

## 今日のトピックス

- 近況報告
- TIA「かけはし」の紹介
- XAFSを機械に理解させる取り組み
- DOIが付与されたデータの修正



<https://mdr.nims.go.jp/collections/qz20st57x>  
<https://doi.org/10.48505/nims.1447>

# MDR XAFS DBの今後の計画

## TIA「かけはし」



国立研究開発法人物質・材料研究機構  
石井真史 田辺浩介 松田朝彦

# 最近のMDR XAFS DBの進捗

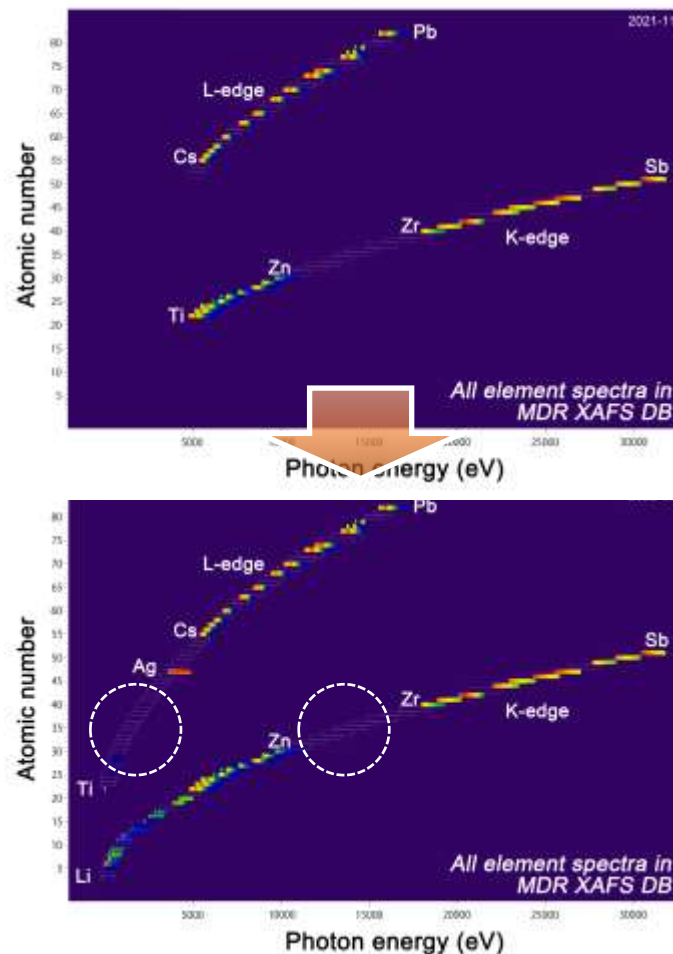
## SP8に加え三機関データ公開済み

- Ritsumeikan SR Center, Ritsumeikan University: 75
- Hokkaido University, Institute for Catalysis: 206
- KEK PF:136
- 計 2,174 試料
- 5 keV以下とL殻が強化  
L殻高エネ側、K殻Ga-Yの間が欠損

