

熱物性データベースの整備

- 物質・材料の熱物性値を収録する熱物性データベース
- 12,000件の熱物性データがインターネットから無償で利用可能
- 热設計やマテリアルズインフォマティクスの実施に貢献

研究のねらい

電子デバイスや自動車等の開発において、設計段階から熱マネジメント・熱対策を考慮することが必要となっています。信頼性が高くかつ精緻な熱設計の実現には、不確かさの評価された熱物性データが必要ですが、固体材料分野においては十分な質・量を備えたデータベースが存在しません。そこで当グループでは、計量標準で培われた計測ポテンシャルと豊富なバックデータを活用して、信頼性の高いデータ整備を実施しています。また本データベースは、マテリアルズインフォマティクスを始めとする情報科学を取り入れた研究での利活用促進にも取り組んでいます。

研究内容

物質・材料の熱伝導率、熱拡散率、比熱容量、熱膨張率、放射率などの熱物性値を収録する熱物性データベースの整備を進めています。現在合計約12,000件の熱物性データをインターネットにて公開しており、誰でも無償で利用できます。

産総研第4期中期計画期間（2015-2019年）では、ナノスケールにおいてパルクと異なる物性を示す酸化物薄膜、半導体薄膜およびナノワイヤを中心とした対象とし、熱・電子輸送に係る物性データを約600件を整備しました。

機能面では、熱物性データをプログラム処理に適したXML形式（機械可読形式）にて、インターネットを介して提供するWebAPI提供機能を開発しました。

熱物性データベースは下記URLから利用可能です
<https://tpds.db.aist.go.jp/>

今後の展開

- ・ 機械学習を利用した測定データの解析高度化支援
- ・ WebAPI機能によるシミュレーションソフトウェアおよびデータベースとのデータ連携
- ・ Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 11RH03

熱物性データベース閲覧Webシステム

```

{
  "ChemicalFormula": "Al2O3",
  "CrystalStructure": "Poly crystal",
  "MatName": "Aluminum Oxide(alpha phase)_PC,Bu,G3,Lt1,Specimen1",
  "MaterialID": 15112,
  "MaterialLevel": 8,
  "MetaCount": 4,
  "SubItemswithT": [
    {
      "Doi": "http://dx.doi.org/10.1016/j.0022-3115(94)90996-2",
      "Equation": false,
      "MetalID": 20276,
      "PropertyName": "Thermal conductivity",
      "RecordCount": 20,
      "Items": "PropertyValue;1,Temperature;K",
      "PropertyData": [[36.528, 290.72, 2, 2]]
    }
  ]
}
  
```

酸化アルミニウムの熱伝導率
 プログラム処理に適した
 形式のデータがインターネットから取得可能に。

機械可読形式データ例