

X線吸収分光における ラウンドロビン・データベース を巡る状況

木村 正雄 (KEK)



大学共同利用機関法人 高エネルギー加速器研究機構 (KEK)

物質構造科学研究所 (IMSS)



昔から使われてきたデータベース

特定の目的（情報）に特化

結晶構造データベース：

- ICSD (Inorganic Crystl Structure Database, 22万件)
- CRYSTMET (金属結晶構造, 18万件)
- CSD (Cambridge Structural Database, 100万件)
- PDB (Protein Data Bank, 16万件)

熱力学データベース：

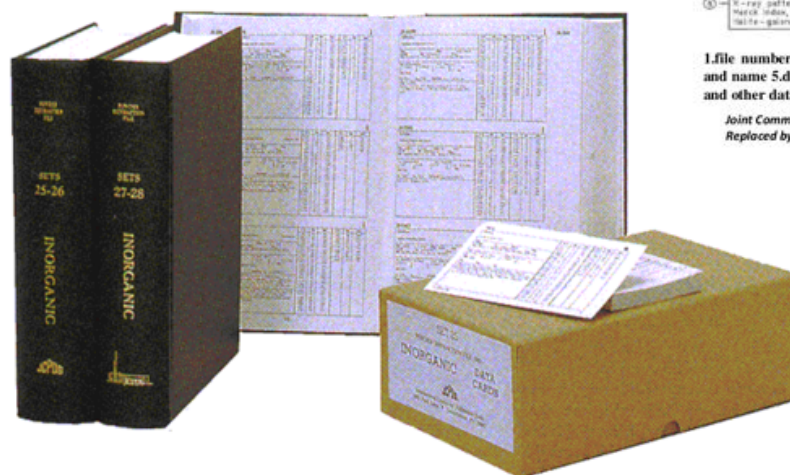
- OpenCalpahd
- FactSage
- NIST
- NIMS

JCPDS CARD

①	②	③	④	⑤
5-625				
2	2.82	5.99	5.83	3.26
ZnS	5.5	7.7	7.7	4.0
Rock salt, $a = 0.3570$ nm	P4/m3m		D _{2d}	
Calc. ref.	S.G. Diffraction		S/G	
Ref. Swenson and Huggs, <i>MS Circular 338</i> , Vol. 2, 43				
19533				
S.G. Calc.	S.G. Index		I(220)	
m 54602 ng	g	2	4	D ₂ 2364
Ref 1986				
m	mcp 1563	m	Cu	Color
Zn	Q	mp	Selen Colloidal	
Ref. 1986				

1.file number 2.three strongest lines 3.lowest-angle line 4.chemical formula and name 5.data on diffraction method used 6.crystallographic data 7.optical and other data 8.data on specimen 9.data on diffraction pattern.

Joint Committee on Powder Diffraction Standards, JCPDS (1969)
Replaced by International Centre for Diffraction Data, ICDD (1977)



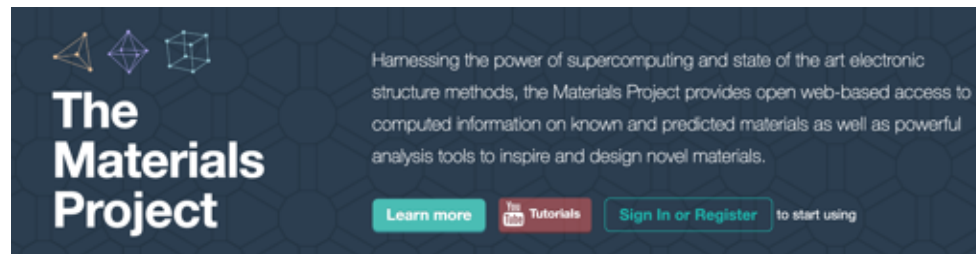
最近のデータベース

統合型→AI, Machine learning

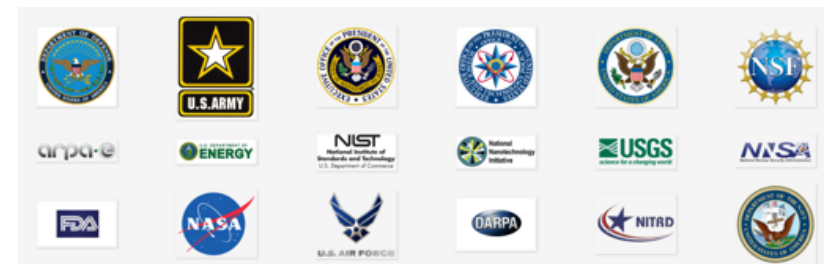
NIMS 物質・材料データベース (MatNavi) <https://mits.nims.go.jp>



