

令和3年6月22日

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ運営機構
第2回データ連携基盤委員会／第1回データ構造化委員会 合同委員会
議事次第

1. 開催日：令和3年6月22日（火）13:00～15:00
2. 開催方法：オンライン会議（webex 会議）
3. 議 事：
 - （1）新委員および委員長について 資料 デ基 2-1
 - （2）接続装置アンケート結果と解析・選定について 資料 デ基 2-2
 - （3）NIMS 装置コードとサンプルデータについて 資料 デ基 2-3
 - （4）ネットワークの設定について 資料 デ基 2-4
 - （5）IoT ネットワークの説明会開催のご紹介（情報共有） 資料 デ基 2-5
 - （6）微細加工系データ収集検討WG について 資料 デ基 2-6
 - （7）その他

配布資料

- 資料 デ基 2-1 データ連携基盤委員・データ構造化委員・データ構造化WG 担当者名簿
- 資料 デ基 2-2 接続装置アンケート結果と解析・選定について
- 資料 デ基 2-3 NIMS 装置コードとサンプルデータについて
- 資料 デ基 2-4 ネットワークの設定について（案）
- 資料 デ基 2-5 IoT ネットワーク説明会開催のご紹介（情報共有）
- 資料 デ基 2-6 微細加工系データ収集検討WG について（案）

各ハブ機関より選任

○データ連携基盤委員会メンバーリスト

(敬称略)

機関	氏名	部署・役職	メールアドレス	電話番号
東北大学	戸津 健太郎	マイクロシステム融合研究 開発センター・教授	totsu@tohoku.ac.jp	022-229-4113
NIMS	吉川 英樹	材料データプラットフォーム センター・副センター長	YOSHIKAWA.Hideki@nims.go.jp	029-859-2451
	松波 成行	統合型材料開発・情報基 盤部門・参事役	MATSUNAMI.Shigeyuki@nims.go.jp	029-860-4606
東京大学	田浦 健次郎	大学院情報理工学系研究 科電子情報学専攻・教授 ／情報基盤センター・セン ター長	taura@itc.u-tokyo.ac.jp	03-5841-6081
名古屋大学	加藤 剛志	未来材料・システム研究所 高度計測技術実践セン ター・教授	kato.takeshi@b.mbox.nagoya-u.ac.jp	052-789-3304
京都大学	小寺 秀俊	学際融合教育研究セン ター ナノテクノロジーハブ 拠点ユニット・特定教授	kotera_hide@me.kyoto-u.ac.jp, hidetoshi.kotera@riken.jp	075-753-5656 080-7841-8279
九州大学	加藤 幸一郎	大学院工学研究院・准教 授	kato.koichiro.957@m.kyushu-u.ac.jp	092-802-2922

○データ構造化委員会メンバーリスト

(敬称略)

機関	氏名	メールアドレス
東北大学	戸津 健太郎	totsu@tohoku.ac.jp
NIMS	吉川 英樹	YOSHIKAWA.Hideki@nims.go.jp
	松波 成行	MATSUNAMI.Shigeyuki@nims.go.jp
東京大学	石川 亮	ishikawa@sigma.t.u-tokyo.ac.jp
名古屋大学	加藤 剛志	kato.takeshi@b.mbox.nagoya-u.ac.jp
	湯川 博	h.yukawa@nanobio.nagoya-u.ac.jp
京都大学	土屋 智由	tutti@me.kyoto-u.ac.jp
	富井 和志	tomii.kazushi.8e@kyoto-u.ac.jp
九州大学	藤ヶ谷 剛彦	fujigaya.tsuyohiko.948@m.kyushu-u.ac.jp
	村上 恭和	murakami.yasukazu.227@m.kyushu-u.ac.jp

○データ構造化WGメンバーリスト

(敬称略)

機関	氏名	メールアドレス
東北大学	森山 雅昭	mmoriyama@tohoku.ac.jp
NIMS	松波 成行	MATSUNAMI.Shigeyuki@nims.go.jp
東京大学	豊倉 敦	toyokura@if.t.u-tokyo.ac.jp
名古屋大学	湯川 博	h.yukawa@nanobio.nagoya-u.ac.jp
京都大学	根本 隆 佐藤 政司	tnemoto@eels.kuicr.kyoto-u.ac.jp satou.masashi.4e@kyoto-u.ac.jp
九州大学	山本 知一	yamamoto@hvem.kyushu-u.ac.jp
北海道大学	松尾 保孝	nanoplat@cris.hokudai.ac.jp
千歳科学技術大学	大越 研人	k-okoshi@photon.chitose.ac.jp
山形大学	杉本 昌隆 サティシュ スクマラン 武田 敬子	sugimoto@yz.yamagata-u.ac.jp sathish@yz.yamagata-u.ac.jp sugimoto@yz.yamagata-u.ac.jp
筑波大学	末益 崇	suemasu.takashi.gu@u.tsukuba.ac.jp
産業技術総合研究所	多田 哲也	t-tada@aist.go.jp
早稲田大学	関口 哲志	t-sekiguchi@waseda.jp
東京工業大学	勝山 造	TKatsuyama@opto.ee.e.titech.ac.jp

機関	氏名	メールアドレス
電気通信大学	小林 利章	kobayashi@cia.uec.ac.jp
北陸先端科学技術大学院大学	高村 由起子	yukikoyt@jaist.ac.jp
信州大学	森川 大	dmorikawa@shinshu-u.ac.jp
名古屋工業大学	宮崎 秀俊	miyazaki@nitech.ac.jp
豊田工業大学	佐々木 実	mnr-sasaki@toyota-ti.ac.jp
自然科学研究機構	中村 敏和	t-nk@ims.ac.jp
大阪大学	光岡 薫	kaorum@uhvem.osaka-u.ac.jp
日本原子力研究開発機構	岡根 哲夫	okanet@spring8.or.jp
量子科学技術研究開発機構	石井 賢司	ishii.kenji@qst.go.jp
奈良先端科学技術大学院大学	宮家 和宏	kazuhiro@ms.naist.jp
広島大学	坂本 弘樹	h-sakamoto@hiroshima-u.ac.jp
香川大学	近藤 哲也	kondo.tetsuya@kagawa-u.ac.jp

