

ICDD の活動

井田 隆

名古屋工業大学先進セラミックス研究センター
〒507-0071 岐阜県多治見市旭ヶ丘 10-6-29

Activities of ICDD

Takashi Ida

Advanced Ceramics Research Center, Nagoya Institute of Technology
10-6-29, Asahigaoka, Tajimi, Gifu 507-0071, JAPAN

This article is intended to describe the activities of the International Centre for Diffraction Data (ICDD). ICDD is a non-profit, non-governmental scientific organization, dedicated to collecting, editing, maintaining, publishing, and distributing powder diffraction data. The ICDD membership consists of worldwide representation from academe, government, and industry. ICDD also provides assistance to the scientific community through a variety of approaches.

Keywords: International Centre for Diffraction Data, powder diffraction

1. はじめに

国際回折データセンタ (International Centre for Diffraction Data、略称 ICDD[®]) は 1941 年に米国で粉末回折法による化学分析のための合同委員会 (Joint Committee on Chemical Analysis by Powder Diffraction Methods) として発足した。この組織と日本の科学者との繋がりは弱いものではなく、日本結晶学会の創設に尽力されたと言われる [1] 東京大学鉱物学教室の竹内慶夫先生が 1985 年に [2]、また東京工業大学応用セラミックス研究所に所属していた石澤伸夫先生が 2000 年 [3] に、いずれも日本結晶学会誌の「談話室」欄で、丁寧に JCPDS-ICDD の紹介をされている。現在これらの記事は科学技術情報発信・流通総合システム (Japan Science and Technology Information Aggregator, Electronic 略称 J-STAGE) において、無料で閲覧することが可能となっている。

2016 年に筆者が日本人としては初めてこの ICDD という組織の運営を指揮する評議会 Board of Directors の一員 (Director-at-Large) として選出されたことも本稿を執筆する動機となったが、石澤伸夫先生の解説記事が出版されてからもう 16 年になっており、ICDD の最近の活動を紹介する記事を本研究センターの年次報告として出版し、Web サイトから広く公開することには意義があると思う。

筆者が ICDD のデータと初めて出会ったのは、理学部化学科の学生のとき、大学の図書館においてであった。化学科の学生は多様な化学分析手法を学ぶが、そのような分析手法の多くは化学組成や官能基の存在を知り得るだけのものである。ところが、X線回折という方法を使えば、「この物質」が「何」であるかということが、間違いなくわかるらしいという衝撃的な事実を知り、驚愕した記憶がある。化学分析で「炭素 100 %」だと分かったとしても、それが黒鉛 (グラファイト) なのかダイヤモンドなのかでは大違いで

ある。X線回折を用いれば黒鉛かダイヤモンドかを区別できるだけでなく、それが本当に黒鉛か、本当にダイヤモンドなのかを知ることができるのである。もちろん化学分析も有用なのだが、物質が何であるかを知る(同定する)という用途であればX線回折が唯一の決定的な手法であり、その他の方法は補助的な手段にすぎないとも言える。

ところが、筆者は大学で卒業研究学生として所属した研究室では有機化合物錯体の合成や分子性結晶の高圧光学物性を主な研究対象としたために、構造解析の必要があれば単結晶法を用いることとなった。多くの有機化合物では、かりに粉末回折測定をしても、パターンが複雑になりすぎたり、原子配列を確定するためには不十分な情報量しか得られないことが多い。当時の ICDD データには有機物データの収録数は多くなく、粉末回折は「無機物には有効だが有機物にはあまり役に立たないと思われる方法」であった。

筆者はその後実用性を指向して研究分野を変更し、イオン伝導性物質の微粒子合成とその集合体の輸送特性に関する研究を開始した。微粒子研究で決定的に重要なのは、粒の大きさを正しく評価することである。当然電子顕微鏡を用いることになるが、筆者が関心を持った銀イオン伝導体であるヨウ化銀 AgI は真空中で電子線を照射すると容易に分解してしまう。電子顕微鏡を用いずに微細な結晶粒の大きさを評価する手法として、粉末回折ピーク線幅分析という方法があることを知り、やむを得ず粉末回折法の方法論を独学で勉強し始めた。そして粉末回折法で物質を同定するための方法論は既に完成しているとしても、粉末回折データに基づく結晶構造解析のための手法が発展段階にあり、結晶粒径評価、組織評価、定量分析、精密格子定数評価のための方法論はまだ未熟なものであることを知った。

現在筆者はセラミックスを含む無機物の構造解析・組織評価手法を主な研究対象とするが、シンクロトン軌道放射光やポテンシャル計算なども用いて粉末回折法によって分子性結晶の構造推定などをすることもある。現在では、医薬品の評価は粉末X線回折の特に重要なターゲットとなっており、高分子材料の評価へも応用が進んでいる。