The Materials Project <https://materialsproject.org/>



Materials Genome Initiative <https://www.mgi.gov/>



ラウンドロビン実験 @光ビームプラットフォーム

<https://photonbeam.jp>



光ビームプラットフォーム

 高エネルギー加速器研究機構 PHOTON FACTORY	 科学技術交流財団 あいちシンクロトロン光センター
 佐賀県立九州 シンクロトロン光研究センター SAGA Light Source	 兵庫県立大学 ニュースリシ放射光施設
 高輝度光科学研究センター Spring-8	 東京理科大学総合研究機構 赤外自由電子レーザー研究センター
 立命館大学 SRセンター	 大阪大学 レーザー科学研究所

放射光施設と大型レーザー施設がネットワークを形成し、
産学官の皆様による施設のご利用をより一層推進しようとするネットワーク
(平成28年度から2期目の活動を開始)

→詳しくは、渡辺義夫（あいちSR）氏のご講演

ラウンドロビン実験 @光ビームプラットフォーム

背景（問題意識）

1. ユーザーにとっての目安が欲しい

「正しく測定できている？」

「報告例と違うけど、試料のせい？測定法？施設のせい？」

* XAFSがメインでない(特に企業)研究者で重要

* 新たなユーザー拡大のためにも

2. 施設スタッフにとっても目安があると良い

* 自身の測定法の妥当性の確証、高度化の基準、...

* より親切なユーザー対応

「* * 施設で測定したデータなんですけど、...」

3. データベース構築, データの情報科学処理化 への対応

→詳しくは、君島堅一（KEK）、太田俊明（立命館）氏のご講演

XAFSのデータベース

北大・触媒研 XAFS database

https://www.cat.hokudai.ac.jp/catdb/index.php?action=xafs_login_form&opnid=2

北海道大学触媒科学研究所: Institute for Catalysis, Hokkaido University
触媒科学研究データベース

XAFS database

Spring-8 JASRI

<https://support.spring8.or.jp/xafs/standardDB/standardDB.html>



PF XAFS Database <https://pfxafs.kek.jp/xafsdata/list.php>

XAFS database

Registered data list

Registered data number: 84 [Reload](#)

登録日時 Registered date	ビームライン Beamline	試料名 Sample name	吸 At
2018-05-11 15:57:41	BL9C	6um Cu foil	Cu

IXAS Database <http://ixs.iit.edu/database/>



→詳しくは、朝倉清高（北大）氏のご講演

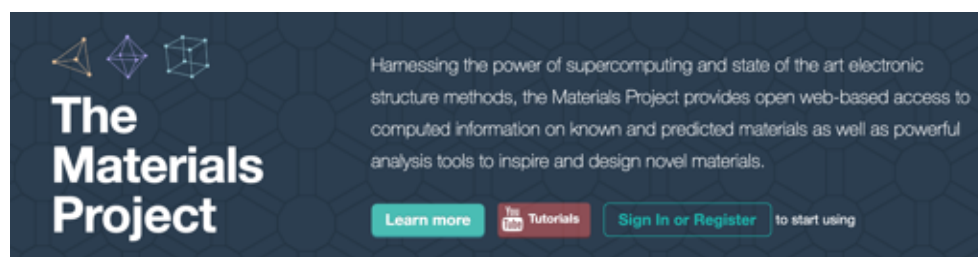
最近のデータベース

統合型→AI, Machine learning

NIMS 物質・材料データベース (MatNavi) <https://mits.nims.go.jp>



The Materials Project <https://materialsproject.org/>



Materials Genome Initiative <https://www.mgi.gov/>



→詳しくは、石井真史（NIMS）、山口浩司（住友電気工業(株)）氏のご講演

プログラム

- | | | |
|-----------------------------|------|-------------|
| 1. 提案理由説明 | 木村正雄 | (KEK) |
| 2. 光ビームプラットフォームでの取り組み概要 | 渡辺義夫 | (あいちSR) |
| 3. 硬XAFSラウンドロビン実験 | 君島堅一 | (KEK) |
| 4. 軟XAFSラウンドロビン実験 | 太田俊明 | (立命館) |
| 5. 硬XAFSデータベース | 朝倉清高 | (北大) |
| 6. 材料データベース | 石井真史 | (NIMS) |
| 7. 産業利用でのラウンドロビン・データベースへの期待 | 山口浩司 | (住友電気工業(株)) |