

AtomWork Adv.

無機材料データベース
<https://atomwork-adv.nims.go.jp>



国立研究開発法人 物質・材料研究機構
National Institute for Materials Science

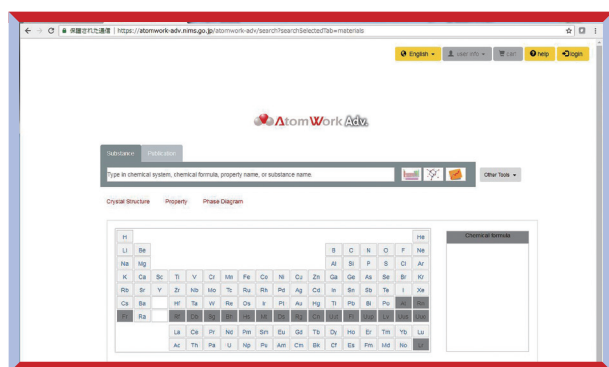
無機材料データベース AtomWork Adv.

約1,000種類の科学技術ジャーナルの文献から抽出した無機材料の結晶構造、X線回折、特性、状態図に関するデータを収録したデータベースです。

内 容	データ	結晶構造：379,736 件 X線回折：689,445 件 特 性：504,325 件 (特性種：508 件) 状態図：47,347 件 2023年12月時点での件数 データ拡充していく予定
	ツール	検索機能 材料マトリクス 特性チャート
利用方法	Webページにアクセスして利用	
契約形態	無料のトライアルユース (最長72時間、閲覧のみ ページ閲覧数は上限あり) 年間定額 (アカデミック割引があります)	

検索機能

化学成分系・化学式・物質名・プロトタイプ・ピアソン記号・空間群番号や特性名など様々な方法でデータを検索することが可能です。



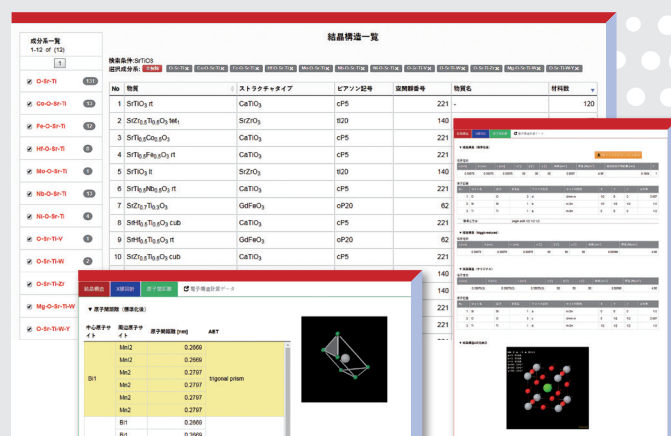
結晶構造データ 379,736 件

下記にあげる情報に加え、3D画像が表示されます。3D画像は任意の角度からの構造を視覚的に確認することができます。

データのダウンロードは、結晶構造データ (CIFファイル) 提供となります。

表1 詳細で表示される情報 (結晶構造)

物質情報	物質名・化学組成、ストラクチャタイプ、ピアソン記号、空間群名・番号
試料情報	原材料、合成方法
結晶構造決定方法	試料形状、実験方法、温度
格子定数決定方法	試料形状、実験方法、スペクトル
結晶構造データ(標準化後)	格子定数、原子配置
その他情報	原子間距離、参考文献情報など

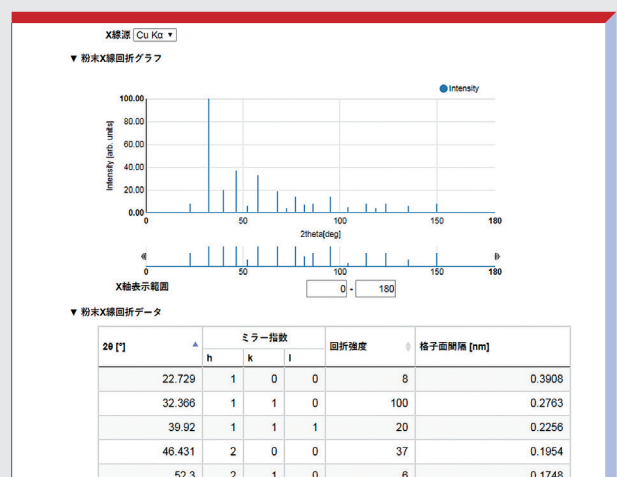


X線回折データ 689,445 件

実験データと計算データについての情報・グラフが表示されます。グラフでは表示範囲の変更、表ではソートが行えます。

表2 詳細で表示される情報 (X線回折)

X線源ごとのX線回折グラフ	x軸：2θ、y軸：インテンシティ
X線回折データ (表形式)	2θ、ミラー指数、回折強度、格子面間隔



特性データ 504,325 件 (特性種 508 件)

特性カテゴリを7つ用意しております (電子・電気特性、磁気特性、機械的特性、光学特性、相変態、超伝導特性、熱・熱力学特性)。カテゴリに特性が分類され、それぞれの特性名にて検索を行えます。

検索した特性値一覧のほか詳細情報として物質ごとの情報が表示できます。データのダウンロードは、物質ごとの特性値一覧(TSVファイル)の提供となります。

表3 詳細で表示される情報 (特性)

物質情報	物質名・化学組成、ストラクチャタイプ、ピアソン記号、空間群名・番号、結晶構造データへのリンク
指定した特性データ	特性値、温度、文献情報

The screenshot displays a search result for 'electron concentration [m⁻³]'. It shows a table with columns for No., Symbol, electron concentration [m⁻³], and a detailed description of the material and its properties. Below the table, there is a section for '特性一覧' (Property List) which provides a summary of various physical and electrical properties for the selected materials.

