

あなたのXAFSデータを 世界中で見てもらうために

2024年第三回XAFS勉強会 2024/09/26

国立研究開発法人物質・材料研究機構

石井真史



XAFSデータの行く末について

XAFSデータのライフタイム

【上り坂】XAFSをPFで測定した→自分のPCにデータを入れて持ち帰った→解析して学会発表をした
→論文を書いた →

【下り坂】あるけれど、実験内容の記憶が曖昧→データはどこかにある**

*参照スペクトルに助けられたこと、ありませんか？

**日本学術会議 研究データ「10年間」保存ルール、ラボノートの書き方の指南書もある

科学技術政策からXAFSローカルまで

世界は、どうなっているの？ 日本の考えは？

世界的潮流・国策としての オープンサイエンス（G7科学技術大臣会合）

オープンサイエンスに関する最新の政策動向

https://www8.cao.go.jp/cstp/openscience/r6_0730/siryo1.pdf

オープン研究データ：（研究データをよりオープンに）

- 論文の根拠データを皮切りに、**研究データを共有・公開**することで新しい科学的価値とイノベーションを効率よく生み出す基盤づくりを推進。（論文で起きた問題の根本的解決を目指す）
- 機関リポジトリと連携した**研究データ基盤整備**とインセンティブを付与（評価体系に導入、ムーンショット研究開発プログラムにおける先行実施等）

進む国際イニシアチブでの検討

EU：欧州オープンサイエンスクラウドを構築

G7：オープンサイエンスWGを設置（日本とEUが共同議長）。2016年より毎年会合等を開催。

OECD：公的資金による研究データアクセスに関する理事会勧告（2021年1月）

UNESCO：オープンサイエンス勧告（2021年12月）

米国（2022年8月）：論文と研究データの即時オープンアクセス方針を決定

G7科学技術大臣会合（2023年5月@仙台）：
オープンサイエンスにおける国際連携

出典：文部科学省科学技術・学術政策研究所 林和弘データ解析政策研究室長 提供資料を基に内閣府作成

研究データを共有・公開することで新しい科学的価値とイノベーションを効率よく生み出す基盤づくりを推進。

初期の考え: Farrel Lytle Database

http://ixs.iit.edu/database/data/Farrel_Lytle_data/

The directory tree " PROCESSED" contains data that is reduced to a standard file type (of which we do not know the format). Note that there is no description of the data in these files, only a reference to the original "raw" data file name.

ディレクトリツリー

「PROCESSED」には、**標準的なファイル形式に圧縮されたデータが含まれています(その形式は不明です)**。これらのファイルには**データの説明はなく**、元の「生」データファイル名への参照のみが含まれていることにご注意ください。

Welcome to the Farrel Lytle Database!

This collection of data represents just about every scan of data ever taken by Farrel.

The directory tree "[RAW](#)" contains as-collected data in the native format where the data was obtained (e.g. SSRL, CHESS made (a sometimes unsuccessful) attempt to extract the documentation and sort this data according to the edge element available.

The directory tree "[PROCESSED](#)" contains data that is reduced to a standard file type (of which we do **not** know the format) the data in these files, only a reference to the original "raw" data file name.

- [Raw \(beamline\) data \(directory tree\)](#)
- [List of processed \(standard format\) data \(711 Kbytes\)](#)
- [Processed \(standard format\) data \(directory tree\)](#)
- [Return to the top level of the XAFS database](#)

Created by Boyan Boyanov on July 31, 1995.

Last modified by Carlo Segre on July 29, 2008.

- 後から見ると、折角のデータが、ほとんど理解できないことが多い。
- **本人以外はわからない記号によるデータ管理は、再利用は困難**

メタデータとは？ なぜ必要で、何を書くか

後で何のデータかわかるようにしたい

データの素性を表す、「データのデータ」が必要

→メタデータ

メタデータ

- いつ When
- どこで Where
- 誰が Who
- 何を What
- どうやって How

データの4W1Hがメタデータ

```

change.log 新規3 WEPlan.txt ストーリー案.txt 題目と概要.txt CuFoil-1-f.dat
1 9809 AichiSR BL11S
2 CuFoil-1 22.06.24 09:42 - 22.06.24 09:43
3
4 Ring : 1.2 GeV 0.0 mA 0.0 mA
5 Mono : Si(111) D= 3.13553 A Initial angle= 12.63979 deg
6 BL11S Transmission ( 2) Repetition= 1 Points= 4446
7 Param file : DUMMYNAME.prm energy axis (2) Block = 1
8
9 Block Init-Eng final-Eng Step/eV Time/s Num
10 1 8684.36 10084.36 0.31 0.01 4448
11 ORTEC( 0) NDCH = 4
12 Angle(c) Angle(o) time/s 1 2 3
13 Mode 0 0 1 2
14 Offset 0 0 10086.800 8811.300 7363.200
15 13.15894 13.15787 0.0122 29204813 61146389 31906537
16 13.15853 13.15746 0.0122 29204813 61146389 31906537
17 13.15811 13.15705 0.0122 29204213 61157489 31911337
18 13.15769 13.15664 0.0122 29200313 61147289 31912237
19 13.15728 13.15623 0.0122 29190913 61146989 31917637
20 13.15686 13.15582 0.0122 29192413 61145689 31912537
21 13.15644 13.15541 0.0122 29190513 61147489 31919637

```

9809フォーマット

✓いつ、どこで、どうやって、はヘッダに記載

みんなで共有するために、あともう一步

IXAS (International x-ray Absorption Society)

<https://xrayabsorption.org/>

The mission of the IXAS is to promote the research activities of XAS and related phenomena as a multi-nation non-profit organization and to coordinate community activities that benefit the community of people using XAS. The IXAS establishes committees, fosters education, and shares relevant information about analytical method

IXASの使命は、**多国間非営利組織**としてXASおよび関連現象の研究活動を推進し、**XASを利用する人々のコミュニティに利益をもたらす活動を調整**することです。IXASは委員会を設置し、教育を推進し、分析手法に関する関連情報の共有を行っています。

IXAS: The International X-ray Absorption Society

IXAS ▾ Conferences ▾ Resources ▾ Activities ▾ Data & Software ▾ People ▾

The International X-ray Absorption Society

The International X-ray Absorption Society (IXAS) is an international scientific organization representing all those working with X-ray Absorption Spectroscopy, and especially the detailed structure associated with inner shell excitation by X-rays and electrons. XAS includes XANES (X-ray Absorption Near-Edge Spectroscopy) and EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine-Structure) but also includes related methods in which an X-ray or electron has enough energy to remove a core-level electron from an atom. All of these methods share a physical basis and many methods for measuring and interpreting the data.

- 国際的にも検討が進行中
 - ワーキンググループの活動**
 - ✓ メタデータの統一
 - ✓ XAFSデータフォーマットの統一

IXAS Data Format Working Group

先日のQ2XAFS2024のMattの講演から

The XAS community wants to be able to share XAS data and results with each other

Many journals expect or require published data to be available as supplemental material in a downloadable, machine-readable format.

XASコミュニティは、XASデータや結果を**コミュニティ内およびより広範な科学コミュニティと共有**できることを望んでいます。

多くの学術誌は、**ダウンロード可能な機械可読形式**の補足資料として**公開されたデータ**を利用できることを**期待または要求**しています。

Progress Report: Data Format Working Group

Matthew Newville

Center for Advanced Radiation Sources,
The University of Chicago

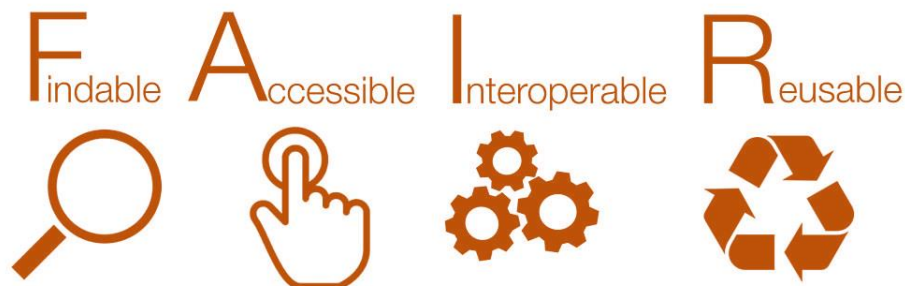
Q2XAFS 2024: 2024-July-26

Active Working Group: Wout De Nolf, Marius Retegan, Mauro Rovezzi, Abhijeet Guar, Hitoshi Abe, Shelly Kelly, Gerry Seidler, Edmund Welter.

Thanks to: Bruce Ravel, Armando Sole, James Hester, Pieter Glatzel, Benjamin Watts, many others.

The slides, example data, more info:

<https://tinyurl.com/nxxas2024>



FAIR原則とデータ駆動

<https://www.go-fair.org/fair-principles/>

歴史

FAIR原則

2011 Future of Research Communication (FoRC) にて、**FORCE11** (The Future of Research Communications and e-Scholarship) 発足

2014 「**人や機械が大量データに対して、発見やアクセス、相互運用、再利用を適切な引用と共に簡便に実施できる**」→「DATA FAIRPORTフレームワーク」

データ駆動

2009 実験・理論・計算に続く**データ中心の科学「第四の科学」**の提案 Jim Gray

2011 **Materials Genome Initiative, MGI** 開始 Barack Obama

現在WGで示されている方針

Main Recommendations:

- use XDI for a single XAS spectrum: a plaintext file with clear column labels and organized metadata
- NeXuS (using HDF5) is the preferred choice for multi-spectral data files.
- For communicating XAS data, the main data to present is “edge-step normalized” $\mu(E)$.
- Required metadata are:
 1. Symbol of absorbing element.
 2. Absorption edge of absorbing element (“K”, “L3”, etc).

