

CRW (Chemical Reactivity Worksheet) Ver. 4.0 の使用方法

【概要】

CRW は、米国海洋大気庁(NOAA)により開発され、現在は米国化学工学会／化学プロセス安全センター(AIChE/CCPS)により管理・運用されている、混合危険マトリクス作成ソフトウェアである。複数物質の混合危険マトリクスを作成するとともに、内蔵しているデータベースから混合危険の予測を行うことができる。また、代表的な吸収剤や構造材についての混合危険に関する情報も内蔵されている。

CRW は、以下のサイトで入手可能である。Windows 版と Mac 版があり、OS に応じた版をダウンロードし、インストールすることで使用できる。

<https://www.aiche.org/ccps/resources/downloadinstall>

1. CRW について

1.1 目的

CRW は、複数の化学物質が混合した際の危険性を調査するためのソフトウェアである。

一般的な化学物質が混合した際の反応性、吸収材や構造材と化学物質との反応性についての調査を行うことが可能である。

1.2 基本的手順

CRW は、基本的に以下の手順で使用する。

- ① 解析する化学物質を CRW のデータベースから選択する。
- ② 混合危険マトリクスを表示する。マトリクスの各要素(解析結果)をクリックすると、詳細な説明が表示される。

必要に応じて、以下の手順も行う。

- ③ 吸収剤との混合危険に関する情報を表示する。
- ④ 構造材との混合危険に関する情報を表示する。

この手順を行うことで、2つの化学物質間での混合危険性を予測し、「混合危険性が予測される」、「混合危険性は予測されない」、「特定の条件下で危険性が発現する可能性がある」、「自己反応性がある」の4種類で予測結果が表示される。ここでの予測は、実験データを一切使用せず、文献情報のみに基づいており、かなり保守的な評価となっている。ユーザーが所有する実験データや確実な情報がある場合は、予測結果を修正できる機能が搭載されている。

また、上記予測結果には含まれないものの、漏えいした化学物質の回収に使用される吸収剤や、化学物質の製造の際に使用される一般的な原料や構造材等(装置に使用される金属やパッキン等に使用されるゴム(エラストマー))の混合危険に関する情報を得ることができる。

1.3 メニューバー

CRW の基本的操作は、メニューバーにある 2 つの項目、及びタスクバーにある 9 つの項目で行う。

① File

- データの保存
- データのインポート, エクスポート
- データの共有
- 印刷設定, 印刷
- CRW の終了

② Edit

Undo, Cut, Copy, Paste, Clear の操作

③ Mixture Manager

解析する化学物質の選択, 管理

④ Mixture Report

解析した結果の表示

⑤ Compatibility Chart

解析した結果の修正, 印刷, エクスポート

⑥ Reactive Groups

CRW が有している 68 種類の反応性グループの説明

⑦ Custom Chemicals

ユーザー定義の化学物質の登録

⑧ Absorbent Incompatibilities

化学物質の回収に使用される代表的な吸収剤の混合危険に関する情報の表示

⑨ Materials of Construction

化学物質の製造の際に使用される一般的な原料や構造材等の混合危険に関する情報の表示

⑩ Data Sharing

CRW データの共有

⑪ Help

CRW についての情報, 操作手順ガイド

1.4 CRW の限界

CRW は 2 つの化学物質間で生じる反応のみを考慮するため, 3 つ以上の化学物質が反応して生じる現象は予測しない(例:グリセリンと硝酸の混合物に硫酸を追加すると爆薬のニトログリセリンを生成するが, 3 つの化学物質があつて初めて生じる反応であるため, CRW ではこの反応は予測

できない)。また、多種の化学物質の中の1つが、混合物中の他の化学物質間の反応速度を加速させる(触媒として作用する)場合があるが、その効果は予測できない。

一方、CRWは穏やかな条件下(<100℃、<0.3MPa)での最悪のシナリオを予測するようになっているため、予測結果はかなり保守的である。また、反応の不活性化剤や重合禁止剤等の影響を無視しているため、過大評価する傾向がある。

