

# 熱物性データベース

山下雄一郎

(国)産業技術総合研究所 計量標準総合センター  
物質計測標準研究部門 熱物性標準研究グループ

データベース公開URL

<http://tpds.db.aist.go.jp/>

## 報告内容

- データベースの概要と利用状況
- H27/28の熱物性データ整備
- Web版閲覧システムの追加機能
- データの信頼性チェックの取組
- まとめ

## 物質・材料情報のハブ

物質・材料の開発

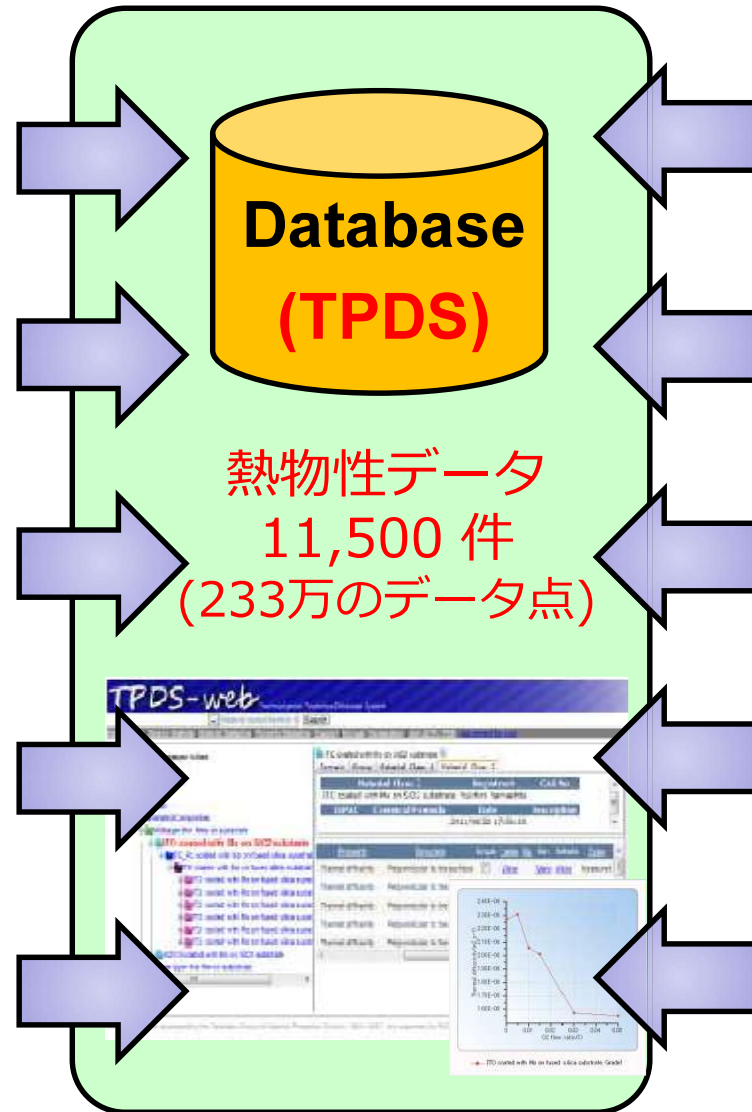
金属・合金

セラミックス

ガラス

半導体

高分子



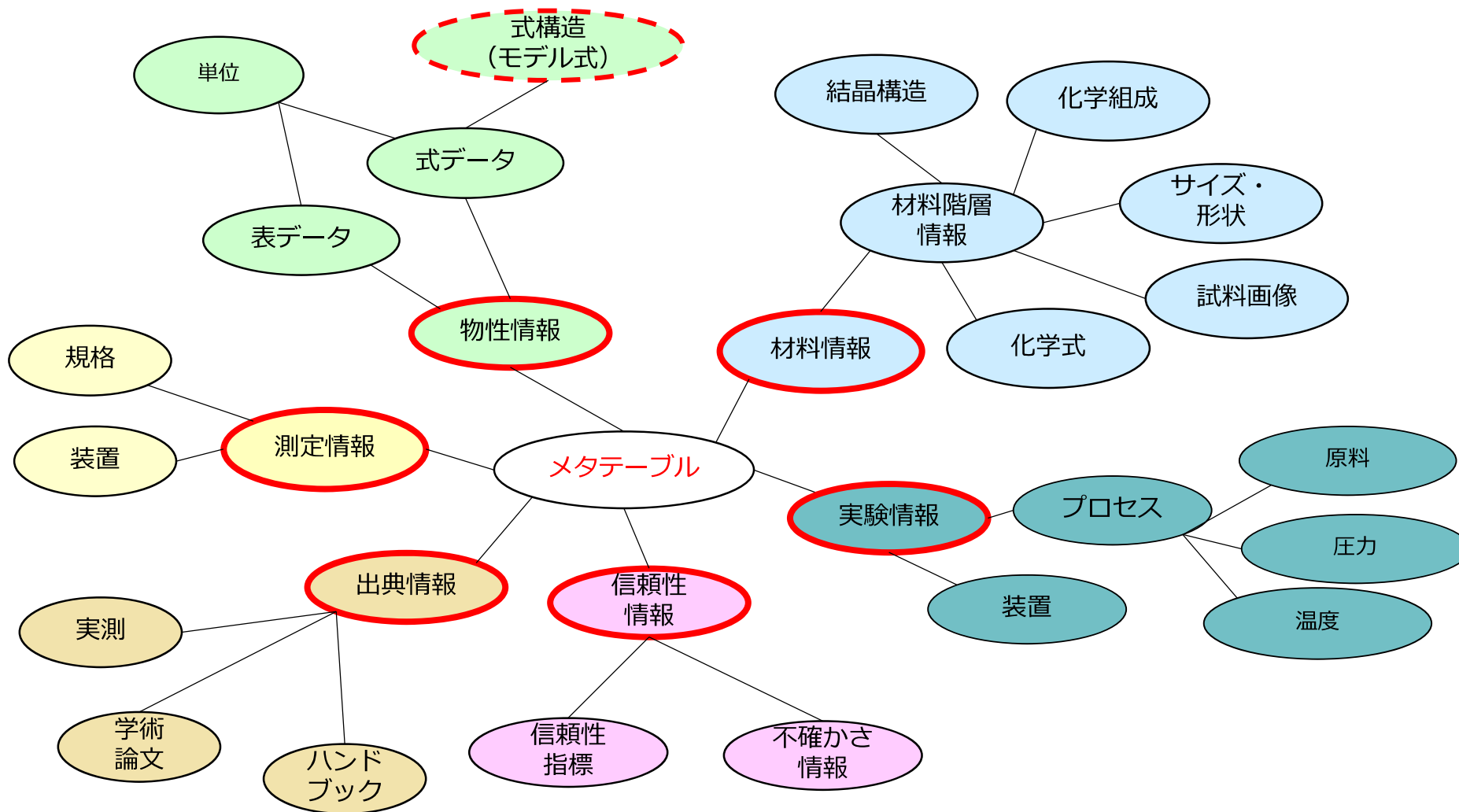
物質・材料の利用  
(データベースユーザー)

エレクトロニクス

プロセス

エネルギー

他多数



1つのデータは6つの要素（物性、材料、実験、測定、出典、信頼性）から構成

**熱物性**

密度、比熱、エンタルピー、熱伝導率、熱拡散率、熱膨張率

**電気物性**

電気抵抗率、ホール移動度、キャリア濃度、ゼーベック係数、  
パワーファクター、誘電率

**光学物性**

屈折率、消衰係数、吸収係数、反射率

**機械特性**

音速、ヤング率、弾性定数

**測定(生)データ1**

XRDスペクトル、サーモリフレクタンス信号



信頼性エビデンス  
+ 解析ベンチマーク用参照データ

**測定(生)データ2**

SEM、TEM、光学顕微鏡写真



画像データと物性との相関

## Fluids

Material	Number of data
<a href="#">Hydrocarbon</a>	40
<a href="#">Esters (d) cyclic compound Carboxylates</a>	169
<a href="#">S containing compounds</a>	290
<a href="#">Ethers</a>	220
<a href="#">Alcohols</a>	529
<a href="#">Phenols</a>	174
<a href="#">N containing compounds</a>	878
<a href="#">Carboxylic Acids</a>	165
<a href="#">Alkenes and Alkynes</a>	281
<a href="#">Natural organic compounds (Terpens)</a>	68
<a href="#">Esters (f) Inorganic acid Esters</a>	122
