

熱物性データベース活動報告

山下雄一郎

産業技術総合研究所 計量標準総合センター
計量標準総合センター研究企画室
(兼) 物質計測標準研究部門 熱物性標準研究グループ
(兼) 物質計測標準研究部門 材料構造・物性研究グループ

1

報告内容

- データベースの概要と周辺動向
- 2020/2021年度の熱物性データ整備
- Web閲覧システムの紹介
- まとめ

2

物質・材料の開発

物質・材料情報のハブ

物質・材料の利用

(データベースユーザー)

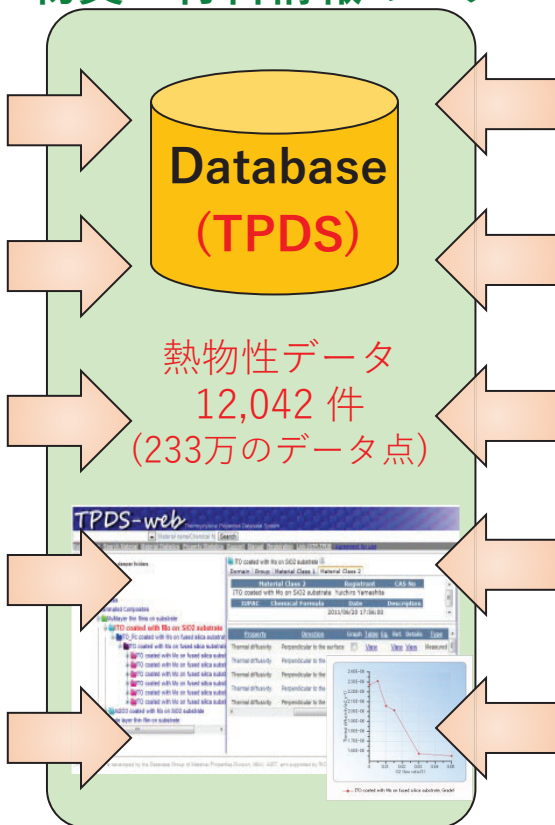
金属・合金

セラミックス

ガラス

半導体

高分子



エレクトロニクス

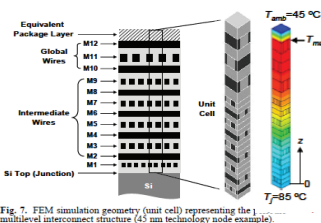
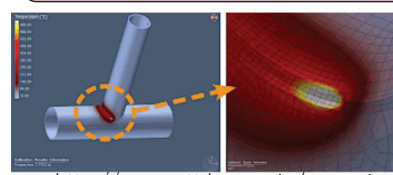


Fig. 7. FEM simulation geometry (unit cell) representing the 1-mutiview interconnect structure (45 nm technology node example).

