The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	材料物理化学の分野におけるデータベース利用の現状と問題点
Author(s)	田中, 敏宏; 飯田, 孝道
Citation	日本金属学会会報. 1993, 32(8), p. 535-542
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/26062
rights	Copyright © 社団法人 日本金属学会
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

解　説

材料物理化学の分野における データベース利用の現状と問題点

田　中　敏　宏*　飯　田　孝　道**

1. はじめに

最近，データベースを利用した材料開発・材料設計の気運が高まり，この分野の今後の発展が期待されている．現代では，情報は貴重な“資源”であり，学術研究や産業技術の多様化と高度化を反映して急増した膨大な情報の中から，いっそう“質の高い”情報を的確，かつ迅速に入手することが求められている[1]．データベースは，このような膨大な情報を収集し，整理して評価と蓄積を行い，効率的な検索をはかるシステムとして現在および将来の高度情報化社会を支える基盤になると考えられる．

材料物理化学の分野におけるデータベースの中で，特に熱力学データベースは歴史が古く，これまで蓄積されてきた熱力学量と状態図のデータが統一的に再評価され，新たなデータの蓄積作業が進められている．また，相平衡・化学反応などを対象とし，その利用範囲の拡張が検討されている．しかしながら，従来構築されている材料物理化学系のデータベースは，特定の分野や物質系に偏っている傾向があり，今後，新材料の開発ならびにその製造プロセスの検討に必要となる分野あるいは物質系(例えば，高温における融体の熱物性，希土類元素など)については，広い温度・濃度・圧力範囲に渡って，必ずしも十分なデータが蓄積されていない．このようなことから，現状のデータベースではそれらに対する情報を求める利用者の要請に応えることができない場合が多い．また，実用材料は，一般に多成分系であり，データベースの実用性を高めるには，多成分系のデータをその基本となる純物質や2元系のデータから推算する方法の確立が必要とされているが，現状ではその基本原理についても十分な検討がなされていない．このように，既存の材料物理化学系のデータベースは，データの内容・信頼度・適用範囲のみならず，データベースの能力を実用上十分に発揮させるために必要な機能(推算・予測能力など)についても満足できる状態ではない．

データベースに関係する立場として，データの供給者，データベースの構築者，データベース利用による材料開発支援システムの構築者，および一般の利用者が考えられる．データベース構築作業における問題点は，文献(1)～(3)などに詳しく述べられている．本報では「データベースとは，情報を計算機可読の形に整理・統合した情報ファイルの集合体」[1]と考えて，データベースに収めることができる信頼性の高い基礎データの測定と蓄積，およびデータベースを利用して材料の基礎物性に関する研究を行っている立場から，材料物理化学の分野におけるデータベースの現状と問題点について述べる．

2. データベースの分類，ならびに材料工学におけるデータベースの歴史的な発展状況

データベースには種々の分類法があるが，便宜上表1のよ

表1　データベースの分類[1]．

案内情報	文献情報 目録・参考
事実情報	文字情報 数値情報 式形情報 図形情報

* 大阪大学講師；工学部材料開発工学科(〒565 吹田市山田丘2-1)
** 大阪大学教授；工学部材料開発工学科
Current Status and Some Problems in Physico-chemical Databases of Materials; Toshihiro Tanaka, Takamichi Iida (Department of Materials Science and Processing, Faculty of Engineering, Osaka University, Suita)
Keywords: *database, materials, physical chemistry, thermodynamics*
1993年6月7日受理

うに分類ができる．本報では，主として「事実情報」を扱うファクトデータベースについて話を進める．なお，文献情報に関するデータベースについては，文献(4)が参考になる．

さて，ヨーロッパでは，1950～60年頃から，ドイツ，イギリス，フランスなどの一部に，熱物性値など古くから蓄積されていたデータや，また欧州共同体委員会が行った高温材料に関する共同研究成果などのデータベース化が検討されるようになっていた．例えば，熱力学データについては，NPL(National Physical Laboratory，英国物理研究所)においてMTDATAというデータベースが作られ，JANAF熱化学表の値を用いてロケットの推力を予測し，解析する計算システムが当時構築されていた[5]．その後，ヨーロッパや北米において，利用者が国際通信網を介して各国の材料データベースを相互に利用しようという提案がなされ，例えば，熱力学データについては後程述べるSGTEやFACTなどのデータベースが構築されている．材料に関するデータベースの歴史については，文献(6)に分かりやすくまとめられている．

また，1966年から自然科学の分野を中心に，国際科学連合評議会の科学技術データ委員会CODATAが，重要な科学技術データの質，信頼性，処理方法，運用方法，入手方法などについて，各分野を越えて改善を図ることを目的とした活動を行っている[6]．この組織には欧米のほかアジア諸国や旧ソビエトも含まれており，活動の報告書として会誌“CODATA Bulletin”が発行されている．一般に欧米の材料データベースの活動に関する情報は多いが，CODATA Bulletinを見ると，アジア諸国のデータベース活動に関する会議報告[7][8]やアジア各国における材料データベースを扱っている研究機関の一覧表[9]も収録されている．なお，1986年に山崎によるCODATAの会議報告が文献(10)に，また，横川によって熱力学データベースに関連したCODATAの活動状況が文献(11)に分かりやすく解説されており，CODATAの活動を知る上で参考になる．

