分析データ収集における構造化ファイルと変換ツールの公開

Structured Interoperative Files and Publication of Conversion Tools in Analysis Data Collection at NIMS

物材機構 [1]，アルバック・ファイ（株）[2]，（株）リガク [3]
○鈴木 峰晴 [1]，長尾 浩子 [1]，渡邉 勝己 [2]，佐々木 明登 [3]，松波 成行 [1]，吉川 英樹 [1]
NIMS-DPFC [1], ULVAC-PHI [2], Rigaku [3]　○Mineharu Suzuki [1], Hiroko Nagao [1], Katsumi Watanabe [2], Akito Sasaki [3], Shigeyuki Matsunami [1], and Hideki Yoshikawa [1]
E-mail: SUZUKI.Mineharu@nims.go.jp

物質・材料研究機構（NIMS）材料データプラットフォームセンター（DPFC）では材料研究データバンクに蓄積すべき分析データの可読化・収集にあたって，可読化データを「計測メタ情報群（Characterization metadata）」，「主要パラメータ群（Primary parameters）」，「測定条件パラメータ群（Raw parameters）」，「条件付き数値データ群（Formatted numerical data）」に構造化していることを報告した（鈴木他；第 79 回応用物理学会秋季学術講演会，2018-09-18，18a-231A-9）．今回は，メタ情報の記述とデータ変換ツールの公開に関して報告する．

Fig. 1 には，X 線光電子分光（XPS）スペクトルのデータから抽出した Primary parameters を示すが，再現測定・繰り返し測定を可能にすると共に第三者可読性を高めるために用いることができる．より詳細な測定パラメータは Raw parameters として扱い，装置操作者の詳細な測定条件設定や装置管理に利用可能である．これらのメタ情報群と Formatted numerical data は，生データから Python スクリプトを用いて抽出・変換される．NIMS では，生データから Formatted numerical data への変換ツール・visual データ作成ツールとともに Primary parameters，Raw parameters の抽出・XML ファイル作成ツールを無償公開することとした．現状では，アルバック・ファイ社 Quantera SXM のスペクトル，深さ方向プロファイルおよびリガク社 SmartLab の粉末 X 線回折パターンに対応しているが，徐々に拡大する計画である．

講演では，詳細なメタ情報の内容に関して触れるとともに，公開ツールの利用方法を述べる．

Item (Key name)	Units	Value
Technique		XPS
Instrument model identifier		PHI Quantera SXM
Experiment identifier		20170606
Experiment mode		SPECTRUM
Operation datetime[datetime][0]	year	2017
Operation datetime[datetime][1]	month	6
Operation datetime[datetime][2]	day	6
Analysis source beam diameter	um	100.0
Analysis source strength		103.08W HP
Analyser mode		FAT
Analyser work function	eV	4.250
Analyser axis take off polar angle	degree	45.0
Analyser acceptance solid angle	sr	0.38
Analyser pass energy	eV	280.00
Flood gun voltage	V	1.40
Flood gun emission current	uA	20.0
Ion gun voltage	V	1000
Species label		Survey
Abscissa end	eV	-20.0000
Abscissa increment	eV	-0.5000
Collection time	s	0.359280
Number of scans		10
Comment		1#2Au foil

Fig. 1 Example of primary parameters generated from an XPS spectrum data file.

© 2019年 応用物理学会