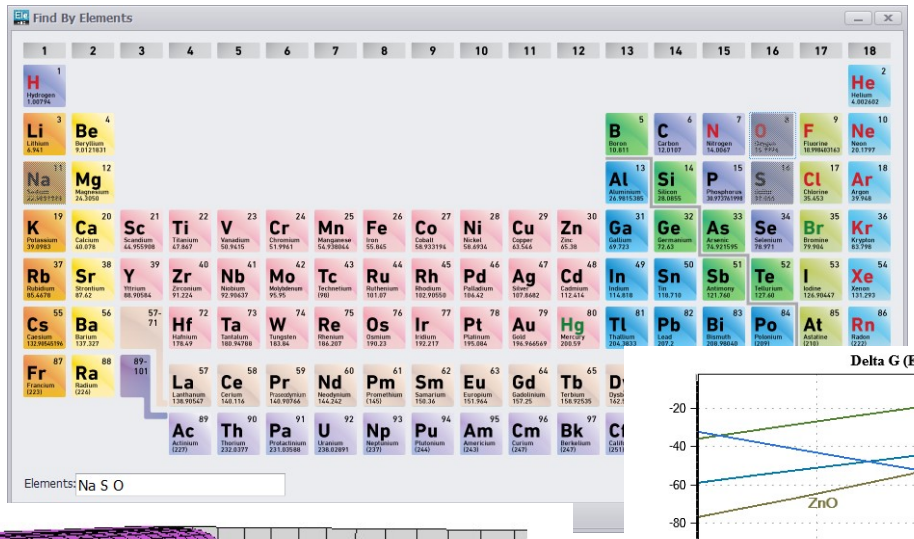
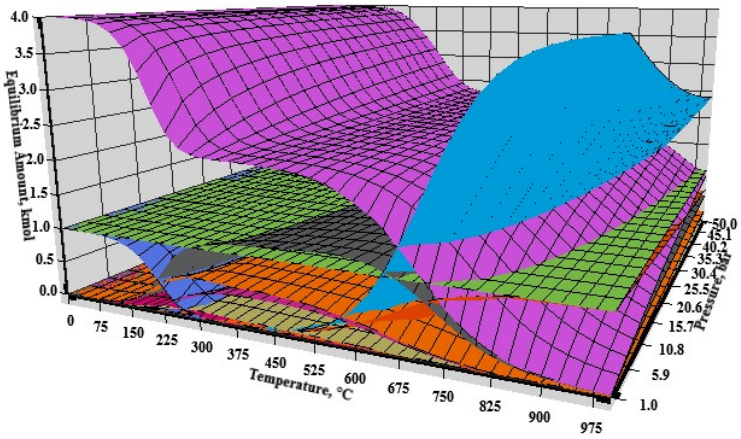
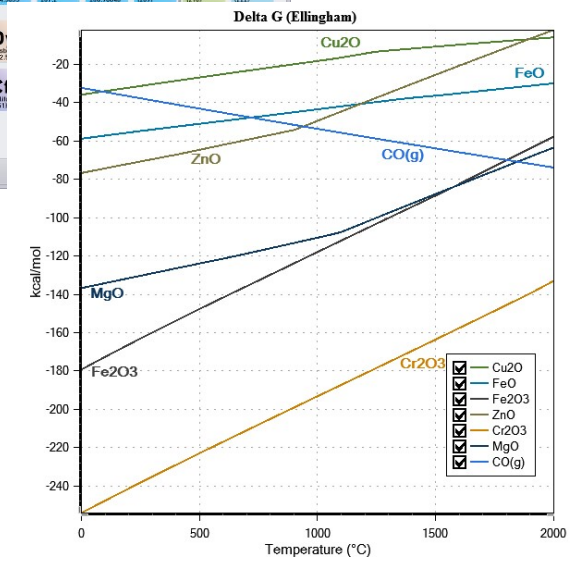
熱化学データベース／熱力学計算ソフトウエア