日本では，文献情報センターとして知られている日本科学技術情報センターJICSTが，1988年から材料物性に関するファクトデータについて，電話回線によるオンラインサービスを行っており，同時に，STNインターナショナルという科学技術情報の国際ネットワーク組織の一員となって，アメリカ化学会情報センターCASとドイツ専門情報センターFIZとともにネットワークを作り，活動を進めている[6][12]．

3. 材料物理化学の分野におけるデータベースの現状

(1) 熱力学データベース

材料物理化学系データベースとしては熱力学データベースが代表的なものであり，その構築状況を**表2**に示す．表中のSGTE(The Scientific Group Thermodata Europe)はヨーロッパにおける研究所，大学を中心とするグループが共同で構築した熱力学データベースで，MTDATA, Thermo-Calc, THERDASなどの構築グループもSGTEのメンバーである[13]．それらのメンバーは，SGTEのデータベースを共同利用するとともに，各グループ独自の熱力学データベースおよび応用ソフトウエアと組合せたデータベースシステムを作っている．表2に示した熱力学データベースの多くは，合金の状態図に関連して発展したデータベースであり，これらについては石田ら[14]やBaleとEriksson[15]による詳しい解説がある．状態図を中心とする熱力学データベースの構築はCALPHAD法とよばれ，系統的な熱力学データの整理が行われている．CALPHAD法[16][17]は，1973年にアメリカのL. Kaufmanの提唱により結成された「計算状態図」に関する国際的な研究グループによる状態図解析方法で，相平衡や活量などに関する実験データを基に，熱力学的解析とコンピュータ計算に基づいて状態図を作成する手法である．年に4回程度，会誌“CALPHAD”が発行されている．表2のMTDATAやCSIROは当初製錬プロセスの解析・検討を目的にして構築された熱力学データベースである．状態図を基本にしたデータベースも，現在，総合的な熱力学データベースにまで内容が充実しており，これらのデータベースを利用して材料開発や製精錬プロセスの解析・検討に積極的に応用されるようになっている[18]-[28]．また，表2のMALTは，国産の熱力学データベースであり，構築中の諸問題ならびにその応用に関する詳しい報告が，山内，横川によってなされている[29][30]．

表2　各国の主な材料熱力学データベース[5][13]-[15]．

FACT	カナダ	オンラインサービスも可
Manlab	アメリカ	L. Kaufmanが構築
CSIRO	オーストラリア	SGTE, JANAFのデータベースも利用
HSC	フィンランド	純成分が主体
MTDATA	イギリス	SGTEのデータベースも利用
THERDAS	ドイツ	水溶液も対象(SGTE)
THERMODATA	フランス	文献情報もある(SGTE)
Thermo-Calc	スウェーデン	化合物半導体データベースもある(SGTE)
SGTE	ヨーロッパ	4ケ国7研究機関のグループ
MALT (MALT2)	日本	純成分が主体
データの主な内容	純成分：各相における比熱，変態熱 溶　体：過剰自由エネルギ	
主な対象物質	純金属，合金，無機化合物(酸化物，塩その他)の各相(気相，液相，固相)	

(2) 熱物性・融体物性に関するデータベース

材料物理化学系データベースとして，各種プロセスの解析・開発のために，融体の粘度，熱伝導度，表面張力，密度などの物性に関するデータベースの充実を図る必要がある．特に，金属・合金液体，酸化物融体に関するものは十分な整備

がなされていない．ただし，文献の形で各種物性値に対するデータの整理が行われており，International Metals Review などに掲載されている(例えば，液体鉄合金の表面張力[31]，液体金属・合金における拡散係数[32]，熱伝導度[33]，溶融スラグの粘度，密度，電気伝導度，表面張力[34]など)．常温で液体である無機化合物や，溶融塩については粘度・表面張力などに関するデータベースが構築されている．したがって，液体金属・合金，酸化物融体のデータベース構築の遅延は，実験データの蓄積，測定に関する計測学的検討，および高温液体に対する物理化学的検討が十分でないことに起因すると考えられる．

化学工業で対象となる無機化合物に関しては，各種熱物性値のデータベースが数多く構築されており，その中にはオンラインでデータを得ることができるシステムもある．例えば，国内でも JICST の TH というデータベース[1][35]は熱力学的性質，粘度，拡散係数，熱伝導度，表面張力などの物性を取り扱っている．また，TPPF[1][36]や PROPATH[37]という流体の熱物性値データベースもある．ただし，液体金属・合金ならびに酸化物融体は含まれていない．

米国の NIST (National Institute of Standatds and Technology) では，**表 3** に示すようなデータベースを構築している[38]．NIST のデータベースには，表 3 に示すように予測プログラムやアルゴリズムに関するシステムも含まれている点が興味深い．これらの中で例えば，「溶融塩の物性データベース」は密度，粘度，電気伝導度，表面張力についてのデータベースであり，320種類の純成分，約4000の主として 2 元系のデータが整理されている．

また，米国の ES Microware 社の TAPP (Thermochemical and Physical Properties) というデータベース[39]には，高温の液体金属も含む各種物性値(固体，液体，あるいは気体における結晶構造，密度，熱膨張に関する物性値，弾性に関する物性値，粘度，熱伝導度，表面張力，各種熱力学的性質など)と状態図が整理され，まとめられている．さらに，ドイツのアーヘン工科大学理論冶金研究所は，冶金関係の液体に対する熱伝導度，電気伝導度，粘度，拡散係数についての KINDAS というデータベースを構築中である[40]．なお，英国の NPL では，SLAG という名の溶融スラグの物性値(粘度，密度，表面張力など)に関するデータベースが開発されており，英国のいくつかの企業ですでに利用されている[41]．

