#### BL14B2 XAFS 標準試料データベース(BENTEN 版)使用手順

2022.3.30 大渕 博宣

1. データベースサイトへの接続

(1) インターネットブラウザより、SPring-8 実験データ転送システム BENTEN の
 URL(https://benten.spring8.or.jp/)を開く。URL を開くと、トップページ(図 1)が表示される。

SPringe 8 Experimental Data Transfer System	
Login Username: Password: Login  Guest login with Email if you only need open data access.	
BENTEN SYSTEM:Copyright (C) 2020 JASRI All Rights Reserved.	<ul> <li>利用に関してはSPring-8 BENTENデータベースユーザーマニュアルを参照ください。</li> <li>BENTEN SYSTEMではCookleを利用しています。</li> <li>Cookleの使用目的は利用者のログイン認証と CSRF対策、ウェブサイトの利便性用途のみ に限定しております。</li> </ul>
	<ul> <li>Please refer SPring-8 BENTEN database User Manual (Japanse only for now).</li> <li>BENTEN SYSTEM uses cookies. The purpose of using cookies is limited only to user authentication, CSRF protection, and convenience of website.</li> </ul>

図1 SPring-8 実験データリポジトリトップページ画面

(2) UI サイト(SPring-8/SACLA 電子申請システム(<u>https://user.spring8.or.jp/</u>))のアカウントがあ る場合は、ユーザー名(SPring-8 ID)及びパスワードを入力し、Login ボタンをクリックする。 個人のメールアドレスでログインする場合は、Login ボタン下の"Guest login with Email"をク リックする。図 2 のようなゲストログイン画面が表示されるので、メールアドレスを入力し、 Login ボタンをクリックする。正常にログインが行われると、メールアドレス認証(2 要素認証) に関する画面(図 3)が表示される。

※UI サイトのアカウントを新規作成後、本データベースサイトにログインできるまで手続き に一日程度かかります。

SPringe 8 Experimental Data Transfer System	
Guest Login Email:	
BENTEN SYSTEM:Copyright (C) 2020 JASRI All Rights Reserved.	<ul> <li>利用に関してはSPring-8 BENTENデータベ ースユーザーマニュアルを参照ください。</li> <li>BENTEN SYSTEMではCookieを利用しています。</li> <li>Cookieの使用目的は利用者のログイン認証と CSRF対策、ウェブサイトの利便性用途のみ に限定しております。</li> </ul>
	<ul> <li>Please refer SPring-8 BENTEN database User Manual (Japanse only for now).</li> <li>BENTEN SYSTEM uses cookies. The purpose of using cookies is limited only to user authentication, CSRF protection, and convenience of website.</li> </ul>

図2個人のメールアドレスでのゲストログイン画面

SPring 8 Experimental Data Transfer System	UID:	I LOGOUT
ログインを完了するためにはメールアドレスによる認証が必要です。 下記ボタンを押すとUIサイトに登録されたメールアドレスに認証のメールを送信いたします。 メールアドレス: o*u*h*@s*r*n*8*o*.*p ※ メールアドレスは一部非表示としております。 >SPring-8/SACLA User Informationログインページ		
To finish the login process, email authentication is also required. After you push the buttton below, an email will be sent for the authentication with the following add Email: o*u*h*@s*r*n*8*o*.*p * The email is partially hidden. >SPring-8/SACLA User Information Login page	ress.	
次へ進む(メール送信) / Send Email 戻る / Back to home		

BENTEN SYSTEM:Copyright (C) 2019 JASRI All Rights Reserved.

図3 メールアドレス認証(2要素認証)に関する画面

(3) 「次へ進む(メール送信)/Send Email」ボタンを押すと、メール確認を促す画面が表示される(図 4)。



BENTEN SYSTEM: Copyright (C) 2019 JASRI All Rights Reserved.

