

Materials Data Repository (MDR)の 実例から考えるFAIR原則

田辺浩介 TANABE.Kosuke@nims.go.jp

物質・材料研究機構

技術開発・共用部門 材料データプラットフォーム データ基盤ユニット 主幹エンジニア

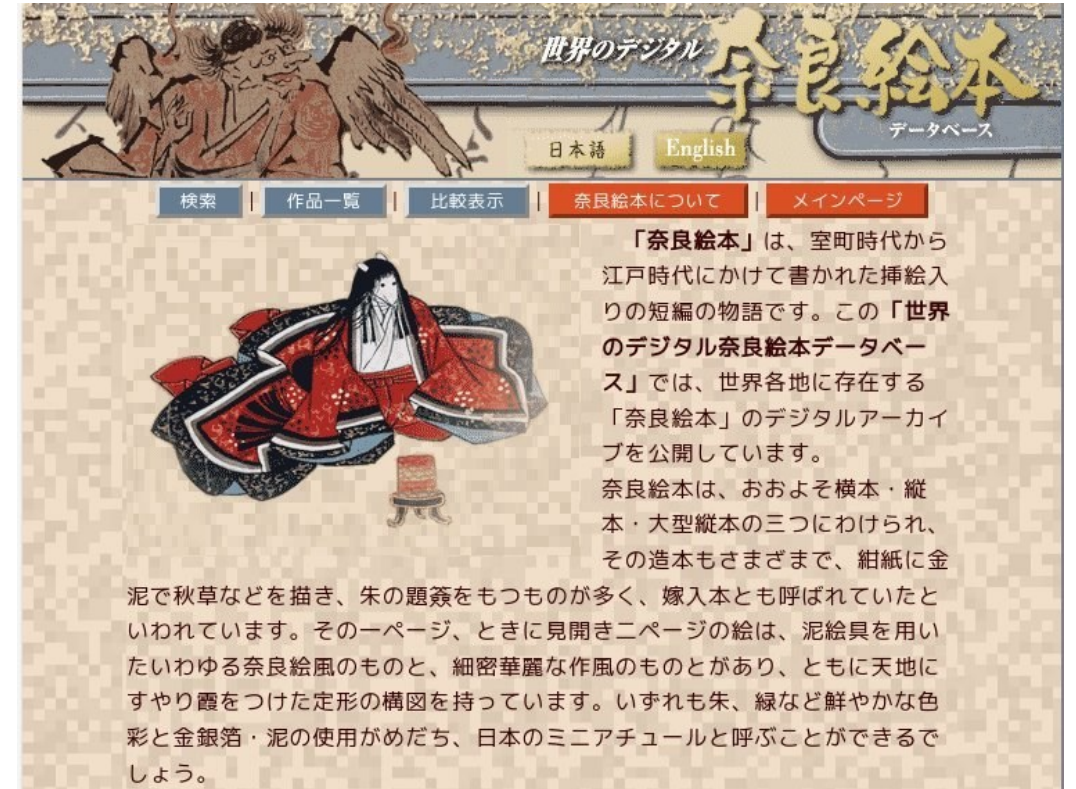
 <https://orcid.org/0000-0002-9986-7223>



2025年11月18日 図書館総合展 JST/CHORUSオンラインフォーラム

「学術コミュニケーションプラットフォームにおけるFAIR原則の実装に向けて」

- 田辺 浩介 (たなべ こうすけ)
- 慶應義塾大学文学部・図書館情報学科卒業、
同大学院政策・メディア研究科修士課程・
博士課程修了。博士（学術）
 - 材料科学とは全く関係のない専攻でした
- 東京工科大学大学院バイオ・情報メディア
研究科助手、慶應義塾大学・東洋大学
非常勤講師などを経て、
2012年10月より物質・材料研究機構で勤務
- 図書ポータル・研究者総覧SAMURAI・
Materials Data Repositoryなどの開発・
運用に従事
- JPCOAR、JaLC、ORCID日本コンソーシアム
の活動にも携わる



修士のときに関わっていた
絵巻物のデジタル化プロジェクト



Materials Data Repository (MDR)



