

2008/02/07 @秋葉原コンベンションホール
第3回 固体熱物性クラブ

分散型熱物性データベースの開発

産業技術総合研究所 計測標準研究部門

○山下雄一郎、馬場哲也

アウトライン

1. 分散型熱物性データベース
2. データベースの活用
3. まとめ

熱物性DBへの取組

- 日本熱物性学会提言「知的基盤としての熱物性のあり方」
(1998年7月)

【提言3】

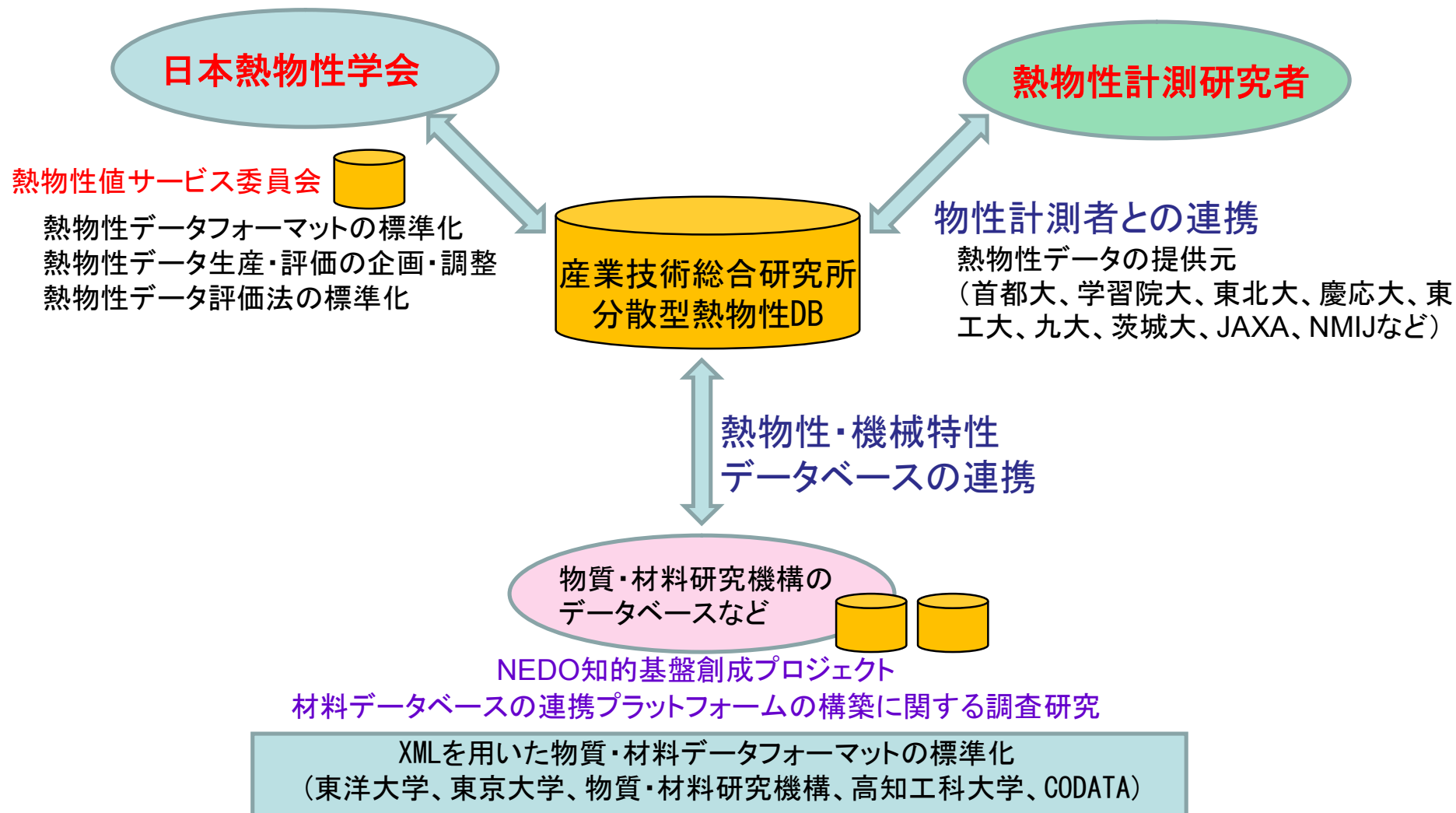
先端的材料およびその関連物質に関する基礎物性データを、我が国独自で測定・取得し、評価できる能力を保持すべきである。またそれらを実証するものとして一定規模で高水準のデータベースを保有すべきである。

- 知的基盤整備重点分野における2010年の目標
知的基盤整備特別委員会 (1999年12月)

【材料】

- 材料物性データベースの規模で現在の米国並みの100万件程度を目指す

分散型熱物性DBの周囲環境



分散型熱物性DB:統計データ

収録件数の多い物質

(総データ数:8453件)