2. ICDD という組織

ICDD は米国ペンシルバニア州の Newtown Square という小さな町に本部 Headquarter を持つ非営利団体(Non-Profit Organization; NPO) であり、非政府団体 (Non-Governmental Organization; NGO) でもある。この組織が、粉末回折データという学術的かつ実用的な情報を人類の共有の資産として収集・編集・維持・公開することを目的としており、設立当初から国際的な科学者・研究者の献身的な努力と、周囲の好意や善意によって支えられてきたことは、文献 [2] に克明に記されている。

ICDD の専任職員は現在 42 名であり、粉末回折データを主体とする Powder Diffraction File (PDF[®]) データベ

スの構築と販売だけでなく、講習会や学術会議 Denver X-ray Conference[®] の開催、学術誌 Powder Diffraction Journal の出版、X線回折や蛍光X線分析などに関する教育・啓蒙活動も手がける。

ICDD が製品を販売することにより得る収入の大部分は、これらの事業に従事する職員の人件費として支出される。非営利団体であるから、原則的に収益をあげることはない。

3. ICDD 会員

ICDD の活動は原則的に ICDD 会員の合議に基づいて運営される。現在の総会員数は 314 名であり、47 国の大学、研究機関、民間企業からX線回折・分析に関わる科学者がボランティアとして運営に協力している。国別の会員数は上位から順に、(1) 米国 140 名、(2) 中華人民共和国 27 名、(3) インド 15 名、(4) ドイツ 11 名、(5) オーストラリア 10 名、(5) 英国 10 名、(7) フランス 8 名、(7) イタリア 8 名、(7) ロシア 8 名、(10) 日本 6 名、(11) ブラジル 5 名、(12) カナダ 4 名、(12) メキシコ 4 名、(12) ポーランド 4 名、(12) オランダ 4 名、(16) イスラエル 3 名、(16) 大韓民国 3 名、(16) チュニジア 3 名、(16) ウクライナ 3 名となる。アルゼンチン、オーストリア、ベルギー、クロアチア、エジプト、シンガポール、サウジアラビア、スペイン、トルコ、ベネズエラには 2 名ずつの会員がおり、コロンビア、チェコ共和国、デンマーク、フィンランド、ガーナ、ギリシャ、ハンガリー、インドネシア、ナイジェリア、ノルウェー、イエメン、ルーマニア、セネガル、セルビア、スロベニア、スウェーデン、スイス、ウルグアイには 1 名ずつ会員がいる。

ICDD がこのように高い国際性を保つためには、もっぱら ICDD 製品の販売により得られる収入を活動の資金源として、米国やその他の政府からの資金提供を受けない非政府団体 NGO であることも重要な意味を持つと思われる。ICDD の製品は安価ではないが、そのことで特定の政府からの干渉を受けないことが担保されているとしたら、少しは許せる気分にもなるのではないだろうか。

ICDD の最高意思決定機関である Board of Directors (BoD) のメンバーは会員による選挙に基づいて選出される。選挙によって選出された 2016 年の BoD メンバーは議長 Chairman – Matteo Leoni (イタリア)、副議長 Vice Chairman – Xiaolong Chen (中華人民共和国)、技術委員会議長 Chairman, Technical Committee – Mark Rodriguez (米国)、役員 Directors-at-Large – Jefferey Dann (米国)、Robert Papoular (フランス)、Robert Dinnebier (ドイツ)、Takashi Ida (日本)、David Rafaja (ドイツ)、前議長 Past Chairman – Scott Mixture (米国) である。これらの BoD メンバーの合議により、さらに事業部長 Corporate Secretary – Theresa Maguire (米国)、執行役員 Executive Director – Timothy Fawcett (米国)、財務責任者 Treasurer – James Kaduk (米国) の 3 名の BoD メンバーが任命された。2016 年は米国人でな

い Matteo Leoni が Chairman になったことも異例だったが、中国人の Xiaolong Chen がアジア人としては初めての Vice Chairman となり、筆者も日本人としては初めての BoD メンバーとなるなど、2016 年の BoD は特に国際色の豊かな陣容となったようである (図1)。

しかしながら、日本での ICDD 製品ユーザーの多さと比較して、日本からの ICDD メンバーの数が少ないことは、悩ましい問題である。もちろん言語の障壁があるということや、日本から米国への距離の隔たりを考えればやむをえない面もあるだろう。また、日本人はボランティア活動に対する意識が低いとも言われてきた。しかし、それは 40 歳代以上の古い世代にだけ言えることであり、30 歳代、20 歳代の若い世代では国際的なボランティア活動に対する意識も高くなっていると聞く。これからの若い世代の貢献に大いに期待したい。

