

熱関連材料の計算シミュレーションとデータベース構築： 熱関連材料データベース（PropertiesDB Web）の開発と 蓄熱材探索への応用

プロジェクト名：未利用熱エネルギーの革新的活用技術研究開発

プロジェクト実施者：未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合(TherMAT)
国立研究開発法人 産業技術総合研究所

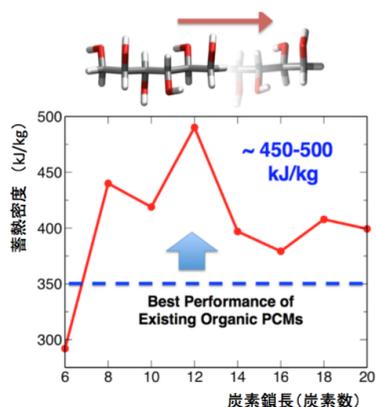
プロジェクト実施期間：2015年4月～2023年2月



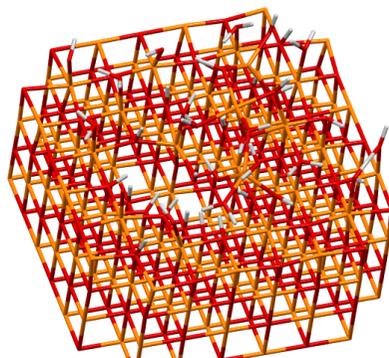
1-1. 研究開発の背景

未利用熱エネルギーの利用技術を革新するための材料開発を効率的に進めるためには、目標値（断熱技術では熱伝導率、蓄熱技術においては蓄熱密度や反応温度、熱電発電技術では無次元性能指数など）を達成する材料探索と設計に加えて、新規材料を部素材とするモジュール設計に必要な多角的・体系的な熱関連物質についての情報が必要であり、**熱関連材料の各種熱物性情報と関連データを収集し、プロジェクト内外でデータを共有するプラットフォームとして機能するデータベース整備が求められている。**

また実験データが存在しない場合も多く、一例として高密度蓄熱を達成する蓄熱材を例とするなら、有望な候補材料ですら蓄熱機構の不明な物質は依然として多く、**このような場合には熱関連材料に関するデータベース整備に加えて、各種計算シミュレーションが連携した物質探索が必須となる。**



分子設計による非天然糖アルコール化合物の蓄熱密度と炭素鎖長との相関関係



化学蓄熱材として期待されるアルカリ土類金属酸化物 (MgO) の表面水和反応

熱関連材料データベースシステム

- ・ 公共データ、学術データ、Webデータとの連携
- ・ 関連論文の調査、ネットワーク解析

物性・数値データ

- ・ 収録熱物性データ、表示、解析
- ・ 高品位データセットの整備

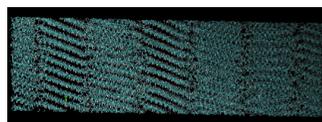
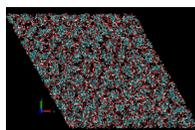
プロジェクト内の情報共有

- ・ 計算シミュレーションとの連携
- ・ 分室企業との連携

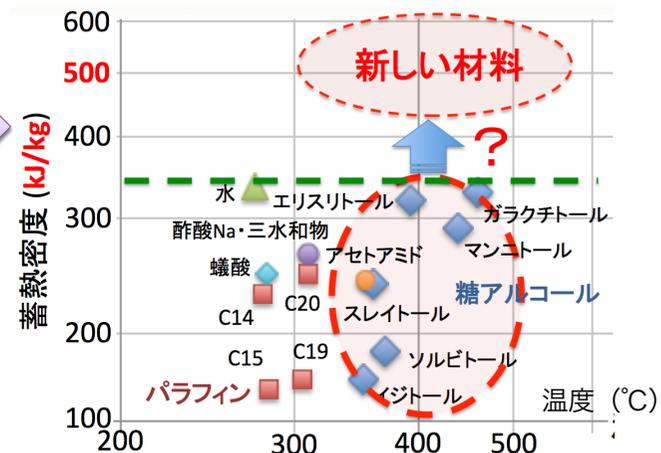
1-2. 研究開発の目的、目標



計算機による熱関連材料の物性解析、そして候補化合物の分子モデリングと新機能デザイン



各種の材料研究において、計算シミュレーションによる材料スクリーニング技術が大きく期待されている。候補材料を効率的に探索するための計算シミュレーション技術の開発を行いつつ、具体的な物質に対してシミュレーション解析を実行する。



データ



熱関連材料データベースは、未利用熱エネルギー革新的活用技術研究開発プロジェクト遂行に有用な熱関連材料・部素材の各種熱物性情報を収集し、熱マネジメント材料開発の共通基盤として寄与する。



2-1.研究開発体制

国立研究開発法人
産業技術総合研究所

材料・化学領域
機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター

[1] 熱関連材料の計算シミュレーション

[2] 熱関連材料データベースの開発



2-2. 研究開発内容：PropertiesDB Web 公開



未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合 (TherMAT) においては、熱関連材料開発の基礎となる基盤情報として、関連する物質・材料の熱的特性、化学組成を収録した「熱関連材料データベース (PropertiesDB Web)」の整備を進めている。