## Readmeの作成

- 登録状況の統計情報
- 各機関のデータフォーマット
- 試料に関するメタデータ記載状況
- 吸収端の星取表
- エネルギー校正情報のまとめ OTSF作成中

## TIA「かけはし」採択



新規 連携

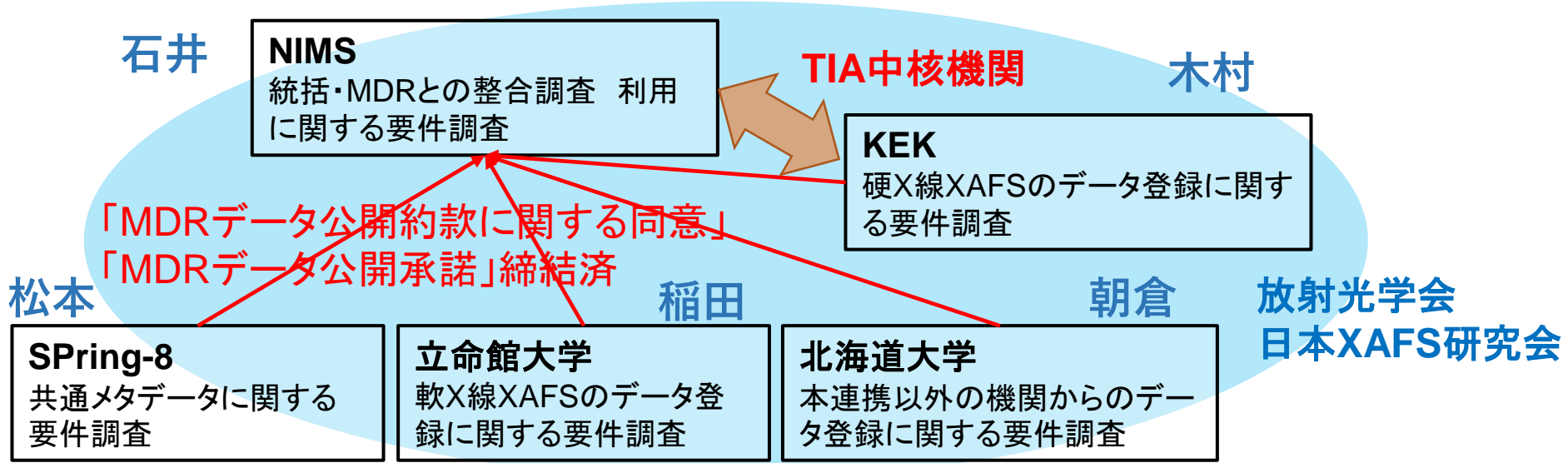
題目: 放射光研究DX化のための多機関連携XAFSデータベース構築技術調査研究

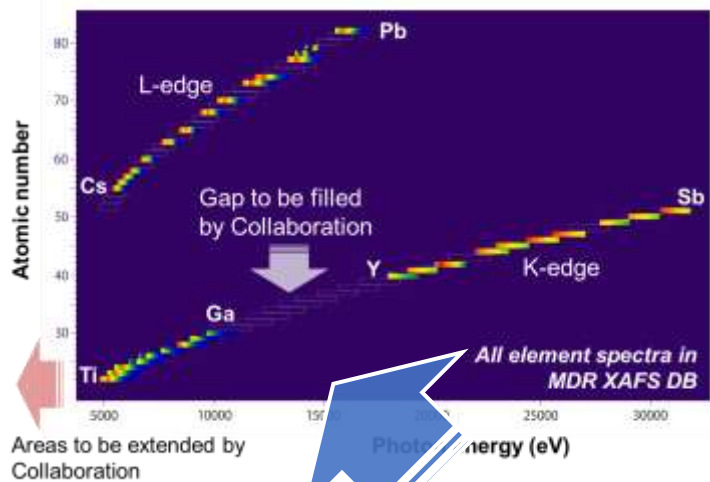
調査研究代表: 物質・材料研究機構 石井真史

NIMS代表者: 統合型材料開発・情報基盤部門 材料データベースG 石井真史

・調査研究の概要と連携状況

X線吸収分光は放射光実験の中でも特に汎用性が高く、様々な試料のスペクトルの共有が結果の解釈を深める。本課題は、多機関が持つスペクトルデータをNIMS材料データリポジトリ(MDR)に集約し、データベースとして公開するため以下の技術調査を行う: ①大量データ登録のためのバッチシステムの要件、②横断的検索のための共通メタデータ形式とバージョン管理方法、③広範なユーザーにデータを提供するGUI/API技術。全ての参画機関とはデータ提供および公開の契約を締結済みである。





## 【発展のイメージ】

- 大型実験施設や大学からデータがどんどん集約される仕組みの確立
- 放射光データ利活用のための共通データフォーマットの作成

「かけはし」との連携  
(会合共催のご承認)

