

科学技術におけるデータベースの役割(2)

Role of Databases for Science and Technology (2)

馬場 哲也*

Tetsuya Baba

1. 物質・材料に関する情報の共有

開発された物質や材料が広く社会に利用されるためには、それらの性質が信頼性高く計測・分析され、その情報が利用しやすい形態で公開されていなければならない。特に人体や生物への有害性や環境汚染・環境への負荷、発火・爆発等の可能性、強度など安全・安心に関わる特性に関しては法的規制を満たす計測・分析・試験評価が求められることが多い。

一方、実用化に向けての研究段階にある物質・材料の開発を効率化し普及を促進するには、研究開発により生み出された情報が物質・材料を利用する研究者・技術者に速やかに提供され、利用側のニーズをフィードバックしていくことが有効である。

インターネットによるデジタル情報の提供と利用が一般化した今日においては、図1に示されるようにデータベースが開発と利用を結ぶ橋渡しの役割を果たすことが期待される[1,2]。

新規に開発された材料は、その機能が定量化された物性値として材料の利用分野に対して提示される。材料を利用する立場からは必要な機能を有する材料を分野横断的に求めていくことになるが、定量化された機能については所要の物性値を持つ物質・材料をデータベースから検索することが効率的である。その場合、材料製造プロセス、組成、微構造などは材料利用の立場からは第一義的に重要な情報ではなく、物性値として抽象化された材料情報ならびに安定性や耐環境性などの化学的特性や価

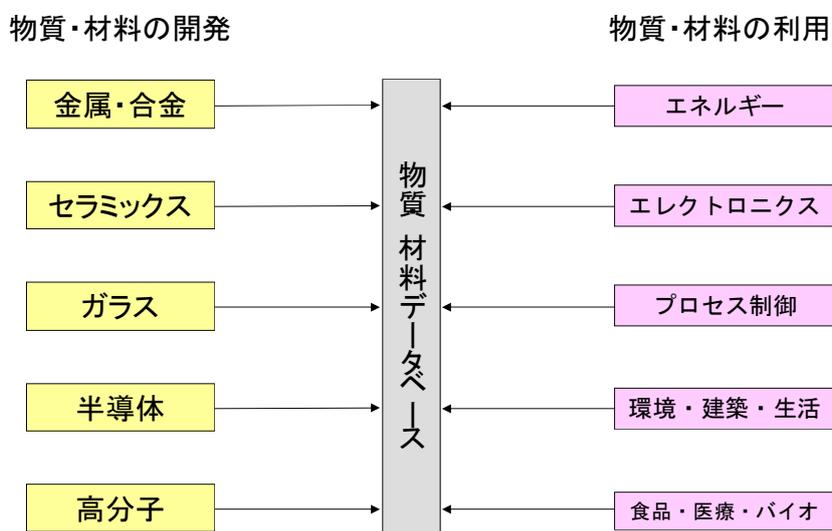


図1 物質・材料の開発と利用を橋渡すデータベース

* 産業技術総合研究所 計測標準研究部門、〒305-8563 茨城県つくば市梅園 1-1-1 中央第3 Metrology Institute of Japan, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST Tsukuba Central 3, 1-1-1, Umezono, Tsukuba, Ibaraki 305-8563, JAPAN FAX: 029-861-4236, E-mail: t.baba@aist.go.jp

格などの経済性に関する情報の優先順位が高い。

以上のようにデータベースを介することにより、物質・材料開発のコミュニティと物質・材料利用のコミュニティがお互いに必要且つ十分な情報を共有する状況が実現される[3-6]。

2. 材料固有の量と測定法に依存する量

物質・材料の熱的性質を定量的に記述した値である熱物性値には熱エネルギーの移動に関わる熱伝導率、寸法の温度変化を表す熱膨張率など多くの種類がある。

均質な材料に対しては、熱伝導率、比熱容量、熱膨張率などの代表的な熱物性値は科学技術の多くのコミュニティで共有される普遍的な定義により定められている。従って、その定義に則った方法により測定すれば、測定法によらず材料固有の値が得られると期待される。しかし現実には定義に対応する測定法であっても分解能や再現性が十分でないこともあり、図2の左側に示したように測定結果がばらつくことになる。その場合でも、その測定法が原理的に定義との乖離がない方法であれば、多数の測定を行った平均値は材料固有の値に収束することが期待される。

一方、材料の硬さや引張り強度、曲げ強度などは、測定法を決めて初めてその値が定まる「測定法依存の量」であり、熱的性質では上記のガラス転移温度などがこの範疇に区分される。この場合には同じ名称の量（例えば引張強度）であっても、図2の右側に示されるように、実測値は測定法、試料の形状、測定手順に依存して異なる値となる。多数の測定を行った場合の平均値が同一の値に収束することも期待できない [2]。