S.Im et al., Proc. of 22th VMIC, 2005, pp.525-530

プロセス



<http://www.nttd-es.co.jp/magazine/backnumber/no74/no74-sw.html>

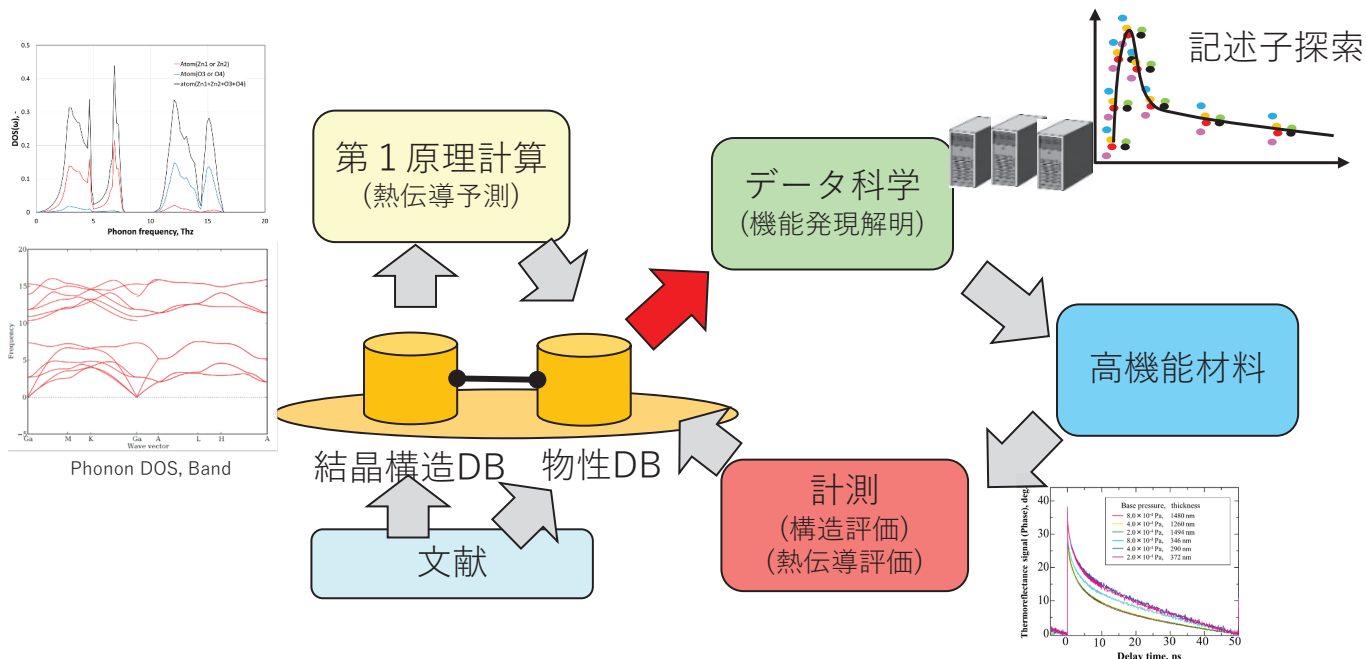
エネルギー

他多数 3

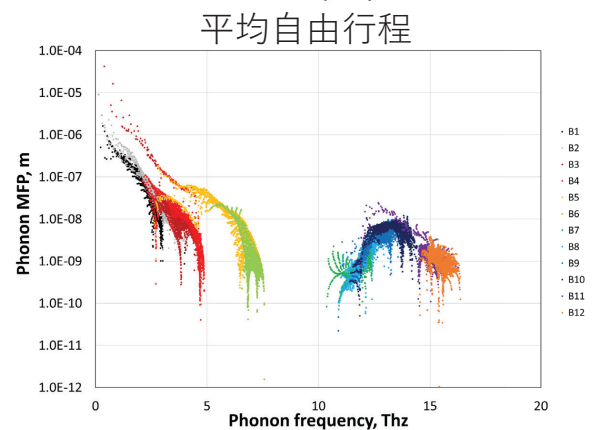
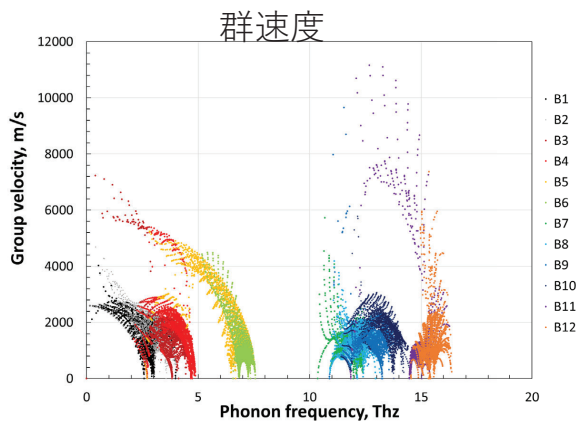
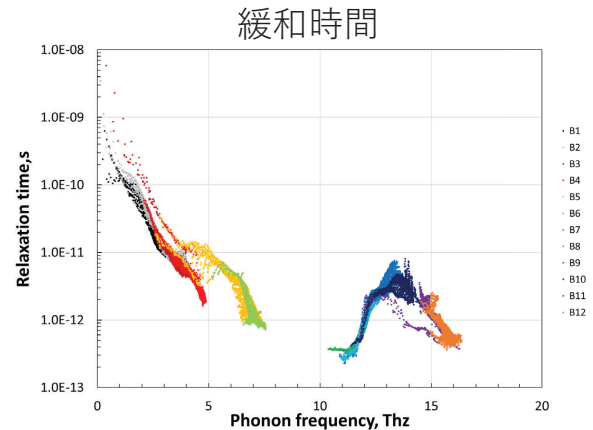
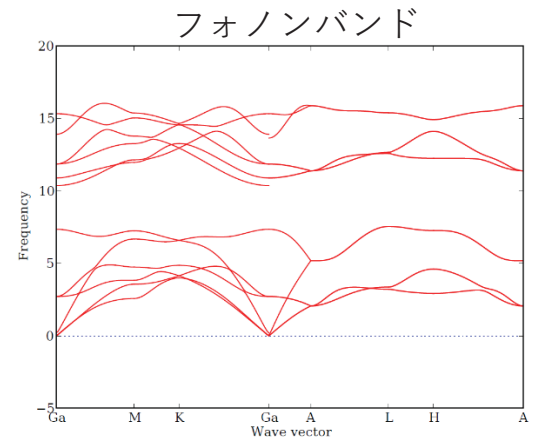
ニーズ：マテリアルズインフォマティクス