- 物質・材料研究機構(NIMS)の運用するデータリポジトリ

- <https://mdr.nims.go.jp>
- 2020年6月から運用開始



- 約4,200件の論文・約12,900件の研究データを収録
- 登録作業担当2名（他業務兼任）
- システム運用2名（他業務兼任）
- 研究成果である論文や研究データを、**FAIR原則に沿った形で流通させるためのサービス**

MDR MATERIALS DATA REPOSITORY

MDRについて ヘルプ お問い合わせ Switch language ▼

Enter search terms 検索

MDR: Materials Data Repository は、材料科学に関する論文や研究データを公開するデータリポジトリです。材料科学向けに設計されたメタデータ項目を用いて、論文や研究データを検索することができます。MDRは [物質・材料研究機構\(NIMS\)](#) によって運営されています。 ([MDRについて](#))

BROWSE ALL PUBLICATIONS **BROWSE ALL DATASETS** **BROWSE ALL COLLECTIONS**

お知らせ

- MDRは新しいアプリケーションに更新されました。(2025-03-25)
- MDR will be temporarily offline due to system upgrade **between 19:00 March 24th and 18:00 March 25th (UTC+9)**. (2025-03-11)

注目データ

MDR XAFS DB

This MDR XAFS DB is an integrated database of XAFS spectral data provided by the participating institutions in this project. The metadata provided by each organization (hereafter referred to as "local metadata") is not currently standardized, but typical metadata items are extracted from the local metadata and standardized on the MDR (hereafter referred to as "MDR metadata"). MDR metadata can be obtained via API.

This readme summarizes the status of data provided by each institution (2. Statistics), basic data format and related information (3. Data Format), and results of analysis of local metadata (4. Metadata Analysis Results), and status of absorption edge collection (5. Absorption edge information).

This work is a part of XAFS database (MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>) as a collection of MDR.

本MDR XAFS DBは本プロジェクト参画機関から提供いただいたXAFSスペクトルデータを統合したデータベースです。各機関から提供いただいているメタデータ（以下「ローカルメタデータ」）は現時点では統一されておりませんが、ローカルメタデータから代表的なメタデータ項目を抽出し、MDR上で統一的に表記（以下「MDRメタデータ」）としています。MDRメタデータはAPIで取得可能です。

ここでは、各機関からのデータ提供状況（2. 統計情報）、基本的なデータ形式と関連情報（3. データ形式）、各機関のローカルメタデータの解析結果（4. メタデータ解析結果）、吸収端コレクションの状況（5. 吸収端情報）をまとめてあります。

本解説は、MDRコレクションXAFSデータベース (MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>) の一部です。

MDR XAFS DB Readme

[ISHII_Masashi](#) ; SHIMIZU, Miharu

論文 Integration of X-ray Absorption Fine Structure Databases for Data-Driven Materials Science

Masashi Ishii  (National Institute for Materials Science ); Kosuke Tanabe  (National Institute for Materials Science ); Asahiko Matsuda  (National Institute for Materials Science ); Hironori Ofuchi ; Takahiro Matsumoto ; Toyonari Yaji; Yasuhiro Inada ; Hiroaki Nitani ; Masao Kimura ; Kiyotaka Asakura 



Integration of X-ray absorption fine structure databases for data-driven materials science

Masashi Ishii, Kosuke Tanabe, Asahiko Matsuda, Hironori Ofuchi, Takahiro Matsumoto, Toyonari Yaji, Yasuhiro Inada, Hiroaki Nitani, Masao Kimura & Kiyotaka Asakura

To cite this article: Masashi Ishii, Kosuke Tanabe, Asahiko Matsuda, Hironori Ofuchi, Takahiro Matsumoto, Toyonari Yaji, Yasuhiro Inada, Hiroaki Nitani, Masao Kimura & Kiyotaka Asakura (2023) Integration of X-ray absorption fine structure databases for data-driven materials science, Science and Technology of Advanced Materials: Methods, 3(1), 2187518, DOI: 10.1002/STAM.2023.2187518

To link to this article: <https://doi.org/10.1002/STAM.2023.2187518>

© 2023 The Author(s). Published by National Institute for Materials Science in partnership with Taylor & Francis Group.

