

# Chesta Ver. 2.22 マニュアル

2010/6/22

畑田 直行

## 目次

1	はじめに.....	4
1.1	Chesta とは .....	4
1.2	動作環境.....	4
2	使用の流れ .....	6
2.1	ソフトの起動 .....	6
2.2	データの読み込み .....	6
2.3	作図条件の設定.....	6
	• 座標軸の割り当て .....	7
	• パラメータの選択.....	7
	• 相の選択.....	7
2.4	化学ポテンシャル図の表示と操作.....	7
	• 図の拡大・縮小 .....	8
	• 図の回転.....	8
	• 座標軸の設定 .....	8
	• 環境設定(パラメータ操作) .....	9
	• 相の活量設定 .....	9
	• 画像の出力.....	9
	• 表示の設定.....	10
	• 図の切り替え.....	10
3	各種機能.....	11
3.1	共通オプション設定 .....	11
	• 表示色設定.....	11
	• 軸表示設定.....	11
	• フォント設定.....	11
3.2	画像一括保存 .....	11
3.3	平衡点リスト表示.....	12
3.4	Mathematica 出力 .....	12
4	データファイルについて.....	14
4.1	データファイルに含まれる情報.....	14
4.2	データファイルの形式 .....	14
4.3	各識別子の意味.....	15
4.4	Log(活量) 軸のみを用いた化学ポテンシャル図を作成するには .....	17
	• 熱力学データの準備.....	17
	• 熱力学データの記述.....	17
	• その他の情報の記述.....	18
	• データファイルの完成例 .....	19

- 4.5 配位子を含む電位 pH 図を作成するには ..... 20
- 熱力学データの準備..... 20

# 1 はじめに

## 1.1 Chesta とは

Chesta は Microsoft Windows 上で動作する化学ポテンシャル図作成ソフトウェアです。次のような主要機能があります。

- ▶ ユーザーが与えた熱力学データをもとに、n 元系 ( $n \geq 2$ ) に対する二次元・三次元化学ポテンシャル図 (電位 pH 図を含む) を作成する<sup>1</sup>。
- ▶ 二元系・三元系に対して組成—自由エネルギー図を作成する。

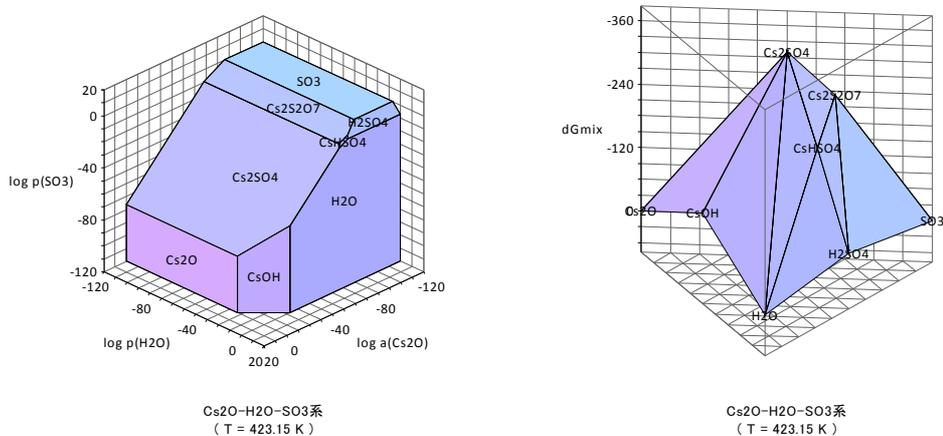


図 1.1: 三次元化学ポテンシャル図(左)および組成—自由エネルギー図(右)

