

# 結晶構造をはじめとする多くの状態図を研究や教育に活かす

## SpringerMaterials 利用事例

Volker W. Blum 氏に聞く

### SpringerMaterials との関わりについて教えてください。



SpringerMaterials のチームと共同作業するようになってから2年ほどになります。もっとも、私はその前から SpringerMaterials を利用していました。物理学者となって以来、Landolt-Börnstein シリーズを大いに利用していたのです。実際、私が初めて SpringerMaterials チームのことを知ったのも、私がデータベースをどのように改善できるかを考え、フィードバックをチームに送ったのがきっかけです。

以来、私たちの協力関係が続いています。私は Landolt-Börnstein シリーズのうち、半導体に関するコンテンツをデジタル化する作業をサポートしていました。現在では機械でデータを読み取り、SpringerMaterials Interactive\* に組み入れることができます。

私たちのチームは、冊子体の書籍から複雑なデータを抽出する独自のコードとソフトウェアツールを開発する研究プロジェクトに取り組んでいます。SpringerMaterials からはその実現に向け、研究プロジェクトの資金をサポートいただいております、互いにベネフィットがある協力関係を築いています。

SpringerMaterials のチームは、データベースの改善には、私のような専門家との協働が必要だと考えています。一方、私は莫大な数の貴重なデータを全てデジタルプラットフォーム上から入手できるようにする作業をサポートし、そこから得られるメリットを享受しています。このプラットフォームを通じてデータを交換し、研究上必要な情報を入手することができるのです。

### SpringerMaterials を利用する価値とは？

現在の材料科学はデータ駆動型の科学です。研究者は計算法を使用することにより、材料のほとんどの物理特性を計算することができます。しかし、ベンチマークの設定や計算値の検証には、実験データが必要となります。そこで Landolt-Börnstein が役立つわけです。なぜならそこには、慎重に選別された大量の実験データが収録されているからです。以前は、そのデータは書籍のなかに埋もれており、簡単にアクセスすることはできず、ソフトウェアツールにエクスポートすることも容易ではありませんでした。



Volker W. Blum

### 教育利用 ケーススタディ

\*SpringerMaterials Interactive の特長

1. 検索結果の統合表示：  
様々なドキュメントに散在していたデータセットからの検索結果を一目で確認可能
2. インタラクティブ・プロット：  
選択したパラメータ軸（圧力、温度等）に基づきデータプロットをカスタマイズ
3. 材料比較：  
複数の材料特性を対照比較
4. 物性範囲検索：  
物性範囲を指定して材料を検索可能（例えば屈折率が1.60以上の材料をすべて検索する等）



「SpringerMaterials は、  
入手が難しいデータを検索できる  
素晴らしいリソースです。  
SpringerMaterials を利用すれば、  
時間を節約することができます」



## 授業で使う メリット

このコンテンツを機械可読データに変換すれば、研究者はそのデータを簡単にワークフローに組み入れることができます。

また、このような古いデータセットを失わないようにするだけでも非常に重要な意味があると考えています。その価値は莫大なものです。私が SpringerMaterials とともにやっている仕事とは、そのようなデータセットを保全し、21 世紀に伝えるための支援でもあるのです。

## SpringerMaterials を授業で使うメリットは？

材料科学の講義を行う際には、SpringerMaterials を利用し、学生が調べることができるデータソースを示せます。そうすれば学生はデータソースを探しに外出する必要もなく、自らの手で一からやり直す必要もありません。例えば、私が講義を受け持った学生が取り組む最終プロジェクトには、簡単な材料のセットに関する材料特性の計算が基本的に含まれているものがあります。全ての学生は、それぞれ異なる材料に集中的に取り組んでいます。

次に学生が必要とするのが、何らかの出発点となるものです。例えば、シミュレーションしようとしている材料の格子パラメータが必要となることがあるでしょう。その場合、その情報をどこで見つければよいのでしょうか。答えは明らかです。SpringerMaterials を検索すれば見つかります。ですので、私は講座の教材として SpringerMaterials を学生に紹介するようにしています。もうひとつ、バンドギャップも例としてあげられます。例えば、