表 3　NIST のデータベースの例．

- 化合物の質量分析データベース
- photoelectron & Auger spectral データベース
- 気相反応に関するデータベース
- セラミックスの熱および機械的性質に関するデータベース
- JANAF の熱力学データベース
- 水溶液中の溶質の活量および浸透圧に関するデータベース
- 298 K における有機化合物の熱力学的性質推定アルゴリズム
- 溶融塩の物性データベース
- 有機化合物の化学的性質に関する，構造からの予測システム
- hydrocarbon 系物質の熱力学的性質および輸送的性質(粘度と熱伝導度)データベース
- 耐火物質の熱力学データベース

(3) その他，化合物半導体，アモルファス合金，超伝導物質に関するデータベース

化合物半導体の気相成長プロセスに関する検討のために，関ら[42]によって構築されたデータベースがあり，そこでは主として気相-固相平衡が取り扱われている．同じく化合物半導体の液相-固相平衡に関するデータベースとして，石田ら[43]，大谷ら[44]によるシステムがある．アモルファス合金については，東北大学金属材料研究所でデータベースが構築されている[45]．また，超伝導物質に関するデータベースは，近年特に重点が置かれ，その構築が急がれている代表的なものであり，産官学共同研究として進められている．これについては文献(6)に，現状ならびに問題点がまとめられている．

4. 材料物理化学の分野におけるデータベースの問題点

ここでは，前節で引用した参考文献に述べられている各種ファクトデータベース構築上ならびに利用上の問題点の中で，特に共通して指摘されている課題，および著者らが直面している問題点を整理してみる．

(1) データの標準化

データベースでは，そこに収められている共通のデータを複数の利用者が同時に使用することができる．この際，すべての利用者のために，データの保存方法の標準化を図る必要がある．標準化の課題としては，**表 4** に示すような問題がある．例えば，金属の定圧比熱 C_p をデータベース化する場合，共通に認識できる次式でデータを整理し，各係数(a, b, c, d, e)の値だけがデータベースの中に保存されている．

$$C_p = a + b\cdot 10^{-3}\,T + c\cdot 10^{5}/T^2 + d\cdot 10^{-6}\,T^2 + e\cdot 10^{8}/T^3 \quad (1)$$

この場合，利用者はこのデータの保存形式とその意味を十分理解しておく必要がある．なお，表 4 のデータの標準化の問題については国際的な組織による活動が行われている[46]．

表 4　標準化の課題[6]．

(1) 材料の表記方法の統一
(2) 用語と記号の統一
(3) データ交換方法の統一
(4) データ報告様式の基準
(5) データの評価方法の統一

(2) データの分布状況

現状のデータベースでは，これまでの実験データについて蓄積・整理が行われているので，特定の分野や物質に偏っている傾向がある．したがって，現在のデータの分布状況を正確に把握し，データの蓄積が少ないが今後重要になると考えられる分野や物質の選定を行い，それらに関する系統的なデータの蓄積作業を行う必要がある．

(3) データの推奨値の選択および信頼度の評価・表示

実用上の熱物性値のデータは，実測による正確な数値そのものが要求されるが，文献に与えられている実測値には，大きな相違が見られることが多いため，通常はデータの推奨値が選定される．しかしながら，推奨値が与えられると，ただ1つの実験データから推奨されたデータも，100個のデータから決定されたものも同じ重みで扱われる危険性がある．したがって，データの信頼性の表示が必要であり，また，その推奨値に関する元の情報・出典も参照できるデータベースの構築が望まれる．

(4) 解析表現でのデータの収録

いくつかの温度・濃度に対するデータが表示されているシステムもあるが，利用者の立場からは，解析表現でのデータの収録および表示も求められている．例えば，10 K ごとに比熱のデータが示されるよりも，それらを温度の関数とした式で与えられるほうが利用者にとって便利である．比熱の場合，温度を関数としたほぼ共通の式が知られているので，それに合わせてデータの整理が可能である．しかしながら，合金の混合熱などに関しては，そのデータの濃度・温度依存性を記述するために一定の規則が必要となる．この場合の規則とは，混合熱を表す熱力学モデルを意味し，そのモデルの濃度・温度式における係数が複数の利用者の間で共通に認識されるものでなければならない．この点については，例えば，合金の過剰自由エネルギの場合，**表5**に示すようなモデルが提案されており，代表的な熱力学データベースではこれらが共通のモデルとして採用されている．表5のモデル[47][48]は，現時点で一般にその妥当性が評価されて，一連のデータがモデル式の係数に変換され，データベース化されている点に注意すべきである．したがって，各種物性について経験則や物理的背景の明確なモデルの構築がなされていなければ，その物性値に関するデータベース化が困難であるとも考えられる．

表5　過剰自由エネルギの主なモデル．
各モデルの詳細は文献(47)(48)参照．

合金融体	・Redlich-Kister-Muggianu の式 ・Kaufman-Kohler の式 ・Sundman-Agren による多重副格子モデル (侵入型元素を含む溶体も取り扱える)
イオン性融体	・Hillert-Jansson-Sundman-Agren による2重副格子モデル ・Pelton の2重副格子等価モデル ・Pelton-Blander による擬化学モデル
酸化物融体	・Gaye-Kapoor-Frohberg のセルモデル
希薄合金溶体	・改良型 Wagner の式
水溶液	・Pitzer の式