接続装置アンケート結果と解析・選定について

2021年6月22日 データ連携基盤／データ構造化 合同委員会

国立研究開発法人物質・材料研究機構

統合型材料開発・情報基盤部門

松波 成行

- 回答台数: **763**台。 ネットワーク接続条件OK+優先順位高を満たす**449**台に絞り込み
- 449台をナノプラのイエローページに準じる**80種目のカテゴリーに分類**。



今年度の方針

- 各機関で**共通・横断的**に取り組める**上位12種目**から**各1機種**を対象(**計12機種**)として、それらのデータ構造化の検討を進める。
- 各12種目の機器を保有する機関で**データ構造化の「勉強会」**をデータ構造化WGの中で行う。

- 上記、上位12種目の合計機種は**158台**。
各種目の勉強会の進度に応じ、その158台についてデータ構造化に着手する。

機器選定の調査票と選定方式

秘 | CONFIDENTIAL

- 5月14日 全ハブ・スポークス機関に『事務連絡』として発信
- 5月21日 回答締め切り

Excel 2016 の画面キャプチャ。表のタイトルは「【様式1】データ構造化にかかる装置の調査」。

設置状況	設備（設備群）名	メーカー	仕様	装置が出力するデータファイルをネットワーク接続で取り出せるか否か（注1）	稼働率の状況 高：80%以上 中：30%～80%程度 低：30%以下	データ構造化希望優先順位 高：本年度～来年度 中：R5年度以降 低：特に必要なし	理由
例）取込	125kV電子ビーム描画装置	エリオニクス社製：ELS-F125	最大加速電圧：125kV 最小ビーム径：1.7nm 最大照射寸法：φ6インチ	○	高	高	
例）取込	ボットプレート			×	高	低	例）ファイルを出力しない
1							
2							
3							
4							

各機関には**上限20台**として候補となる機器について、以下の3つで回答願

- ① 装置が出力するデータファイルをネットワーク接続で取り出せるか否か
- ② 稼働率の状況
- ③ データ構造化希望優先順位

■ ネットワーク対応可とする数（省人化によるデータ収集対応の機器）

申請数（※1）	ネットワーク対応可（※2）	対応可能率
763台	386台	51 %

※1 上限20台を超えて回答した機器を含む

※2 機器的にはネットワーク接続可能ながら、組織のネットワークポリシー上で不可となっている回答があった。
期限までに確認がとれず、「保留」または「確認中」とした機器は含んでいない。

■ 選定の考え方

ネットワークに対応可 AND データ構造化希望が「高」の種目（※）

※ 種目はナノプラの「イエローページ」の中分類（80種目）に準拠して分類した

データ構造化を優先対象とする上位12種目(案)

秘 | CONFIDENTIAL

#	中分類（イエローページを元に再設定）	選定機種	全体機種
1	電子線描画(EB)	11	15
2	核磁気共鳴法(NMR) ※1	9	15
3	走査電子顕微鏡(SEM)	8	23
4	光学顕微鏡(一般、共焦点、レーザ)	6	14
5	磁気特性評価装置群 (SQUID/高周波透磁率測定)	6	6
6	収差補正透過電子顕微鏡	5	17
7	集束イオンビーム(FIB)	5	14
8	電子スピン共鳴法(ESR)	5	6
9	電子分光 (XPS) ※構造化済	4	11
10	粉末・薄膜 X 線回折(XRD) ※構造化済	4	14
11	ラマン分光	4	13
12	単結晶 X 線構造解析	4	10
合計		71台	158台

※1: 5月にNIMS内部でデータ構造化を実施. JE0(溶液NMR)については完了 → 議題3にて紹介

- ✓ ネットワーク接続可, かつ 優先度高の種目 **71** 台
- ✓ 優先度「中」などの機器を含めた場合 **158** 台 の装着可を見込む

【例】 核磁気共鳴法 (NMR) 9機種 4機関

秘 | CONFIDENTIAL

■想定

- JEOL（5機種）のデータ構造化は共通性が見込まれる
- Bruker社（4機種）もデータ構造化は共通性が見込まれる。

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
NIMS	500MHz固体汎用NMR	JEOL RESONANCE (国内)
NIMS	500MHz固体高分解能NMR	JEOL RESONANCE (国内)
NIMS	800MHz固体高分解能NMR	JEOL RESONANCE (国内)
奈良先端科学技術大学	500MHz超伝導NMR装置	日本電子 ECX-500
奈良先端科学技術大学	400MHz固体超伝導NMR装置	日本電子 ECX-400P
北陸先端科学技術大学院大学	核磁気共鳴スペクトル測定装置・NMR 400MHz	Bruker BioSpin Inc. : AVANCE III 400
北陸先端科学技術大学院大学	核磁気共鳴スペクトル測定装置・NMR 500MHz	Bruker BioSpin Inc.: AVANCE III 500
北陸先端科学技術大学院大学	核磁気共鳴スペクトル測定装置・NMR 800MHz	Bruker BioSpin Inc: AVANCE III 800
千歳科学技術大学	核磁気共鳴装置 (NMR)	Bruker AVANCE NEO 400

各社1機種を対応することで同系機種 of データ構造化を見通すことができる
(各機関が個別に取り組むのではなく、共同で作業・共有することが効果的)

【参考】データ構造化実績としての装置リスト

秘 | CONFIDENTIAL

2021.6.18現在

	装置一般名称	装置メーカー	機種	メーカー了承	公開
1	電子プローブ微小部分分析	日本電子	XM15003-0003		
	電子プローブ微小部分分析	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X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		
作業中	硬X線光電子分光法 (SPring-8 BL46XU)	Scienta Omicron, Inc.	R4000		
NEW	核磁気共鳴法 (NMR)	日本電子	JNM-ECS400		
21	紫外可視分光光度計 (UV-vis)	日立ハイテクノロジーズ	U-2900 (U-3300も可)		
22	蛍光分光分析 (PL)	日立ハイテクノロジーズ	F-7000 (F-4500も可)		

