

熱化学データベース／熱力学計算ソフトウェア HSC Chemistry, Version 9

(1年間のアップグレード込み)

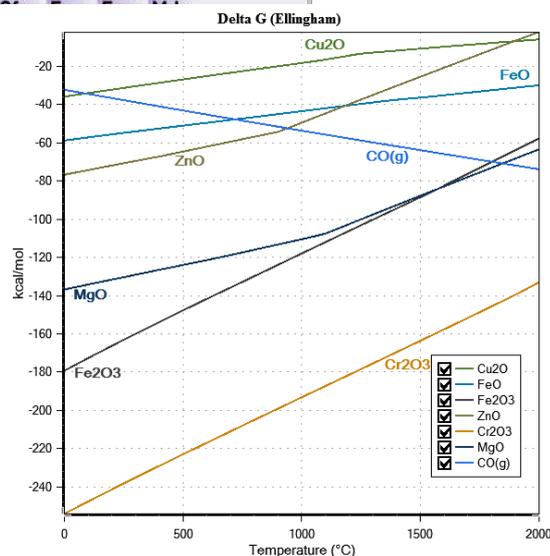
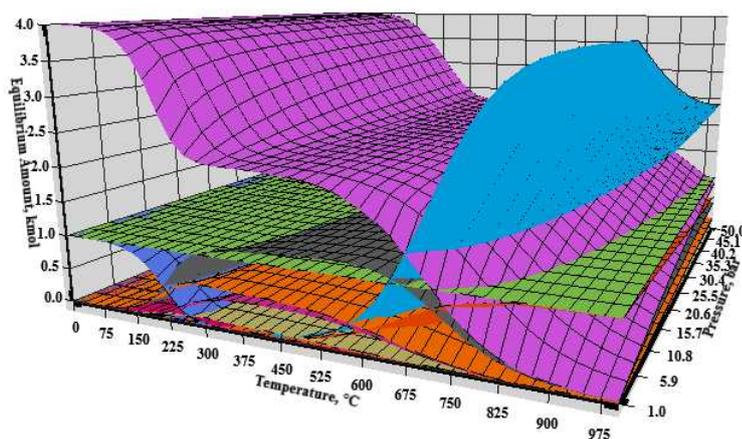
Version 6からのアップグレード価格¥240,000.- (大学・教育機関向け)

Version 7からのアップグレード価格¥200,000.- (大学・教育機関向け)

Version 8からのアップグレード価格¥140,000.- (大学・教育機関向け)

新規価格¥280,000.- (大学・教育機関向け)

(いずれも1ライセンス/税別)



必要なシステム構成

Windows 7/8/10 (32/64 bits)、1GB メモリ、ハードディスク、USB ポート、インターネット接続

商品構成: インストーラのダウンロードリンク、バックアップ用 USB 用メモリーカード、日本語マニュアル (Sim モジュールを除く)

HSC Chemistry の基本機能とデータベース

HSC Chemistry は PC 上で化学反応を解決するための 12 種類の計算オプションを提供します。すべてのオプションは 15 冊以上の分厚い熱化学データ集に収集された 28000 以上の化合物種(固体、液体、気体)の熱化学データベースに匹敵する HSC データベースを活用します。

The screenshot shows the 'Database Editor' window for Iron (Fe). The main data table is as follows:

Range	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
100.00	298.15	800.00	1042.50	1184.80	1667.50	1809.00					
298.15	800.00	1042.50	1184.80	1667.50	1809.00	4000.00					
s	s	s	s	s	s	s					
0.000	0.000	0.000	0.000	1.013	0.853	13.806					
27.280	0.000	0.000	0.000	0.855	0.495	7.623					
19.867	31.873	930.623	-13469.659	24.717	-10.634	46.024					
21.972	-22.333	-1445.325	15857.388	7.463	30.936	0.000					
-0.994	-3.519	-1077.583	29209.350	-1.700	275.166	0.000					
-3.193	40.076	676.724	-5241.389	0.368	-3.791	0.000					
7.860	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000					
15	0	0	0	0	0	0					
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000					

