東北溶融塩データベース(TMSDB)

遠 藤 守* 山 村 力**

1. は じ め に

先端技術の開発や従来技術の洗練には手探りの実験による試行錯誤とデータの積み上げはもちろん重要であるが、系統的な研究・開発計画にはデータの検索が欠かせない。特に関連物質の物理化学的性質に関するデータの検索は開発計画の可能性評価の段階から詰めの定量的な洗練化の段階まで常に重要となるが、専門分野から少しでも離れた分野になるとデータの検索が時間もかかるし、また良質のデータに出会わずじまいになることはしばしば経験するところである。このようにデータ検索に関する需要は増える一方であり、また、その需要に応ずる多くのデータベースが構築されてもいる。内容的にも文献やデータの検索を目的としたもの、更にソフトウェアを装備して関連した分野のユーザーがデータを運用できるように高度に開発されたものなど多彩である。

溶融塩は高温において化学的に安定なイオン性融体であることから、活性金属の製錬浴として従来より用いられて来たが、近年、熱媒体、蓄熱材あるいは反応媒体などの応用として、蓄電池、燃料電池あるいは太陽エネルギー利用システム、原子炉使用済燃料の再処理などの諸工業分野で急速に広がりつつある。そこで、溶融塩の諸性質の理解と高精度の物性値の蓄積が期待されている。しかしながら、その物性値は測定方法および測定者間でばらつきがあり、それらの物性値を整理することが必要となる。

このような測定値の需要とデータに対するユーザーの需要に応えるべく、溶融塩の物性値を収録・評価してデータベース化し、ユーザーが容易に目的の温度および組成の物性値を

得ることを目的としている。また、近年のインターネットの急速な普及に伴い、インターネットを使つてのデータベースへの利用が普及してきている。本データベースも東北大学大型計算機センターの利用資格を取得すればインターネット経由での利用可能であるので、多くのユーザーに利用していただくことを期待している。

2. 東北溶融塩データベースの概要

本データベースは、液体、特に昇温することによって融解した塩すなわち溶融塩を中心に、溶融塩および半導体融体などの物理化学的性質に関する文献情報を収録し、一部の物性値については評価してデータベース化したものである。

本溶融塩データベースの構成は、文献情報と物性値の二つに分けられる。

(1) 溶融塩物性に関する文献情報(文献の著者、タイトル、文献の出版)

密度、表面張力、導電率、粘性率、拡散係数、融解エンタルピー、融解時体積増加、熱伝導度、蒸気圧、モル凝固点降下、共晶点温度、安全、毒性、および腐蝕に関する情報。

(2) 物性値(密度、導電率、粘性および表面張力)

溶融塩および半導体融体などの密度、導電率、粘性および表面張力の温度依存性を表す式の形で、各組成ごとに所蔵されている。

東北溶融塩データベースのファイルの大部分は米国レンセラー理工科大学 故 G. J. Janz 教授によって構築され、レンセラー理工科大学のメインフレーム上で運用されていた MSGDB-RPI(Molten Salts Global Data Base)から移植した

* 東北大学助手；工学部金属工学科(〒980-77 仙台市青葉区荒巻字青葉)

** 東北大学教授；工学部金属工学科

Tohoku Molten Salt Database(TMSDB); Mamoru Endo, Tsutomu Yamamura(Department of Metallurgy, Faculty of Engineering, Tohoku University, Sendai)

Keywords: database, molten salt, bibliography, property data, tohoku molten salt database; TMSDB

1996年5月15日受理

ものである。この東北溶融塩データベース TMSDB の元となった MSGDB の情報の入手は Chemical Abstract や Current Contents が主であるが、その外に個人的提供によるものが多い。特にロシア語が堪能な Janz 教授の元には東欧、旧ソ連からの情報も豊富に所蔵されている。文献データの評価を客観的に行うことは困難であるが、MSGDB では明確に定義された標準誤差(Standard Error)を百分率で表して精度(Precision)としている。標準誤差の算出には測定値の生のデータが必要であるが、文献に掲載されていない場合には著者から取り寄せている。一方、確度(Accuracy)を数値化するのは更に困難であるが、実験方法、装置、実験技術、資料の化学的純度などを詳細に検討し、異なるグループあるいは同一グループの測定値間の差異などを根拠として数値化している。