公表等にかかるメーカー同意の必要性についてはP7参照

装置メーカーの同意がない場合の起こりうる実務的な制限の可能性

【1】生データファイルや構造化データの共用の課題

- 利用権限に制限がかかり、最悪の場合には「装置が出力する生データのファイルを他機関の者に開示不可」となる恐れ。
- データ構造化をした結果のファイルや構造化のテンプレート、それを駆動するプログラムを他機関と共用することができなくなる恐れ

【2】データの構造化の不正確さや部分的なデータ構造化の課題

- メタデータや数値データの（装置メーカーが著作権を持つ）フォーマットや語彙について、装置メーカーより情報を開示がない場合にはこれらの情報を”推測してデータ構造化する”ことになり、不正確性となる恐れ。

秘 | CONFIDENTIAL



FY2021に行うデータ構造化対象候補となる機器リスト (案)

- 調査の集計をもとにした今期の取り組む候補であり、ネットワーク接続等による各ハブ機関への収集を確約したものではありません。
- 集計においては中分類のカテゴリにまとめていますが、機器名称などでの表記揺れがあるため、必ずしも中分離の正確なカテゴリー分けを保証しているものではありません。

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
大阪大学	125kV電子ビーム描画装置	エリオニクス社製：ELS-100T
大阪大学	50keV高速大面積電子ビームリソグラフィー装置	エリオニクス社製：ELS-S50LBC
大阪大学	自動搬送電子線ビームリソグラフィー装置	未定
広島大学	超高精度電子ビーム描画装置	(エリオニクス, ELS-G100)*
北海道大学	超高精度電子ビーム描画装置 125kV	エリオニクス社製：ELS-F125
北海道大学	超高速スキャン高精度電子ビーム露光装置	エリオニクス製：ELS-F130HM
早稲田大学	電子ビーム描画装置	エリオニクス社製7700
香川大学	電子線描画装置	エリオニクス社製：ELS-7500EX
東北大学	EB描画装置	エリオニクス ELS-G125S
名古屋大学	電子線露光装置	日本電子（株）
京都大学	高速高精度電子ビーム描画装置	(株)エリオニクス社製 ELS-F125HS

■方針

- ・テンプレートのみでの対応可否についてすり合わせが必要
- ・機器からのファイルデータおよび構造化が可能な場合にはエリオニクス社からスタート

【2】 核磁気共鳴法 (NMR) 9台 4機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
奈良先端科学技術大学	400MHz固体超伝導NMR装置	日本電子 ECX-400P
NIMS	500MHz固体汎用NMR	JEOL RESONANCE (国内)
NIMS	500MHz固体高分解能NMR	JEOL RESONANCE (国内)
奈良先端科学技術大学	500MHz超伝導NMR装置	日本電子 ECX-500
NIMS	800MHz固体高分解能NMR	JEOL RESONANCE (国内)
北陸先端科学技術大学院大学	核磁気共鳴スペクトル測定装置・NMR 400MHz	Bruker BioSpin Inc. : AVANCE III 400
北陸先端科学技術大学院大学	核磁気共鳴スペクトル測定装置・NMR 500MHz	Bruker BioSpin Inc.: AVANCE III 500
北陸先端科学技術大学院大学	核磁気共鳴スペクトル測定装置・NMR 800MHz	Bruker BioSpin Inc: AVANCE III 800
千歳科学技術大学	核磁気共鳴装置 (NMR)	Bruker AVANCE NEO 400

■方針

・ Bruker社（4台）とJEOL（5台）で機関間も含めて対応可能が見込まれる。

→ JEOLについては5月にデータ構造化を完了。

→ Brukerのrawデータ形式の確認を残す。

【3】 走査電子顕微鏡 (SEM) 8台 6機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
千歳科学技術大学	電界放出形走査電子顕微鏡 (FE-SEM)	日本電子 JSM-7800F
早稲田大学	インラインモニター用 超高分解能電界放出型 走査電子顕微鏡	日立ハイテク製SU8240
早稲田大学	FE-SEM	日立ハイテク社製S-4800
京都大学	卓上顕微鏡(SEM)	(株)日立ハイテクノロジーズ Miniscope TM3000
京都大学	超高分解能電界放出形走査電子顕微鏡	(株)日立ハイテクノロジーズ社製 SU8000
千歳科学技術大学	走査型電子顕微鏡 (SEM) (更新前)	キーエンス VE-8800
奈良先端科学技術大学	高分解能電界放出型電子顕微鏡	未定
北海道大学	超高分解能走査型電子顕微鏡	日立ハイテク：Regulus8230

■方針

- ・日立ハイテク社のデータを確認することで5台の展開が見込まれる。

【4】 光学顕微鏡（一般、共焦点、レーザ） 6台 3機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
名古屋工業大学	白色共焦点顕微鏡	レーザーテック OPTELICS HYBRID C3
京都大学	デジタルマイクロスコープ コントローラ	キーエンス製
京都大学	ユニバーサル測定顕微鏡	(株)ミットヨ製 MF-UB2010C
京都大学	ユニバーサル測定顕微鏡	(株)ミットヨ製 MF-UB2010C
京都大学	ユニバーサル測定顕微鏡	(株)ミットヨ製 MF-UB2010C
NIMS	共焦点レーザ走査型蛍光顕微鏡	Leica (国外)

■方針

- ・ ファイル（画像）の出力形態とEXIFデータの確認.
- ・ テンプレート方式の作成を始めることからスタートできると思われる

【5】 磁気特性評価装置群（SQUID） 6台 3機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
自然科学研究機構	SQUID (MPMS-7)	QuantumDesign
自然科学研究機構	SQUID (MPMS-XL7)	QuantumDesign
電気通信大学	超伝導量子干渉型磁束計	Quantum Design: MPMS-XL7
名古屋工業大学	高感度SQUID磁化測定装置	日本カンタムデザイン MPMS5
名古屋工業大学	振動試料型磁束計	東英工業 VSM-5
名古屋工業大学	高周波透磁率測定装置	凌和電子 PMF-3000

■方針

- ・クオンタムデザイン社を手がかりにスタート
- ・三機関ともにNIMSのスポークであることから、各機関にインタビューを開始する。

【6】 収差補正透過型電子顕微鏡 5台 4機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
名古屋工業大学	原子分解能分析電子顕微鏡	日本電子(JEOL) JEM-ARM200F
北海道大学	モノクロメータ付収差補正走査透過電子顕微鏡	FEI : Titan3
北海道大学	収差補正走査型透過電子顕微鏡	日本電子製 : JEM-ARM200F
京都大学	モノクロメータ搭載低加速原子分解能分析電子顕微鏡	日本電子社製 : JEM-ARM200F
九州大学	三次元原子分解能透過電子顕微鏡 [筑紫地区]	サーモフィッシャーサイエンティフィック (株) Titan G2 60-300

■方針

- ・ 日本電子を優先的に対応するところからスタート.