(5) 実験技術の充実の必要性

前記(2)で述べたように，今後データベースの構築を進めるにあたって，測定値の蓄積を系統だてて行う必要がある．ただし，測定方法の中には，物性値の絶対値が直接得られず，相対法として得られるものや，絶対法であっても，その測定装置の校正のために，特定の条件下で正確な値がわかっている物質(標準物質)が必要な場合が多い．常温の測定では，多くはこの種の標準物質が整備されているが，高温では，標準値のみならず標準物質すら明確に定められていない場合が多い．したがって，データベースの構築を考える際，測定方法および標準物質の選定，ならびにその標準物質による標準値の決定までを含めた系統的な実験データの蓄積が急務である．例えば，EC の Community Bureau of Reference を中心に，高温の酸化物融体に関する 0.1～10 Pa·s の粘度範囲における粘度測定用標準物質の選定ならびに粘度値の決定作業が行われており，著者らのグループもこのプロジェクトに参加している[49]．

(6) データベースを実際の解析に利用するソフトウエア

熱力学データベースの場合，溶体の自由エネルギについては最小限の数値が収められており，各成分の活量などは個々に収められていない．この際，利用者の有するプログラムまたはソフトウエアが，成分の活量を計算できる機能を有していなければデータベースの利用価値は半減する．熱力学データベースに関しては，多くはほぼこの要請を満たしているソフトウエアがすでに準備されている[14]．例えば，SGTE の熱力学データベースに直結できる ChemSage[47][48]というソフトウエアでは(1)各種熱力学関数値の計算，(2)化学平衡・相平衡の計算，(3)物質移動を伴う反応容器内の定常状態の計算を行える機能が組み込まれている．表2に示した THERDAS は SGTE のデータベースとこの ChemSage というソフトウエアの組合せからなるデータベースシステムである．この種のソフトウエアでは，かなり複雑な相平衡計算も可能であり，種々の応用例が報告されている[16]-[28]．また，利用者が扱い易いソフトウエアが求められており，例えば，前述の TAPP というデータベースでは，**図1**に示す初期画面において周期律表の元素をマウスで指定すればその元素および元素の組合せからなる化合物に関する物性値や状態図が表示される．この種の取扱いは表1の HSC や Thermo-

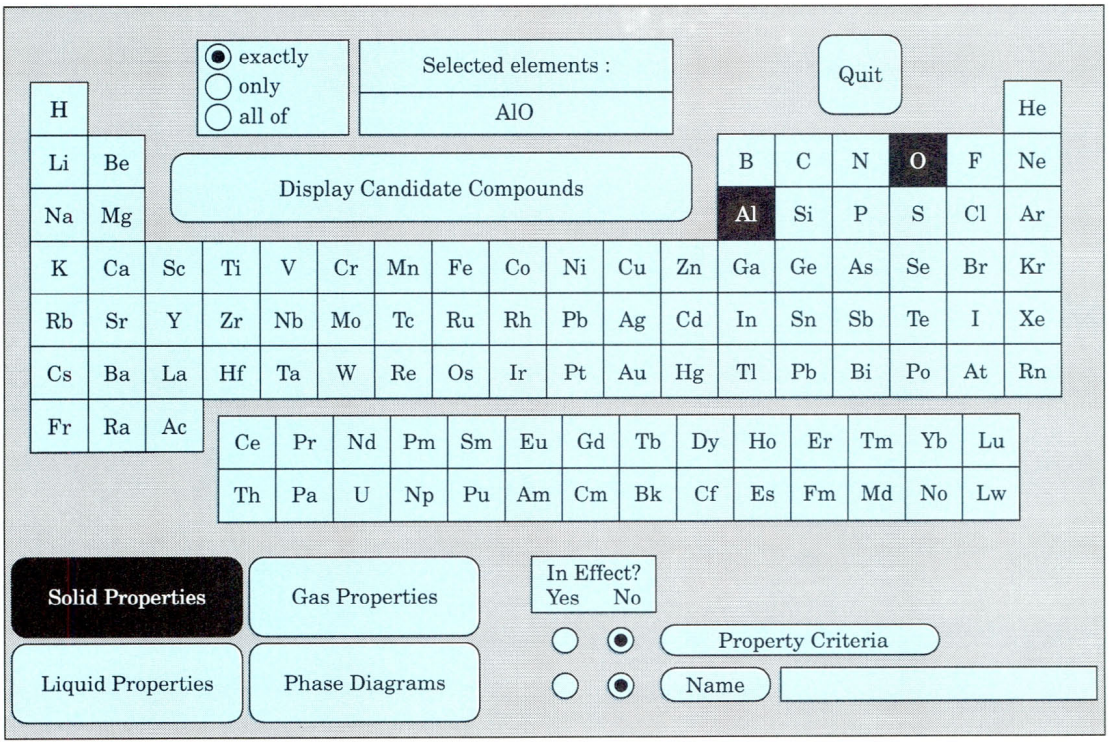


図1　TAPP(Thermochemical and Physical Properties Database)の初期画面.

Calc でも用いられている.