Landolt Börnstein や NBS Tables of Chemical Thermodynamics、電子技術総合研究所調査報告などに記載された有機/無機化合物の標準熱力学データ等をデジタル化し熱関連材料データベースに収録し、TherMAT HP 上を通して一般ユーザー向けに公開。

<https://thermatdb.secsite.jp/Achievement/PropertiesDBtop.html>

PropertiesDB Web 熱関連材料データベース表示ソフト

本データベースは、熱関連材料および基本的物質について、右記の物性データを収録しております。条件を設定し検索ボタンを押すと、条件を満たす物質を収録データから抽出し、その物性データの分布をグラフに表示することができます。また、検索結果の表上で任意の物質を選択すると、その化学式に該当するPubchemのデータを一覧表示します。

未利用熱エネルギー革新的活用技術研究組合
国立研究開発法人 産業技術総合研究所

【種別データ数】		【物性別データ】	
有機物*	4,507	標準生成エンタルピー	7,953
無機物*	8,804	標準生成ギブスエネルギー	4,221
*収録データ例を表示します		標準エントロピー	3,478
		比熱容量	1,905
		転移エンタルピー	7,936
		転移エントロピー	1,654

現在、生成エンタルピー・ギブスエネルギー・比熱容量は、標準状態(298.15K、1bar)の値のみです

【検索方法】

- 検索の条件は、「元素比」・「化学式」・「名前」・「物性値」について設定できます。
- どれか一つでも設定すれば、抽出は可能です。
- 複数設定した場合は、設定した全ての条件を満たすものを抽出します。

詳しい操作方法については[マニュアル](#)をご覧ください。

PropertiesDB Web を起動

>> 出典 <<

- 4桁の原子量表 (2017)、日本化学会 原子量専門委員会
- 神本正行、作田宏一、小沢丈夫、坂本龍二、蓄熱および蓄熱材に関する調査報告、電子技術総合研究所調査報告 第196号
- K. N. Marsh (ed.), Thermodynamic Properties of Organic Compounds and Mixtures - Enthalpies of Fusion and Transition of Organic Compounds, Landolt-Börnstein - Group IV Physical Chemistry, vol.8A, 1995.
- Wagman, Donald D., The NBS tables of chemical thermodynamic properties: Selected values for inorganic and C1 and C2 organic substances in SI units, Journal of physical and chemical reference data, v. 11, supplement no.2

更新情報

05/14



3-1.研究開発成果：PropertiesDB Webシステム掲載データ（1）

Landolt Börnstein : Group IV Macroscopic properties of matter, Vol 8, Enthalpies of Fusion and Transition of Organic compounds より引用

Preface より

“ Experimental data on the enthalpies of solid–solid and solid–liquid transitions for organic compounds is critically important from both a scientific and practical point of view. **A knowledge of these properties is necessary to calculate energy balances for solid and liquid transfers and transitions during production processes in the chemical and related industries** “

1.5 Application of Enthalpies of Fusion and Transition in Chemical Engineering and Thermodynamics

The observation of the latent heat associated with a transition between crystal phases in a calorimeter is the most common way of detecting the transition. A careful study of the heat effect during heating and cooling through the transition distinguishes monotropic phases from enantiotropic phases. Similar studies identify liquid crystals.

The entropy, and thus the enthalpy, associated with equilibrium transitions is required to calculate the absolute entropy of a compound from low temperature calorimetry via the third law of thermodynamics.

The enthalpy of fusion is related to the cryoscopic constant by the van't Hoff equation. This forms the basis of thermal analysis either by a time-temperature plot during fusion or (lf) - T plot observed in an adiabatic calorimeter (f is a mole fraction of the sample in the liquid state). It is a common general method of quantitatively establishing the purity of a sample.

A system composed of two condensed phases in equilibrium can serve as a heat storage system. If the system contains only a single component the temperature remains constant as heat is absorbed or evolved. An effective system contains a substance that has a large enthalpy of fusion per unit volume (Table 1.1). It is also desirable that phase equilibrium be rapidly attained and that the substance be chemically stable at the transition temperature.

Table 1.1 Examples of compounds with relatively large enthalpies of fusion or transition.

