

第3回SPring-8データセンター構想におけるデータ流通基盤

日時: 2022年4月18日(月) 13:00-16:40

開催形式: オンラインZoom

放射光学会の取り組み

会長 横山 利彦 (分子研)

yokoyama@ims.ac.jp

日本放射光学会 第1回データ構造化諮問委員会

日時 2022年4月5日10時～

場所 zoom

リモート実験等諮問委員会からの答申を受けて設置

委員名簿 30名 ◎：委員長

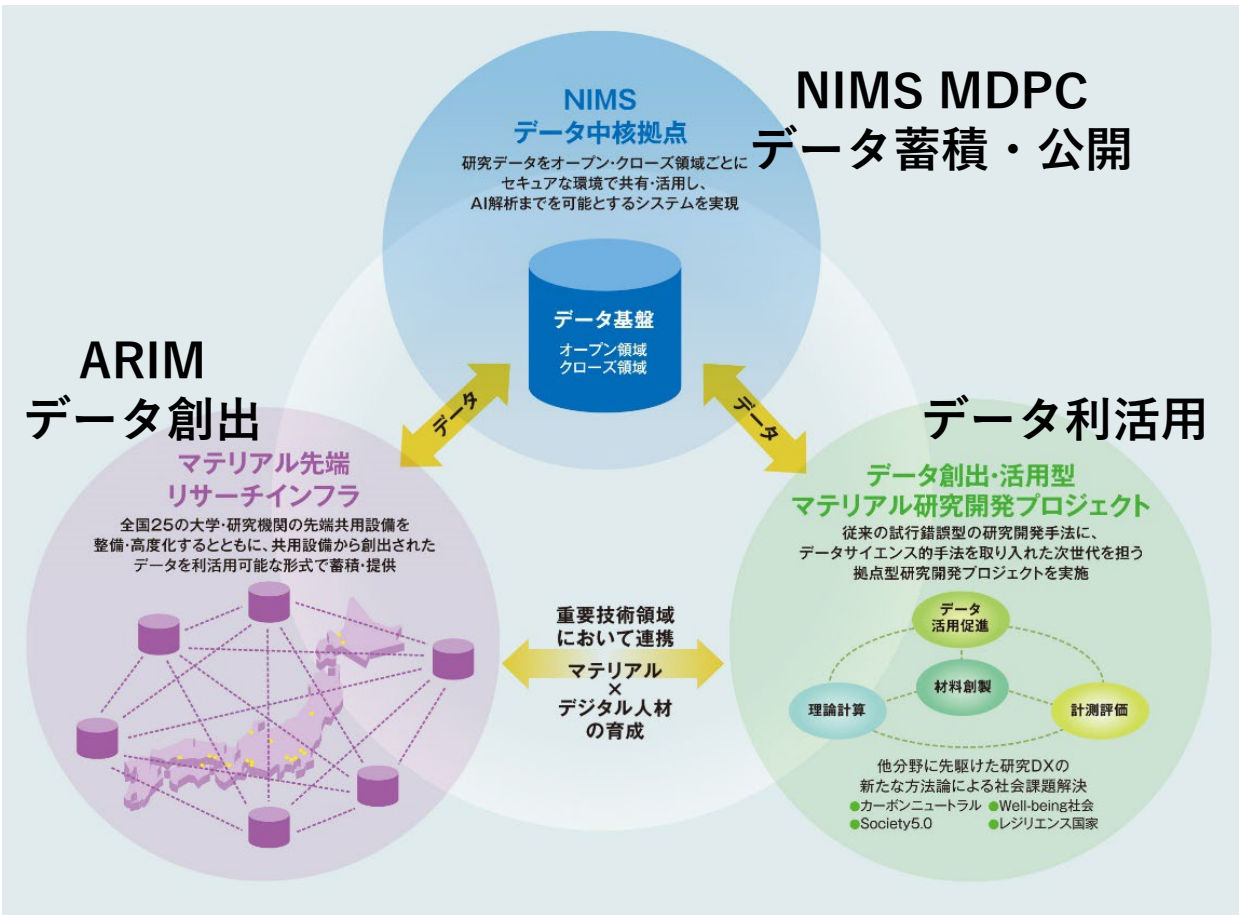
◎朝倉清高	北海道大学触媒科学研究所
高橋幸生	東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター
矢代航	東北大学国際放射光イノベーション・スマート研究センター
若林裕助	東北大学理学研究科
仁谷浩明	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所
山田悠介	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所
木村正雄	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所
五十嵐教之	高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所
石井真史	物質・材料研究機構
西堀英治	筑波大学 数理物質系 物理学域
松井文彦	分子科学研究所極端紫外光研究施設 JSSRR庶務幹事
岡島敏浩	あいちシンクロトロン光センター
田淵雅夫	名古屋大学
稲田康宏	立命館大学生命科学部
栗栖源嗣	大阪大学蛋白質研究所
小野寛太	大阪大学工学研究科