<a href="#">Cyclic Ethers and O-HeteroRing Compounds</a>	48
<a href="#">Esters (a) mono-Carboxylates</a>	533
<a href="#">Esters (e) hydroxy- oxo- alcoxy Carboxylates</a>	174
<a href="#">Alternative refrigerant</a>	58
<a href="#">Aromatic compounds</a>	621
<a href="#">Esters (b) di-Carboxylates</a>	258
<a href="#">Aldehydes and Ketones</a>	317
<a href="#">OrganoMetallic compounds</a>	179
<a href="#">Inorganic materials</a>	340
<a href="#">Si including compounds</a>	169
<a href="#">Alkanes and AlkaneHalides</a>	1252
<a href="#">Esters (c) Unsaturated Carboxylates</a>	181
<a href="#">Cyclo-alkanes, -alkenes and Spiro-alkanes</a>	237
<a href="#">Natural refrigerant</a>	33
<a href="#">P containing compounds</a>	141
<b>Totals:</b>	<b>7477</b>

## Solids and melts

Material	Number of data
<a href="#">Semi-Metals and Semiconductors</a>	598
<a href="#">Others</a>	8
<a href="#">Other Compounds</a>	120
<a href="#">Polymers</a>	49
<a href="#">Ceramics and Glasses</a>	1018
<a href="#">Welding Materials</a>	31
<a href="#">Minerals</a>	40
<a href="#">Metals</a>	1300
<a href="#">Thin films</a>	465
<a href="#">Slags and Salts</a>	90
<a href="#">Non-metallic Elements</a>	7
<b>Totals:</b>	<b>3726</b>