流体(主に有機物):	7730件
固体および融体	1119件
金属:	645件
セラミックス:	139件
塩・溶融塩:	83件
半導体・半金属:	66件

収録件数の多い物性

(総データ数:8453件)

表面張力:	3700件(+1600)
蒸気圧:	2162件
密度:	429件(+45準備中)
熱伝導率:	351件(+115)
定圧比熱:	261件(+60準備中)

収録データの特徴;

- 流体(有機物)の表面張力、蒸気圧
- 元素の密度、熱伝導率、定圧比熱
- 先端材料の熱物性

(2008/01/24,一般公開分)

閲覧専用ソフトウェア(InetDBGV)

(<http://www.aist.go.jp/RIODB/TPDB/DBGVsupport/>)

The screenshot shows the InetDBGV web application interface. On the left is a hierarchical tree view of materials, including categories like Fluids, Solids and Melts, and Metals. The main area displays a table of properties for selected materials.

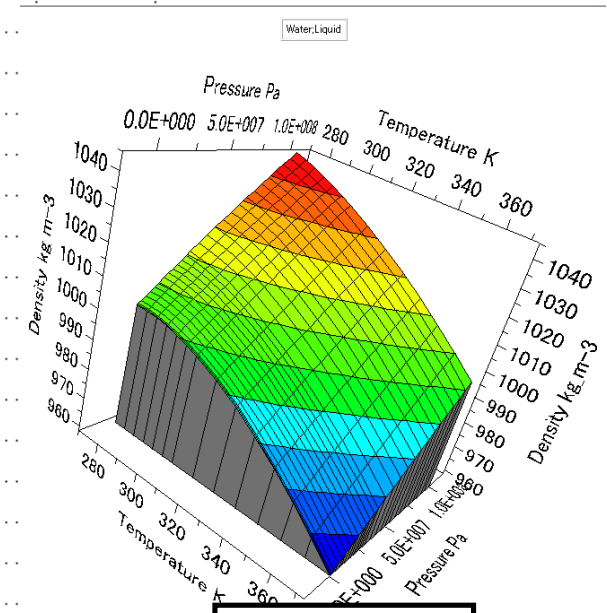
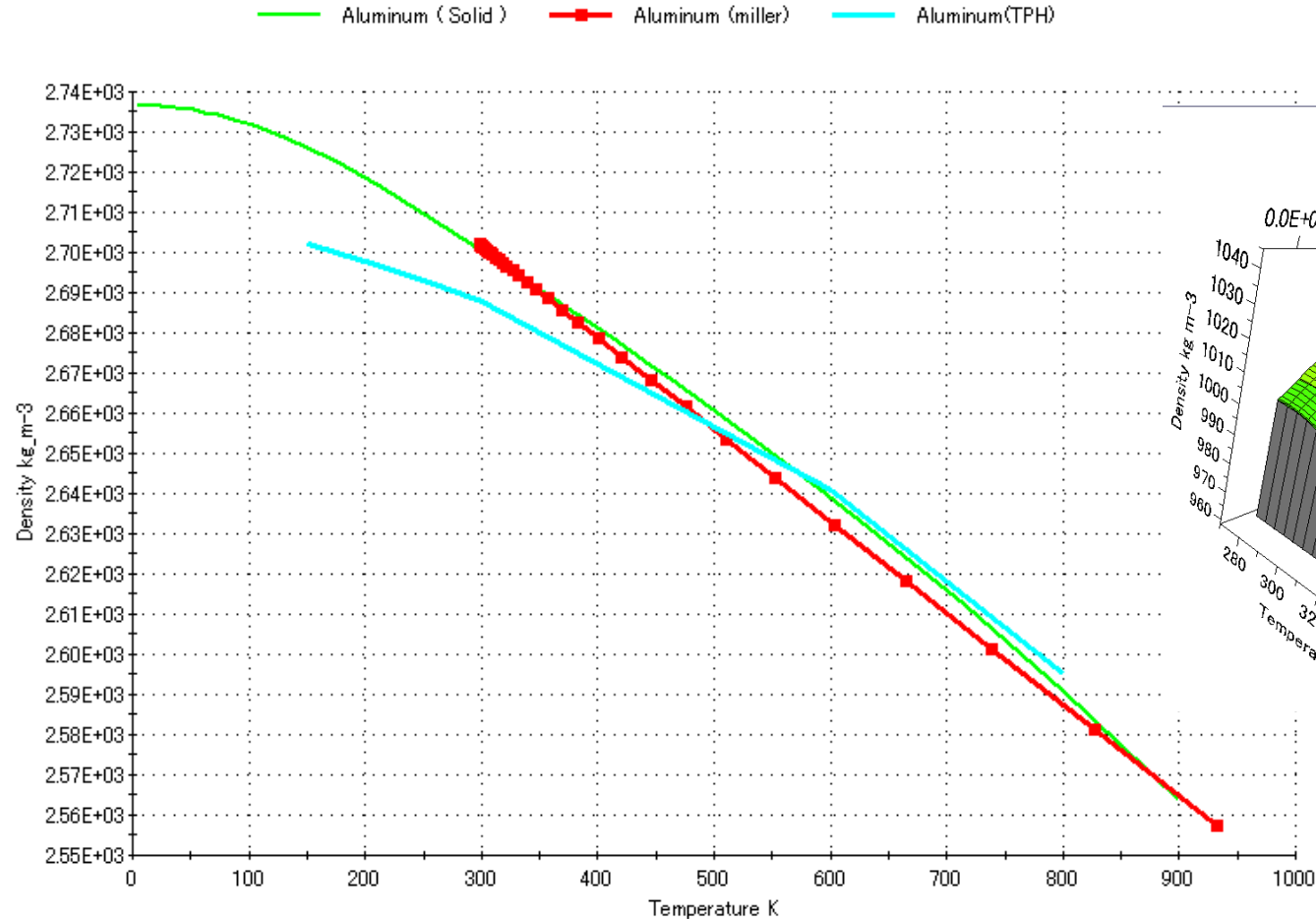
Material	PropertyCategory	Property	Direction	Table	Equation	Type	Traceability	Authorization
Molten Gold	Physical Property	Surface tension		No	Yes	Literature		
Molten Platinum	Physical Property	Enthalpy per kg		No	Yes	Literature		
Molten Platinum	Physical Property	Electrical resistivity	Isotropic	No	Yes	Literature		
Molten Rhodium	Physical Property	Density		No	Yes	Literature		
Molten Rhodium	Physical Property	Specific heat capacit...		No	Yes	Literature		
Molten Rhodium	Physical Property	Surface tension		No	Yes	Literature		
Molten Rhodium	Physical Property	Viscosity		No	Yes	Literature		
Molten Silver	Physical Property	Surface tension		No	Yes	Literature		
Palladium	Physical Property	Electrical resistivity	Isotropic	Yes	No	Literature		
Palladium	Physical Property	Electrical resistivity	Isotropic	Yes	No	Literature		
Palladium	Physical Property	Electrical resistivity	Isotropic	Yes	No	Literature		
Palladium	Physical Property	Specific heat capacit...		Yes	No	Literature		
Palladium	Physical Property	Specific heat capacit...		Yes	No	Literature		
Platinum	Physical Property	Enthalpy per kg		No	Yes	Literature		
Platinum	Physical Property	Enthalpy per kg		No	Yes	Literature		
Platinum	Physical Property	Electrical resistivity	Isotropic	No	Yes	Literature		
Platinum	Physical Property	Electrical resistivity	Isotropic	No	Yes	Literature		