Published online 17 Apr 2023

Submit your article to this journal

Article views: 460

View related articles

View Crossmark data

Full Terms & Conditions of access and use can be found at <https://www.tandfonline.com/action/journalInformation?journalCode=STAM2023>

DOWNLOAD FILE (5.91MB)

Download as zip (5.19MB)

説明:

(abstract)

With the aim of introducing data-driven science and establishing an infrastructure for making XAFS spectra findable and reusable, we have integrated XAFS databases in Japan. This integrated database (MDR XAFS DB) enables cross searching of spectra from more than 2000 samples and more than 700 unique materials with machine-readable metadata. The introduction of a materials dictionary with approximately 6000 synonyms has improved the search performance and links with large external databases have been established. In order to compare spectra in the database, the energy calibration policies of each institution were compiled, and the energy calibration methods across institutions were shown. This clarified how to utilize the MDR XAFS DB as a knowledge base. The database created through this cross-institution initiative is a model case for the further development of databases for other methods and material informatics using them.

権利情報:

-  Creative Commons BY Attribution 4.0 International

キーワード: X-ray absorption fine structure, data integration, metadata, materials data repository, DOI, RDF

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/3cc837bb-64f2-4495-b0c6-8254e519829e>



MDRに収録されている研究データの例: MDR XAFS DB

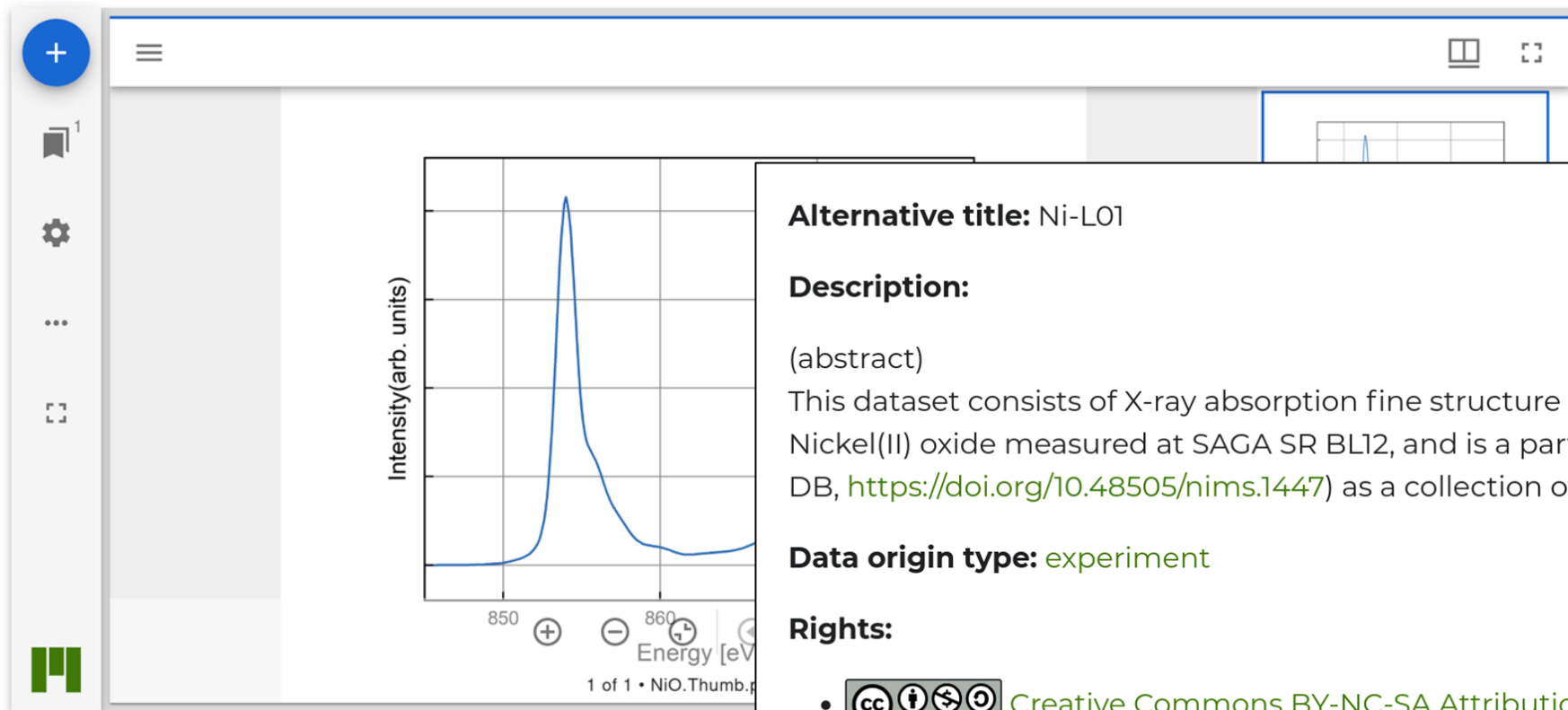


- 日本国内の6機関の放射光施設で測定されたXAFS(X-ray Absorption Fine Structure)データを収集したデータベース
 - <https://doi.org/10.48505/nims.1447>
- MDRで2,264件のデータを公開
- 各データにDataCite DOIを付与
 - CiNiiだけでなく、OpenAlexやData Citation Index (Clarivate)など、世界で人気の高いデータベースでもMDRのデータを検索可能



Dataset XAFS spectrum of Nickel(II) oxide

Masashi Ishii   (National Institute for Materials Science) ; SAGA-LS (Kyushu Synchrotron Light Research Center )



