

実験データ転送システム BENTEN を活用した XAFS 実験データベースの構築

松本 崇博、横田 滋、松下 智裕、大淵 博宣、本間 徹生
(公財)高輝度光科学研究センター (JASRI)

JASRIでは、SPring-8におけるユーザー支援活動の一環として、標準試料のXAFSスペクトルデータを収集し、XAFS実験データベースとして一般公開している[1]。本データベースではSPring-8 BL14B2において測定した28元素、462試料のXAFSスペクトルデータが試料情報や測定条件とともに1079件収録されている(2019年12月現在)。放射光実験データを一般公開することで、ユーザー実験における参照試料としての利用の他、近年進展が著しいマテリアルズ・インフォマティクスにおける活用など、利便性の向上が期待される。

我々は、XAFSに加えて、放射光施設で計測された様々な実験データの利活用を推進するため、所外実験データ転送システムBENTEN(Beamline Experimenta**N**Tal stations ori**E**nted data transfer system)[2]を新規開発し、2019年3月より運用を開始した。BENTENでは、下図に示すようにディレクトリ構造からの実験データ、メタデータ項目の閲覧機能に加え、実験データのサムネイル表示を可能とした。また、様々な実験測定で必要となる多様なメタデータ項目を柔軟に登録することができ、実験データの全文検索及びダウンロードができる。

今後、実験データ利活用をより推進するためには、KEK-PFなど他の放射光施設とも協調していく必要がある。XAFS実験データベースの進め方に関しては、2018年より日本XAFSコミュニティにおいて議論が進んでいる。大きな点としては、標準試料のXAFSデータフォーマットを国内で標準化すること、また、物質・材料研究機構(NIMS)と連携し材料データともリンクさせることで利便性を向上させること、が検討されている。本講演では、BENTENシステム、及びXAFS実験データベースに関するNIMSとの連携状況について報告する。

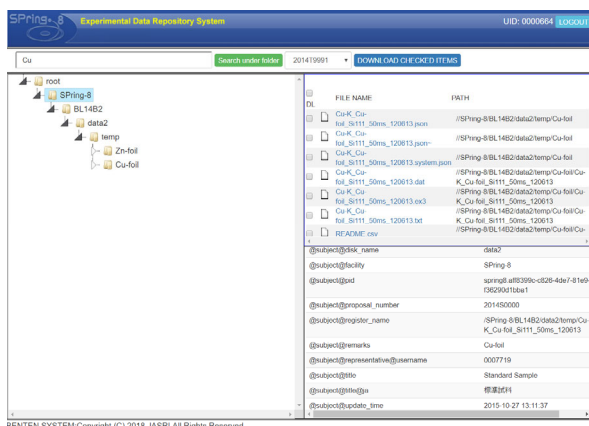


図1 BENTEN を活用した XAFS 標準試料データベース画面

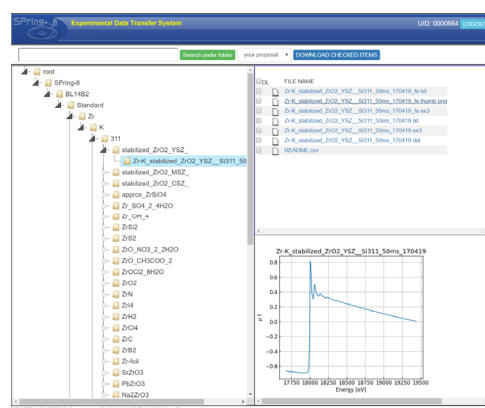


図2 データベース上での XAFS スペクトルのサムネイル表示機能

[1] H. Sakai *et al.*, Proc. of ICALEPCS 2013, p.577-599

URL: <https://sp8dr.spring8.or.jp/bl14b2/>

[2] T. Matsumoto *et al.*, AIP Conf. Proc. 2054, 060076 (2019)

URL: <https://benten.spring8.or.jp/>