

研究開発のためのデータベース

滋賀県立大学工学部 材料科学科

吉田 智

Valuable Databases for R & D

Satoshi Yoshida

Department of Materials Science, School of Engineering,
The University of Shiga Prefecture

日常のホームページ閲覧といえば、検索エンジンを利用するか「ブックマーク」や「お気に入り」のページをチェックするといった程度ではないだろうか？ 少なくとも筆者の場合はそうであるが、「ネットサーフィン」という言葉を最近耳にしないという事実は、日常生活におけるホームページの活用が安定期へと移行してきたことを示している。そういう意味で、インターネット黎明期に比べてホームページを「ブックマーク」に加えて貰うためのハードルは高いだろう。「ホームページ紹介」が置かれる状況は厳しいが、筆者が個人的に「あったら便利」と感じるホームページを紹介することにした。「気に入って」頂ければ幸いである。

ここでは、ガラスの研究開発に有用だと思われるデータベースを紹介したい。材料の研究開発に用いられるデータベースは、その多くが近年 CD-ROM 化の傾向にある。X 線回折の JCPDS カード (<http://www.icdd.com/>) がその例の一つであろう。それはそれでパソコンの優れた検索機能により非常に使い易くなっているのだが、次世代のデータベースは、インター

ネット上での提供というスタイルをとることになると考える。これにより、データベース提供者側も使用者側も次のメリットがある。①トータルコスト（利用コスト）の削減、②アップデート時の経費削減、③メディアの管理や破損等の問題からの解放。

このような点から、現在は会員制や CD-ROM 販売をしているようなデータベースが、近い将来インターネット上でデータのの小売り（検索一回いくらのように）へと移行することは十分考えられる。逆に使用者側としても、使う機会の少ない何十万円もする CD-ROM を購入するよりは、利用頻度に応じた支払いの方が嬉しい場合も多いだろう。実際に課金するとなると小額決算やセキュリティの問題など今後の問題は山積しているが、以下ではデモバージョンやサンプル紹介などでインターネットを果敢に活用している例を紹介する。

1. ガラスの作製

新規な組成のガラスを作製することになったとしよう。熔融温度はどうやって決定したらよいか？ 経験的には相平衡状態図を見て液相温度よりも十分高い温度で溶かすことにな

る¹⁾。「Phase Diagrams for Ceramists」は、全巻分 CD-ROM 化されている。

<http://www.esm-software.com/pd-ceramists/>
しかし、過去に決定された相平衡図がないときはどうしたらよいのだろうか?…相平衡図を作ろう!

<http://www.crct.polymtl.ca/fact/fact.htm> (図1)

F*A*C*T (Facility for the Analysis of Chemical Thermodynamics) と呼ばれるこのデータベースシステムは、数多くの純物質の熱力学データから、溶解・酸化などの化学反応による熱収支計算、蒸気圧計算、果てには2元系、3元系状態図の予測と作図をこなすという非常に優れたデータベースシステムである。1976年からシステム構築が開始されたという非常に長い歴史を持つデータベースシステムで、現在はカナダのモントリオール大学内のチームによりメンテナンスおよび改良が行われている。もともと高温プロセス冶金の研究に用いられていたよ

うであり、相平衡状態図の作成に限らず、ガラス融体と雰囲気ガスとの平衡濃度計算、そのガス圧、ガス種依存性など応用範囲は広いと思われる。このデータベースの開発者の一人であるペルトン教授は、ボウ硝清澄反応により生成する亜硫酸ガスのガラス融液への溶解度を計算している²⁾。この応用例として、バッチ反応から生じるガスの溶解度計算や減圧融液下でのガスの溶解度計算などが考えられるだろう。ガラスの高温融体の研究に、この冶金研究者の資産を使わない手はない。

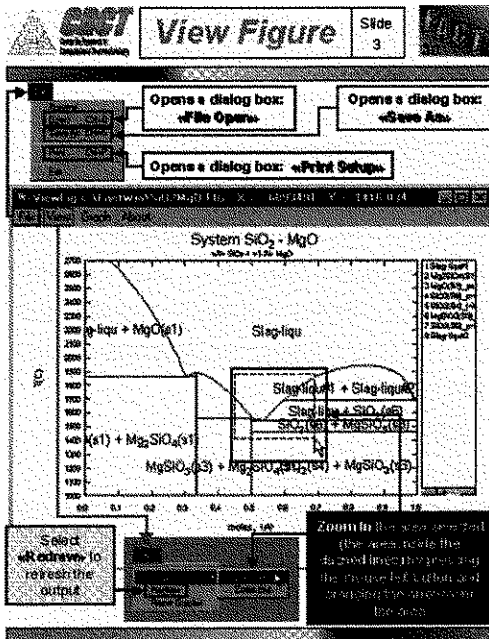
インターネット上でデモバージョンの使用が可能で、平衡計算に関しては5元素3反応に限られてはいるが、このデータベースシステムの底知れぬ可能性を感じるには十分である。その他詳細は、日本代理店(株式会社エクエストリアン MHB01560@nifty.ne.jp)へ照会されたい。

2. ガラス物性の評価

ガラスが作製できた次は物性測定である。物性測定する際に標準化された測定法を参考にしたい。そんなときは測定法の検索が必要である。JIS (<http://www.jsa.or.jp/>) では定義されていない測定法でも、ISO (<http://www.iso.ch/>) や ASTM に測定法が見つかることがある。最近の筆者の例では、共振法でバルク材の剛性率を求める計算式を至急手に入れたい状況があった。至急というのも身勝手な話ではあるが、そんなわがままに答えてくれたのが ASTM のホームページだった。

