

再び 「熱力学データ発表の国際 規準」によせて

関 集三*

1. ま え が き

筆者はさきに、熱測定研究会発行の「熱・温度測定と熱分析」(1971)版に本標題の小文を記載し¹⁾、同年秋の熱測定研究会ニューズレターの別冊付録として、阪大理学部の特博士と共に、IUPAC・熱力学・熱化学委員会で作採し、同年の総会でみとめられた「熱力学データの発表手続きに関する指針」を日本語²⁾に訳し、本会々員全員に配布していただいた。それからもう3年の歳月を経て、また新たに本会編集委員会から同じ主旨の記事をたのまれることになった。「仏の顔も3度」という言葉があるので、会員の方から「またか」といわれるのが眼に見えるようである。私もまた「またですか?」といった位である。しかしこのような地味でしかも一見すると学問や研究に直接関係のなさそうで、「だれかがやるだろう」「自分は厄介な取決めは生来好きじゃない」ような事柄は、まことに申訳ないがくりかえして普及すべきことであると悟り、改めて筆をとることにした。従って、ここでは余り肩のこらないよう、また重複をさせて読んでいただくようにした。

いまさらいうまでもないが、研究者が研究結果を公表することによって、その研究が一つの完結を意味するとすれば、それをできるだけ、他の人々に正確に理解してもらいたい、できるだけ多くの国内、国外の人に読んでもらいたいと願っている。もしそれが誤って理解され、特に抄録や総報に一度あやまって憶えられてしまうと、今日のような情報検索が機械化されている時代ではいつまでも情報公害として沈積し、ぬぐいきれないものになってしまう。そこで、できるだけ誤りの少ないよう万国共通の言葉をつくっておく方が都合が良い。特に熱力学や熱化学のデータは、熱力学的関係式を通じて、思いがけない他の学問分野に大きな波及効果をもっているのではなおさらのことである。そんなわけで、この分野では本誌前号 IUPAC 50 年史³⁾にも述べられているように早くも 1922 年頃から国際規準を決める努力が続けられ

てきた。一次情報の記載の標準化が、世界で他の分野にさきがけて決められたのもっともなことであり、また IUPAC や CODATA で、この分野の研究者がもっとも活発に活動している現状も上述のような理由からである。

しかしながら、自然科学の分野に限るにしても、その中のあらゆる分野について共通した国際規準を決めることは、場合によっては人間の自由な思想や思考形式を束縛することにもなりかねまい。それで以下に述べることは、実験測定によってデータが定量的に求められるような研究発表について限られたものであることに最初に注意していただきたい。

2 熱力学データの発表に際して 何が一番大切か?

上に述べたように、もし誤った熱力学データがつぎつぎと一次情報から高次情報に引継がれて、その波及効果が広い他の学問分野に害毒を流すとなると、データ発表については、細心の注意と最小限度満たすべき記述の条件が自らでつくるはずである。すなわち、よくわが国の論文誌に見られるようなデータの図による表示で終ることは極めて危険であり、また著者自身も不親切であるというべきであろう。後につづく研究者が再現して利用し得るためにはなまのデータ (Primary data) を表にして記述すべきことを厳守しなければならない。次にそのデータの精度 (precision) と確度 (accuracy) をできるだけ記述すべきである。これらのことを記述するためには当然、用いた基本物理定数や換算式、単位を明確にしておく必要がある。

繰り返すが、(i) なまのデータ、(ii) 精度、(iii) 確度の三者がデータに密着したもっとも大切な事項である。

3. 実験結果を報告するのに書き 落してはならない事項

これについても、既に文献 1), 2) に詳しく述べられているので、ここでは簡単に再録しておこう。データはどのような場所で生産されたか? その工場(?) の内情がわからないと生産物の品質の信頼性に欠けるからである。その装置の詳しい設計図、性能、とくにその検定 (calibration) については明確にしておきたい。計器の信頼性を確めた方策についてできるだけわしく述べる必要がある。

一方、実験とはわれわれが五感を離れて精確度の高い測定器により、自然の対象物質に問いかけ、その反応を

* 大阪大学理学部：豊中市待兼山町 1-1

Shūzō Seki: Faculty of Science, Osaka University

見る作業であるから、物質の素性をできるだけ明瞭にしておくことは、計器の性能の記述に優るとも劣らぬ細心の注意を必要とする。対象物質の純度またはキャラクタリゼーションについて詳しい説明を要する。

「計器の性能」と「物質の広義の純度」とは実験研究のデータを生み出す値の両面である。従って、もし一つの言葉でこの両者を表現するとすれば、「測定装置および対象物質の性能」または「測定装置と物質のキャラクタリゼーション（または純度）」といっても過言ではないであろう。この両者の結び付きから、素性の決められた実験データが生れてくる。従ってその結び付きとなる実験操作が当然記載されるべきことはいままでもない。