## Thin films

Material	Number of data
<a href="#">Laminated Composites</a>	305
<b>Totals:</b>	<b>305</b>

データ総数 = 11,508件  
 固体 : 4,031  
 流体 : 7,447

AlドープZnO、VO<sub>2</sub>など透明導電膜の熱物性、電気特性を収録。金属単体を中心に熱拡散率、熱伝導率を収録。100件+αくらいのデータを公開予定。

1. AlドープZnOに関する熱拡散率、熱伝導率、比熱、電気伝導率、キャリア密度、移動度、ゼーベック係数
2. VO<sub>2</sub>薄膜の熱伝導率
3. TaO、Ge<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、CdOの比熱
4. モリブデン、Armco Iron、タングステン、アルミニウム、チタン、サファイア  
プラチナに関する熱拡散率
5. モリブデン、タングステン、タンタルに関する熱伝導率

今後追加があります。



## TPDS-web Thermophysical Properties Data

### 簡易物質検索フォーム



UserName: 
Password:

**物質ツリー**

- MaterialTree
- Search Material
- Material Statistics
- Property
- Solids and Melts
  - Non-metallic Elements
  - Semi-Metals and Semiconductors
  - Metals
    - Steel and Iron
    - Nickel and Cobalt base Alloys
    - Copper and Copper Alloys
    - Aluminium and Aluminium Alloy
    - Titanium and Titanium Alloys
    - Zirconium base Alloys
    - Other Alloys
    - Alkali Metals
    - Alkaline Earth Metals
    - p-block Metal Elements
      - Al Aluminum
        - Aluminum\_Representativ
        - Aluminum\_Bulk, Po**
        - Aluminum\_Wire, Structur

X: Temperature(K)

Y: Density(kg\_m-3)

X: Logarithmic scale in axis  Cardinal number: 10  
min:  max:  Notation: Scientific

Y: Logarithmic scale in axis  Cardinal number: 10  
min:  max:  Notation: Scientific

Search Result

Graph Select

2D Graph 3D Graph

Graph	Material	Property
<input checked="" type="checkbox"/>	Molten Aluminum	Density
<input checked="" type="checkbox"/>	Aluminum(real crystal model)_Bu,SU	Density
<input checked="" type="checkbox"/>	Aluminum(perfect crystal model)_Bu,SU	Density

マルチタスク  
パネル





## TPDS-webからオンラインで入手可能

$$TD(T) = 3.42 \times 10^{-6} + 1.224 \times 10^{-2} (T - 156.1)^{-1}$$



関数の構造だけを抽出し、提供

$$TD(T, t_0, a_0, a_1) = a_0 + a_1(T - t_0)^{-1}$$

Equation data - Google Chrome

localhost:56731/property/propertyequation.aspx?MaterialName=RM8424%20C

MaterialName:  
 Thermal Property:Thermal diffusivity  
 Representative Property:Diffusion coefficient  
 Type:Measured  
 Traceability:National standard  
 Authorization:Evaluated  
 Unit:m<sup>2</sup>s<sup>-1</sup>  
 Image:( No Images )

No.	Equation	Variable Range
1	TD=1.224*10 <sup>-(2)</sup> /(T-156.1)+3.42*10 <sup>^(-6)</sup>	<a href="#">View</a>

No.	Equation for Fortran	Variable Range
1	TD=1.224*10 <sup>**(-2)</sup> /(T-156.1)+3.42*10 <sup>**(-6)</sup>	<a href="#">View</a>

No.	MathML	Variable Range	Model Eq.
1	TD1 (T, 3.42e-6, 1.224e-2, 156.1) = 3.42e-6 + 1.224e-2(T - 156.1) <sup>-1</sup>	<a href="#">View</a>	<a href="#">View</a>