複数グラフの描画、相関式の描画、3Dプロット等の高度な機能を搭載(要ユーザー登録・無料)

InetDBGVスクリーンショット

閲覧専用ソフトウェア(InetDBGV)

(<http://www.aist.go.jp/RIODB/TPDB/DBGVsupport/>)

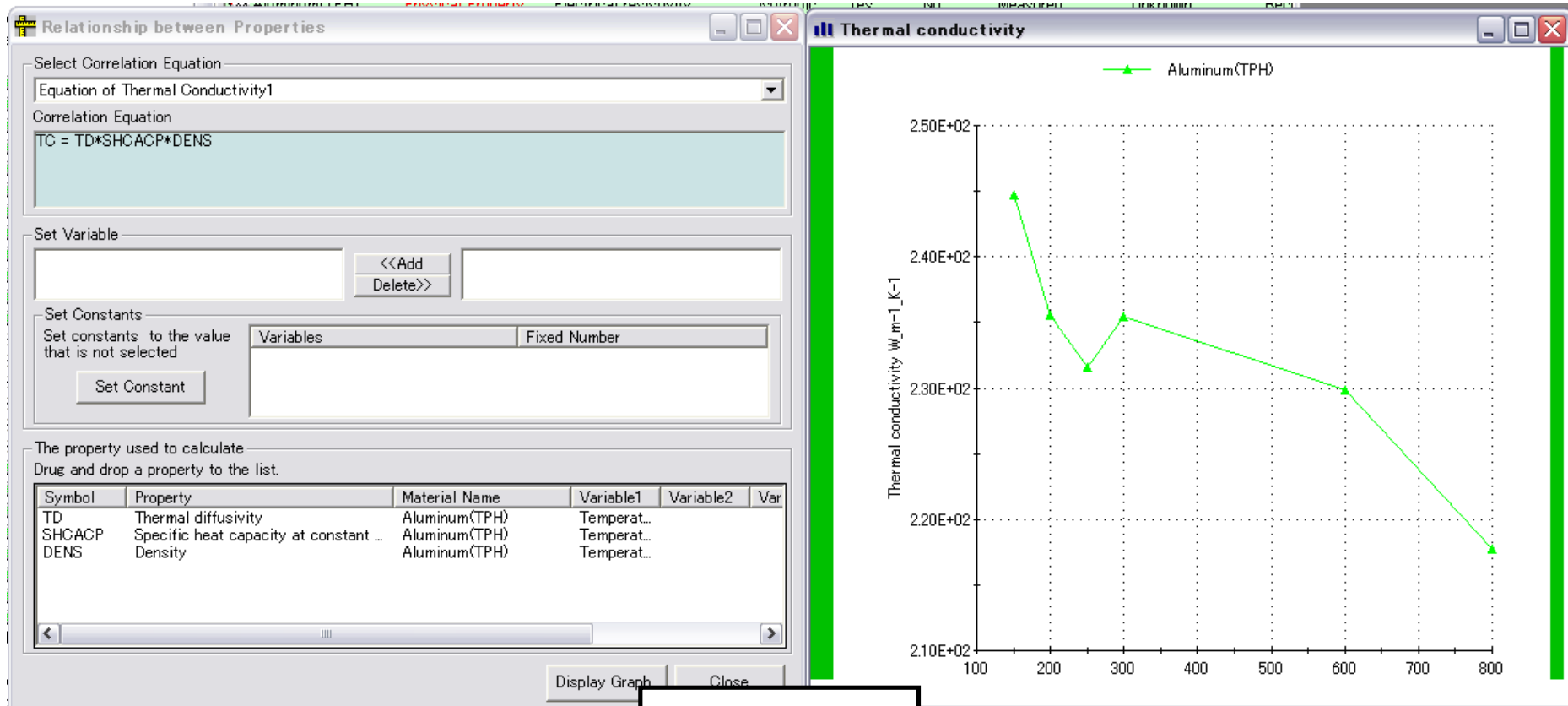


3Dプロット

複数グラフの描画

閲覧専用ソフトウェア(InetDBGV)

(<http://www.aist.go.jp/RIODB/TPDB/DBGVsupport/>)



相関式の描画

実測値と推算値を直接比較することが可能

$$\text{熱拡散率} = \text{熱伝導率} / (\text{密度} \times \text{比熱})$$

分散型熱物性DB-ホームページ

(<http://www.aist.go.jp/RIODB/TPDB/DBGVsupport/>)

InetDBGV 分散型熱物性データベース閲覧ソフト
 Network Database System for Thermophysical Property Data

English

- NEWS
- TPDS-web
- InetDBGV
- About us
- RIO-DB
- AIST
- NMIJ
- Contact

Copyright © 2006 産総研 All rights reserved.

>最新情報

分散型熱物性データベースを利用するには2つの方法があります。

1. 閲覧用ソフトウェアをパソコンにインストールして利用する。
([ユーザ登録](#)してからソフト[ダウンロード](#)してください。)

- ・複数のグラフを画面に表示して操作するなどの高度な機能が利用できます。
- ・産総研のサーバーに収録されたデータに加えて、日本熱物性学会のデータを閲覧することができます(日本熱物性学会の会員の場合)

2. ブラウザによる閲覧(ソフトウェアのインストール不要、登録不要)。
すぐにデータベースを閲覧できます。こちらを[クリック](#)してください。

News

現時点では有機物の蒸気圧、表面張力、密度のデータが多数収録されています。(物質別の件数([流体](#)、[固体と融体](#))、物性別の件数)

最新情報 更新日:2007/10/22

閲覧ソフトInetDBGV版は3.0.0にバージョンアップしました

- 分散型熱物性データベース閲覧用ソフトウェア(InetDBGV3.0.0)のダウンロードサービスを行っております。
- **いままでのバージョンは使用できません。**すでにInetDBGV2.2.*以前のバージョンソフトをお使いの方は、新しいバージョンへの切り替えをお願いします。
- ユーザ登録が必要です。
- **既に登録されたユーザの再登録は必要ありません。**

Copyright © 2006 産総研 All rights reserved.

分散型熱物性DB-Web版(TPDS-web)

(<http://www.aist.go.jp/RIODB/TPDB/TPDS-web/>)

グラフやテーブルデータに手軽にアクセス可能
(ユーザー登録なし、無料)

InetDBGV 分散型熱物性データベース閲覧ソフト
Network Database System for Thermophysical Property Data

最新情報
分散型熱物性データベースを利用するには2つの方法があります。

1. 閲覧用ソフトウェアをパソコンにインストールして利用する。
(ユーザ登録してからソフトをダウンロードしていただく。)
 - 複数のグラフを画面に表示して操作するなどの高度な機能が利用できます。
 - 産総研のサーバーに登録されたデータに加えて、日本熱物性学会のデータを閲覧することができます(日本熱物性学会の会員の場合)
2. ブラウザによる閲覧(ソフトウェアのインストール不要、登録不要)。
すぐにデータベースを閲覧できます。こちらをクリックしてください。

News
現時点では有機物の蒸気圧、表面張力、密度のデータが多数収録されています。(物質別の件数(流体、固体と融点)、物性別の件数)

