

材料データリポジトリにおける 共通メタデータ・分野別メタデータ

物質・材料研究機構 (NIMS)

統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)

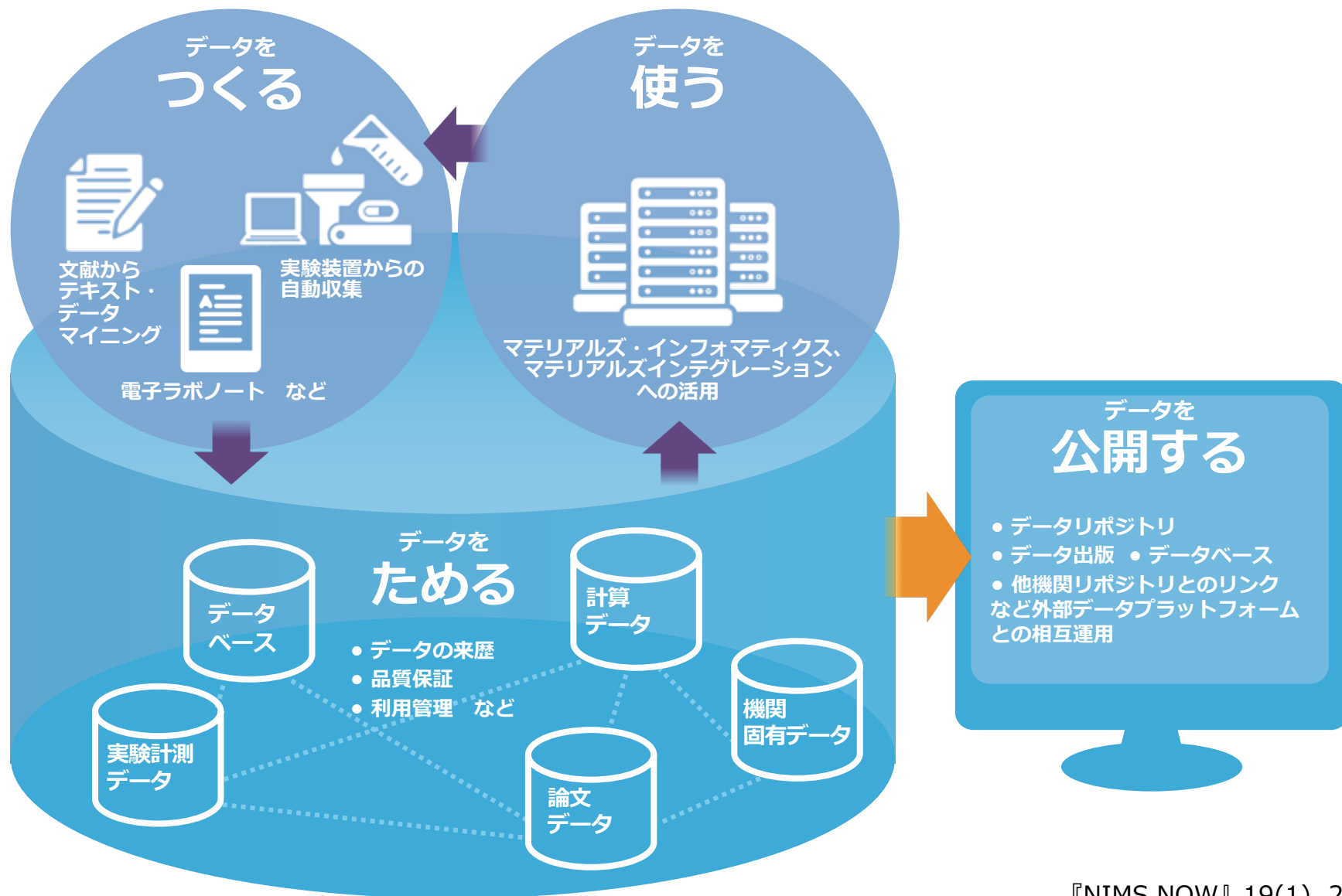
材料データプラットフォームセンター (DPFC)