ICDD の会員には世界でトップクラスの回折研究者が多く、ICDD の会員と認められることは、もちろん名誉なことなのであるが、ICDD の BoD としては、会員には何かの形で ICDD の活動に関わってもらうことを期待している。例えば科学者あるいは技術者としての立場からの助言でも、粉末回折測定・データ解析をさらに普及するためのサポートでも、回折研究や関連する教育での貢献でも良い。ICDD の会員になるためには研究歴や学歴・職歴などを記載した履歴書 curriculum vitae を含む申請書類と、現 ICDD 会員からの推薦状 recommendation letter、できれば所属する地域の地区議長 Regional Co-chair (図 2) からの推薦状などを提出し、Membership Committee の投票による可否判断を受ける。日本人の現 ICDD 会員は、ICDD のリストによれば Takashi Ida (Nagoya Inst. Tech.)、Nobuo Ishizawa (Nagoya Inst. Tech.)、Toshimichi Matsukura、Atsushi Saiki (University of Toyama)、Hideo Toraya (Rigaku Corp.)、Masatomo Yashima (Tokyo Inst. Tech.) である。



図1 2016 年 ICDD Board of Directors メンバー。左から右に Robert Papoular, Terry Maguire, Jeff Dann, Mark Rodriguez, Jim Kaduk, Takashi Ida, Scott Misture, Xiaolong Chen, Matteo Leoni, Tim Fawcett (右下: Robert Dinnebier, David Rafaja)

実際のところ、Membership Committee のメンバーの多くは Regional Co-chair から構成され、投票の際には所属する地区の Regional Co-chair からの推薦が、かなり強い影響を与える印象がある。もちろん応募者の履歴書には目を通すのであるが、Regional Co-chair 同士はお互い人柄も良く知り合った仲なので、「この人がこのように推薦するなら間違いないだろう」という判断を下す傾向はあるだろうと思う。

日本と韓国、フィリピンの3国は、ICDD では Eastern Pacific Rim という地域に分類され、現在は筆者が Regional Co-Chair of Eastern Pacific Rim の職も兼務している。筆者は、応募者を新しい会員の候補として推薦するためには、応募者が ICDD での活動を通じて社会に貢献しようと思う「意志」が最も重要と考えており、これが ICDD BoD の方針であると考えていただいても差し支えない。

現状で日本人は多くの ICDD 製品を購入することによって経済的に ICDD の活動を支えていることは確かなのだが、その一方で人的な貢献が少ないという、何かどこかで見たような構図となっている。また、ICDD は世界中の科学者のボランティア活動によって運営されているのに、日本人はその恩恵を受けるばかりで貢献をしないようにも見えるし、「金は出すけど知恵は出さない」あるいは「金はあるけど知恵はない」ようにも見える。過去の ICDD の活動に敬意と感謝の気持ちを持てば、ICDD 会員になってもよいと思う人が日本の中にもっと現れても良いのではないだろうか。

また ICDD には学部学生、修士学生、博士学生が参加できる Student Affiliate という制度もある。Student Affiliate としての応募には、現 ICDD 会員あるいは Regional Co-chair だけでなく指導教員の推薦も受け付けられる。

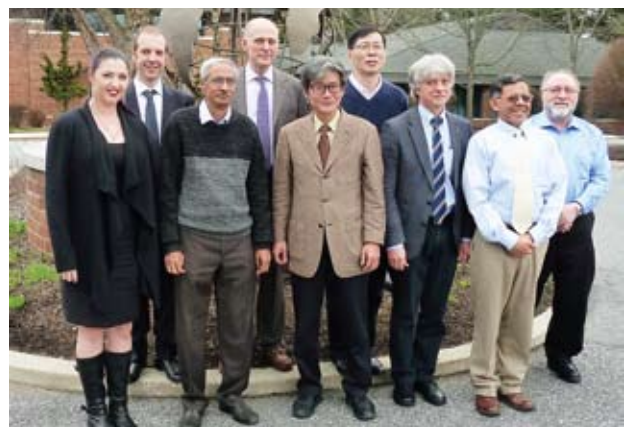


図2 ICDD Regional Co-chairs (2016)。左から右へ Vanessa Peterson (Indian Ocean Rim), Matteo Leoni (European Community), T. N. Guru Row (India), David Rendle (United Kingdom), Takashi Ida (Eastern Pacific Rim), Xiaolong Chen (China), Evgeny Antipov (NIS; Newly Independent States), José Miguel Delgado (South America), John Anzelmo (North America)