主な推奨事項:

- **シングルスペクトルにはXDI**を使用: 列ラベルが明確で、メタデータが整理されたプレーンテキストファイル
- **マルチスペクトルデータファイルにはNeXuS(HDF5)**が最適な選択肢
- XASデータのやり取りで示すべき主なデータは「エッジステップを正規化した」 $\mu(E)$
- **必須メタデータ**
 1. 吸収元素の記号
 2. 吸収元素の吸収端(「K」、「L3」など)

XDI (XAS Data Interchange) 形式

書式

Family.Field: Value

大分類 (Family) と小分類 (Field) の組み合わせで、項目名に階層構造

必須項目;

- Element.symbol: 吸収元素
- Element.edge: 吸収端
- Mono.d_spacing: モノクロメータ結晶の面間隔

メタデータ項目の詳細

<https://github.com/XraySpectroscopy/XAS-Data-Interchange/blob/master/specification/dictionary.md>

```

1 # XDI/1.0 Demeter/0.9.26CR LF
2 # Beamline.name: BM08-LISACR LF
3 # Column.1: energy eVCR LF
4 # Column.2: mutransCR LF
5 # Element.edge: KCR LF
6 # Element.symbol: CuCR LF
7 # Facility.name: ESRFCR LF
8 # Facility.xray_source: Bending magnetCR LF
9 # Mono.d_spacing: 3.134692CR LF
10 # Mono.name: Si(111)CR LF
11 # Mono.notes: LNT cooledCR LF
12 # Sample.formula: CuCR LF
13 # Sample.name: Cu metal foilCR LF
14 # Scan.start_time: 2023-06-27T17:30:10CR LF
15 # ///CR LF
16 # room temperatureCR LF
17 #-----CR LF
18 # energy mutrans CR LF
19 8780.3263 0.21410661 CR LF
20 8785.1052 0.21311910 CR LF
21 8789.9326 0.21227465 CR LF

```

項番	大分類	定義と小分類数
1	Facility	測定が行われた施設 (4)
2	Beamline	ビームラインの構造と光学系の情報 (4)
3	Mono	分光器の情報 (2)
4	Detector	検出系の詳細という情報 (4)
5	Sample	試料の調合と測定の情報 (6)
6	Scan	測定スキャンに関する情報 (3)
7	Element	吸収元素の情報 (4)
8	Column	データ列とその単位に関する情報 (2)

メタデータの位置づけ(XDIの場合)

スペクトルとして最低限必要な情報とは？

- Element.symbol: The element of the absorbing atom. The periodic table is replete with examples of atoms that have absorption edges with very similar edge energies. For example, the tabulated values of the Cr K edge and the Ba L1 edge are both 5989 eV, while Se K and Tl L3 are both at 12658. Without identification of the species of the absorbing atom and of the absorption edge measured, some data cannot be unambiguously identified.

吸収元素。例えば、Cr K吸収端とBa L1吸収端の表記値はどちらも5989 eVですが、Se KとTl L3はどちらも12658 eVです。吸収元素と測定された吸収端が特定されないと、データは明確に識別できません。

- Element.edge: The absorption edge measured. See above.

吸収端 上記参照

- Mono.d_spacing: The d-spacing of the monochromator. It is required to convert an abscissa represented as monochromator angle or encoder step count into energy. Also a correction to the energy axis of measured data, which may be required in the case of a miscalibration due to inaccuracies in the translation from angular position of the monochromator to energy, would need the d-spacing.

モノクロメーターのd間隔。モノクロメーターの角度をエネルギーに変換する必要があります。測定データのエネルギー軸への補正にもd間隔が必要です

要所: エネルギーが決まり、吸収元素が分かること

日本(放射光学会・日本XAFS研究会)の活動 機械可読なXAFS用のメタデータの設計と公開

2022-2023 放射光学会 データ構造化諮問委員会

- 放射光実験のための
共通メタデータの作成
- 日本XAFS研究会が
承認したXAFS共通メ
タデータ*を公開**
- あいちSR、SAGA-LS
で採択 MDR XAFS
DBで公開

*<https://raw.githubusercontent.com/xafs-db/xafs-schema/main/draft/20230203/xafs-schema.json>



The image shows a code editor with a YAML file defining XAFS metadata. The YAML includes fields like 'instrument', 'arrangement', 'monochromator', 'mirrors', 'crystal_material', 'crystal_plane', 'crystal_d', and 'crystal_d_unit'. To the right, a table lists metadata keys, their options, data types, descriptions, and examples.

Key name	Option	Data type>Description (ja)	Description	Example
#data_info@data_depositor@organization	required	string	データ登録者の組織	organization of data depositor Kipho Synchrotron Light Research Center
#data_info@data_depositor@affiliation	optional	string	データ登録者の所属	affiliation of data depositor Beamline Group
#data_info@data_depositor@name	required	string	データ登録者の名前	name of data depositor Kipho Synchrotron Light Research Center
#data_info@data_depositor@role	optional	string	データ登録者の役割	role of data depositor Beamline staff
#data_info@contact@organization	required	string	データ責任者の組織	organization of data depositor Kipho Synchrotron Light Research Center
#data_info@contact@affiliation	optional	string	データ責任者の所属	affiliation of data depositor Beamline Group
#data_info@contact@name	required	string	データ責任者の氏名(てもよい)	contact name (person or affiliation) Kipho Synchrotron Light Research Center
#data_info@contact@name	optional	string	データ責任者の役割	role of data contact name Beamline staff
#data_info@access@rights	optional	string	アクセス権限	access rights open
#data_info@license	optional	string	ライセンス	license beamline
#data_info@history@time@create_time	required	date	データ登録の作成日時	create time of data depositor 2023.12
#data_info@history@time@update_time	optional	date	データ登録の更新日時	update time of data depositor 2023.12
#data_info@title	required	text	データセットの題名(英語)	title of work (english) NEMYS spectrum of Si 28K
#data_info@title_ja	optional	text	データセットの題名(日本語)	title of work (japanese) NEMYS XAFSデータ

XAFS メタデータ
スキーマ

(> 254 項目)

data_info (27 項目)

facility (12 項目)

files (14 項目)

instrument (45 項目)

measurement (101 項目)

sample (33 項目)

reference (22 項目)

**ユーザー入力
>134項目**

XAFSのメタデータ

共通メタデータ(日)の狙い

形式	必須項目	特徴	備考
XDI(米)*	3	<ul style="list-style-type: none"> 必要最低限の項目 人可読 	NeXusとの互換はこれから 敷居低(作成容易)
NeXus(欧)*	多	<ul style="list-style-type: none"> 緻密な定義(コミュニティによる管理) 機械可読 	深く、本来の目的として理想的 敷居高(作成難)
共通メタデータ(日)**	9	<ul style="list-style-type: none"> 項目多(書きたいときに整理よく残せる) 機械理解可能 	XDIとNeXusの中間 別添YAML形式 難解
光ビームプラットフォーム(日)	16	<ul style="list-style-type: none"> 施設側のデータ管理目的 機械可読 	実験の再現性を重視 XML形式

国際

国内

*IXAS推奨

**日本放射光学会・日本XAFS研究会推奨

データの4W1Hを
カバー

MDR XAFS DBの歴史

個別データが国際舞台に乗るまで

- **JASRI-NIMS共同研究開始**
2018.6-「実験データ利活用を目的とした材料データプラットフォームと実験データリポジトリの融合によるデータ共有基盤の研究開発」
- **XAFS Database Workshop**
第一回 2018.9.5@北大、第二回 2019.3.1@秋葉原、第三回 2019.9.2@京大、第四回 2020.1.9@名大、第五回 2020.2.26@秋葉原、第六回 2020.7.3@online... 第十一回 2022.3.25
- **MDRを用いた XAFSデータベースプロジェクト**
朝倉,木村,廣沢,松本,石井、第 23回 XAFS討論会 (2020).
- **2021.7.21 MDR XAFS DB 公開**
<https://doi.org/10.48505/nims.1447>
- **施設横断データベースの実現**
2022.6.8 立命館大学、北海道大学 2022.7.8 PF
2023.4.11 あいちSR、2023.6.9 SAGA-LS 現在 構築フェーズ12
- **国際横断検索の実現**
2024.9.1 日米欧の国際データベース横断検索ポータルの正式開設
<https://ixdb.jxafs.org> 日本XAFS研究会の公式サービス