1993年度以降の文献については東北溶融塩データベース委員会が文献および物性値収集評価を行い、逐次データベース化している。物性値収集評価については、本東北溶融塩データベース(TMSDB)も MSGDB と同様の手法を用いて文献データ評価を行い精度および確度を算出している。現在、この TMSDB で評価を行っている物性データは、密度、導電率、粘性および表面張力の温度依存性および組成依存性である。

本データベースシステムは、東北大学大型計算機センターのワークステーション(cctu-unix.cc.tohoku.ac.jp)上のリレーショナルデータベース(Oracle Relational Database System)をサーバーとして、そしてデータベース検索システム(molten)をクライアントとして構成されている。したがって、ユーザーは unix システムのコマンドの一つとして molten を起動し、検索を行い、そして検索結果を画面上もしくはワークステーションのハードディスク上にファイルとして書き出すことになる。

3. 溶融塩データベースの検索方法

著者、タイトル、文献の出典(発行年)、記述子(descriptor)を指定した検索ができ、また全データからの文字列の部分一致による検索が可能である。記述子(descriptor)はいわゆる検索上のキーワードとして作用するもので、各データを特徴づける見出しである。記述子の例を挙げると、導電率(conductivity)は COND、密度(density)は DENS のようになる。

(1) 溶融塩データベースの使い方

(i) データベースの起動

まず、端末から cctu-unix.cc.tohoku.ac.jp に telnet コマンドや telnet が使えるソフトウェアで login する(このときの端末モードは vt100、もしくは UNIX の X ウィンドウのクライアントである xterm や kterm でも出力可)。溶融塩データベースを起動するコマンドは“molten”である。プロンプトがでたら“molten”と打つ。これで、molten(データベース・クライアント)が起動し Oracle データベース・サーバ

ーにアクセスすることになる。以下の記述におき、アンダーラインは端末から打ち込んだ文字、<CR>はリターンキーとする。

cctu-unix : ~{17:19}36% molten<CR>

これで、molten が起動される。

(ii) データベースの初期画面

molten が起動されると、以下の画面が端末に出力される。

←MOLTENSALT DATA QUARRING SYSTEM→

....途中省略....

COMMAND LIST FUNCTION

(1) KLIST (kl)	KEYWORD LIST (for “SEARCH” command)
(2) SEARCH (se)	KEY SEARCH—(KEY : SYSTEM)
(3) TLIST (tl)	PRINT SELECTED TITLE LIST
(4) QLIST (ql)	QUESTION LIST (SEARCH LIST)
(5) QCLEAR (qc)	CLEAR OUT QUESTIONS
(6) FILE (fi)	DATA OUTPUT (FILE)
(7) PRINT (pr)	DATA DISPLAY
(8) HELP (he)	TEACH THE USAGE OF COMMANDS
(9) QUIT (END, q, e)	END OF RETRIEVAL
(10) SSEARCH (ss)	STRING SEARCH—(KEY: TITLE, AUTHOR, DESC)
(11) PSEARCH (ps)	PROPERTY TABLE SEARCH—(KEY : SYS, DESC)

<ORACLE7—RDBMS>Connection complete.

Input Command (? : help)→

“→”のプロンプトがでたら上記のリストにあるコマンドを入力することにより検索する。このとき、入力するキーはリストの数字かコマンドをそのまま、もしくは括弧の中の省略形を入力する。例えばヘルプを見たければ、

Input Command (? : help)→?<CR>

Input Command (? : help)→help<CR>

Input Command (? : help)→he<CR>

のいずれかを入力する。そうすると再び上記のリストが現れる。とにかくわからなくなったら、“help”や“?”を入力すればよい。

(2) 検索方法

(i) 文献情報の検索

では、実際に検索しよう。まず、検索速度は遅いが、柔軟な検索ができる SSEARCH (STRING SEARCH) で例を示す。

まず、“ss”と入力する。

Input Command (? : help)→ss<CR>

そうすると

—SS→

というプロンプトが現れる。次に、簡単な使い方の説明を見るために

“?”を入力して help を出力してみよう。

—SS→? <CR>

—usage : “TAG/STRING”

— (TAG : title, auth, desc, year, sys)

—usage by Logical Ops. : →title/nano3 and auth/satoh
→#1 and title/agno3 (“#1” is the Searched No.
produced by “se/ss” command)

→#1 or #2

そうすると、タグ(TAG)とSTRING(文字列)を“/”で区切ってデータの項目とその中に含まれる文字列を指定すればよいことがわかる。TAGには、title(文献のタイトル)、auth(著者)、desc(記述子)、year(年)そしてsys(物質名)がある。