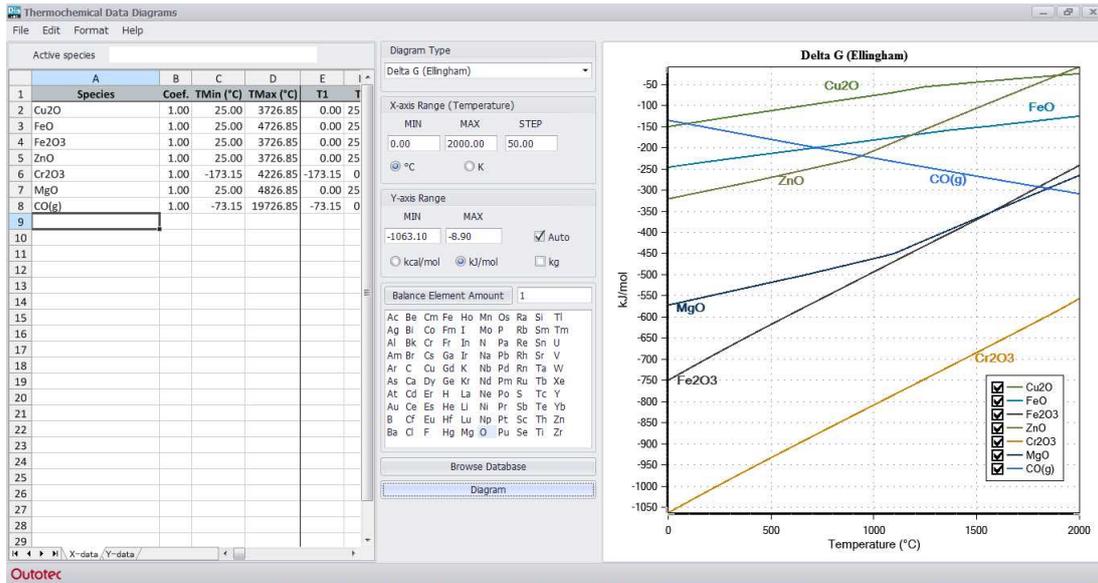
HSC の計算モジュール

1. 反応式
2. 熱と物質の収支
3. 熱損失計算
4. 平衡成分
5. エクセルギー計算
6. H、S、Cp 推定
7. H、S、Cp の Benson 推定 (有機物種)
8. 相安定の状態図 (T_{pp} と L_{pp})
9. 濃度変数と温度変数を持つ Eh-pH 状態図
10. エンタルピー、エントロピー、熱容量、ギブスエネルギー、エリンガム状態図
11. 組成分析の変換
12. 水-蒸気表とモリエール線図
13. 水溶液平衡特性推算モジュール
14. 単位変換
15. テーブルとグラフィックフォーマットでの元素特性

H、S、C、G 状態図

物質種の基礎熱化学データを温度の関数として状態図を作成します。

- H エンタルピー (全体、潜在)
- S エントロピー
- Cp 熱容量
- G ギブスエネルギー
- Delta H
- Delta S
- Delta G (エリンガム状態図)

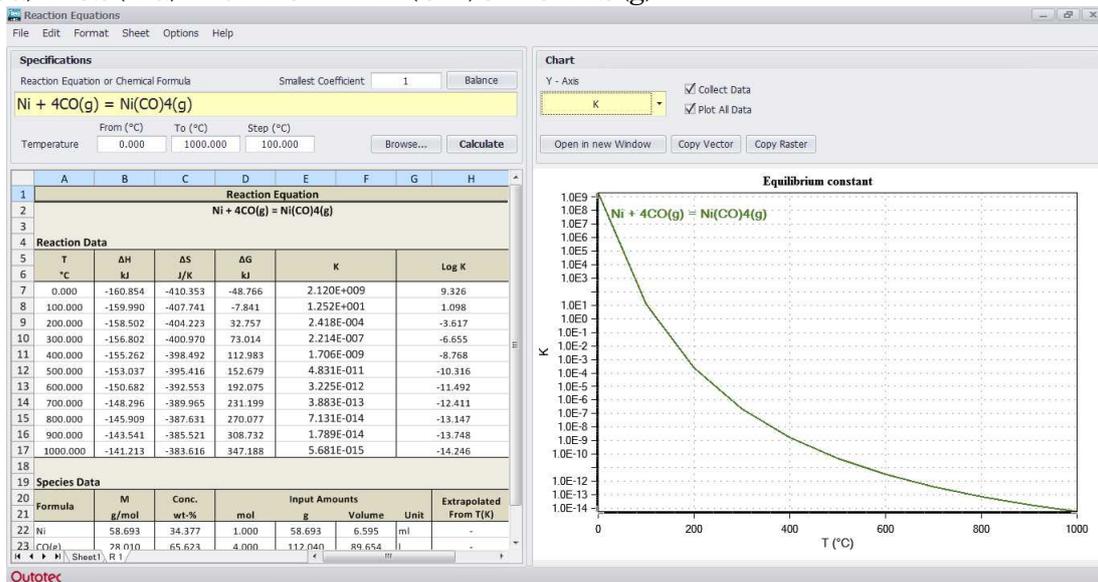
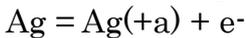
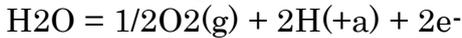
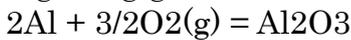
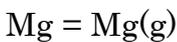