MDR XAFS DB

<https://doi.org/10.48505/nims.1447>



六機関*からのXAFSデータを統合→**機関の差を感じさせない横断検索を実現**

スペクトル総数: 2,263

SPring-8: 1,757

立命館大: 75

北海道大: 199

PF: 136

あいちSR: 72

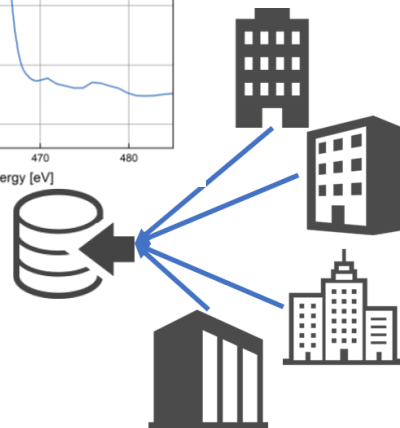
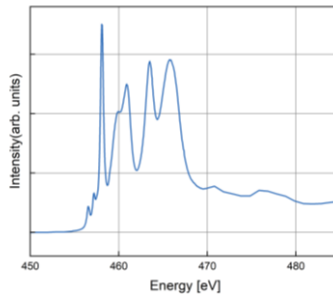
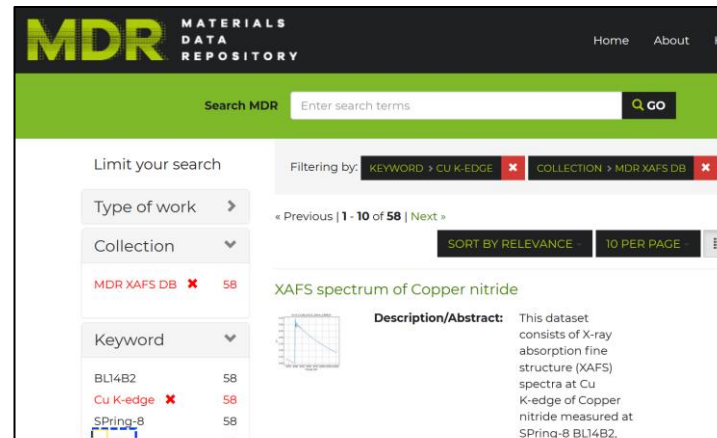
SAGA-LS: 24

*新規二機関データ編纂中

吸収元素数: 56

K吸収端: 50

L吸収端: 24



ホームページ



<https://mdr.nims.go.jp/collections/qz20st57x?locale=en>

<https://doi.org/10.48505/nims.1447>

MDR MATERIALS DATA REPOSITORY

Home About Help Contact Login

Search MDR Enter search terms

Home

MDR XAFS DB

User Collection MDR Open

2168 Items · Created by: ISHII, Masashi · Last Updated: 27/09/2022

This collection of data has been compiled at the National Institute for Materials Science (NIMS) with the cooperation of related organizations for the purpose of wide use of X-ray Absorption Fine Structure (XAFS) spectra.

The data published in this collection are publicly known data, and the data providers have guaranteed that the publication of the data does not violate the Copyright Law, the Personal Information Protection Law, or any other laws and regulations by submitting the "Application for Data Publication in the Materials Data Repository (MDR)".

The data providers as of July 2022 are as follows.

- Japan Synchrotron Radiation Research Institute
- Ritsumeikan SR Center
- Hokkaido University, Institute for Catalysis
- Photon Factory, KEK

The data published in this repository can be used to determine the electronic state and local structure of materials. Please refer to the readme for file formats and other details. For details of analysis methods, please refer to the many references available.

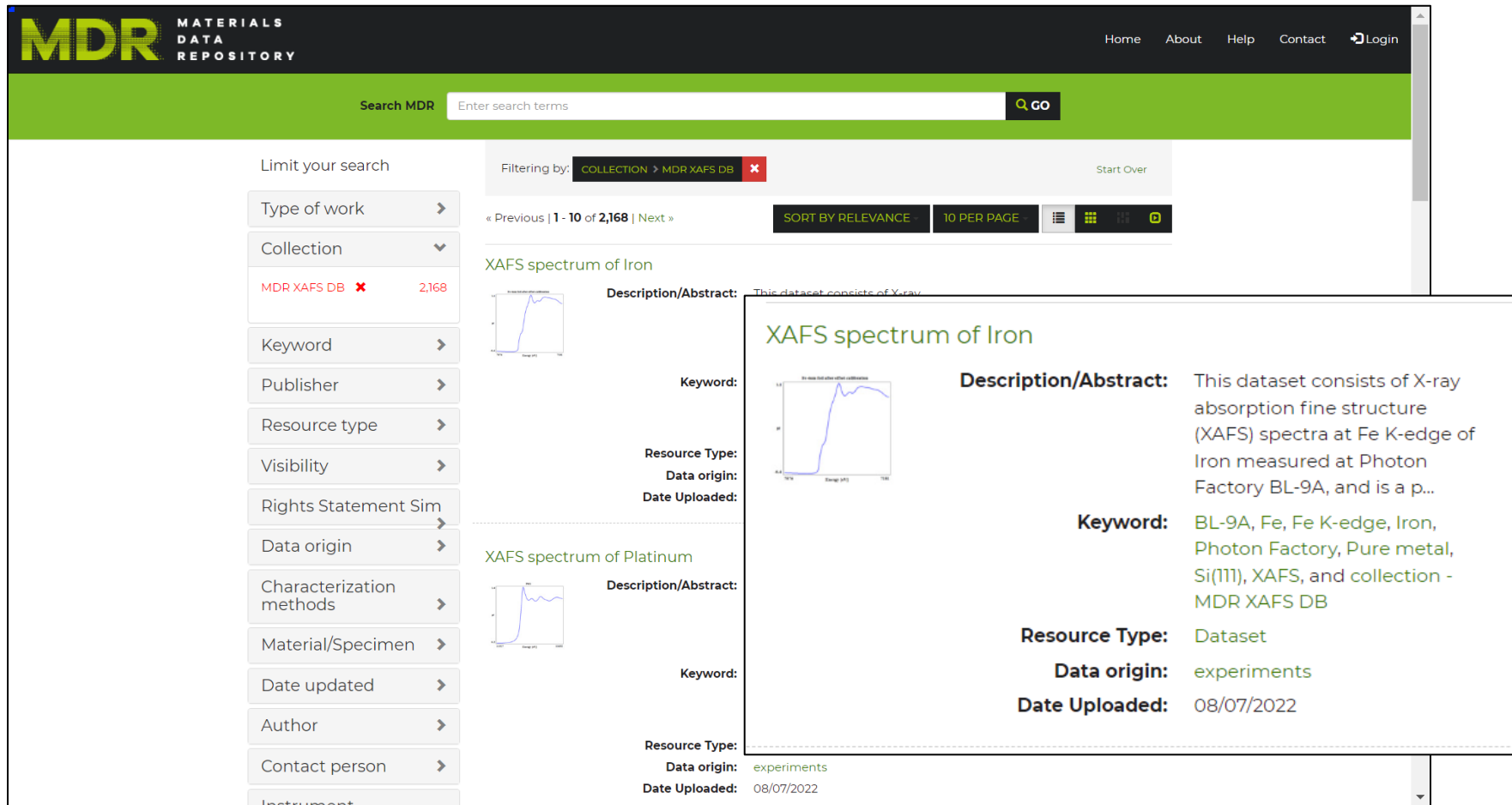
Information on substances and measurements is compiled from metadata provided by relevant organizations into a format suitable for data linkage on the Data Platform (DPP), and used for display and search. For substances, IDs (Q numbers) are assigned, and the substances are classified and managed in a dictionary. For measurements, information from each organization is included as is, so it can be used for

Collection Details

Total items	2264
Size	unknown
Resource type	Dataset
Creator	ISHII, Masashi
Contributor	MATSUDA, Akihiro TANABE, Kosuke NAGAO, Hiroki YOSHIKAWA, Hideki
Keyword	spectroscopy x-ray absorption local structure
License	Creative Commons BY-NC-SA Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International
Publisher	National Institute for Materials Science
Date Created	2021-07-21
Language	English
Identifier	https://doi.org/10.48505/nims.1447

Open access

全XAFSスペクトルリスト 2,263スペクトル (2023.9)



MDR MATERIALS DATA REPOSITORY

Home About Help Contact Login

Search MDR Enter search terms **GO**


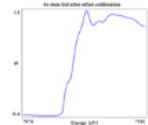
Limit your search

- Type of work >
- Collection >
 - MDR XAFS DB **x** 2,168
- Keyword >
- Publisher >
- Resource type >
- Visibility >
- Rights Statement Sim >
- Data origin >
- Characterization methods >
- Material/Specimen >
- Date updated >
- Author >
- Contact person >
- Instrument >


Filtering by: COLLECTION > MDR XAFS DB **x** Start Over

« Previous | 1 - 10 of 2,168 | Next » SORT BY RELEVANCE 10 PER PAGE

XAFS spectrum of Iron

Description/Abstract: This dataset consists of X-ray

 Keyword: 
 Resource Type: Dataset
 Data origin: experiments
 Date Uploaded: 08/07/2022

