上にない新材料群を発掘するDXシステムを構築し、実用に資するエレクトロニクス材料を開発する

目標

- ▶ 実用に資する新電子機能材料群の高速・高効率開発
従来の延長線上にない「真の新材料」の発掘
- ▶ 計算科学・データ活用+研究者の智慧
= Human-in-the-Loopを取り入れたMDXシステムの確立
- ▶ マテリアルxデジタル (MxD) 人材の育成

拠点体制

日本最強の「無機電子機能材料」研究グループ

東京工業大学 (代表機関)
研究代表者 神谷 利夫

- ・ 新概念の材料系を開拓
- ・ コンビナトリアル技術の提唱者
- ・ マテリアルズインフォマティクスを先導

物質・材料研究機構 (NIMS)
機関代表 大橋 直樹

- ・ マテリアルデータ中核拠点
- ・ コンビナトリアル技術

ファインセラミックスセンター (JFCC)
機関代表 森分 博紀

- ・ 第一原理計算とSTEMの連携
- ・ 新規強誘電体材料の機構解明、探索

代表研究者：神谷 利夫

DXによる連携効果の増大

材料計測・大型施設

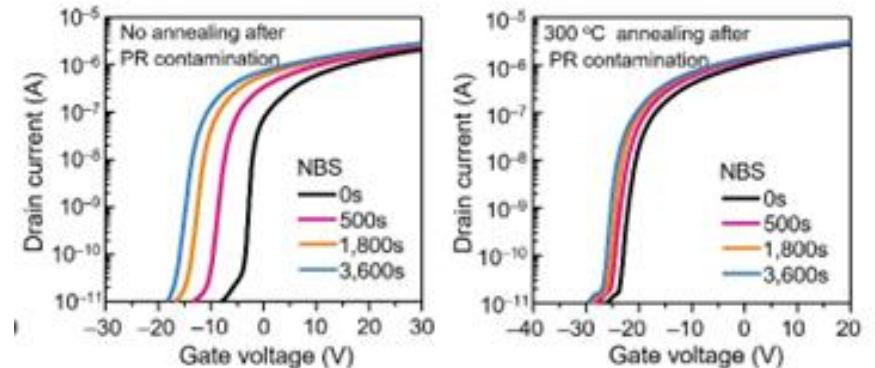
高エネルギー加速器研究機構 (KEK)
機関代表 佐賀山 基

- ・ 大学共同利用機関
- ・ 量子ビーム施設

研究課題

研究課題	詳細
革新的MDX システムの開発と半導体材料創製	情報端末用高性能半導体
	超ワイドギャップ半導体
	キャリア注入電極
格子空間制御による革新的誘電体・圧電体材料創製	高誘電率と低温度係数を両立する誘電体
	高圧電性能と高弾性率を両立する圧電薄膜材料

成果：情報端末用高性能半導体 高移動度・高安定なIn-Sn-ZnO TFTの開発



半導体に付着したCO関連の不純物を除去することで、移動度 $70\text{cm}^2/(\text{Vs})$ かつ高安定なTFT特性を得た

拠点概要

本拠点では、超耐熱性、耐水素性、耐疲労性、耐摩耗性など、多様な極限環境下で長期使用に耐え得る機能（「極限機能」）を備えた構造材料とその利用技術のデータ駆動型開発を、産官学のオールジャパン体制で推進します。そして、構造材料の長寿命化や新しい構造システムの高効率化に向けた、データ駆動型材料の科学と工学の構築を目指します。本拠点は、我が国の構造材料研究の拠点として、デジタル・トランスフォーメーション（DX）の可能性を無限に広げながら、世界の構造材料分野をリードしていきます。