松田 朝彦 MATSUDA.Asahiko@nims.go.jp

 <https://orcid.org/0000-0001-5989-027X>



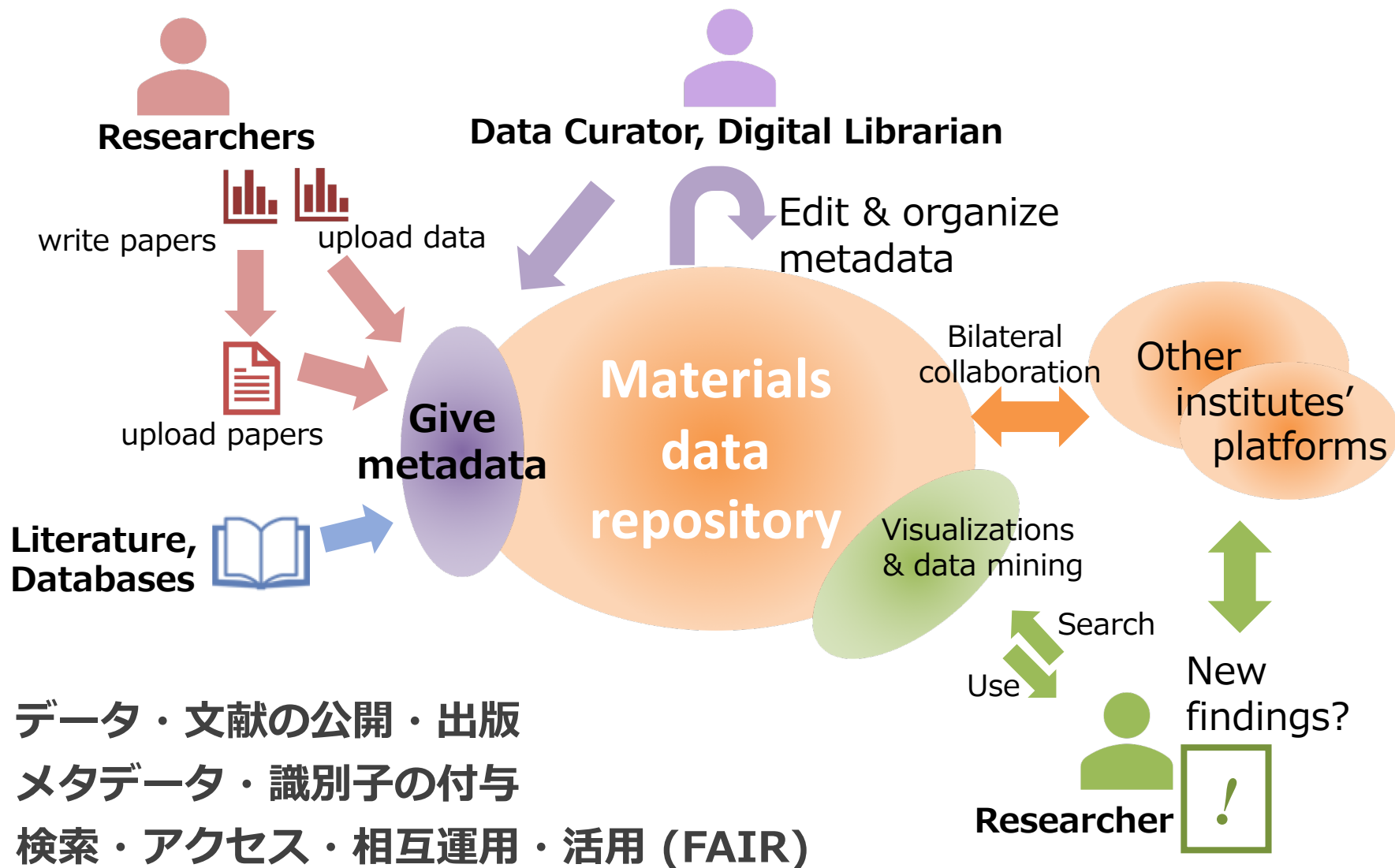
材料データプラットフォーム



『NIMS NOW』 19(1), 2019



研究データリポジトリ





研究データリポジトリの機能的要件

RDA Repository PF for Res. Data IG (2016)