また材料固有の値が存在する熱物性値に対しても、実用測定法や研究開発段階の測定法では厳密に定義を満たしているのではなく、近似的な比例関係などに基づき測定していることも少なくない。一例として比熱容量を測定する場合を考えると、断熱法が材料固有の値を測定する絶対測定法であるのに対して、実用的に普及している示差走査熱量法 (DSC) は相対測定法である。DSC により比熱容量の絶対値を求めるためには標準物質による校正が不可欠である。

このような相対測定の場合には「材料固有の値」が値づけられた参照試料による校正を行うことにより、図2の左側の状態が実現される。参照試料として国家標準や国際標準により値づけられた「認証標準物質」を使用すれば計量標準にトレーサブルな測定が実現される。

測定法に依存する量や相対測定法のみならず、材料固有の量を定義に基づく絶対測定法による場合でも、絶対値を正確に測定するためには、測定原理に対する深い理解に基づき測定装置を設計し、十分な経験のもとに測定を行う必要がある。従って、測定法を広く普及させ信頼

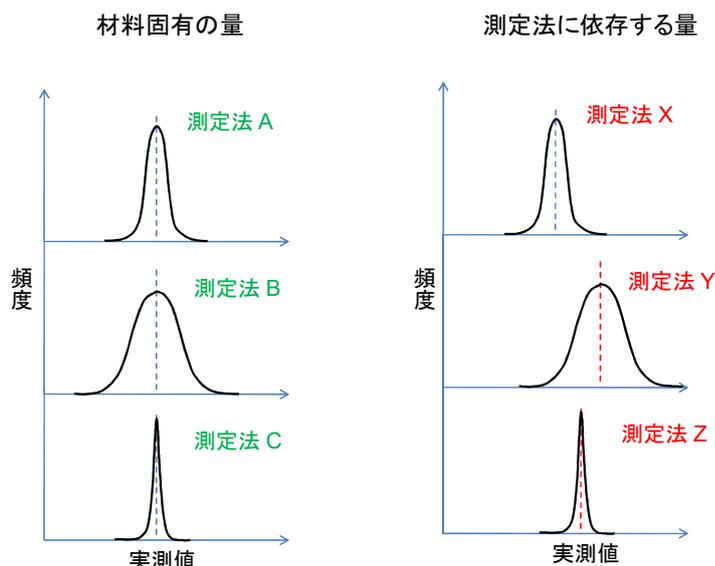


図2 材料固有の量と測定法に依存して定義される量

性の高いデータが安定して効率的に得られる状況を実現するには、測定法、測定手順、試料の形状などを規格として定め、その規格に基づく装置を標準物質で校正して使用することが推奨される。

3. 熱物性の計量標準

長さ、質量、温度などの基本量に関しては国家標準にトレーサブルな計測器で測定すれば、測定結果が不確かさの範囲で一致する社会システムが確立されている。一例として計量法校正事業者登録制度 (Japan Calibration Service System, JCSS) により認定された事業者により JCSS 校正の行われた温度計を適切に使用して測定した温度は温度計の種類や測定者によらず普遍的な値となる [7]。

熱物性に関しても熱膨張率、比熱容量、熱伝導率、熱拡散率などの材料固有の量については、基本量と同様にトレーサブルな計測を普遍的に実現する社会システムの整備が進められている。

その実現に向けて図3に示されるように、計量標準と標準物質の整備、測定法の標準化 (JIS 規格、ISO 規格等の整備) および規格に対応した実用測定器の開発の三位一体の取り組みが進められている [8]。

均質で緻密な固体材料に関する熱物性値の計量標準の整備と供給は産業技術総合研究所 計測標準研究部門 材料物性科 熱物性標準研究室が担っており、バルク材料の熱膨張率・熱拡散率および比熱容量の計量標準を確立して依頼試験を実施するとともに、熱膨張率標準物質、