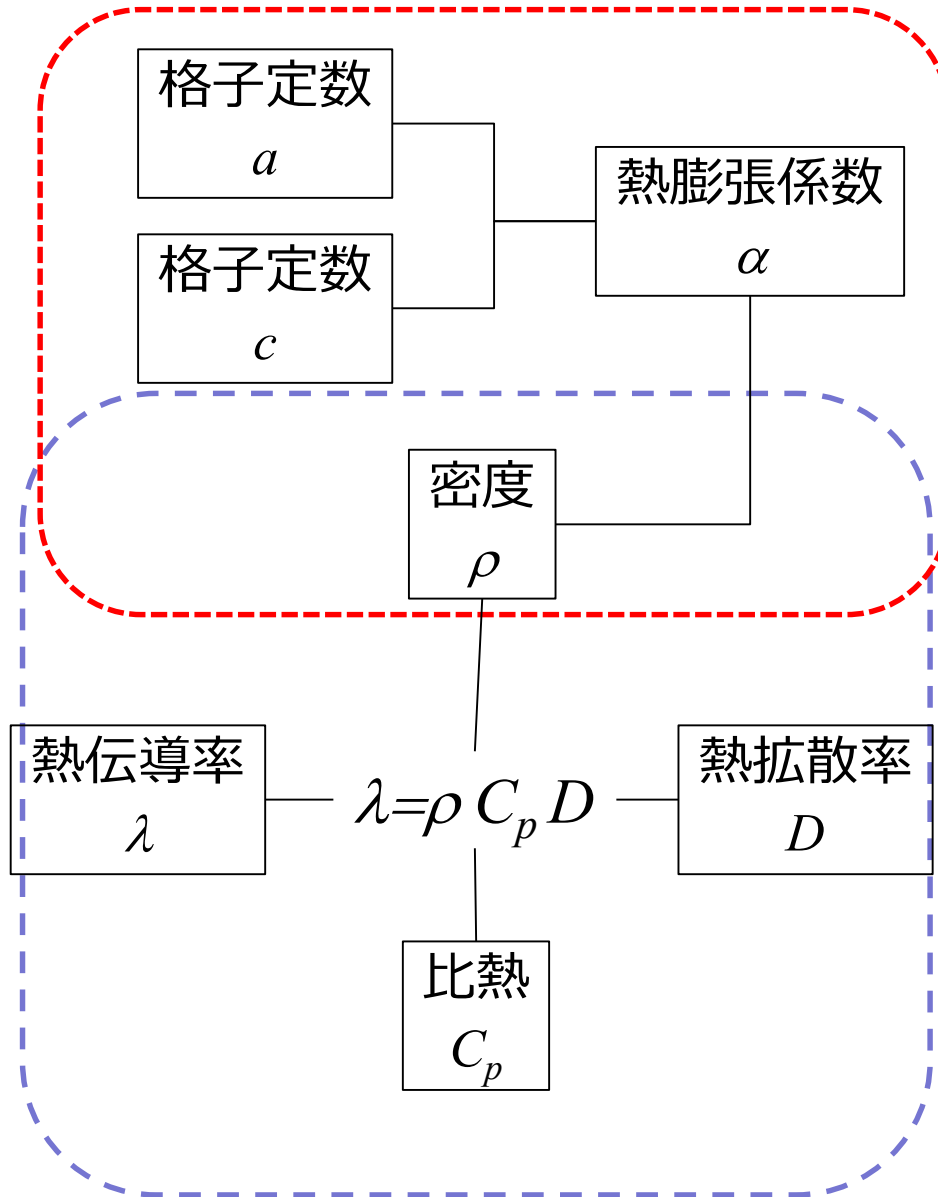
POWERED BY **MathJax**

Math Expression of MathML data is based on the MathJax Technology.

```

Model Equation:
<CDDefinition> <Name> TD1 </Name> <Role>application</Role> <Description> Thermal
diffusivity equation 1 </Description> <CMP> TD1(T,a0,a1,t0) = a0 + a1*(T-t0)^(-1)
</CMP> <FMP> <OMOBJ xmlns="http://www.openmath.org/OpenMath" version="2.0"
cdbase="http://www.openmath.org/cd"> <OMA> <OMS cd="arith1" name="eq" />
<OMA> <OMS cd="aist_tpdb1" name="TD1" cdbase="http://www.example.org/cd" />
<OMATTR> <OMATP> <OMS cd="cc" name="type"/> <OMS cd="SI_BaseQuantities"
name="temperature"/> </OMATP> <OMV name="T"/> </OMATTR> <OMV name="a0"
/> <OMV name="a1" /> <OMV name="t0" /> </OMA> <OMA> <OMS cd="arith1"
name="plus"/> <OMV name="a0" /> <OMA> <OMS cd="arith1" name="times"/> <OMV
name="a1" /> <OMA> <OMS cd="arith1" name="power"/> <OMA> <OMS cd="arith1"
name="minus"/> <OMATTR> <OMATP> <OMS cd="cc" name="type"/> <OMS
cd="SI_BaseQuantities" name="temperature"/> </OMATP> <OMV name="T"/>
</OMATTR> <OMV name="t0"/> </OMA> <OMI>-1</OMI> </OMA> </OMA>
</OMA> </OMA> </OMOBJ> </FMP> </CDDefinition>
    
```

記述フォーマット：OpenMath2.0



“Data Evaluation Theory and Practice for Materials Properties”,  
R. G. Munro, NIST SP 960-11, (2003)