状態図データ 47,347 件

状態図の画像とともに、個々のフェーズ (相) の一覧等が表示されます。

データのダウンロードは、状態図の画像データ (PNGファイル) とフェーズの一覧 (TSVファイル)、概要・文献情報 (TSVファイル) の提供となります。

表4 詳細で表示される情報 (状態図)

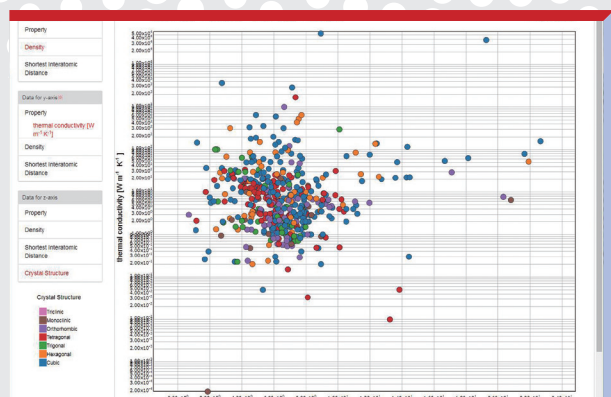
概要	状態図種別、成分範囲、温度範囲、作成方法、APDIC
フェーズ一覧	フェーズ、ストラクチャタイプ、ピアソン記号、空間群名・空間群番号、上限・下限温度、結晶構造データへのリンク
その他	文献情報

The screenshot shows a search result for '状態図一覧' (Phase Diagram List). It includes a table with columns for No., 状態図 (Phase Diagram), 成分名 (Component Name), 下限温度 [°C] (Lower Temperature [°C]), 上限温度 [°C] (Upper Temperature [°C]), 組成率 (Composition), and 発行年 (Year). Below the table, there are detailed views of phase diagrams, including a ternary diagram and a binary phase diagram, with associated data and literature references.

便利ツール

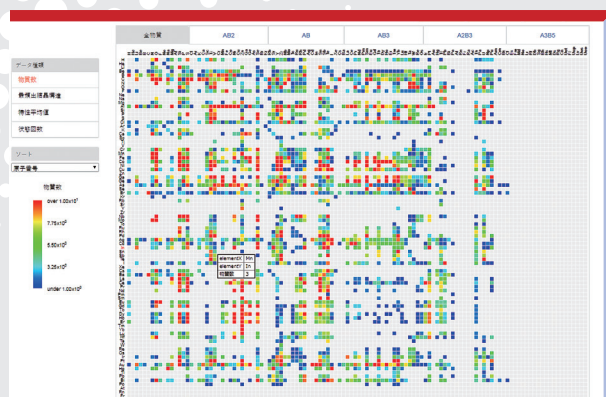
● 特性チャート

縦軸・横軸・階層に対して、異なる対象 (特性・密度・最近接原子間距離) を選択すると、データが収録されている物質がプロットされます。プロットからその物質の結晶構造一覧ページに移動でき、簡単に特性データや状態図データを確認することができます。



● 材料マトリックス

縦軸・横軸の元素の組合せの収録データ数を色で表すマトリックスを表示します。組成比ごとにもマトリックスを確認することができます。色表示は、物質数の他に、最頻出結晶構造、特性平均値、状態図数に変更することができます。



ライセンス形態

ライセンス名	利用単位	エリア制限	認証方式		一定量データのダウンロード(※1)	割引適用
			ID/パスワード	IPアドレス		
シングル	1 ユーザ	なし	あり	—	可能	—
シングル IPアドレス	1 ユーザ	あり(※2)	あり	あり	可能	あり
グループ	10 ユーザ	なし	あり	—	可能	—

(※1) ダウンロード件数は5,000件

(※2) アクセス元のグローバルIPアドレスをご登録いただきます。登録されたグローバルIPアドレスからのみ利用可能です。

年間利用料

ライセンス名	価格(税別)(※2)	支払い方式
シングル	150,000 円	クレジットカード、銀行振込
シングルIPアドレス	(※1) 100,000 円	クレジットカード、銀行振込
グループ	900,000 円	クレジットカード、銀行振込

(※1) 公共・アカデミア割引適用価格 50,000 円(税別) (※2)

(※2) 国内法に基づき、消費税を加算します。

お問い合わせ先

国立研究開発法人物質・材料研究機構 (NIMS)
技術開発・共用部門 (RNFS)
材料データプラットフォーム



AtomWork-Adv.サイト (<https://atomwork-adv.nims.go.jp>)
上記サイトの「お問合せ」よりご連絡ください。