Name	Formula	T / K	$\Delta_{fus}H / J \cdot cm^{-3}$ (of crystal)
Propylene oxide clathrate hydrate	$C_3H_2O_{10}$	268.6	440
Water	H_2O	273.2	334
Methanoic acid	CH_2O_2	281.4	413
Ethanediamine	$C_2H_8N_2$	284.3	368
Ethanamide	C_2H_5NO	353.3	277
Dulcitol	$C_6H_{14}O_6$	460.3	346
Pentaerythritol	$C_5H_{12}O_4$	461.1 (trs)	320 (trs)
3-Hydroxybenzoic acid	$C_7H_6O_3$	472.0	582
5-Amino-1-methyltetrazole ^a	$C_2H_5N_5$	504.0	320

3.5.3 Organic Compounds, C ₆						143
Phases		T/K	$\Delta_{tr}H / (kJ \cdot mol^{-1})$	Sample Description and Purity as %	Method	Reference
1s	1	500.0 ± 1.0	3.04 ± 0.10	sa;cs;ca,sp	DTA	76-mei/sey
1s	1	499.80 ± 0.50	3.94 ± 0.10	sa;cs,dv	DSC	84-fer/lop
cr,V	cr,IV	203.50 ± 0.10	1.734 ± 0.005			Selected
cr,IV	cr,III	280.30 ± 0.10	2.511 ± 0.010			Selected
cr,III	cr,II	396.5 ± 1.5	0.194 ± 0.007			Selected
cr,II	cr,I	413.5 ± 1.5	1.3 ± 0.6			Selected
cr,I	1s	422. ± 4.	4.54 ± 0.06			Selected
1s	1	499.90 ± 0.10	3.5 ± 0.5			Selected

Cyclohexane		[110-82-7]	C ₆ H ₁₂	MW = 84.16		
cr,II	cr,I	185.90 ± 0.20	6.715 ± 0.011	cm;fc	isoperibol	30-par/huf
cr,II	cr,I	185.9 ± 2.0	6.74 ± 0.08	cm;purified	isoperibol	31-par/huf
cr,II	cr,I	186.40 ± 0.20	6.82 ± 0.07	cm;fc;fd;	conduction	42-zie/and
				99.9% hc		
cr,II	cr,I	186.090 ± 0.020	6.686 ± 0.020	cm;ch,fd,dd, av	adiabatic	43-ast/sza
cr,II	cr,I	186.10 ± 0.10	6.740 ± 0.004	sx;	adiabatic	43-rue/huf
				99.985m% hc		
cr,II	cr,I		6.99 ± 0.35			51-kaa
cr,I	1	279.30 ± 0.20	2.961 ± 0.007	cm;fc	isoperibol	30-par/huf
Cyclohexane (cont.)						
cr,I	1	279.4 ± 1.0	2.594 ± 0.033	cm;purified	isoperibol	31-par/huf
cr,I	1	279.40 ± 0.20	2.728 ± 0.008	cm;fc;fd;	conduction	42-zie/and
				99.9% hc		
cr,I	1	279.840 ± 0.020	2.628 ± 0.005	cm;ch,fd,dd, av	adiabatic	43-ast/sza
cr,I	1	279.820 ± 0.050	2.677 ± 0.004	sx;	adiabatic	43-rue/huf
				99.985m% hc		
cr,I	1	279.9 ± 3.0	2.63 ± 0.15	99.8%		51-kaa
cr	1	279.70 ± 0.10	2.700 ± 0.020	cm;99.98m%;	DTA	90-kna/sab
				dsc		
cr,II	cr,I	186.14 ± 0.02	6.740 ± 0.019			Selected
cr,I	1	279.826 ± 0.010	2.677 ± 0.008			Selected

オリジナルデータを整理確認して PropertiesDB Webへと収録



3-1.研究開発成果：PropertiesDB Webシステム掲載データ（2）

原著論文：The NBS Tables of Chemical Thermodynamic Properties: Selected Values for Inorganic and C1 and C2 Organic Substances in SI Units

Summary より

“ The NBS Tables of Chemical Thermodynamic Properties is a collection of thermodynamic properties, published in book form, consisting of 103 tables with 14330 critically evaluated species. The tables were originally published as a series of NBS2 Technical Notes. Enthalpy of formation, $\Delta_f H^\circ$, Gibbs energy of formation, $\Delta_f G^\circ$, entropy, S° , heat capacity at constant pressure, C_p° , all at 298.15 K, and the enthalpy difference, [$H^\circ(298) - H^\circ(0)$] are provided where known.“

Journal of
Physical and
Chemical
Reference Data

Volume 11, 1982
Supplement No. 2

The NBS tables of chemical
thermodynamic properties
Selected values for inorganic
and C₁ and C₂ organic substances
in SI units

Donald D. Wagman, William H. Evans,
Vivian B. Parker, Richard H. Schumm,
Iva Halow, Sylvia M. Bailey,
Kenneth L. Churney, and
Ralph L. Nuttall

