

TODAY

非鉄金属産業の「稼ぐ力」



経済産業省 製造産業局
非鉄金属課長
井上 幹邦

本年6月、日本再興戦略が改訂され、政府の方針として、企業の「稼ぐ力」を取り戻すことが課題として明示されました。非鉄金属産業を始めとする素材産業は、これまでもユーザー産業と共に様々な取組を進めることで我が国の製造産業を支え、我が国の「稼ぐ力」を高める努力を重ねてきましたが、国内需要の頭打ち、海外勢との市場競争の激化、原材料やエネルギーの価格の急激な変動と調達の不安定化など、企業単体の努力だけでは解決困難な課題が次々と立ちはだかり、その力が徐々に弱まっているように感じられます。非鉄金属課では、これらの課題解決にむけて取り組む産業界からの声を汲み取り、「稼ぐ力」の強化に資する対応策について、まずは以下の3つの軸について検討していきたいと考えています。

(1) 技術で「稼ぐ」

国内需要の頭打ちや、海外勢との市場競争の激化に加え、近年では素材間の競争も厳しさを増しています。炭素繊維や樹脂等に係る新たな素材技術の発展は、非鉄金属素材に取ってかわりうる存在となりつつある一方、これらの素材も実用化にむけては耐熱性や強度、コスト面等の弱点を有しているのが現状です。また、素材産業はユーザーがあってこそその産業であることから、素材開発の方向性をしっかりと見定め、「稼ぐ力」に直結するような研究開発の実施を支援していく必要があります。そのためにも今後はそれぞれの素材の弱点を補いつつも、その特性を活かした材料戦略が重要であると考えています。

非鉄金属課では、昨年度から未来開拓型のプロジェクトとして革新的な次世代構造材料の開発に着手しました。本事業は強度、加工性、耐食性等の機能及びコスト競争力、また素材を適材適所に使用するための接着・接合技術等の開発を行っています。来年度は3年目を迎える本プロジェクトは、NEDOが主体となり中間報告が行われる時期を迎えます。

非鉄金属課としても、本事業を始め様々な研究開発プ

ロジェクトについて、これまでの進捗状況を整理したうえで、今後の方向性についてしっかり議論していきたいと考えています。

(2) 国際で「稼ぐ」

非鉄金属産業でも他の産業と同様に、大企業を中心に海外展開が進み、一定の成果をあげています。しかし、昨今一部の国における競争政策の先行き不透明さが影響して、国際展開を進めた企業に影響を及ぼしている事例が確認されています。更に、電力料金を始めとする様々なコストの上昇や新規の課税等により、事業の継続に対して深刻な影響が出ているという声も聞いています。

このような問題の中には、企業の自助努力だけでは事前の十分な検討や、事後的な対応が困難な場合もありうることから、非鉄金属課としても、関係機関と連携した積極的な情報提供や対応策の検討などを通じて、事業計画や国際展開の形態等についての検討時や、問題発生時の対応について適切に支援していきたいと考えています。

(3) 競争で「稼ぐ」

我が国の非鉄金属産業は、製造産業の長いサプライチェーンの中でも素材の賃加工などのように限られた部分のみを事業として担って原料調達や最終製品と切り離されていることが多いことから、様々なコストの変動を吸収する余力が少ないうえに価格への転嫁が困難なため収益性が低くなり、突発的な事象により事業の継続に支障を来す場合があります。そこで近年では、新日鐵住金と東邦チタニウムが事業統合した日鉄住金直江津チタン設立や、古河スカイと住友軽金属が経営統合して世界3位のアルミメジャーとなるUACJ設立などの動きも出てきています。

このような事業の再構築等を通じたコストの削減は、収益性の向上による競争力強化に資する有効な手段であることから、経済産業省としても産業競争力強化法等により後押しをしています。非鉄金属課では、引き続き事業再構築や新事業への展開等を含め、競争力強化に取り組む産業界のニーズに適切に対応していきたいと考えています。

今回は、技術・国際展開・競争力強化の3つの軸について今後取り組むべき課題について触れてきましたが、非鉄金属産業ではそれぞれの業界が特有の課題を抱えているということは言うまでもありません。非鉄金属課では、各業界の課題を的確に汲み取り、各業界にあった「稼ぐ力」の強化に貢献していきたいと考えています。

