基礎データベース： Pauling File の開発指針と機能

黒田 潔*¹ 多田羅尚子*² 吉田 健 司*³
陳 迎*⁴ 愛宕隆治*⁵

1. はじめに

物質や材料の分野の研究者にとって、他者が執筆した論文を参考には研究上非常に重要なプロセスの一部である。その場合、目的の論文の研究指針・思想および知見はもとより、そこに掲載された物質に関するデータそのものが重要な参考情報となることは言うまでもない。一方科学技術の発展に伴い、近年、物質や材料の分野の論文数は増加の一途をたどっている。特に一大ブームの生じた分野ではその論文数は飛躍的に増加し、その分野のみの学術論文誌が新規に発刊されることすらある。このような中、物質・材料全体の分野におけるデータ数が猛烈な勢いで増加中であることは想像に難くない。したがって研究者自らが原論文からデータを収集・整理し、それらを利用することは益々困難になってきている。ところで昨今の物質・材料の研究においては、多角的・多面的に精査することが重要となっており、実験手法や取得するデータにも様々な種類が存在し、それらの情報を俯瞰的に検討することが必要である。以上のような状況下、情報の整理・類型化、そしてより効率的・俯瞰的な材料設計支援システムの構築が求められてきている。現在はインターネット等のネットワークの普及が驚異的に飛躍しており、情報取得においてその利便性が高いことは誰しもが認めるところである。このような研究環境の情報化およびマルチメディア時代にあって、数値情報を中心とした新たなマルチメディア型のデータベース(以下 DB)の姿を求める声が大きくなってきている。

科学技術振興事業団(以下 JST)では、以上のような研究・情報環境に鑑み様々な DB の姿を模索し⁽¹⁾、1995年(平成

7年)度から合金および高分子を対象とした高機能物質データベース開発事業の一環として、合金、金属間化合物および無機物質の基礎データベース(Pauling File)の開発に取り組んでいる。2001年5月には、二元系物質・材料を格納した Pauling File の試験公開を開始した。Pauling File は、インターネット(<http://lpfb.jst.go.jp/>)を介し全ての研究者に無料で試験的に公開されており、本稿では主に Pauling File の指針、内容、機能等に関し報告することを目的にしている。

2. Pauling File の概要

JST ではミクロな現象・特性からマクロな実用材料を対象としたいくつかの物質・材料系 DB を試験公開中であるが(<http://atlas.tokyo.jst.go.jp/>)、その中間の領域に基礎データベース：Pauling File の概念を構築した。しかし Pauling File はある特定の特性・物性に特化して構成されているのではなく、それらの全てを縦横に機動的に接続・閲覧でき、更に材料設計支援システムとして利用することが可能である。

Pauling File は、JST と Materials Phases Data System 社による共同開発事業であり、インターネットを介したオンラインシステムは JST において、また CD-ROM 等のオフラインシステムは MPDS で開発することが予定されている。現在試験公開中である二元系 Pauling File の特徴は以下の通りである。

- 対象物質：二つの元素からなる金属・合金・無機物質
- 目 的：物質データ提供、材料設計支援
- データ源：1900年以降全世界主要1000誌以上の文献
- データ内容：
 - ・結晶構造(27000件以上、約2500系)

*¹ 科学技術振興事業団データベース開発部物質・材料部門情報員(〒102-0081 東京都千代田区四番町5-3)

*^{2,3} 科学技術振興事業団情報員

*⁴ 科学技術振興事業団客員研究員

*⁵ 科学技術振興事業団主任調査役

Design and Policy of the Basic Database: Pauling File; Kiyoshi Kuroda*¹, Naoko Tatara*², Kenji Yoshida*³, Chen Ying*⁴, Takaharu Atago*⁵(Japan Science and Technology Corporation, Tokyo)

Keywords: *database, materials research, materials design, alloy, intermetallic, inorganic*

2001年8月17日受理

図1 Pauling File のトップページの一部。

- ・粉末回折(実験と計算; 27000件以上, 約2500系)
 - ・状態図(8000件以上, 約2300系)
 - ・固有特性(相転移情報, 機械, 熱, 電気, 光学, 誘電, 磁気, 超伝導の各特性; 42000件以上, 約2000系)
- 〔()内はデータ件数とA-B系の系数〕
- 材料設計: 物質の持つ組成・構造・特性等を指標とし, 統計的に俯瞰, あるいは相関関係の明確化を可能とする
- ・Structure Map⁽²⁾⁽³⁾ (Pettifor type map, Quantum Structure Diagram(QSD) Quantum Formation Diagram(QFD))
 - ・統計分析
 - ・回折パターン計算プログラム