Category	Requirement	Functional requirement score
Metadata	Support for different metadata (schemas), including domain-specificity and interoperability	28
Persistent Identifiers	Assignment of PID / DOI	26
Authentication	Fine grained authentication and authorization. Allow integration or import from external systems.	16
Data Access	Allow data providers to choose the level of access to data (e.g. Open Access)	16
Data Access	Provide state-of-the-art user interfaces	16
Policy Support	Allow the automated use of data policies	15
Publication	Provide data access statistics by analytics services or monitoring of user activity	13
Submission / Ingest / Management	APIs for automated execution of tasks, (e.g. to ingest data or to integrate data analysis tools etc)	13
Metadata	Allow data annotation by the data owner, by other people, or by automatic extraction tools	12
Data Access	Sophisticated search capabilities for metadata and data both for humans and computers	11

44件より上位を中心に抜粋 “Matrix of use cases and functional requirements for research data repository platforms”
doi:10.15497/rda00033



北海道大学 触媒科学研究所 XAFS database

- <https://www.cat.hokudai.ac.jp/catdb/>
- X線吸収微細構造 (XAFS) に関する専門的データベース





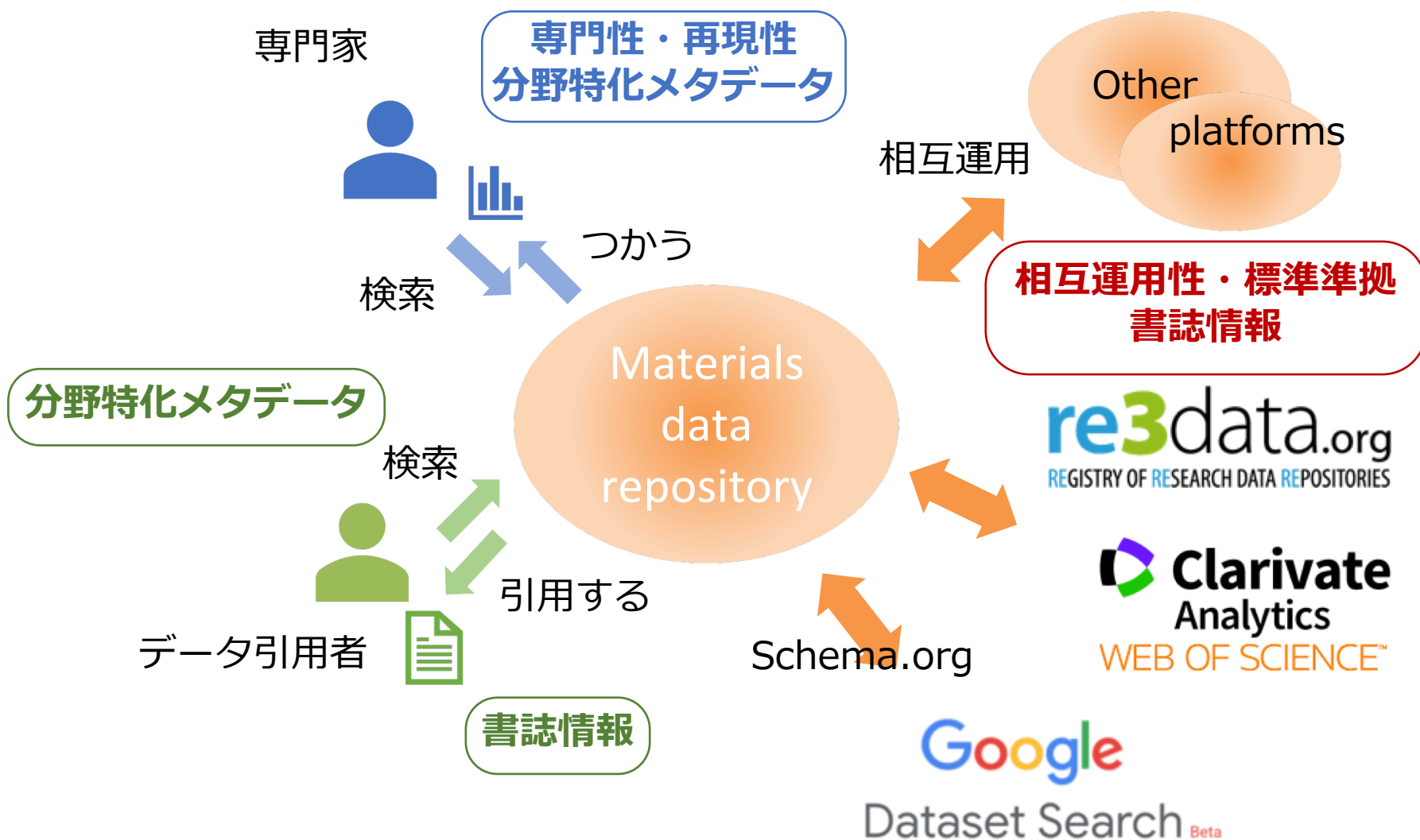
- Data:

Search:





材料研究データに対するメタデータの役割



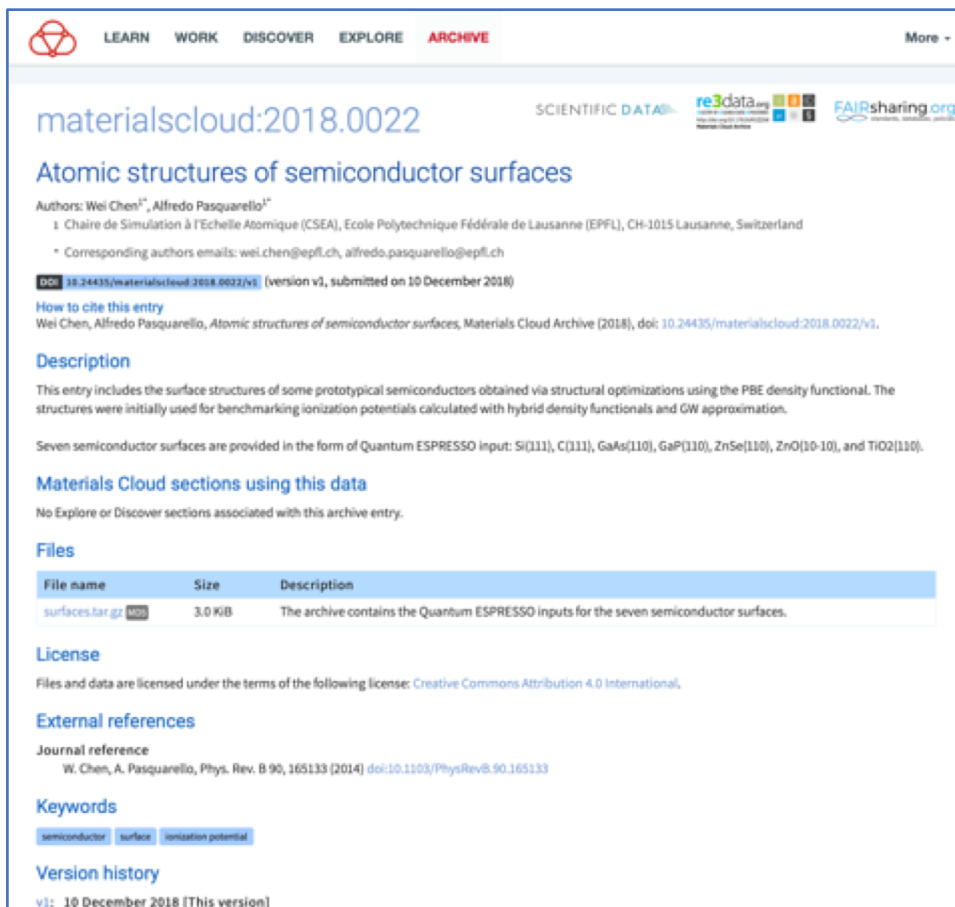


Materials Cloud



MATERIALSCLOUD

- <https://www.materialscloud.org/>
- 計算材料科学のオープンリポジトリ
- 計算科学による新材料探索を行う
スイスの国家プロジェクト、
NCCR-MARVEL がホスト