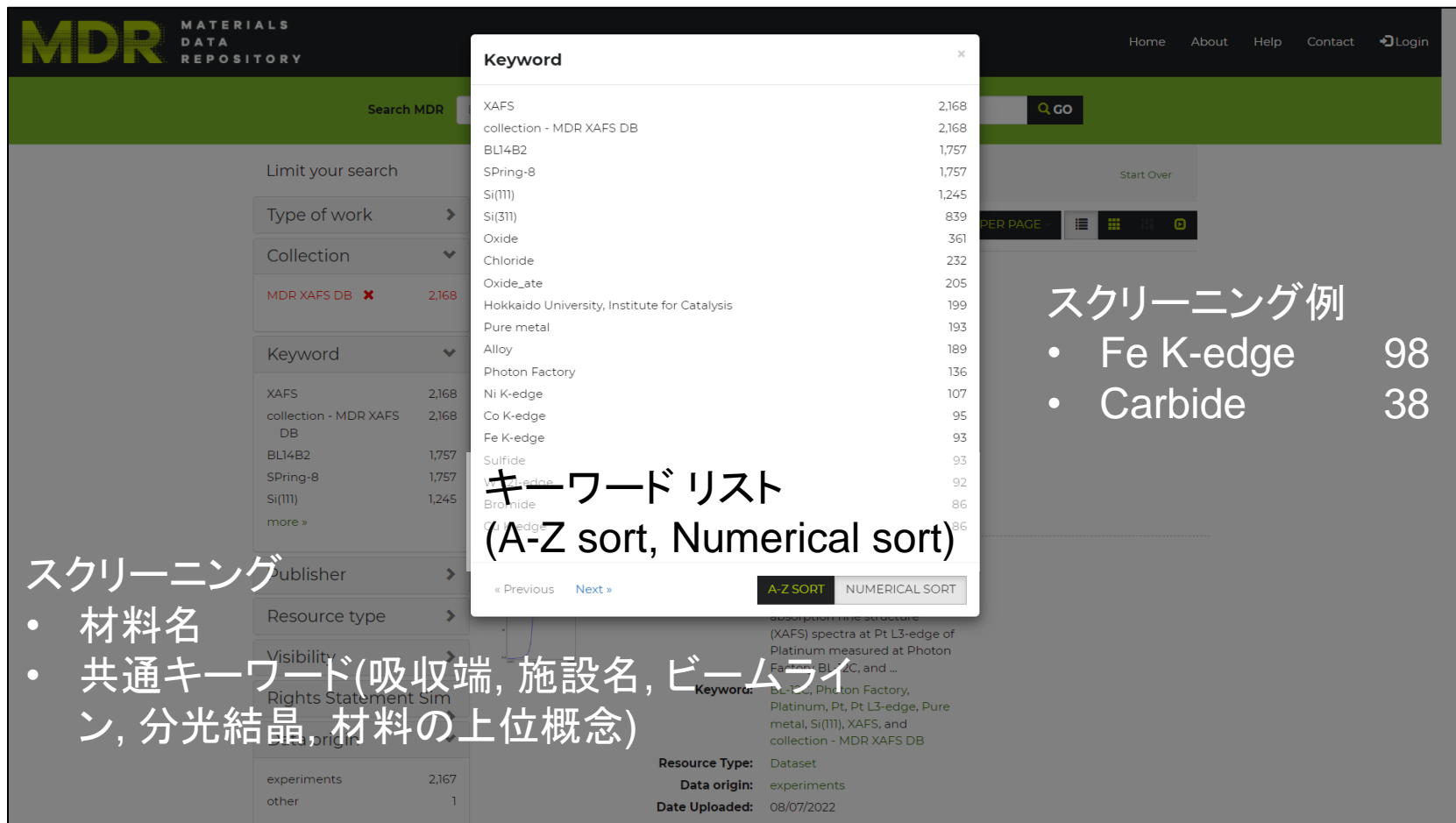
XAFS spectrum of Platinum

Description/Abstract:

 Keyword:
 Resource Type:
 Data origin:
 Date Uploaded:

Description/Abstract: This dataset consists of X-ray absorption fine structure (XAFS) spectra at Fe K-edge of Iron measured at Photon Factory BL-9A, and is a p...
Keyword: BL-9A, Fe, Fe K-edge, Iron, Photon Factory, Pure metal, Si(111), XAFS, and collection - MDR XAFS DB
Resource Type: Dataset
Data origin: experiments
Date Uploaded: 08/07/2022

スクリーニング

目的スペクトルへの迅速アクセス



Keyword

XAFS	2,168
collection - MDR XAFS DB	2,168
BL14B2	1,757
SPring-8	1,757
Si(111)	1,245
Si(311)	839
Oxide	361
Chloride	232
Oxide_ate	205
Hokkaido University, Institute for Catalysis	199
Pure metal	193
Alloy	189
Photon Factory	136
Ni K-edge	107
Co K-edge	95
Fe K-edge	93
Sulfide	93
...edge	92
Bromide	86
...edge	86

Keyword List (A-Z sort, Numerical sort)

Navigation: < Previous Next > **A-Z SORT** NUMERICAL SORT

スクリーニング例

- Fe K-edge 98
- Carbide 38

スクリーニング

- 材料名
- 共通キーワード(吸収端, 施設名, ビームライン, 分光結晶, 材料の上位概念)

Resource Type: Dataset
Data origin: experiments
Date Uploaded: 08/07/2022

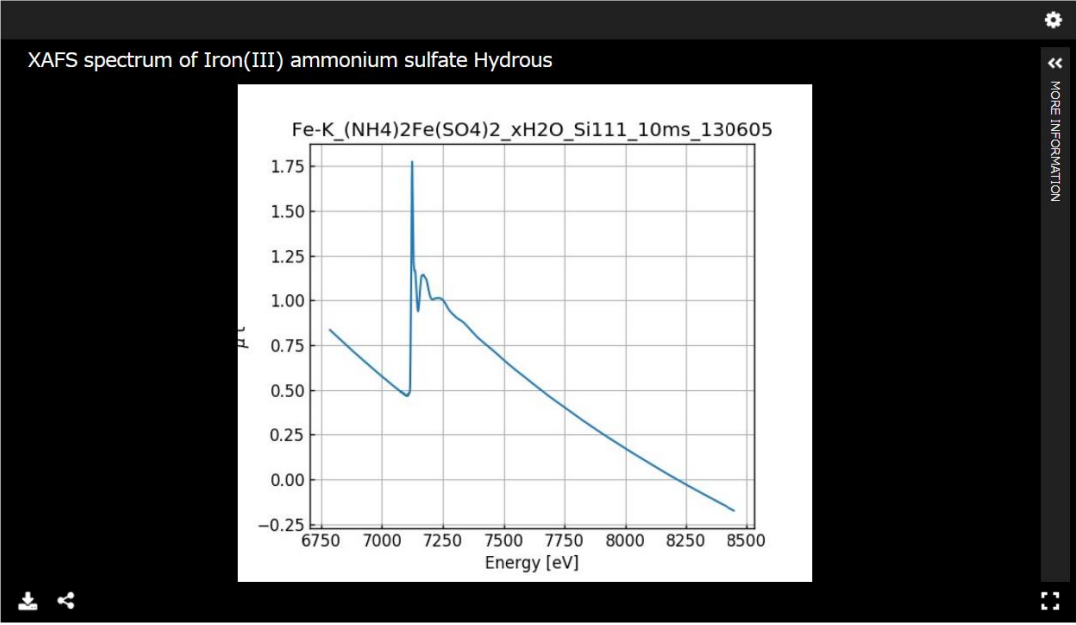
データ閲覧

サムネイル付きのデータ詳細 DOIによるアクセス

Dataset

XAFS spectrum of Iron(III) ammonium sulfate Hydrus

MDR Open Deposited ANALYTICS



DOWNLOAD THIS WORK (ZIP)

CITATIONS EXPORT: -

In Collection: MDR XAFS DB

全スペクトルデータにDOIを付与

どこからでもDOIによってスペクトルに行きつく

全データダウンロード可能 利用ライセンス: CC BY-NC-SA





@data_info@contact_name@role organization
@data_info@data_depositor@affiliation@organizationJASRI

Showing 1 to 10 of 102 entries

Previous 1 2 3 4 5 ... 11 Next

Items

Thumbnail	Title	Size	MDR Open	Select Action
	(NH4)2Fe(SO4)2_xH2O.thumb.png			
	Fe-K_(NH4)2Fe(SO4)2_xH2O_Si111_10ms_130605.dat	230 KB	MDR Open	SELECT AN ACTION Download
	Fe-K_(NH4)2Fe(SO4)2_xH2O_Si111_10ms_130605.ex3	14.4 KB	MDR Open	SELECT AN ACTION
	Fe-K_(NH4)2Fe(SO4)2_xH2O_Si111_10ms_130605.txt	14 KB	MDR Open	SELECT AN ACTION
	metadata.all.json	6.57 KB	MDR Open	SELECT AN ACTION

「表示 - 非営利 - 継承」(出所の明示、非営利目的での利用及び元データと同じ利用条件要素を付与)

放射光の産業が進む中で変更要
商用可の機関はCC BYに変更で調整中

XAFSのメタデータ

共通メタデータ(日)の狙い

形式	必須項目	特徴	備考	
XDI(米)*	3	<ul style="list-style-type: none"> 必要最低限の項目 人可読 	NeXusとの互換はこれから 敷居低(作成容易)	
NeXus(欧)*	多	<ul style="list-style-type: none"> 緻密な定義(コミュニティによる管理) 機械可読 	深く、本来の目的として理想的 敷居高(作成難)	国際
共通メタデータ(日)**	9	<ul style="list-style-type: none"> 項目多(書きたいときに整理よく残せる) 機械理解可能 	XDIとNeXusの中間 別添YAML形式 難解	国内
光ビームプラットフォーム(日)	16	<ul style="list-style-type: none"> 施設側のデータ管理目的 機械可読 	実験の再現性を重視 XML形式	

*IXAS推奨

**日本放射光学会・日本XAFS研究会推奨

可読だけではなく、機械が理解し、処理できること

なぜ機関を越えて横断検索出来ているか？

使用語彙の辞書化



化合物名の統一

e.g. “Zinc oxide”: 下記語彙の名寄せ表現

- *Zinc white*
- *philosopher's wool*
- *flowers of zinc*
- *Chinese white*
- *calamine*
- *ZnO*
- 1314-13-2


NIMS XAFS DB Project Materials Dictionary > Chemicals > Inorganic materials > Oxide > Zinc oxide

Q1800: Zinc oxide

Vocabulary ID <http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q1800>

Language	Label	Description	Alias
English	Zinc oxide	BENTEN-registered chemicals, ZnO	ZnO, Zinc white, Zinc oxide (in O), Zinc oxide, philosopher's wool, flowers of zinc, white, calamine, 1314-13-2
Japanese	酸化亜鉛	BENTEN登録済み化学物質、ZnO	ZnO

