



第11回 技術開発・共用部門オープンセミナー ～MDPF利活用事例の紹介 [MDR]～

MDPF利活用事例紹介のシリーズでは、NIMSデータ中核拠点（MDPF）が提供するDICEサービスが、材料の研究開発現場でどのように活用されているかをご紹介します。

材料データの利活用やデータ駆動型のマテリアル研究開発に関心のある方々を広く対象としたオンラインセミナーです。

AI for DB、DB for AI：AIと計測の融合

【講師】石井 真史

NIMS マテリアル基盤研究センター
材料設計分野データ駆動型材料設計グループ
主席研究員



【日時】2026年10月15日（木）15:00 – 16:00

【開催方法】オンライン（Microsoft Teams）

【関連するDICEサービス】 **MDR** MATERIALS DATA REPOSITORY

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

【参加方法】事前に参加登録が必要、参加費無料

<https://events.teams.microsoft.com/event/063634a7-b356-4606-a0a9-84b6845c4212@dca88378-b099-4193-9bb0-dfd0fa1bba75>



【講演内容】

AIによる研究アシストが常識化している中で、材料分析・解析についても、AIがどのように関与してゆくか考え、検証する 때가来ていると思われる。X線吸収分光（XAFS）スペクトルを関連機関の協力で集め、MDRで公開しているMDR XAFS DB[1]（<https://doi.org/10.48505/nims.1447>）や、世界6カ国7データベースが統合されたIXDB（International XAFS Database Portal, <https://ixdb.jxafs.org/>）[2]についても、おそらく既にAIに学ばれていると予想されるが、エネルギー校正やデータフォーマット、データ処理の違いを勘案すると、実はハルシネーションの原因になっていることも考えられる。本講演では、AIを使うことで、データベースの利用がどのように変わるか、またその根幹にある、AIが分析データを誤解なく読み、コミュニティに還元するための要件を考える。

【参考論文】

[1] M. Ishii et al. (2023) Integration of X-ray absorption fine structure databases for data-driven materials science, Science and Technology of Advanced Materials: Methods, 3:1, 2197518
<https://mdr.nims.go.jp/datasets/3cc837bb-64f2-4495-b0c6-8254e519829e>

[2] M. Ishii et al. (2025) Global cross-database search system for X-ray absorption spectra, Journal of Synchrotron Radiation, 32:3, 661–668 <https://mdr.nims.go.jp/datasets/a87fcb51-28ce-4e15-abde-2621a3775862>