ICDD の会員は表 1 に示す技術委員会の 12 分科会のうち最低 1 つ、通常は複数の分科会に所属して、分科会での討議に加わる。正式な分科会メンバーでなくてもオブザーバーとしての参加もできるし、発言も自由である。また会費は無料である。

毎年 3 月に ICDD の Headquarter で開かれる定例会議では概ね 100 名ほどの ICDD 会員が集まり、招待講演、ポスターセッション、分科会、ICDD の方針に関する討議などが行われる。5 日間にわたる長い会議であるが、そのうちの半日だけ開かれるポスターセッションはワインカビールを飲みながら談笑する気楽な雰囲気であり、終わった後にはディナー、その前後には、米国らしく陽気なお楽しみが毎回行われる。2016 年の会議では、「カジノ・ナイト」と銘打たれ、モンテカルロ・ルーレット、ブラック・ジャック、バカラの卓とディーラーが用意された。一方で、2 日間に分けて開催される各分科会では真剣に討議が行われ、分科会からの議案が 4 日目の本会議で審議される流れとなる。しかし本会議で可決された議案も、最終日に開かれる BoD 会議でもう一度審議される。2016 年度の BoD 会議では、本会議で可決されたうち一件が分科会に差し戻された。確かに BoD が ICDD の最高意思決定機関であるということには間違いがないようである。

ICDD 本会議の様子はインターネットでストリーミング配信され、遠隔地の ICDD 会員も、非会員も制限なく視聴することが可能である。しかし 2016 年の ICDD 会議には日本からの参加者が筆者だけであっただけでなく、ストリーミング視聴モニターでも日本からの本会議視聴は確認されなかった。時差のために日本ではストリーミング配信が平日の深夜ということになってしまうし、日本の ICDD 会員の高齢化も進んでいるので、このこともやむを得ない面はあるだろうと思う。

表 1 ICDD 分科会リスト (ICDD subcommittees)

Ceramics
Metals and Alloys
Micro and Meso
Minerals
Organic and Pharmaceutical
Polymers
Electron Diffraction
Non-Ambient Diffraction
Synchrotron & Neutron Scattering Methods
X-ray Fluorescence
Education
PDF Editorial Staff

4. ICDD 賞と DXC 賞

ICDD による教育・啓蒙活動の一環として結晶学関連分野の研究者や学生を対象として、あるいは ICDD 会員を対象として各種の褒賞・奨学金制度が設定されている (表 2)。また ICDD が毎年夏に開催する学術会議 Denver X-ray Conference (DXC) の参加者を対象とした各種の賞も存在する (表 3)。

日本からの ICDD 賞受賞者には、今までに ICDD 活動にとっての特別な功労者 Distinguished Fellow として Yoshio Takeuchi (1993)、功労者 ICDD Fellow として Takashi Ida (Nagoya Inst. Tech.)、Nobuo Ishizawa (Tokyo Inst. Tech.)、Toshimichi Matsukura (Sanyo Information System)、Hideo Toraya (Nagoya Inst. Tech.) の名前がある。DXC 賞受賞者には 2015 年の Snyder 賞に Tsuyoshi Matsuno (Osaka City Univ.) と Yuki Takimoto (Osaka City Univ.)、2012 年の Snyder 賞に Takashi Nakazawa (Osaka City Univ.)、2003 年の Cohen 賞に Yukio Takahashi (Tohoku Univ.) の名前が見つけられる。

しかし、世界中で結晶学を学ぶ学生にとって最も権威のある Frevel 奨学金については、28 年間、合計 181 名にもおよぶ受給者リストの中に一人の日本人の名前も見いだすことができない。日本結晶学会誌で 16 年前に「過去 8 年間に一人も日本人受賞者がいない」と指摘されていたが [3]、それどころではない状況になっていることに、ここで注意を喚起したい。

ただし、注意しなければいけないことは、Frevel 奨学金は毎年 10 月に応募が締め切られるが、翌年の 7 月に学生として在籍していないと受給資格がないということである。したがって、日本の博士課程の学生は博士課程 2 年の 10 月までに応募する必要がある。日本人学生は明らかに

表 2 ICDD 賞 (ICDD Awards)

賞名称	対象分野等	授与年
Hanwalt	粉末回折	3 年ごと
McMurdie	主にセラミックス	2 年ごと
Frevel	結晶学を学ぶ学生	毎年
ICDD Fellow	会員	随時
Distinguished Fellow	会員	随時
Distinguished Grantee	公募課題	3 年ごと

表 3 DXC 賞 (DXC Awards)