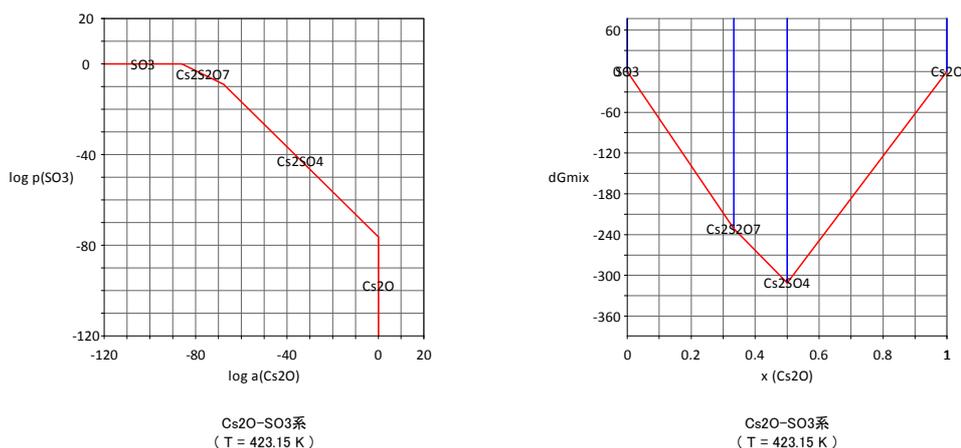


図 1.2: 二次元化学ポテンシャル図(左)および組成—自由エネルギー図(右)

## 1.2 動作環境

<sup>1</sup> 最大 251 元系にまで対応しています。

- Microsoft Windows 98, Me, XP, Vista が正常に動作する環境.
- 解像度 XGA (1024 × 768) 以上のモニター.

## 2 使用の流れ

ここでは、既存のデータファイルを使用して化学ポテンシャル図を作成する方法を説明します。データファイルの作成方法については“4 データファイルについて”を参照してください。

### 2.1 ソフトの起動

“Chesta.exe”をダブルクリックします。Chesta が起動し、図 2.1 のような画面が現れます。

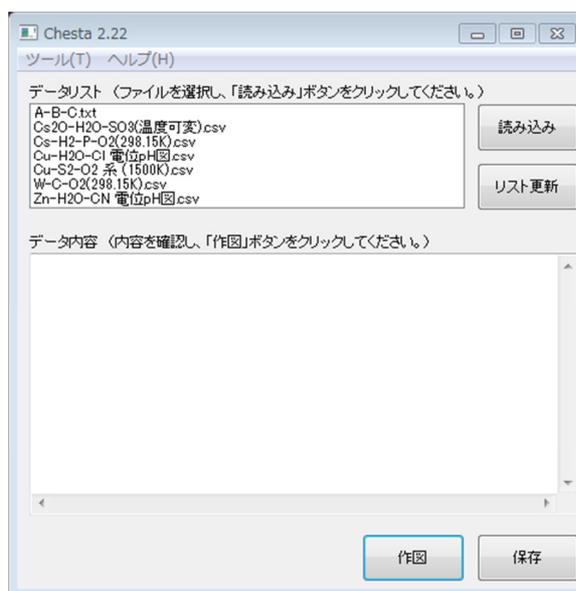


図 2.1: 起動直後の初期画面

### 2.2 データの読み込み

図 2.1 の画面上部に表示されている“データリスト<sup>2)</sup>”から、使用したいデータファイルを選択して“読み込み”ボタンをクリックします。そのファイルの内容が画面下部のテキストボックスに表示されます。内容を確認し、必要であればテキストボックス中で修正を加えます<sup>3)</sup>。

### 2.3 作図条件の設定

“作図”ボタンをクリックすると、図 2.2 のような作図条件設定画面が現れます。

<sup>2)</sup> “Chesta.exe”があるフォルダ内の“Data”フォルダ内のテキストファイルおよび CSV ファイルがリストアップされます。

<sup>3)</sup> “保存”ボタンにより変更を保存することができます。

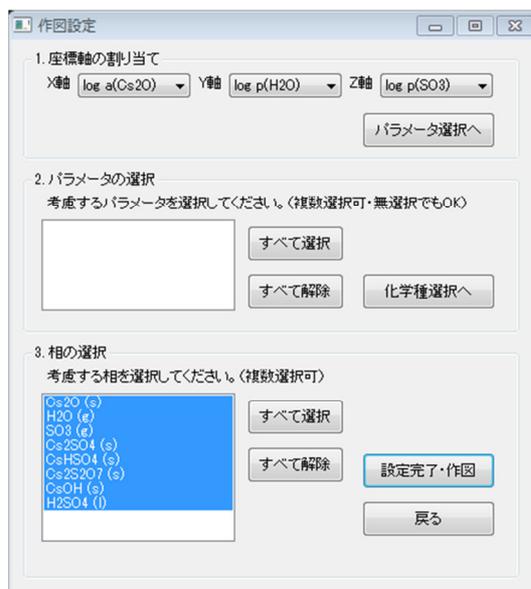


図 2.2: 作図条件設定画面

### ▶ 座標軸の割り当て

まず画面上部のコンボボックスで座標軸の割り当てを行います。化学ポテンシャル図中の X 軸, Y 軸, Z 軸に割り当てる変数をそれぞれ選択します。Z 軸に対し“なし”を選択した場合は二次元図が作成されます。割り当てが完了したら“パラメータ選択へ”ボタンをクリックします。