実験的に求めたバンドギャップを検索し、彼らの計算結果と比較するように学生に求めることがあります。そしてその情報も、SpringerMaterials に掲載されているのです。

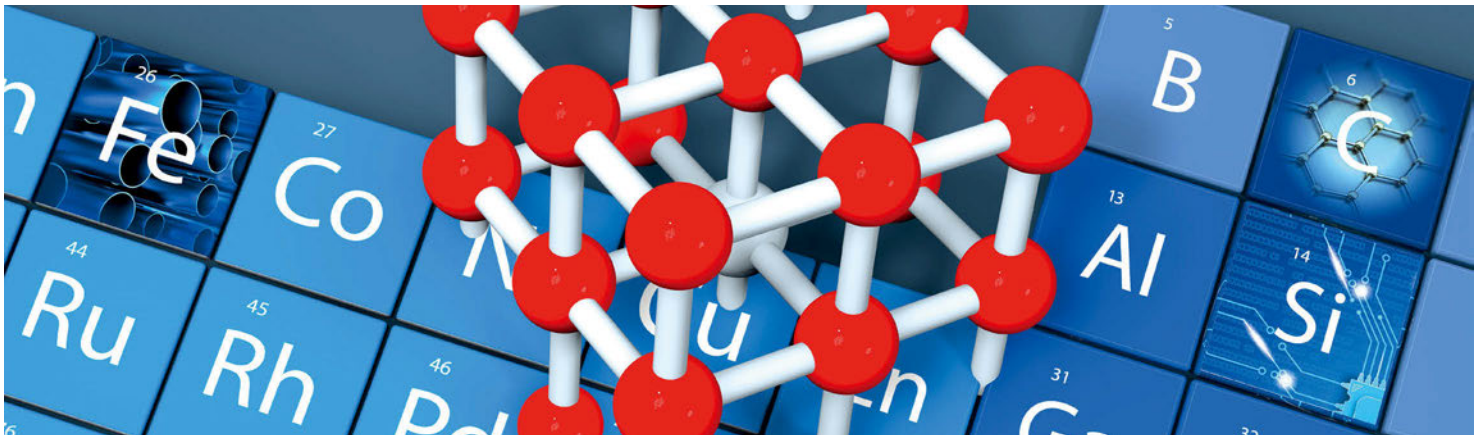
このように、計算材料科学の教育に利用できること、そして参照データのある場所を示すことができる点にとっても大きな価値があります。また、散在している参照データでさえもまとめて検索可能となっていることを教えられるだけでも、非常に重要な意味を持っています。

The screenshot displays the SpringerMaterials website interface. The search bar contains 'anisotropic optical properties', resulting in 93 search results. The left sidebar shows filters for Properties (e.g., band gap, nuclear magnetic resonance spectrum) and Discipline (e.g., biophysics, electromagnetism). The main content area shows search results for 'anisotropic optical properties', including a section for 'Systematics of Semiconductor Data' and 'Available properties of Gallium Nitride'. The 'Available properties of Gallium Nitride' section lists properties like Debye Temperature, Grüneisen Parameter, Hall Coefficient, etc., with the number of data points for each. The 'Band Gap of gallium nitride (GaN)' section shows a table of tabular data with columns for Band gap (eV), Temperature (K), Data Origin, Reference, and Comments and Labels.

Property	Number of data points	View
Debye Temperature	2	View
Grüneisen Parameter	81	View
Hall Coefficient	18	View

Band gap (eV)	Band gap	Temperature (K)	Data Origin	Reference	Comments and Labels
3.17	$E_{g,dir}$	300.0	experiment	Collaboration (2002) citing Petalas (1995)	ellipsometry, energy gap (β-GaN)
3.21	$E_{g,dir}$	300.0	experiment	Collaboration (2002) citing Powell (1993)	transmission, energy gap (β-GaN)
3.22	$E_{g,dir}$	300.0	experiment	Collaboration (2002) citing Lacklison (1995)	reflectivity, energy gap (β-GaN)
3.231	$E_{g,dir}$	300.0	experiment	Collaboration (2002) citing Ramirez Flores (1994)	photoreflectance, energy gap (β-GaN)