なお、評価は実験データを一切使用せず、文献情報のみに基づいていることに留意する必要がある。

2. 反応性の予測方法

CRWでは、化学物質を、反応性のある化学構造によって、表1に示す68種の反応性グループに分類し、物質そのものではなく反応性グループの組合せから混合危険を予測している。ここでいう混合危険とは、反応によって420J/gを超える反応熱が生じるか、本質的に可燃性又は爆発性か、反応によって可燃性又は毒性物質を生成する場合をいう。なお、ソフトウェア上の「Reactive Groups」で、68種の反応性グループの説明を見ることができる。

表1 CRW 4.0 で定義されている反応性グループ

番号	反応性グループ	番号	反応性グループ
1	強酸(非酸化性)	38	塩(酸性、無機及び有機)
2	強酸(酸化性)	39	塩(塩基性、無機及び有機)
3	カルボン酸	40	酸ハロゲン酸、ハロゲン酸スルホニル、クロロギ酸エステル
4	アルコール、ポリオール	42	有機金属化合物
5	アルデヒド	44	酸化剤(無機)
6	アミド、イミド	45	還元剤
7	アミン、ホスフィン、ピリジン	46	無機物(酸化還元反応以外で活性)
8	アゾ、ジアゾ、ヒドラジン、アジ化物	47	フッ化物(有機)
9	カルバミン酸塩	48	フッ化物(無機)
10	強塩基	49	穏やかな酸化物(無機)
11	シアン化物(無機)	50	穏やかな還元剤
12	チオカルバミド酸エステル及び塩、ジチオカルバミド酸エステル及び塩	51	窒化物、リン化物、炭化物、ケイ化物
13	エステル、硫酸塩エステル、リン酸塩エステル、チオリン酸塩エステル、ホウ酸塩エステル	55	クロロシラン
14	エーテル	58	シロキサン
16	炭化水素(芳香族)	59	ハロゲン化剤

番号	反応性グループ	番号	反応性グループ
17	ハロゲン化物(有機)	60	弱酸
18	イソシアン酸, イソチオシアン酸塩	61	弱塩基
19	ケトン	62	炭酸塩
20	硫化物(有機)	63	アルキン(アセチレン結合の水素を保有)
21	アルカリ金属(反応性大)	64	アルキン(アセチレン結合の水素なし)
22	金属元素及び粉体(活性)	65	共役系ジエン
23	金属(反応性低い)	66	ハロゲン化アリール
25	ジアゾニウム塩(染料工業の中間体)	68	アミン(芳香族)
26	ニトリル	69	硝酸塩, 亜硝酸塩(無機)
27	亜硝酸塩, 硝酸塩, ニトロ化物, ニトロソ化物(有機)	70	アセタール, ケタール, ヘミアセタール, ヘミケタール
28	炭化水素(不飽和脂肪酸)	71	アクリル酸塩, アクリル酸
29	炭化水素(飽和脂肪酸)	72	フェノール塩
30	過酸化物(有機)	73	4原子のアンモニウム及びホスホニウム塩
31	フェノール, クレゾール	74	亜硫酸塩, .チオ亜硫酸塩
32	スルホン酸塩, リン酸塩, チオリン酸塩(有機)	75	オキシム
33	硫化物(無機)	76	重合性物質
34	エポキシド	98	化学反応性なし
35	金属水素化物, 金属アルキル, 金属アリール, シラン(アリール基は芳香族炭化水素のこと)	99	不明(反応性グループへの分類情報不足)
37	無水物	100	水(水溶液, 含水物)