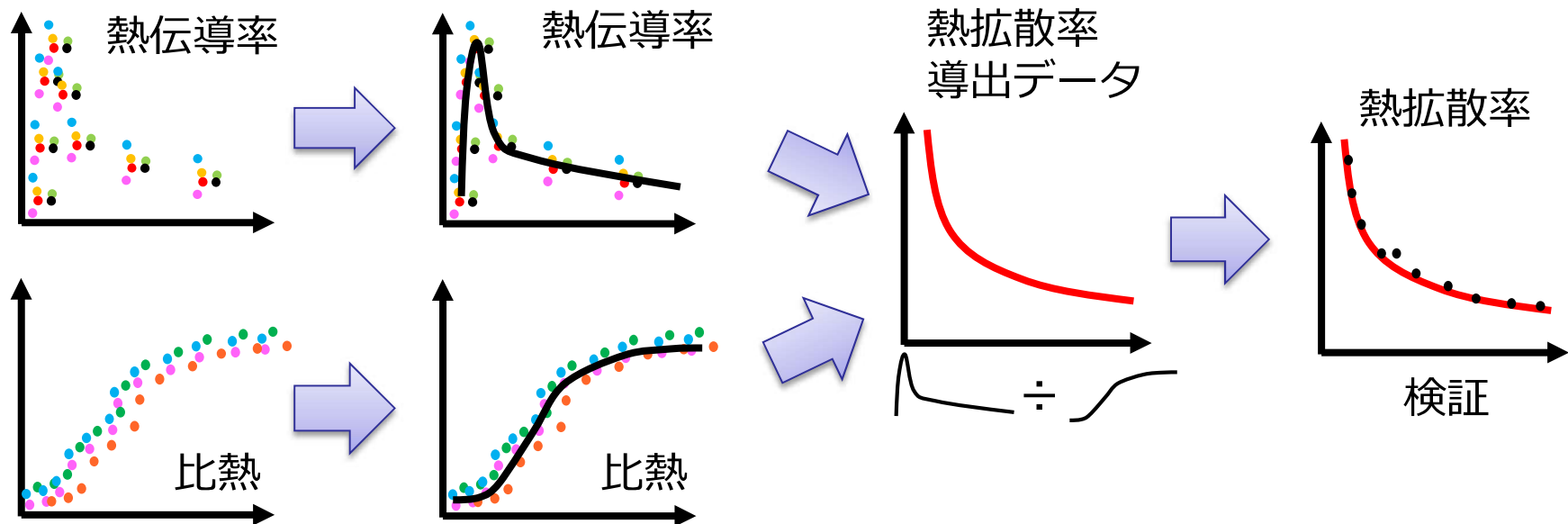
格子定数の温度依存性から、熱膨張係数、密度を構築 & チェック

熱拡散率、比熱、密度、熱伝導率の関係からコンシステンシーをチェック

各物性データは離散点群同士であるので、点群に対して関数を当てはめ、**線と線の評価**を実施

離散点の集まりである物性データをモデル関数にあてはめ、物性間の関係に基づいて整合性をチェックするアプリケーションを開発する

## 物性データに対する処理イメージ





産総研 | 物性データ整合性検証システム

① 相関式読込    ② あてはめ    アプリ式作成    データ比較

(thermal conductivity/specific heat capacity/density) 右辺を他の物性から計算し組み立てる。

No	Property	Equation
1	thermal conductivity	
2	specific heat capacity	
3	density	

比較範囲: 200 ~ 1500

熱拡散率定義:  $\alpha = \frac{\lambda}{\rho C}$

表示 材料ID 460 物性 Thermal conductivity

MetaID	MatName	Property
16485	Molybdenum (TPH 2008)	Thermal diffusivity
1913	Molybdenum	Thermal diffusivity
1914	Molybdenum	Thermal diffusivity
1915	Molybdenum	Thermal diffusivity
1916	Molybdenum	Thermal diffusivity
434	Molybdenum(TPH)	Thermal diffusivity
27156	Molybdenum_Bu,Pc,Grade2	Thermal diffusivity
27157	Molybdenum_Bu,Pc,Grade2	Thermal diffusivity
2047	Molybdenum(TPS)	Thermal conductivity
16483	Molybdenum (TPH 2008)	Thermal conductivity

Property	Valuable 1
5.5897001127656...	299.903686529438
5.0647900934564...	407.003997802734
4.7684599849162...	521.276977539063
4.4161301048006...	643.903015136719
4.30721011071E...	674.119018554688
4.0133101720130...	734.189025878906
3.8759699236834...	848.825012207031
3.7962599890306...	958.776000976563
3.7770598282804...	1029.60302734375
3.4895299904746...	1077.09704589844
3.5660301364259...	1112.92395019531

$$f(T, a_0, a_1, t_0) = a_0 T + a_1 / (T - t_0)$$

拘束条件

Model:

$(T, a_0, a_1, t_0) = ((a_0 * T) + (a_1 / (\text{System.Math.Pow}((T - t_0), -1)))) =$

Error of y = 0.368403622602621  
 a[0] = -0.074894299332007 ± 3.18776016747627E-11  
 a[1] = -826692.335623684 ± 0.000432793943845649  
 a[2] = 5446.64601545503 ± 3.03078791435136E-06  
 Processing Time in ms = 16881

Parameters	Var. Flag	Min.	Max.	Fixed.
T	<input checked="" type="checkbox"/>	200	1500	
a0	<input type="checkbox"/>			
a1	<input type="checkbox"/>			
t0	<input type="checkbox"/>			

データリスト表示  Thermal conductivity

List of TP Data

MetaID	MatName	Property
2047	Molybdenum(TPS)	Thermal conducti...
16483	Molybdenum (TP...	Thermal conducti...
12613	Molybdenum_Bul...	Thermal conducti...
433	Molybdenum(TPH)	Thermal conducti...