物質・材料分野における膨大なデータ群の蓄積と最先端のデータ科学・情報科学を組み合わせた材料探索手法。

データベースの整備を進めながら、最先端の情報科学・データ科学の材料開発への実装を図り、材料開発ニーズに対する有効なソリューションを提供する。



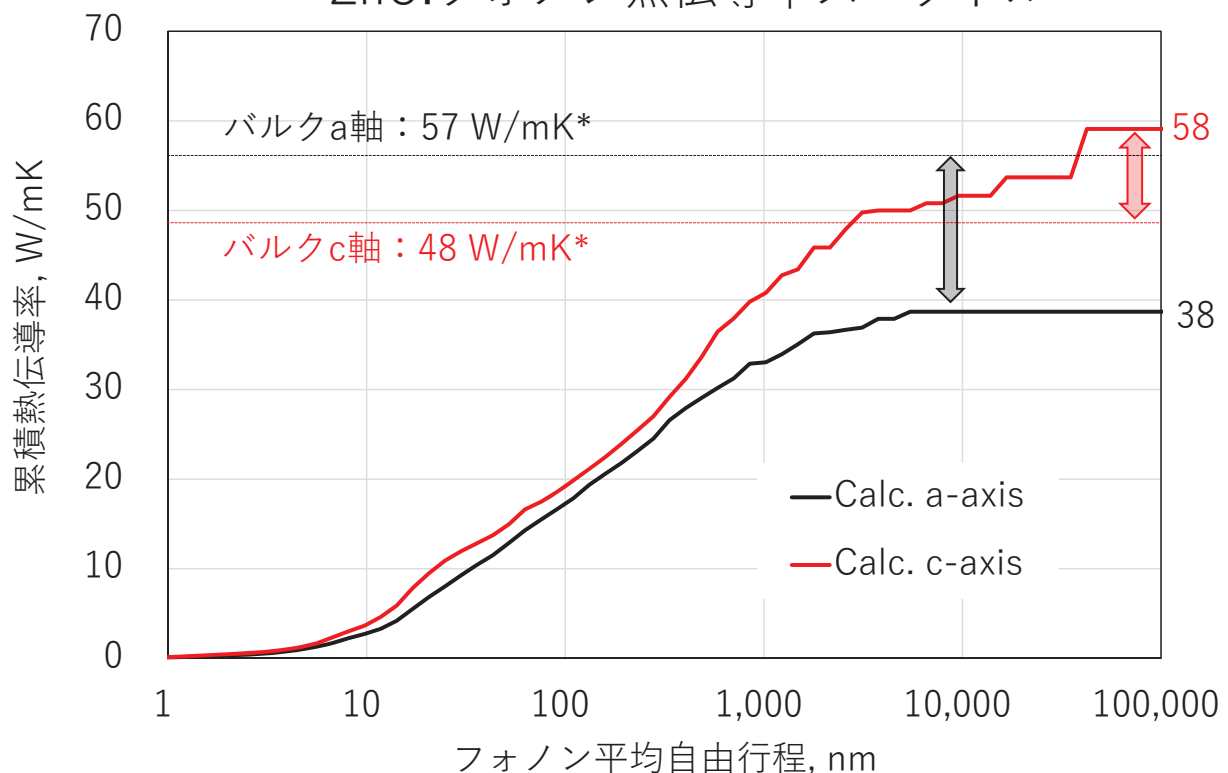
計算科学からの新たな種類のデータ ZnO:フォノンバンド・緩和時間・群速度・MFP