Open access



Semantic Relatives

▼ Parents

- ▶ Q735: Oxide

<https://matvoc.nims.go.jp/explore/en/results/Q713>

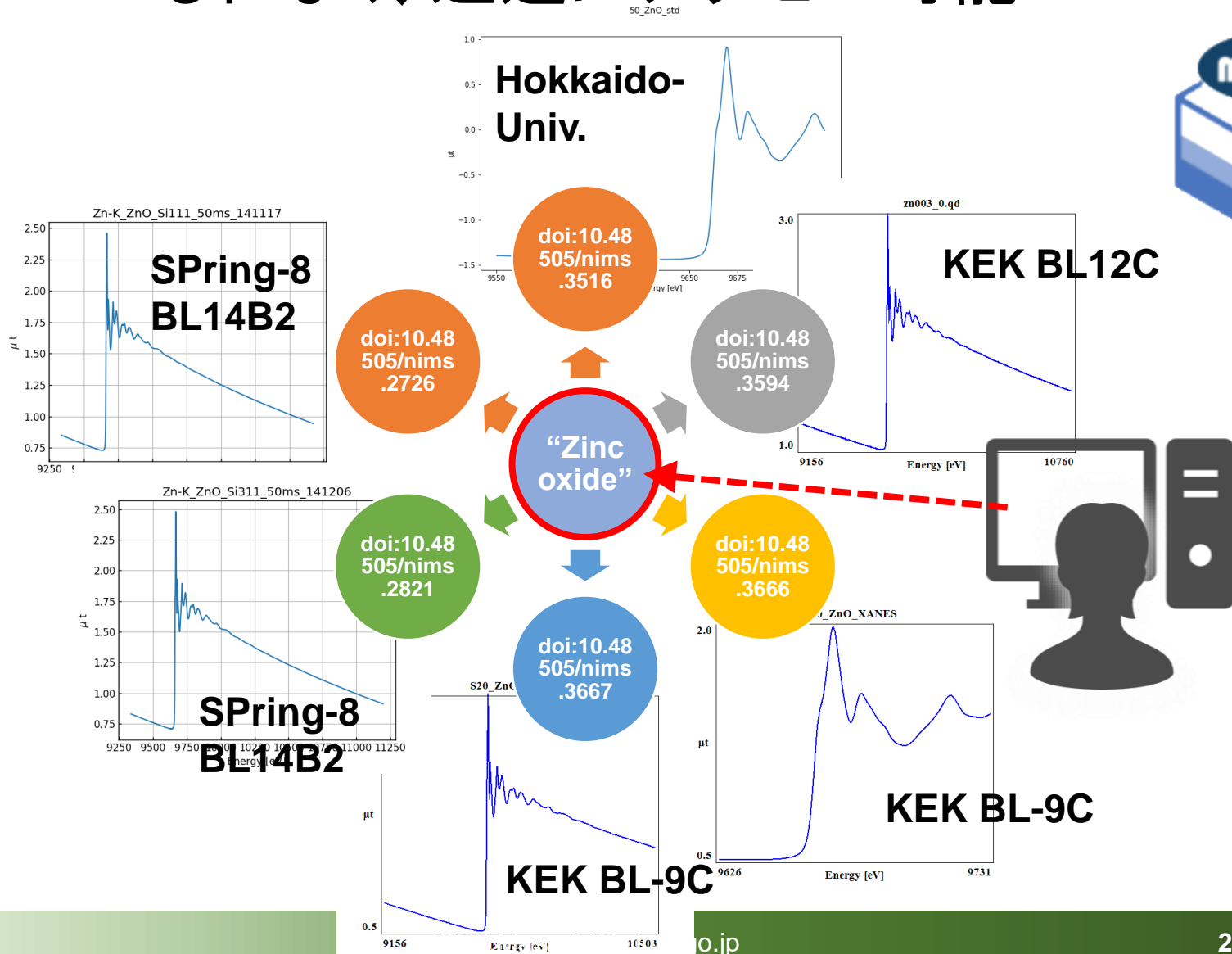
ID (URI) + 代表名
(wd:Q1800, Zinc oxide)

検索インデックス化

機械理解可能 (Machine-understandable)

- keyの管理→再現性・信頼性(学究的)
- Valueの正規化→機械が理解・処理

6機関の該当スペクトルにもれなく、迅速にアクセス可能



海外のDBとの辞書共有 国際横断検索

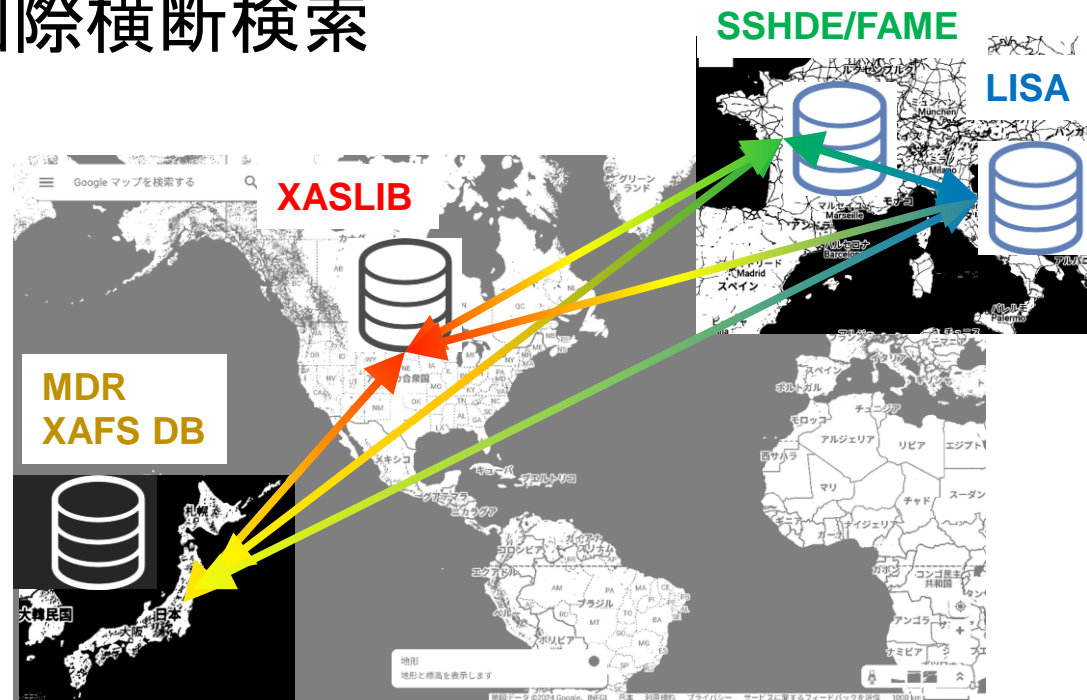
XAFS材料辞書 (Valueの管理) の拡張→

日仏米伊DB横断検索

- 国内でできた横断検索を国際的に展開
- MDRの検索機能強化
- 機械可読な知識共有

メタデータ・データベースの統合はかなり困難

- **世界中のスペクトルをFindableにする**
- **各国の考えを尊重する**



対象データベース

日本: MDR XAFS DB	2,263 spectra
US: XASLIB	277 spectra
EU: SSHADE/FAME	516 spectra
LISA	48 spectra

International XAFS DB Portal, IXDB

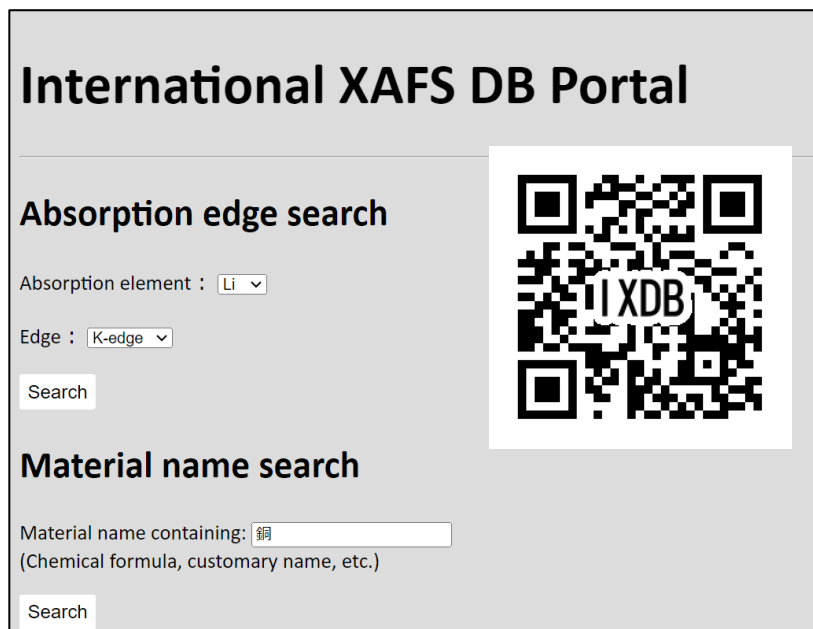
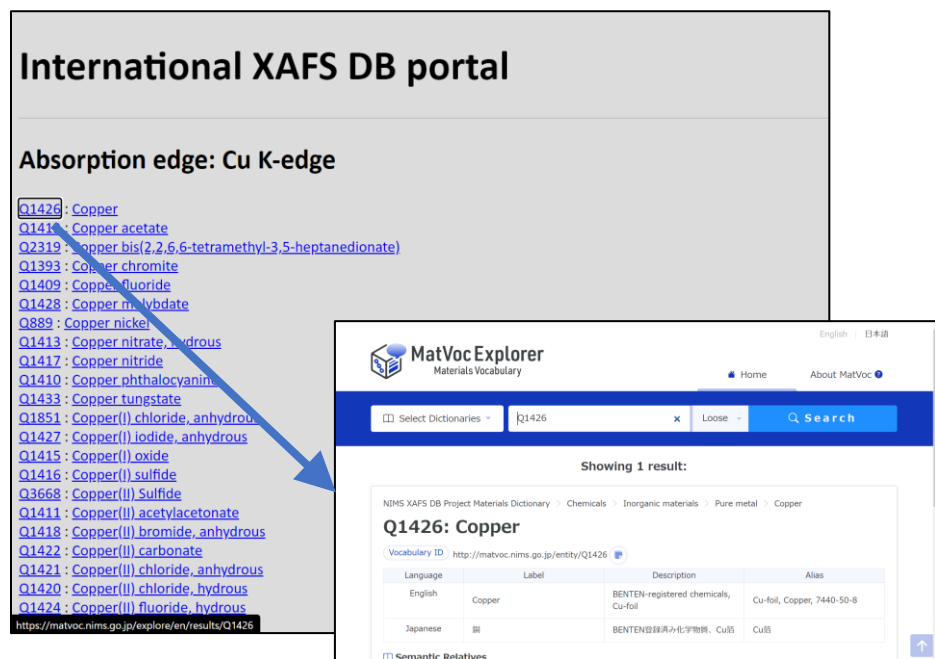
国際横断検索の実際