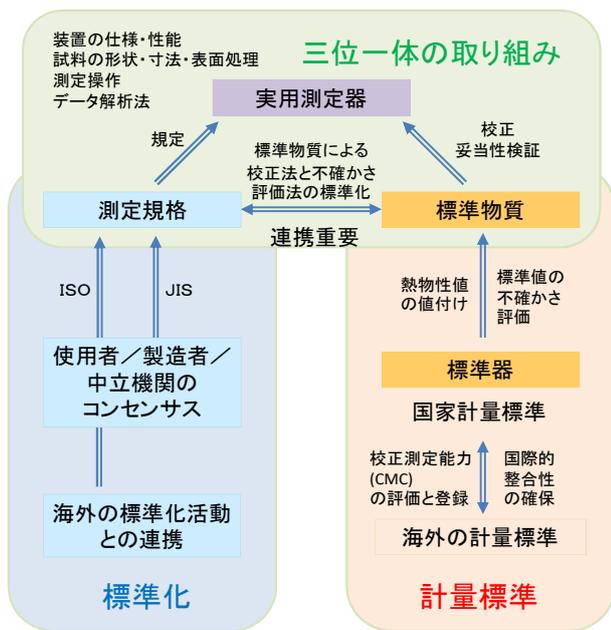


図3 熱物性の実用測定器と計量標準・標準物質・測定規格の役割

熱拡散率標準物質を供給している。さらに半導体デバイスや記録メディアを構成する薄膜の熱拡散率・熱拡散時間の計量標準の整備にも取り組み、依頼試験の実施とともに標準物質を供給している[9, 10]。

一般財団法人建材試験センターは国際相互承認 (Mutual Recognition Arrangement, MRA) 対応 JCSS (Japan Calibration Service System, 校正事業者登録制度) の登録機関として断熱材や保温材等の熱伝導率校正の依頼を受けるとともに、校正値を付した熱伝導率校正板の頒布を行っている[11]。

4. 実測値と材料の不均質性

個々の熱物性測定は、特定の試料に対して行われるので、指定のロットから統計的にランダム採取された一組の試料を測定した結果は図4に表示されるような分布を示す。この分布から平均値と標準偏差が求められるが、標準偏差には測定の不確かさとロットの不均質性によるばらつきの両者が寄与している。

測定の不確かさが既知であり、かつ上記の実測結果の標準偏差より十分小さければ、実測されたばらつきはロットの不均質性に帰着される。測定の不確かさが未知であるか、実測された標準偏差に対して無視できないほど大きければ、材料の不均質性を求めるには分

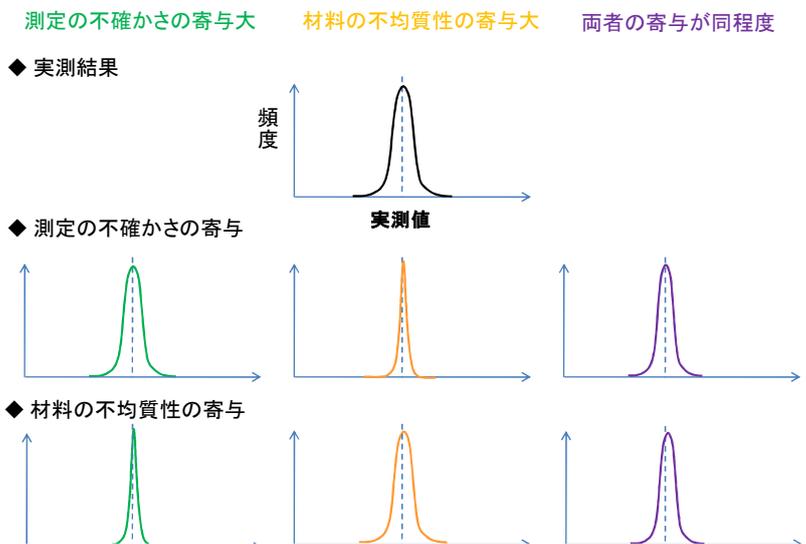


図4 実測値に対する測定の不確かさと材料の不均質性の寄与

散分析が必要となる[2]。

材料メーカーはこのような測定と解析を行うことにより、特定の材料グレードに対して、その平均的な特性に加えて特性の均質性を保証して材料ユーザに供給することができる。

材料を利用する視点からは、大別して2種類の情報が必要となる。使用する材料がすでに決まっている場合には、その材料を用いたシステムやデバイスの動作時の温度応答を把握することが重要である。信頼性の高い伝熱シミュレーションを行うためには、構成材料の正確な熱物性データが求められる。この要請は前記の材料開発側の要請と共通点が多く、国家標準にトレーサブルで不確かさの評価された熱物性データを用いることにより、安定に動作するデバイスやシステムを実現する信頼性の高い熱設計が期待される。前節に述べた手法に基づいて材料メーカーがデータを提供していれば、そのデータを使用することができる。

一方、デバイスやシステムの性能向上のために新規材料を導入する場合には、目標とする熱的性能に対応する熱物性データのみならず、機械的強度や電気特性などの諸物性や安全性、環境負荷、希少性、加工性、価格などの多面的な情報が必要となる。