National Bureau of Standards
Washington, DC 20234

オリジナルデータを整理確認して
PropertiesDB Webへと収録

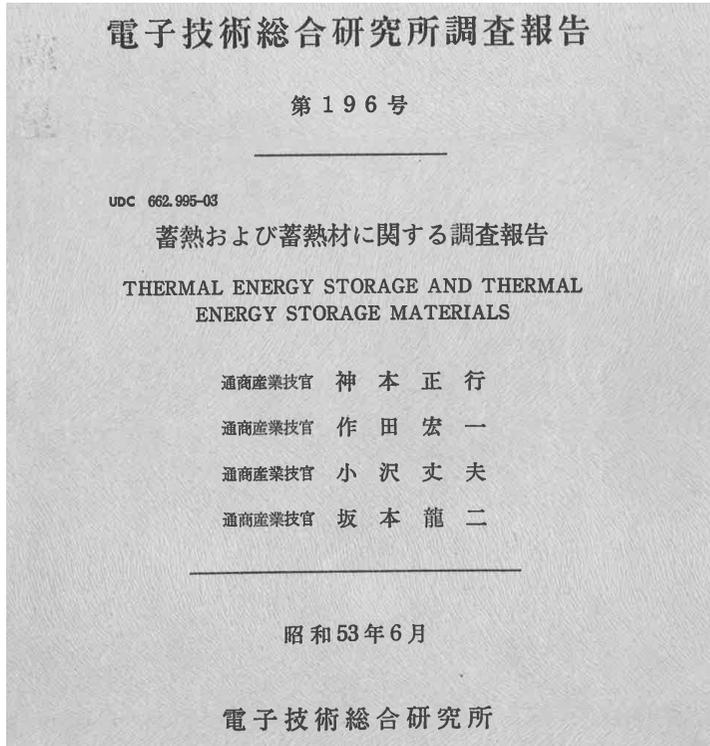
2-260 WAGMAN, EVANS, PARKER, SCHUMM, HALOW, BAILEY, CHURNEY, AND NUTTALL

Table 93:Mg		MAGNESIUM (Prepared 1967)						Table 93:Mg	
Substance Formula and Description	State	Molar mass g mol ⁻¹	0 K	298.15 K (25°C) and 0.1 MPa (1 bar)			S ^o J mol ⁻¹ K ⁻¹	C _p	
			$\Delta_f H_f^\circ$ kJ mol ⁻¹	$\Delta_f G_f^\circ$ kJ mol ⁻¹	$H^\circ - H^\circ_0$				
Mg	cr	24.3120	0	0	0	5.000	32.68	24.89	
	g	24.3120	146.499	147.70	113.10	6.197	148.650	20.786	
Mg ⁺	g	24.3120	884.242	891.635	—	6.197	—	—	
Mg ²⁺	g	24.3120	2334.915	2348.504	—	6.197	—	—	
Mg ³⁺	g	24.3120	10067.54	10087.33	—	6.197	—	—	
Mg ⁴⁺	g	24.3120	20609.97	20635.95	—	6.201	—	—	
Mg ⁵⁺	g	24.3120	34240.35	34272.52	—	6.197	—	—	
Mg ⁶⁺	g	24.3120	52235.6	52274.1	—	6.372	—	—	
Mg ⁷⁺	g	24.3120	73939.2	73984.0	—	6.197	—	—	
Mg ⁸⁺	g	24.3120	99600.1	99650.7	—	6.197	—	—	
Mg ⁹⁺	g	24.3120	131237.4	131294.3	—	6.197	—	—	
Mg ¹⁰⁺	g	24.3120	166694.3	166757.5	—	6.197	—	—	
Mg ¹¹⁺	g	24.3120	336684.4	336753.4	—	—	—	—	
Mg ¹²⁺	ao	24.3120	—	-466.85	-454.8	—	-138.1	—	
Mg ₂	g	48.6240	288.15	287.73	—	9.54	—	—	
MgO	macrocrystal (periclase)	cr	40.3114	-597.530	-601.70	-569.43	5.167	26.94	37.15
	microcrystal	cr2	40.3114	-593.936	-597.98	-565.95	5.297	27.91	37.66
	g	40.3114	—	17.	—	—	—	—	
MgH ₂	cr	26.3280	-67.15	-75.3	-35.9	5.314	31.09	35.35	
MgOH ⁺	ao	41.3194	—	—	-626.7	—	—	—	
Mg(OH) ₂	cr	58.3268	-913.794	-924.54	-833.51	11.401	63.18	77.03	
	am	58.3268	—	-920.5	—	—	—	—	
	g	58.3268	—	-561.	—	—	—	—	
	ai	58.3268	—	-926.84	-769.4	—	-159.4	—	
MgF	g	43.3104	-221.29	-221.8	-247.7	8.966	220.98	32.55	
MgF ⁺	g	43.3104	519.	527.	—	—	—	—	
MgF ₂	cr	62.3088	-1119.51	-1123.4	-1070.2	9.916	57.24	61.59	
	g	62.3088	-722.07	-723.8	-730.5	12.042	258.39	48.62	
MgCl	g	59.7650	-41.4	-42.	-67.	9.37	233.6	34.81	
MgCl ₂	cr	95.2180	-640.905	-641.32	-591.79	13.757	89.62	71.38	
MgCl ₂	g	95.2180	—	-400.4	—	—	—	—	
	ai	95.2180	—	-801.15	-717.1	—	-25.1	—	
	in 10 H ₂ O	95.2180	—	-781.65	—	—	—	—	
	in 12 H ₂ O	95.2180	—	-784.83	—	—	—	—	
	in 15 H ₂ O	95.2180	—	-788.47	—	—	—	—	
MgCl ₂	in 20 H ₂ O	95.2180	—	-791.49	—	—	—	—	
	in 25 H ₂ O	95.2180	—	-793.16	—	—	—	—	
	in 50 H ₂ O	95.2180	—	-795.92	—	—	—	—	
	in 75 H ₂ O	95.2180	—	-796.88	—	—	—	—	
	in 100 H ₂ O	95.2180	—	-797.43	—	—	—	—	