(7) 物性値の推算・予測

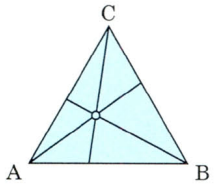
データベースの利用者が，常にいっそう信頼性の高いデータを求めるのは言うまでもないことである．しかしながら，信頼し得るデータがなければ，不確かさの範囲が大きくとも，その旨を付記したデータは実用上の要求を一応満たすことになる[1]．例えば，単体および2元系化合物の熱力学データは比較的よく整備されているが，3元系以上の多元系化合物では極端に利用可能なデータが少なく，また信頼性も乏しい．実用材料では多元系化合物が多いことを考えれば，研究開発の現場で熱力学データベースを使うには，欠落している情報を補うための何らかの工夫が必要である[50]．すなわち，データベースシステムには，物性値の推算・予測機能が不可欠であると考えられる．合金系では，格子安定性・混合則などの理論的検討がなされており，計算機による推算・予測が行われている．しかしながら，セラミックス系などでは，混合の性質をどのように熱力学的に記述するのかというモデル構築の検討が遅れているため，評価活動と機能的に連動しておらず，今後の理論的検討の進展が望まれている[5]．このように物性値の推算・予測の問題は，データベースを利用して新たな知見を得ることを期待する利用者にとって重大な問題であり，また，今後のデータベースの発展方向を検討する上でも大切な課題である．

5. 物性値の推算・予測法の具体例

前節で述べたデータベースの構築に関わる諸問題についてはそれぞれの文献に詳しく述べられているので，ここでは物性値のデータベースを有効に利用する場合に重要な“推算・予測”の問題について述べることにする．

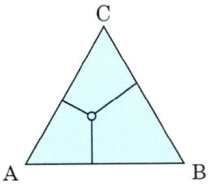
(1) 与えられたデータの外挿・内挿および2元系の組合せから成る多成分系に対する物性値の推算

前述のように，物性値の温度・濃度・圧力依存性が理論的に解析されており，共通のモデルが存在すれば，それを利用したデータの内挿あるいは外挿が可能である．これはCALPHAD法の利点のひとつとして評価されている．また，単体や2元系合金の物性値に比べて，多成分系の物性値のデータの蓄積量は少ないことから，多成分系の物性値を純物質および2元系合金から推算する方法の検討が，熱力学量については，古くからなされている．例えば，3元系合金の混合熱をその3元系を構成する各2元系から推算する方法として，**図2**のようないくつかの近似法[51]が考案されている．最近では，余と徳田によって新たな近似モデルが提案されている[52]．熱力学量以外の物性値の場合，3元系以上の多元系への拡張については多くの問題が残されている．



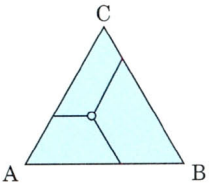
Kohler:

$$\Delta H=(x_A+x_B)^2\Delta H_{AB}(x_B/x_A)+(x_B+x_C)^2\Delta H_{BC}(x_C/x_B)+(x_C+x_A)^2\Delta H_{CA}(x_A/x_C)$$



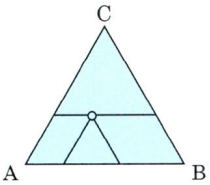
Muggianu:

$$\Delta H=\frac{4x_Ax_B}{(2x_A+x_C)(2x_B+x_C)}\Delta H_{AB}\left(x_B+\frac{x_C}{2}\right)+\frac{4x_Bx_C}{(2x_B+x_A)(2x_C+x_A)}\Delta H_{BC}\left(x_C+\frac{x_A}{2}\right)+\frac{4x_Cx_A}{(2x_C+x_B)(2x_A+x_B)}\Delta H_{CA}\left(x_A+\frac{x_B}{2}\right)$$



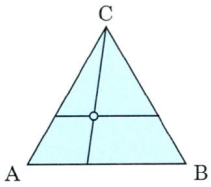
Colinet:

$$\Delta H=\frac{x_B}{1-x_A}\Delta H_{AB}(x_A)+\frac{x_C}{1-x_B}\Delta H_{BC}(x_B)+\frac{x_A}{1-x_C}\Delta H_{CA}(x_C)$$



Hillert:

$$\Delta H=1/2\left(\frac{x_A}{1-x_B}\Delta H_{AB}(x_A)+\frac{x_B}{1-x_A}\Delta H_{AB}(x_B)\right)+\frac{x_B}{1-x_C}\Delta H_{BC}(x_C)+\frac{x_A}{1-x_C}\Delta H_{CA}(x_C)$$



Toop:

$$\Delta H=(x_A+x_B)^2\Delta H_{AB}(x_B/x_A)+\frac{x_B}{1-x_C}\Delta H_{BC}(x_C)+\frac{x_A}{1-x_C}\Delta H_{CA}(x_C)$$

図2　3元系溶体における混合熱の近似法
各近似法の詳細は文献(51)参照.

(2) 実験値がない系の物性値に対する理論的・半経験的・経験的推算

この問題については数多くの研究がなされているが[(2)(53)-(59)]，本報では具体例として著者らの最近の研究[(60)-(66)]について述べる.

著者らは，特に液体合金中の無限希薄溶液における溶質元素の部分モル自由エネルギ $\bar{G}_B^E$ に着目し，その推算方法について検討を行ってきた．この $\bar{G}_B^E$ が分かれば，合金の形成能が判断でき，また，希薄溶液における活量，溶解度，蒸発能などさまざまな情報が得られる．まず著者らは，部分モル溶解熱 $\bar{H}_B$ と部分モル過剰エントロピ $\bar{S}_B^E$ の間に，経験的な粗い近似であるが，直線関係が成り立つことが指摘されている点に着目し，自由体積理論に基づいた統計熱力学溶体モデルを考え，次の式(2)～(6)に示す両者の関係式を導出した.