HSC Chemistry, Version 10.x



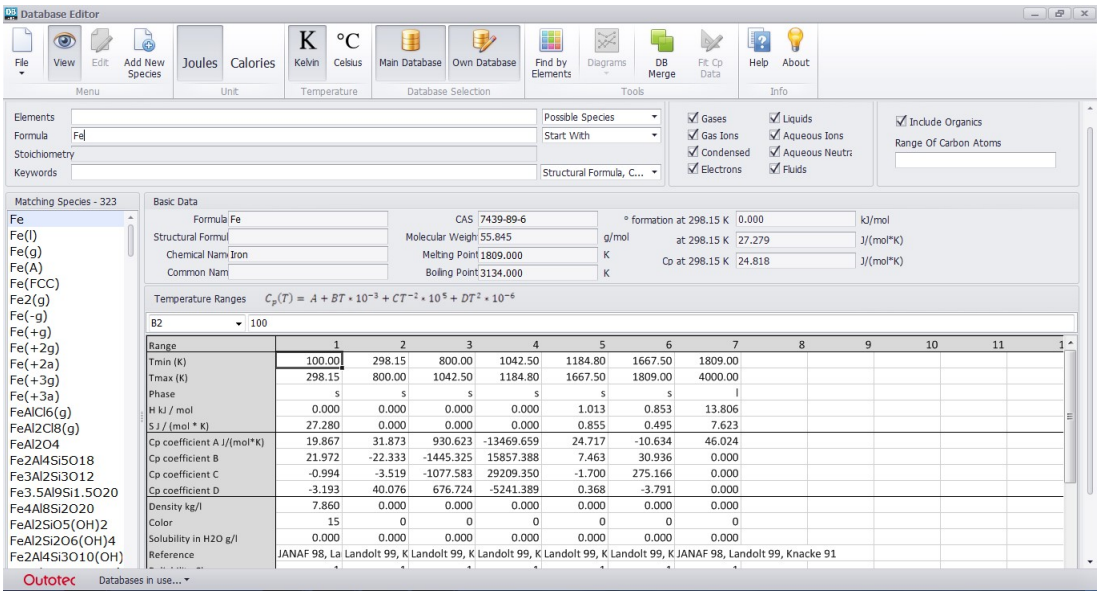




制作：Outotec Research Oy (Finland)
国内販売：株式会社　ディジタルデータマネジメント
〒103-0025　東京都中央区日本橋茅場町 1-11-8　紅萌ビル
Tel: 03 (5641) 1771　Fax: 03 (5641) 1772
E-mail: tech@ddmcorp.com　URL: http://www.ddmcorp.com

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。



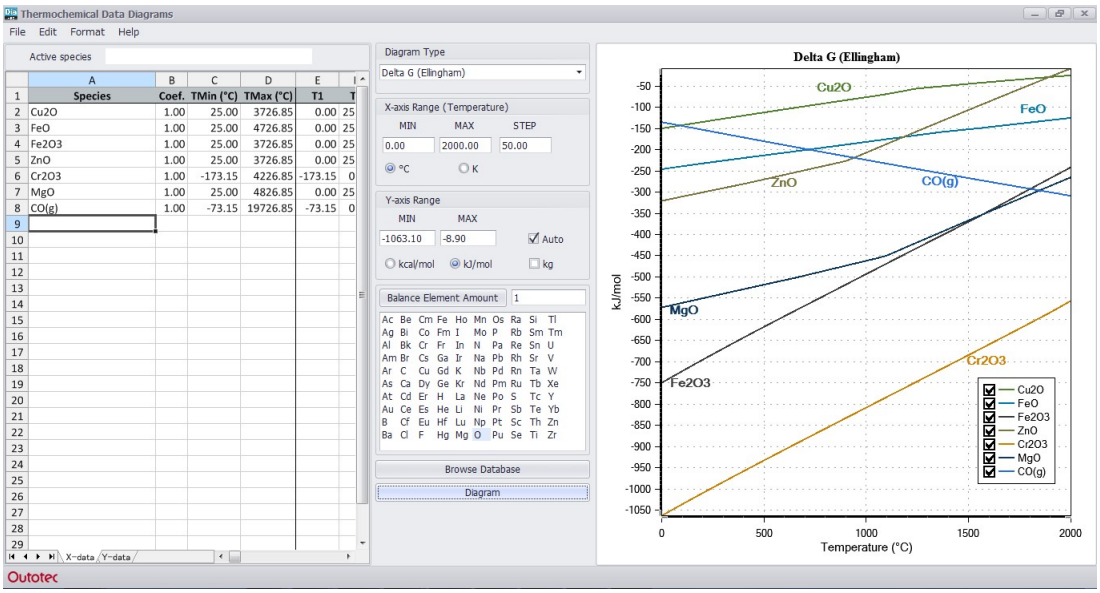
HSC の計算モジュール

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（Tpp と Lpp）
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）