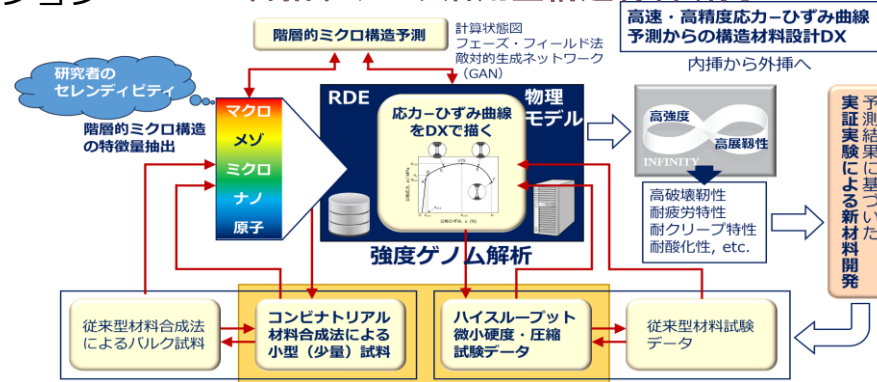


吉見 享祐 拠点長

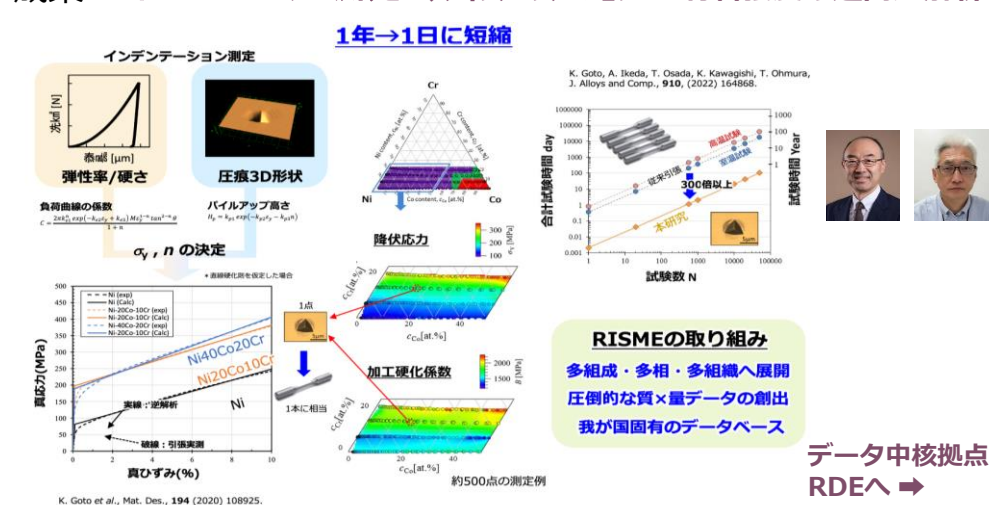
体制 社会像：国土強靱化，対象：構造材料，データ駆動による高強度化+高寿命化



ビジョン RISMEが目指すデータ活用型構造材料研究



成果 ハイスループット測定：ナインデテンション × 材料強度の逆問題解析



高強度耐水素材料P

PL 九州大学
松永 久生

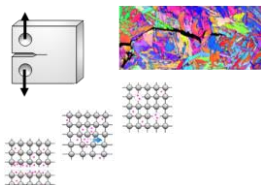
耐疲労表面硬化材料P

PL 東北大学
宮本 吾郎

安全・安心かつ低コストな水素社会の実現を後押しする

次世代自動車を支える表面硬化材のメタラジを確立する

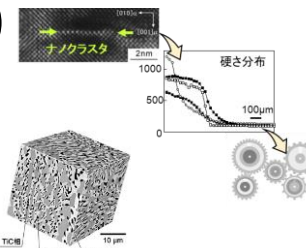
損傷・破壊メカニズムの解明
材料マイクロ構造の特徴量を抽出
スモール・データ活用



超耐熱材料P

PL 東北大学
吉見 享祐

宇宙・航空・発電等の耐熱材料分野で世界をリードする



拠点概要

カーボンニュートラルの実現には二酸化炭素から合成されると共に環境循環型のバイオアダプティブ材料や、二酸化炭素を分離・回収する機能材料が求められ、Well-Being社会にはQOLを向上させるバイオマテリアルが必要不可欠である。また、高分子材料は多様な自然環境・生体環境・工業プロセスで利用されており、日本における基幹材料の一つである。本拠点研究では、日本固有のビッグデータと大型研究施設を基軸としたマテリアル研究開発のプラットフォームを京都大学を中心に拠点化する。重要な実装領域である、高タフネス・環境低負荷高分子、高度循環型高分子、QOLバイオマテリアル、および二酸化炭素分離回収材料を含む機能性バイオアダプティブ材料の開発を目指す。