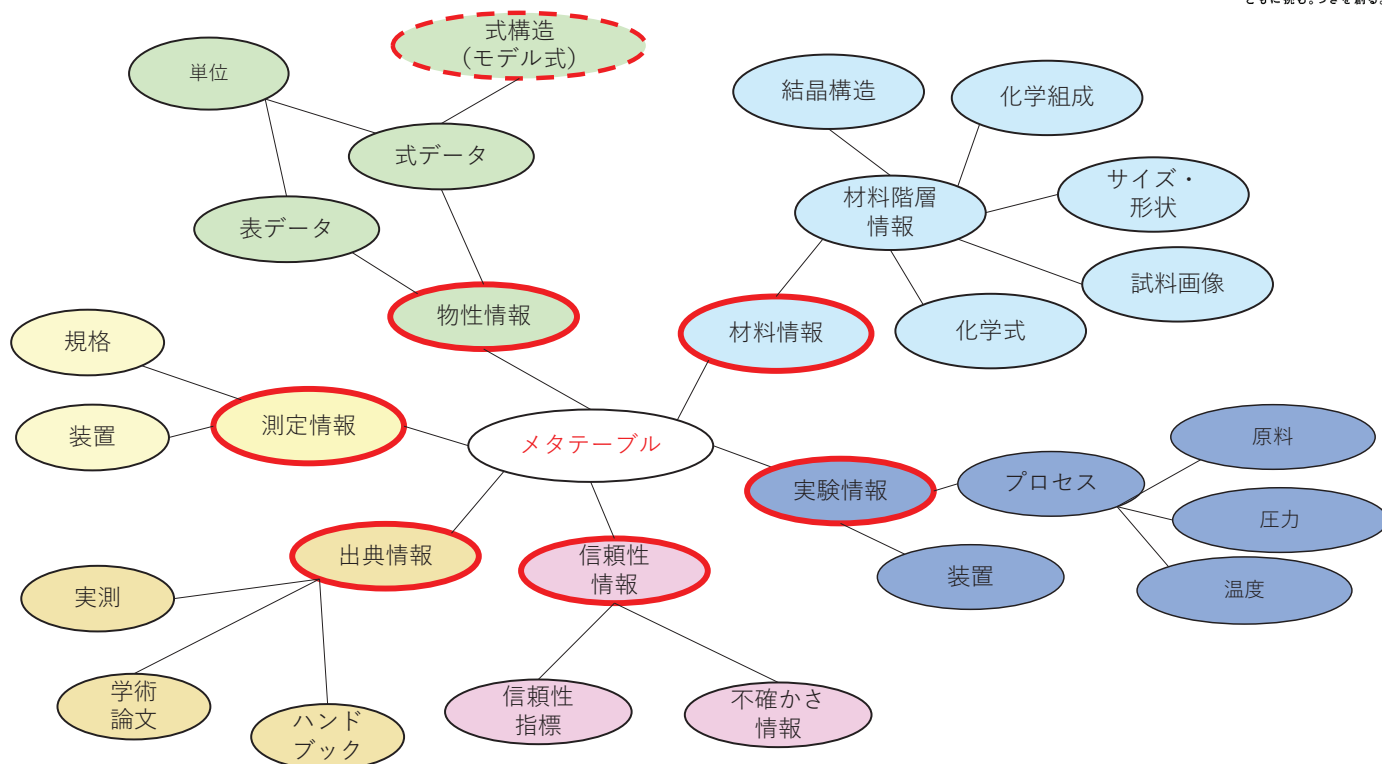
5

計算科学に基づく物性

ZnO:フォノン熱伝導率スペクトル



*G. A. Slack, Phys. Rev. B, 6(1972).