4 実験結果のまとめと表示

4.1 記号、術語および単位

熱力学的ないろいろな物理量をふくめ、物理や化学で重要な種々の術語の英語、フランス語等は (1) および (2) の文献をふくめ種々の雑誌に発表されている。IUPAC の場合は、これらの取り決めは 1979 年まで少なくとも変更なしに用いられる筈である⁴⁾。この術語の日本語は、日本化学会の標準化委員会の編集として昨年度文部省より発行されている⁵⁾。したがって、ここでは詳しいことは省略したい。

これらの術語を一つ一つ記載するのは厄介でもあるのでその術語の意味する物理量を記号で表わすことが昔より行われてきた。特に熱力学では、これまで国により、著者により実に千差万別(?) といつてよい程に用いられてきたが、IUPAC や IUPAP 等でこれらの混乱を少なくするための国際的取り決めが行われ、今日ではごく一部を除いてほとんど異見がなくなった(文献 3) 参照)。

ここで特に注意しておきたいことは、物理量の記号は必ずイタリック(斜体)の文字で表現すべきことである。読者の方は、手元にある学術雑誌を一冊拾い上げてほしい。そして、その多くの論文でこの約束が完全に守られているかをためしてみるのはいささか楽しいものであろう。まだまだこの約束の守られていない論文が審査をパスしているのを見るのは、まことに残念である。

ここで単位の話にうつる前に、本誌前号⁶⁾の「国際単位について」の記事で、三々付いたことを述べておきたい。メートルの英語は metre で正しく書かれているが、グラムの方は gram となっている。正しい英語は gramme である。また比熱(specific heat)なる言葉は IUPAC で廃止された。比(specific)は単位質量あたりの意味であるので、specific heat capacity は比熱容量となる。それから熱化学、化学熱力学等にとって重要なエネルギーの換算である $1 \text{ cal}_{\text{th}} = 4.18 \text{ J}$ が第 4 表から欠けて

いる。表にある $1 \text{ cal}_{\text{I.T.}} = 4.186 \text{ J}$ は蒸気機関に関係している人々によってのみ用いられている換算式であって、熱量測定をやっている研究者には用いられていない。

次に単位について述べることにしよう。これについては既に上述のように本誌前号に桜井・三井両氏の詳しい説明があるので詳細は一切省略したい。SI 単位の優れていることは既に万人により認められているので、できる限り一日も早くこれに従うことが望まれる。単位を統一することは異なる学問領域での定量的連繫をつくるための必要条件であるからである。

さて単位の記号は、物理量と対照的に必ずローマン(立)文字で表示することになっている。

一言付け加えておきたいことは、国際度量衡会議では、組立単位(または誘導単位)を表示するとき、記号と記号の間になるべく点を入れるようになっている。たとえば $\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ のようになる。しかし、IUPAC や IUPAP では記号間を少し空けるだけで点は付けない。すなわち $\text{J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$ となる。今日学術雑誌では点のないものの方が多い。余程誤解が生じない限り、この点のない表示がとられてよいであろう。その他接頭語や割算方式の表示等については文献(1)を参照されたい。

ついでながら、表 1 に同じ文字を使っても、イタリックスかローマンかで全く意味の違う例をいくつか挙げて読者の参考に供した。

ここで物理量と単位の関係について再度述べておきたい。物質のもっているさまざまな性質の中のある特定の物理量、たとえば「長さ」を測定するためには、万国共通に定められたメートル単位を正確に覚えこまされた測定装置(ものさし、カセットメーター等)を用い、光を媒介として単位の何倍がその物質の長さに含まれているかと応答によって決められる。この「何倍か」を表わすのが純粋の数である。従って

$$\text{物理量} = \text{数値} \times \text{単位}$$

この関係が対象と装置の間に存在している。このような測定の意味する内容を理解しておく、グラフや表に数値を示す時には

$$\text{数 値} = \text{物理量} / \text{単位}$$

となる。すなわち、物理量を単位で割って数値を表示することになる。

以上述べてきたことでこの節の説明は一応完結することになるが、実際には多くの誤った表示が現在でも随所に見出されているので、以下、順序不同ではあるがそのような例を列举してご参考に供したい。