代表研究者：沼田圭司



カーボンニュートラル & Well-Being社会を実現するバイオアダプティブ材料

Pr1:サーキュラー高分子
高度な資源循環と環境負荷低減を示す高分子材料

材料創製グループ

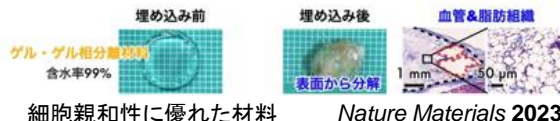
完全分解性材料 沼田教授 PL
バイオゴム
人工タンパク質材料



マイクロプラスチックを生じない繊維材料
Science Adv. 2022
Science Adv. 2020

Pr2:QOLバイオマテリアル
Society5.0/Well Being社会に必要な人に優しいバイオ材料

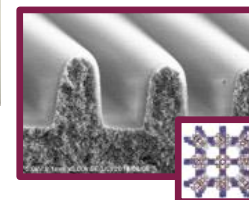
ドラッグデリバリー材料 酒井教授 PL
生体ストレス材料
再生医療足場材料
抗体材料



Nature Materials 2023

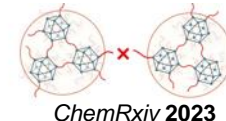
Pr3:CO₂分離回収材料
カーボンニュートラル社会の実現

星野教授 PL



CO₂分離膜
自己修復膜
CO₂吸収材

無機有機 (MOF-高分子) ハイブリッド膜



ChemRxiv 2023

計測評価グループ



鳴瀧 教授
名古屋大学

JRR3
SPring-8



RDE Spider Silkome Database
日本発 バイオ・高分子ビッグデータ

データ活用促進グループ

内藤 博士
NIMS



荒川 教授
慶應大学



理論計算グループ



佐藤 教授 京都大学



FUKUI INSTITUTE FOR FUNDAMENTAL CHEMISTRY






RIKEN R-CCS Center for Computational Science



概要

データ連携部会はDxMT事業の横串機能として、5つの拠点に共通する技術課題の開発と共有、広報、人材育成によって、事業を推進するエンジンとなります。共通課題では、研究DXの推進、データ駆動・計算基盤を課題として、ワーキンググループを中心に、5拠点と連携して共通技術課題の解決を目指します。研究DX推進では、NIMSが開発したRDEという研究データ収集・構造化システムを活用して、研究全体のフローを解析しながら、デジタル化を進めていきます。データ駆動・計算基盤では、領域を超えてデータを活用していくために、材料の構造に着目した特徴量の抽出技術の開発を進めていきます。これらの活動を通じて、5つの拠点を横断するデータの活用を目指し、領域を超える成果の創出を目指します。

また、マテリアルDXプラットフォーム構築事業を構成するARIM、データ中核拠点（DICE）と連携していくための要として、日本のマテリアル研究のDXを推進します。

社会像	カーボンニュートラル		Society5.0	国土強靱化	Well-Being社会	
対象	蓄電・水電解触媒		半導体	金属構造材料	バイオタイプ	
代表機関	東京大学		東京工業大学	東北大学	京都大学	
代表研究者	杉山 正和  先端科学技術研究センター教授	大久保 忠勝  磁性・スピントロニクス材料研究拠点副拠点長	神谷 利夫  教授 元素戦略研究センター センター長	吉見 享祐  工学研究科教授	沼田 圭司  教授 JST ERATO 研究総括	
連携機関	<ul style="list-style-type: none"> •NIMS •東京理科大 •横浜国立大 •早稲田大 •大阪公立大 •名工大 •東北大 •理研 	<ul style="list-style-type: none"> •北海道大 •山梨大学 •東京農工大 	<ul style="list-style-type: none"> •AIST •東北学院大 •東北大学 •名古屋大学 •JASRI •大阪大学 •トヨタ自動車 •TMI •東京大学 	<ul style="list-style-type: none"> •NIMS •KEK •JFCC 	<ul style="list-style-type: none"> •九州大学 •大阪大学 •NIMS •東京大学 •横浜国立大学 •JAEA •名古屋大学 	<ul style="list-style-type: none"> •NIMS •東工大 •JASRI •慶応大学 •名古屋大学 •理研 •QST •九州大学 •北海道大
先端設備	放射光（Spring-8, SACLA）・中性子（J-PARC, QST）・電子顕微鏡等の活用					
計算科学	スパコン「富岳」の活用					
MDX	データ中核拠点・マテリアル先端リサーチインフラとの連携					



データ連携部会
中核機関責任者
NIMS 出村 雅彦



データ連携部会
中核機関