例えば、KCl という物質を検索するのであれば、“sys/KCl” またタイトルに spectroscopy を含む文献を検索するのであれば“title/spectroscopy”，記述子が COND(導電率)を含む文献を検索するのであれば“desc/COND”ということになる。また、このとき AND(論理積)と OR(論理和)を取ることによって論理演算が可能となる。

まず、KCl の密度に関する文献を探してみる。sys/KCl と desc/DENS で論理積(AND)を取ればよいので、

*Input KEYWORD (<CR> : end, ? : help)

—SS→sys/KCl and desc/dens<CR>

のように入力する。その検索結果は、

#1 : SYSTEM/KCL AND DESCRIPTOR/DENS
(298)

となり、298 個の文献が見つかったことになる。さらに、NaCl を含む文献を探すとする。こんどは、前回見つかった結果(#1)を利用して OR をとる。

*Input KEYWORD (<CR> : end, ? : help)

—SS→sys/NaCl or #1<CR>

そうすると、その検索結果は、

#2 : SYSTEM/NACL OR #1 (4801)

今度は、4801個の文献が見つかったことになる。

そして検索が終了したら<CR>(リターンキー)を打つ。

そうすると、メインメニュー画面に戻る。

(ii) 物性値の検索

物性値の検索コマンドは PSEARCH (ps) [Property Search]である。物性値の検索は文献情報の検索と同様である。前項を参照してください。ただし、物性値についてはいまのところ密度(desc/DENS)、導電率(desc/COND)、粘性(desc/VISC)および表面張力(desc/TENS)のデータだけが整理・格納されている。

(3) 検索結果の出力

次に検索結果を画面に出力、もしくは file に書き込む方法を説明する。

検索結果の出力コマンドには

TLIST(tl) : タイトルのみの出力

PRINT(pr) : すべての検索結果の出力

FILE(fi) : ファイルへの書き込み

がある。

(i) タイトルのみの出力

検索方法のところで検索した結果を出力してみる。

メインメニューから TLIST(tl) コマンドを入力する。

Input Command (? : help)→tl<CR>

そうすると次の画面が表示される。

*Input Searched No. (<CR> : end, ? : help)

#No. →

ここで、molten は出力する検索セット番号を要求してくる。検索セット番号は“#”をつけて入力する。ここでセット番号と検索セットの対応がわからなくなった場合、“list”と入力すれば検索セットのリストがとれる。

*Input Searched No. (<CR> : end, ? : help)

#No. →list<CR>

そうすると次の画面が現れる。

←search key list→

#1 : SYSTEM/KCL AND DESCRIPTOR/DENS
(298)

#2 : SYSTEM/NACL OR #1 (4801)

ここで、#2を入力すると、

*Input Searched No. (<CR> : end, ? : help)

#No. →#2<CR>

そうすると次のタイトルリストの画面が表示される。

←SELECTED TITLE DATA PRINT OUT→

ART_NUM : 1009

TITLE : Electromotive Force Measurements in the System and their Comparison with the Quasi-Lattice Theory

ART_NUM : 1031

<中略>

Hit Return Key (if ‘qCR’ then end)

ここで ART_NUM はデータ源となっている文献番号(Article Number)を示す。

続きを見なければリターンキーを入力、見たくなければ“q”を入力する。

(ii) すべての文献情報の出力

メインメニューから PRINT(pr) コマンドを入力する。そうすると次の画面が現れる。

*Input Article-number or Searched-No. (<CR> : end, ? : help)

→

これも、タイトルのみの出力と同様の操作、すなわちセット番号の入力によって文献情報を画面に出力することができる。

(iii) ユーザーファイルへの書き込み

メインメニューから FILE(fi) コマンドを入力する。

Input Command (? : help) →fi<CR>

次の画面が表示される。

*Input Article-number or Searched-No. (<CR>:end, ?:
help)

→

ここでタイトルのみの出力と同様にセット番号を入力する。ここでは、例として#2のセット番号を入力している。

→#2<CR>

これにより以下の画面のように検索結果を出力するファイル名を聞いてくるので、ファイル名を入力する。

Output file name?