物性データ表示

Table of Selected data

物性値	温度
109	1073.19995117188
108	1100
15.1999998092651	1
30.3999996185303	2
45.5999984741211	3
60.7999992370605	4
76	5
91.0999984741211	6
106	7
121	8
136	9
151	10

当てはめ対象の物性データはCSVファイルからの直接入力も可能

右辺中の物性値を関数化後

相関式読込    あてはめ    **③** 関数式作成    **④** データ比較

(((a[0]\*x[i])+(a[1]\*(System.Math.Pow((x[i]-a[2])-1)))/(a[3]+(a[4]\*x[i])+(a[5]\*(System.Math.Pow(x[i],2)))+(a[6]\*(System.Math.Pow(x[i],-0.5)))+(a[7]\*(System.Math.Pow(x[i],-2)))/10280))))

No	Property	Equation
1	thermal conducti...	((a0*T)+(a1*(System.Math.Pow((T-t0)-1))))
2	specific heat cap...	(a1+(a2*T)+(a3*(System.Math.Pow(T,2)))+(a4*(System.Math.Pow(T,1.5)))+(a5*(System.Math.Pow(T,-2))))
3	density	280

比較範囲  
200 ~ 1500

表示    材料ID 460    物性 Thermal conductivity

MetaID	MatName	Property
1618	Molybdenum(TPS)	Thermal diffusivity
16485	Molybdenum (TPH 2008)	Thermal diffusivity
1913	Molybdenum	Thermal diffusivity
1914	Molybdenum	Thermal diffusivity
1915	Molybdenum	Thermal diffusivity
1916	Molybdenum	Thermal diffusivity
434	Molybdenum(TPH)	Thermal diffusivity
27156	Molybdenum_Bu,Pc,Grade2	Thermal diffusivity
27157	Molybdenum_Bu,Pc,Grade2	Thermal diffusivity
2047	Molybdenum(TPS)	Thermal conductivity
16488	Molybdenum (TPH 2008)	Thermal conductivity

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho C}$$

Property	Valuable1
5.5887001127656...	299.903686523438
5.0647900934564...	407.003997802734
4.7684599849162...	521.276977539063
4.4161301048006...	643.903015136719
4.30721011071E...	674.119018554688
4.0133101720130...	734.189025878906
3.8759699236834...	848.825012207031
3.7962599890306...	958.776000976563
3.7770598282804...	1029.60302734375
3.4895299904746...	1077.09704589844
3.5660301364259...	1112.92395019531