【7】 集束イオンビーム (FIB) 5台 5機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
筑波大学	FIB-SEM	FEI
早稲田大学	集束イオン/電子ビーム加工観察装置 (極表面微量元素分析機能つき)	日立ハイテク社製NB-5000
NIMS	TEM試料自動作製FIB装置	日本エフイー・アイ(株) (国外)
名古屋大学	バイオ/無機材料用高速FIB-SEMシステム ETHOS NX5000	(株)日立ハイテク
九州大学	キセノンプラズマ集束イオンビーム加工・走査電子顕微鏡複合機 [筑紫地区]	サーモフィッシャーサイエンティフィック (株) Helios 5 Hydra DualBeam

■方針

- ・日立ハイテク社とFEIのデータを確認することで4台の展開が見込まれる。

【8】 電子スピン共鳴(ESR) 5台 2機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
自然科学研究機構	電子スピン共鳴	Bruker
自然科学研究機構	データ連携・遠隔操作機能付 電子スピン共鳴	未定
自然科学研究機構	電子スピン共鳴	Bruker
自然科学研究機構	電子スピン共鳴	Bruker
名古屋工業大学	電子スピン共鳴装置	日本電子(JEOL) JES-RE1X

■方針

- ・ Bruker社のデータ構造化で機関間も含めて対応可能が見込まれる.
- ・ 2機関ともにNIMSのスポークであることから, NIMSが対応するものとする.

【9】 電子分光(XPS) 4台 4機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
信州大学	光電子分光装置	ULVAC・PHI製 Quantera II
奈良先端科学技術大学	多機能走査型X線光電子分光分析装置(XPS)	アルバックファイ PHI 5000 VersaProbe II
東京大学	多機能走査型X線光電子分光分析装置PHI5000 (XPS)	アルバック・ファイン社製
自然科学研究機構	X線光電子分光	Scienta-Omicron

■方針

- ・アルバック社, 日本電子社についてはデータ構造化済.
- ・シエンタ社については検討の可否判断を行う

【10】 粉末・薄膜 X 線回折 (XRD) 4台 4機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
奈良先端科学技術大学	薄膜X線構造解析装置	リガク SmartLab9kW/IP/HY/N
京都大学	X線回折装置	(株)リガク社製 SmartLab-9K
東北大学	X線回折装置	リガク
NIMS	高輝度高感度粉末X線回折	(株) リガク (国内)

■方針

- ・ NIMSのデータ構造化済のリガクの適用について検討を進める.
- ・ 要求項目やユーザー利用については調査する必要がある.

【11】 ラマン分光(顕微ラマン) 4台 4機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
九州大学	高速レーザーラマン顕微鏡	ナノフォトン Raman-touch
千歳科学技術大学	ラマンイメージング	Renishaw inVia
大阪大学	レーザーラマン顕微鏡	ナノフォトン :RAMAN-touch VIS-NIR-OUN
早稲田大学	顕微ラマン分光装置	東京インスツルメンツ社製nanofinder 30

■方針

- ・ナノフォトン，レニショー，東京インスツルメンツの三社を優先して進める。

【12】 単結晶XRD 4台 3機関

秘 | CONFIDENTIAL

機関名	設備名	メーカー (国内・国外)
名古屋工業大学	単結晶X線構造解析装置	リガク VariMax with DW RAPID
名古屋工業大学	単結晶X線構造解析装置	リガク Mercury
奈良先端科学技術大学	微小結晶X線構造解析装置	リガク VariMax RAPID RA-Micro7HFM
NIMS	結晶自動交換ロボット搭載型強力X線単結晶構造解析装置	リガク(株)

■方針

- ・粉末・薄膜のデータフォーマットとの対応を見据え検討を進める。
- ・単結晶ならではの要求項目やユーザー利用について調査する必要がある。

APPENDIX

上位13番目以降の種目 #1

秘 | CONFIDENTIAL

#	中分類（イエローページを元に再設定）	選定数	全体台数
13	RIE(ICP)	3	14
14	RIE(Deep)	3	11
15	電子材料・デバイス評価	3	11
16	CVD(化学気相成長)、有機膜	3	10
17	スパッタリング	3	10
18	光露光(DMD)	3	8
19	ESI-MS、CSI-MS、LC-MS	3	7
20	MALDI-MS	3	5
21	走査プローブ顕微鏡(AFM, SPM)	2	10
22	原子層堆積(ALD)	2	6
23	X線回折法(XRD)	2	5
24	膜厚・段差・粗さ測定（触針）	2	4
25	赤外分光	2	4
26	透過電子顕微鏡	2	9
27	熱測定	1	7
28	蒸着(抵抗加熱、電子線)	1	6
29	超高压透過電子顕微鏡	1	6

上位13番目以降の種目 #2

秘 | CONFIDENTIAL

#	中分類（イエローページを元に再設定）	選定数	全体台数
30	RIE(その他)	1	5
31	光露光(マスク)	1	5
32	紫外可視近赤外分光	1	5
33	膜厚・段差・粗さ測定（エリプソメータ）	1	4
34	X線吸収微細構造（XAFS）	1	4
35	ダイシング、スクライバ	1	4
36	光露光(レーザー描画)	1	4
37	ゼータ電位計，パーティクルサイズアナライザー	1	3
38	光露光(マスクレス、直接描画)	1	3
39	質量分析(MS)	1	3
40	低真空走査電子顕微鏡	1	3
41	エネルギー分散型蛍光X線分光(EDS)	1	2
42	レジスト塗布・現像装置	1	2
43	三次元マルチスケール解析	1	1
44	物理特性測定装置	1	1
45	プロセスシミュレータ	1	1
	合計	55台	183台