(エリಂಗム状態図)

反応式

従来、研究者は反応式を書き、自分の考えを試験し、そして熱化学の標準データから平衡定数と反応熱を計算しました。しかし、基準状態変換でデータを時間の要する研究が必要とされました。

入力フィールドに反応式を入力すると、試料の任意の温度と量で反応熱と平衡定数が得られます。元素の収支がチェックされ、電気化学反応について電位 vs 標準水素電極が得られます。計算された反応熱は反応で吸収、放出された熱の総量です。平衡定数で反応の方向を予測できます。ユーザーは以下のように分子式または化学反応式の形式で入力できます：



(反応式を入力すると、平衡式ボタンで反応に対する係数が与えられます。)

熱収支

熱収支計算は操作の事前条件、必要なエネルギー、プロセスのコストを予測するために必要とされます。実際に、熱収支が見合わなければ、プロセスが働きません。入出力の試料、その量と温度が計算に必要とされます。初期条件が変化するたびに、熱収支が計算されます。この方法で反応系の電気熱をオフセットするための原材料の最適な事前温度を見つけることができます。反応式または平衡計算から試料と量を得ることにより、理論的熱収支を計算できます。実験結果から試料と量を得ることにより、実際の熱収支を計算できます。

実験室から工業規模にプロセスをスケールアップするときに、これらの収支が大変役に立ちます。それぞれのボタンを押さえることにより、温度として°CまたはK、量として mol または kg、エネルギー単位としてカロリーまたはジュールを選択できます。

(熱収支計算)

Temp Bal ボタンはゼロ熱収支での製品の温度を得るために使われます。環境へのゼロ熱収支のガス燃焼プロセスの場合、断熱燃焼温度が発生します。Save ボタンを押すと、入力と結果の両方をテキストファイルとして保存できます。ファイルは HSC での編集も外部のプログラムでの利用も可能です。