未利用熱エネルギー革新的活用技術研究における熱関連材料データベースの役割

未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合 上席研究員 馬場 哲也

(兼務：独立行政法人 産業技術総合研究所 計測標準研究部門 招聘研究員)

1. はじめに

本稿では平成 25 年度に開始された未利用熱エネルギーの革新的活用技術開発プロジェクトにおいて、未利用熱エネルギー活用技術開発センター（産業技術総合研究所つくばセンター内）が開発を進めている熱関連材料データベースについて紹介する。

本データベースは、プロジェクト遂行に有用な熱関連材料・部素材の各種熱物性情報を収集し、革新的な熱マネジメント材料開発の共通基盤として機能することを目指している。さらに、研究開発全体のシナリオ研究を検討するための基礎データや、プロジェクトの成果を社会システムへ導入するシナリオを検討するための基礎データを公共データなどから収録・整理し、プロジェクトにおいて共有する機能についても整備する計画である。

2. 研究開発におけるデータベースの役割

本プロジェクトにおいては運輸、民生、産業において排出される未利用の熱エネルギーを活用すること、低減することを目的として従来より優れた蓄熱技術、遮熱技術、断熱技術、熱電変換技術、排熱発電技術、ヒートポンプ技術、熱マネジメント技術、およびそれらを支える基盤技術の研究開発が実施される¹。これらの技術は、未利用熱エネルギーを利用可能なエネルギー（電力や高温の熱エネルギー）に変換したり、熱エネルギーの損失を最小化して保持するシステムやモジュールとして実現される。それらのシステムやモジュールが革新的な性能を発揮するために、従来より性能の優れた蓄熱材料、断熱材料、熱電材料など高性能部材の開発が行われる。

熱関連材料データベースは材料開発の立案、実施、製品部材としての実用化の各フェーズにおいて必要とされる多様な情報を提供することを目的として開発を進めている。熱電材料を例に挙げると、熱電性能に直接関係するゼーベック係数、電気伝導率、熱伝導率、無次元性能指数 (ZT) のみならず、信頼性の高いモジュールを作成するに当たって重要な、耐熱性、対環境性、寿命、強度、熱膨張率などのデータの収録を進めていく。

3. 物質・材料データの蓄積と所在

固体材料の熱物性に関しては、これまでに公表さ

れているデータを包括的に収集し、評価して推奨値を提示する取り組みが 1960 年代に米国 Purdue 大学により着手され、その成果は TRRC データシリーズとして公刊された。このシリーズは 1970 年から 1979 年にかけて出版され、全 13 巻（+索引 1 巻）からなり金属、合金、非金属材料、液体、気体について、熱伝導率、比熱容量、熱放射特性、熱拡散率、粘度、熱膨張率のデータが記載されている。

Purdue 大学における活動は 1980 年代以降は縮小し現在は継続していないが、そのデータは非営利組織の CINDAS LLC に引き継がれ、データベース化されている (Thermophysical Properties of Matter Database, TPMD)²。TPMD は 4,900 種類の材料の 87 種類の物性に関する約 50,000 のデータカーブ (=データセット) を収録しており、所属機関が CINDAS LLC と契約することにより Web 上で閲覧できるようになる。

前記のデータベースは固体材料が主体であるが、作動流体、冷媒、液体燃料など熱工学、化学工学関連の流体の熱物性に関しては、より継続的、体系的なデータの生産、収集、評価が行われている。それらのデータを探す方法、入手する方法については参考文献 3 と 4 に記載されている^{3,4}。この分野に関するデータを対象とした学術雑誌として米国化学会 (American Chemical Society) から Journal of Chemical Engineering Data が出版されている⁵。また米国標準技術研究所 (National Institute of Standard Technology, NIST) において PVT 特性や熱力学のデータベースが開発されている^{6,7}。一方、熱的特性のみならず、材料全般のデータを含む、物理科学と工学の包括的データを集積する活動がドイツにおいて 1883 年から行われ、Landolt Bornstein Handbook として刊行されてきた。現在は科学技術分野の大手出版社である Springer 社が Linus Pauling File (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ベース)、Dortmund Data Bank (DDBST, 化学工学のプロセスシミュレーションに必要な熱力学、熱物性データベース、主として流体を集録) などのデータとともに、Springer Materials という名称のオンラインデータベースとして提供している⁸。