最新情報
閲覧ソフト InetDBGV 版は 3.0.0 にバージョンアップしました。更新日: 2007/10/22

- 分散型熱物性データベース閲覧ソフト InetDBGV 3.0.0 のダウンロードサービスを行っております。
- 旧バージョンの InetDBGV は使用できません。すでに InetDBGV 2.x 以前のソフトウェアをお使いの方は、新しいバージョンへの切り替えをお願いします。
- ユーザ登録が必要です。
- 閉じ登録されたユーザの再登録は必要ありません。

TPDS-web
Thermophysical Property Database System

RIO-DB News

Japanese English

Tree (Top page)

Search
>> Search by Property
>> Search by Material

InetDBGV
> About
> Download

Statistics
> Material Statistics
>> Fluids
>> Solids and Melt
> Property Statistics

System requirements
[Microsoft Internet Explorer Ver.6.0SP2 or later]
[Java Runtime Environment Ver.4.2.05 or later]

TPDS-web is developed by the Database Working Group of Material Properties and Metrological Statistics Division, NMIJ, AIST, and supported by RIO-DB.

AIST NMIJ
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
National Metrological Institute of Japan
Material Properties & Metrological Statistics
Dr. Tetsuya Baba
E-mail
Copyright (c) 2005 AIST. All rights reserved.

Hierarchy Display all lower folders (effective at hierarchies lower than MatCls2)

Root > Domain > Group > MatCls1 > MatCls2 > MatCls3 > Grade Lot Specimen

Material Solids and Melts Metals Transition Metal Elements Cu Copper Copper Copper

Material
The last material of this sequence.

Meta

HIT#	Material	Chemical formula	Property	Data category	Table	Equation	Graph	Registrant	Reference	Comment
1	Copper	Cu	Specific heat capacity at constant pressure	Recommended	Yes	No	Yes	NMIJ Database Working Group	Yes	Yes
2	Copper	Cu	Specific heat capacity at constant volume	Recommended	Yes	No	Yes	NMIJ Database Working Group	Yes	Yes
3	Copper	Cu	Thermal conductivity	Evaluated	Yes	No	Yes	NMIJ Database Working Group	Yes	Yes
4	Copper	Cu	Thermal conductivity	Evaluated	Yes	No	Yes	NMIJ Database Working Group	Yes	Yes
5	Copper	Cu	Thermal conductivity	Evaluated	Yes	No	Yes	NMIJ Database Working Group	Yes	Yes
6	Copper	Cu	Thermal conductivity	Evaluated	Yes	No	Yes	NMIJ Database Working Group	Yes	Yes
7	Copper	Cu	Thermal conductivity	Evaluated	Yes	No	Yes	NMIJ Database Working Group	Yes	Yes

TPDS Web

TPDS-webは(株)産業技術総合研究所(以下「研究所」)と、国立計測標準研究所(以下「研究所」)が共同で開発した分散型熱物性データベースWeb上で提供されるサービスです。下記同意書をご記入の上からご利用下さい。

同意書
分散型熱物性データベース閲覧ソフト InetDBGV 3.0.0 のダウンロードサービスを行っております。旧バージョンの InetDBGV は使用できません。すでに InetDBGV 2.x 以前のソフトウェアをお使いの方は、新しいバージョンへの切り替えをお願いします。

ユーザ登録が必要です。

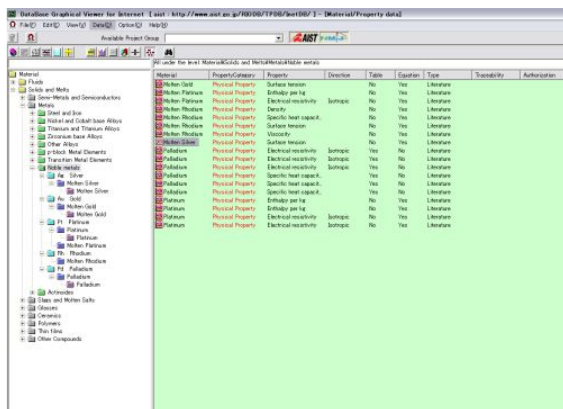
閉じ登録されたユーザの再登録は必要ありません。

同意書に同意した上で TPDS-web を利用する

AIST NMIJ
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
National Metrological Institute of Japan
Material Properties & Metrological Statistics
Dr. Tetsuya Baba
E-mail
Copyright (c) 2005 AIST. All rights reserved.

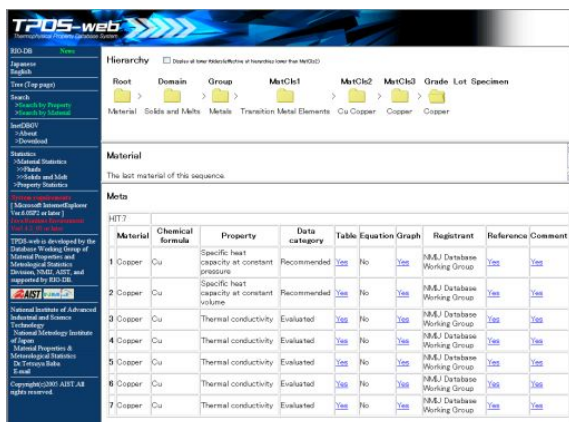
閲覧ソフトの住み分け

専用クライアントソフトInetDBGVのターゲット



- ・異なる物質で物性の比較がしたい
- ・温度・圧力など2変数に依存する物性をグラフ化したい
- ・物性間の相関式を利用したい
- ・物質の特性を分類別に知りたい