NIMS装置コードとサンプルデータについて

2021年6月22日 データ連携基盤／データ構造化委員会合同委員会

国立研究開発法人物質・材料研究機構

統合型材料開発・情報基盤部門

松波 成行

報告内容

1. 第1回データ連携基盤委員会での依頼事項： サンプルコード配信について【報告】
2. NMRの装置コードとサンプルデータについてご紹介【報告/提案】

第1回データ連携基盤委員会での依頼事項： サンプルコード配信について【報告】

田浦委員：NIMSですで行った18機種のサンプルデータやコードは共有できるか。これまでNIMSで取り組んできた人はどのような専門性やポジションの方であるか。

対応：2021年6月11日に下記の内容を委員会皆様へメールにて発信

【1】 ”NIMS開発の自動翻訳のコードやサンプルデータ”

既に公開済のXRD,XPS,AESの3機種につきましては下記からGithubへアクセスしていただきますと、サンプルデータ、コード、および出力例をご確認いただけます。

<https://dice.nims.go.jp/services/M-DaC/>

いずれも計測のものばかりで恐縮ではございますが、どうぞよろしくお願いいたします。

【2】 データ構造化にかかるNIMSの参考論文

ご紹介をさせていただいたGithubのコードは、現在、弊所内でのオンプレミスのシステムで実装し、IoTからデータ構造化を経てDB化を進めています。

全体の概要につきましては、この4月にオンラインで公開となりました情報処理学会のデジタルプラクティス（※）をご照覧いただければ、技術的な背景も含めてご理解が進むのではないかと思いますので共有をさせていただきます。

（本内容は、現在のオンプレミスでの仕様をもとにしておりますが、本事業ではクラウド化によって、特に入力GUIにかかる仕掛けが大幅に変更となる予定です。その後の構造化の流れは踏襲予定です）

本件、各機関で独立に行うものではなく、みなさんと協調および共有しながら人材育成の観点も含めて進めて参りたいと思っております。

※<https://www.ipsj.or.jp/dp/contents/publication/46/TR0202-08.html>







2. NMRの装置コードとサンプルデータについてご紹介 【報告/提案】

新たにデータ構造化した装置

秘 | CONFIDENTIAL

装置の種類	核磁気共鳴装置(NMR) 溶液専用
メーカー	日本電子(JEOL)
型番	JNM-ECS400

■ 新たにお送りできるコードとサンプルデータ

 JEOL_converter-exe	2021/06/04 18:20	ファイル フォルダー		}	メタデータ抽出パーサー (不可) データ構造化コード (可) メタデータXMLスキーマ (不可)
 output	2021/06/04 18:20	ファイル フォルダー			
 sample	2021/06/04 18:20	ファイル フォルダー			
 NMR-JEOL_keypara.py	2021/06/01 9:58	Python source file	6 KB		
 NMR-JEOL_v1.0.py	2021/05/25 11:57	Python source file	4 KB		
 NMR-JEOL-XML.xml	2021/06/01 8:37	XML Document	1 KB		

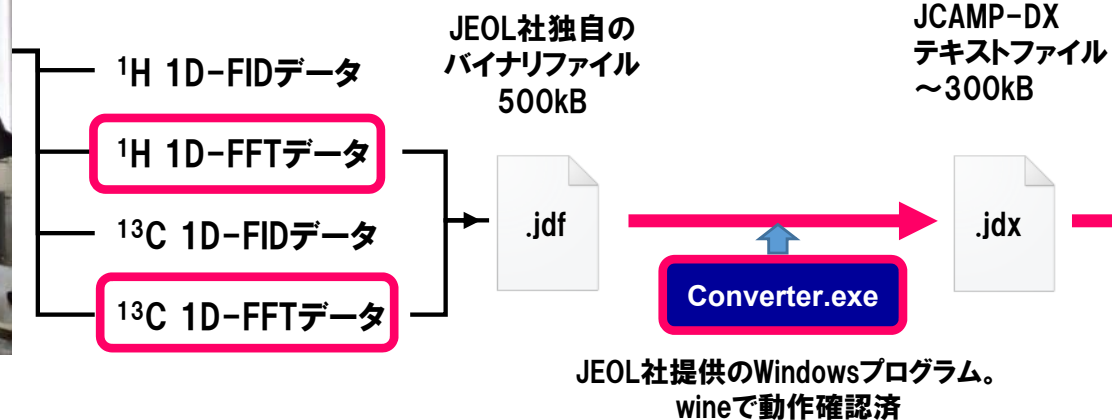
■ 注記

- 本コード等は、NIMS内の運営交付金事業(内部事業向け)です。
そのため、データ構造化方法、メタデータの選定、変換語彙(翻訳)についてはNIMS事業向けの構成としております。
- 語彙変換(語彙の翻訳)にかかるスキーマ(.xml)とパーサー(.py)の提供はメーカー合意がないため、現段階での提供は差し控えたく存じます。

- 一次元スペクトル(FFT)のrawデータ(.jdf)をデータ構造化。
(二次元スペクトルなど複数測定ファイルが投入された場合は、1次元データのみを対象とする)



利用頻度の高い ^1H と ^{13}C のFFTデータを「データ構造化」の対象とする



計測パラメータ(メタデータ)のXML構造化

- JCAMP-DXからのメタデータ取り出し → 可能. **202種類が出力**できる
- 当該装置のメタデータ候補および翻訳(語彙)は下記17項目とした.