[default : /usr/user2/a21362/outmol#2] :

ファイル名は任意である。良くわからない場合はそのままリターンキー(<CR>)を入力しても構わない。そのままリターンキーを入力すると outmol#2 というファイルが/usr/user2/a21362/ というディレクトリに生成されることになる。このファイルへの書き込みは、検索結果を保存したり、検索結果を他のパーソナルコンピュータやワークステーションに転送することを想定している。したがって、molten から抜けた後に生成されたファイルから検索結果を閲覧、加工そして転送することができる。

4. ま と め

本データベースの構成と使用法を概説した。溶融塩および半導体融体と物質を限定し、その代わり古いものから最新の整理された情報を迅速に入手していただくことを念頭においている。情報の正確さがデータベースの必須の条件であり、デバッグに努力しているが、誤入力をすべて見つけ出しているとは言い切れない。原論文を参照していただければより安心である。出力データには文献番号が示されているので、東北溶融塩データベース委員会に問い合わせいただければマイクロフィルムから文献をコピーしてお送りできる。

現在のところ学術情報ネットワークでのみ公開している。東北大学の大型計算機センターの利用資格を取得していないユーザーには不便をおかけしているが、より公開性の良好な、例えば WWW (World Wide Web)での一般公開も現在準備中である。気軽に当データベースを使っていただくとともに、この分野のデータを公表された場合には当データセンターに別刷りをお送りいただき、データベースの充実に御協力いただきたい。

本データベースに関する問合せは、電子メールにて [redacted] まで。また、本データベースのマニュアルを WWW<<http://ital.material.tohoku.ac.jp/>>にて公開している。

付録 1 : molten の仕様

- vt100 端末モード
- 大文字小文字の区別無し(ただし出力ファイル名は区別有り)
- SSEARCH(文字列検索)ではワイルドカード(*,?)が使用可能

付録 2 : コマンド

(1) KLIST(kl)

SEARCH コマンドのためのキーワードリスト

このキーワードリストはこの溶融塩データベースに格納されている塩のリストである。このリストにでてくる物質名を SEARCH コマンドで入力することにより、検索を行える。

(2) SEARCH(se)

物質名による検索

KLIST により出力された物質名を入力することにより、検索する(この検索コマンドは、検索速度を重視した検索を目的として用意された.)。

(3) TLIST(tl)

選択された検索結果(文献のタイトル)の出力

ここでは、検索のセット番号を入力する。このとき、セット番号の前に“#”をつける。セット番号は“list”を入力すればリストアップされる。

(4) QLIST(ql)

検索の履歴のリスト

(5) QCLEAR(qc)

検索の履歴をすべて消去する

(6) FILE(fi)

検索結果のファイルへの出力

ここでは、検索結果をファイルに出力する。このとき、検索セット番号と文献の番号を指定することができる。またセット番号の入力は、セット番号の前に“#”をつける。さらに、物性値(密度、導電率、粘性および表面張力)に関するデータが存在する場合は、記述子を指定することによって物性値を添付して出力することができる。このときは、セット番号の後に“/”そして記述子を続けて入力する。また、セット番号は“list”で確認することができる。

例)

セット番号が#3で、#3に粘性のデータがあればそれも添付して出力したい場合は、

→#3/visc<CR>

となる。

(7) PRINT(pr)

検索結果の画面への出力

ここでは、検索結果をファイルに出力する。機能は、FILE(ファイルへの出力)と同様である。

(8) HELP(he)

コマンドの簡単な説明の要求

(9) QUIT (END, q, e)

molten の終了

(10) SSEARCH(ss)

文字列による検索一(KEY : TITLE, AUTHOR, DESC)

文字列の部分一致検索を行う。このとき検索の項目を指定することができる(このコマンドは検索速度を犠牲にするが、その代わり柔軟な検索が可能となる.)。

(11) PSEARCH(ps)

物性値の検索一(KEY : SYS, DESC)