3-1.研究開発成果：PropertiesDB Webシステム掲載データ（3）

蓄熱および蓄熱材に関する調査報告，電子技術総合研究所調査報告第196号，pp.60-136. :無機化合物、有機化合物の融点より引用



オリジナルデータをデジタル化、整理確認の上で PropertiesDB Webへと収録

物質	式量	T		状態変化*	ΔH		ΔS		γ	ΔE		備考**	文献†
		K	°C		kJ/mol	J/g	J/mol K	mJ/g K		kJ/mol	J/g		
HCN	27.029	170.41	-102.74	F	0.017	0.629	0.100	3.691	41.87	0.0071	0.263		
N ₂ O	44.013	170.76	-102.40	F	6.544	148.68	38.32	870.7	41.75	2.732	62.077		化C
NaCN	49.008	171.6	-101.6	T	0.63	12.86	3.67	74.9	41.47	0.26	5.33		L
"	"	172.1	-101.1	*(III→II)	0.628	12.81	3.649	74.43	41.29	0.259	5.286		A
"	"	"	"	*(*)	0.63	12.86	3.66	74.7	"	0.26	5.31		化、化L
Cl ₂	70.906	172	-101	F	6.406	90.35	37.24	525.3	41.33	2.648	37.34		L
"	"	172.12	-101.04	"	"	"	37.22	524.9	41.29	2.646	37.30	10.1 Torr	A
"	"	172.16	-100.99	"	"	"	37.21	524.8	41.27	2.644	37.29	"	化
"	"	"	"	"	"	"	37.23	525.1	"	2.65	37.3	"	化
H ₂ Se	80.976	172.54	-100.61	T (II→I)	1.117	13.794	6.474	79.05	41.14	0.4596	5.676		化
"	"	"	"	*(*)	1.12	13.83	6.49	80.16	"	0.461	5.69		化L
"	"	172.6	-100.6	"	"	"	"	80.1	41.12	"	"		L

(b) -100°C~-50°C

物質	式量	T		状態変化*	ΔH		ΔS		γ	ΔE		備考**	文献†
		K	°C		kJ/mol	J/g	J/mol K	mJ/g K		kJ/mol	J/g		
CH ₃ Br	94.939	173.80	-99.36	T (II→I)	0.473	4.98	2.722	28.65	40.71	0.193	2.028		A
Si(CH ₃) ₄	88.225	174.12	-99.04	F	6.8952	78.155	39.600	448.86	40.61	2.7999	31.736	0.2 Torr	L
HDSe	81.982	174.35	-98.80	T	1.15	14.03	6.60	80.47	40.52	0.466	5.69		L
CH ₃ OH	32.04	175.26	-97.9	F	3.167	98.742	18.07	563.4	40.22	1.274	39.711		化、化A
"	32.042	175.4	-97.8	"	3.159	98.59	18.01	562.1	40.17	1.269	39.60		A
CH ₂ Cl	50.488	175.43	-97.73	"	6.431	127.38	36.66	726.1	40.16	2.583	51.15	65.66 Torr	"
CH ₂ Cl ₂	84.933	176	-97	F	4.60	54.16	26.14	307.7	39.96	1.84	21.64		A
D ₂ Se	82.988	176.01	-97.14	T	1.184	14.27	6.727	81.07	"	0.4731	5.702		L
"	"	"	"	*(*)	"	14.207	"	81.05	"	"	5.701		化L
"	"	"	"	*(II→I)	1.18	14.22	6.70	80.79	"	0.472	5.68		化、化N ₁
iso-propylbenzene	120.20	177.13	-96.03	F	9.67	80.33	54.59	453.5	39.58	3.83	31.79		化
SiF ₄	104.08	177.7	-95.5	S	25.7	246.9	144.6	1389	39.38	10.1	97.2	760 Torr	化