	出力計測パラメータ	日本語語彙	英語語彙	単位	備考(出力)
1	TITLE	語彙翻訳のため非公開			EB
2	DATATYPE				NMR SPECTRUM
3	NUMDIM				1
4	LONGDATE				2021/05/12 14:28:05
5	.OBSERVEFREQUENCY			MHz	399.7821984
6	.OBSERVENUCLEUS				1H
7	.PULSESEQUENCE				proton.jxp
8	.SOLVENTNAME				CHLOROFORM-D
9	.SPINNINGRATE			Hz	15
10	.OBSERVE90			us	6.83
11	\$XPOINTS				16384
12	\$TEMPGET			C	23
13	\$SCANS				8
14	\$CHANGERSLOT				24
15	\$PROJECTNAME				Taro
16	\$INSTMODELNUMBER				JNM-ECS400
17	\$INSTSERIALNUMBER				NM1441001300130

✓ NIMS内部でのNMRのデータ収集の運営的な検証を目的として、この17項目で進める

テンプレートの構成（手入力の必要なメタのデータ登録GUI）

秘 | CONFIDENTIAL

■ 入力項目はデフォルト版（材料情報の記述欄： 4項目 機器固有項目： なし）

■デフォルト版テンプレート

JEOL-NMR JNM-ECS400用 データ送付状 JEOL-NMR_v20210601

記入年月日

NIMS user ID

データセット名

データセット管理者

測定目的・説明（任意）

試料名（任意）

分子式・組成（任意）

試料の説明（任意）

ファイル情報
 選択されていません

基本情報

- ① 記入年月日
- ② データ投入者
- ③ データセット名
- ④ データ責任者

サンプル情報

- ⑤ 計測の目的・説明
- ⑥ 試料名（番号）
- ⑦ 分子式・組成式
- ⑧ 試料の説明（option）

- ✓ NIMS内部でのNMRのデータ収集の運営的な検証を目的では、デフォルト版のテンプレートにてFSする
- ✓ 運用試験をする主体： NMRの管理Gr

【提案】WGでの試験的な検討

秘 | CONFIDENTIAL

- 当該ソースコードならびに構造化方法をたたき台として、データ構造化WGで以下の装置について横展開をしたい
- 本検討にて**15台**のデータ構造化が作業を共有することで効率的に完了することが見込まれる

ハブ	機関名	装置名		メーカー	型番
NIMS	NIMS	500MHz固体汎用NMR	固体	日本電子	
NIMS	NIMS	500MHz固体高分解能NMR	固体	日本電子	
NIMS	NIMS	800MHz固体高分解能NMR	固体	日本電子	JEOL RESONANCE (国内)
NIMS	NIMS	汎用NMR	溶液	日本電子	(株)日本電子 (JNM-ECS400)
NIMS	産業技術総合研究所	固体NMR装置 (SSNMR)	固体	ブルカー	
NIMS	自然科学研究機構	高磁場NMR(600MHz固体)	固体	ブルカー	
NIMS	自然科学研究機構	高磁場NMR(600MHz溶液)	溶液	日本電子	
NIMS	自然科学研究機構	高磁場NMR(800MHz溶液)	溶液	ブルカー	
NIMS	電気通信大学	溶液NMR装置	溶液	日本電子	ECA-500
京都大学	奈良先端科学技術大学	400MHz固体超伝導NMR装置	固体	日本電子	ECX-400P
	奈良先端科学技術大学	500MHz超伝導NMR装置		日本電子	ECX-500
名古屋大	北陸先端科学技術大学院大学	NMR 400MHz		ブルカー	AVANCE III 400
	北陸先端科学技術大学院大学	NMR 500MHz		ブルカー	AVANCE III 500
	北陸先端科学技術大学院大学	NMR 800MHz		ブルカー	AVANCE III 800
	千歳科学技術大学	核磁気共鳴装置 (NMR)		ブルカー	AVANCE NEO 400

機関数: 9
台数: 15
メーカー: 2

上記9機関のほか、各機関でNMRを共用する機関で参加したい機関に呼びかけたい

■目的と取り組む内容

ハブおよびスポークでデータ構造化作業のワークフローやイメージを体得しつつ、下記の4つについて、**メーカー合意が不要の範囲**で意見集約を図る

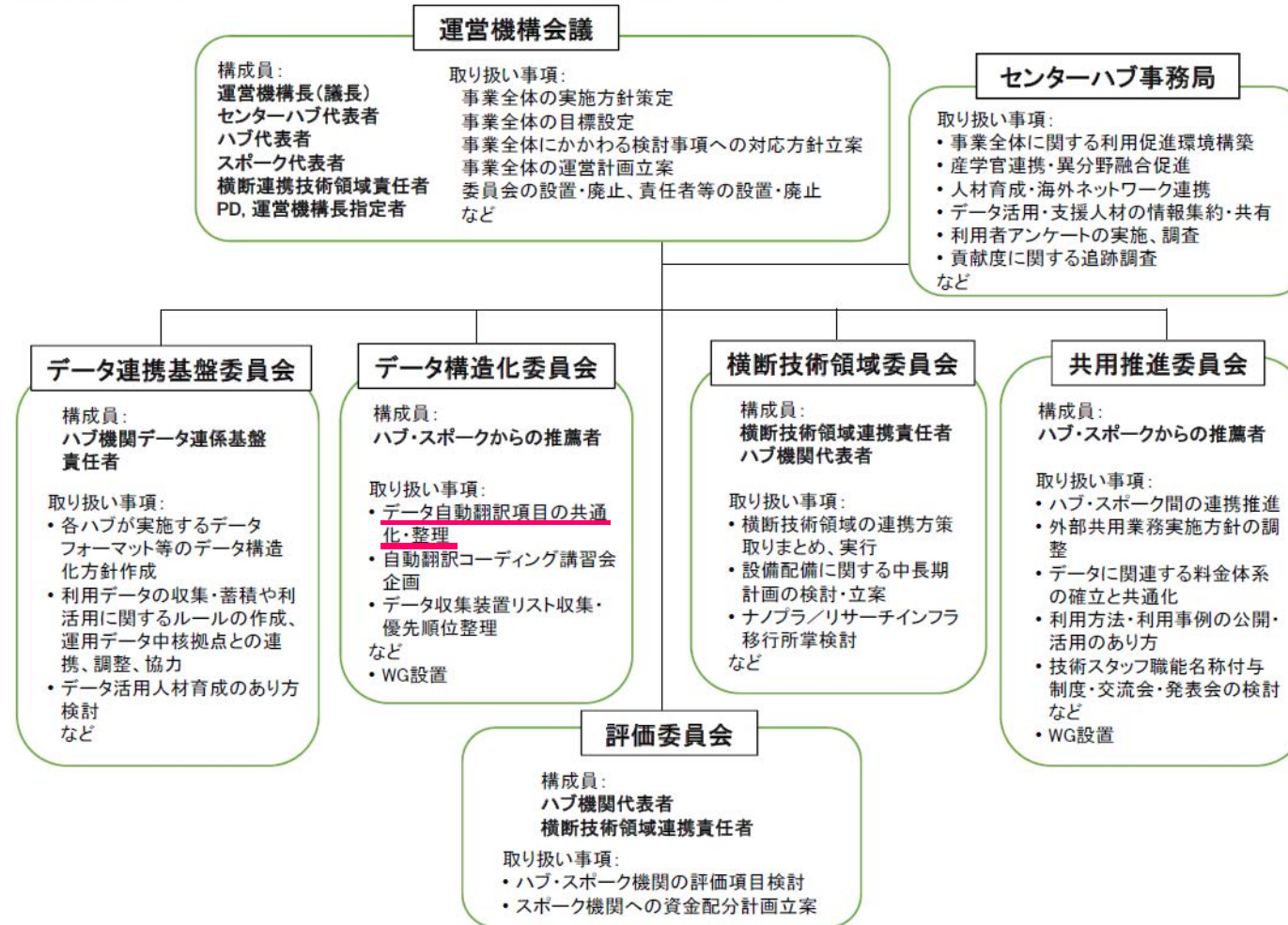
- ① NMRの手入力項目(テンプレート)の構成の意見集約 (特に材料情報の記述の在り方)
- ② NMRの機関共通のメタデータの選定にかかる意見集約
- ③ NMRの溶液/固体のメタデータの選定にかかる意見集約
- ④ NMRのメーカー間共通のメタデータの選定にかかる意見集約