$$\bar{G}_B^E=RT\ln\gamma_B^0=\bar{H}_B-T\cdot\bar{S}_B^E \quad (2)$$

$$\bar{H}_B=\Omega_{AB} \quad (3)$$

$$\bar{S}_B^E=3/2R[(L_A-L_B)^2/L_AL_B+\{4U_AU_B-2\Omega_{AB}(U_A+U_B)-(U_A+U_B)^2\}/2U_AU_B] \quad (4)$$

$$L_X=1/2(2^{1/2}V_X/N_0)^{1/3} \quad (X=A\ \text{or}\ B) \quad (5)$$

$$U_X=-685\beta_X^2T_{m,X} \quad (X=A\ \text{or}\ B) \quad (6)$$

ここで，γ_B^0 は成分Bの無限希薄状態の活量係数，Ω_{AB} は成分A-B間の相互作用エネルギ，V_X は純成分Xのモル体積，N_0 はアボガドロ数，$T_{m,X}$ は純成分Xの融点，β_X は純成分Xの固体および液体状態の融点における原子振動数の比を表す(文献(59)に各種金属に対して β_X の値が掲載されている.).

上式より，$\bar{H}_B$ すなわち Ω_{AB} が分かれば，$\bar{S}_B^E$ および部分モル自由エネルギ $\bar{G}_B^E$ を求めることができる．例えばMiedemaの半経験則[(58)]を利用して任意の溶媒・溶質元素の組合せに対して部分モル溶解熱 $\bar{H}_B$ を求めることができる．このように，例えば，溶鉄中における一連の希土類元素に対する活量係数の推算も可能である[(63)]．また，以上の検討から，$\bar{H}_B$ と $\bar{S}_B^E$ の関係は温度に依存することが明らかになり，さらに無限希薄溶体における溶質の部分モル過剰エントロピの導出など，物理化学の基礎事項に対しても様々な情報を得ることができた．このモデルは3元系の溶液に対して拡張可能であり，希薄溶体におけるWagnerの相互作用パラメータの推算にも利用できる[(65)]．さらに，無限希薄溶体のみならず2元系合金の全濃度範囲にわたって拡張でき，混合熱から過剰エントロピや過剰自由エネルギの推算が可能である[(60)(66)]．上記のモデルはベルギーのKatholieke大学でPTP(Prediction of Thermodynamic Properties)という液体合金の熱力学量の推算プログラムにも組み込まれており，1993年度のCALPHAD会議でも紹介されている[(67)].

(3) 既存の熱力学データベースを利用した物性値の推算

熱力学データベースに収められているデータを液体の物性値の評価に利用することができれば，既存の熱力学データベースの利用価値を高めることができるだけでなく，液体物性の理解のためにもきわめて有意義である．著者らは，データの蓄積が十分でなく，また実験の困難さが指摘されている2元系合金液体の表面張力に着目し，Butlerの式[(68)]に基づいて，L. Kaufmanらのグループが CALPHAD法によって構築した熱力学データベースを用いて一連の液体鉄基2元および3元系合金に対する表面張力の計算を行った[(69)]．また，粘度についてはBattezzatiら[(70)]および平居[(71)]が，平衡状態図の液相線温度から2元系合金液体の粘度を計算する方法を提案している．この場合，熱力学データベースを利用し，CALPHAD法によって合金成分の活量と状態図を計算できれば，表面張力および粘度の推算も可能となる．著者ら

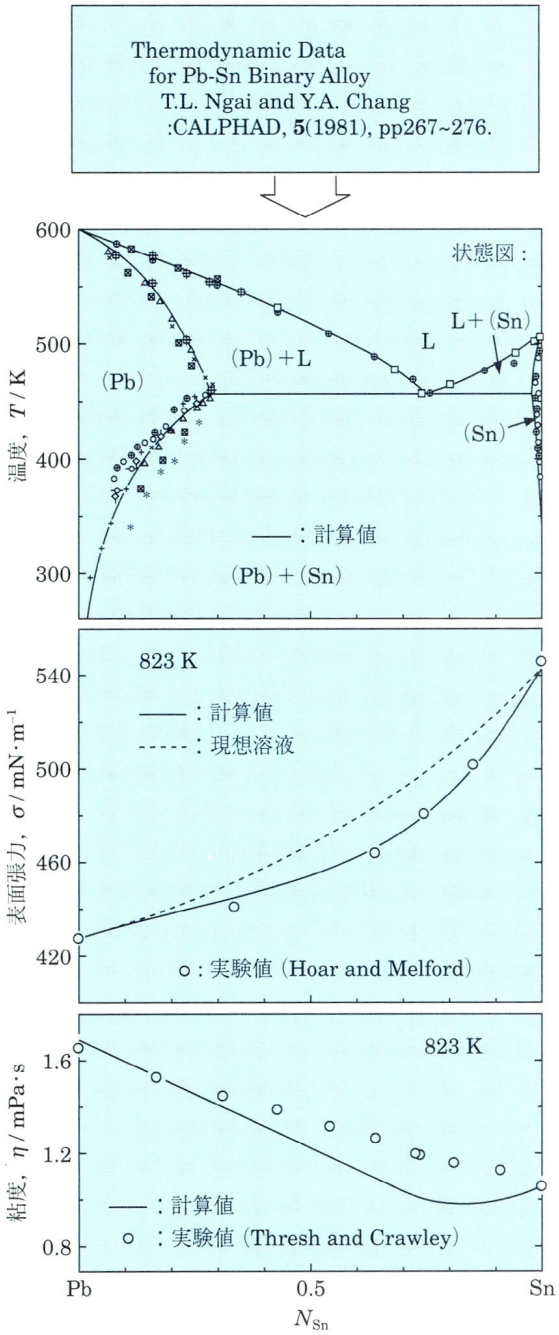


図3　Pb-Sn 系合金の状態図・表面張力・粘度の計算.