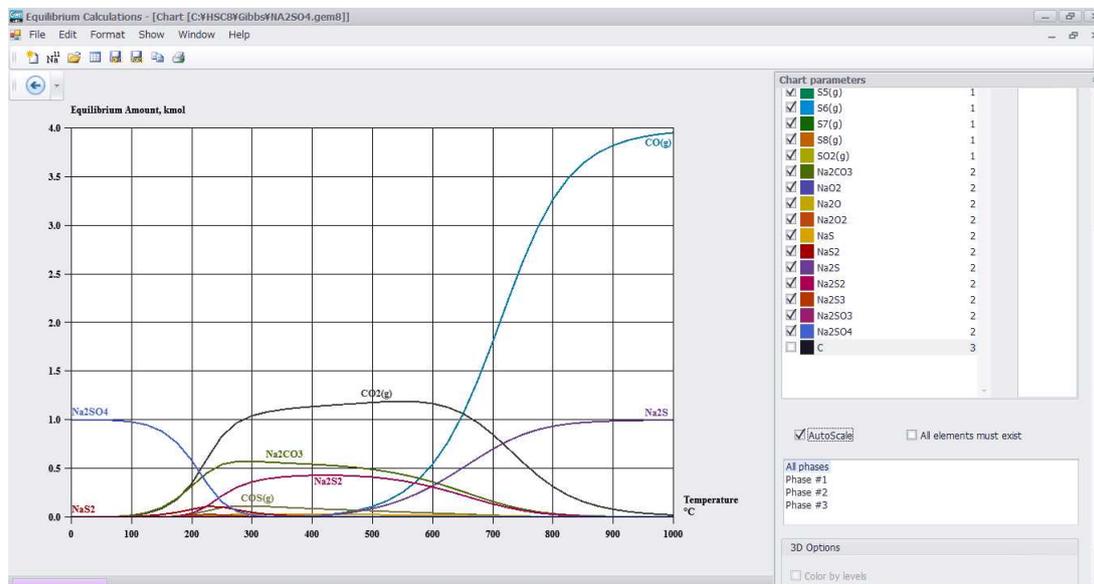
平衡状態図

(平衡成分オプションのユーザー入力)

平衡計算は生成物の原材料量と温度のようなプロセス変数の影響を観察するための方法を提供します。

このオプションで反応器内での平衡成分と優勢な相の量を計算できます。系の原材料量、温度、試料を指定するだけです。系の元素を選択することにより、または分子式を入力することにより、また古いファイルを編集することにより、試料を指定できます。温度と成分の定数として、または関数として活性係数が得られます。

プロセス変数の影響を視覚化するために原材料量または反応温度の範囲の段階的なインターバルで計算を反復できます。例えば、銅と硫化鉄からの砒素蒸発における温度の影響、または塩化チタンに供給された塩素の影響をシミュレートできます。

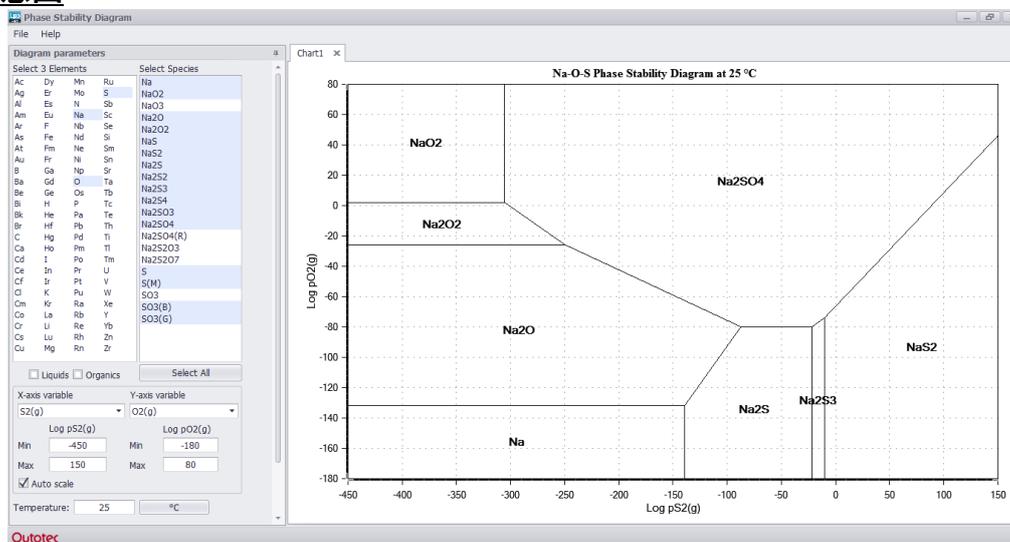


(平衡結果の例：気相と固相における炭素での Na2SO4 還元の種類
圧力の範囲を与えると表紙の 3D 状態図になります。)

Save ボタンを押すことにより、ユーザーが入力データを保存するとすぐに、ギブスの自由エネルギー最小化法を使って平衡成分が計算されます。そして原材料量、温度、部分圧他の関数として結果をグラフで表現できます。リニアまたは対数表示を選択でき、XY 軸として最大と最小を設定できます。

ダイアグラムを描くために使われるテーブルデータは Table ボタンを押すことによりテキストファイルとして保存できます。このファイルをスプレッドシートで読み込むことができます。