### ▶ パラメータの選択

次に画面中部のリストボックスでパラメータの選択を行います<sup>4</sup>。化学ポテンシャル図を作成する際に考慮したいパラメータを選択し、“相の選択へ”ボタンをクリックします<sup>5</sup>。自由エネルギー図を作成するときにはすべて選択を解除します。

### ▶ 相の選択

さらに画面下部のリストボックスで相の選択を行います。化学ポテンシャル図を作成する際に考慮したい相を選択し、“設定完了・作図”ボタンをクリックします。

## 2.4 化学ポテンシャル図の表示と操作

作図条件設定が完了すると、図 2.3 のように 2 つのウィンドウが開きます。化学ポテンシャル図ウィンドウには化学ポテンシャル図が表示されます。コントローラウィンドウは化学ポテンシャル図の操作用です。

<sup>4</sup> リストボックスには直前の座標軸の割り当てで選択されなかった変数が表示されます。

<sup>5</sup> 座標軸にもパラメータにも選択されなかった変数に対応する成分を含む相は化学ポテンシャル図から除外されます。

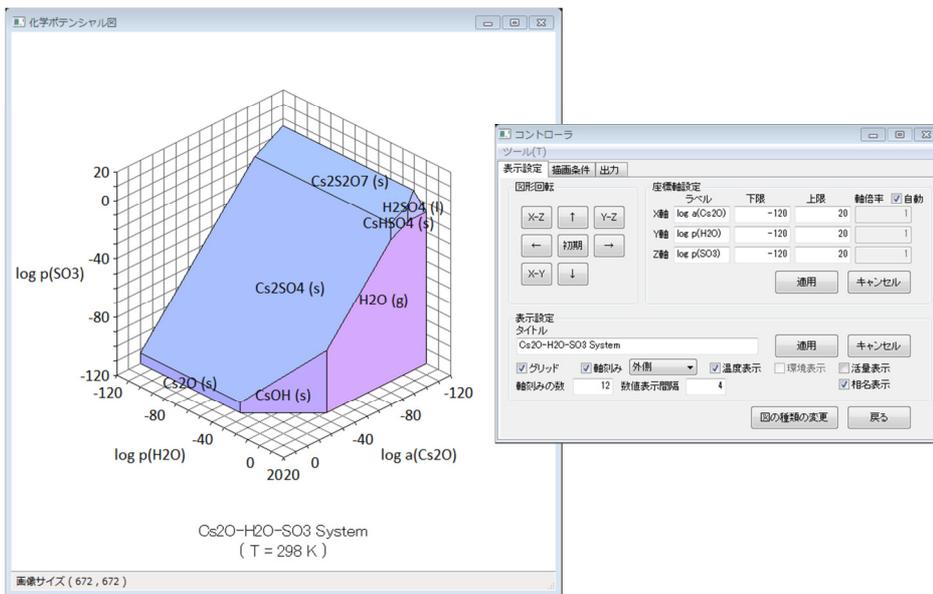


図 2.3: 化学ポテンシャル図ウィンドウ(左)とコントローラウィンドウ(右)

▶ 図の拡大・縮小

化学ポテンシャル図ウィンドウのサイズを変更すると、それに合わせて化学ポテンシャル図のサイズが変更されます。サイズは化学ポテンシャル図ウィンドウ下部のステータスバーで数値により確認することができます。

▶ 図の回転

三次元化学ポテンシャル図および自由エネルギー図が表示されている場合には、図形を三次元的に回転させることができます。コントローラウィンドウ左上のボタン群(図 2.4)を操作します。



図 2.4: 図の回転用のボタン群

▶ 座標軸の設定

コントローラウィンドウ右上のテキストボックス群(図 2.5)で座標軸に関する設定ができます。任意の値に設定した後、“適用”ボタンをクリックします。

また、“キャンセル”ボタンをクリックすると各テキストボックスの値が現在の設定値に戻ります<sup>6</sup>。

<sup>6</sup> コントローラウィンドウ内の“キャンセル”ボタンの機能は、基本的にすべて同じです。“キャンセル”ボタンをクリックすると、該当部分の値が現在の設定値に戻ります。