図4 メール送信画面

(4) UI サイトに登録されたメールアドレスに届いた BENTEN 承認に関するメールを確認する (図 5)。

Guide for BENTEN authentication

実験データ転送システムBENTENの認証を行う際は以下URLをクリックしてください。

https://benten.spring8.or.jp/verify/token/confirm

有効期限: 20分

このメールに見覚えがない場合はメールを破棄していただいて結構です。

To proceed the email authentication process of BENTEN, please click the URL below.

https://benten.spring8.or.jp/verify/token/confirm

Expiration time : 20 min.

Please ignore this message if you did not make the request.

図 5 BENTEN 認証に関するメール

(5) メールに記載されたリンクをクリックすると、認証を促す画面(図 6)が表示される。

※「次回から同一端末からのログイン時による認証をスキップする」のチェックを入れてお くと、次回から同一端末でのメールアドレス認証が一定期間省略される。



BENTEN SYSTEM:Copyright (C) 2019 JASRI All Rights Reserved.

図6BENTEN 認証画面

(6) 「認証します/Authenticate」ボタンを押すと、認証完了画面(図 7)が表示される。(確認後 は画面を閉じてください。)

SPring. 8 Experimental Data Transfer System	
アカウントは正常に認証されました。 実験データ転送システムBENTENを利用することができます。このWebページを閉じてください。	
Your account have been successfully authorized. You can now use BENTEN. Please close this Web page.	

BENTEN SYSTEM:Copyright (C) 2019 JASRI All Rights Reserved.

# 図7 アカウント認証画面

(7) 図4のメール送信画面がデータ閲覧画面(図8)にリダイレクトされる。



BENTEN SYSTEM:Copyright (C) 2019 JASRI All Rights Reserved.

図8 データ閲覧画面

- 2. 標準試料データの閲覧
- 2-1. データの閲覧
- (1) 画面左のツリー表示から、図 9(a)のような画面が表示される。ツリーのフォルダ階層は
- root(図 9(a))
- SPring-8(図 9(b))
- ・BL14B2(図 9(c))
- ・XAFS\_Standard (XAFS 標準試料データ登録フォルダ、図 9(d))
- ・吸収元素(図 9(e))
- ・吸収端(K 又は L3,2,1、図 9(f))
- ・結晶面(Si(111)又は Si(311)、図 9(g))
- ・標準試料名(図 9(h))

の順番となっている。該当データ欄には、ツリー表示で選択したフォルダの一段下のフォル ダ(最下層の場合、フォルダに含まれるデータファイル)の情報が表示される。



図 9 (a) ツリー表示初期画面 (ツリー表示のトップ(root)を選択)

SPring 8 Experimental Data Transfer System	LOGOUT
Search under folder your proposal V DOWNLOAD CHECKED ITEMS	
▲ @ root ▲ @ SPring-8 を選択 ▷- @ BL14B2	^
	>
META DATA KEY VALUE	
	v
	>

(b) SPring-8 を選択した場合

SPrings 8 Experimental Data Transfer System		LOGOUT
Search under folder your proposal V DOWNLOAD CHECKED ITEMS		
▲ anot SPrope ● BL482 ● aVPS, Slandard → adata	CL FLE NAME	^
	< META DATA	>
	KEY VALUE	
C BENTEN SYSTEM Copyright (C) 2019 JASRI AI Rights Reserved.	v C	~

(c) BL14B2 を選択した場合

SPring- & Experimental Data Transfer System UID:	LOGOUT
Search under folder your proposal 🗸 DOWNLOAD CHECKED ITEMS	
Image: Service of the service       Image: Service of the service	

(d) XAFS\_Standard を選択した場合



(e) 元素名を選択した場合(Cuを選択)



(f) 吸収端を選択した場合(Kを選択)



(g) 結晶面を選択した場合(111 を選択)



(h) 試料名を選択した場合(Cu-foilを選択)