（エリンガム状態図）

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：

Na2So4

Mg = Mg(g)

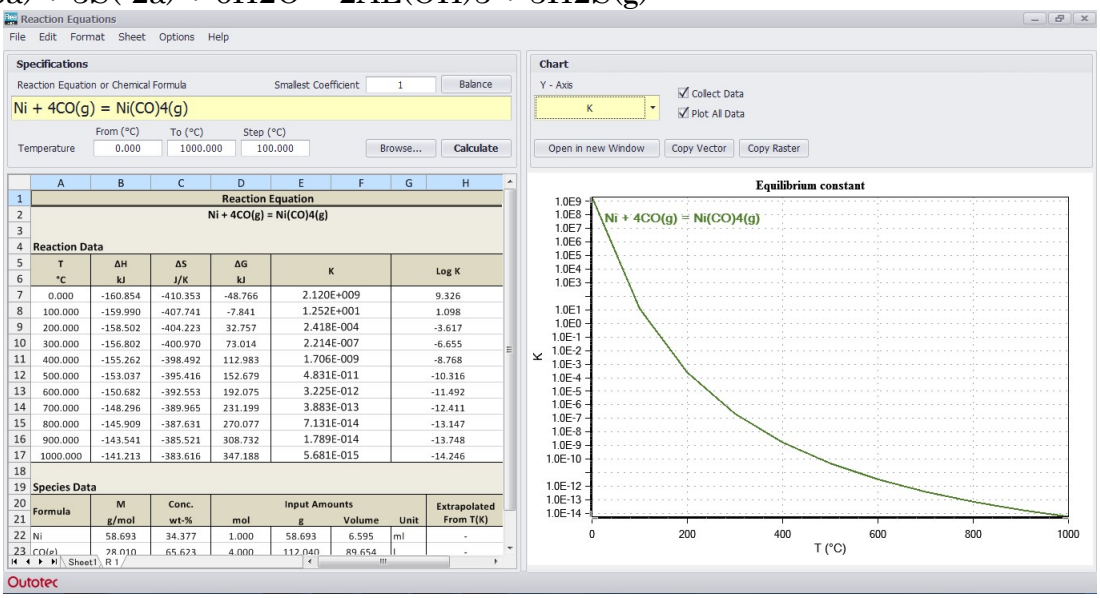
2Al + 3/2O2(g) = Al2O3

H2O = 1/2O2(g) + 2H(+a) + 2e-

Ag = Ag(+a) + e-

3NO2(-a) + 2H(+a) = 2NO(g) + H2O + NO3(-a)

2Al(+3a) + 3S(-2a) + 6H2O = 2AL(OH)3 + 3H2S(g)