Alternative title: Ni-L01

Description:

(abstract)

This dataset consists of X-ray absorption fine structure (XAFS) spectra at Ni L-edge of Nickel(II) oxide measured at SAGA SR BL12, and is a part of XAFS database (MDR XAFS DB, <https://doi.org/10.48505/nims.1447>) as a collection of MDR

Data origin type: experiment

Rights:



Creative Commons BY-NC-SA Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International

Creative Commons BY-NC-SA Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International

Keyword: Nickel(II) oxide, NiO, Ni L-edge, Oxide, BL12, SAGA-LS, XAFS, collection - MDR XAFS DB

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/c7c8a33f-e754-4b87-8c4b-49b463e72b54>



分野特有のメタデータを記述



Specimen / 試料

Name / 名称 : Nickel(II) oxide

Description / 試料の説明 : on carbon tape

Material type / 試料種別 : 酸化物 

Material type description / 試料種別の説明 : Oxide

Identifier / 識別子 :

Measurement method / 計測法

Description / 説明 : total electron yield

Category / カテゴリ : X線吸収分光法 

Category description / カテゴリの説明 : x-ray absorption spectroscopy

Analysis field / 解析分野 : 分光法 

Analysis field description / 解析分野の説明 : spectroscopy

Measurement environment / 計測環境 :

Standardized procedure / 標準手順 :

Measured at / 計測時刻 :



- 材料研究に関する用語をまとめた語彙（シソーラス）



- <https://matvoc.nims.go.jp>
- 用語の略称・表記ゆれを吸収するとともに、用語の上位・下位概念についての関係性を定義
- MDRで材料メタデータを記述する際に使用
- NIMSの[松田朝彦主任エンジニア](#)による開発

分光法 (Q30)

説明はありません
スペクトル解析 | スペクトロスコーピー

▼ 他言語の表示
設定

言語	ラベル	説明	別名
日本語	分光法	説明はありません	スペクトル解析 スペクトロスコーピー
英語	spectroscopy	説明はありません	

文

広義概念



計測手法

▼ 0件の情報源

辞書の一部



characterization dictionary 英語

▼ 0件の情報源

<http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q30>



材料語彙MatVocによるMDRの検索



Analysis field / 解析分野 : 分光法 

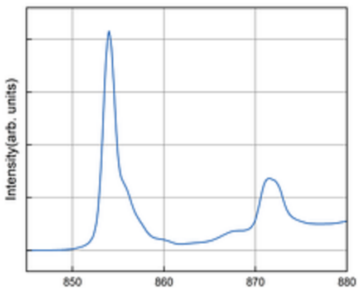
<http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q30>

MDRのメタデータに語彙のURIを記述することで、その語彙を含むMDRの研究データが検索できるようになる

matvoc:"http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q30" 検索

2263 件の記録が見つかりました。

Intensity (arb. units)



Energy [eV]

