



## 第10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 [AtomWork-Adv, AtomWork-Battery]～

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サービスのユーザを講師にお招きし、各サービスをどのように利用し、新しい材料の発見や研究の効率化につながったかについてご紹介いただきます。

AtomWork-Advをはじめとしたデータサービス、材料データの利活用に関心のある方々を広く対象にしたオンラインセミナーです。

# NIMSの電池材料データネットワークとその活用法

## — AtomWork-Adv・AtomWork-Batteryを用いたデータ駆動型材料探索 —

### 【講師】徐一斌

NIMS マテリアル基盤研究センター

データ駆動型無機材料グループ グループリーダー



【日時】2026年8月31日（月）15:00 – 16:00

【開催方法】オンライン（Microsoft Teams）

【関連するDICEサービス】 AtomWork Adv.

<https://atomwork-adv.nims.go.jp/service.html>

【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/5f32e15d-5676-40af-9965-c80c2000342f@dca88378-b099-4193-9bb0-dfd0fa1bba75>



### 【講演内容】

近年、データ駆動型材料研究の発展に伴い、高品質な材料データベースの重要性がますます高まっています。NIMSでは、単相無機材料データベース「AtomWork-Adv（AWA）」と電池材料データベース「AtomWork-Battery（AWB）」を中心に、電子構造データベース「CompES-X」と連携した電池材料データネットワークを構築・公開しています。

本講演では、これらのデータベースの構成や特徴、利用方法を紹介するとともに、全固体電池材料の探索や機械学習による材料設計などの具体的な研究事例を通して、データベースを活用したデータ駆動型研究の進め方を解説します。

### 【参考論文】

Yibin Xu, Yen-Ju Wu, Huiping Li, Lei Fang, Shigenobu Hayashi, Ayako Oishi, Natsuko Shimizu, Riccarda Caputo & Pierre Villars (2024)  
A comprehensive data network for data-driven study of battery materials, Science and Technology of Advanced Materials, 25:1,2403328,  
<https://mdr.nims.go.jp/datasets/a8293f23-e053-4c1d-86ec-1656e2efb03c>

Yen-Ju Wu, Yibin Xu, Lei Fang, Wenqin Peng, Ken Sakaushi, Meiqi Zhang, Masao Arai & Yukinori Koyama (2025)  
Periodic table-based compositional descriptors for accelerating electrochemical material discovery: Li-ion conductors and oxygen evolution electrocatalysts, Science and Technology of Advanced Materials: Methods, 5:1, 2513218,  
<https://mdr.nims.go.jp/datasets/c7ec772e-9300-42ee-aabf-b07b43d54cc5>

【お問合せ】 国立研究開発法人物質・材料研究機構  
技術開発・共用部門 運営室  
[mdpf-pr@ml.nims.go.jp](mailto:mdpf-pr@ml.nims.go.jp)