以上の予測方法から、68種の反応性グループそれぞれの組み合わせによる混合危険マトリクスに、CRWが解析し得る全ての予測結果(「混合危険性が予測される」、「混合危険性は予測されない」、「特定の条件下で危険性が発現する可能性がある」、「自己反応性がある」)が表されることとなる。図1に、68種の反応性グループそれぞれの組み合わせの混合危険マトリクスの出力を示す。CRWの使用方法がわからない、予測結果が十分に解読できない(CRWは全て英語で表示される)等で評価に時間がかかる場合は、図1を参照することにより、大まかな混合危険を把握することができる。ただし、CRWで出力される予測結果には、大まかな混合危険の分類だけではなく、生じ得る現象の候補、発生する可能性があるガスの種類、予測の根拠となる参考文献等の有用な情報も数多くあるため、できる限りCRWから出力される予測結果を見ることを推奨する。

3. CRW の手順

3.1 情報整理

CRW による解析を始める前に、解析対象となる化学物質を全て列挙しておく。列挙する際に以下の点に注意する。

- ・ 反応中間体のような物質を見落とさない。
- ・ 取扱量が微量でも見落とさない(金属のアジ化物や金属アセチリド等が生成すると、微量であっても激しい爆発を起こす)。
- ・ 空気、水、油等のプロセス周りで使用されている物質等、合成に使用している物質以外のものについても考慮する。考慮すべき物質の例を表 2 に示す。

表 2 混合反応を考慮する上で考慮すべき物質の例

水との反応性がある物質と雰囲気中の水との接触
自然発火性物質と空気との接触
プロセス物質／試薬
不純物，混入物等
熱媒，冷媒
構造材
構造物，構造物の腐食生成物
断熱材
消火剤
洗浄剤
ガスケット
シーリング材
充てん剤
ライニング
封止流体
潤滑油
計器内流体（オイル等）

3.2 CRW の起動

- (1) Windows では、「スタートボタン」 → 「CRW4」 → 「CRW4」を選択するか、デスクトップ上の「CRW4」のショートカットをダブルクリックする。
- (2) プログラムが起動すると、バージョン情報等が表示される。「OK」をクリックすると、プログラムが起動する。「Getting Started」をクリックすると、ブラウザにヘルプが表示される。



3.3 化学物質の指定

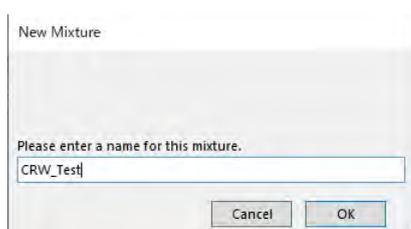
(1) タスクバーの「Mixture Manager」をクリックし、Mixture Manager の画面を出す。



(2) Mixture Manager の「New Mixture」をクリックする (Mixture Manager の右下にある)。



(3) 混合物 (解析対象の一連の化学物質のこと) の名前を入力し、「OK」をクリックする。



(4) CRW データベースから化学物質を検索する。以下の検索方法が用意されているため、必要項目を入力し、「Search」をクリックする。

- 化学物質名: 「Chemical Name」ボックスに英語名を入力する。検索モードとして、「Exact」(完全一致)、「word starts with」(先頭一致)、「Anywhere」(部分一致)が用意されており、それぞれのラジオボタンをクリックする。
- CAS 番号: 「CAS Number」ボックスに CAS 番号を入力する。
- UN 番号: 「UN Number」ボックスに UN 番号を入力する。

- ・ 化学式:「Formula」ボックスに化学式を入力する.
- ・ DOT ラベル:「DOT Label」ボックスに DOT ラベルを入力する.

- (5) 「Search results list・・・」ボックス(「Chemical Name」等のボックスの下にある)に表示された検索結果から, 対象物質をクリックして選択し, 「Add to Mixture」をクリックする. 又は対象物質をダブルクリックする.