① トップ画面

例 “銅” で材料名検索

② 「銅」を含む材料名一覧を表示 (材料名≠試料名)

欧米のデータベースを日本語で検索！

Absorption edge: Cu K-edge

- Q1426: Copper
- Q1416: Copper acetate
- Q2319: Copper bis(2,2,6,6-tetramethyl-3,5-heptanedionate)
- Q1393: Copper chromite
- Q1409: Copper fluoride
- Q1428: Copper hydroxide
- Q889: Copper nickel
- Q1413: Copper nitrate, anhydrous
- Q1417: Copper nitride
- Q1410: Copper phthalocyanine
- Q1433: Copper tungstate
- Q1851: Copper(I) chloride, anhydrous
- Q1427: Copper(I) iodide, anhydrous
- Q1415: Copper(I) oxide
- Q1416: Copper(I) sulfide
- Q3668: Copper(II) Sulfide
- Q1411: Copper(II) acetylacetonate
- Q1418: Copper(II) bromide, anhydrous
- Q1422: Copper(II) carbonate
- Q1421: Copper(II) chloride, anhydrous
- Q1420: Copper(II) chloride, hydrous
- Q1424: Copper(II) fluoride, hydrous

Showing 1 result:

Language	Label	Description	Alias
English	Copper	BENTEN-registered chemicals, Cu-foil	Cu-foil, Copper, 7440-50-8
Japanese	銅	BENTEN登録済み化学物質, Cu箔	Cu箔

<https://ixdb.jxafs.org/>

International XAFS DB Portal , IXDB

国際横断検索の実際(つづき)

③ “Q1426 : Copper”を選択
スペクトルへのリンク一覧を表示

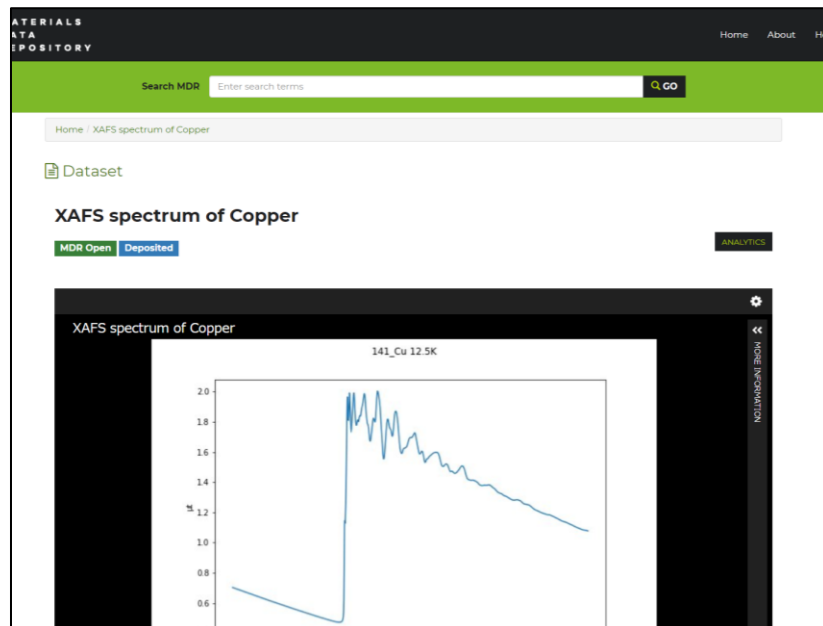
④6機関についてはMDR XAFS
DBへリンク(別タブで開く)

International XAFS DB portal

Links for Copper

- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/w3763b36m> (Aichi Synchrotron Radiation)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/hm50tv733> (Hokkaido University)
- <https://xaslib.xrayabsorption.org/spectrum/275/> (IXAS)
- <https://xaslib.xrayabsorption.org/spectrum/89/> (IXAS)
- <https://xaslib.xrayabsorption.org/spectrum/91/> (IXAS)
- <https://xaslib.xrayabsorption.org/spectrum/92/> (IXAS)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/6t053k50s> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/6t053k512> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/70795b65z> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/pt06e579t> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/gm80hz547> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/kk91fp694> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/th83m2688> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/vh53x0039> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/zk51vm676> (KEK)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/2227ms449> (SPring-8)
- <https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/2z10ws744> (SPring-8)
- https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_OP_20180117_002 (SSHADE/FAME)
- https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_OP_20230216_001 (SSHADE/FAME)
- https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_OP_20230216_001C (SSHADE/FAME)

Related HAXPES

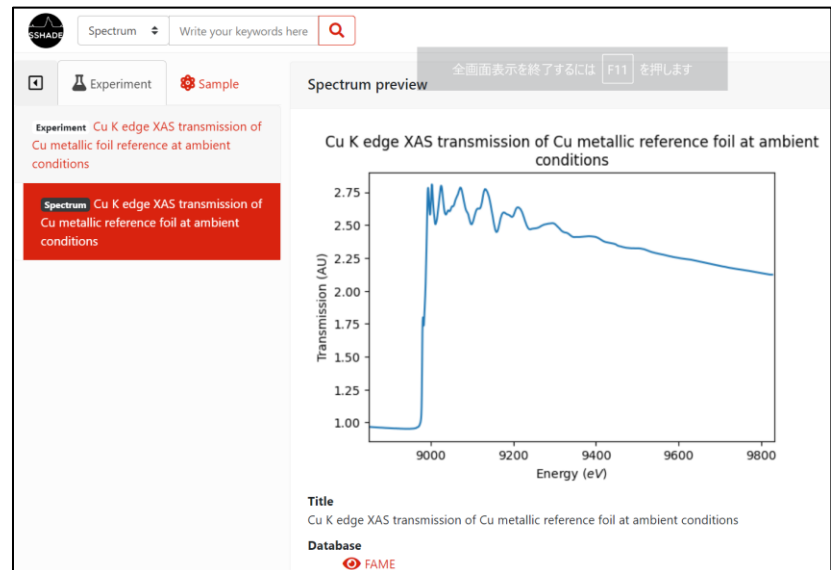
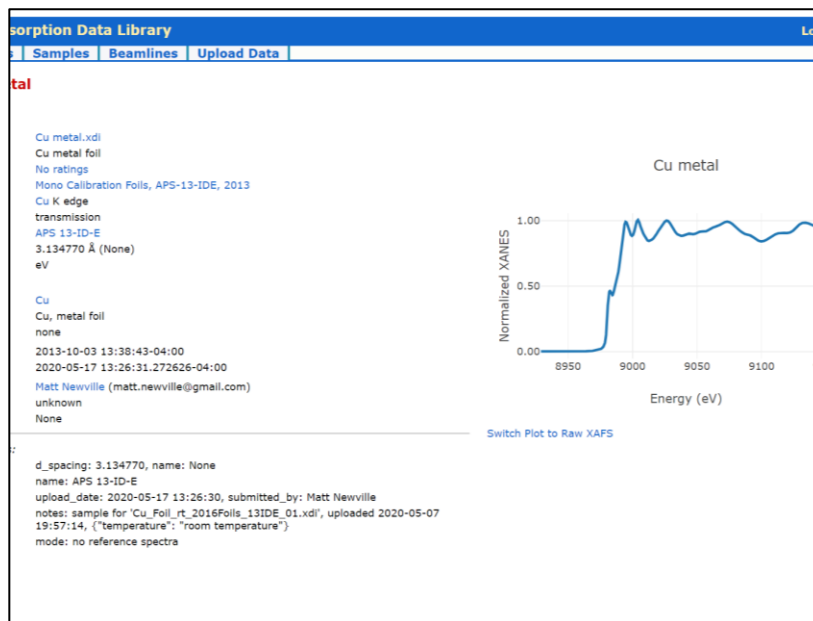


International XAFS DB Portal , IXDB

国際横断検索の実際(つづき)

⑤ XASLIBについてはアメリカ
ヘリンク(別タブで開く)

⑥ SSHADE/FAMEについては、
フランスヘリンク(別タブで開く)