- 2-2. 実験データ情報の閲覧
- (1) ツリー表示から閲覧したい試料のフォルダを選択し、該当データ画面を表示させる(図 10)。

SPringe 8 Experimental Data Transfer System		UID:	LOGOUT
	Search under folder your proposal ~		
	include related data files     DOWNLOAD CHECKED ITEMS     Cu-K_Cu-Kol_SIT1_50ms_120613.dat     Cu-K_Cu-Kol_SIT1_50ms_120613.dat     Cu-K_Cu-Kol_SIT1_50ms_120613.dat     Cu-K_Cu-Kol_SIT1_50ms_120613.dat     Cu-Ku-Kol_SIT1_50ms_120613.dat     Cu-Ku-Kol_SIT1_50ms_120613.dat     Cu-Ku-Kol_SIT1_50ms_120613.dat     Cu-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku-Ku		~
↓       111         ↓       □ C32H16CuN8         ↓       □ C32H16CuN8         ↓       □ C40F000(2(neutral))         ↓       □ Cu(CH3)2_3H20         ↓       □ Cu(OH3)2_3H20         ↓       □ Cu(OH3)2_3H20         ↓       □ Cu(OH3)2_3H20         ↓       □ Cu(OH3)2_3H20         ↓       □ CuE01         ↓       □ CuE01         ↓       □ CuE01         ↓       □ CuE01         ↓       □ CuE04 H20         ↓       □ CuC3(basic)	META DATA KEY VALUE		~

図 10 該当データ画面の表示(Cu-foil を選択)

(2) 右上の該当データ画面内のいずれかのデータをクリックする。クリックすると、実験デー タ情報(図 11(a)サムネイル画像、(b)簡易情報)が表示される。







(b)

図 11 実験データ情報画面

((a) サムネイル画像 (b) 簡易情報(右下画面を下にスクロール))

#### 2-3. 実験データの種類

(1) BL14B2 XAFS 標準試料データベースには、1 つの登録番号に対し3 種類の実験データ(拡 張子 dat,ex3,txt((fitted encoder 処理のある場合は 5 種類))、及び実験データの詳細情報 (metadata.main.yml、metadata.data\_format.yml、metadata.data\_info.yml)が登録されている。

	FILE NAME				
	Pd-K_Pd-foil_Si111_50ms_150511.dat				
FILE NAME	Pd-K_Pd-foil_Si111_50ms_150511.ex3				
Cu-K_Cu-foil_Si111_50ms_120613.dat	Pd-K_Pd-foil_Si111_50ms_150511.bt				
Cu-K_Cu-foil_Si111_50ms_120613.ex3	Pd-K_Pd-foil_Si111_50ms_150511_fe.ex3				
Cu-K_Cu-foil_Si111_50ms_120613.bt	Pd-K_Pd-foil_Si111_50ms_150511_fe.bd				
Cu-foil.thumb.png	Pd-foil.thumb.png				
metadata.data_format.yml	metadata.data_format.yml				
metadata.data_info.yml	metadata.data_info.yml				
metadata.main.yml	metadata.main.yml				

図 12 データベースの登録データ((a)Cu-foil、(b)Pd-foil)

(b)

実験データのファイル名には、以下のような順番で測定情報が表記されている。

#### 吸収元素-吸収端-試料名-結晶面-積算時間-測定年月日-(fe).拡張子

図12の各登録データのファイル名に表記された測定情報例を以下に示す。

(a)

## (例 1) Cu-K\_Cu-foil\_Si111\_50ms\_120613.dat

吸収元素:Cu 吸収端:K端 試料名:Cu-foil 結晶名:Si(111) 積算時間:1点あたり50msec 測定年月日:2012年6月13日 拡張子:測定データ(9809フォーマット)

## (例 2) Pd-K\_Pd-foil\_Si111\_50ms\_150511\_fe.txt

吸収元素:Pd
吸収端:K端
試料名:Pd-foil
結晶名:Si(111)
積算時間:1点あたり50msec
測定年月日:2015年5月11日
fe:fitted encoder 処理あり(※)
拡張子:XAFS 解析ソフトウェア Athena で読み込み可能
(※)「XAFS データ変換プログラム」マニュアル参照