XAFS spectrum of Nickel(II) oxide

データセット

コレクション MDR XAFS DB

著者 Masashi Ishii  ; SAGA-LS

キーワード Nickel(II) oxide, NiO, Ni L-edge
SAGA-LS, XAFS, collection - MDR

刊行年月日
更新時刻 2025-05-06 20:26:04 +0900



MDRのメタデータ内の材料語彙の記述



```
"instrument_operators": [],  
"instrument_managing_organizations": [],  
"experimental_methods": [  
  {  
    "category_vocabulary": "http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q386",  
    "category_description": "x-ray absorption spectroscopy",  
    "analysis_field_vocabulary": "http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q30",  
    "analysis_field_description": "spectroscopy",  
    "measurement_environment_vocabulary": null,  
    "standardized_procedure_vocabulary": null,  
    "description": "Transmission",  
    "measured_at": "2009-10-30T15:00:00Z"  
  }  
],
```



- <https://ixdb.jxafs.org/>
- 世界7カ国（日本・カナダ・フランス・アメリカ・中国・イタリア）のXAFSデータベースの横断検索サービス
- NIMSの[石井真史主席研究員](#)による開発
- 日本のデータはMDRから提供
- MatVocの語彙を使った横断検索を行える

International XAFS DB Portal

Absorption edge search

Absorption element :

Edge :

Search

Material name search

Material name containing:

(Chemical formula, customary name, etc.

Enter in English or Japanese within 25 characters.)

Search

International XAFS DB Portal

Material name containing: 銅

「銅」という語を含むMatVocの語彙の一覧

[Q4069](#) : [Chalcopyrite](#)

[Q1426](#) : [Copper](#)

[Q1412](#) : [Copper acetate](#)

[Q2319](#) : [Copper bis\(2,2,6,6-tetramethyl-3,5-heptanedionate\)](#)

[Q1393](#) : [Copper chromite](#)

[Q1409](#) : [Copper fluoride](#)

[Q4122](#) : [Copper hydroxy nitrate](#)

[Q1425](#) : [Copper iron oxide](#)

[Q1428](#) : [Copper molybdate](#)

[Q889](#) : [Copper nickel](#)

[Q1413](#) : [Copper nitrate trihydrate](#)

[Q1417](#) : [Copper nitride](#)

[Q1410](#) : [Copper phthalocyanine](#)

[Q1433](#) : [Copper tungstate](#)

Links for Copper

find it in the original DB <https://xasdb.lightsource.ca/>, or use "Direct data download" [below](#) (CLS)

<http://xasdb.ihep.ac.cn/element/32> (IHEP)

<http://xasdb.ihep.ac.cn/element/406> (IHEP)

<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)

find it in the original DB <https://lisa.iom.cnr.it/xasdb/>, or use "Direct data download"

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/badc8b57-7fdf-4023-9007-d6a29f7c8667> (MDR (A

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/59987173-9b9f-4e0c-ade8-679b8af2d2a0> (MDR (H

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/280782d6-9b3a-4cb1-9544-6c1dfaaa68c7> (MDR (K

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/40f58f6d-0dd0-461c-b07b-bb900c31c306> (MDR (K

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/4890c804-8d02-43a4-ba13-3bdbee>

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/5849685d-5950-4a2a-b8bb-ea7a1b>

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/59698f23-e92d-4721-87b0-4d0490>

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/99083873-4805-4b77-8f49-aa2d82>

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/9f6042b2-05e3-4274-9132-360764>

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/abd8212b-9321-4cf8-b848-70b474>

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/af3d80a9-4673-4639-9174-090ad8>

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/b45ad132-06c5-4e1b-ad97-15cf91>