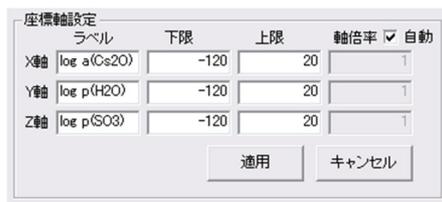


図 2.5: 座標軸の設定部

▶ 環境設定(パラメータ操作)

コントローラウインドウ中部(図 2.6)でパラメータを操作することができます。はじめに、左側のリストボックスで設定対象のパラメータを選択します。次に、右側のテキストボックスに任意の値を入力して“適用”ボタンをクリックするか、トラックバーを操作することによりパラメータを変更します。トラックバーの上限値、下限値は、その値をダブルクリックすることにより変更可能です。



図 2.6: 環境設定部

▶ 相の活量設定

コントローラウインドウ中部(図 2.7)で各相の活量を操作することができます。操作方法は環境設定に準じます。



図 2.7: 活量設定部

▶ 画像の出力

コントローラウインドウ下部(図 2.8)で、作成した化学ポテンシャル図の画像出力が行えます。各ボタンの機能は表 2.1 のとおりです。



図 2.8: 画像出力部

表 2.1: 画像出力ボタンの機能

ボタン	機能
保存	化学ポテンシャル図を画像ファイルとして保存します。ボタンの右側でファイル名と保存形式(ビットマップまたは拡張メタファイル)を設定しておく必要があります。ファイルは実行ファイルと同じフォルダ内の“IMAGE”フォルダに保存されます。
印刷	化学ポテンシャル図をプリンターで用紙いっぱい印刷します。
コピー	化学ポテンシャル図をメタファイル形式でクリップボードにコピーします。

▶ 表示の設定

コントローラウィンドウ下部(図 2.9)で、化学ポテンシャル図ウィンドウの表示に関する設定ができます。任意の状態に設定し、“適用”ボタンをクリックすると設定が化学ポテンシャル図上に反映されます。



図 2.9: 表示設定部

▶ 図の切り替え

コントローラウィンドウ最下部の“図の種類の変更”ボタンをクリックすると、化学ポテンシャル図と組成—自由エネルギー図の表示が切り替わります。組成—自由エネルギー図は、二元系および三元系にのみ対応しています。(化学ポテンシャル図と組成—自由エネルギー図については図 1.1, 図 1.2 参照.)

### 3 各種機能

ここでは、前章で述べた以外に知っておくと便利な機能について説明します。

#### 3.1 共通オプション設定

毎回の化学ポテンシャル図作成時に共通して適用される設定項目を変更することができます<sup>7</sup>。初期画面またはコントローラウインドウの上部メニュー内の“共通オプション”をクリックして、共通オプションウインドウ(図 3.1)を呼び出します。



図 3.1: 共通オプションウインドウ

##### ▶ 表示色設定

三次元化学ポテンシャル図中で X~Z 軸にそれぞれ垂直な面の色を設定します。それらの中間の傾きをもつ面の色も、この設定を元に決定されます。二次元図にはこの設定は適用されません。

##### ▶ 軸表示設定

軸刻みの長さをピクセル単位で指定します。

##### ▶ フォント設定

化学ポテンシャル図中の各部分で用いられるフォントの種類およびサイズの設定をします。

#### 3.2 画像一括保存

特定のパラメータまたは相の活量をスウィープしながら、一定間隔で画像を自動保存することができます。コントローラウインドウの上部メニュー内の“画像一括保存”をクリックすると、画像一括保存ウインドウ(図 3.2)が現れます。左側のリストボックスからスウィープ対象を選択し、右側でスウィープ下限、上限、ステップ(画像保存間隔)、ファイル名、拡張子を設定して“OK”ボタンをクリックします。なお、“連番付与”チェックボックスをチェックすることにより、画像ファイル名の最後に連番が挿入されます。

<sup>7</sup> 設定は実行ファイルと同じフォルダ内の“Setting.txt”に保存されます。



図 3.2: 画像一括保存ウィンドウ

### 3.3 平衡点リスト表示

化学ポテンシャル図中の各頂点の座標を表示することができます。コントローラウィンドウの上部メニュー内の“平衡点リスト表示”をクリックすると、平衡点リスト(図 3.3)が現れます。化学ポテンシャル図表示時には各成分の化学ポテンシャル、組成—自由エネルギー図表示時には各相の組成とモル生成自由エネルギーが表示されます。タブ区切りテキストとして表示されるので、Excel 等のソフトにコピーして使用します。