相安定状態図

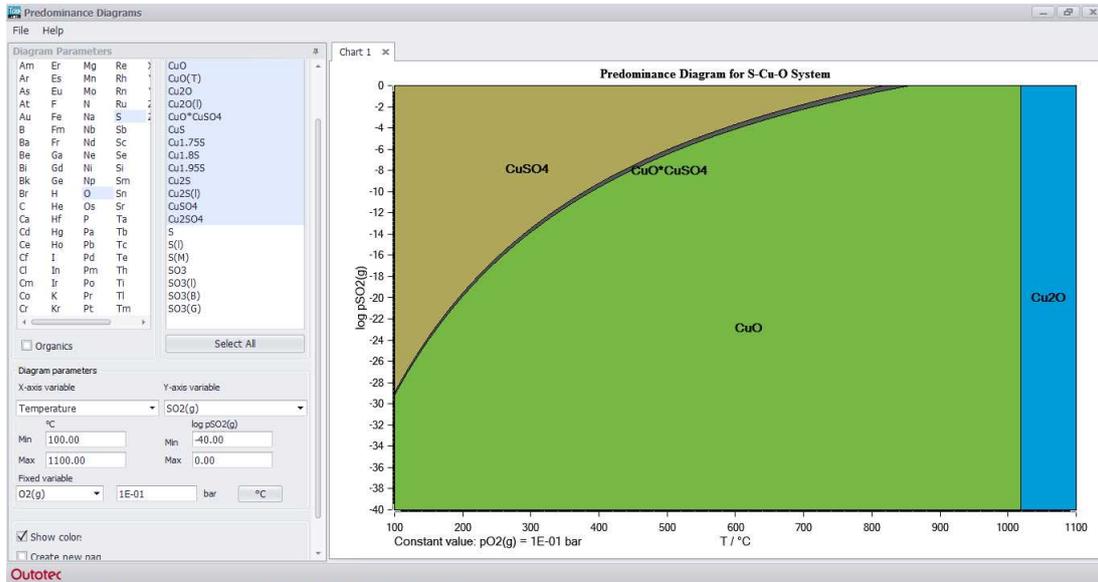


(系の 3 元素を選択 - TPP 状態図)

相安定ダイアグラムは酸素、硫黄、塩素、酸化窒素他のさまざまな部分圧での異なる相の安定範囲を見つける方法を提供します。ダイアグラムは以下の手順で作成されます。

- 3つの元素を選択し、OK ボタンを押す
- XY 軸と種を選択
- ダイアグラムを見るために Go to PSD ボタンを押す

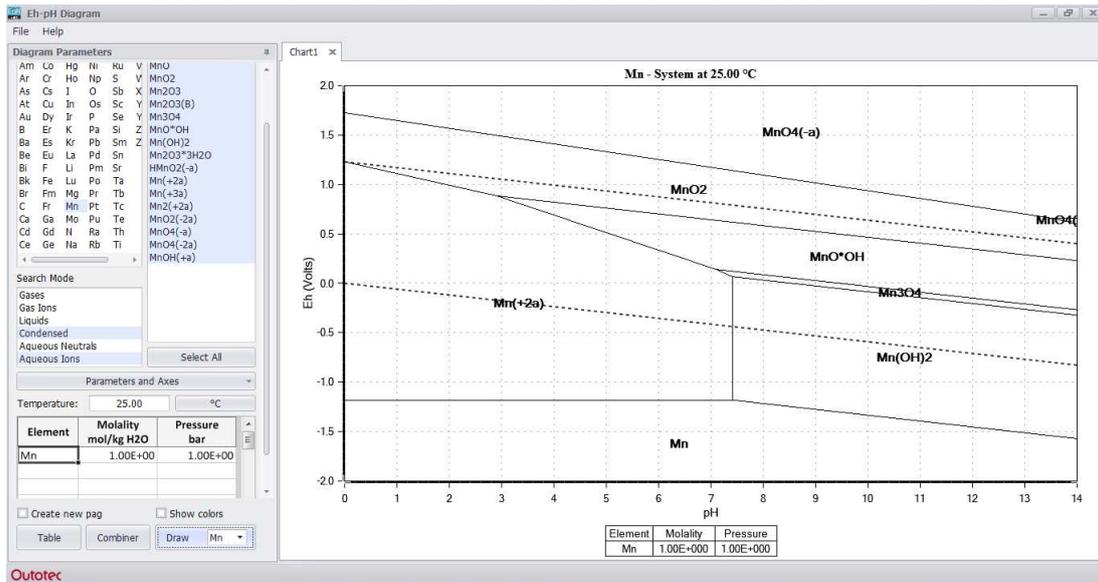
マウスでラベルを再配置でき、Menu ボタンを押すと、スケールを変更でき、Font ボタンを押すと、フォントを変更でき、タイトルはタイトルフィールドで直接編集できます。ダイアグラムのコピーが必要であれば、Print ボタンを押すとウィンドウでサポートされたプリンタの最高の解像度で印刷が得られます。