LEARN WORK DISCOVER EXPLORE **ARCHIVE** More +

materialscloud:2018.0022

SCIENTIFIC DATA  

Atomic structures of semiconductor surfaces

Authors: Wei Chen^{1*}, Alfredo Pasquarello^{1*}

¹ Chaire de Simulation à l'Echelle Atomique (CSEA), Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), CH-1015 Lausanne, Switzerland

* Corresponding authors emails: wei.chen@epfl.ch, alfredo.pasquarello@epfl.ch

DOI: [10.24435/materialscloud:2018.0022/v1](https://doi.org/10.24435/materialscloud:2018.0022/v1) (version v1, submitted on 10 December 2018)

How to cite this entry
Wei Chen, Alfredo Pasquarello, Atomic structures of semiconductor surfaces, Materials Cloud Archive (2018), doi: [10.24435/materialscloud:2018.0022/v1](https://doi.org/10.24435/materialscloud:2018.0022/v1).

Description

This entry includes the surface structures of some prototypical semiconductors obtained via structural optimizations using the PBE density functional. The structures were initially used for benchmarking ionization potentials calculated with hybrid density functionals and GW approximation.

Seven semiconductor surfaces are provided in the form of Quantum ESPRESSO input: Si(111), C(111), GaAs(110), GaP(110), ZnSe(110), ZnO(10-10), and TiO2(110).

Materials Cloud sections using this data

No Explore or Discover sections associated with this archive entry.

Files

File name	Size	Description
surfaces.tar.gz 	3.0 KiB	The archive contains the Quantum ESPRESSO inputs for the seven semiconductor surfaces.

License

Files and data are licensed under the terms of the following license: [Creative Commons Attribution 4.0 International](#).

External references

Journal reference
W. Chen, A. Pasquarello, Phys. Rev. B 90, 165133 (2014) doi:[10.1103/PhysRevB.90.165133](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.165133)

Keywords

[semiconductor](#) [surface](#) [ionization potential](#)

Version history

v1: 10 December 2018 [This version]



標準プロトコルによるメタデータ提供と Google Dataset Search による検索機能提供

Google Dataset Search

semiconductor surface structure

15 件の検索結果が見つかりました

Atomic structures of semiconductor surfaces
archive.materialscloud.org
公開日: Dec 10, 2018

Influence of Molecular Shape on the Thermal Stability and...
www.osti.gov
search.datacite.org
公開日: Jul 25, 2017

Monitoring the formation of surface-enriched PbI₂ in...
data.isis.stfc.ac.uk

LED-based luminaires: cost breakdown 2015
www.statista.com

Display a menu



Metadata in
Schema.org
format

LEARN WORK DISCOVER EXPLORE ARCHIVE

materialscloud:2018.0022

Atomic structures of semiconductor surfaces

Authors: Wei Chen^{1*}, Alfredo Pasquarello^{1*}
1 Chaire de Simulation à l'Echelle Atomique (CSEA), Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), CH-1015 Lausanne, Switzerland
* Corresponding authors emails: wei.chen@epfl.ch, alfredo.pasquarello@epfl.ch

DOI: 10.24435/materialscloud:2018.0022/v1 (version v1, submitted on 10 December 2018)

How to cite this entry
Wei Chen, Alfredo Pasquarello, Atomic structures of semiconductor surfaces, Materials Cloud Archive (2018), doi:10.24435/materialscloud:2018.0022/v1.