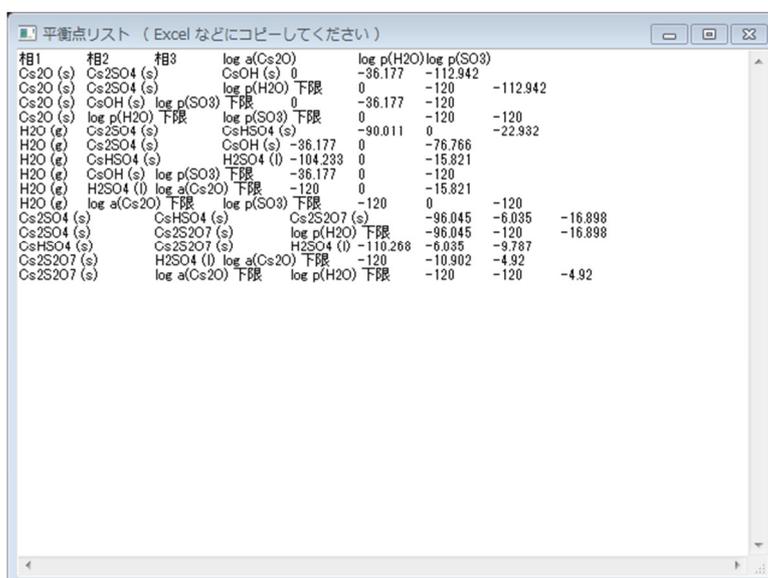


図 3.3: 平衡点リスト表示

### 3.4 Mathematica 出力

Chesta で作成した化学ポテンシャル図を、Mathematica の描画エンジンを用いて描画することができます。コントローラウィンドウの上部メニュー内の“Mathematica 出力”をクリックすると、Mathematica 用のコードが表示されます(図 3.4)。Mathematica にコピーして実行します。

```

Mathematica 描画用コード ( Mathematica にコピーしてください )
Phases = {};
Phases = Append[Phases, RGBColor[0.6627,0.6627,0.996]Polygon[{{0,-36.1764,-112.942},{0,-120,-112.942},{0,-120,-120}],
Phases = Append[Phases, RGBColor[0.8313,0.6627,0.996]Polygon[{{-90,0,101,0,-22.932},{-36.1764,0,-76.7657},{-36.1764,0,
Phases = Append[Phases, RGBColor[0.6627,0.749,0.996]Polygon[{{0,-36.1764,-112.942},{-36.1764,0,-76.7657},{-90,0,101,0
Phases = Append[Phases, RGBColor[0.7058,0.749,0.996]Polygon[{{-90,0,101,0,-22.932},{-104.2326,0,-15.8208},{-110.2672,
Phases = Append[Phases, RGBColor[0.6666,0.7764,1]Polygon[{{-96.0447,-6.0347,-16.8973},{-110.2672,-6.0347,-9.7861}],
Phases = Append[Phases, RGBColor[0.749,0.6627,0.996]Polygon[{{0,-36.1764,-112.942},{0,-36.1764,-120},{-36.1764,0,-12
Phases = Append[Phases, RGBColor[0.749,0.749,0.996]Polygon[{{-104.2326,0,-15.8208},{-120,0,-15.8208},{-120,-10.9011,

PhaseNames={};
PhaseNames = Append[PhaseNames, Text["Cs2O (s)",{0,-78.0882,-116.471}]];
PhaseNames = Append[PhaseNames, Text["H2O (g)",{-84.4326,0,-61.8899}]];
PhaseNames = Append[PhaseNames, Text["Cs2SO4 (s)",{-53.046,-47.0352,-59.8961}]];
PhaseNames = Append[PhaseNames, Text["CsHSO4 (s)",{-100.1386,-3.0174,-16.3591}]];
PhaseNames = Append[PhaseNames, Text["Cs2SO7 (s)",{-108.4713,-52.5941,-10.6884}]];
PhaseNames = Append[PhaseNames, Text["CsOH (s)",{-18.0882,-18.0882,-107.4269}]];
PhaseNames = Append[PhaseNames, Text["H2SO4 (l)",{-113.625,-4.234,-11.5868}]];

Show[Graphics3D[Phases],Graphics3D[PhaseNames],
ViewPoint -> {2.4494,2.4494,1.9999},
AxesLabel -> {"log a(Cs2O)", "log p(H2O)", "log p(SO3)"},
PlotRange -> {{-120,20.0001},{-120,20.0001},{-120,20.0001}},
FaceGrids -> {{0, 0, -1}, {-1, 0, 0}, {0, -1, 0}},
Axes -> True,
Lighting -> False,
Boxed -> True,
BoxRatios -> {1, 1, 1}];
    
```