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

7

収録対象

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

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

XRDスペクトル、

測定（生）データ3

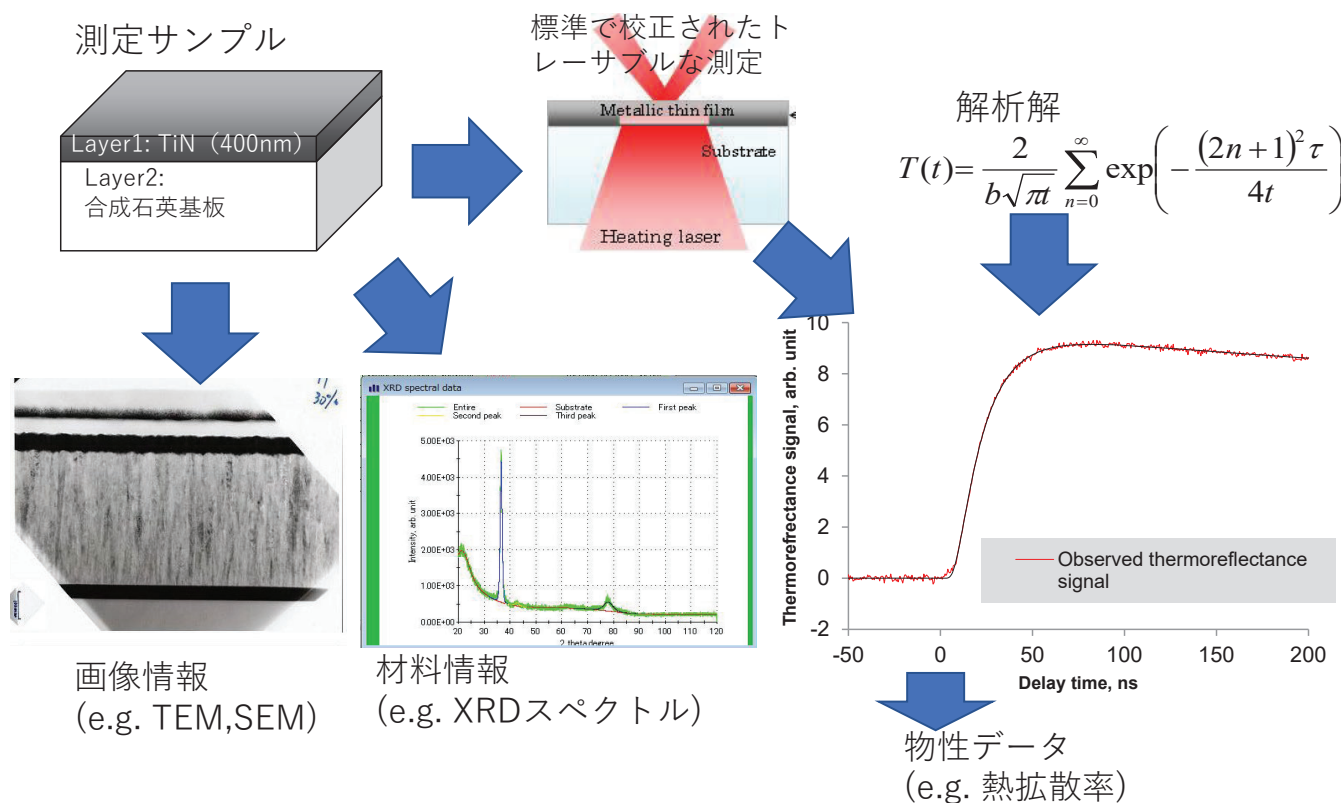
SEM、TEM、光学顕微鏡写真



構造-物性発現の相関

8

実験データに対応したデータ収録（例：薄膜）



9

収録データ

Fluids

Material	Number of data
Hydrocarbon	40
Esters (d) cyclic compound Carboxylates	169
S containing compounds	290
Ethers	220
Alcohols	529
Phenols	174
N containing compounds	878
Cyclic Ethers and O-HeteroRing Compounds	48
Carboxylic Acids	165
Alkenes and Alkynes	281
Esters (a) mono-Carboxylates	536
Natural organic compounds (Terpens)	68
Esters (e) hydroxy-, oxo-, alkoxy Carboxylates	178
Esters (f) Inorganic acid Esters	122
Alternative refrigerant	58
Aldehydes and Ketones	317
Aromatic compounds	621
OrganoMetallic compounds	179
Esters (b) di-Carboxylates	262
Esters (c) Unsaturated Carboxylates	181
Cyclo-alkanes, -alkenes and Spiro-alkanes	237
Inorganic materials	340
Natural refrigerant	33
Si including compounds	169
Alkanes and AlkaneHalides	1252
P containing compounds	141
Totals:	7488

Solids and melts

Material	Number of data
Semi-Metals and Semiconductors	787
Others	8
Other Compounds	120
Polymers	61
Ceramics and Glasses	1250
Welding Materials	31
Minerals	40
Metals	1390
Thin films	465
Slags and Salts	90
Non-metallic Elements	7
Totals:	4249