Chemical Name	CAS #	UN #	DOT Label	Formula
DIETHANOLAMINE	111-42-2	3082	Class 9	C4H11NO2
DIETHOXYMETHANE	462-95-3	2373	Flammable	C5H12O2
DIETHYL ALUMINUM CHLORIDE	96-10-6	3394	Spontaneous	C4H10AlCl
DIETHYL CARBONATE	105-58-8	2366	Flammable	C5H10O3
DIETHYL CHLOROPHOSPHATE	814-49-3	3278	Poison	C4H10ClO3P
DIETHYL DIETHYLPHOSPHORAMIDATE	62928-17-5	2814	Poison	C12H28N2O4P2
DIETHYL ETHER	60-29-7	1155	Flammable	C4H10O
DIETHYL ETHYLPHOSPHONATE	78-38-6	3082	Class 9	C6H15O3P
DIETHYL KETONE	96-22-0	1156	Flammable	C5H10O
DIETHYL METHYLPHOSPHONITE	15715-41-0			C5H13O2P
DIETHYL PEROXYDICARBONATE	14666-78-5	3115	Organic Peroxide	C6H10O6
DIETHYL PHOSPHITE AND TRIETHYL PHOSPHITE, [LIQUID]	762-04-9	1993	Combustible	C4H11O3P / C6H15O3P

Chemical Name	CAS #	UN #	DOT Label	Formula
DIETHYL ETHER	60-29-7	1155	Flammable Liquid	C4H10O

General Description: A clear colorless liquid with an anesthetic odor. Flash point -49°F. Less dense than water and slightly soluble in water. Hence floats on water. Vapors are heavier than air. Used as a solvent and to make other...

Reactive Group(s): Ethers

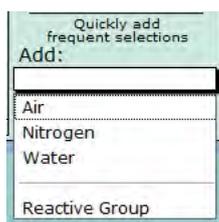
Reactivity Alert(s): Highly Flammable; Peroxidizable Compound

Synonyms (double-click to add to mixture): 1,1'-OXYBIS(ETHANE), 3-OXAPENTANE, AETHER, ANAESTHETIC ETHER, ANESTHESIA ETHER.

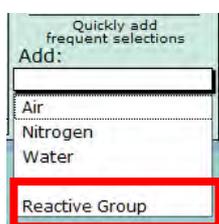
Hazard Diamond: NFPA 1, 1, 1. Health: 1. Special: 1.

- (6) 「Mixture」ボックス(「Search results list・・・」ボックスの下にある)に, 選択した化学物質が表示されることを確認する.

- (7) (1)~(6)を繰り返し, 対象物質を全て「Mixture」ボックスに入力する.
- (8) 一般的な物質(空気, 窒素, 水)については, 「Add」ボックス(「View Chart」の上にある. チェックボックスとなっている)をクリックし, 選択することにより「Mixture」ボックスに入力できる.



- (9) 化学物質の特定は困難であるが、化学構造より反応性グループの特定が可能である物質の場合は、「Add」ボックスをクリックし、「Reactive Group」を選択する。表 1 に示した反応性グループが表示されるため、対応する反応性グループを選択し、「Add Selected Group to Mixture」(タスクバーの下にある)をクリックする。



Reactive Group Information
Add Selected Group to Mixture

1. Reactive Group Category

All

Click once on reactive group name to select

	RG #
Acetals, Ketals, Hemiacetals, and Hemiketals	70
Acids, Carboxylic	3
Acids, Strong Non-oxidizing	1
Acids, Strong Oxidizing	2
Acids, Weak	60
Acrylates and Acrylic Acids	71
Acyl Halides, Sulfonyl Halides, and Chloroformates	40
Alcohols and Polyols	4
Aldehydes	5
Alkynes, with Acetylenic Hydrogen	63
Alkynes, with No Acetylenic Hydrogen	64
Amides and Imides	6
Amines, Aromatic	68
Amines, Phosphines, and Pyridines	7
Anhydrides	37
Aryl Halides	66
Azo, Diazo, Azido, Hydrazine, and Azide Compounds	8
Bases, Strong	10
Bases, Weak	61
Carbamates	9
Carbonate Salts	62
Chlorosilanes	55
Conjugated Dienes	65
Cyanides, Inorganic	11
Diazonium Salts	25
Epoxides	34
Esters, Sulfate Esters, Phosphate Esters, Thiophosphate Esters, and Borate	13
Ethers	14
Fluoride Salts, Soluble	48
Fluorinated Organic Compounds	47
Halogenated Organic Compounds	17

Description of: Acids, Strong Oxidizing

FLAMMABILITY -
Materials in this group are generally nonflammable. They may accelerate the combustion of other materials by providing oxygen to the combustion site, that is, by serving as oxidizing agents.