### SpringerMaterials を利用すると、どのくらいの時間が節約されますか？

難しい質問ですね。はっきりとお答えすることはできません。なぜなら、材料の特性によって大きく左右されるからです。特に簡単な材料データを検索するような場合には、Google 検索でもまずまず正確な結果を得ることができるでしょう。例えば、シリコンの格子パラメータを検索する必要がある場合には、Google で検索すれば答えを得ることができます。

しかし、詳細なデータの場合には、SpringerMaterials が必要になります。材料科学に関して発表された論文は、莫大な数になります。したがって、生み出されたデータの量も、使用されているデータも莫大な量になります。そしてこのようなデータの範囲の広さが、必要とする具体的なデータを検索することを非常に難しいものになっているのです。

SpringerMaterials は、入手が難しいデータを検索することができる素晴らしいリソースです。SpringerMaterials を利用すれば、時間を節約することができます。例えば、半導体に関する領域では、異方性光学特性に関するデータを非常に簡単に検索することができます。半導体の光学特性は、これから多くの研究がなされるであろう分野です。しかし、特定の材料に関する高品質の光学特性データを検索することは簡単ではありません。この類の詳しい情報を見つけることができるのは、実のところ SpringerMaterials 以外にはありません。

### SpringerMaterials データベースの最も重要な要素とは？

これまでに私が最も多く利用してきたのは状態図、特に結晶構造です。結晶構造の CIF ファイルを同じレベルまで収集するという事は非常に重要ですし、多くの人々が必要とするものでもあります。SpringerMaterials では、このファイルの標準化が非常に高いレベルで進められています。だからこそ、多くの人々が SpringerMaterials を利用しているのです。個人的には、慎重に測定された電子特性を必要としています。電子特性は実際に計算することが可能であり、さらに同僚が作成した新材料の測定値と比較することもできます。これこそが私たちが必要とする情報です。より複雑な材料に関する情報を探す時には、そもそもその材料に関する情報が存在するのかどうかを確認する必要があります。その場合も、私はやはり SpringerMaterials を利用するでしょう。



「SpringerMaterials と同じ機能を持っているものは他に知りません。キュレートされた信頼性の高いデータこそが、SpringerMaterials を真に特別なものとしている要素なのです」



Volker W. Blum

デューク大学（機械工学・材料科学部）准教授

## 講義で状態図を使用されていますか？

学部生向けの講義は、どちらかというと材料科学への入門編です。この講義で特に重要な要素をひとつ具体的にあげれば、ある固体の平衡構造とはどのようなものであるかを求め、それが何かを明らかにすることがあります。

初めて状態図を目にした人は、それが何であるのかが分かりません。そのため、少なくとも2回の講義、さらに課題と試験では、状態図とその読み方を取り上げています。

SpringerMaterials に記載されている状態図のコレクションに非常に価値がある理由は、まさにそこにあります。なぜなら、そこで見つけることができるのは1つの状態図だけではないからです。詳しく調べれば、さまざまな人々が発表したさまざまな状態図があることが分かります。そして、どの状態図が正しいのかが分からなければ、その状態図を調べる必要があるのです。

したがって、講義ではSpringerMaterials の状態図が特に役立っています。私は実際にそれを講義で使用し、学生に状態図を解釈する方法を教えています。ですので、私の学生はSpringerMaterials を利用する方法を完璧に身につけています。SpringerMaterials はまさに必須情報、すなわち基本の材料データベースなのです。

## 最後に、他に使用されているデータベースはありますか？ またその違いについても教えてください。

他にもデータベースはありますが、SpringerMaterials と同じ機能を持っているものは知りません。精選された信頼性の高いデータこそが、SpringerMaterials を真に特別なものとしている要素なのです。

SpringerMaterials についてさらに詳しく  
[https://go.sn.pub/jp\\_springermaterials](https://go.sn.pub/jp_springermaterials)



シュプリンガー・ネイチャー インスティテューショナル・マーケティング  
• Email: [jpmarket@springernature.com](mailto:jpmarket@springernature.com)