は電子材料の接合用マイクロソルダリング材についてこの方法を適用し，基本的物性値として重要な液相線温度，表面張力，粘度が，一組の熱力学データから推算できることを示した[72]（**図3**）．また，この手法は多成分系への拡張も可能である．液体の基本的物性である密度については，熱力学量からの推算例もあり[73]，著者らも検討を進めている[66].

上記以外の物性値についても，特に多成分系について熱力学量をパラメータとしたモデルや推算方法が提出されればきわめて有意義であり，今後，データベースの利用価値を高める上で，また次世代のデータベースを構築する上で重要な課題である.

6. データベースを利用した材料開発支援システムの構築

データベースを材料開発・材料設計のための道具として積極的に利用する試みが，さまざまな分野でなされるようになってきた．例えば，エキスパートシステムを利用した材料開発支援システムの構築はその一例である[74]-[79]．その他，データベースの材料開発への利用に関しては，文献(80)に“Intelligent Utilization of Materials Information”と題した特集が組まれている.

7. おわりに

将来，材料データベースは，本報で述べたようにエキスパートシステムなどの推算・予測システムとの結合が行われ，知的材料設計（コンピュータによる材料の設計）に利用されることになるであろう．日本におけるデータベースの整備は欧米に比べて立ち後れていることがしばしば指摘されているが，欧米における既存のデータベースにおいても上述のような種々の問題点が残されている．材料開発に対して発揮できる独創的な概念・機能性を取り入れたデータベースの開発は，材料工学の分野において今後取り組むべき重要な課題と考えられる．データベースの問題は情報工学の分野，あるいは過去の実験データの単なる整理と考えられがちであるが，内容の充実した高機能データベースシステムの構築を図るためには，材料の基礎物性に関する研究に依存する点が多い.

材料物理化学の分野におけるデータベースは，対象が広範囲であり，また現時点では未公開の個人あるいは小組織内で構築されたデータベースも数多くあると考えられる．したがって，著者らの能力および不勉強の問題もあるが，すべての分野における現状と問題点をここで述べることができなかった．本報がいささかなりともこの分野の研究に資すれば幸いである.

文　献

（1）蒔田　董：新熱測定の進歩，**1**(1990), 59.
（2）三島良績，岩田修一編：新材料開発と材料設計学，ソフトサイエンス社，(1985).
（3）J. R. Cuthill, N. A. Gokcen and J. E. Morral (ed.): *Computerized Metallurgical Databases*, The Metall. Soc. Inc., (1988).
（4）千原秀昭，時実象一：化学情報―文献とデータへのアクセス―，東京化学同人，(1991).
（5）横川晴美，山内　繁：熱測定の進歩，**4**(1986), 19.
（6）西島　敏：21世紀の材料設計，堂山昌男，小川恵一，北田正弘編，アグネ承風社，(1991), 203.
（7）CODATA Bulletin, No. 3, Vol. 23, (1991).
（8）CODATA Bulletin, No. 3, Vol. 22, (1990).