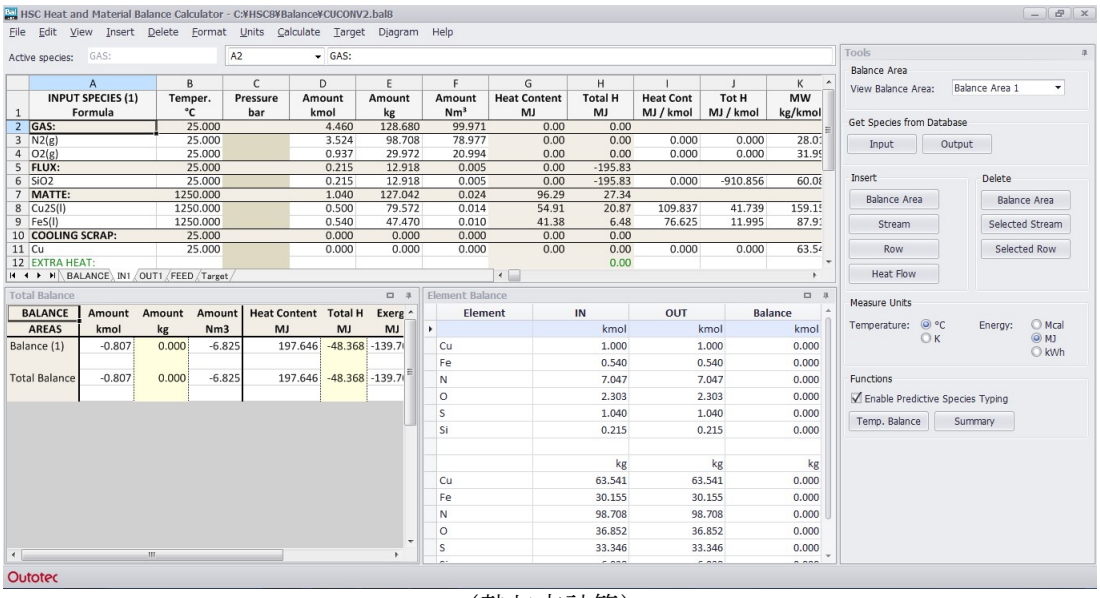


（反応式を入力すると、平衡式ボタンで反応に対する係数が与えられます。）

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。

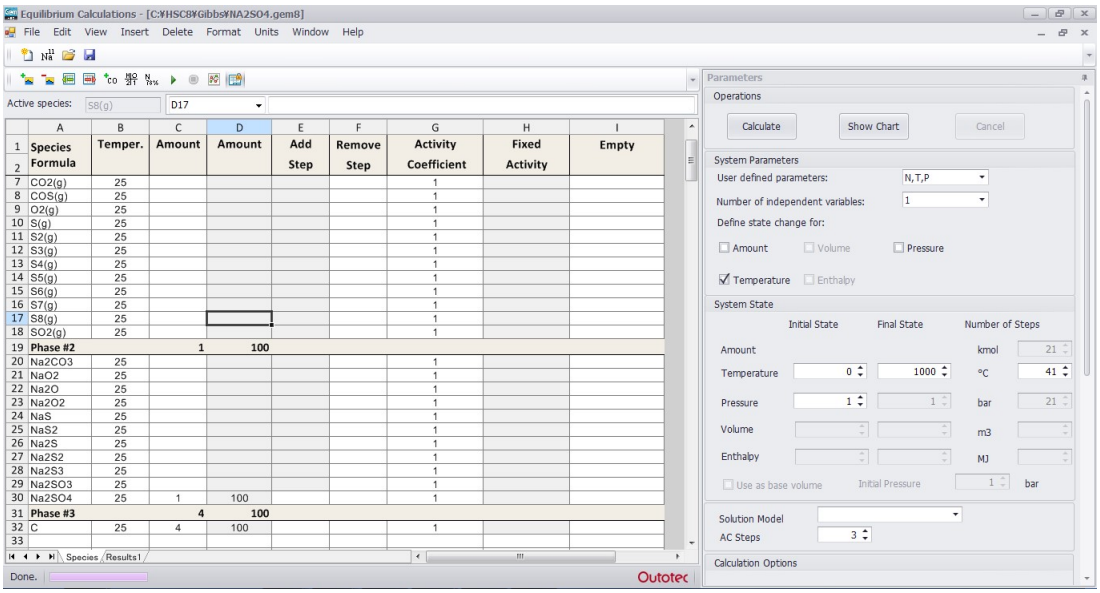
実験室から工業規模にプロセスをスケールアップするときに、これらの収支が大変役に立ちます。
それぞれのボタンを押さえることにより、温度として℃またはK、量として mol または kg、エネルギー単位としてカロリーまたはジュールを選択できます。