各機能, 即ちデータ検索機能および材料設計支援機能については, 次章以降に記述するので是非参考にされたい。ところで現在の二元系 Pauling File は無料提供であるが, 利用者管理のため簡単な登録制を採用している。また Pauling File プログラムはかなり大量のものであり, ライブラリの一部を Pre-install することにより, 起動時間を短縮することが可能である。図1は Pauling File のトップページの一部を示したものである。

3. Pauling File の検索機能

Pauling File は図2に示すような検索・設計機能の構造を構成している。検索機能には複数のオプションが用意されており, 本章では「Search」に続く「Element-Element Map」, 「Restrains」, および「Constitution」に関して説明する。

「Element-Element Map」: 図3がこの機能の画面である。縦横両軸に元素を列挙し, 交点の元素組み合わせで物質を検索する。データを保持していれば交点は着色され, 画面右上にはデータの種類と数が表示される。交点をクリックす

図2 Pauling File の検索・材料設計機能構造。

図3 「Element-Element Map」画面。

ることにより, 保持データのリストが表示される。

「Restrains」: 構成元素を直接選択し物質を検索する方法と, 検索希望の物性値の範囲を入力しその値にかなう物質を検索する方法があり, 画面は上部タグで切り換えられる(図4)。構成元素から検索する方法では, 一つあるいは二つの元素, もしくは族・周期を選択し検索する。原子組成比も代表的なものは選択可能である。物性範囲検索においては現在選択可能な物性値として, 「Cell parameter ratio(c/a)」, 「Superconducting critical temperature」, 「Melting temperature」がある。

検索後, 検索物質リストから特定の物質を選択すると図5に示すような画面が表示され, 上部フレーム内のボタンにより詳細情報の閲覧が可能である。各項目は以下の情報を示す。

「Detail Information」(書誌・物質情報)は論文リスト・書誌情報等からなり, 同物質を扱う異なる論文へ切り換えが可能である。物質情報には, 物質の格子定数等の基本的パラ

図4 「Restrains」画面。

図5 「Detail Information」(書誌・物質情報)画面。

メータや作製方法、各種測定方法等が記載されている(図5)。

図6は、「Structure」(結晶構造情報)における原子座標・サイト占有数等の情報である。ところでPauling Fileでは結晶構造を三次元表示するためのデータフォーマットを数種類提供している。図6に示すのはMSIフォーマットをMSI ViewerLITEで表示したものである。この表示にはplug-inが必要であり、入手先URLはDB内に記載してあるので参照されたい。現在はMSIおよびCIFフォーマットを提供している。

「Diffraction」(回折パターン情報)は、実験データと結晶構造から計算されたデータによるグラフとテーブルで表示される。

「Property」(物性情報)は、相転移情報・機械・熱・電気・光学・誘電・磁気・超伝導の各特性からなり、採択原論文に存在するデータは全て閲覧できる。

「Constitution」(状態図情報)はその物質に関する状態図を表示する。

一方図2に示すように状態図そのものの検索も可能であ

図6 「Structure」(結晶構造情報)画面とMSI Viewerによる三次元結晶構造表示画面。

図7 周期律表の状態図表示画面と状態図画面。

る。

「Constitution」: 検索には周期律表を用い、構成元素をクリックして選択する。この時構成元素を直接二つ選択すればその条件に合致する状態図を表示する。一方一つの元素のみを選択した場合、画面表示は図7のようにその選択元素ともう一つの元素の組み合わせによる状態図を周期律表で示したものになる。状態図で表示された周期律表から希望の系を選択すれば、Pauling Fileが保持するその系の状態図全てを閲覧することが可能となる。状態図はSVG形式のベクトル画像であり、表示にはSVG plug-inが必要となる。入手先URLはDB内に記載してあるので参照されたい。このSVG形式の状態図では図中の各相へのハイパーリンクが形成されており、各相の文字列から図5に示す「Detail Information」画面を表示可能である。

以上検索機能について概要を述べたが、今後も利用者の利便性を高める改良を続けていく予定である。

4. Pauling Fileの材料設計支援機能

Pauling Fileは図2に示すように「Design Tool」を持つが、本章では主に「Structure Map」とそれに続く「Quantum Structure Diagram(QSD)」に関して説明する。