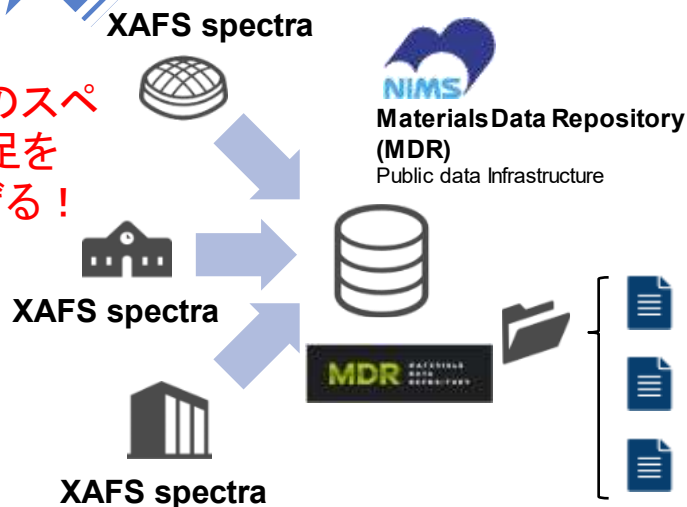
## 【年間活動計画】

- 6-11月 データフォーマットの調査と確定
- 12-3月 データを抽出するAPI/GUIの試作

## 【主な活動】

- バッチ登録システム試作
- API/GUI試作

全国の機関からのスペクトルがDBの不足を補い、範囲を広げる！



## 期待される成果

- ① 全国のXAFSデータがMDRに集まり共同で利活用できるようになる
- ② MDRのAPIの機能を活かした、ドメイン向けサービスの試行

## 発展の可能性

ワールドワイドのデータ蓄積によるデータ駆動  
放射光実験全体のデータ流通のひな形の形成・他分野への拡張

# XAFSを機械に理解させるために

## On Top Single Figure (OTSF)を手始めにスキーマの導入

「吸収端」と「MDR XAFS DB Work」を定義

### ✓ 吸収端

- 励起原子
- 内殻

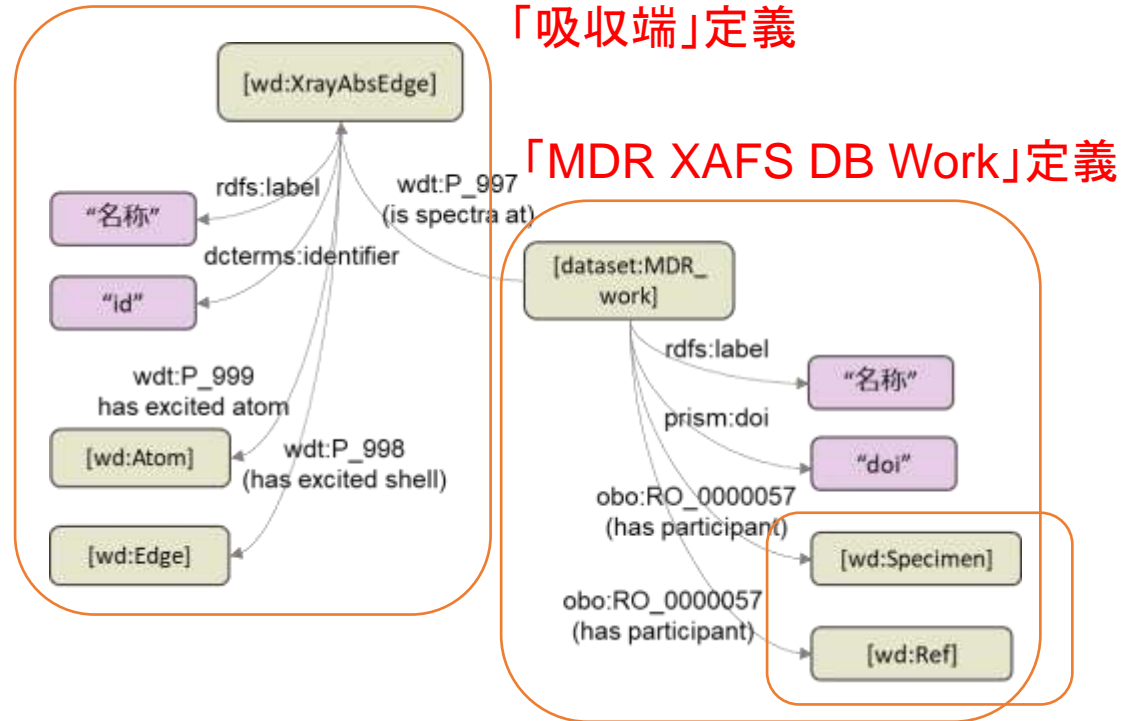
の組合せで定義

### ✓ MDR XAFS DB Work

- 試料
- リファレンス

の組合せで定義