比較



手順1

材料を選択 → モリブデン

手順2

検証に使う量と式を選択 → 熱伝導率 = 密度 × 比熱容量 × 熱拡散率

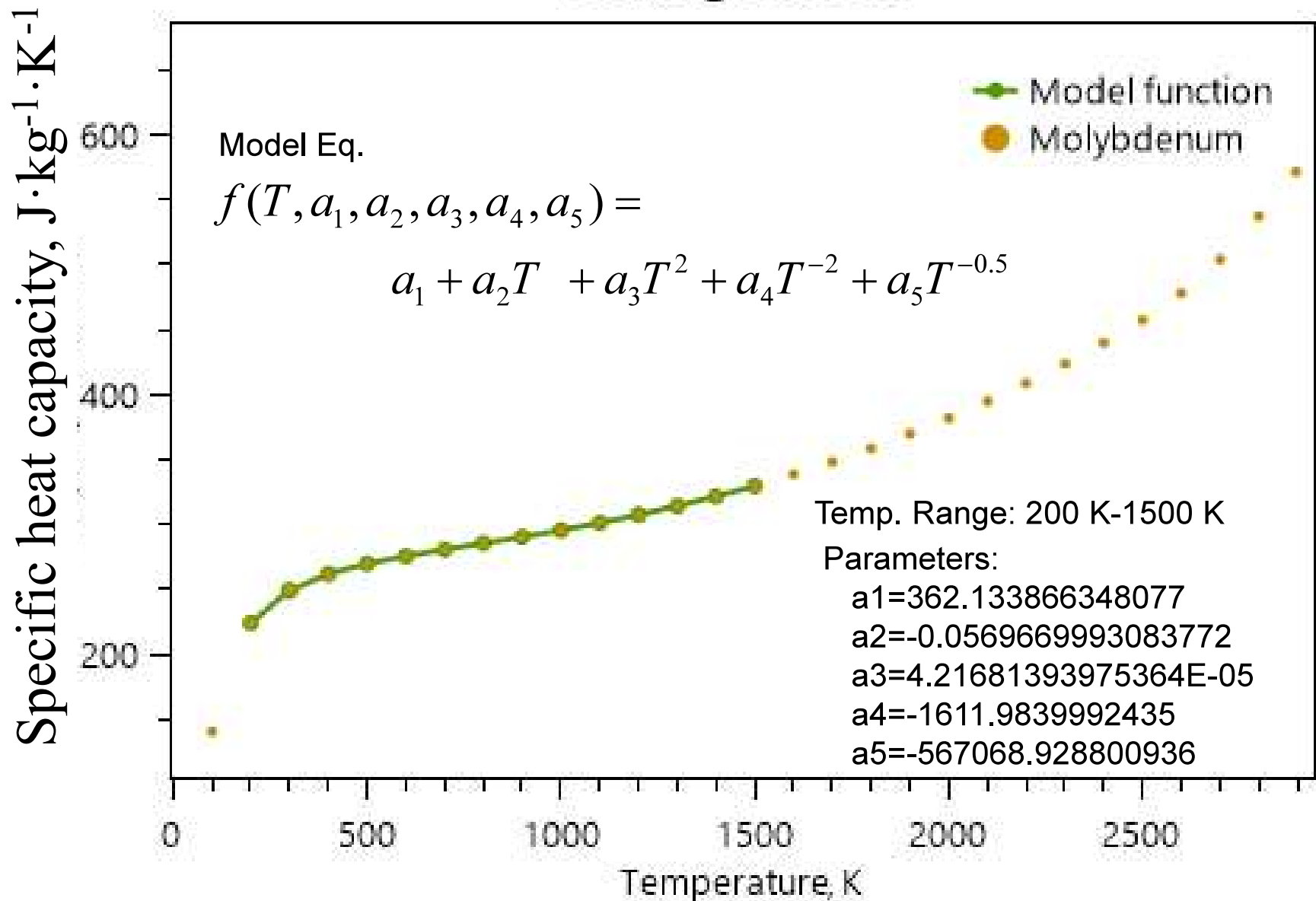
手順3

右辺の量に対してモデル式当てはめ(比熱容量、熱拡散率、密度)

