

材料データリポジトリの放射光科学への展開： MDR XAFS DB の取り組み

石井真史

物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター

国内の関係機関の協働作業で作られた統合データベース MDR XAFS DB は、独自の材料辞書を以て横断検索を実現し、現在、世界中の XAFS データを Findable にする取り組みに発展している。

【背景】物質・材料研究機構（NIMS）では、材料研究に資する研究データや論文を収録し、公開する材料データリポジトリ（Materials Data Repository, MDR）を運用している[1]。MDR は、大量データのバッチ登録、メタデータ管理、登録データへの DOI（Digital Object Identifier）付与、検索と閲覧、データのダウンロード、API（Application Programming Interface）によるバルクデータ取得などの多くの機能を有し、いわゆる FAIR 原則に則ってデータの利活用ができるシステムである。

X 線吸収分光（X-ray Absorption Fine Structure, XAFS）は、データを共有することでスペクトルの解釈が深まることから、データの再利用が広く求められてきた。この要請は、上記の MDR の特長と相俟って、MDR XAFS DB の構築に繋がった[2]。しかしここで強調すべきは、MDR の機能に加えて、XAFS コミュニティの協働作業（国内 6 参画機関からのデータ提供、共通メタデータの設計）の結果として、国際的にも稀な統合データベースができた点である。

【狙い】MDR XAFS DB は、提供機関に関係なく全てのデータを等しく Findable にすることを狙っている。この機関横断検索は、独自の語彙辞書によって実現される。すなわち、各機関からの提供時には様々な表記になっている試料名を、NIMS XAFS プロジェクト材料辞書[3]により、一意の材料 ID と代表名にまとめ、検索用のインデックスにしている。（「語の統一」）

この狙いは最近国際レベルに拡張され、世界中の XAFS のデータを等しく Findable にするプロジェクトに発展している[4]。この国際 XAFS データベースポータル（International XAFS DB Portal, IXDB）は、上記の「語の統一」に加え、データベースの違いを統合するオントロジー的な「知の統一」により、現在 MDR XAFS DB を含む 4 カ国のデータベースを国際横断検索可能にしている。

【展開】現在、XAFS 以外の材料知識との連携も進んでいる。例えば材料の結晶構造との連携は、XAFS の短距離不規則構造と結晶の長距離規則構造を関連付け、ドメイン外との知識共創をもたらす。実際 IXDB は Crystallography Open Database (COD)[5]と連携する予定である。放射光科学全体の知識統合で科学全体にインパクトをもたらすこと。これが、MDR XAFS DB の深い狙いである。

【謝辞】本研究は DxMT 「データ創出・活用型磁性材料研究拠点」JPMXP1122715503(MEXT)と SIP 「マテリアルユニコーン育成のための材料情報基盤連携と人材創出」(NIMS)の支援を頂きました。

[1] NIMS Materials Data Repository, <https://mdr.nims.go.jp/>

[2] MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>, <https://doi.org/10.1080/27660400.2023.2197518>

[3] NIMS XAFS DB Project Materials Dictionary, <https://matvoc.nims.go.jp/explore/en/results/Q713>

[4] International XAFS DB Portal, <https://ixdb.jxafs.org/>

[5] Crystallography Open Database, <http://www.crystallography.net/cod/index.php>