n-hexane	86.17	177.81	-95.35	F	13.029	151.21	73.275	850.35	39.35	5.127	59.497		化N ₁
ethylbenzene	106.17	178.21	-94.95	"	9.163	86.274	51.42	484.1	39.21	3.593	33.829		化L
acetone	58.08	178.34	-94.82	"	5.69	97.91	31.91	549.0	39.17	2.23	38.25		L
PF ₅	125.966	179.4	-93.8	"	11.8	93.7	65.8	522	38.80	4.58	36.4		A
"	"	"	"	"	11.3	89.7	63.0	509	"	4.38	34.8	427 Torr	"
"	"	"	"	V	17.6	140.0	98.1	780	"	6.83	54.3	"	"
cyclopentane	70.14	"	"	F	0.6067	8.546	3.3818	48.205	"	0.2354	3.258		N ₁
CH ₃ Br	94.939	179.49	-93.67	"	5.98	62.99	33.32	350.9	38.77	2.32	24.42		A
H ₂ Cl ₄	163.432	180.22	-92.93	"	10.79	66.02	59.87	366.3	38.53	4.157	25.43		L
B ₂ H ₆	27.67	180.63	-92.52	V	14.4	520.4	79.7	2881	38.39	5.53	199.8	760 Torr	化L
PCl ₃	137.333	181	-92	F	4.52	32.91	24.97	181.8	38.26	1.73	12.59		L
2,5-dimethyl cyclohexane	114.23	181.96	-91.20	"	12.857	112.59	70.658	618.76	37.93	4.877	42.707		N ₁
N ₂ O	44.013	182.1	-91.1	"	6.527	148.3	35.843	814.39	37.88	2.473	56.18	659 Torr	A
"	"	"	"	V	16.61	377.4	91.21	2072	"	6.292	142.97	"	"
"	"	182.25	-90.90	F	6.540	148.59	35.885	815.31	37.83	2.474	56.215		L
"	"	182.30	-90.85	"	"	148.603	35.875	815.16	37.82	2.473	56.195	658.9 Torr	化、化L
"	"	184.6	-88.6	V	16.560	376.25	89.707	2038.2	37.03	6.132	139.33	760 Torr	A
"	"	184.68	-88.47	"	16.55	376.05	89.61	2036	37.00	6.12	139.2	"	化



3-1.研究開発成果：PropertiesDB Webシステム 表示検索パネル機能

PropertiesDB Web 初期起動画面

The screenshot shows the search panel with the following sections and callouts:

- 元素比で検索する場合** (Element ratio search case):
 - 元素比で検索
 - 検索方法: 指定元素含む 指定元素のみ
 - 比の種別: モル組成比 重量組成比
- 元素記号の選択と組成を指定** (Select element symbols and specify composition):
 - Table with columns: 元素記号, 最小, ~, 最大
 - Rows 1-5 for element selection and range specification.
- 化学式で検索する場合** (Search by chemical formula case):
 - 化学式で検索
 - 検索方法: 完全一致 部分一致 前方一致 後方一致
 - (例)C3H8
- 名前で検索する場合** (Search by name case):
 - 名前で検索
 - 検索方法: 完全一致 部分一致 前方一致 後方一致
 - (例)Ethane
- 物性値で検索する場合** (Search by property value case):
 - 物性値で検索
 - 物性: [dropdown]
 - 最小 [input] ~ 最大 [input]

Buttons: 検索, 条件クリア

Footer: 元素選択 [dropdown] [input] [input] 物性選択 [dropdown] [input] [input] 元素組成比切り替え

複数の条件を設定した場合は、その全てを満たすデータを検索（AND検索）

3-1. 研究開発成果：PropertiesDB Webシステム 有機化合物の相変化

PropertiesDB Web 実行画面 1 (選択&ズーム表示)

物性選択
温度 / 相転移温度(K) ▾
相転移潜熱(kJ/kg) ▾

物性値散布図

相転移潜熱 (kJ/kg)

温度 / 相転移温度(K)

パネル表示上から物質を絞る場合
マウスで選択&ズーム実行が可能

検索条件変更 ▾
ズーム
ズームリセット

- : 結晶性固体、非結晶性固体
- : 液晶
- : 液体、水溶液
- : 気体

物性値散布図

相転移潜熱 (kJ/kg)

温度 / 相転移温度(K)

表示システム下段に選択した物質情報を一括して表示

材料ID	材料名	化学式	分子量	状態1	状態2	温度 / 相転移温度(K)	生成エンタルピー(kJ/kg)	生成エンタルピー(kJ/kg)
2023	Nitrosobenzene	CBH5NO	107.110	結晶性固体	液体	340.000		
2053	2-Hydroxybenzenamine	CBH7NO	109.126	結晶性固体	液体	447.350		
2053	2-Hydroxybenzenamine	CBH7NO	109.126	結晶性固体	液体	447.000		
2054	3-Hydroxybenzenamine	CBH7NO	109.126	結晶性固体	液体	394.900		
2054	3-Hydroxybenzenamine	CBH7NO	109.126	結晶性固体	液体	394.150		
2055	4-Hydroxybenzenamine	CBH7NO	109.126	結晶性固体	液体	460.000		
2055	4-Hydroxybenzenamine	CBH7NO	109.126	結晶性固体	液体	459.450		
2102	Butanedioic acid, mono (2,2-dimethyl)	CBH12NO3	160.176	結晶性固体	液体	432.000		
2102	Butanedioic acid, mono (2,2-dimethyl)	CBH12NO3	160.176	結晶性固体	液体	425.800		
2102	Butanedioic acid, mono (2,2-dimethyl)	CBH12NO3	160.176	結晶性固体	液体	432.400		