有機化合物とその化学反応に関しては 1881 年より Beilstein's Handbook of Organic Chemistry が編集されている。現在はやはり科学技術の大手出

版社である Elsevier 社により Gmelin Database (有機金属化合物・無機化合物のデータベース) などとともに Reaxys という名称のオンラインデータベースとなっている⁹。Reaxys は Elsevier 社が運営する学術論文の包括的データベースである Scopus と連動している。

これらのデータベースは所属機関が、それぞれについて Springer 社、Elsevier 社と契約することにより検索・閲覧でき、学術論文の購読契約と類似の契約システムとなっている。このように物性値などのファクトデータのデータベースとオンラインジャーナル化された学術論文および学術論文データベース (Scopus, Web of Science, Google Scholar など) の連携は今後さらに深まっていくものと予想される。

日本では物質・材料研究機構 (NIMS) が物質・材料データベースの整備に組織的に取り組んでおり、マテリアルデータベースサイト MatNavi を運営し公開している¹⁰。MatNavi からは 10 数種類のデータベースにアクセスできる。特にクリープデータシートは NIMS の前身の金属材料技術研究所の時代から長年にわたり耐熱鋼のクリープデータを実測してきた取り組みの貴重な成果である。また高分子データベース (PoLyInfo) は科学技術振興機構 (JST) が整備を開始し NIMS が引き継いだものである。無機材料データベース (AtomWork) は Linus Pauling File との連携のもとに進められている。

基礎物理定数や元素の原子量などの基本的物理量を含む様々な標準データのデータベースが米国標準技術研究所 (National Institute of Standard Technology, NIST) により公開されている¹¹。NIST は主に物理化学分野を対象とした標準データに関する学術論文 Journal of Physical and Chemical Reference Data を米国物理学会 (American Institute of Physics) に委託して発行している¹²。

4. 熱物性データベースと熱関連材料データベースの整備

前節で述べた物質・材料に関するデータベースはいずれも組織的かつ継続的に整備・開発が進められ、集積されたデータも相当の量に達している。従って必要としている物質・材料に関する情報が上記のいずれかのデータベースの収録対象とマッチしている場合にはこれらのデータベースを参照する価値は高いといえる。

しかしながら、上記のいずれのデータベースも単独では現在広く使用されている材料の熱特性のデータの収録は十分ではない。その理由として、物質・材料データの整備は普遍性の観点から純物質のデータから着手される傾向があるのに対して、

産業、民生、運輸のいずれの分野においても高純度単結晶など化学式と結晶構造だけで表現される純物質が部材として使用される比率は低いことがあげられる。具体的には金属系の材料は多結晶で種々の微構造を伴い、セラミックスは焼結体、高分子材料は射出成型体である場合が多い。特に熱伝導率などの輸送性質に関する熱物性は材料の構造に依存して大きく変化するため、実用材料について定量的に有用な熱物性データとするためには材料の結晶構造・微構造を含む情報の記載が必要となる。

また論文に掲載されているデータは規格レベルで合意された手法により測定されているとは限らず、研究開発の段階の測定法を用いている場合があり、その場合は大きな誤差を伴うなど信頼性が保証されない場合も少なくない。従って論文の内容を精査し、必要な場合には論文が参照している文献を読んで、データの誤差、信頼性を評価することが求められる。複数の論文で異なる値が報告されている場合にはその原因を明らかにし、推奨値を提供することが必要となる。前記のような取り組みを推進するためには測定対象とする量の定義、単位、測定法、計量標準、標準物質、規格に関する情報を知的基盤として、体系的に整備していくことが求められる。