- a) 接頭語はローマンであること。例えばマイクロメータは μm , μm , μm ではなくて μm

- b) 接頭語は物理量にくっつけて表示すること

$mN = 10^{-3}N$ であるか、 $mN = m \times N$ である。

- c) 単位記号に複数はないこと。言葉ではないのでペリオドはない。

10cm は良いが、10cms または 10cm. はよくない。

- d) モルを表わす単位記号は、mole でも mol. でもなく、mol である。mole というのは言語であって単位記号ではない。

- e) 接頭語には小文字と大文字のあることに注意すること。

$mW = 10^{-3}W$, $MW = 10^6W$

- f) 割算方式は 1 回しか用いないこと。

$JK^{-1}mol^{-1}$ または $J/(Kmol)$ は良いが、 $J/K/mol$ は良くない。

- g) 微分記号はイタリックでなくローマンであること。

$\frac{dV}{dt}$ ではなく $\frac{dV}{dt}$ となる。

- h) 差を示す記号の Δ はイタリックでなくローマンであることは、しばしば見落されている。

ΔX でなくて、 $\triangle X$ である。

- i) C_p は恒圧熱容量でいずれもイタリックであるが、物質 A の熱容量を示す C_A では C はイタリックであり、A はローマンである。

- j) $10^{-6}Kg$ を示す場合には

mg であって、 μkg ではない。すなわち二つ以上の接頭語は用いない。また kg がよく間違えて Kg となっている。

- k) 摂氏温度を示すには、 $15^\circ C$, $15^\circ C$ ではなく、 $15^\circ C$ である。 $^\circ C$ で単位を表わす記号であるので、 $^\circ$ 印は C の左肩につけるので、15 の右肩や中間におくことはよくない。なお、英語の読み方は degree Celsius であって、degree centigrade ではない。

- l) 三桁以上の数値はまとめて間隔を空けて示す。

たとえば、46593615 ではなく、4 659.361 5 となる。

さて以上の注意をもとにして、机上の Bull. Chem. Soc. Japan 46 (1974) をひもといてみたところ、次のように種々様々の、規則に合致しないものが目についた。先ず図の数は、この一冊で 109 ばかりあるが、その縦軸および横軸のラベリングの正しい図は僅か 6、やや正しいものが 3、残りの 100 は全部上記の約束から違反している。表は約 53 あるが、同様にヘッディングの正しいものは 1 で、残りの 52 は全部違反している。日本化学会の編集委員会では、審査員をわずらわさないで、事務局員でこれを全部修正されるようになったとのことで誠に喜ばしい処置である。最近の日化欧文誌数冊で、特に目

についた例をあげてみよう。

- a) 温度の記載例 (図の場合)。

temp. ($^\circ C$), Temperature ($^\circ C$); $T(K)$: $T(K)$; t ($^\circ C$); T ($^\circ C$); t ($^\circ C$); t ($^\circ C$); T , $^\circ K$; $T(K)$; $t(K)$ その他である。

摂氏目盛なら $t/^\circ C$ または $\theta/^\circ C$ とすべきであり、ケルビン目盛なら T/K である。物理量にローマンを用いたり、単位にイタリックを用いる例は少なくなっていた。

- b) スペクトルの波長または振動数を示す場合 (図)

wave length, $\text{\AA}$; wave length, nm; $\tilde{\nu}$ ($\times 10^3 cm^{-1}$); Wave length (nm); Wavelength (nm); ν (Hz); λ (nm); 等が見られるが、正しくは λ/nm と記すべきである。あるいは振動数で示すときは、 ν/s^{-1} (または ν/Hz) と書くべきであろう。(一時キロカイザー kK が用いられたが、これだとキロ・ケルビンである。)

- c) 物質の融点を記してある表が多数見出されたが、 $MP^\circ C$, $MP, ^\circ C$, $MP(^\circ C)$, $(MP, ^\circ C)$ 等その他さまざまである。正しくは T_m/K と記すべきであろう。

- d) リットル ℓ はなるべく用いないで、 dm^3 , 立方センチメートルは、 $m\ell$ でも c.c. でもなくて、 cm^3 にしたい。

- e) 圧力の単位としては、mmHg, atm, bar, Torr がまだ多く用いられているが、J. Chem. Thermodynamics では、Pa に統一している。

- f) cal を示すときは、なるべく $cal_{J.T.}$ との区別をさけて、 cal_h とする。しかし、なるべく J を用いるようにしたい。

この節を終るにあたって、実際の図または表の実例を今一度掲げて、その正しい書き方を示しておこう。

4.2 その他の熱化学、熱力学データの表示

これについても、すでに文献(3)に詳しい説明があるので、ここでは数式関係の代表的なものについて記述するにとどめる。

- a) 標準状態における水蒸気のエントロピー:

$S_{25}^{0g} H_2O$ ではなく、 S の右肩は 0 でなく、標準圧を示す $^\circ$ であり、温度はケルビン単位、温度、物質、状態は上ツキや下ツキにすると複雑になるので、 $S^\circ(H_2O, g, 298K)$ と記す。

- b) 標準生成エンタルピーのときは、formation の f を下ツキとする。

$\Delta H_f^\circ(298.15K)$

- c) 過剰混合エンタルピーのときは、上肩つきに E を付し:

$H^E = 1643.5 J mol^{-1}$ のように記す。

以上述べた他の多くの例をあげれば際限がないので、
J. Chem. Thermodynamics, J. Chem. Soc. Faraday
Section その他文献(1), (2), (4)等を参照されたい。