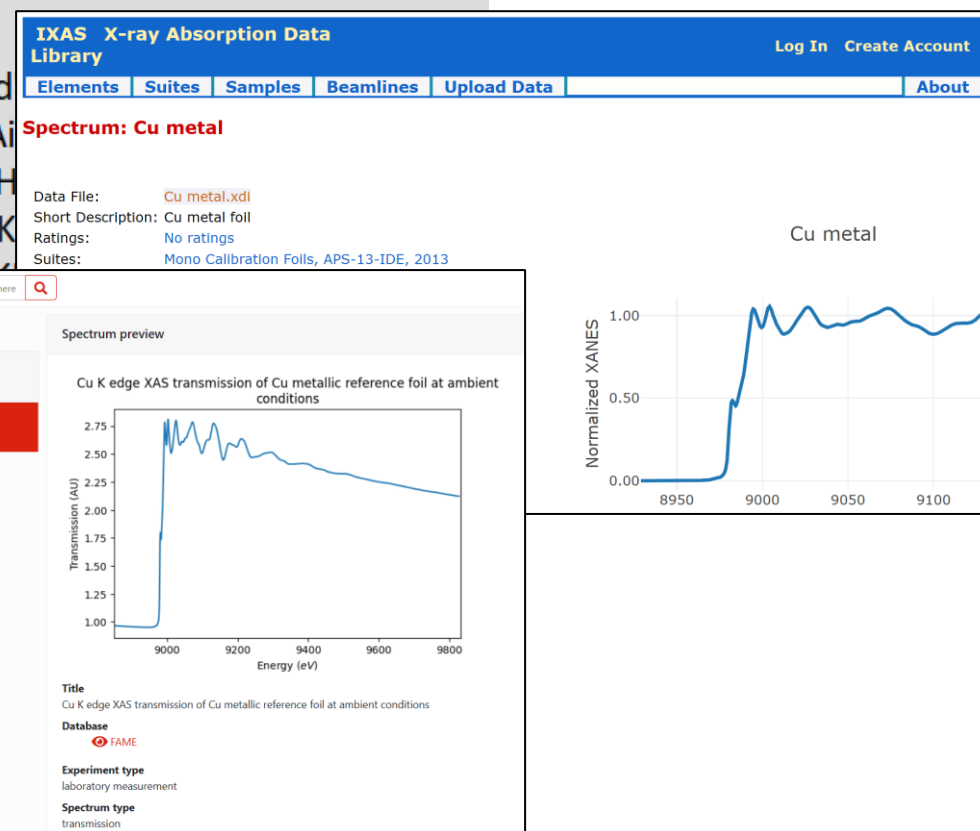
<https://mdr.nims.go.jp/datasets/d15c09bc-4119-4a70-96d3-a78756>

https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_OP_20180117

https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_OP_20230216

https://www.sshade.eu/data/spectrum/SPECTRUM_OP_20230216_001C (SSHADE/FAME)