以上の認識のもとに、科学技術の広い分野にわたる熱物性に関する情報を一冊に集約した「熱物性ハンドブック」が日本熱物性学会により 1990 年に発刊され、2008 年に改訂されている^{3,4}。熱物性ハンドブックは単なるデータブックとは異なり、広い分野の利用者が、それぞれ自分の分野およびそれ以外の関係データを探しやすいように配慮して作られている。最初の基本事項の編で、単位とその換算、各物性値の定義などが記載され、次いで多くの分野に共通な基本的な物質・材料のデータ、それに続いて応用分野別の熱物性データが記載されている。最後に、熱物性値の探し方、データベース、推算方法、測定方法およびその規格、標準物質について記されている

また熱物性ハンドブックの編集と関係しつつ、独立行政法人産業技術総合研究所計測標準研究部門では「分散型熱物性データベース」を開発しインターネット上に公開している^{13,14,15,4}。このデータベースは、金属・セラミックス・炭化水素など基本物質、材料について、熱伝導率、熱拡散率、比熱容量、密度、電気抵抗率を合わせて約 3,000 のデータセットを収録している。他の物性に関しては有機化合物の蒸気圧や表面張力などを中心に 8,000 データセットを収録し、合計 11,000 以上のデータセットがインターネット公開されている。このデータベースは物性値とともに、その不確かさ (統計学に基づいて世界的に合意された誤差の

期待値の数学的表現) を収録可能である¹⁶。

以上のように材料・物質に関する情報は科学技術の発展とともに学术论文への掲載と連動して長年にわたってデータベース化されてきた。産業技術総合研究所の分散型熱物性データベースは、これらの多様な物質・材料データを熱特性の観点から体系的に収録し、物質・材料を階層的に整理した情報と物性値のグラフ表示・数値表示をインタラクティブなユーザインターフェイスでインターネット公開している。

5. TherMAT の熱関連材料データベース

TherMAT において開発する熱関連材料データベースは、**図1**に示されるように前節までに紹介した物質・材料データベースの蓄積を礎として、本プロジェクトの実施において重要な最新のデータを収録し利用しやすい形で提供することを目的としている。最新のデータをタイムリーに収録するためには関連分野の最新の論文を速やかに把握する必要があり、学术论文データの活用技術がキーテクノロジーとなる。

このような認識のもとに平成25年度には、熱関連材料データベースサーバ機能とデータベース基本ソフトウェアを開発した。開発したデータベー

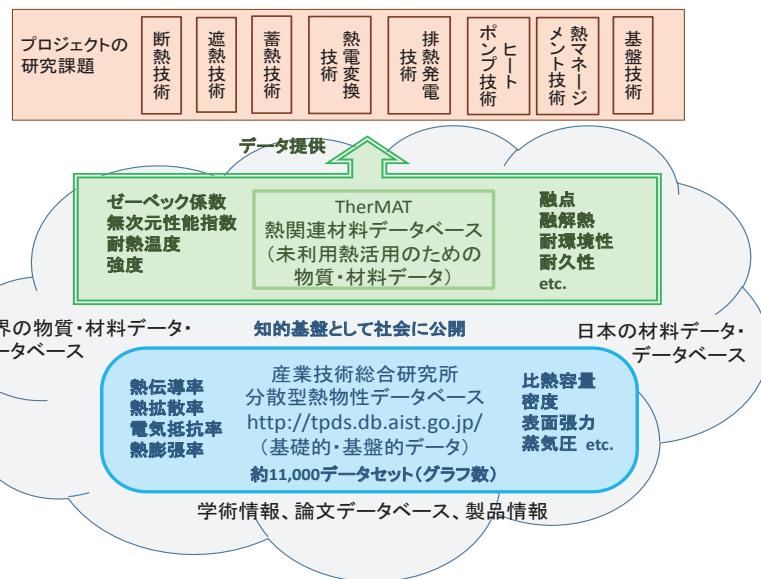


図1 知的基盤としての物質・材料データの蓄積と TherMAT の熱関連材料データベースの役割

スに収録した代表的な熱電材料データから性能指数と無次元性能指数のグラフを表示した例を**図2**に示す。図2の右側には図中の一つのカーブについて温度毎の無次元性能指数の数値表が表示されている。