（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

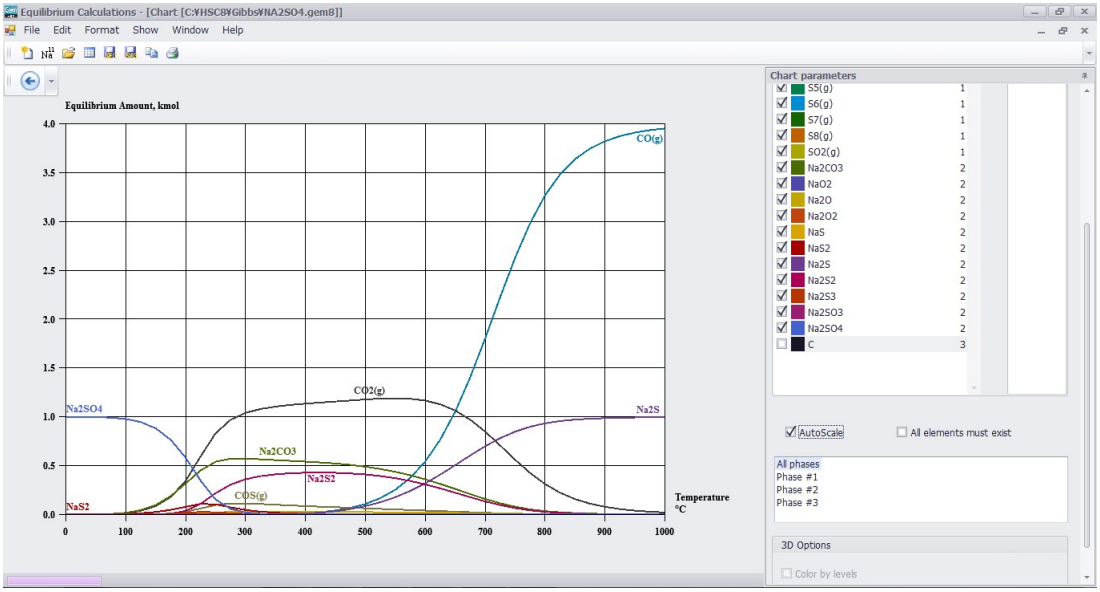


（平衡成分オプションのユーザー入力）

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、また旧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。