REACTIVITY -
Materials in this group are generally soluble in water with the release of hydrogen ions. The resulting solutions have pHs of 1 or near 1. Materials in this group react with chemical bases (for example: amines and inorganic hydroxides) to form salts. These neutralization reactions occur as the base accepts hydrogen ions that the acid donates. Neutralizations can generate dangerously large amounts of heat in small spaces. The dissolution of acids in water or the dilution of their concentrated solutions with water may generate significant heat. The addition of water to acids often generates sufficient heat in the small region of mixing to boil some of the water explosively. The resulting "bumping" spatters acid widely. These materials have significant ability as oxidizing agents, but that ability varies (for example, nitric acid is a stronger oxidizing agent than sulfuric acid and most sulfonic acids). They can react with active metals, including iron and aluminum, and also many less active metals, to dissolve the metal and liberate hydrogen and/or toxic gases. The subsequent stability of the corrosion products (possibly nitrates) should be considered. Like other acids, materials

Structural Formula Example(s) for: Acids, Strong Oxidizing

$$\begin{array}{c} \text{O} \\ \parallel \\ \text{HO}-\text{S}-\text{OH} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array}$$

Sulfuric acid

3.4 新規化学物質の追加

以下の手順により、リストにない新規化学物質を追加できる。混合物としての情報がわかってい

れば、新規混合物としての登録も可能である。

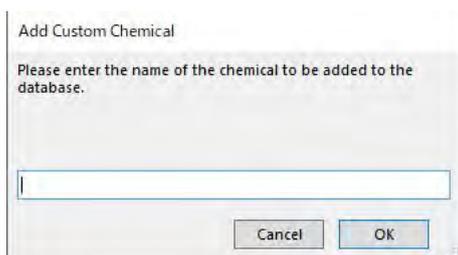
- (1) タスクバーの「Custom Chemicals」をクリックし、Custom Chemicals の画面を出す。