ウェブ版クライアントソフトTPDS-webのターゲット



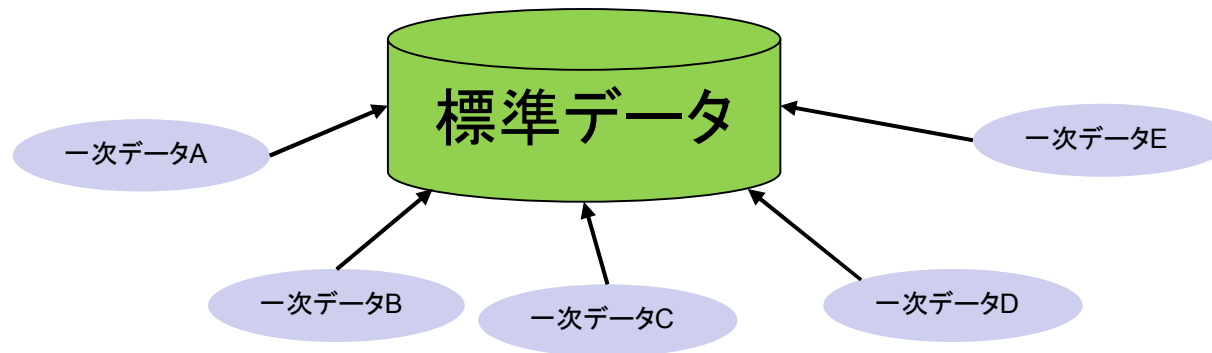
- ・とにかく手軽にデータを利用したい
(数物質程度の閲覧であれば、Web版が便利)
- ・社内ネットワーク接続の利用制限を受けづらい
(WebブラウザでAISTのHPが閲覧できれば利用可能)

データベースの活用

物性計測における物性データの活用

- 新規開発した計測器の性能評価
- 計測器の校正

標準データ(信頼性が高く、不確かさが評価されたデータ)であれば、
上記取り組みが可能



一次データ: 不確かさ、試料、計測手法、計測装置に関する情報が伴ったデータ

標準データ開発 (溶融鉄の密度を例に)

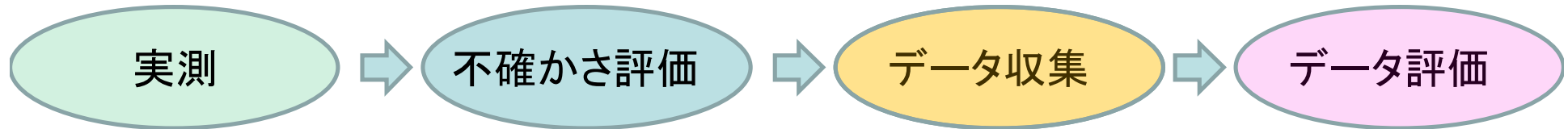


TABLE 2. Data sets considered for the density of liquid iron

Reference	Purity (mass %)	Technique employed ^a	Uncertainty quoted/%	Form of data ^b
Primary data				
Brillo and Egry (2004)	99.995	Elect. Levitation (Abs)	1.0	P
Sato (2003)	99.99	Pycnometer (Abs)	0.5	E
Lucas (1972)	>99.96	Archimedean (Abs)	0.3	D
Saito <i>et al.</i> (1969)	>99.9	Levitation (Abs)	1.5	D
Frohberg and Weber (1964a)	99.98	Bubble Pressure (Abs)	—	D
Kirshenbaum and Cahill (1962)	>99.9	Archimedean (Abs)	0.05	P
Lucas (1960)	99.9	Archimedean (Abs)	—	D
Secondary data				
Wille <i>et al.</i> (2002)	99.99	Levitation (Rel)	—	D
Nasch and Steinemann (1995)	—	γ -Ray (Abs)	0.75	E
Adachi <i>et al.</i> (1971)	99.97	Archimedean (Abs)	—	D
Watanabe (1971)	>99.9	Bubble Pressure (Abs)	0.7	D

Primary Data:

不確かさ、試料、計測情報に関する情報が十分なデータ

^aAbs—absolute; Rel—relative.
^bD—diagram; E—equation; P—points.