賞名称	対象分野等	授与年
Jenkins	XRD & XRF	2 年ごと
Barrett	粉末回折	2 年ごと
Birks	XRF	2 年ごと
Cohen	学生	毎年
Snyder	学生	毎年

不利な状況に置かれていると思われるので、筆者は ICDD の Scholarship Committee と Corporate Secretary に対して応募資格の変更を要請したことがある。しかし、日本の大学の学期が、国際的にはかなり特殊な部類に属するので、なかなか変更は容易でなさそうである。筆者自身は博士課程学生の研究指導をしていないのだが、客観的に見て日本人博士課程学生の研究にはかなり質の高いものもあるのだから、もし博士 2 年の秋までに国際会議発表や論文発表などができる程度に研究がまとまっていれば、積極的に Frevel 奨学金に応募をされると良いと思う。2016 年の受給件数は 10 件で、賞金（奨学金）は 1 件あたり 2,500 ドルであった。

Frevel 奨学金は、この賞の趣旨を支持する多くの団体や個人からの善意の寄付を原資とする基金による。日本の篤志家からも寄付は行われていると聞く。さらに多くの寄付を受けることができれば受給件数を増やすことも可能なので、この基金の趣旨に賛同する方は寄付をされることもご検討をお願いしたい。この基金は ICDD が管理することになるが、公正かつ効果的に扱われることは保証できる。

学生が Frevel 奨学金を受給し、ICDD の Student Affiliate となり、学位を得てから ICDD の会員として活動に参加するというのも、一つの典型的なパターンとなっている。

5. ICDD から学会や研究会への資金提供

ICDD は、結晶学に関連する学術的な会議や研究会に、学生や若い科学者の参加を促す目的で使われることを前提として、資金援助を提供する場合がある。資金援助の仲介も、基本的には Regional Co-chair が引き受ける。筆者が日本国内で開かれる会議で ICDD への仲介をしたものには、2010 年の 3rd International Congress on Ceramics (ICC3)、2012 年の IUCr Commission on High Pressure 2012 Meeting (IUCrHP2012)、2015 年の The 22nd International Conference on the Chemistry of the Organic Solid State がある。これらは申請にもとづいて審査されるが、ICDD から提供できる資金の総額には限りがあるので、ICDD の活動のためにいかに効果的であるかということを判断基準として、かなり競争的な状況で審査を受けることになることをご承知いただきたい。日本国内で開催される会議の場合では、国際会議であること、ある程度の参加人数、特に若手の参加が見込めること、粉末回折法に関連するセッションが明確に設けられていることなどが判断の材料とされる傾向があるようである。

6. Grant-in-Aid プログラム

ICDD は信頼し得る回折データあるいは結晶構造データを得るために、ICDD にデータが提供されることを前提として、研究者に助成金を提供する Grant-in-Aid プログラムを実施している。毎年 4 月に始まり翌年 3 月に終了するサ

イクル (Cycle I) と、10 月に始まり 9 月に終了するサイクル (Cycle II) が常に並列して進行している。このうち、2015 年の Cycle II では 12 件、Cycle I では 20 件が助成を受けた。しかし、1996 年から現在までの受給者リスト中、日本で助成を受けたのは 2005 年 Cycle I の Dr. Masatomo Yashima (Tokyo Inst. Tech.) のみである。粉末法でも単結晶法でも、X 線、シンクロトロン、中性子のいずれを用いるのであっても、新物質だけでなく既知物質であっても固溶体の組成を変化させたり、低温・高温・高圧での X 線回折データを収集するタイプの研究計画などであれば、採択される可能性は低くない。また、腕に自信があり、まったく既知の物質で常温常圧下の安定構造であっても現行の ICDD データより良いデータを提供できると思うのであれば、積極的に応募されると良いと思う。

7. ICDD-PDF データベース

7.1 PDF とは？

ICDD は設立の当初 1941 年から紙カード型粉末回折データベースを Powder Diffraction FileTM と呼んでおり、PDF[®] という名称にも米国で商標登録がされているが、1993 年から Adobe 社が可搬性文書形式 Portable Document Format に PDF という名称を用いたので紛らわしくなった。現在の電子化された PDF[®] データベースでは当然 Portable Document Format の出力をする機能が備えられているので、ICDD-PDF のユーザーはかなり頻繁に PDF[®] の PDF を出力することになる。最近では粉末回折強度データをフーリエ変換したものを対分布関数 Pair Distribution Function、PDF と呼ぶ人も現れ、さらに紛らわしいことになった。この稿の読者には PDF の本家本元はあくまでも ICDD であるということをご承知いただきたい。