図8 超伝導に関する Quantum Structure Diagram (QSD)の例[文献(3)より]。

「Structure Map」: Pauling File が提供する Structure Map には図2に示すように三方法があるが、これらの方法では物質・材料を構成する各元素の持つ特徴的な様々な値(例えば電気陰性度, イオン半径, 等)や, あるいはその特徴的な値どうしを演算することによって得られた結果の値によってグラフ化する。この時軸値の選択により, 物質は特定の位置に存在することになる。ここで物質の物性値の存在や値の範囲で表示を切り換えることにより, 物質がクラスターを作る場合がある。そのクラスター範囲内にあり, 必要な物性値を持つ新規物質を予測・開発しようというものである。

本稿では例として Villars らによる高温超伝導を含む超伝導物質に関する「QSD」について示す⁽³⁾⁽⁴⁾。「QSD」に関する原理的な詳細説明は参考文献(3), (4)を参照されたい。Villars らは構成元素の特徴的な値として三種類を選択し, いくつかの演算を施すことによって, グラフ化する際の軸を決定した。選択された元素の特徴的な値と演算式を図8に示す。二元系以上の場合でも類似した演算方法をとる。このグラフにおいて, 物性値は超伝導臨界温度である。演算により得られた値を三次元図の軸とし, その物性値によってグラフ化する。このことにより保持するデータがあるクラスターを構成すれば, その範囲に類似の物性を示す物質・材料が存在する可能性がある, というのが Structure Map のコンセプトになる。図8(a)は Martynov and Batsanov による electronegativity の差; $\Delta\bar{X}$ と pseudopotential radius の差; $\Delta\bar{R}$ のみの二次元図である。A, B, C はそのデータポイントの存在する範囲を示している。図8(b)はその A, B, C の範囲内の物質について, X 軸に平均の Number of valence electrons; N_V を, また Y 軸には超伝導臨界温度を示したものである。この図では二元系以上の物質についても採用されており, 今次試験公開している二元系 Pauling File の範囲を超えてはいるが, 超伝導物質がある程度の範囲でクラスター化されていることが分かる。ここに示された各物質は現在その存在が明らかなものであり, 未知の物質・材料でこの範囲内にあるもの, あるいはこの範囲から逸脱しているものの存在を否定するものではない。しかしながらそれを考慮の上, クラ

図9 「Quantum Structure Diagram(QSD)」設定画面。

スターを詳細に検討すれば, その範囲にある物質・材料と同様の物性を示す物質・材料を探索することが可能であると考えられる。

以上が Structure Map の概要になる。図9には「QSD」の設定画面と全データを用いた「QSD」の結果を示した画面を示す。設定できるパラメータは多種存在するが, 詳細は DB もしくは文献(2)-(4)にて確認されたい。

5. ま と め

JST における DB 開発では, 豊富なデータ量と高機能ソフトウェアの統合化, 材料の研究および設計・開発に携わる全ての研究者に検索機能・材料設計支援機能共に広く利用されること, そして最終的にその利用により大きな成果が達成されること, が目的となっている。本稿では, 試験公開を開始した基礎データベース Pauling File について報告を行った。Pauling File は検索閲覧機能と材料設計支援機能を装備する特徴を有し, 一層広範な検索・設計が可能になる。現在は試験提供版であり, 読者諸兄のご意見をもとに一層有効な DB となるよう開発を続けていく予定である。

ところで JST では, 高分子関連の DB (PoLyInFo; <http://triton.tokyo.jst.go.jp/>) についても平成13年4月より実用システムの公開を開始しており, 是非参照されたい。

文 献

- (1) 小原満穂: まてりあ, 6(1998), 449.
- (2) D. G. Pettifor: "Structure Mapping", in *Intermetallic Compounds: vol. 1, Principles*, (eds. J. H. Westbrook and R. L. Fleischer), John Wiley & Sons, Inc., (1994), 419.
- (3) P. Villars: "Factors Governing Crystal Structures", in *Intermetallic Compounds: vol. 1, Principles*, (eds. J. H. Westbrook and R. L. Fleischer), John Wiley & Sons, Inc., (1994), 227.
- (4) K. M. Rabe, J. C. Phillips, P. Villars and I. D. Brown: *Phys. Rev. B*, 45(1992-II), 7650.