カーブフィッティングにより、
 推奨値(式)を求める

$$\rho_{fit} = 7034.96 - 0.926(T - T_{ref}) \quad \text{unit : kg/m}^3$$

(1809K < T < 2480K)

Ref. of Table : M.J.Assael et al., J. Phys. Chem. Ref. Data, 35, (2006) 285-299

熔融鉄の密度標準データ

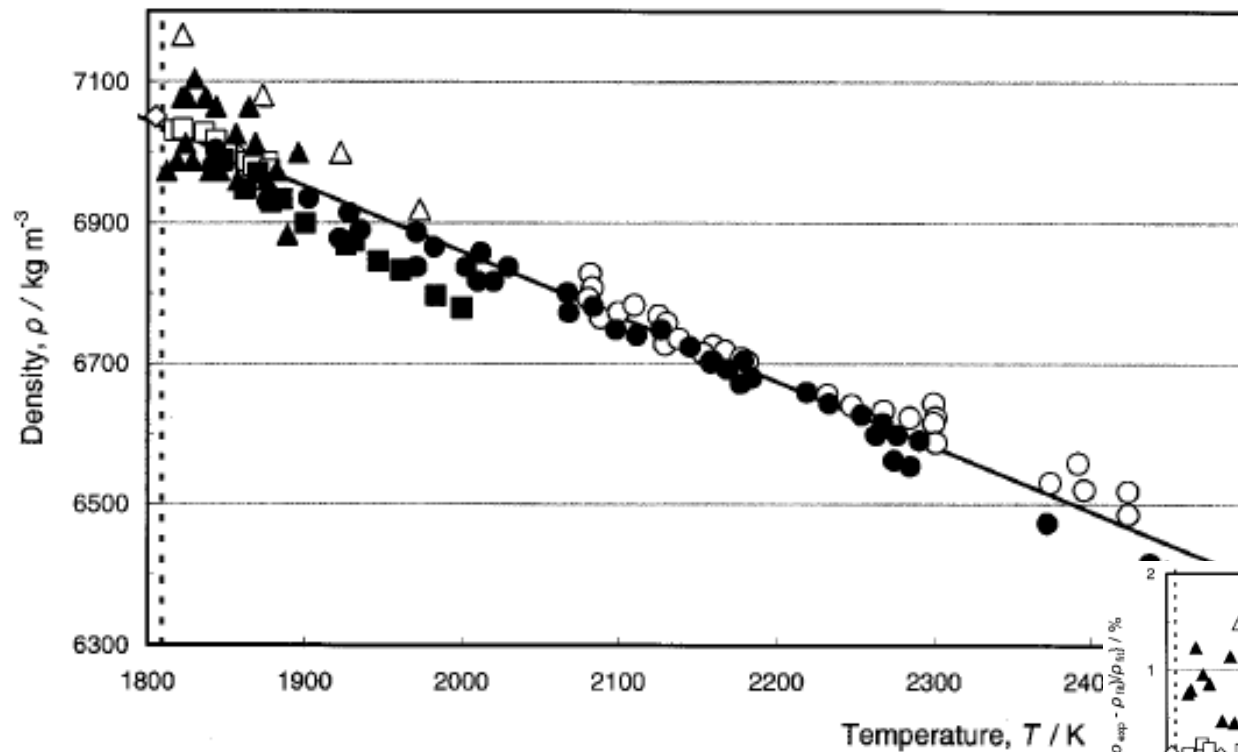
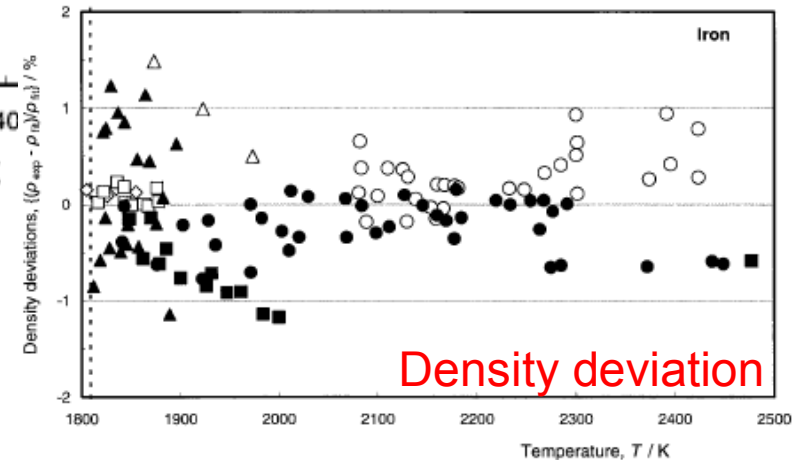


FIG. 3. Density primary data for liquid iron as a function of the temperature: (◇) Brillo and Egry (2004); (□) Sato (2003); (△) Lucas (1972); (○) Saito *et al.* (1969); (▲) Froberg and Weber (1964a); (●) Kirshenbaum and Cahill (1962); (■) Lucas (1960); (—), fitted equation; (---) melting point.

$$\rho_{fit} = 7034.96 - 0.926(T - T_{ref})$$

unit : kg/m³

(1809K < T < 2480K)