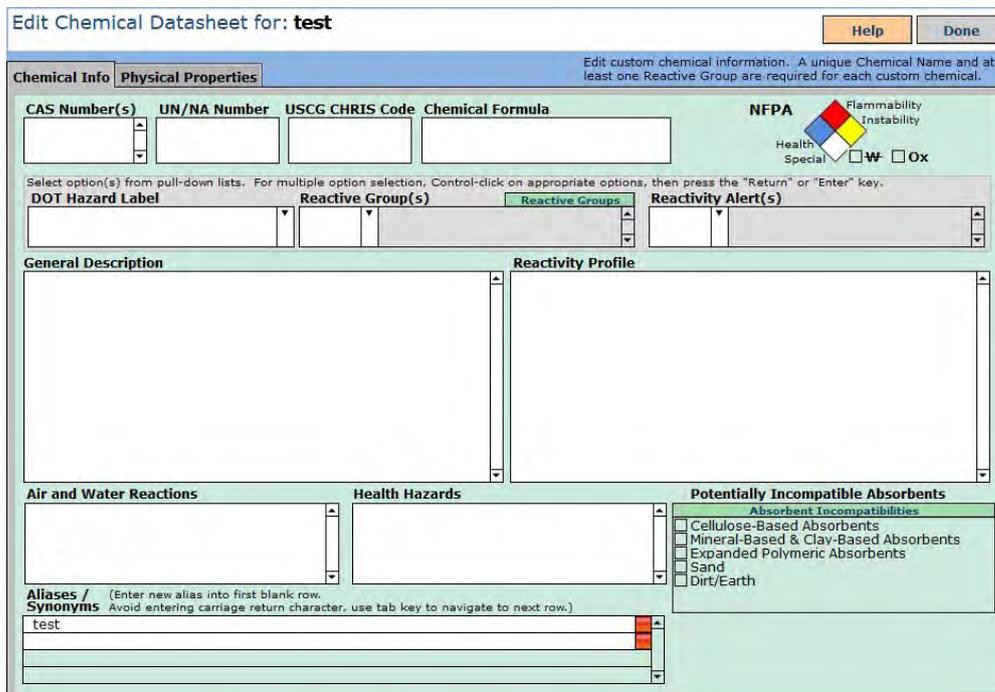
- (2) 「Add New Custom Chemical」をクリックする。



- (3) 新規化学物質もしくは新規混合物の名前を入力し、「OK」をクリックする。



- (4) 新規化学物質もしくは新規混合物の情報を入力する。必ず 1 つ以上の反応性グループを選択する。



- (5) 反応性グループを選択するには、「Reactive Group(s)」の下の「▼」をクリックし、出てきたリストの中から該当するものをクリックする。複数選択する場合は、コントロールキーを押しながら該

当する反応性グループをすべて選択し、「Enter」キーを押す。各反応性グループの説明は、「Reactive Groups」ボタンをクリックすると表示される。

Reactive Group(s)	Reactive Groups	Reactivity Alert(s)
1 Acids, Strong Non-oxidizing		
2 Acids, Strong Oxidizing		
3 Acids, Carboxylic		
4 Alcohols and Polyols		
5 Aldehydes		
6 Amides and Imides		
7 Amines, Phosphines, and Pyridines		
8 Azo, Diazo, Azido, Hydrazine, and Azide Compounds		
9 Carbamates		
10 Bases, Strong		
11 Cyanides, Inorganic		
12 Thiocarbamate Esters and Salts/Dithiocarbamate Esters and Salts		
13 Esters, Sulfate Esters, Phosphate Esters, Thiophosphate Esters, and Borate Esters		
14 Ethers		
16 Hydrocarbons, Aromatic		
17 Halogenated Organic Compounds		

反応性グループを選択する際には、以下の情報を参考にする。

- ・ 同種の化学物質を CRW のデータベースから選択し、選択されている反応性グループを確認する。
- ・ 混合物については、混合する前の物質の反応性グループをすべて選択する。
- ・ 物質が水溶液の場合、反応性グループに必ず「100 Water and Aqueous Solutions」を選択する。

(6) 「Physical Properties」タブをクリックすると、引火点等の情報を入力できる。

Edit Chemical Datasheet for: **test** [Help] [Done]

Chemical Info | **Physical Properties** | Edit custom chemical information. A unique Chemical Name and at least one Reactive Group are required for each custom chemical.

Flash Point	Vapor Density (Relative to Air)
Lower Explosive Limit (LEL)	Specific Gravity
Upper Explosive Limit (UEL)	Boiling Point
Autoignition Temperature	Molecular Weight
Melting Point	Water Solubility
Vapor Pressure	IDLH

(7) 情報の入力終了したら、「Done」ボタンをクリックする。

Chemical Info Physical Properties Edit custom chemical information. A unique Chemical Name and at least one Reactive Group are required for each custom chemical.

CAS Number(s) UN/NA Number USCG CHRIS Code Chemical Formula NFPA Health Special W Ox

Select option(s) from pull-down lists. For multiple option selection, Control-click on appropriate options, then press the "Return" or "Enter" key.

DOT Hazard Label Reactive Group(s) Reactive Groups Reactivity Alert(s)

General Description Reactivity Profile

Air and Water Reactions Health Hazards Potentially Incompatible Absorbents

Absorbent Incompatibilities

- Cellulose-Based Absorbents
- Mineral-Based & Clay-Based Absorbents
- Expanded Polymeric Absorbents
- Sand
- Dirt/Earth

Aliases / Synonyms (Enter new alias into first blank row. Avoid entering carriage return character, use tab key to navigate to next row.)