Description
This entry includes the surface structures of some prototypical semiconductors obtained via structural optimizations using the PBE density functional. The structures were initially used for benchmarking ionization potentials calculated with hybrid density functionals and GW approximation.

Seven semiconductor surfaces are provided in the form of Quantum ESPRESSO input: Si(111), C(111), GaAs(110), GaP(110), ZnSe(110), ZnO(10-10), and TiO₂(110).

Materials Cloud sections using this data
No Explore or Discover sections associated with this archive entry.

Files

File name	Size	Description
surfaces.tar.gz	3.0 KiB	The archive contains the Quantum ESPRESSO inputs for the seven semiconductor surfaces.

License
Files and data are licensed under the terms of the following license: [Creative Commons Attribution 4.0 International](#).

External references

Journal reference
W. Chen, A. Pasquarello, Phys. Rev. B 90, 165133 (2014) doi:10.1103/PhysRevB.90.165133

Keywords
semiconductor surface ionization potential

Version history
v1: 10 December 2018 [This version]

NIMS

EPFL

The National Centres of Competence in Research (NCCR) are a research instrument of the Swiss National Science Foundation

Search





MDPFメタデータモデル

共通
メタデータ

分野別
メタデータ

共通メタデータ（必須） 識別子・記入者・物質・装置・データ起源…				
計測 メタデータ 計測法 測定環境	試料 メタデータ 物質タイプ 構造的特徴	特性 メタデータ 特徴的性質	合成・プロセス メタデータ 処理日 処理温度	計算 メタデータ 計算機 ソフトウェア
計測 主要パラメータ	試料 主要パラメータ	特性 主要パラメータ	合成・プロセス 主要パラメータ	計算 主要パラメータ
任意データ	任意データ	任意データ	任意データ	任意データ

- 議論を通じて共通性の高いメタデータを特定した。
- システムとしてのメタデータには含まないが、その分野で重要なものは「**主要パラメータ**」として扱う。
統制しないがシステム上読み出す機能を備えさせる。

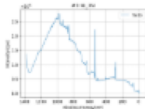


主要パラメータのUI表示（開発中イメージ）

Home / Back to search results

Work

DataBase01.104 **Public** **Deposited**



共通メタデータ

Common Term

Author
Hideyuki, YASUFUKU

Organization
NIMS

Created Date
2019-01-22

Data Origin
experiments

Specimen Description
Ni_reference

instrument
PHI Quantera SXM

manufacturer
ULVAC-PHI

Managing Organization
NIMS(材料分析ステーション)

Specimen Types

Specimen Description
Ni_reference

Description
リボトリ用サンプル

Characterization Methods

Measured Date

計測メタデータ

energy-level-transition-structure
Survey

Analysis Field-items
Chemical state
Qualitative analysis
Quantitative analysis
表面分析, 元素分析

specimen
Ni_reference

primary
Measurement Technique, XPS
Measurement Instrument, PHI Quantera SX
Experiment ID, forDB
File Property, SPECTRUM
Operation Date-time[Year], 2017
Operation Date-time[Month], 10
Operation Date-time[Day], 30
Xray Beam Diameter, 100.0 um
Analysis source strength, 103.08W_HP
Analyzer Mode, FAT
Analyzer Work Function, 4.250 eV
Xray Analyzer Angle, 45.0 deg
Analyzer Solid Angle, 0.38 sr
Pass Energy, 280.00 eV
Analysis Region, Area
Analysis Width_x, 1400.0000 um
Analysis Width_y, 100.0000 um