現在のところ、物性値は導電率(desc/COND)、密度(desc/DENS)、表面張力(desc/TENS)および粘性(desc/VISC)限定されている。

付録 3 : 記述子(Descriptor) リスト

BIBL	Bibliography	FEMX	Free Energy Mixing	PHAS	Phase Diagram
BK	Book	FER	Free Energy Reaction	PHYP	Physical Properties
BND	Bnd	FVOL	Free Volume	PMFE	Partial Molar Free Energy
BPT	Boiling Point	FUCL	Fuel Cell	PMT	Potentiometric
CALY	Calorimetry	FURN	Furnace	PMTT	Potentiometric Titration
CAT	Catalysis	FUSD	Fusion Diagram	POGR	Polarography
CHAP	Chapter	GAS	Gas-MS System	POL	Polarization
CHMP	Chemical Properties	GEOL	Geology	PREP	Preparation
CHRM	Chromatography	GLAS	Silicate	PRF	Purification
CMPE	Complex Formation	GLST	Glass Forming	PRTC	Peritectic
CMPF	Compound Formation	HACT	Enthalpy Activation	PVT	Equation Of State
COND	Conductivity	HBK	Handbook	RDCH	Radiochemical
CONT	Containment	HD	Enthalpy Dissociation	RDOX	Redox
CONF	Conference	HEAT	Enthalpy	REAC	Reaction
COON	Coord. Number	HF	Enthalpy Formation	RED	Reduction
CORN	Corrosion	HM	Enthalpy Fusion	RES	Resistance
CPRS	Computer Studies	HMX	Enthalpy Mixing	REV	Review
CRSG	Crystal Growth	HR	Enthalpy Reaction	RFRI	Refractive Index
CRST	Crystal Structure	HSL	Enthalpy Solution	RAM	Raman Spectra
CRTP	Critical Properties	HT	Enthalpy Transition	RSPR	Raman Spectra
CRYO	Cryoqenic	HVAP	Enthalpy Vaporization	SLAG	Slag
DEC	Decomposition	HPST	High Pressure	SLD	Solid
DECP	Decomposition Potential	HTCP	Heat Capacity	SLDE	Solid Electrolysis
DEHY	Drying Study	HIT	High Temp. Techniques	SMC	Semiconductor
DENS	Density	ICMS	Inorganic Cpd Ms System*	SOLB	Solubility
DEP	Deposition	IMBY	Immiscibility	SONC	Sonic
DIEL	Dielectric	INTP	Interface Phenomena	SPR	Spectra
DIF	Diffusion	ION	Ion	STB	Stability
DIFF	Diffusion Constant	IOX	Ion Exchange	STOI	Stoichiometry
DISB	Distribution	IPOT	Ionization Potential	STRC	Structure
DKA	Dissociation Constant	IRS	Infrared Spectra	SURP	Surface Phenomena
DPM	Dipole Moment	ISOE	Isotope Effects	SAF	Safety And Hazards
DTA	DTA	KIN	Kinetics	SVEX	Solvent Extraction
EANL	Electro-analytical	LIGF	Ligand Field	TCON	Thermal Conductivity
EACT	Energy Of Activation	LIQ	Liquid	TCOH	Heat Transfer
ECCL	Electrochemical Cell	LPST	Low Pressure	TDY	Thermodynamic Calclation
ECH	Electrochemical	MAG	Magnetics	TDYP	Thermodyamic Properties
EL	Electrode	MECH	Mechanism	TEP	Thermoelectric
ELEC	Electrolysis	MECP	Mechanical Properties	TES	Thermal Energy Strage
ELM	Electromigration	METX	Metal Extraction	TENS	Surface Tension
ELP	Electrode Potential	MISS	Molten Inorganic States	THCH	Thermochemical
ELPR	Electrode Processes	MMET	Molten Metal	THEO	Theoretical
ELPT	Electro-plating	MOB	Mobility	TRNM	Transport Number
ELRD	Electro-reduction	MPP	Melt Prep. and Pur.	TRN	Transference Number
EMF	EMF	MPT	Melting Point	TRP	Transprot Properties
ENGY	Energy	MSBT	Molten Salt Battery	TRST	Trans. Time
ENT	Entropy	MSRE	Molten Salt Reaction	UNCL	Unclassified
ENTA	Entropy Activation	MSRM	Molten Salt Reaction Media	USON	Ultrasonic
ENTF	Entropy Formation	MSRR	Molten Salt Reactor	UVIS	UV-Vis.
ENTL	Entropy Solution	MTHD	Method	VAP	Vapor Phase
ENTM	Entropy Fusion	MTGY	Metallurgy	VCHF	Volume Change On Fusion
ENTT	Entropy Transition	MTMS	Metal-Molten Salt System	VCHX	Volume Change On Mixing
ENTX	Entropy Mixing	MTR	Mass Transfer	VISC	Viscosity
ENVZ	Entropy Vaporization	NMR	NMR	VPDH	Vapor Density
EPR	Electron Paramagnetic	NTDF	Neutron Diffraction	WIM	Water In Melts
EXP	Expansion	OPT	Optical Properties	XRAY	X-ray
FE	Free Energy	NUCL	Nuclear		
		OXD	Oxidation		

* Inorganic Compound Mixtures System