Done Done

3.4 混合危険マトリクスの表示

(1) 「View Chart」をクリックすると、対象物質に関する混合危険マトリクスが表示される。

chemicals in mixture

New Mixture

Rename Mixture

Delete Mixture

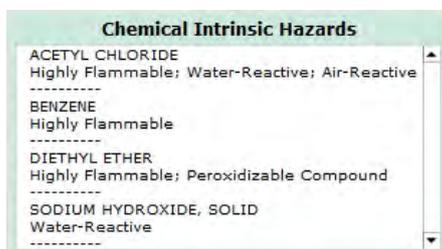
Quickly add frequent selections

Add:

View Chart



- (3) 「Chemical Intrinsic Hazards」ボックス(上記タブの右にある)には、対象物質単独の危険性の概要が表示される。



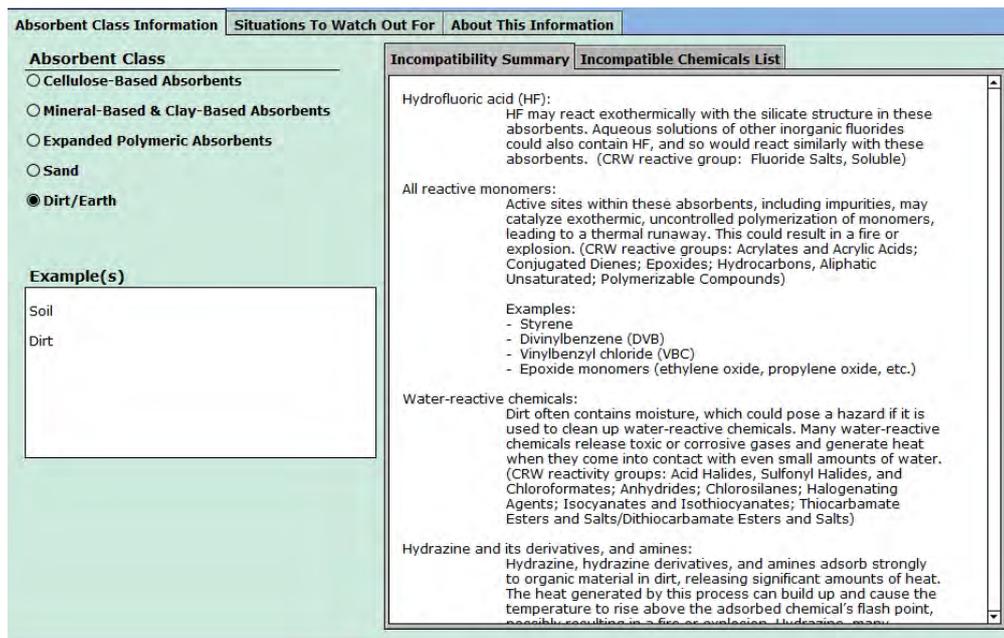
3.5 吸収材との混合危険に関する情報の表示

タスクバーにある「Absorbent Incompatibilities」をクリックすると、以下に示す情報が英文で表示される。現時点では情報の提示のみで、混合危険マトリクスでの評価には含まれない。



- 以下の 5 種類の分類の吸収材と混合危険を示す化学物質及び反応性グループ (「Absorbent Class Information」で表示)

- ・ 繊維質吸着剤
- ・ 鉱物又は粘土質吸着剤
- ・ 発泡性ポリマー
- ・ 砂
- ・ 土



○ 以下の 8 種類の状況での吸収材による回収作業での留意点及び作業指針

- ・ 吸収材上の酸化されやすい有機物
- ・ 吸収材上の高濃度の過酸化物
- ・ 吸収材内の湿気
- ・ 使用済み吸収剤における蓄熱
- ・ 吸収材上の可燃性雰囲気形成
- ・ 吸収材の供給源やロット間の違い
- ・ 高濃度物質の漏洩
- ・ 漏えい物質の回収における汚染物質