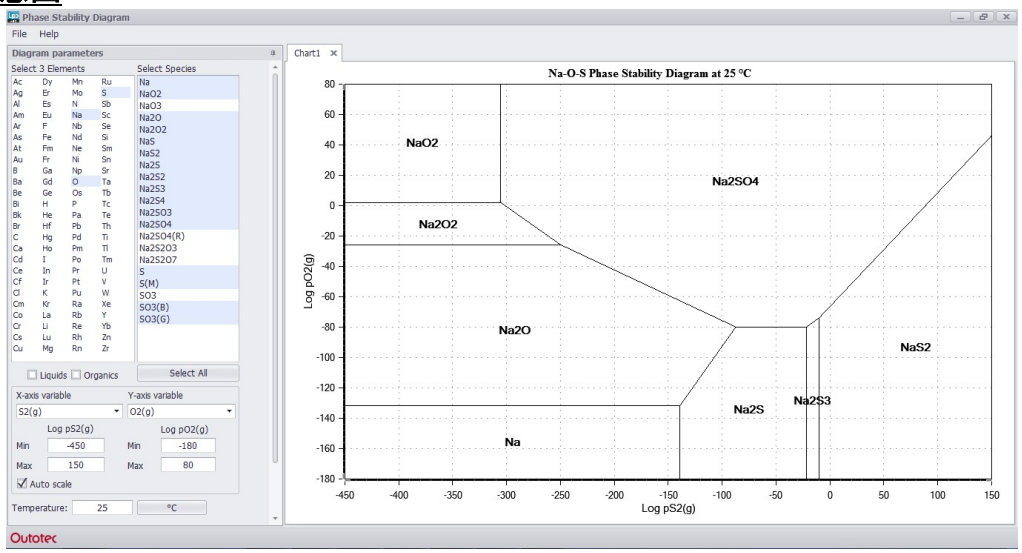


（平衡結果の例：気相と固相における炭素での Na2SO4 還元の種の量
圧力の範囲を与えると表紙の 3D 状態図になります。）

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）

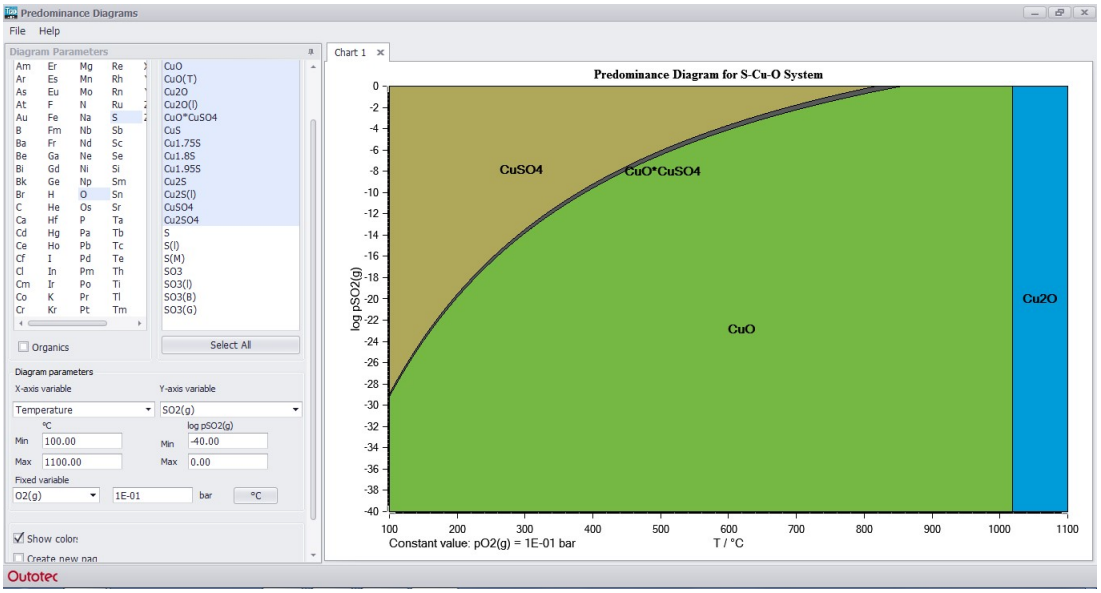
相安定ダイアグラムは酸素、硫黄、塩素、酸化窒素他のさまざまな部分圧での異なる相の安定範囲を見つける方法を提供します。ダイアグラムは以下の手順で作成されます。

－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

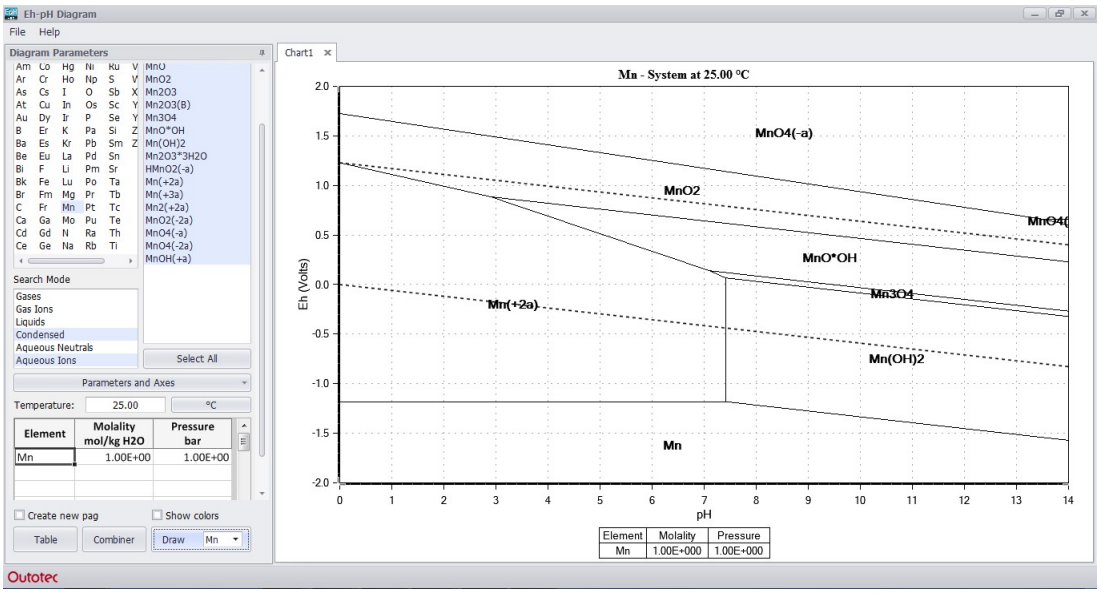
マウスでラベルを再配置でき、Menu ボタンを押すと、スケールを変更でき、Font ボタンを押すと、フォントを変更でき、タイトルはタイトルフィールドで直接編集できます。ダイアグラムのコピーが必要であれば、Print ボタンを押すとウィンドウでサポートされたプリンタの最高の解像度で印刷が得られます。