【参考】データ構造化委員会の所掌範囲

秘 | CONFIDENTIAL

資料 運1-3

運営機構組織(案)



ネットワークの設定について（案）

令和3年6月22日

物質・材料研究機構

マテリアル先端インフラ センターハブ事務局

【議案趣旨】

5月14日に事務連絡にてご協力をいただきました機器優先順位調査で、各ハブ様、スポーク様よりいただいたご回答のあった中で、全ハブで共通するネットワーク関連の対応すべき事柄がございましたので情報共有ならびに対応の共通化を図らせていただきたく、ご承認をいただきたく存じます。

1. 非ネットワーク環境にあるPC, 特にサポート切れOS (Win7) のPCからのデータ登録の件
2. 当該装置が別事業であるリモート接続等による遠隔操作対象となっている場合の件
3. PLC 制御のためファイル取得ができない装置の件
4. 巨大ファイルの上限について

第1案件 非ネットワーク環境にある PC，特にサポート切れ OS (Win7) の PC からのデータ登録の件

1. 提案趣旨

装置の安定運用の観点，およびネットワークセキュリティの観点から計測装置やプロセス装置の制御 PC が非ネットワーク環境に置かれているケースがあります．そのような場合のデータ登録の方法について，以下の2通りの場合で各ハブ機関様がスポークス機関様へ対応できるかを判断しつつ，検討していただきたい．

① OS が win8 以上

- 各機関のネットワークポリシーは，適切なセキュリティ対策をした PC については接続可能としていることから，ハブ-スポークス間でのネットワークセキュリティ対策が十分に取られることでネットワークを介してデータの転送が可能となると判断されます．

【参考：NIMS ハブの対応案】 OS が準拠していても装置管理上の理由から接続していないケースでは，IoT セキュリティデバイスを設置することで，現在の PC 環境を変更せずに，特定の送り先（弊所の場合は，NIMS のデータクラウド）のみに送信可能となります．

また，IoT セキュリティデバイスは windows update などの外部トリガーはかかりませんので，勝手なバージョンアップなどは行わず，非ネットワーク環境をそのまま維持します．

② OS が win7 以前（レガシー装置）の場合

- 各機関のネットワークポリシーから，本事業では，原則としてネットワーク接続を推奨しない機器とさせていただくのはどうか．
- 代替案としては II の参考図にあるような最新 OS をもつ中継 PC（各機関のネットワークポリシーに合致するもの）を配置し，その PC とシリアル接続をさせて，その中継 PC にデータを取り込んだあとに，各ハブの用意する事業専用のデータ登録サーバに蓄積することを推奨したい．

【参考：NIMS ハブの対応案】 参考図 II は NIMS ハブとしての案となります．NIMS ハブでは，中継 PC に IoT セキュリティデバイスを設置し，そこからデータ構造化システムのサイトの GUI (テンプレートとも称する) へアップロードをすることを計画しております．