5. 熱物性データの利用と信頼性

前節では材料を測定して得られた熱物性データを念頭において議論を進めずめたが、一般には材料がまだ手元になく、どのような材料を選択するか検討することか

ら始めることも多い。すでに材料を保有している場合でも、実測する前にデータベース、データブック、論文、カタログ、ウェブサイトに記載されたデータを検索して利用することも多い。このようにして入手される多様な熱物性データは玉石混交でありその信頼性を評価することが根源的な課題となる。

このような熱物性データの信頼性を評価する仕組みを作るためのアプローチとして、図5に示されるように、「計測」に対する不確かさ評価とトレーサビリティの概念を、まず「標準物質に対する標準値」、「標準データ」に対しても適用できるよう拡張し、さらに「一般の熱物性データに対する不確かさ評価とトレーサビリティ」へと展開していくことが考えられる。その実現には、計測のトレーサビリティの確立と不確かさ評価に加えて、材料の均質性評価・安定性評価を行うとともに、キャラクタと物性値の相関を定量的に表現する新規の研究課題を解決することが不可欠である。

このような取り組みにより、熱物性を含む材料標準において、「物理標準（計測の不確かさ評価とトレーサビリティによる供給）および化学標準（標準物質による供給）と同様の標準供給」に加えて、器物に依存しない情報である「物性データ」の形態により情報を供給していく可能性が開かれる。

6. おわりに

産業技術総合研究所は日本熱物性学会と連携して分散型熱物性データベースの開発に取り組んできた[3-6, 12, 13]。

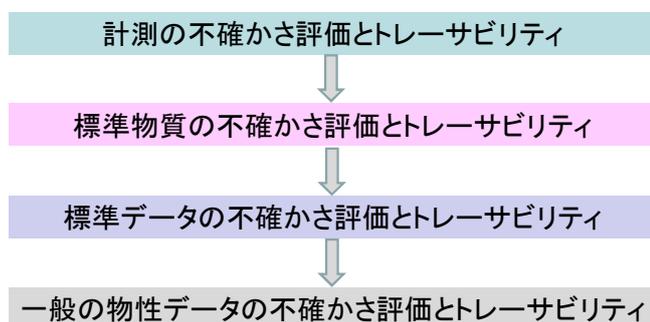


図5 計測の不確かさとトレーサビリティの物性データのトレーサビリティへの拡張

分散型熱物性データベースにはデータ出典情報（論文掲載データであれば論文の書誌情報とそのデジタルオブジェクト識別子、Digital Object Identifier (DOI))を収録するとともに、実測データに関してはその計量トレーサビリティに関する情報が収録可能な構造となっている。

次回以降は計測と標準物質の関係、データの不確かさの評価法などについて紹介したい。

参考文献

- [1] T. Baba, Y. Yamashita, A. Nagashima: Function Sharing and Systematic Collaboration between a Networking Database System and Printed Media on Thermophysical Properties Data, *J. Chem. Eng. Data*, 54, 2745–57 (2009), DOI: 10.1021/jc9003542.
- [2] T. Baba: Measurements and Data of Thermophysical Properties Traceable to a Metrological Standard, *Metrologia*, 47, S143–S155 (2010), DOI:10.1088/0026-1394/47/2/S12.
- [3] 馬場哲也、分散型熱物性データベースの開発、熱物性, 18, 136-142 (2004)。
- [4] 馬場哲也、山下雄一郎、分散型熱物性データベースの開発、計測標準と計量管理, 59 (2), pp.49-57 (2009)。
- [5] 山下雄一郎、馬場哲也、統合システムを有する分散型熱物性データベースの展開、情報知識学会誌, 19 (2), 104-111, 2009.
- [6] Y. Yamashita, T. Baba: Traceable Thermophysical Property Data of Thin Films and Boundary Thermal Resistance between Thin Films -Their Measurements and Database-, *Proc. 9th Asian Thermophysical Properties Conference*, Beijing (2010).
- [7] <http://www.nite.go.jp/iajapan/jcss/outline/index.html>
- [8] https://www.jstage.jst.go.jp/article/synth/7/1/7_1/_article/-char/ja/
- [9] <http://www.nmij.jp/service/>
- [10] T. Baba, N. Yamada, N. Taketoshi, H. Watanabe, M. Akoshima, T. Yagi, H. Abe, Y. Yamashita: Research and Development of Metrological Standards for Thermophysical Properties of Solids in the National Metrology Institute of Japan, *High Temperatures - High Pressures*, 39, pp. 279-306 (2010).
- [11] <http://www.jtccm.or.jp/biz/kosei/tabid/486/Default.aspx>
- [12] <http://tpds.db.aist.go.jp>
- [13] <http://tpds.db.aist.go.jp/tpds-web/>