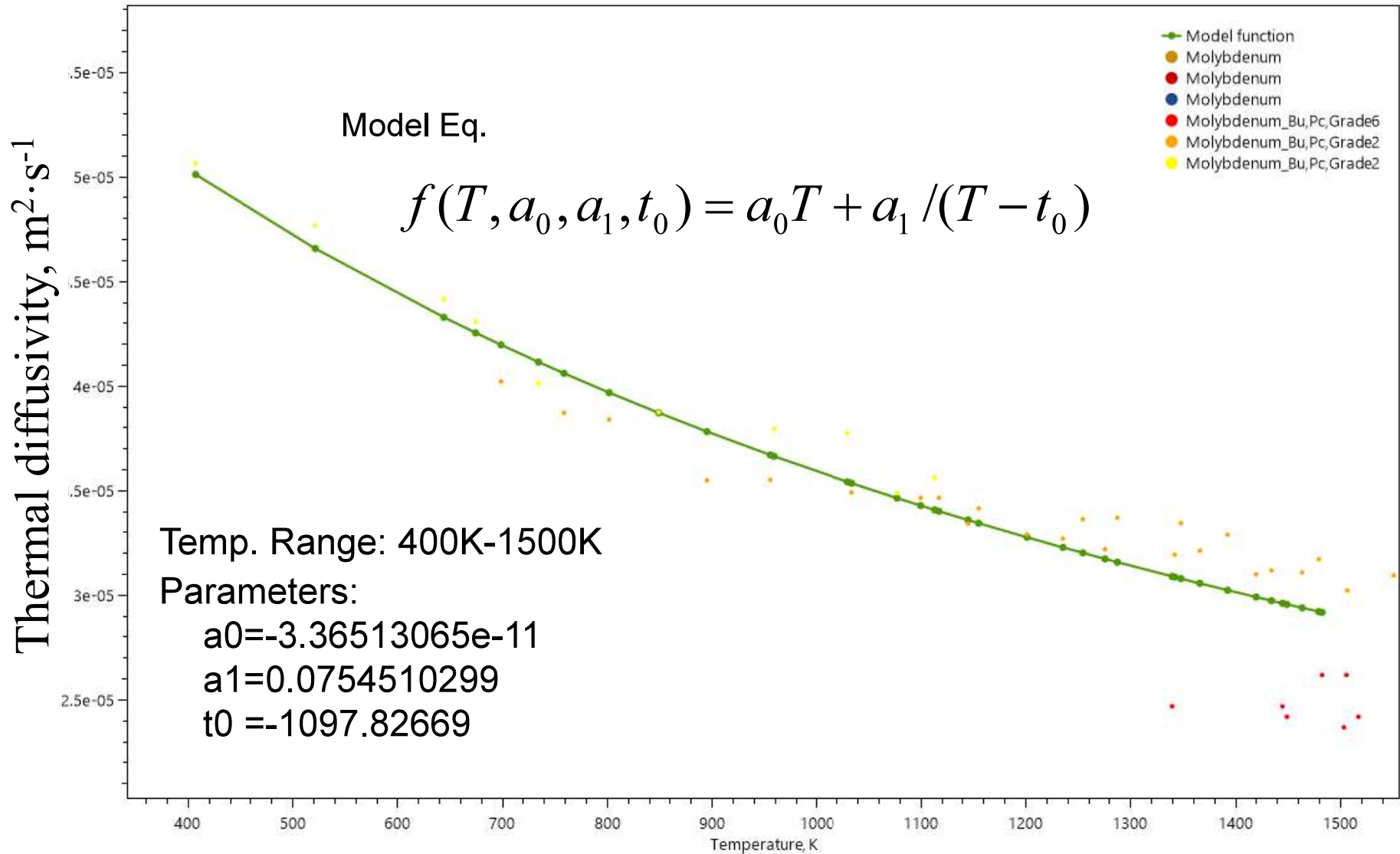
手順4

左辺の量と比較

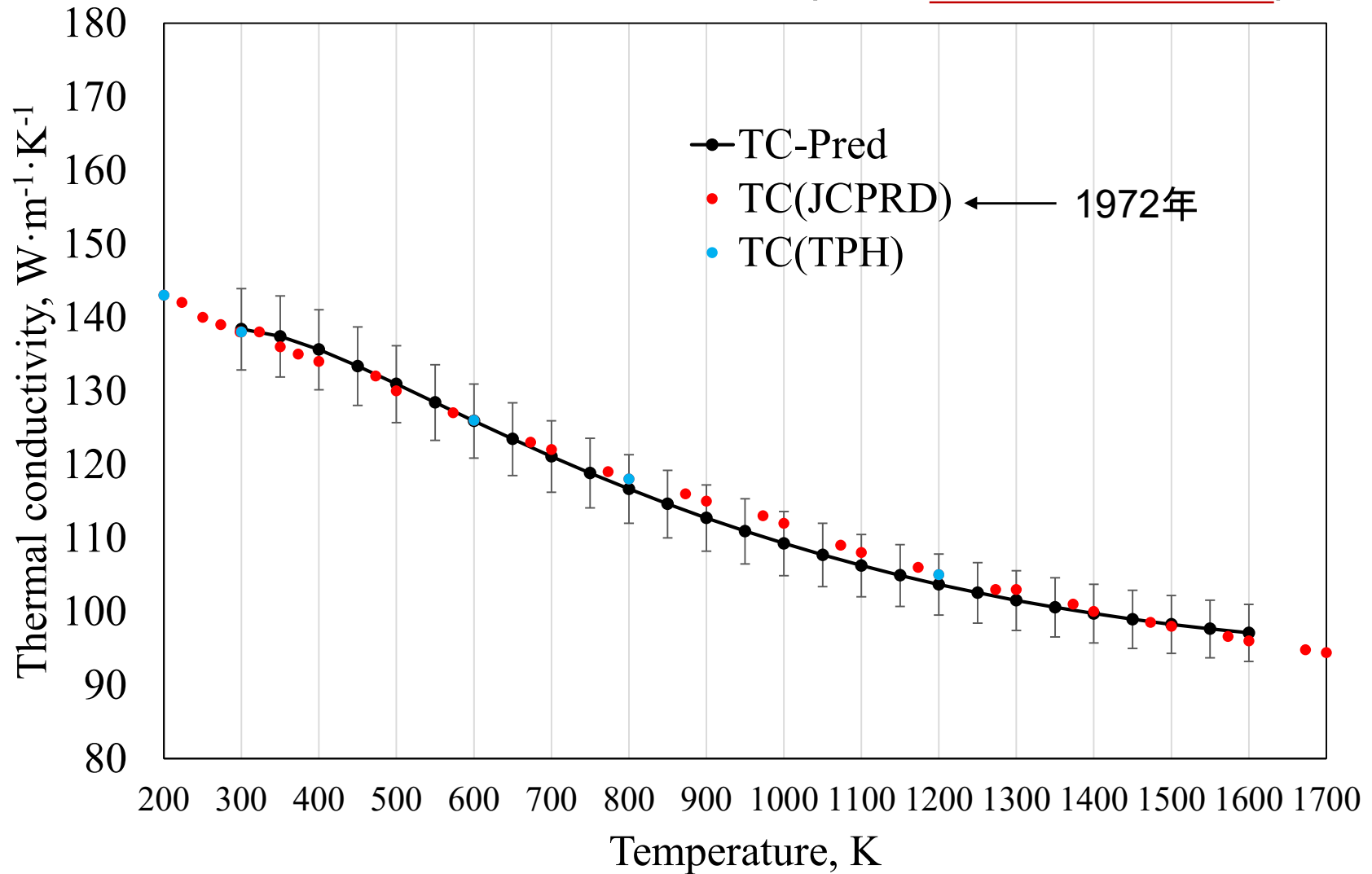
## Fitting Result



Fitting Result



熱伝導率 vs 熱伝導率 (密度 × 比熱容量 × 熱拡散率)



4%以内にJCRPD推奨値や熱物性ハンドブックの値が収まる

- 熱物性データベースの収録熱物性データ：  
11,500件（223万データ点）
- 上記に加え、100件+aの物性データを公開予定
- Web版閲覧システムのデータ表示機能の正常化
- データ整合性チェックの取り組みを開始

#### 今後の取り組み

- 熱物性データの拡充
- データ整合性チェックアプリ（Web版の作成）
- データ整合性チェックにおける不確かさ導入の検討