矢橋牧名	理研
初井宇記	理研 データ処理系開発チーム
熊坂崇	JASRI タンパク質結晶解析推進室 JSSRR渉外幹事
為則雄祐	JASRI 分光推進室
登野健介	JASRI 散乱・イメージング推進室
玉作賢治	JASRI 回折・散乱推進室
松本崇博	JASRI
木下豊彦	JASRI
藤森伸一	日本原子力研究開発機構 原子力科学研究部門
松尾光一	広島大学放射光科学研究センター
廣沢一郎	九州シンクロトロン光研究センター
米山明男	九州シンクロトロン光研究センター
東純平	佐賀大学 シンクロトロン光応用研究センター
原野貴幸	日本製鉄/日鉄ケミカル&マテリアル
横山利彦	陪席 分子科学研究所 JSSRR会長

日本放射光学会 データ構造化諮問委員会 意見交換概要

- ・ 2022年4月5日10時～ 第1回会合 委員30名中28名出席＋会長
- ・ 放射光計測データ データベース化
各計測手法毎に構造化データ共通フォーマット策定 各手法毎に分科会
- ・ データ公開に向けたデータ構造化の目的策定
データ公開の意義 データサイエンスを駆使した新規機能材料開発のための資源
データ公開自体が研究者の業績（現状での論文引用のように）
データ公開での利用料金ディスカウント？（文科省マテリアル先端リサーチインフラARIMで採用）
- ・ 各放射光施設でのデータ構造化・公開の考え方取りまとめ（あくまで情報として）
- ・ 本委員会はデータ構造化を目的とする
- ・ 構造生物（タンパク質単結晶X線構造解析）
既に世界標準の構造化データフォーム（cif形式）
データ公開（原子座標・構造因子 公開必須、生データ公開任意）
データ公開がないと論文投稿できない
物質科学で扱われる単結晶X線構造解析データもcif形式であるが、試料名等が記載されていないことも多い

Advanced Research Infrastructure for Materials and Nanotechnology in Japan (ARIM)



- ・ 7つの重要技術領域 ハブ&スポーク 25機関 NIMSがセンターハブ
- ・ 高度なデバイス機能の発現を可能とするマテリアル 東北大、筑波大、豊田工大、香川大
- ・ 量子・電子制御により革新的な機能を発現するマテリアル NIMS、北大、東工大、産総研、QST
- ・ 革新的なエネルギー変換を可能とするマテリアル 東大、広島大、JAEA
- ・ マテリアルの高度循環のための技術 NIMS、分子研、名工大、電通大
- ・ 次世代バイオマテリアル 名大、早稲田大、千歳科技大、JAIST
- ・ 次世代ナノスケールマテリアル 九大、信州大
- ・ マルチマテリアル化技術・次世代高分子マテリアル 京大、阪大、NAIST、山形大

- ・ ナノテク (ナノ計測・ナノ加工・材料合成) をベースとした設備共用・ものづくり支援
- ・ マテリアルデータ創出・蓄積・利活用
- ・ 技術人材育成

(下線: HUB)

ARIM放射光関連支援設備リスト

機関名	装置	中分類	設置場所
分子研	軟X線磁気円二色性	XAFS	UVSOR BL4B
九大	XAFS/SAXS計測ビームライン	XAFS	SAGA-LS BL06
産総研	超伝導蛍光収量XAFS (SC-XAFS)	XAFS	産総研
JAEA	表面化学実験ステーション	その他	SPring-8 BL23SU
JAEA	軟X線磁気円二色性測定	XAFS	SPring-8 BL23SU
JAEA	高輝度放射光XAFSシステム	XAFS	SPring-8 BL22XU
JAEA	応力・イメージング測定	その他	SPring-8 BL22XU
JAEA	カップ型多軸回折計	X線回折	SPring-8 BL22XU
JAEA	エネルギー分散型XAFS	XAFS	SPring-8 BL14B1
QST	放射光メスバウアー分光	その他	SPring-8 BL11XU
QST	共鳴非弾性X線散乱	その他	SPring-8 BL11XU
QST	表面X線回折計	X線回折	SPring-8 BL11XU
QST	高温高圧プレス	X線回折	SPring-8 BL14B1
QST	コヒーレントX線回折イメージング	X線回折	SPring-8 BL22XU
QST	高速2体分布関数計測	X線回折	SPring-8 BL22XU

ARIMとは独立に…

・X線吸収分光(XAFS)

日本XAFS研究会

NIMSマテリアルデータプラットフォーム拠点

SPring-8/JASRI

ほか多くの放射光施設

データ構造化フォーマット策定

標準データ蓄積

・硬光電子分光(HAXPES)

NIMSマテリアルデータプラットフォーム拠点

データ構造化フォーマット策定

標準データ蓄積

NIMSマテリアルデータプラットフォーム

蓄積・公開

NIMSマテリアルデータプラットフォームに蓄積・公開予定

今後の展開・期待（私見）

- ・放射光計測データ 各計測手法毎に構造化データ共通フォーマット策定 粛々と実動
- ・巨大容量先端計測データ(CT等) SPring-8データセンター NII
- ・小容量汎用的手法計測データ(XAFS, X線回折, XPS…)

利用者視点では

各施設のデータはNIMS等どこかにまとまってほしい

放射光に限らず、他の量子ビーム・他の計測手法(TEM, 実験室X線, …)・機能物性データが
マテリアルベースでNIMS等どこかにまとまってほしい

- ・データ公開の文化を形成

共用の文化は、実験室レベルの機器でもこの10年程度で大きな進展があった

データサイエンスを駆使した新規機能材料開発のための資源

データ公開自体が研究者の業績となるように

研究不正（捏造・改竄・盗用）の抑制