検索条件変更

ズーム

ズームリセット

- : 結晶性固体、非結晶性固体
- : 液晶
- : 液体、水溶液
- : 気体

PropertiesDB Web 実行画面 2 (画面上部 表示パネル 2 枚)

PropertiesDB 上での無機化合物データ (平衡熱力学量) は標準状態 (25°C、1気圧) にて収録されるため、X軸に温度を選択すると、物性は直線上に表示され、区別のために別表示 (追加パネル) を活用

元素選択

Mg

0

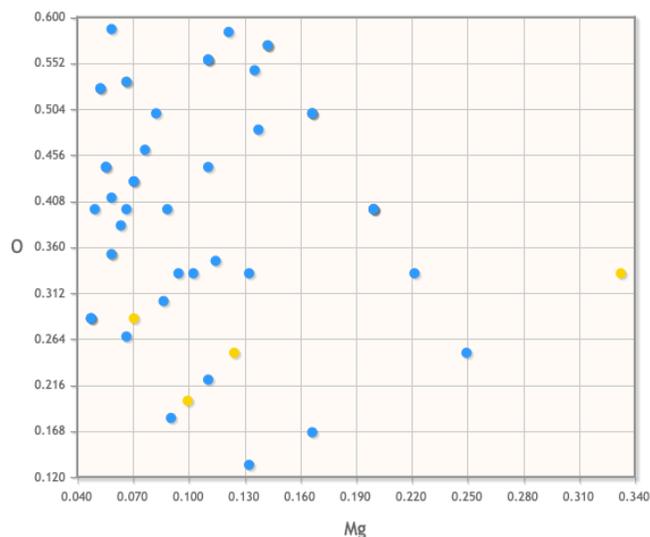
物性選択

温度 / 相転移温度(K)

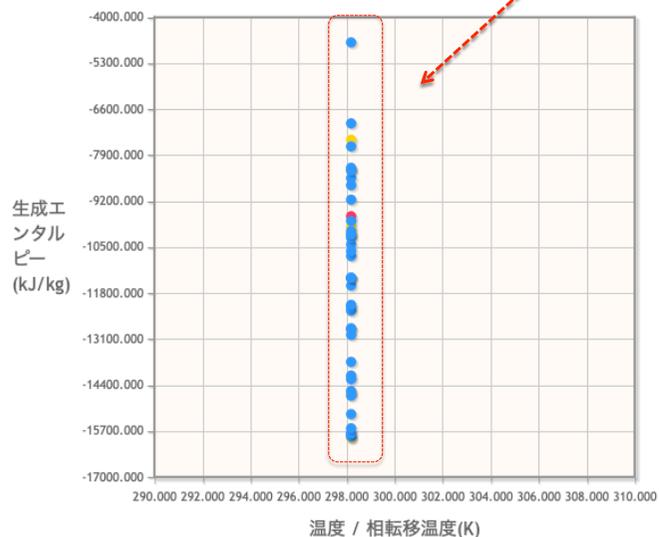
生成エンタルピー(kJ)

元素組成比切り替え

元素組成比散布図

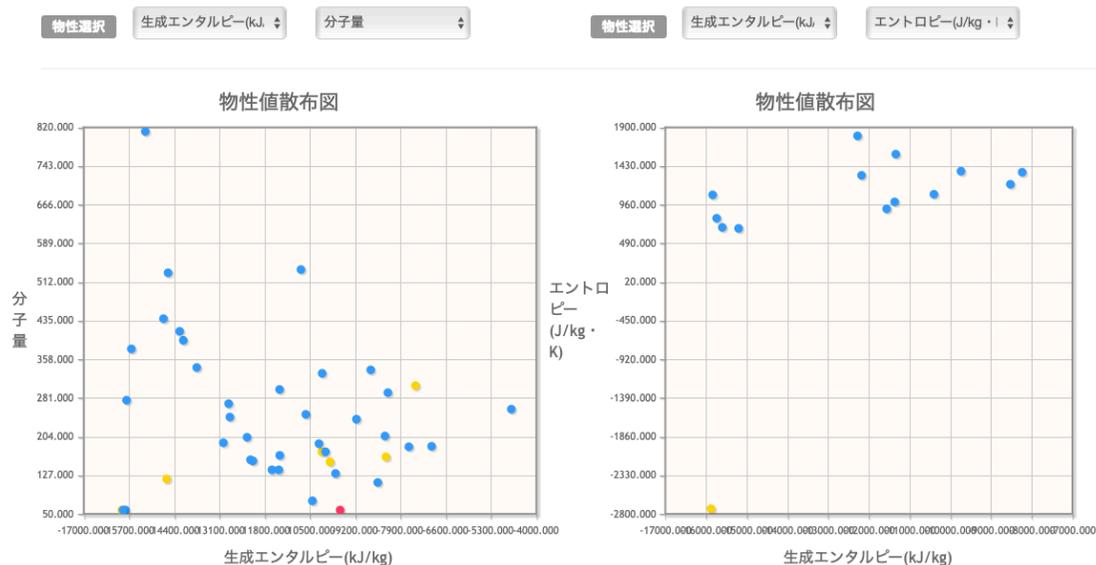


物性値散布図



同時にパネル 4 枚まで表示可能

- 標準生成エンタルピー
- 標準生成ギブスエネルギー
- 標準エントロピー
- 温度 (転移温度)
- 比熱容量
- 転移エンタルピー
- 転移エントロピー
- 分子量
- 元素比