（800C における Na-S-O-系の相安定 LPP 状態図）

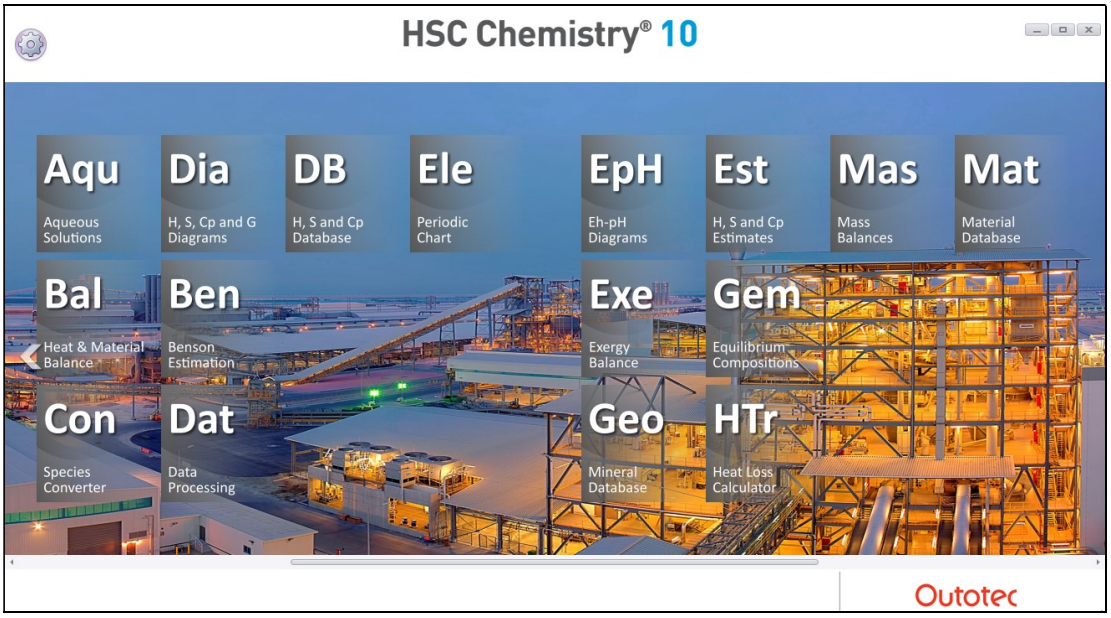
EpH（プールベ）状態図

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。



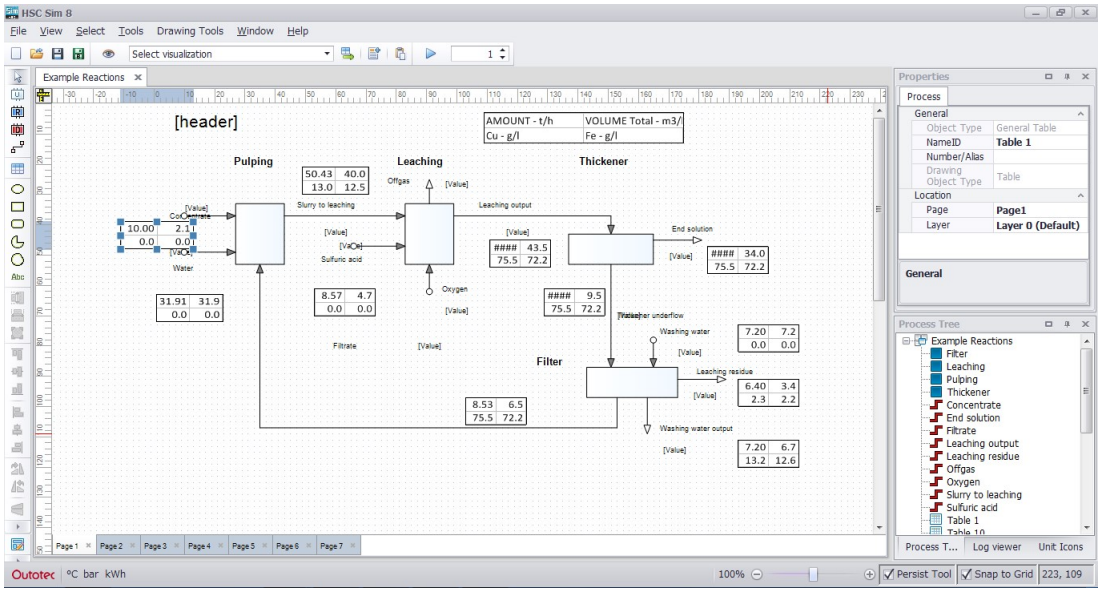
（少なくとも 1 元素を選択）／（25C における Mn-H2O 系の EpH ダイアグラム）

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。



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 ライセンス形式－概略

HSC Basic

- アクティベーション時にインターネット接続が必要です。
- HSC 使用時にインターネット接続の必要はありません。
- ライセンス数はマシンの数に基づきます。
- インスタンスの数に制限はありません。
- 30 日以上の間隔でアクティベーションを別のマシンに移行できます。(

HSC Mac/Linux with windows emulator

- インターネットの常時接続が必要です。
- ライセンス数はマシンの数に基づきます。
- ウィンドウズエミュレータをバーチャルマシンで起動できます。
- 1 台のマシンで 5 個のインスタンスが許容されます。

HSC Floating

- アクティベーション時にインターネット接続が必要です。
- インターネットの常時接続が必要です。
- インターネットの常時接続が必要です。
- インスタンスの数に制限はありません。
- 必要な時にアクティベーションをマシンから別のマシンに変更できます。

HSC Server with Remote Desktop and Virtual Machine Support

- インターネットの常時接続が必要です。
- 物理的なサーバーまたはバーチャルマシンに HSC をインストールできます。
- ライセンス数はユーザー数に基づきます。
- 1 ユーザー当り 5 インスタンスまでが許容されます。

＊“マシン”＝HSC を起動し、使用されるコンピュータデバイス(物理的またはバーチャルにかかわらず)