表1 熱力学・熱化学等に関する物理量または
単位のイタリック体とローマン体との対比

物理量(イタリック)	左のローマン体
<i>A</i> : ヘルムホルツエネルギー	<i>A</i> : アンペア
<i>C</i> : 熱容量	<i>C</i> : クーロン
<i>F</i> : ファラデー定数	<i>F</i> : ファラッド
<i>G</i> : ギブズエネルギー	<i>G</i> : ガウス, (ギガ: 接頭語)
<i>H</i> : エンタルピー	<i>H</i> : ヘンリー
<i>J</i> : 流速	<i>J</i> : ジュール
<i>K</i> : 平衡定数, 体積弾性率	<i>K</i> : ケルビン
<i>M</i> : モル質量	<i>M</i> : モル毎リットル(濃度)
<i>N</i> : 分子数	<i>N</i> : ニュートン
<i>P</i> : 圧力	<i>P</i> : ポアズ
<i>R</i> : 気体定数	$^{\circ}\text{R}$: 度ランキン
<i>S</i> : エントロピー	<i>S</i> : ジーメンス
<i>T</i> : 絶対温度	<i>T</i> : テスラ, (テラ: 接頭語)
<i>V</i> : 体積	<i>V</i> : ボルト
<i>W</i> : 仕事	<i>W</i> : ワット
(その他小文字は略す)	

表2 (a)

Substance	Temp ($^{\circ}\text{C}$)	$1/T$ ($\text{K} \times 10^3$)	Time (hr)	Pressure (mmHg)	log (P/mmHg)
A	—	—	—	—	—
B	—	—	—	—	—

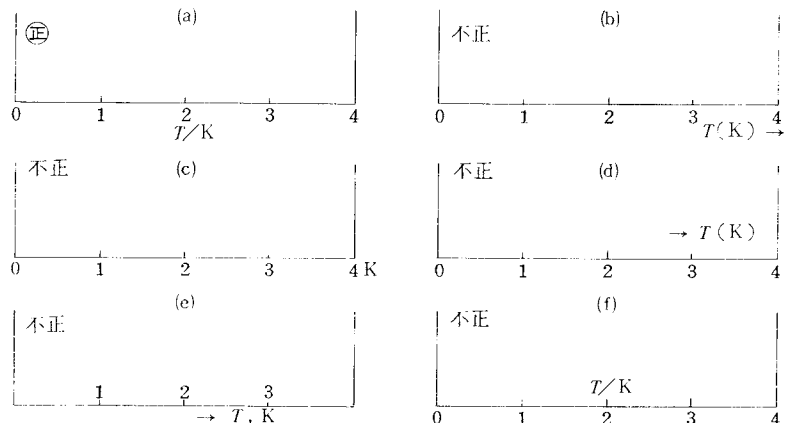
(b)

Substance	T K	kK/T	t h	P Pa	log (P/Pa)
A	—	—	—	—	—
B	—	—	—	—	—

(a)のような書方では単位と物理量が割算になっていない。
(b)のようになるべく $^{\circ}\text{C}$ よりもK, mmHgよりもPaを用
いて割算形式で表示する。

図1 →

(a)のように軸の目盛は
外側, 割算形式の T/K を
外側中央, 矢印はしない
のがよい。(b), (c),
(d), (e), (f)その他
多数の正しくないものが
未だ文献にみられる。



文 献

- 1) 関 集三, 熱・温度測定と熱分析, P.75(1971), 科学技術社
- 2) 関 集三, 菅 宏訳, 熱力学データの発表手続に関する指針, 熱測定研究会ニューズレター特別付録(1971)
- 3) S. Sunner, 高橋洋一訳, IUPAC 熱力学および熱化学委員会50年史, NETSU 1(1~2) P.28(1974)
- 4) IUPAC I-I委員会編, 関 集三, 松尾隆祐訳, 物理・化学量と単位に関する記号と術語の手引(1969)(原本および訳本のいずれも日本化学会で購入できる)
- 5) 文部省, 日本化学会標準化委員会編, 学術用語集, 化学編(1973)
- 6) 桜井, 三井, 国際単位系(SI)について, NETSU 1(3) P.76(1974)
- 7) なおSI単位, 一次情報の発表形式等の全般については,

関 集三, 松尾隆祐, 化学と工業 25, 362, 433, 506, 571, 791(1972)

関 集三, 徂徠道夫訳, M. L. McGlashan 著, Physicochemical Quantities and Units, The Royal Institution of Chemistry (1971), 化学(化学同人)(1973)連載 単行本(1974), 化学同人

関 集三, 一次情報における発表形式の標準化, 情報管理 17, №4 235~242(1974)
等を参照していただければ幸いである。