(9) CODATA Bulletin, No. 3, Vol. 21, (1989).
(10) 山崎正人：情報管理，**29**(1986), 743.
(11) 横川晴美：新熱測定の進歩，**1**(1990), 125.
(12) 板山和彦：ケミカルエンジニヤリング，**33**(1988), 731.
(13) I. Ansara and B. Sundman: *Computer Handling and Dissemination of Data*, Ed. by P. S. Glaeser, Elsevier, North-Holland, (1987), 154.
(14) 石田清仁，大谷博司，西沢泰二：新熱測定の進歩，**1**(1990), 50.
(15) C. W. Bale and G. Eriksson: Can. Metall. Q., **29**(1990), 105.
(16) 西沢泰二：日本金属学会会報，**31**(1992), 389.
(17) 西沢泰二：状態図の基礎から応用まで(金属学会セミナーテキスト)，日本金属学会，(1987), 19.
(18) R. G. Gallagher, K. Hack, M. Simons and P. J. Spencer: Steel Research, **56**(1985), 7.
(19) 田中敏宏，今井規雄，森田善一郎：鉄と鋼，**75**(1989), 432.
(20) P. J. Spencer and H. Holleck: High Temp. Sci., **27**(1990), 295.
(21) M. Lahtinen and L. E. K. Holappa: Scan. J. Metall., **19**(1990), 137.
(22) P. J. Spencer and K. Hack: Swiss Chem., **12**(1990), 61.
(23) K. Hack and P. J. Spencer：新熱測定の進歩，**1**(1990), 39.
(24) 横川晴美：新熱測定の進歩，**1**(1990), 9.
(25) 横川晴美：化学工学，**54**(1990), No. 10.
(26) E. Königsberger, E. Schuster, H. Gamsjäger, C. God, K. Hack, M. Kowalski and P. J. Spencer：熱測定，**19**(1992), 135.
(27) H-J. Li and M. Tokuda: Steel Research, **64**(1993), 39.
(28) 松宮　徹：知的材料設計，日本金属学会分科会シンポジウム予稿，(1993), 29.
(29) 山内　繁：熱測定，**12**(1985), 142.
(30) 横川晴美：熱測定，**12**(1985), 144.
(31) B. J. Keene: Intern. Mater. Rev., **33**(1988), 1.
(32) P. Kubiček and T. Pepřica: Intern. Metals. Rev., **28**(1983), 131.
(33) P. G. Klemens and R. K. Williams: Intern. Metals. Rev., **31**(1986), 197.
(34) K. C. Mills and B. J. Keene: Intern. Mater. Rev., **32**(1987), 1.
(35) 江里口恭子，志村和樹：ケミカルエンジニヤリング，**33**(1988), 723.
(36) 蒔田　董：ケミカルエンジニヤリング，**33**(1988), 711.
(37) プロパス・グループ：新熱測定の進歩，**1**(1990), 101.
(38) 問合先：Standard Reference Data, NIST, U. S. Department of Commerce, Gaithersburg, MD 20899, USA.
(39) "TAPP(A Database Thermochemical And Physical Properties)", ES Microware, Inc., (1991).
(40) CODATA Bulletin, No. 1, Vol. 22, (1990), 87.
(41) K. C. Mills: NPL Materials Metrology News, Issue 1, Autumn, (1991).
(42) 関　　寿，纐纈明伯：新熱測定の進歩，**1**(1990), 23.
(43) K. Ishida, H. Tokunaga, H. Ohtani and T. Nishizawa: J. Crystal Growth, **98**(1989), 140.
(44) H. Ohtani, K. Kojima, K. Ishida and T. Nishizawa: J. Alloys and Compounds, **182**(1992), 103.
(45) T. Nakanomyo, Y. Akiyama, T. Itoh, S. Wada, N. Mori, A.-P. Tsai and Y. Kawazoe: Sci. Rep. RITU. Ser. A, **37**(1992), 228.
(46) 金尾正雄，新居和嘉，新谷紀雄：鉄と鋼，**74**(1988), 207.
(47) G. Eriksson and K. Hack: Metall. Trans. B, **21B**(1990), 1013.
(48) 田中敏宏，飯田孝道：熱測定，**18**(1991), 174.
(49) T. Iida and T. Tanaka: Proc. of 4th Inter. Conf. on Molten Slags and Fluxes, Sendai, ISIJ, (1992), 444
(50) 横川晴美：セラミックス，**26**(1991), 433.
(51) R. Lück, U. Gerling and B. Predel: Z. Metallkde., **77**(1986), 442.
(52) J-Z. Yu and M. Tokuda: Sci. Rep. RITU. Ser. A, **37**(1992), 279.
(53) 日本金属学会分科会シンポジウム予稿：知的材料設計，(1993).
(54) 堂山昌男，山本良一編：計算材料科学，海文堂，(1987).
(55) 荒井康彦，宮本　明，亀山秀雄，山口　兆：計算機化学工学，オーム社，(1992).
(56) 山本良一編：材料の物性予測，丸善，(1989).
(57) 日本金属学会会報，特集「計算機による材料設計」，**31**(1992) No. 7.
(58) F. R. de Boer, R. Boom, W. C. M. Mattens, A. R. Miedema and A. K. Niessen: *Cohesion in Metals*, North-Holland, (1988).
(59) T. Iida and R. I. L. Guthrie: *The Physical Properties of Liquid Metals*, Clarendon Press, Oxford, (1988).
(60) T. Tanaka, N. A. Gokcen and Z. Morita: Z. Metallkde., **81**(1990), 49.
(61) T. Tanaka, N. A. Gokcen and Z. Morita: Z. Metallkde., **81**(1990), 349.
(62) T. Tanaka, N. A. Gokcen, Z. Morita and P. J. Spencer: Anales de Fisica-Ser. B, **86**(1990), 104.
(63) T. Tanaka, N. A. Gokcen, D. Neuschütz, P. J. Spencer, Z. Morita: Steel Research, **62**(1991), 385.
(64) T. Tanaka, N. Imai, A. Kiyose, T. Iida and Z. Morita: Z. Metallkde., **82**(1991), 836.
(65) T. Tanaka, N. A. Gokcen, P. J. Spencer, Z. Morita and T. Iida: Z. Metallkde., **84**(1993), 100.
(66) T. Tanaka, N. A. Gokcen, Z. Morita and T. Iida: Z. Metallkde., **84**(1993), 192.
(67) K. C. H. Kumar *et al.*: Abstract of CALPHAD meeting, Catalonia, Spain, (1993).
(68) J. A. V. Butler: Proc. Roy. Soc. A., **135**(1935), 348.
(69) T. Tanaka and T. Iida: Steel Research, **64**(1993), in press.
(70) L. Battezzati and A. L. Greer: Acta Metall., **37**(1989), 1791.
(71) 平居正純：鉄と鋼，**78**(1992), 399.
(72) 田中敏宏，飯田孝道：日本金属学会春期大会講演概要，(1993), 268；田中敏宏：材料化学におけるデータベース利用の現状と問題点，日本金属学会分科会シンポジウム予稿，(1993).
(73) S. Srikanth: Z. Metallkde., **82**(1991), 841.
(74) 山崎正人：システムと制御，**27**(1983), 752.
(75) 大河内 真：情報管理，**30**(1988), 1143.
(76) 平野　徹：材料科学，**26**(1989), 216.
(77) 平尾一之：セラミックス，**26**(1991), 420.
(78) 井上博之，牧島亮男：日本金属学会会報，**31**(1992), 604.
(79) 星本健一：知的材料設計，日本金属学会分科会シンポジウム予稿，(1993), 41.
(80) *Computer Aided Innovation of New Materials*, Ed, by. M. Doyama *et al.*, North-Holland, (1991).