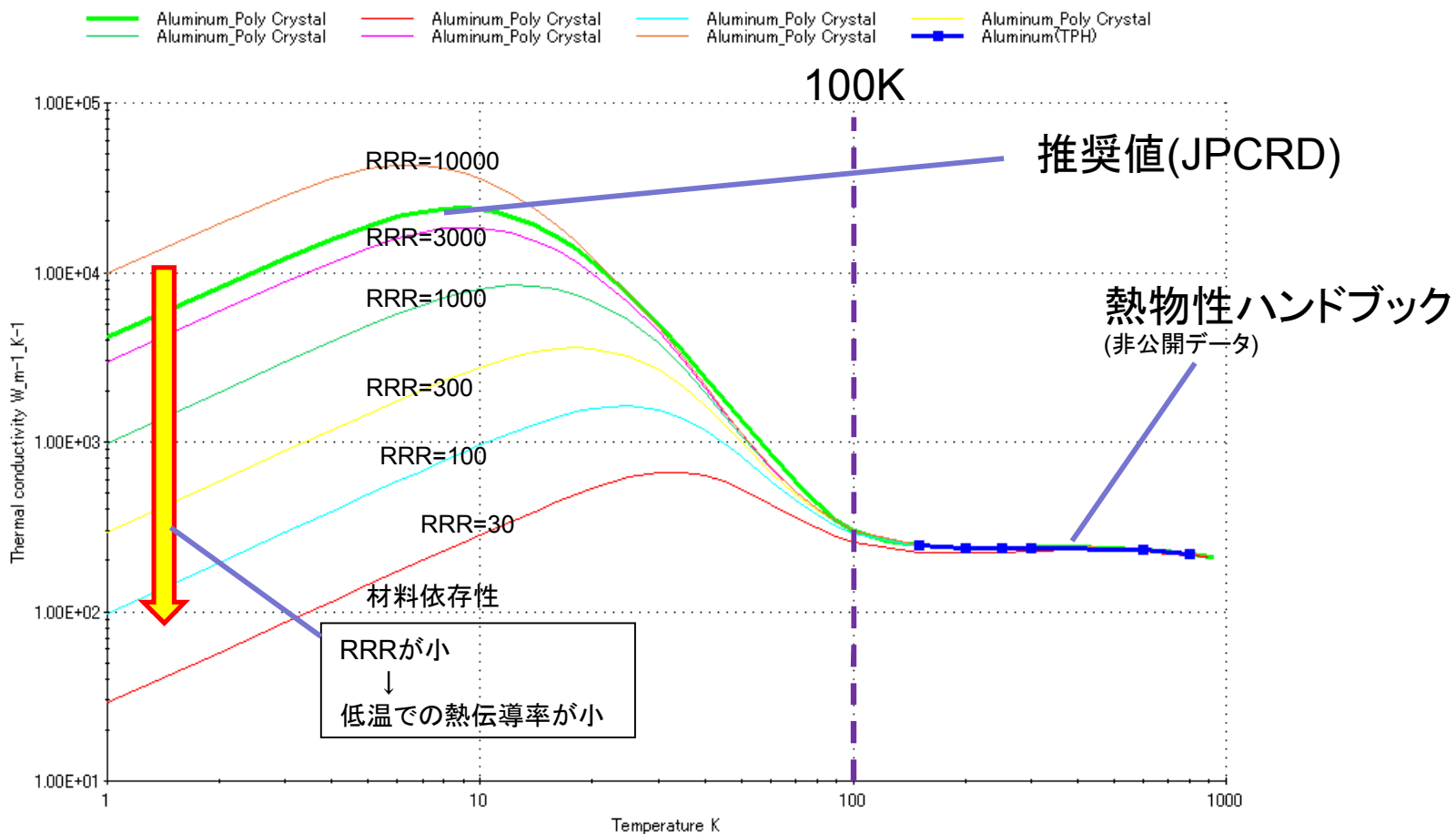
Ref. of Figures : M.J.Assael et al., J. Phys. Chem. Ref. Data, 35, (2006) 285-299

国際機関からの標準データ

- CIPM** 国際密度表：
標準平均海水に等しい同位体組成における密度
- ISO** 蒸留水粘性率の絶対値
粘性率比較測定的一次標準
- IUPAC** 水・トルエンの熱伝導率
第一次標準値に推奨
- CODATA** 固体熱膨張率標準データ(銅、シリコン、タングステン、
 α -アルミナ)
- IAPWS** 水の国際蒸気圧表
“The IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam”

データベースの活用 (実測値の妥当性検証)

アルミニウム熱伝導率データ(CODATA推奨値)



計測した物性値の妥当性を手軽に確認することが可能

まとめ

- 分散型熱物性データベースは専用ソフトウェアとWebブラウザの両方の方法で誰でも、自由に閲覧可能
- データベースに収録されている標準データや推奨データの利用法を紹介

今後の取り組み

- 大量の収録データから、装置情報、試料情報、不確かさ等でフィルタリングを行い、ユーザーが欲しい条件で物性式データを取得できるシステムを開発する
- 科学技術の基盤として重要な熱物性データについて、上記システムに見合うだけの十分な質・量を熱物性データベースに収録する。その為の協力体制を構築する