また、意外に知られていないことのようにだが、ICDD は現在でも紙に印刷したデータベースを販売している。PDF-2 データブックは現在全 65 巻で、ICDD の eStore 価格では 9,000 ドルという価格が付けられている。概ね書庫 2 冊を占める分量と思われ、価格以上に占有するスペースがかなりの負担になる。電子版の PDF-2 は DVD 1 枚に納められ、eStore 価格はアカデミックで 5,775 ドル、一般で 8,660 ドルであるから、印刷体を販売し続けることの意味は筆者にも理解しかねるが、教育用途であれば効果的な場合もあるのかもしれない。

7.2 日本での ICDD-PDF

ICDD 製品の売り上げを国別で見ると、2015 年の時点で過去 10 年平均の売り上げは、1 位日本、2 位米国、3 位ドイツ、4 位中国、5 位ロシア、6 位インド、7 位韓国、8 位フランス、9 位カナダ、10 位英国という順であった。日本で ICDD 製品のユーザーが多いのは、日本の製造系民間企業が高品質な製品を顧客に提供するために、材料や製品の品質評価に用いる高価なデータベースに投資することも

厭わず、また日本の教育の成果として、高度なデータベースでも使いこなすことができる知的水準の高い国民であるからこそと思うと、筆者にとっては本当に誇らしいことである。

ここで注意していただきたいことに、世界の中で日本と韓国、ロシアの3カ国だけは ICDD から製品を直接購入することができず、ICDD が指定した再販業者からしか ICDD 製品は購入できないルールになっているということがある。これは ICDD のポリシーに基づき、これを「排他的な縄張り」exclusive territory 指定と呼ぶ。特に日本では、世界の中でも突出して、米国以上に ICDD 製品が広く普及しているのだが、その現実的な要因としては、ICDD 製品を日本国内で販売する商社の貢献があること、また、高品質なX線回折装置を提供してきた日本の装置製造企業が ICDD 製品を普及させるために大きな貢献をしてきたことにも、間違いがないと考えられている。そこで ICDD としては、日本国内の ICDD 再販業者に継続的にユーザーへのサポートをしてもらうために、指定した再販業者のみに独占的に販売をする権利を付与しているのである。筆者は 2008 年に ICDD 会員となった当初、日本を ICDD の exclusive territory 指定から解除することを繰り返し要求したが、筆者以外には、それを望む ICDD 会員はいなかった。現実には日本での ICDD 製品ユーザーはかなり強く再販業者に依存しており、ICDD から直接製品を購入することを必ずしも望まないユーザーが多い。ICDD は従業員 40 名程度の小さな組織であり、確かに再販業者の力を借りなければ日本国内の多くのユーザーを支えることは困難かとも思われる。

ICDD がそれほど日本での再販業者の貢献を高く評価しているのであれば、再販業者には、一般ユーザーへの直接販売より安い卸価格で製品を提供すれば良いのではないのか？この問いに対する回答は、以下のようなものであった。ICDD もそれを検討したことがあるが、税務担当者と協議した結果、かりに再販業者に割引価格で製品を提供すると、一般ユーザーへの直接販売では利益を得ているとみなされて、米国の税制上優遇される非営利団体 NPO 認定を失う可能性があるとのことである。

しかし、ICDD 職員が行うべきユーザーサポートを再販業者に肩代わりさせるなら、その経費を ICDD が負担するのは当然ではないだろうか？現時点では非営利団体の運営に関わる米国の法制度や解釈に、やや問題があるように思われる。

ICDD の運営方針は原則的に ICDD 会員の合議によって決められるので、ICDD のポリシーに異議を唱えられる人にこそ ICDD 会員になっていただきたいと思う。ユーザーが再販業者のサービスに満足できれば、割高であっても再販業者から購入しようとするはずであるし、exclusive territory 指定は必要ないというのが筆者の個人的な意見である。

7.3 ICDD-PDF データベース製品

現在の ICDD データベース製品としては、Data Books、PDF-2、PDF-4+、PDF-4/Minerals、PDF-4/Organics、WebPDF-4+ がある。

大きく分けて PDF-2 と PDF-4 シリーズに分かれるが、主力製品である PDF-2 と PDF-4+ の DVD 版の場合、いずれも初期導入費用は同じで、2015 年版 eStore 価格はアカデミックで 5,775 ドル、一般で 8,660 ドルである。

PDF-2 と PDF-4 の大きな違いは、PDF-2 には原子位置の座標が記載されていないのに対して、PDF-4+ の多くのカードには原子座標が記載されているということである。したがって、PDF-4+ はリートベルト法 [4] にも使えるが、PDF-2 はリートベルト法には使えない。PDF-4+ 2015 の総収録件数は 365,877 件であり、そのうち 251,640 件には原子座標が記載されている。一方で PDF-2 2015 の総収録件数は 278,503 件で、いずれも原子座標は記載されていない。