Thin films

Material	Number of data
Laminated Composites	305
Totals:	305

データ総数 = 12,042件
 固体 : 4,554
 流体 : 7,488

JAXA石川毅彦教授より、高温融体熱物性に関する出版論文の元データをご提供頂き、データを公開

オスミウム、イリジウム、プラチナ、ルテニウム、アルミナ、酸化ガドリニウム、酸化ユーロピウムなどの密度、粘性係数。

これらのデータは静電浮遊法で計測されたものです。

一部は国際宇宙ステーション（ISS）きぼう実験施設にて計測されたものです。

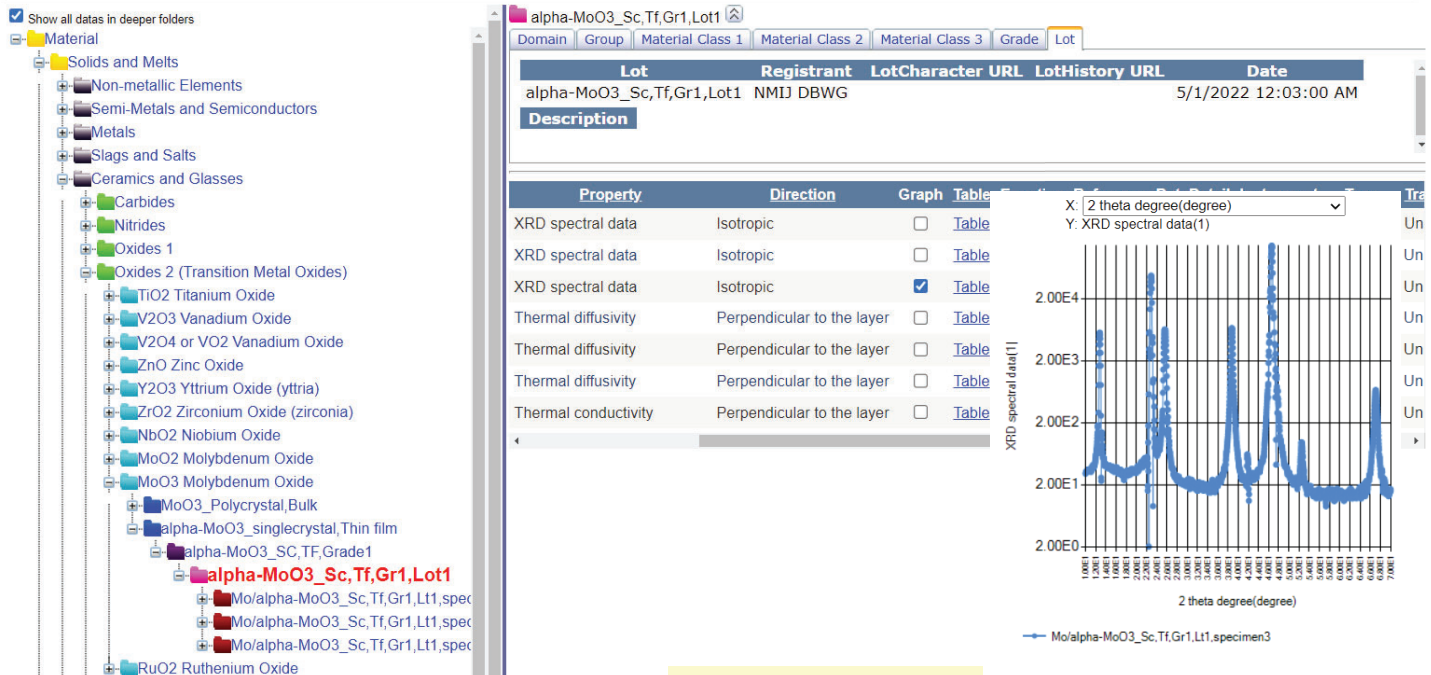
2021年度主な整備データ

- 酸化物薄膜の熱物性、構造
- 脂肪酸メチル粘性データ

1. α - MoO_3 薄膜の熱拡散率、熱伝導率、界面熱抵抗、XRDスペクトル
2. SnO_2 薄膜の熱伝導率、界面熱抵抗、ゼーベック係数
3. Methyl oleate、methyl linoleate、methyl Myristateの粘性係数の圧力依存性

