

たことも幸い致しました。

このデータベースの周辺技術であるパソコンやコンパクトディスクにおいてはダウンサイジングとコンパクト化、さらに記憶容量の飛躍的な拡大と技術革新の最中にあり、コンパクトディスクの記憶容量の制約からガラスデータとして重要な図形データ収録を見送っておりましたが、次回にはこうした事情も考慮に入れた抜本的な再検討が必要であると考えております。

終わりにになりましたが、初版に続き今回の増強版の構築にあたっては懇切なご支援をいただいた通商産業省始め関係の方々並びにユーザーの皆様方の暖かいご支援に深く感謝申し上げます。

## INTERGLAD の使い心地



東京大学生産技術研究所 安井 至

1991年4月にINTERGLADがリリースされてから、すでに、2年以上が経過した。この2年間、我々の研究室でどのような使われ方がされてきたかを簡単に記述し、あわせて新バージョンへの今後の期待などを書いてみたい。

我々の研究室では、どうも次の4種類の使い方がなされているようだ。それぞれについて、若干説明をしてみよう。

### 1. 研究を開始する際の基礎データの収録

化学屋が何か新しい研究を始めようとするときには、「ケミアブ (Chemical Abstracts) を引いて過去何年かの文献を漁ること」が最初の作業であった。しかし、当研究室では、この2年ほどで、少なくともガラス関係の研究を始める学生がまずやる仕事が変わってしまった。それは、CD-ROMをメディアとするデータベースが2種類ほど導入されたからである。勿論、一つはINTERGLADであり、他の一つは、アメリカセラミックス協会が発行しているCeramic Abstracts CD-ROM Versionである。何か新しいガラス系の検討を始めようとするとき、INTERGLADと

数時間戯れているうちに、そのガラス系がどのようなもので、どの程度の歴史があり、どの程度の研究がなされているかなどといった感触が伝わってくる。そこで、必要なデータをフロッピーディスクに落としておけば、これは、研究がある程度進んでからも再び役に立つ。(もう一方のCeramics Abstractsは、IBM系のパソコンでなければ動作しないが、検索ソフトは非常に洗練されたもので、また、検索速度も結構速いので感心してしまう。データベースの構造が、INTERGLADとは本質的に異なるが、将来は同じ様な検索方式を指向しなくてはならないかも知れない。このように、今やINTERGLADは、新しい研究を始めるときの必須アイテムになっている。特に、Ceramics Abstractsとの組み合わせは無敵コンビである。

### 2. 商品化されているガラスの確認

あるガラス組成が商品として売られているかどうかを知りたくなることがある。最近出会った例では、イオン交換用のガラスが日本で市販されているかどうか、また、そのガラスの組成はどのよ

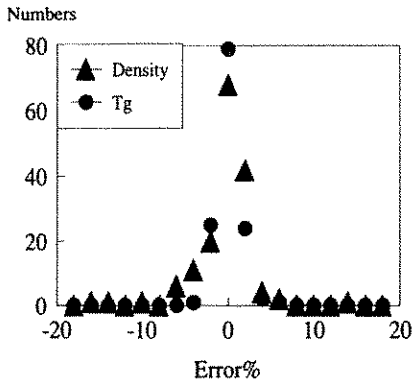


Fig. 1 フッ化物ガラスにおける実測値と多変量解析による推定値との比較。密度とTgともに、±5%程度の精度で推測可能であることを示している。

うなものであるかを調べる必要に迫られたことがある。コーニングの#0317 ガラスなどを発見して、無事に入手することができた。これもINTERGLADの効用である。

### 3. あるガラス系の物性の比較検討

4月に研究室に配属されてくる学生の教育の一環として、ある組成のガラスを作り、その密度を測定し、文献値と比較するという課題を与えている。これによって既存のデータをINTERGLADを用いて入手し、いくつかのデータを比較検討することによって、実験で得られた値の妥当性を検討することを教えている。オンラインデータベースと異なり、いくら時間がかかっても良いので、精神衛生上大変によい。

### 4. 材料設計システムへの応用、物性値の予測

おそらく最も高度な利用法が、INTERGLADのデータを利用した材料設計システムの検討であるものと思われる。酸化物系については、物性予測システムが牧島先生<sup>1)</sup>のものを始めとしていくつかあるようだが、フッ化物系、カルコゲナイド系などについては実例が知られていないので、いくつかの試みを行った<sup>2,3)</sup>。

フッ化物系について、その方法論を説明してみよう。まず、INTERGLADの中から、フッ素を一定量以上含むガラスを抽出し、ハードディスクに落とす。次に、どのような物性値が記述されているかを分類する。例えば、ガラス転移点について記述したデータは828件あった。組成を原子%に

換算し、多変量解析を行い、各物性に対する係数を求める。これは、ガラスの物性が線形であることを仮定した作業である。数回に渡る多変量解析を繰り返して、最終的には30種程度の化合物に対して係数を決定することができた。Fig. 1は、フッ化物ガラスのTgと密度の推測値と実測値との比較であり、いずれも±5%程度の誤差で一致することが分かった。

カルコゲナイド系のガラスの場合には、多変量解析が巧くできない場合も多く、物性と組成に線形な関係が成立する範囲が小さいのではないかとということが推測された。

このような作業を繰り返しているうちに、いくつもの入力ミスあるいは変換ミスではないかと思われるデータを発見し、それらは、逐一NGF事務局の西岡さんに知らせていたつもりである。新しいバージョンでは、これらの値が修正されていることを期待したい。

このようにINTERGLADはもはや必須のアイテムになった。現在のところ、CD-ROM読み取り装置がついているPC-9801は1台しかなく、ある人がそれをワープロなどに使っていると、しばらく待たされることになる。このような状況もそのうち改善され、これから2年間ほどでCD-ROM装置のないパソコンはパソコンではないといった情勢になると思うが、INTERGLADが本当に全ての研究者によって使われるようになるのは、実はそれから先なのかも知れない。バージョンIIがより多くの人々に使われることを期待している。

### 文献

- 1) 富士通製「VitrES-AI」カタログ
- 2) Itaru Yasui, Futoshi Utsuno, Computer Aided Innovation of New Materials II, pp1539-1544 (1993)
- 3) Itaru Yasui, Futoshi Utsuno, Bull. Am. Ceram. Soc., in press.