(800C における Na-S-O 系の相安定 LPP 状態図)

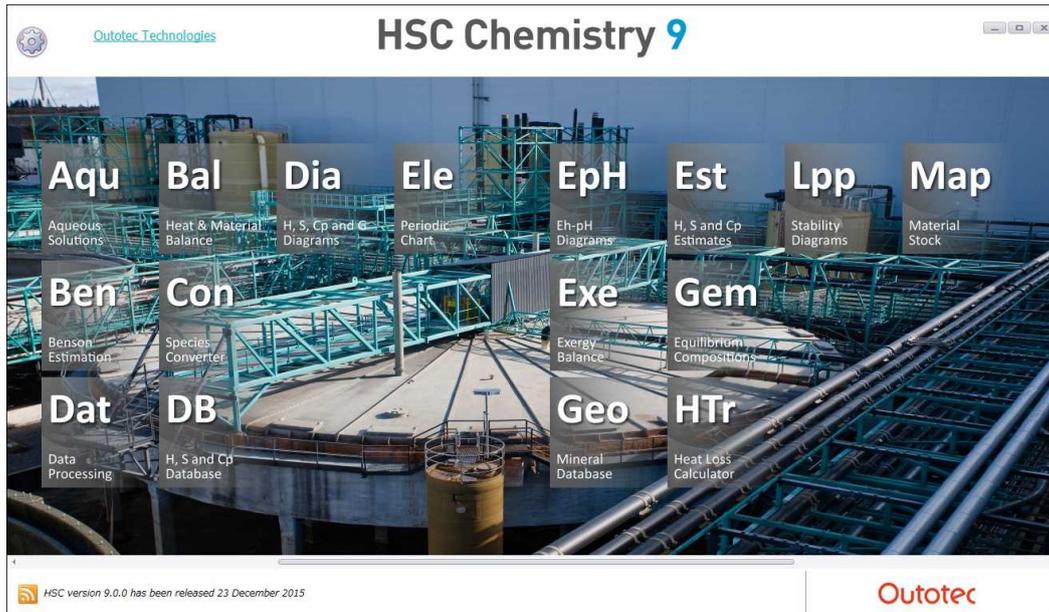
EpH(プールベ)状態図

水溶液中のイオン性と非イオン性種の安定性の知識は腐食、溶解、リーチングと選択性沈殿の内容の理解に Critical です。Ep-pH ダイアグラムによりグラフィックでこの情報がディスプレイされます。この計算オプションで 1 元素と H₂O の単純なダイアグラムや複数元素での複雑なダイアグラムを描くことができます。