産総研計量標準総合センターが協力した研究のデータを収録

2021年度整備データ例： α -MoO₃薄膜

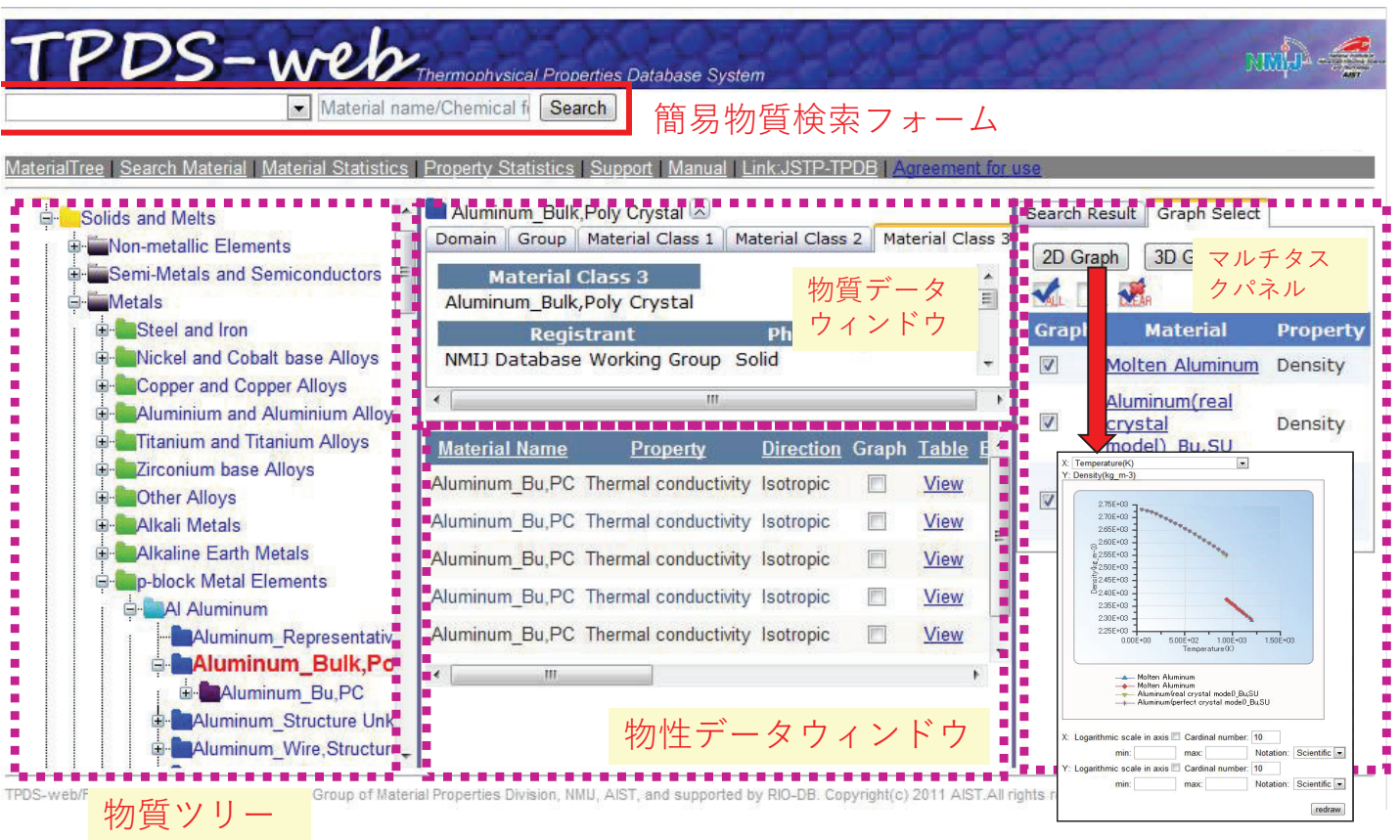


α -MoO₃薄膜
XRDスペクトル

13

参考：Web版閲覧システム（TPDS-web）

サイトURL <https://tpds.db.aist.go.jp/>



14

2020/2021年度

- 熱物性データベースの収録熱物性データ：
12,042件（220万超のデータ点）
- 2020年度：高温融体の物性データを新規公開
- 2021年度：28件のデータを新規公開
- データベースポータルサイト発信、Web版閲覧システム安定運用業務

今後の取り組み

- 熱物性データの拡充
- データ解析アプリWeb版の作成など