⑦ LISA: XDIファイルの直接ダウンロード

IXDBまとめ

日本XAFS研究会公式サイトで公開

IXDB

- ✓ 計3,104スペクトル、62元素 116吸収端(LiからUまで)
- ✓ 吸収端と物質名(慣用名、化学式)で4か国のデータベースを横断検索
- ✓ 日本語で海外のデータベースの検索可能

各DBの特徴

- MDR XAFS DB(2,263) <https://doi.org/10.48505/nims.1447>
日本の六機関がデータを持ち寄った統合データベース
標準試料中心
- SSHADE/FAME DB(516)
<https://www.sshade.eu/doi/10.26302/SSHADE/FAME>
研究試料が多い(吸着元素、添加物、隕石, 生体...)
- XASLIB(277) <https://xaslib.xrayabsorption.org/elem/>
鉱物を含む
XDIベース
- LISA (48) <https://lisa.iom.cnr.it/xasdb/>
標準試料中心
XDIを直接ダウンロード

もっと見てもらえるように もっと使えるように

圧倒的ビジビリティ

MDRを訪れた人の2/3は
MDR XAFS DBを見ている
(Google Analytics 2024上
期)

外部サイトでも検索可能

CiNii

NII学術情報ナビゲータ
[サイニイ]学術情報検索
サービス

<https://cir.nii.ac.jp/articles>

DataCite

国際DOI登録機関による
検索サービス

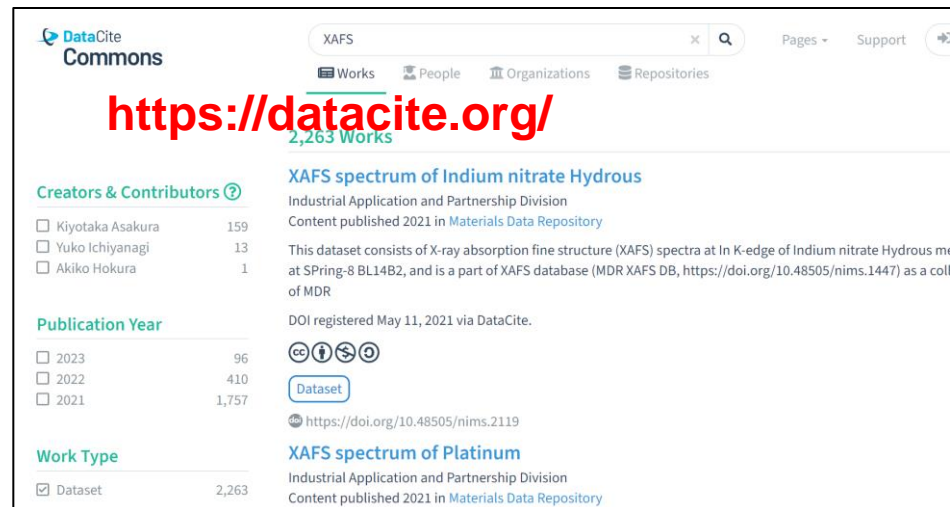
<https://datacite.org/>

機械での操作

APIの利用(全データの
一括ダウンロードも可能)



The screenshot shows the CiNii search interface. The search bar contains 'XAFS spectrum of Copper'. Below the search bar, there are filters for 'すべて' (212), '研究データ' (208), '論文' (3), '本' (0), '博士論文' (0), and 'プロジェクト' (1). The search results are displayed in a table with columns for 'データ種別', '検索結果', and '本文・本体へのリンク'. The first result is 'XAFS spectrum of Copper(I) chloride, anhydrous' with a DOI and Web Site link.



The screenshot shows the DataCite Commons search interface. The search bar contains 'XAFS'. Below the search bar, there are filters for 'Works' (2,263), 'People', 'Organizations', and 'Repositories'. The search results are displayed in a table with columns for 'Creators & Contributors', 'Publication Year', and 'Work Type'. The first result is 'XAFS spectrum of Indium nitrate Hydrous' with a DOI and Web Site link.

機械処理

APIによる機械的なデータアクセス

アプリ開発が容易

GUI→APIへのシームレスな繋がり

- MDRによるXAFSデータスクリーニング



- URLのコピー



- APIクエリパラメータとして利用

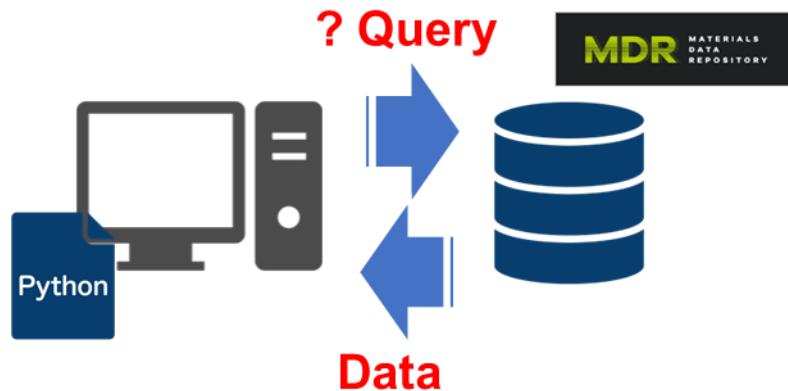
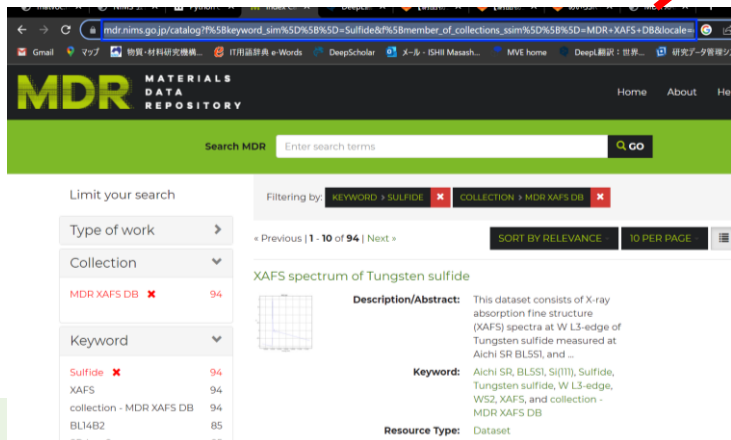
APIマニュアル

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

サンプルプログラムあります

```

1 import sys
2 import requests
3 import urllib
4
5
6 def update_query(url, key, org_val, new_val):
7     pr = urllib.parse.urlparse(url)
8     d = urllib.parse.parse_qs(pr.query)
9     l = d.get(key)
10    if l:
11        d[key] = [new_val if v == org_val else v for v in l]
12    else:
13        d[key] = new_val
14    return urllib.parse.urlunparse(pr._replace(query=urllib.parse.urlencode(d, doseq=True)))
15
16 if len(sys.argv) != 2 or not sys.argv[1]:
17    print("Usage: python "+sys.argv[0]+" 'https://mdr.nims.go.jp/catalog?...'"
18    sys.exit()
19 url = sys.argv[1]
20
21 if "catalog?" in url:
22    url = url.replace("catalog?", "api")
23    response = requests.get(url)
24    response = json.loads(response.text)
25    current_page = response["pages"]["current_page"]
26    last_page = response["pages"]["last_page?"]
27    id_list = [ sub['id'] for sub in response["docs"] ]
28
29 while not last_page:
30    next_page = int(current_page) + 1
31    url = update_query(url, 'page', current_page, next_page)
32    response = requests.get(url).text
33    id_sublist = [ sub['id'] for sub in response["docs"] ]
34    id_list = id_list + id_sublist
    
```



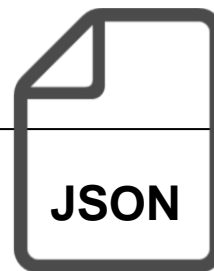
APIプログラム (Python) の書き方① メタデータ取得

Cu-K edgeの
XAFSデータ一覧取
得するプログラム
(たった数行)



```
import requests
import json
import pprint

url =
'https://mdr.nims.go.jp/catalog.json?f%5Bkeyword_sim%5D%5B%5D
=Cu+K-
edge&f%5Bmember_of_collections_ssim%5D%5B%5D=MDR+XAFS
+DB&locale=en&per_page=100'
res = requests.get(url)
pprint.pprint(res.json())
```



ID

①JSONからID取得

```
{
  "response": {
    "docs": [
      {
        "id": "qn59q665g",
        "keyword_tesim": [
          "Copper nitride"
        ],
        "specimen_set_tesim": [
          "Copper nitride"
        ],
        "resource_type_tesim": [
          "data origin tesim": [
            "complex person contact person tesim": [
              "date_uploaded_dtsi": "2021-07-24T17:02:43Z"
            ]
          ]
        ]
      }
    ]
  }
}
```

jsonメタデータ
取得

DL

ID: qn59q665g
ID: f1881p631
ID: z316q485v
ID: b2773z62g
ID: 3x816q387

ID: f4752k42h
ID: tt44pq66b
ID: gf06g523z
ID: 9k41zh11g
ID: 7w62fc195

②クエリにIDを挿入

https://mdr.nims.go.jp/concern/datasets/{work_id}.json?locale=en

APIユーザーズマニュアル:

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

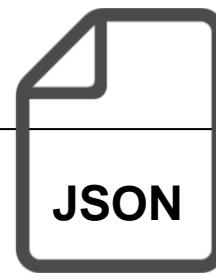
APIプログラム (Python) の書き方② データのDL

Cu-K edgeの
XAFSデータ一覧取
得するプログラム
(たった数行)



```
import requests
import json
import pprint

url =
'https://mdr.nims.go.jp/catalog.json?f%5Bkeyword_sim%5D%5B%5D
=Cu+K-
edge&f%5Bmember_of_collections_ssim%5D%5B%5D=MDR+XAFS
+DB&locale=en&per_page=100'
res = requests.get(url)
pprint.pprint(res.json())
```