図 3.4: Mathematica 用コード

## 4 データファイルについて

ここでは、Chesta で使用されているデータファイルの内容とその作成方法について解説します。この章の内容を理解することにより、各自でデータファイルを作成することが可能になります。また、Chesta にはデータファイル作成ウィザード<sup>8</sup>が付属しています。これを利用すれば、より簡単にデータファイルを作成することができます。

### 4.1 データファイルに含まれる情報

データファイルには、次のような情報が含まれます。

- 図の名前や、座標軸のラベル、座標軸の種類、作図範囲、温度操作の可否など作図の際に必要な設定情報
- 系の基底となる成分名、系の次元数、温度など系に関する情報
- 系に存在する各相の組成と標準生成自由エネルギー、標準生成エントロピーなどの熱力学データ

### 4.2 データファイルの形式

Chesta で使用されるデータファイルは、コンマ区切りのテキストファイルです。拡張子は“.txt”または“.csv”です。データファイルはメモ帳などのテキストエディタまたは Excel などで編集できます。

データファイルは一行ごとが独立して一つの意味を持っています。行の先頭には、その行が持つ情報の種類を示す識別子が記されます。続いて、コンマ区切りで当該情報が記されます。また、アスタリスク“\*”で始まる行はコメント行とみなされ作図の際には無視されます。以下にデータファイルの例を示します。

---

<sup>8</sup> “データファイル作成ウィザード.xls”を Excel で開くとウィザードが起動します。画面の指示に従ってデータファイルを作成します。なお、Excel の設定でマクロが無効になっている場合は、有効にする必要があります。

```

Version, 2.2
Dimension, 3
DiagramName, A-B-C 系
AxisLabel, log a(A), log a(B), log a(C)
AxisType, loga, loga, loga
CompositionLabel, A, B, C
LowerLimit, -20, -20, -20
UpperLimit, 5, 5, 5
T, 298
Tvariable, 1

Phase, A(g), 1, 0, 0, 0, 0, 0
Phase, B(s), 0, 1, 0, 0, 0, 0
Phase, C(s), 0, 0, 1, 0, 0, 0
Phase, AB(s), 1, 1, 0, -30, -5, 0
Phase, AC(s), 1, 0, 1, -60, -3, 0
Phase, A2BC(s), 2, 1, 1, -95, -30, 0

```

### 4.3 各識別子の意味

表 4.1 に識別子の一覧を示します。一つのデータファイル中で各識別子は 1 回のみ使用できます。  
 (“Phase”識別子は除く)

表 4.1: 識別子一覧

識別子	説明
Version	データファイルのバージョンを記述します。現行バージョンは 2.2 です。 (記述例)           Version, 2.2
Dimension	系の次元数を半角整数で指定します。 (記述例)           Dimension, 3
DiagramName	図の名称を記述します。ここで記述された名称は図の下側に表示されます。作図後にコントローラウィンドウで変更することもできます。 (記述例)           DiagramName, A-B-C 系

AxisLabel	各座標軸のラベルを記述します。系の次元数分だけ連続して指定します。作図後にコントローラウインドウで変更することもできます。 (記述例)            AxisLabel, log a(A), log a(B), log a(C)
AxisType	各座標軸の種類を指定します。系の次元数だけ連続して指定します。指定可能な種類は“loga”, “pL”, “E”で、それぞれ log (活量) 軸, -log (活量) 軸, 電位軸を表します。log の底は 10 です。 (記述例)            AxisType, loga, pL, E
CompositionLabel	各座標軸に対応する成分名を記述します。系の次元数だけ連続して指定します。 (記述例)            CompositionLabel, A, B, C
LowerLimit	各座標軸の下限値を指定します。系の次元数分だけ連続して指定します。作図後にコントローラウインドウで変更することもできます。 (記述例)            LowerLimit, -20, -20, -20
UpperLimit	各座標軸の上限値を指定します。系の次元数分だけ連続して指定します。作図後にコントローラウインドウで変更することもできます。 (記述例)            UpperLimit, 5, 5, 5
T	データファイルに記述された熱力学データが何 K におけるものなのか記述します。 (記述例)            T, 298
Tvariable	データファイルが温度操作に対応しているものかどうかを記述します。記述する値は 0, 1, 2 のいずれかで、それぞれ表 4.2 のような意味を持ちます。

