

粒子の生成・表面成長予測

化学反応解析ソフト最新バージョン

リアクション環境・ナノ材料で威力 デザイン

リアクション・デザイン・ジャパン(本社・東京都文京区、三森輝夫代表取締役)は、詳細化学反応解析ソフト「CHEMKIN」の最新バージョン4.1を販売開始した。基本機能を一段と高度化させたことに加え、燃焼による粒子の生成や成長・凝集などの特異な現象を精密に解析できる新しいオープンモジュ

ールを提供する。ナノ材料開発や環境関連分野での応用展開が注目され、価格はフルパッケージの年間ライセンスで約二百万円。

CHEMKINは、実験レベルから工業規模の反応器設計まで、化学反応の影響が大きい系の反応流や化学種の挙動をシミュレーションするシステムで、化学物質の物性データベースを用いて素反応ベースでの詳細な化学反応解析を行えることが特徴。

今回の最新版の最大の特徴は新たなモジュールが用意されたこと。なかでも注目されるのが「粒子追跡モジュール」。各種燃料が燃焼・熱分解し、ハイドロカーボンが生成され、粒子核が発生して表面成長が起こり、粒子同士が凝集、あるいは消失するといった一連のプロセスを詳細化学反応論をベースに精密にシミュレーションが可能。

解析機能としては、気相における粒子核の生成反応、および凝縮や堆積、酸化その他の表面反応によって生じる粒子の成長や、収縮による粒子径の変化を追跡する機能を備えている。新燃料や燃料混合物の幅広い取り扱いが可能で、粒子素反応についての新しい科学的知見を取り込める拡張性も持っている。ウィンドウス上でのわかりやすいクラフィック環境を有していることも特徴だ。

環境規制をならんだすの抑制や、先端材料としてのナノ粒子のサイズ制御、カーボンブラック製造でのプロセス最適化などの分野で利用することが可能。

なお同社は十二日午後一時半から、代理店の要請システムと共同で今回

の新バージョン無料紹介セミナーを開催する。詳細は https://secure.rsi.co.jp/kagaku/cs/semnar/rsi_91.html