上記の取り組みと並行して科学技術論文の表データならびにグラフ表示されたデータを正確に速くデジタル化する技術を整備してきた。

本年度は上記の技術により主要な熱関連材料データのデータベースへの収録を進めている。さらに学术论文に発表される最新の熱関連データを

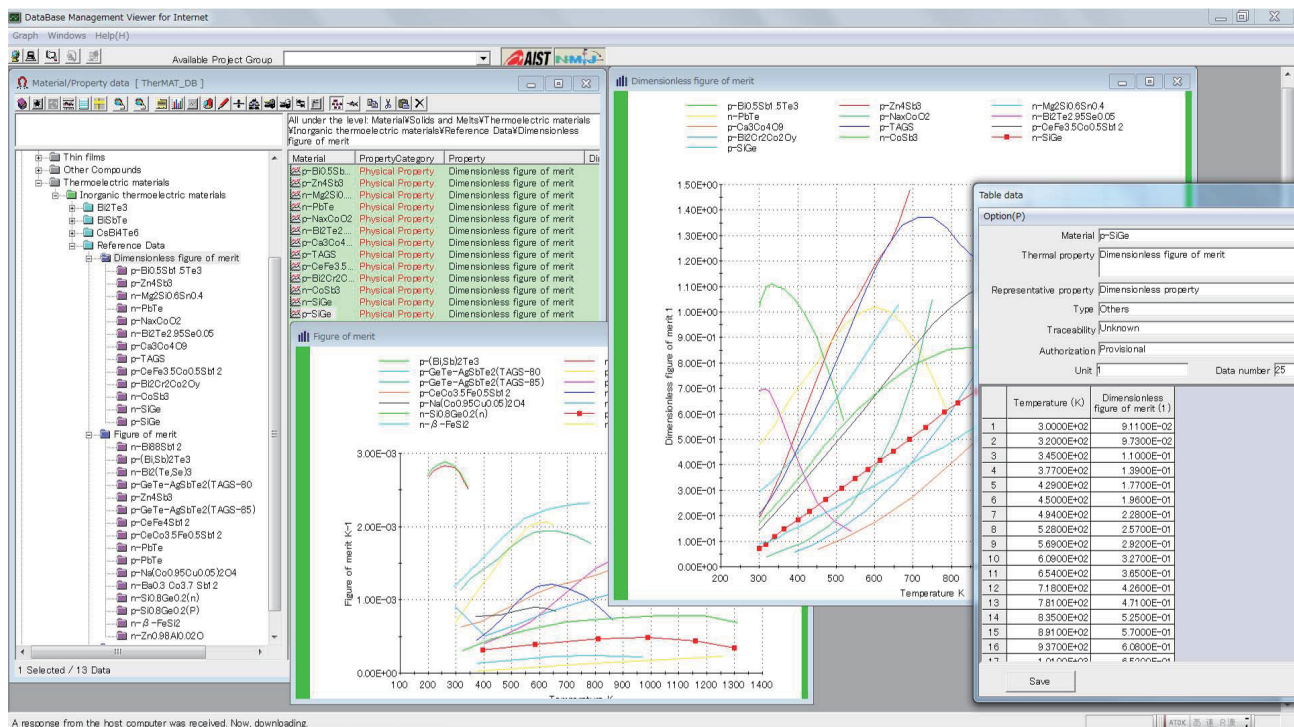


図2 TherMAT の熱関連材料データベースに収録された熱電材料データの表示例

定期的に調査しデータベースへの収録を進めていく予定である。物性データの収録に際して、測定法に関する情報や標準物質による校正に関する情報なども体系的に収録し、データの信頼性評価の基礎データとする。また純粋な化合物としての情報（化学式、CAS番号など）だけでは記述できない一般の材料の数値的な処理を実現するために、テキスト情報である「名称」に加えて、材料を構成する元素の組成比を記述するなど定量的な表現方法を検討している。

プロジェクトにおいて重要性の高い材料系に関しては、材料を表示する適切なパラメータにより材料の物性を体系的に記述する高品位のデータセットを平成27年度までに提供することを目標として研究開発を進めている。

6. 物性の測定と評価

プロジェクトにおける材料開発の進捗に伴い、開発された材料の性能評価が求められる。最適な測定技術・試験評価技術を選択する際には、熱関連材料データベースに収録する測定技術、試験評価技術、それらの規格および標準物質に関する情報が活用できると考えている。部材のみならずシステム／モジュールの試験・評価も重要である。