表 4.2: “Tvariable”識別子の値とその意味

値	温度操作への対応	必要な熱力学データ
0	非対応	標準生成自由エネルギー変化
1	対応	標準生成自由エネルギー変化と 標準生成エントロピー変化
2 <sup>9</sup>	対応	標準生成自由エネルギー変化と 標準生成エンタルピー変化

(記述例)            Tvariable, 1

<sup>9</sup> Version 2.1 から導入。

Phase	系内の相の名称, 組成, 標準生成自由エネルギー変化 (kJ/mol), 活量シフト <sup>10</sup> を記述します. 温度操作に対応させるときは, 自由エネルギー変化の直後に標準生成エントロピー変化 (J/mol) または標準生成エンタルピー変化 (kJ/mol) の値も記述します. “Phase” 識別子は相の数だけ使用することができます. (記述例)                      Phase, A2BC(s), 2, 1, 1, -95, -30, 0
-------	---

#### 4.4 Log (活量) 軸のみを用いた化学ポテンシャル図を作成するには

##### ▶ 熱力学データの準備

データファイルの作成に先立って, その基となる熱力学データを準備する必要があります.

例えば成分 A, B, C から各相が構成されている系を考えます. それぞれの成分の標準状態は A(g), B(s), C(s) とします. また, それ以外に系には AB(s), AC(s), A<sub>2</sub>BC(s) の各相が存在するとします. このとき, 必要な情報はそれぞれの相が成分 A, B, C の標準状態から生成する際の反応式と, 標準ギブス自由エネルギー変化の値です. 温度操作に対応させるときには, 自由エネルギー変化に加えてエントロピー変化またはエンタルピー変化の値が必要になります. この例ではエントロピー変化を用います. 以下に例を示します.

A(g) = A(g)	$\Delta G^\circ = 0 \text{ kJ/mol}$	$\Delta S^\circ = 0 \text{ J/mol}$
B(s) = B(s)	$\Delta G^\circ = 0 \text{ kJ/mol}$	$\Delta S^\circ = 0 \text{ J/mol}$
C(s) = C(s)	$\Delta G^\circ = 0 \text{ kJ/mol}$	$\Delta S^\circ = 0 \text{ J/mol}$
A(g) + B(s) = AB(s)	$\Delta G^\circ = -30 \text{ kJ/mol}$	$\Delta S^\circ = -5 \text{ J/mol}$
A(g) + C(s) = AC(s)	$\Delta G^\circ = -60 \text{ kJ/mol}$	$\Delta S^\circ = -3 \text{ J/mol}$
2A(g) + B(s) + C(s) = A <sub>2</sub> BC(s)	$\Delta G^\circ = -95 \text{ kJ/mol}$	$\Delta S^\circ = -30 \text{ J/mol}$

これらの情報が準備できたら, 熱力学データの記述に取り掛かります.

##### ▶ 熱力学データの記述

各相の熱力学データを Chesta のデータファイル形式に従って記述します. 一つの相につき一行使い, “Phase” 識別子につづけて相の名称, 組成, 自由エネルギー変化 (kJ/mol), エントロピー変化 (J/mol), 活量シフトの順に記述します. 組成の記述は, 相の生成反応式をもとに, 左辺の各成分の化学量論係数を抜き出すことにより行います. 今回は成分 A, B, C の量論係数を 3 つ順に記述することにします. また, 活量シフトはすべての相で 0 とします. 以下に記述例を示します.

<sup>10</sup> Version 2.1 から導入. Chesta で扱う相の活量を意図的にずらすために用います. たとえば,  $\log(\text{活量}) = -1$  である状態を新たに  $\log(\text{活量}) = 0$  と定義して扱いたい場合, 活量シフトを  $-1$  と指定します. これは, 主にブールベ図で溶液中のイオンに含まれる金属原子の濃度を調整するために用います. 活量シフトを指定する必要がない場合は 0 と記述します.

```
Phase, A(g), 1, 0, 0, 0, 0, 0
Phase, B(s), 0, 1, 0, 0, 0, 0
Phase, C(s), 0, 0, 1, 0, 0, 0
Phase, AB(s), 1, 1, 0, -30, -5, 0
Phase, AC(s), 1, 0, 1, -60, -3, 0
Phase, A2BC(s), 2, 1, 1, -95, -30, 0
```