(<u>http://support.spring8.or.jp/xafs.html</u>よりダウンロード可能)

また、実験データの拡張子のファイル形式を表1に示す。

拡張子	ファイルの種類
dat	測定データ(9809 フォーマット)
ex3	XAFS 解析ソフトウェア REX2000 で読み込みが可能
txt	XAFS 解析ソフトウェア Athena で読み込み可能

表1 拡張子のファイル形式

拡張子 yml のファイルには標準試料、測定条件、測定データ、主要項目等の情報が記載され ている。これらは YAML 形式のテキストファイルであり、テキストエディタやブラウザにて 閲覧可能である(図 12)。現在、metadata.main.yml、metadata.data\_format.yml、 metadata.data\_info.ymlの3種類が登録されている。各 yml ファイル内の項目を表2に示す。



図 13 metadata.main.yml ファイル (PbO、Visual Studio Code にて表示)

表 2	yml	フ	P	イ	ルに記載	さ	n	T	い	る	各耳	頁	E
-----	-----	---	---	---	------	---	---	---	---	---	----	---	---

sample(サンプルのカテゴリ)					
chemical_formula	試料の化学式				
lot_number	試料のロット番号				
model_number	試料の品番				
name	試料名				
supplier	試料の製造会社名				
tag	本試料(main、I0-I1 検出器にて測定)				
	又は参照試料(reference、I1-I2 検出器にて測定)				
measurement(測定パラメータ	マのカテゴリ)				
category	計測法カテゴリ				
sub_category	計測法サブカテゴリ				
absorption_edge	測定元素及び吸収端				
instrument(測定器のカテゴリ	J —)				
vertical_size[mm]	4D スリットサイズ((W)幅)				
horizontal_size[mm]	4D スリットサイズ((H)高さ)				
type	測定時の IO、I1、I2 検出器の種類				
gas	I0、I1、I2 検出器に使用したガスの種類				
HV[V]	I0、I1、I2 検出器への印可電圧値				
amp_gain[V/A]	I0、I1、I2 検出器のゲイン値				
local					
measurement_time[sec]	測定開始から終了までにかかった時間				
xafs_filename_list	実験データファイル名(9809 フォーマット)				

(a) metadata.main.yml

# (b) metadata.data\_format.yml

xafs_raw_data_format(測定データのカテゴリ)	
extension	拡張子
name	項目名
unit	単位
additional_metadata	各項目の追加情報
xafs_processed_data_format(変換データのカテゴリ)	
extension	拡張子
name	項目名
unit	単位
formula	測定データからの変換式
additional_metadata	各項目の追加情報

(c) metadata.data_info.yml	
proposal_number	課題番号
access_rights	アクセス権限
data_depositor(データ記入者のカテゴリ)	
name	データ記入者の名前
organization	データ記入者の組織
contact_name(データ責任者のカテゴリ)	
name	データ責任者の名前
organization	データ責任者の組織
role	データ責任者の役割

- 4. 実験データのダウンロード
- 4-1 データのダウンロード方法
- (1) ダウンロードしたい試料の実験データにチェックを入れる(図 14)。

	Include related data files         DOWNLOAD           FILE NAME          Out         Cut         Cut <td< th=""><th>Search under folder your proposal V</th></td<>	Search under folder your proposal V
	Include related data files         DOWNLOAD           CDL         FILE NAME	I CHECKED ITEMS
> = 0 Cr  > = 0 Cs  ≠ = 0 Cu  ≠ = 0 K	<b>チェックを入れる</b>	•],
- Gobernickel	KEY	VALUE
Cu(CH3COO)2(neutral)	@system@parent_directory	/SPring-8/BL14B2/XAFS_Standard/Cu/K/111
Cu(NO3)2_3H2O	@system@uuid_register_directory	/storage/volume-01/SPring-8/BL14B2/2020-04/4b31e8e3-1c70-4f30- 974f-8aed46931ecc
- Q Cu-foil	@system@version@agent	1.0.2
🧾 Cu2O	@system@version@data_register	0.5.4
— 🏭 Cu2S	@system@version@metadata	spring8-bl14b2-2020.04.21
— 🏭 Cu3N	@subject@access_rights	open
	@subject@class_name	BL14B2
	@subject@correspondance	Industrial Application Division
	@subject@correspondance@affiliation	JASRI
	@cubioct@croato_timo_	2020.04.00.22-46-44