<http://www.astm.org/> (図2)

航空便はもちろんのこと、FAX 送信サービスまでである。筆者が選んだのは PDF ファイルのダウンロードである。ASTM からダウンロードできる PDF ファイルのお値段は、1部\$30。クレジットカード決済である。高いという感は否めないが速さには変えられない。現在、各社で利用が進められている小額決済のための電子



ViewFig Window : Menus

図1 F*A*C*Tのデモ画面(SiO₂-MgO系相図)

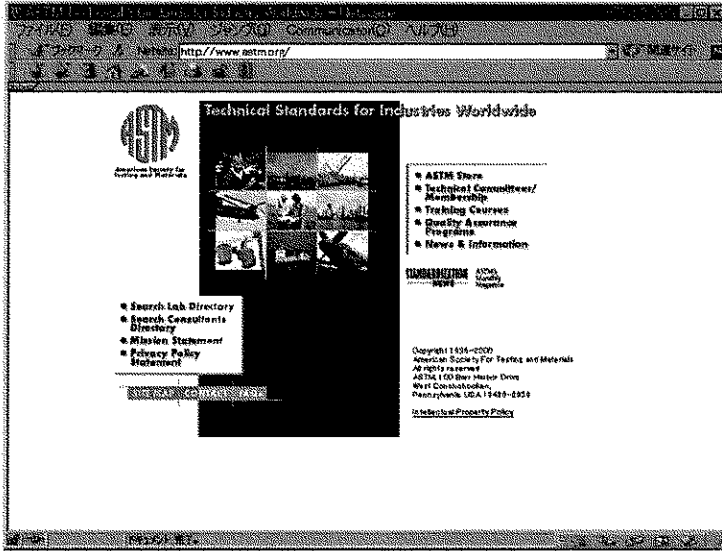


図2 ASTM ホームページ

(この画像は ASTM の許可を得て掲載されています。This image of the ASTM homepage (www.astm.org <http://www.astm.org>) has been translated with permission from the American Society for Testing and Materials (ASTM), 100 Barr Harbor Drive, West Conshohocken, PA 19428, USA.)

マネーシステムにより、必ずや低価格化するものと確信する。

物性評価ではないが、物性関係で有用だと思ったデータベースを列挙すると以下の通りである。いずれもインターネット上でのお試しサイトが存在するか、フリーに利用することが可能である。研究機関のコラボレーションにより構築されたデータベースや個人(!?)の構築によるデータベースのフリー利用に関しては、本当に頭の下がる思いである。このような個人の努力と奉仕がインターネットの可能性を増大させていくのだろう。

- ガラス物性データベース

<http://www.ngf.or.jp/> から INTERGLAD のロゴをクリック。

データ数 16 万 5 千件を誇るニューガラスフォーラムのデータベース。非会員のお試し利用も可能なのでは非アクセスされたい。

- 鉱物学用結晶データベース

<http://web.wt.net/~daba/Mineral/> (図3)

地質学研究者のためのページ。結晶構造の 3

次元アニメーションなどもあり、見ているだけで楽しい。鉱物名を発音してくれる WAV ファイルがある。格子定数などの X 線データや屈折率など 4000 を超える結晶の情報が閲覧しやすく整理されている。

- 結晶構造データベース

<http://193.49.43.4/dif/icsd/>

50000 を超える無機化合物の X 線データベース。インターネット上で化合物数 2000 件程度のデモ版の使用が可能である。元素や化合物を指定すると、該当する X 線データが閲覧でき、ポストスクリプト形式での X 線回折パターンの表示が可能。

- 音波物性データベース

<http://www.ultrasonic.com/>

固体、液体、気体の音波物性と各種圧電体の特性などのデータベース。

- 材料物性データベース

<http://www.matweb.com/>

金属・セラミックス・ポリマー・コンポジットの材料メーカー各社による物性データベース。



図3 鉱物学データベースより（石英結晶）

ガラスのデータは少ないが、詳細な物性データ（カタログデータ）と供給会社にアクセスできる点が便利。

3. 特許検索

良いものができたら特許出願である。特許検索については日米ともに非常に充実している。当に電子図書館となっており、特許番号などがわからなくてもフリーワード検索ができ、労せずして望みの情報が得られるだろう。大学に勤務しているとなかなか特許に目を向ける機会はないが、実験手法等について参考になることは多い。

- 特許庁ホームページ

<http://www.jpo-miti.go.jp/indexj.htm>

- 米国 PTO ホームページ

<http://www.uspto.gov/>

以上、ガラスの研究開発に関係すると思われるいくつかのデータベースを紹介した。長い

URL は面白そうなページでも入力するのが面倒なものである。ニューガラス誌が電子配信されて、クリック一つで該当ホームページにジャンプできるようになることを願わずにはられない。

本稿での画像引用を快諾していただいたモントリオール工科大学のペルトン教授、ASTM のメルツァー氏、鉱物学データベースのバーセルミー氏に感謝いたします。また、日本電気硝子(株)の川地伸治氏、長岡技術科学大学の紅野安彦氏には有益な助言を頂きました。ここに謝意を表します。

参考文献

- 1) S. Hayakawa, ガラスメーリングリスト「めり玻璃」.
(<http://www.ML-Hari.chem.nagaokaut.ac.jp/> より [ML-Hari:00359]).
- 2) A. D. Pelton, *Glastech. Ber.* 72 (1999) 214.