なお、温度操作に対応させない場合には、エントロピー変化の記述は省略できます。

#### ▶ その他の情報の記述

さらに、熱力学データ以外に作図に必要な情報を記述します。まずデータファイルのバージョンを記述します。現行バージョンは 2.2 なので、次のようにします。

```
Version, 2.2
```

系の次元数を記述します。いま考えている系は三元系なので次のように記述します。

```
Dimension, 3
```

図の名前を記述します。例えば“A-B-C 系”とします。

```
DiagramName, A-B-C 系
```

座標軸のラベルを記述します。記述の順番は、各相の組成の記述と対応したものでなければなりません。

```
AxisLabel, log a(A), log a(B), log a(C)
```

座標軸の種類を記述します。今回はすべて log (活量) 軸をとるので次のように記述します。

```
AxisType, loga, loga, loga
```

各座標軸に対応する成分名を記述します。

```
CompositionLabel, A, B, C
```

各座標軸の下限値、上限値を指定します。

```
LowerLimit, -20, -20, -20
UpperLimit, 5, 5, 5
```

データファイルの熱力学データが何 K におけるものなのか記述します。298 K であれば次のようにします。

```
T, 298
```

データファイルが温度操作に対応しているか記述します。今回はエントロピーをデータファイルに記述したため、温度変化に対応しています。表 4.2 にしたがって、1 と記述します。

Tvariable, 1
--------------

#### ▶ データファイルの完成例

以下にデータファイルの完成例を示します。これを“Chesta.exe”があるフォルダ内の“Data”フォルダに保存すると、Chesta で利用することができます。“2 使用の流れ”にしたがって操作すると、図 4.1 のような化学ポテンシャル図を得ます。

Version, 2.2
Dimension, 3
DiagramName, A-B-C 系
AxisLabel, log a(A), log a(B), log a(C)
AxisType, loga, loga, loga
CompositionLabel, A, B, C
LowerLimit, -20, -20, -20
UpperLimit, 5, 5, 5
T, 298
Tvariable, 1
Phase, A(g), 1, 0, 0, 0, 0, 0
Phase, B(s), 0, 1, 0, 0, 0, 0
Phase, C(s), 0, 0, 1, 0, 0, 0
Phase, AB(s), 1, 1, 0, -30, -5, 0
Phase, AC(s), 1, 0, 1, -60, -3, 0
Phase, A2BC(s), 2, 1, 1, -95, -30, 0

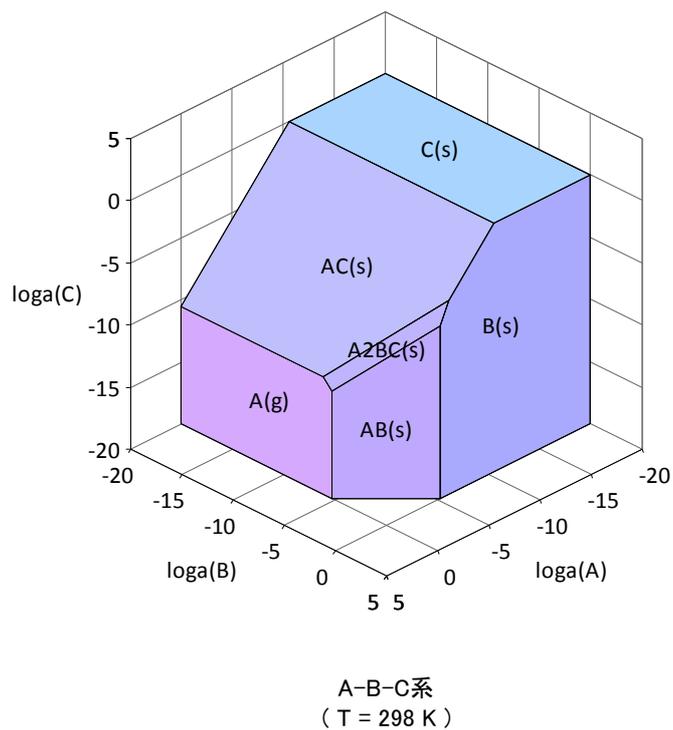


図 4.1: サンプルデータをもとに作成した化学ポテンシャル図

#### 4.5 配位子を含む電位 pH 図を作成するには

##### ▶ 熱力学データの準備

(現在執筆ができておりません。データファイルサンプルをご覧ください。)