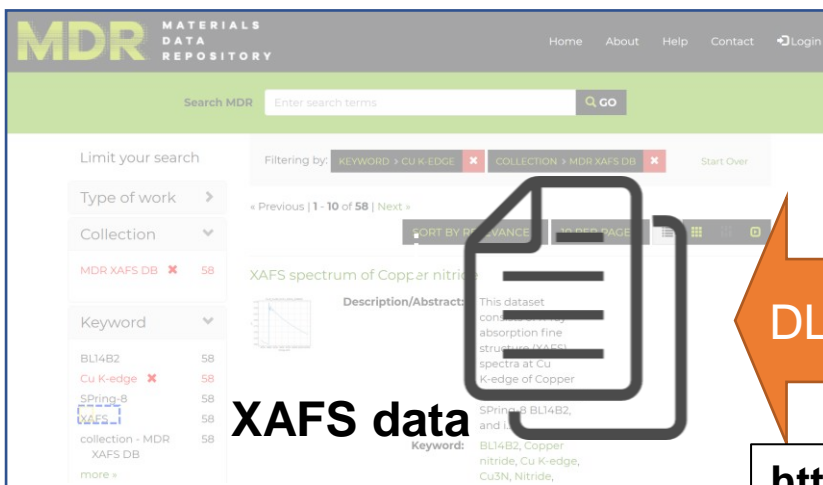
ID

①JSONからID取得

ID: qn59q665g
ID: f1881p631
ID: z316q485v
ID: b2773z62g
ID: 3x816q387
ID: 5425kd55b

ID: **f4752k42h**
ID: tt44pq66b
ID: gf06g523z
ID: 9k41zh11g
ID: 7w62fc195
ID: m900nw92m

②クエリにIDを挿入



DL

https://mdr.nims.go.jp/download_all/{work_id}.zip

あいちSRでのシステム化例

APIを活用したアプリ 名大 田渕先生 作

現在位置: start » tabuchi » mdrxafs
 トレース: start · tabuchi · program · mdrxafs

NUSR HX-XAFS Group

Pages of Tabuchi
 sidebar

今日: 1 / 昨日: 4
 総計: 62 (Since 2022.02.01)

- start(5842)
- tabuchi(5181)
- dead-time-correction(4818)
- 講演資料(4306)
- plugins(4190)
- text-tsukada(4164)
- sidebar(3944)
- absc(3572)
- program(3129)
- feffmanager(3081)

mdrXAFS : MDR XAFS データベース利用プログラム

🕒 NIMS のデータベース(MDR)に公開されている XAFSデータにアクセスし、手元のスペクトルと比較するような作業を簡単に行うための仕組みを検討中です。
 2024年7月23日現在でまだ開発中ですが、ご意見やフィードバックを頂く目的で公開することにしました。

1. ダウンロード

上にあるものほど新しいです。「環境込み」と書かれているものは必要な DLL や設定ファイル等を含んでいます。最新版が「exeのみ」の場合は、なるべく新しい「環境込み」もダウンロードして、その中に最新版の exe ファイルを入れて下さい。



1 [📄]環境込み 2024.08.19版 O16.7.2 win64版

tabuchi:mdrxafs

目次

- mdrXAFS : MDR XAFS データベース利用プログラム
- 1. ダウンロード
- 2. とりあえず使ってみる
 - 2.1 まずは起動
 - 2.2 試しに使う
 - 2.3 自分の測定結果と見比べたい
 - 2.4 MDR のスペクトルから良さげなものを物色したい
- 3. 簡単(?)な説明 (2024.07.24版対応)
- 4. インターフェイス言語の指定
- 5. 不具合等

機能

- ・MDR XAFS DBで吸収端 + キーワードで検索
- ・検索結果のスペクトルをその場で表示
- ・手元のデータも同列で表示可能
- ・ホワイトラインをそろえる / 類似スペクトルを並べる

用途

- ・手元のスペクトルは DB のどのスペクトルと似てる？
- ・リファレンスとして特定の物質の参照スペクトルが欲しいがどれを選べばいい？



あなたのXAFSデータを世界中で見ってもらうための データ登録方法(必要なことは二つだけ)

データを公開したくなったら(PFの例)

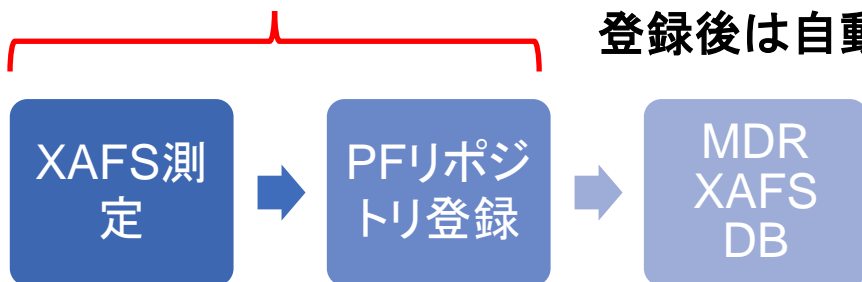
- ① **ビームライン担当に連絡**
- ② **メタデータ作成(サンプル項目)→**

以降は必要に応じて確認のみ

- ① PF→MDR XAFS DBへ
- ② データ編纂
- ③ 辞書登録
- ④ テストページ作成
- ⑤ **確認**
- ⑥ **公開**

ココが必要

PFリポジトリ
登録後は自動



大分類	階層	定義
data_info	@data_info@data_depositor@organization	データ登録者の組織
data_info	@data_info@data_depositor@name	データ登録者の名前
data_info	@data_info@contact_name@organization	データ責任者の組織
data_info	@data_info@contact_name@name	データ責任者(所属名でもよい)
data_info	@data_info@depositor@name@create_time	データ登録の日時
data_info	@data_info@title	データセットの題名(英語)
facility	@facility@name	施設名
facility	@facility@beamline	ビームライン名
instrument	@instrument@monochromator@type	分光器結晶の物質名(結晶の場合)
instrument	@instrument@monochromator@detail@crystal_material	分光器結晶の物質面(結晶の場合)
instrument	@instrument@monochromator@detail@crystal_plane	(結晶の場合)
instrument	分光器結晶の物質面	(結晶の場合)
measurement	@measurement@edges.element	吸収端の元素
measurement	@measurement@edges.edge	吸収端名
sample	@sample@name	サンプル名
sample	sample@sample@chemical_formula	試料化学式(化学式がある場合)

メタデータの大半はビームラインからインポート

残された検討事項

- クオリティの確保
 - ✓ 手を加えると質は高くなる コストはかかる
 - ✓ メタデータ・スペクトルデータとも
- 国際的な動き(XDI、NeXus)との整合
 - ✓ 変換器を使った互換性の確保
 - ✓ Q2XAFS2025のテーマ
- 現在の運用のすべてがボランティアベース
 - ✓ サステナブルな運用
- エネルギー校正の問題
 - ✓ 光子エネルギーの絶対値が定められない
 - ✓ 施設によって異なる校正方法
- 機械学習readyにするためのデータ処理
 - ✓ 機械理解可能 Machine-understandable部分の拡大
- 他の放射光データとの連携
 - ✓ HAXPESとの連携(in IXDB)

おわりに

- 世界の取り組みと日本の取り組み
 - ✓日本:辞書による「Machine-understandable」、ポータルによる「全世界データFindable化」
- データ共有の国際的潮流の中で、(死蔵に終わっている) データを活かすこと
 - ✓皆さんの寄与を明示しつつ、人類の資産として、世界の人に見てもらうこと FAIR原則
- 現在用意してある、見てもらう場所・仕組み
 - ✓MDR, IXDB, CiNii, DataCite, DOI...

みんなで作る、みんなのデータベースであるために、皆さんのご協力・ご参加をお待ちしています！

ご協力いただいた方(一部)

田辺浩介, 松田朝彦, 稲石要, 清水美春 (NIMS)

大淵博宣, 松本崇博, 佐藤正直 (JASRI)

家路豊成, 稲田康宏, 朝倉清高 (立命館大)

山下 翔平, 丹羽 尉博, 阿部仁, 仁谷浩明, 木村正雄 (KEK)

田淵雅夫 (名古屋大. あいちSR)

小林英一 (SAGA-LS)

初井宇記 (理研)

平木 俊幸, 谷藤幹子, 山地一禎(NII)

* 2024年度国立情報学研究所公募型共同研究

* 連携プログラム探索推進事業「かけはし」

* JSPS 科研費 21K18024

* JSPS 科研費 22H05109

リンク集

MDR XAFS DB X線吸収分光データベース

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



IXDB 国際XAFS DBポータル(日本XAFS研究会)

<https://ixdb.jxafs.org/>



MatVoc XAFSプロジェクト材料辞書

<https://matvoc.nims.go.jp/explore/en/results/Q713>

XAFS共通メタデータ

<https://github.com/xafs-db/xafs-schema/tree/main/release/20230203>

参考文献

M. Ishii, K. Tanabe, A. Matsuda, H. Ofuchi, T. Matsumoto, T. Yaji, Y. Inada, H. Nitani, M. Kimura and K. Asakura, STAM: Methods, 3, 2023, 2197518. <https://doi.org/10.1080/27660400.2023.2197518>