主要パラメータ

Items

DataBase01.104 DataBase01.104 meta.zip properties.zip tools.zip

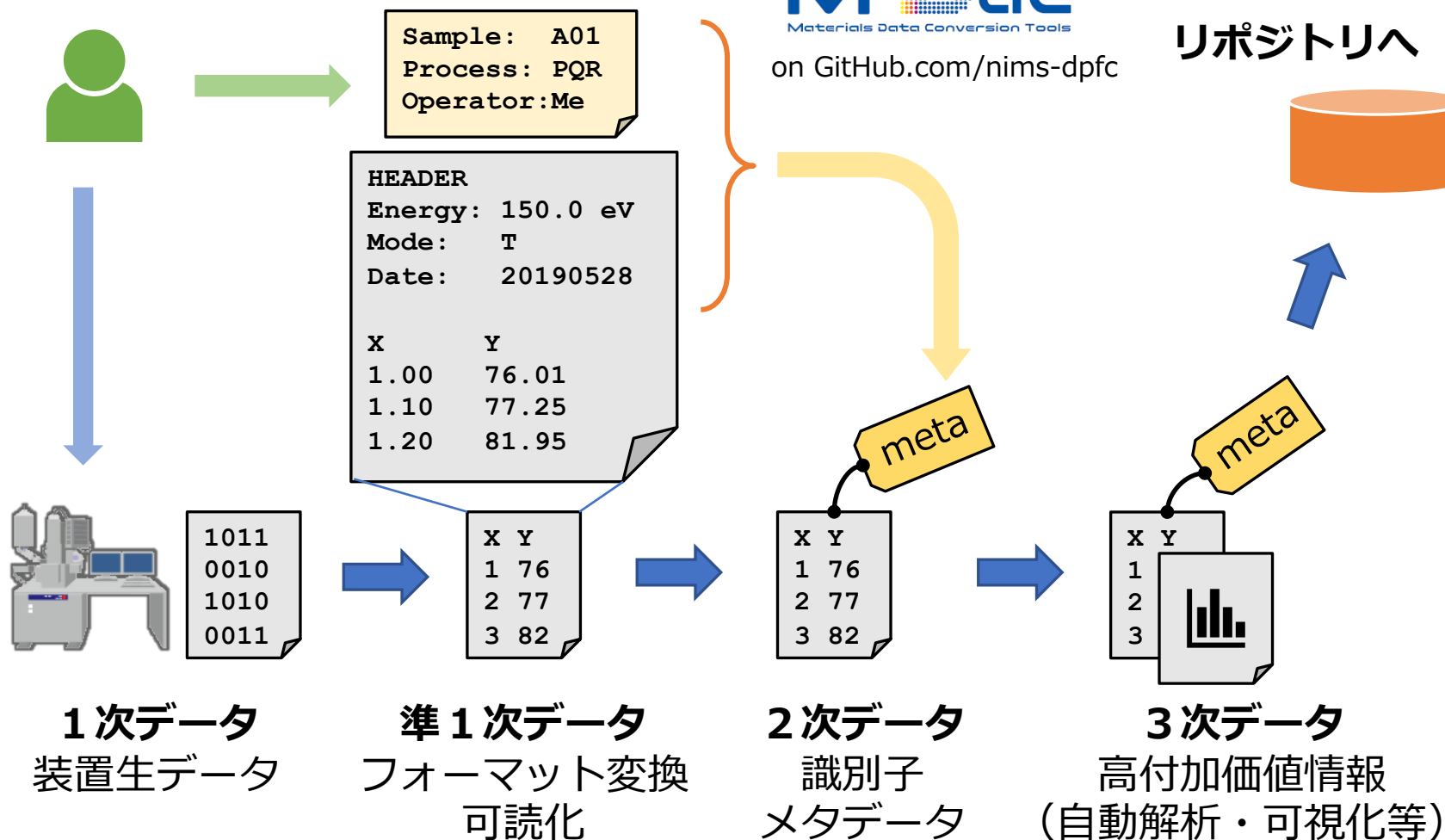


「データ収集システム」によるメタデータ付与例



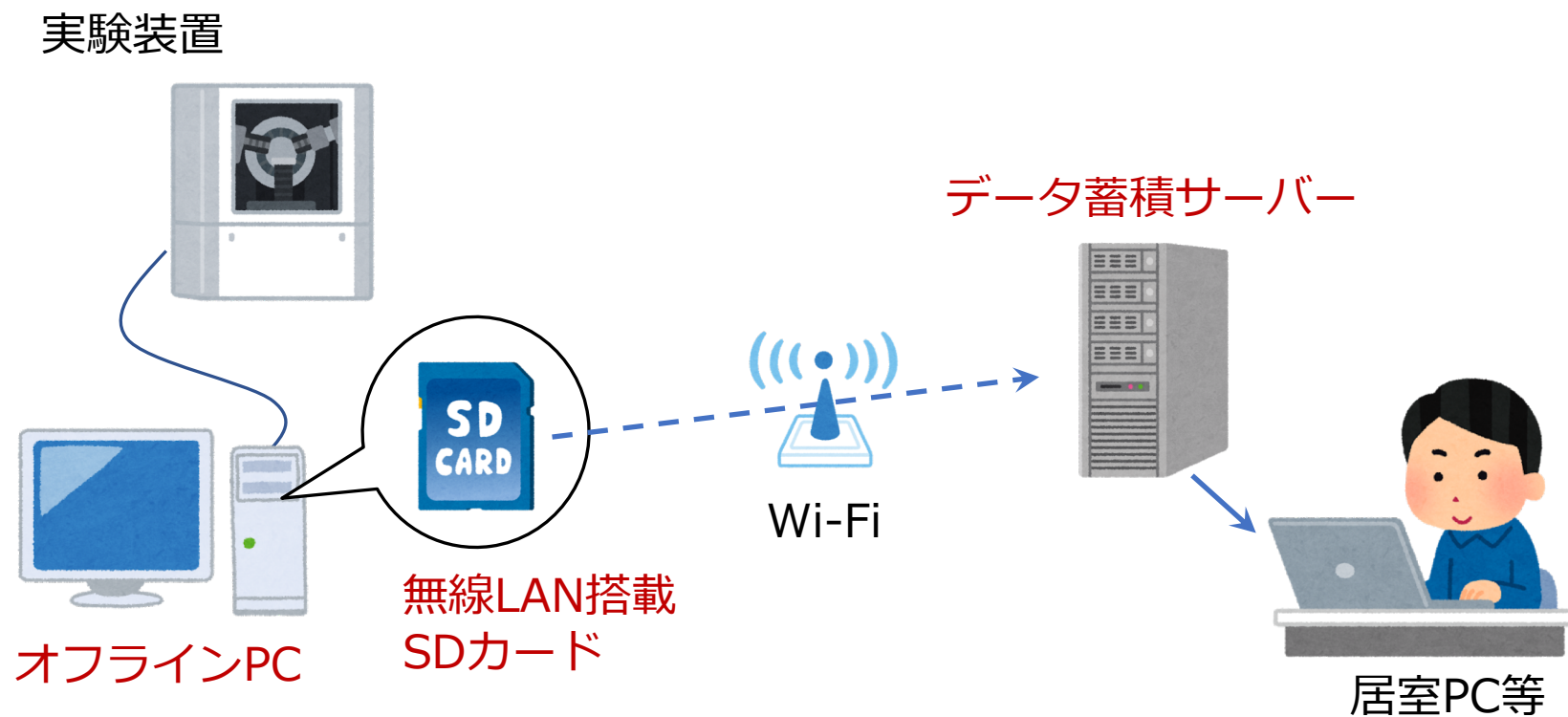
on [GitHub.com/nims-dpfc](https://github.com/nims-dpfc)

リポジトリへ





無線LAN搭載SDカードを用いた自動データ転送システム





まとめ

- **専門リポジトリにおけるメタデータは、様々な要求にこたえる必要がある。**
 - 専門的な検索性の確保
 - 相互運用性・標準準拠
 - データ引用のための書誌情報
- **材料科学上共通性の高い項目を取り出し、共通メタデータ・分野別メタデータからなるモデルを考えた**
- **モデル化しきれないカスタム項目にも柔軟に対応できることが望ましい**
 - NIMS材料データプラットフォームでは「主要パラメータ」だと指定された任意ファイルの中身をリポジトリUIに表示する機能を開発中
- **自動化によるデータ収集・解析・メタデータ付与を考える**