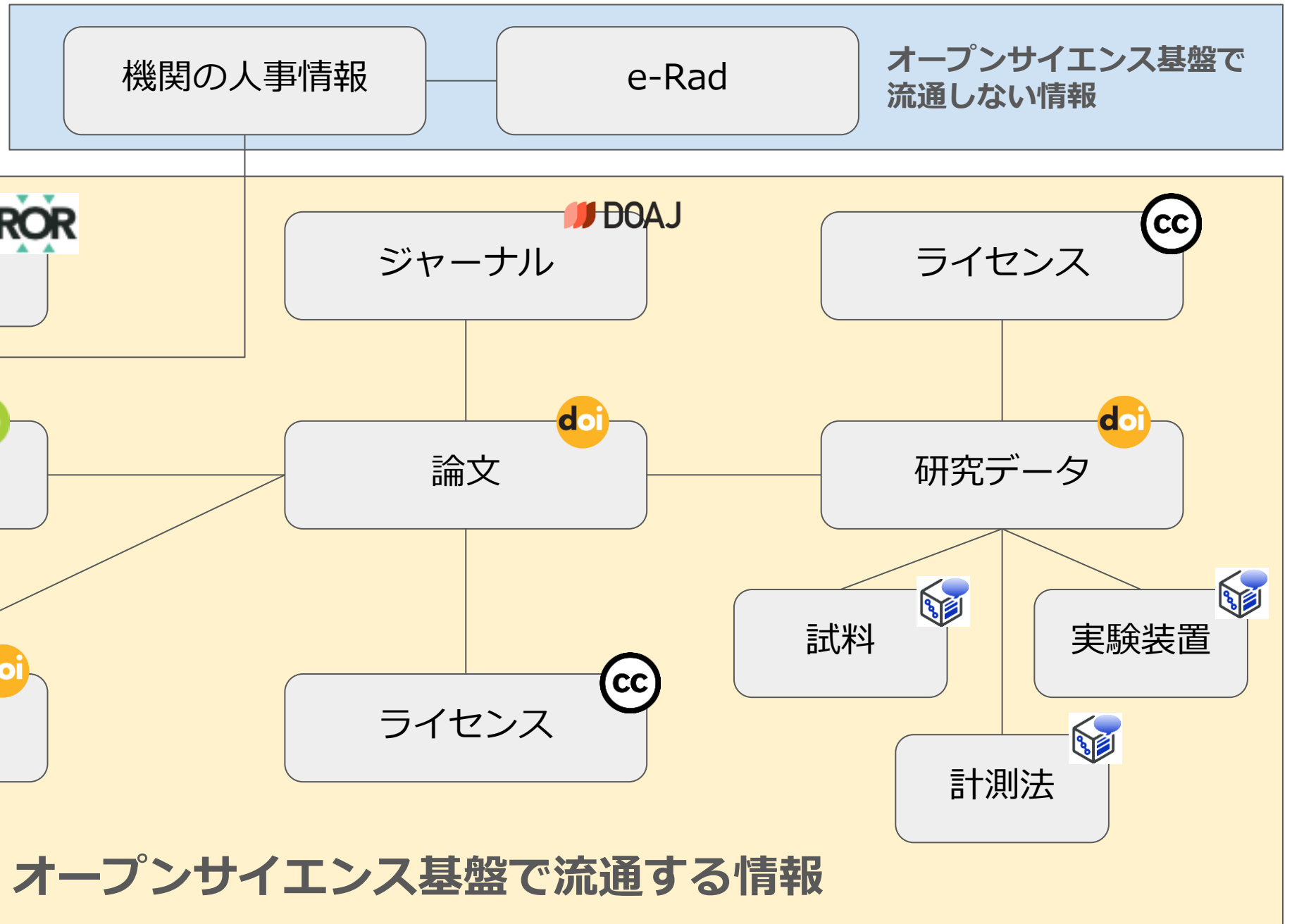
“Copper”を含む世界各地のXAFSデータの一覧





MDRの実例からFAIR原則を考える

MDRで扱う情報の 大まかな全体図





研究成果が「FAIRである」とは？



- 一言で言えば「その情報をURLで示せること」ではないか
 - URLがなければ、そもそもFindableにもAccessibleにもならないし、ましてInteroperableになど絶対にならない
 - Reusableであることを示すライセンスにもURLがついている
 - AIロボットも、URLをたどることで初めてその情報にアクセスできる

<https://mdr.nims.go.jp/datasets/cb67c6fc-0622-41e1-b9d4-7e47bd579743>



<https://doi.org/10.48505/nims.3565>



<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



<https://orcid.org/0000-0003-0357-2832>



https://samurai.nims.go.jp/profiles/ishii_masashi



<http://matvoc.nims.go.jp/entity/Q742>

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

MDRのURLからリンクされる情報



「FAIRのためのサービス」としてMDRがやっていること



- 登録された研究成果にURLをつけ、そのURLを他の情報のURL（例：著者のORCID、材料語彙、関連論文やデータのDOI）とリンクする
- 上記の情報を、国内外の学術情報サービス（例：SAMURAI, CiNii Research, DataCite, OpenAlex）に流通させ、検索やアクセス、再利用に供する





情報のURLをつなぐことで、研究成果をもっとFAIRなものに



The screenshot shows the OpenAlex website interface. At the top, there's a search bar with 'Search OpenAlex' and a 'Works' dropdown. Below the search bar, a notification says 'Data Version 2 is live! Learn more here.' The main content area displays search results for 'Materials Data Repository'. On the left, a list of works is shown, including 'Mdr Xafs Db', 'Calculations of electron inelastic mean free paths.VIII. Data for 15 elemental solids over the 50-2000 eV range', 'MDR SuperCon Datasheet Ver.220808', 'MDR SuperCon Datasheet', and 'Cpddb'. On the right, a 'Stats' section shows '3,978 results' and a bar chart for 'Year'. Below the stats, a 'Topic' section lists various categories with checkboxes and counts.



[Science and Technology of Advanced Materials: Methods 3 \[1\] 2197518. 2023.
https://doi.org/10.1080/27660400.2023.2197518](https://doi.org/10.1080/27660400.2023.2197518)

[Open Access](#) [Informa UK Limited](#) (Publisher) [Materials Data Repository \(MDR\)](#)

NIMS著者



石井 真史



田邊 浩介



松田 朝彦

Materials Data Repository (MDR)上の本文・データセット

MDR available [Integration of X-ray Absorption Fine Structure Databases for Data-Driven Materials Science](#)

TANABE.Kosuke@nims.go.jp

感想・質問・ご意見などお気軽にお寄せください！