### ✓ 両者を「is spectra at」で連結



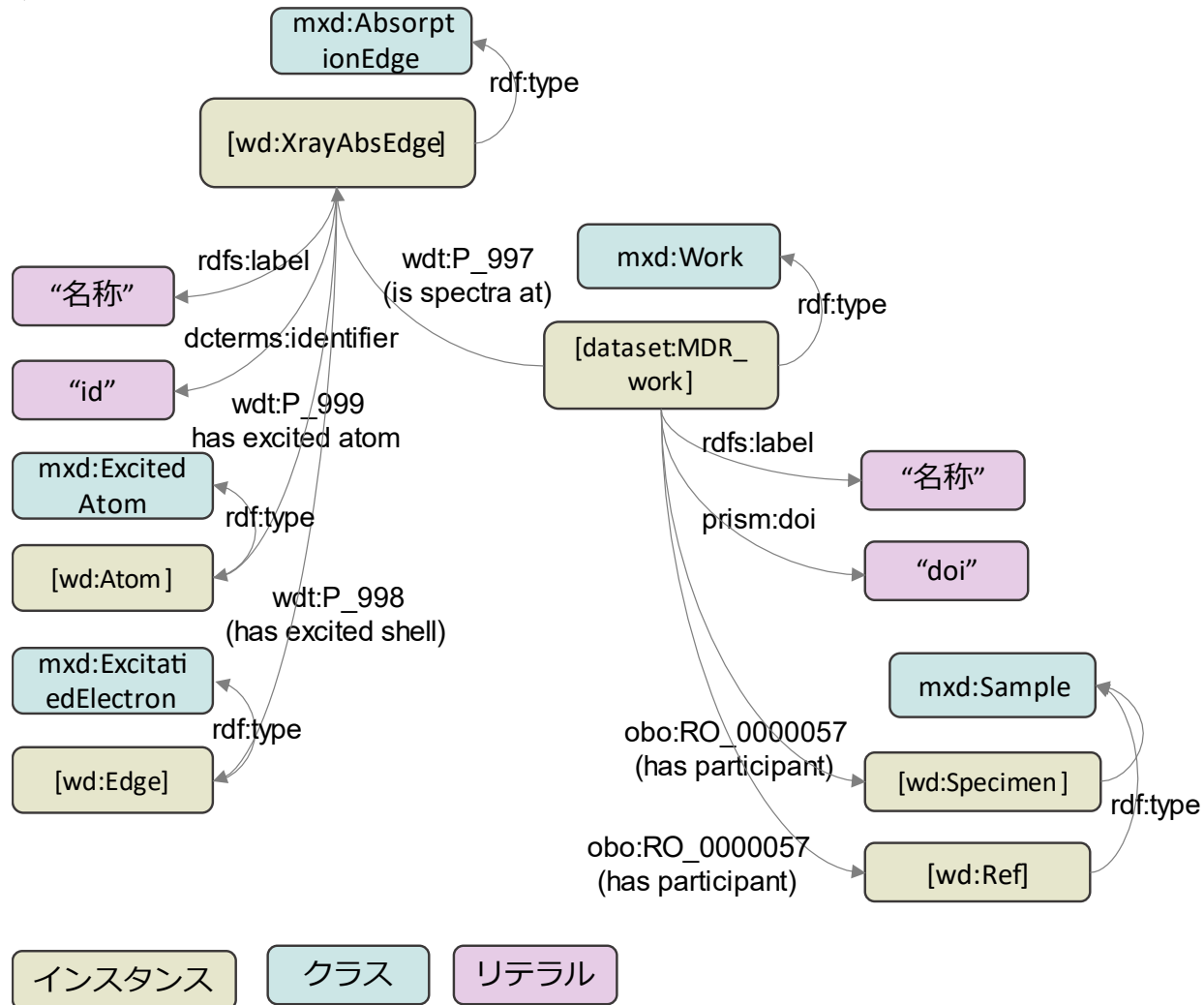
「吸収端」定義

「MDR XAFS DB Work」定義

「サンプル」定義

- セマンティックウェブ技術 RDF (Resource Description Framework)の導入
- MDR XAFS DBオントロジーも別途定義

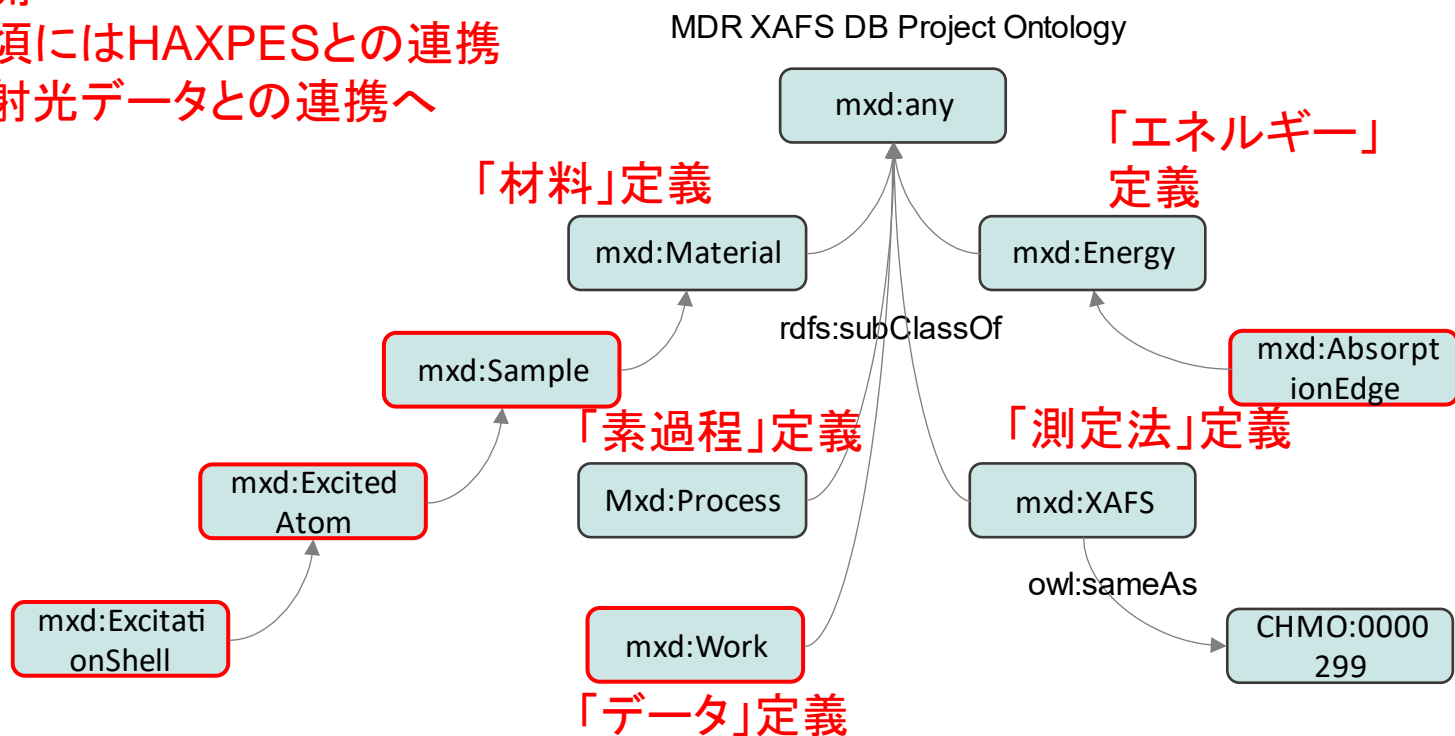
# XAFSを機械に理解させるために クラス定義



# データ構造化：放射光データの連携

## MDR XAFS DBのオントロジーVer.01

- 9月頃にはオントロジーとRDFの公開
- 11月頃にはHAXPESとの連携
- 他放射光データとの連携へ



# Tombstone Page

## DOIが付与されたページの修正について

MDR XAFS DBにおいて、**深刻な誤りがあった場合は**、改訂・取り下げはあり得ますが、DOIの永続性を考慮して、右のような理由を付したTombstone Pageを作成します。

こうしたケースはDOIの管理上、望ましくないため、

**登録にあたっては各機関で十分にReviewをすること**

をお願いします。

参考：

<https://support.datacite.org/docs/tombstone-pages>



Dataset does not exist anymore: XAFS spectrum of Ballium nitrate

The dataset with the identifier <https://doi.org/10.48505/nims.3370> had a serious error in the absorbing edge information and was replaced by another version with the following citation:

Creator: Kenichi Shimizu

Contact agent: Hokkaido University, Institute for Catalysis

XAFS spectrum of Ballium nitrate

<https://doi.org/10.48505/nims.XXXX>

**Tombstone Page**  
**公開予定**