図 14 実験データ情報画面(Cu-foil)

(2) 画面上の「DOWNLOAD CHECKED ITEMS」ボタンを押す。zip ファイル保存メッセージ が表示されるので、任意のフォルダに保存する。

SPringe 8 Experimental Data Transfer System			UID
		Search under folder vour proposal V	
	Include related data files DOWNLOAD	CHECKED ITEMS	<u></u>
Ar i pi 1402			
L I XAES Standard	Cu-K Cu-foll Si111 50ms 120613.da	at	
	Cu-K_Cu-foil_Si111_50ms_120613.ex	3	
Au	Cu-K_Cu-foil_Si111_50ms_120613.tx		
- Ba	Cu-foil.thumb.png		
- 🛺 Ce	metadata.data_format.yml		
🛺 Co	metadata.main.vml		
> 🏭 Cr			
) 🏭 Cs			
🔟 🛄 Cu			
🚈 🟭 K			~
A 💭 111	<		>
	KEY	VALUE	~
Copper_nickel	@system@parent_directory	/SPring-8/BL14B2/XAFS_Standard/Cu/K/111	
	@system@uuid_register_directory	/storage/volume-01/SPring-8/BL14B2/2020-0	04/4b31e8e3-1c70-4f30-
— 🏭 Cu(OH)2		9741-6aed46931ecc	
🏭 Cu-foil	@system@version@agent	1.0.2	
🟭 Cu2O	@system@version@data_register	0.5.4	
🤬 Cu2S	@system@version@metadata	spring8-bl14b2-2020.04.21	
- Li Cu3N	@subject@access_rights	open	
	@subject@class_name	BL14B2	
	@subject@correspondance	Industrial Application Division	
	@subject@correspondance@affiliation	JASRI	
と 1b377948-70b0-4ec4-8434-611edc189c31.zip (102 KB) について行う強 1b377948-70b0-4ec4-8434-611edc189c31.zip (102 KB) について行う強 15番集がでたざい。	開く 保存 へ	キャンセル ×	>
mm: bententest-web03.spring8.or.jp			

図 15 実験データ保存画面(Microsoft Edge の場合)

4-3 複数データのダウンロード方法

(1) 複数のデータを一度にダウンロードしたい場合は、ダウンロードしたいデータのチェッ クボックスにチェックを入れて「DOWNLOAD CHECKED ITEMS」ボタンをクリックする(図 16(a)-(c))。

SPring 8 Experimental Data Transfer System		UID:	LOGOUT
Search under folder your proposal V DOWNLOAD CHECKED ITEMS			
Image: Spring-B         Image: Spring-B	X         Dx.         FILE NAME           C2301602.048         C2301602.048           C2301602.048         C2301602.048           C2301602.048         C2301602.048           C2301602.048         C2301602.048           C2301602.048         C2301602.048           C201602.048         C2301602.048           C201602.048         C2401602.048           C201602.048         C401602.048           C401602.028         C401600           C401602.028         C401600           C401602.028         C401600           C401602.028         C4018           C4018         C4018		× ×

図 16(a) 試料毎にダウンロードする場合



(b) 結晶面毎にダウンロードする場合



(c) 吸収元素毎にダウンロードする場合

# 改訂履歴

改訂年月日	改訂者
2020.1.7	大渕 博宣
2020.1.16	大渕 博宣
2020.4.23	大渕 博宣
2021.3.15	大渕 博宣
2022.3.30	大渕 博宣