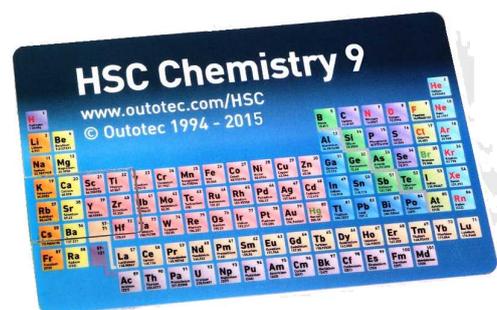
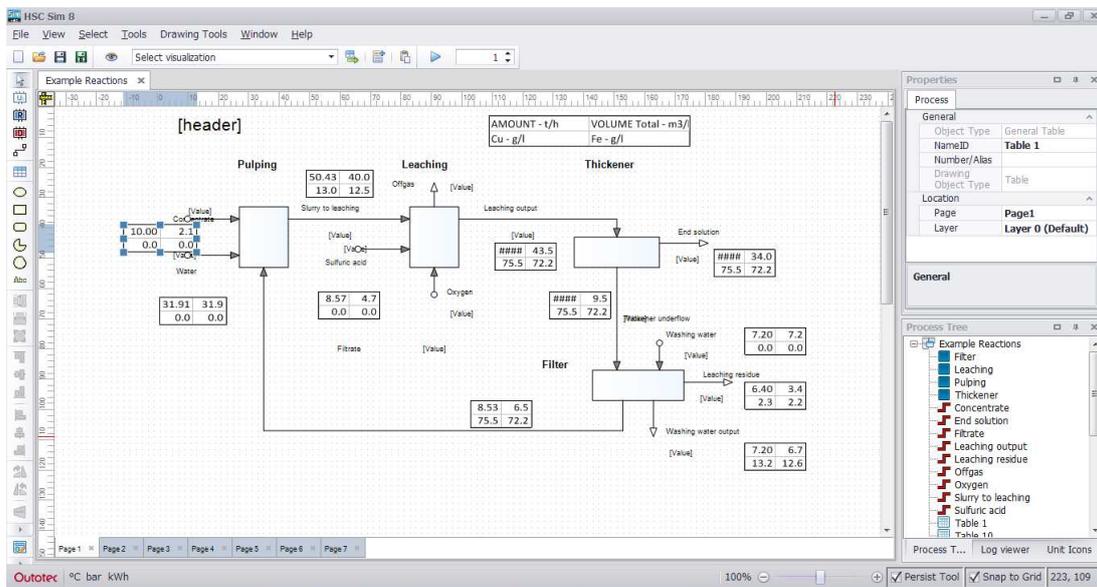
(少なくとも 1 元素を選択) / (25C における Mn-H₂O 系の EpH ダイアグラム)

シアン色の点線は水の安定領域を示します。イオンの安定領域は青い線を囲むこともできます。Menu ボタンを押すと元素の濃度とスケール設定を変更できます。



(HSC Chemistry のメインメニュー)

HSC 8.0 は従来までの単一の化学反応とユニットプロセスのシミュレーションとモデリングではなく、複数のユニットプロセスから成るプロセス全体をシミュレーションとモデリングできるようになりました。



(インストーラが入ったメモリーカード／周期表の左中央部分を折り返すと USB ポートがある)

オーヴィス株式会社 行
 ■ファックス:06-6352-8898
 ■電話:06-6352-7090
 ■メール:info@oviss.co.jp

HSC Chemistry, Version 9.0 新規/アップグレードの注文書

購入形態			
バージョンアップの場合には、対象となる旧バージョンのシリアル番号を記入、新規購入の場合には○印のみを付けて下さい。(価格はいずれも税別です)		Version 5 およびそれ以前からのバージョンアップとしての購入(¥600,000/一般向け)(¥260,000/大学向け)	
		Version 6 からのバージョンアップとしての購入(¥550,000/一般向け)(¥240,000/大学向け)	
		Version 7 からのバージョンアップとしての購入(¥480,000/一般向け)(¥200,000/大学向け)	
		Version 8 からのバージョンアップとしての購入(¥320,000/一般向け)(¥140,000/大学向け)	
		新規での購入(¥650,000/一般向け)(¥280,000/大学向け)	
氏名(日本語表記と英語表記)			
所属機関(会社 大学等)名(日本語表記と英語表記)			
所属部署名(日本語表記と英語表記)			
商品の送付先		この案内書と同じ住所への発送を希望する場合には、左の欄に丸印を付けて下さい。下欄への記入の必要はありません。	この案内書とは異なる住所への発送を希望する場合には、左の欄に丸印を付けて下欄に送付先を記入して下さい。
(日本語表記と英語表記)	〒 _____ 自宅 / 勤務先 (いずれかを○で囲って下さい。)		
e-mail アドレス(*)			
電話番号 ファクシミリ番号	電話	ファクシミリ	
メモ欄: その他の注文/連絡/問い合わせ.....			

HSC Chemistry, Version 8 のインストールはインターネットでのユーザー認識とアクティベートを基本としています。少なくともインストール時にインターネットに接続しなければなりません。インターネットに接続できない PC に HSC Chemistry をインストールする場合には、インストール/アクティベーション部分をオフラインで行う特別バージョンをお求めください。この特別バージョンは追加¥100,000 が必要です。

ご注文分につきましては、商品に納品書と請求書を付けて発送いたします。請求書類に何か指示がありましたら、お知らせ下さい。