PDF-4+ のライセンス期間は 1 年だけなので、使い続けるためには毎年年度更新料金を支払わなければならない。しかし、この更新料金も PDF-2 と PDF-4+ では同じ料金に設定されており、2014 年版から 2015 年版への更新料金の eStore 価格はアカデミックで 1,150 ドル、一般で 1,760 ドルである。

PDF-2 はライセンス期間が 5 年であり、申し出ればさらに 5 年間ライセンス期間を延長することができるので、10 年間は年度更新しなくても使い続けることができる。しかし 5 年以内にデータベースを更新する場合には、PDF-4+ を毎年更新しても PDF-2 の更新を遅らせても、かかる費用はまったく同じになる。このような料金設定がされている理由にも、ICDD が非営利団体であることが関わっているらしい。「更新を遅らせたユーザーの支払う費用が軽減されるとすると、毎年更新するユーザーから利益をあげるになってしまう」という論理のようである。

2015 年版の PDF-4+ に新しく収録されたカードは 11,613 件にのぼり、全収録数の 3 % を占める。また、ICDD は PDF-4+ データのための検索ソフトウェアに、必ず何らかの新しい機能を毎年追加させている。これらの新機能は、多くの場合ユーザーからのリクエストに基づく。これらのことから、ICDD としては、PDF-2 のユーザーには PDF-4+ になるべく早く乗り換えることを推奨している。PDF-2 から PDF-4+ への乗り換え価格は年度更新料と同じ価格に設定されており、PDF-2 の年度更新が行われていれば、追加料金は基本的に発生しない。

また ICDD では最近 PDF-4+ に関する複数年度契約やサイト・ライセンスも提供するようになったので、プロジェクト型の研究や、大学や研究所などの機関での購入にもある程度は対応しうようになっている。現状では再販業者がそのようなことを知らないケースも少なくないので、PDF-4+ への更新や新規導入を検討されることがあれば、直接

ICDD の Web サイトを参照するか、筆者に問い合わせただければと思う。

粉末回折データ解析、特に定量分析の目的でリートベルト法を用いることは常識的になりつつあり、国際的には PDF-4+ のユーザーが多数になっているのだが、日本ではこれもまた突出して PDF-2 のユーザーが多い。

筆者の所属する名古屋工業大学でも、2013 年度まで図書館への来館者が利用できる端末にインストールされていたデータベースは PDF-2 であった。大学の図書館では毎年データベースを更新するための予算を確保できるのが普通であり、現実には PDF-2 のデータは毎年更新されていた。この場合 PDF-2 を使い続ける理由はまったくないのだが、そのことが理解されていなかった。2014 年度から本学で利用できるデータベースは PDF-4+ に変更されているが、もし読者の利用できる大学図書館のデータベースがまだ PDF-2 であったとしたら、PDF-4+ へ変更するように要求すると良いと思われる。

大学の研究室で PDF-4+ の更新を続ける資金を確保することは困難かもしれないから、大学では図書館に PDF-4+ データベースを導入し、これを学内で自由に参照できるようにすることを勧める。また公的な試験研究機関も、ユーザーの要求に応えるためには、なるべく早く PDF-4+ データベースを導入することが推奨される。米国特許も 2013 年に先発見主義から先願主義に変更され、知的財産権を保護するためにデータベースを速やかに更新する必要性は今まで以上に高くなっている。5 年以上の遅れをとるようなことは、試験研究機関のユーザーにとって許容しがたいと思う。筆者が兼務する公益財団法人科学技術交流財団が運営するあいちシンクロトン光センター (AichiSR) でも PDF-2 が用いられているが、PDF-4+ データベースに変更することが計画されている。

なお PDF-4+ には主に無機物のデータが収録されているが、その多くは他の機関からライセンス供与を受けたものである。米国の国立標準技術局 (National Institute for Standard and Technology; 略称 NIST) とドイツの専門情報センター (Fachinformationszentrum Karlsruhe; 略称 FIZ) の制作する無機結晶構造データベース (Inorganic Crystal Structure Database; 略称 ICSD)、スイスのマテリアルズ・フェーズ・データ・システム社 (Materials Phases Data System; 略称 MPDS) の制作するライナス・ポーリング・ファイル (Linus Pauling File; 略称 LPF) のデータが PDF-4+ には含まれる。