＊“インスタンス”＝HSC が開始されたとき、各モジュールがインスタンスを作成します。

サブスクリプション

HSC10 は 1 年または 3 年のサブスクリプション(年間契約)で使用できます。ユーザーは購入した契約期間内の全てのメジャーとマイナーなアップデートを受け取ります。正規のサブスクリプションにより HSC Chemistry のモジュールj の最新バージョンを使用できます。HSC を使用できなくなる空白期間を作らないためには、サブスクリプション期間が終了する前に、サブスクリプションを更新しなければなりません。

株式会社ディジタルデータマネジメント 行き
■ファクシミリ:03-5641-1772
■電話:03-5641-1771
■郵便:〒103-0025 東京都中央区日本橋茅場町 1-11-8 紅萌ビル

HSC Chemistry, Version 10.x の注文書

購入形態とライセンス数 (価格はいずれも消費税込みであり、参考としての1ライセンスの料金です)	購入形態(○印)	ライセンス数(1や2などの数値)
HSC Basic License (1ライセンスの場合¥528,000/一般向け)(¥176,000/大学向け)		
HSC Floating License (1ライセンスの場合¥1,859,000/一般向け)(¥550,000/大学向け)		
HSC Server License (1ライセンスの場合¥1,859,000/一般向け)(¥550000/大学向け)		

氏名(日本語表記と英語表記)		
法人番号		
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 (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／問い合わせ等		

＊HSC Chemistry Version 10 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はインターネットへの接続が原則ですが回避手段もあります。

＊HSC Floating License と HSC Server License ではインターネットの常時接続が必要です。

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。