産業技術総合研究所において固体材料や薄膜の熱物性に関して、計測技術の高度化、計量標準・標準物質の整備、計測技術の規格化、データベースの開発を有機的に連携させ継続的に取り組んできたので、TherMATにおける取り組みにおいても参考になるとと思われる^{17,18,19}。

7. おわりに

生物学・医学分野における遺伝子工学やタンパク質の研究ではバイオインフォマティクス（生命情報学）が飛躍的に進歩し、創薬などに寄与している。材料開発においてもマテリアルインフォマティクスやコンビナトリアル技術などが近年注目されているが、固体材料においては純粋な単結晶が使用される場合は極めて限定されているため、元素組成比の情報のみでは材料を同定することができない。従って、本来デジタルである遺伝子情報や、CAS番号が付与され体系的記述法が確立された純物質と比較すると、固体材料に関しては定量的な処理を行うための敷居が高いのが現状である。

そのような状況に挑戦してマテリアルインフォマティクスを実用化するためのプロジェクトが米国のマテリアルゲノムイニシアティブなどで実施されており²⁰、我が国でもその重要性が検討されている^{21,22}。本データベースにおいてもシミュレーション応用による新材料設計や量的構造物性相関法（Quantitative Structure-Property Relationship,

QSPR）により材料の熱的特性を推算する技術との連携を目指して、固体材料の元素組成のみならず構造に関する情報の定量的記述法を開発する予定である。

参考文献

- 1) TherMAT 赤穂博司、未利用熱エネルギー革新的活用技術研究開発プロジェクト概要、JRCM News, No.326, (2013), pp.2-4.
- 2) <https://cindasdata.com/>
- 3) 日本熱物性学会編：新編熱物性ハンドブック（養賢堂、2008）、<http://www.yokendo.com/book/978-4-8425-0426-1.htm>
- 4) 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/je9003542.
- 5) <http://pubs.acs.org/journal/jceaax>
- 6) <http://www.nist.gov/srd/nist23.cfm>
- 7) <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- 8) <http://www.springermaterials.com/docs/index.html>
- 9) <http://www.elsevier.com/jp/online-tools/reaxys>
- 10) <http://mits.nims.go.jp/>
- 11) <http://www.nist.gov/srd/>
- 12) <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jpcrd>
- 13) <http://tpds.db.aist.go.jp/>
- 14) 馬場 哲也、分散型熱物性データベースの開発、熱物性、18(2004), pp.136-142.
- 15) 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 Vol. 19、No. 2 (2009)、pp. 104-111、<http://dx.doi.org/10.2964/jsik.19-104>
- 16) <https://www.nmij.jp/~measure-sys/metinfo/uncertainty/uncertainty.php>
- 17) 産業構造審議会・日本工業標準調査会合同会議：知的基盤整備特別委員会中間報告 - 知的基盤整備・利用促進プログラム, 49 (2012) <http://www.meti.go.jp/press/2012/08/20120815002/20120815002-3.pdf>
- 18) 馬場哲也、阿子島めぐみ、熱物性データの生産と利用の社会システム - レーザーフラッシュ法による熱拡散率の計測技術・計量標準・標準化・データベース -, Synthesiology, Vol.7 No.1 (2014), pp.1-15. DOI:10.5571/synth.7.1
- 19) 馬場哲也、竹歳尚之、阿子島めぐみ、八木貴志、パルス光加熱法による熱物性の測定技術と計量標準、計測標準と計量管理, 64, No. 2 (2014) PP.63-70.
- 20) <http://www.whitehouse.gov/mgi>
- 21) 産業競争力懇談会 COCN 2013年度 研究会 最終報告、【シミュレーション応用による新材料設計手法】、2014年3月3日、www.cocn.jp/common/pdf/thema66-L.pdf
- 22) データを活用した設計型物質・材料研究（マテリアルズ・インフォマティクス）ワークショップ報告書、CRDS-FY2013-WR-03、科学技術未来戦略ワークショップ www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/WR/CRDS-FY2013-WR-03.pdf