PDF-4/Organics には主に有機物のデータが収録されており、医薬品と高分子を主なターゲットとする。PDF-4/Organics に収録されている結晶構造データの多くは英国のケンブリッジ結晶学データセンター (Cambridge Crystallographic Data Centre; 略称 CCDC) が発行するケンブリッジ構造データベース (Cambridge Structural Database; 略称 CSD) のデータによるものである。

PDF-4/Minerals は PDF-4+ のサブセットであり、主に鉱物が収録されているものである。WebPDF-4+ は比較的最近の製品で、筆者は直接使った経験を持たないが、名前の通り Web ブラウザーを使ってデータベースにアクセスできるものであり、内容は PDF-4+ と同じものとされている。

8. Powder Diffraction Journal

ICDD が出版する学術雑誌 Powder Diffraction Journal について触れる。本学ではオンライン版も含めて学内では Powder Diffraction 誌を自由に閲覧できるように、本学の図書館がこの雑誌を購入するための経費は、すべて筆者の研究費から支出しているが、それが苦にならないほど価格が低い。機関購読価格は個人購読価格より割高になるのだが、それでも 2016 年の印刷体・オンラインのセット価格は年間 345 ドルである。

表 4 に 2016 年の米国 ICDD 会議のポスターセッション中、Powder Diffraction 誌編集部門のポスター発表で揭示されていたダウンロード・ランキングを転載する。これだけ学内で閲覧されている学術雑誌の購読費用を一研究室の個人的な研究資金に負わせるのはいかがなものかとも思うが、世界中の著名な大学や研究機関を抑えて、本学が世界でトップにランキングされているのは愉快である。

表4 2015 年 Powder Diffraction 誌のダウンロードランキング (Top Downloading Institutions)

Organization	Abstract views	Fulltext views	Rank
Nagoya Kogyo Daigaku	494	1230	1
MIT Libraries	1398	626	2
Sichuan University Library	199	259	3
University System of Taiwan – Consortia Level Access	957	205	4
Access paid by the UCSF Library	218	187	5
Access paid by the UC Berkeley Library	148	142	6
ETH-Bibliothek	389	139	7
Lane Medical Library / Stanford University Medical Center	90	136	8
Kainan University	339	135	9
Stanford University Libraries	86	135	10
The NIST Virtual Library (NVL)	194	133	11
University of Cardiff	117	125	12
University of Saskatchewan Library	104	114	13
Indira Gandhi Centre for Atomic Research	86	114	14
New York University	109	107	15
NYU Medical Center: Ehrman Medical Library	109	104	16
University of Illinois at Urbana – Champaign Library	94	104	17
Joint I11 ESRF Library	199	103	18
Bibliothèque du Centre Scienti	28	103	19
Universite Paris Sud XI	28	103	20

9. おわりに

この記事では、最近の ICDD の活動について、筆者の知ることを述べた。本稿を執筆するにあたって、筆者は竹内慶夫先生の執筆された記事 [2] を読み、ICDD の前身となった JCPDS の活動に、歴史的にも日本の科学者が深く関わっていたことを知り、ICDD の活動が、世界中の科学者のボランティア精神によって支えられてきたことも再認識させられた。

筆者は、米国人の前任 ICDD Board of Directors メンバーから BoD メンバーとしての立候補を打診されたときに躊躇したが、日本は ICDD の活動を少なくとも経営面では支えてきた重要な地域であり、ICDD にとっても、日本の多くの ICDD 製品ユーザーのためにも自分が BoD メンバーとなることは有益であろうという理由で立候補をすることにした。選挙権を持つ会員数の少ない日本人が当選することは予想していなかったが、逆にそのような候補者が現実には BoD のメンバーとして選出されたという事実は、この組織の会員が国際性を重視するとともに、日本の科学者やデータベースのユーザーの有形無形の貢献も認識されていることを示すように思う。

参考文献

- [1] 佐々木聡「竹内慶夫先生を偲んで」日本結晶学会誌、**51**, 265–266 (2009).
- [2] 竹内慶夫「JCPDS–国際回折データ・センターについて」日本結晶学会誌、**27**, 40–46 (1983).
- [3] 石澤伸夫「ICDD の活動について」日本結晶学会誌、**42**, 459–461 (2000).
- [4] H. M. Rietveld, “A Profile Refinement Method for Nuclear and Magnetic Structures,” *J. Appl. Cryst.* **2**, 65–71 (1969).

ICDD, the ICDD logo, PDF, and Denver X-ray Conference and design are registered in the U.S. Patent and Trademark Office. Powder Diffraction File is a trademark of the JCPDS–International Centre for Diffraction Data. ©2016 JCPDS–International Centre for Diffraction Data.