PropertiesDB Web 実行画面 3
(画面下部 表示パネル 2 枚 + 収録データ)

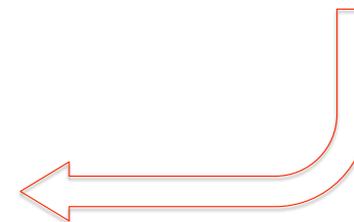
検索条件変更 ▼ ズーム ズームリセット

- : 結晶性固体、非結晶性固体
- : 液晶
- : 液体、水溶液
- : 気体

検索された物質データは
表示パネルと同時に、
収録データ情報を下段の
テーブル内に詳細表示

材料ID	材料名	化学式	分子量	状態①	状態②	温度 / 相転移温度(K)	生成エンタルピー(kJ/kg)	生成エンタルピー(kJ/kg)
13474	MgOH+	MgOH	41.318	水溶液	水溶液	298.150		
13475	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-15851.200	
13476	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	非結晶性固体	非結晶性固体	298.150	-15782.000	
13477	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	気体	気体	298.150	-9618.350	
13478	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	水溶液	水溶液	298.150	-15890.700	
13510	MgCl2 · H2O	MgCl2 · H2O	113.226	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-8537.170	
13511	MgCl2 · 2H2O	MgCl2 · 2H2O	131.242	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-9750.840	
13512	MgCl2 · 4H2O	MgCl2 · 4H2O	167.274	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-11352.600	
13513	MgCl2 · 6H2O	MgCl2 · 6H2O	203.306	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-12291.900	
13547	Mg(ClO4)2 · 2H2O	Mg(ClO4)2 · 2H2O	259.242	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-4701.400	

6 ページ中 1 ページ目 10 54 件中 1 - 10 を表示





3-1.研究開発成果：PropertiesDB Webシステム 無機化合物の熱力学量 3

PropertiesDB Web 実行画面 4 & PubChem 外部サイトとの接続

物質を選択

材料ID	材料名	化学式	分子量	状態①	状態②	温度 / 相転移温度(K)	生成エンタルピー(kJ/kg)	生成エンタルピー(k
13474	MgOH+	MgOH	41.318	水溶液	水溶液	298.150		
13475	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-15851.200	
13476	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	非結晶性固体	非結晶性固体	298.150	-15782.000	
13477	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	気体	気体	298.150	-9618.350	
13478	Mg(OH)2	Mg(OH)2	58.326	水溶液	水溶液	298.150	-15890.700	
13510	MgCl2 · H2O	MgCl2 · H2O	113.226	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-8537.170	
13511	MgCl2 · 2H2O	MgCl2 · 2H2O	131.242	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-9750.840	
13512	MgCl2 · 4H2O	MgCl2 · 4H2O	167.274	結晶性固体	結晶性固体	298.150	-11353.600	
13513	MgCl2 · 6H2O	MgCl2 · 6H2O	203.306	結晶性固体	結晶性固体	298.150		
13547	Mg(ClO4)2 · 2H2O	Mg(ClO4)2 · 2H2O	259.242	結晶性固体	結晶性固体	298.150		

IUPACName	MolecularFormula	CanonicalSMILES	IsomericSMILES	
magnesium;hydroxide	HMgO+	[OH-].[Mg+2]	[OH-].[Mg+2]	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Magnesium-hydroxide
magnesium;hydroxide	HMgO+	[OH-].[Mg+2]	[OH-].[Mg+2]	https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Magnesium-hydroxide

収録データテーブル上からユーザーが物質を選択すると、PubChem サイトで物質情報を検索して、別ウィンドウ上で外部サイトを表示

PubChem Compound Summary for Magnesium;hydroxide (CID 21225543). The page displays the molecular formula HMgO+, molecular weight 41.313 g/mol, and component compounds including Magnesium (CID 5462224) and Water (CID 962). It also shows the structure, dates of modification and creation, and a table of contents for further details.



3-2.まとめと今後の展望

PropertiesDB Web 専用HPの開設

- ・ DBシステムのデータ構造を再設計し、分散したデータを一括管理
→ 今後のデータ追加／機能拡張が可能な設計に変更
- ・ 3種類のデータソースを相互参照／検索可能
- ・ DBシステムの物性検索／表示機能を拡張
- ・ PubChemサイト引用機能の追加
→ 熱物性情報と分子／物質構造情報との紐付け

- ・ データ集から可能なデータを収集しDBに追加、および追加データを基にした Web表示／可視化システムの機能修正／拡張
- ・ PropertiesDB Webシステムと計算化学を活用した高密度蓄熱材探索について応用研究