技術講座開催のお知らせ

■第 219・220 回西山記念技術講座開催のご案内

「材料設計を先導する物理解析技術・計算科学—活用事例と今後への期待—」

講座の視点

1970 年代後半から高度化が進んだ微細組織解析技術は、鉄鋼材料のミクロ情報を提供し、新しい製品の開発に重要なヒントを与えてきた。最新の電子顕微鏡や量子ビーム利用解析・計算科学の進歩により、実証データがない中で、現象を推測しながら鉄鋼材料を生み出してきた時代から、「観察科学」が鉄鋼材料の設計を先導する時代が到来している。近年の計算機シミュレーションや物理モデリングの発展は、解析科学と材料科学との融合を更に加速している。

一方で、物理解析装置のブラックボックス化が進んでいる。我々は、これらの高度手法の原理と限界を理解した上で、各手法を駆使して、今後とも鉄鋼材料の発展に挑戦していくべきである。また、見たいものを「観る」ために、新しい解析技術の不断の開発も重要である。

講座では、鉄鋼材料の本質を理解する、更にはそれを基に材料を設計することに軸足を置いて、物理解析と計算科学が活用された事例を紹介する。これらから、解析・計算科学の現在の実力と課題も見てくるであろう。参加者各位が、いまだに見いだされていない鉄鋼材料の持つ可能性を引出すことに本講座が役立てば幸いである。

1. 日時・場所：

第 219 回 2014 年 11 月 18 日 (火) 9:30 ~ 17:00 受付時間：8:45 ~ 16:00

大阪：(株)ラソソテ 3 階会議室 (大阪市淀川区宮原 1-6-1 新大阪ブリックビル 3 階)

第 220 回 2014 年 11 月 25 日 (火) 9:30 ~ 17:00 受付時間：8:45 ~ 16:00

東京：早稲田大学 西早稲田キャンパス 63 号館 2 階 (大会議室) (東京都新宿区大久保 3-4-1)

2. プログラム：

09:30 ~ 09:40 主旨説明

1) 09:40 ~ 10:30 微細組織・サブナノ構造解析技術の進歩と鉄鋼材料設計

JFE スチール(株)スチール研究所 主席研究員 佐藤 馨

2) 10:30 ~ 11:20 第一原理計算の鉄鋼材料への適用

新日鐵住金(株)技術開発本部 先端技術研究所 数理科学研究部 主幹研究員 澤田 英明

3) 12:20 ~ 13:10 先端結晶方位解析による集合組織・特性評価と材質設計

新日鐵住金(株)技術開発本部 顧問 潮田 浩作

4) 13:10 ~ 14:00 量子ビーム解析を活用した複相組織制御と力学特性発現の解明

茨城大学大学院理工学研究科 特任教授 友田 陽

5) 14:00 ~ 14:50 3D/4D 画像を用いた材料評価と組織制御

九州大学大学院工学研究院 機械工学部門 教授 戸田 裕之

6) 15:10 ~ 16:00 フェーズフィールド法が先導する材料組織設計

名古屋工業大学大学院工学研究科 物質工学専攻 教授 小山 敏幸

7) 16:00 ~ 16:50 高度表面・界面解析による鉄鋼材料の表面設計

JFE スチール(株)スチール研究所 分析・物性研究部 部長 名越 正泰

詳細の案内：<https://www.isij.or.jp/muo2mgbgf>

問合せ先：(一社)日本鉄鋼協会 学会・生産技術部門事務局 育成グループ 檜岡

TEL: 03-3669-5933 FAX: 03-3669-5934 E-mail: educact@isij.or.jp

The Japan Research and Development Center for Metals

JRCM NEWS / 第 336 号

内容に関するご意見、ご質問は JRCM 総務企画部までお寄せください。
本書の内容を無断で複写・複製・転載することを禁じます。

発行 2014 年 10 月 1 日

発行人 小紫 正樹

発行所 一般財団法人 金属系材料研究開発センター

〒105-0003 東京都港区西新橋一丁目 5 番 11 号 第 11 東洋海事ビル 6 階

TEL (03)3592-1282 (代) / FAX (03)3592-1285

ホームページ URL <http://www.jrcm.or.jp/>

E-mail jrcm@oak.ocn.ne.jp