II. 参考図 (NIMS ハブの対応案概略図)

課題：規定上ネットワーク接続不可の装置PCからデータ構造化システムへデータ転送する

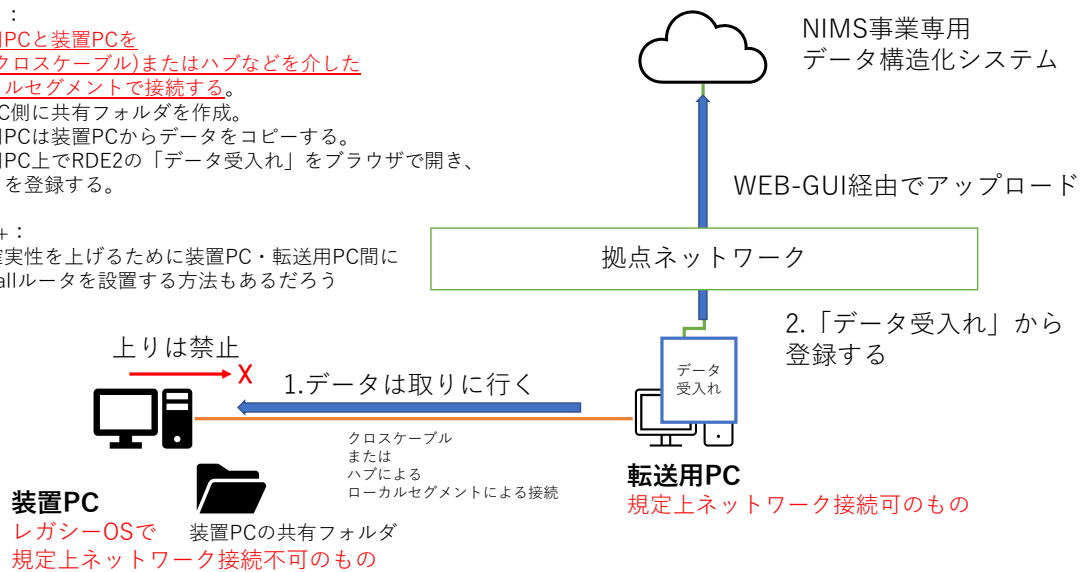
回答案1：

- ・転送用PCと装置PCを
直接(クロスケーブル)またはハブなどを介した
ローカルセグメントで接続する。

- ・装置PC側に共有フォルダを作成。
- ・転送用PCは装置PCからデータをコピーする。
- ・転送用PC上でRDE2の「データ受入れ」をブラウザで開き、データを登録する。

回答案1+：

- ・より確実性を上げるために装置PC・転送用PC間に
Firewallルータを設置する方法もあるだろう



第2 案件 当該装置が別事業であるリモート接続等による遠隔操作対象となっている場合の件

1. 提案趣旨

各機関においては、装置が複数の事業において併用されている場合があります。とくに、昨今は先端研究基盤共用促進事業（研究機器相互利用ネットワーク導入実証プログラム（SHARE））等において、遠隔操作による接続を可能とする機器も増えています。

そのような機器において、本事業が行うデータのアップロードを行う場合にはネットワークセキュリティ上、運用が両立しないことが想定されます。

対応案

- リモート接続事業を優先する場合、第1号案件のレガシーPC の対応と同じように、MRI 事業専用の最新の OS をもつ中継 PC（各機関のネットワークポリシーに合致するもの）を配置し、データ登録はその PC を経由して、各ハブ機関のデータサーバーへ蓄積することを推奨といたく存じます。

【参考：NIMS ハブの対応案】

- NIMS ハブが用いる IoT セキュリティデバイスでも、リモート対応の機器については、双方向の特定の通信のみを厳密に制御できるかについては技術検証ができていないため、不可とする予定です。

第3案件 PLC 制御のためファイル取得ができない装置の件

1. 提案趣旨

半導体プロセスにおいては組み込み PC 等によってユーザーからの入力等の操作が相当に制御されている装置があります。そのような装置からのデータ取り出しについてはどうするか。

対応案

- USB シリアル変換器等を使って PLC とパソコンを接続することができれば、上記のように 中継 PC (各機関のネットワークポリシーに合致するもの) を経由して、データアップロードを行う事が可能となるかと考えております。

【参考：NIMS ハブの対応案】

- PLC 機器からの NIMS のデータ構造化システムへの直接アップロードはシステム設計上できない仕様となっております。そのため、上記のような中継 PC を配置して対応可能であるかを検討いたします。
- もしくは、装置の脇に PC を設置し、事業専用のデータ登録 GUI (テンプレート) から操作情報などをクラウドのデータ構造化システムへ記録するだけに留めることも考えております。(レシピ記録)

第4案件 巨大ファイルの上限について

1. 提案趣旨

最新の計測装置では3次元データ化や動画観察も可能となり、また、放射光設備においてもそのファイルは肥大化しています。

データ転送や登録においては各ハブ機関様の通信受容量やシステム的な制限もあるかと存じます。

今後、各ハブ機関様で蓄積された構造化データをNIMSへ転送等を行う場合には、以下のようなファイルサイズの制限があることを前提にご対応をいただきたく存じます。

対応案

- 各ハブ機関様にご準備されているデータ蓄積サーバの容量ならびに、通信受容量を十分にネットワーク管理部門と協議された上で、データ転送量の上限を定めていただくことを推奨いたします。
- 弊所においては夜間や週末など、日常生活に影響を及ぼさない時間帯において転送を許可するなどの運用上の規則も設けることも一案です。
- なお、弊所が次期システムで想定している Microsoft の Azure では一回の上限で受け付けるファイル容量は 10GBとなっております。それを超えるデータは、原則として受け入れられないため、各ハブ機関様よりNIMSへデータを転送される場合には事前にご相談させていただきつつ、データ管理のあり方について個別に調整をさせていただきたいことにご了解をお願いいたします。

以上

IoT ネットワークの説明会開催のご紹介

(情報共有)

令和3年6月22日

物質・材料研究機構

マテリアル先端インフラ センターハブ事務局

NIMS ハブにおきましては弊所のスポークス七機関様からのデータ収集を効率的に行う仕組みとして、IoT セキュリティデバイスを使ったネットワークのセキュリティを確保した方式にて、個別の装置から安全に転送し弊所のデータ構造化システムへ登録していただける方法を企画しております。

弊所におきましては、来月中旬を目安に NIMS 直下のスポークス七機関様向けに IoT セキュリティデバイスおよび管理システムの概要説明会を開催する予定です。

各ハブ機関様におかれましても、今後のハブ運営におきましてご参考になるかと思われます。

ご参加ご希望のハブ機関様にはご案内を差し上げますので、事務局へその旨ご返答いただければと存じます。

【ネットワーク説明会の予定】

- 6月23日 事務局より NIMS スポークス七機関宛に日程調整開始
各機関のネットワーク管理部門の窓口（担当者様）のご連絡先の依頼
- 7月中旬 説明会開催
- 8月以降 各機関の個別ヒアリング対応（メーカー）

以上

令和3年6月22日（火）

微細加工系データ収集検討WGについて（案）

1. 微細加工領域のデータ収集のあり方を検討するWGを発足させ検討する。
2. メンバーは、横断技術連携領域（微細加工領域）の小寺秀俊責任者を含むハブ機関を中心に選任する。