Absorbent Class Information	Situations To Watch Out For	About This Information
Situations <input checked="" type="radio"/> Oxidizable organics on absorbents <input type="radio"/> Spill of concentrated peroxides <input type="radio"/> Moisture in absorbents <input type="radio"/> Heat buildup in used absorbents <input type="radio"/> Flammable atmosphere above used absorbents <input type="radio"/> Source of absorbent and lot-to-lot consistency <input type="radio"/> Spills of concentrated chemicals <input type="radio"/> Contaminants from spill cleanup		Guidance <p>Liquids have more surface area in contact with air once they have been absorbed by high-surface-area solids. This is a problem when the liquids are organics that are susceptible to exothermic oxidation by air, since the amount of liquid available to react with air is much greater than if the liquid were in a puddle or in container by itself. The amount of heat generated by the exothermic oxidation reaction can lead to a thermal runaway in used absorbents, possibly resulting in a fire or explosion.</p> <p>Steps to minimize the problem:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Allow used absorbent to cool to ambient temperature before collecting it in a disposal pack. - Use airtight, sealed disposal packs to exclude entrance of additional air. - Minimize air in disposal packs by filling the packs with water or purging with nitrogen. - Incinerate disposal packs as soon as possible. - If you must store disposal packs for long periods, monitor them for increases in temperature or internal pressure.

3.6 構造材等との混合危険に関する情報の表示

タスクバーにある「Materials of Construction」をクリックすると、構造材等との混合危険に関する情報が英文で表示される。



対象物質は、主に製造に関連する原料、製品等の貯蔵や輸送品である。ここで示される混合危険は、「Mixture Manager」での予測では混合危険があると判断されないような、ゆっくり進行する腐食のような現象を想定している。また、多くの弁等には各種のエラストマー（ゴム等の弾性材）が使われており、加熱・加圧された液体と繰り返し接触することにより、劣化を引き起こす可能性があるため、エラストマーに関する情報は別途まとめられている。

「Materials of Construction」では、以下の分類に分けて情報が英文で表示される。

○ 主な製造に関する原料等に関する情報

「Incompatibilities by Chemical」タブに表示される主な原料等(タブの左側に表示される)をクリックすると、以下の情報が表示される。

- 対象となる原料等に関する一般的な情報

「Chemical Information」タブ(「Incompatibilities by Chemical」タブ内の右側にある)内に、選択した原料等に関する一般的な情報が、以下の3つの分類で表示される。

- 「Introduction」: 選択した原料等に関する一般情報
- 「Process」: 選択した原料等の製造方法
- 「Pitfalls」: 構造材との反応性に関する情報の概要

- 構造材との混合危険に関する情報

「Incompatibility Summary」タブ(「Chemical Information」タブの右側にある)内にある構造材を選択すると、構造材ごとの、選択した原料等との反応性に関する情報が表示される。

The screenshot shows a software interface with a tabbed menu at the top: 'Incompatibilities by Chemical', 'Incompatibilities by Material', 'References', '"Library"', 'Elastomers', and 'About This Information'. The 'Incompatibilities by Chemical' tab is active, displaying a list of chemicals on the left and detailed information on the right. The chemical list includes: ACETALDEHYDE, ACETATE ESTERS, ACETIC ACID, ACETIC ANHYDRIDE, ACETONE, ACROLEIN, ACRYLIC ACID, ALKANOLAMINES, ALKYLAMINES, ALKYLENE POLYAMINES, AMMONIA, AMMONIUM CHLORIDE, AMMONIUM FLUORIDE, AMMONIUM NITRATE, AMMONIUM PHOSPHATE, AMMONIUM SULFATE, CAPROLACTAN, CARBON TETRACHLORIDE, CAUSTIC SODA, CHLORINE, CHROMIC ACID, ETHYL ALCOHOL, ETHYL BENZENE, ETHYLENE DICHLORIDE, ETHYLENE GLYCOLS, ETHYLENE OXIDE, FATTY ACIDS, and FLUORINE. The right pane is titled 'Chemical Information' and 'Incompatibility Summary'. It contains three sections: 'Introduction' (describing acetaldehyde as a colorless liquid with a pungent odor, used as an intermediate for other organic chemicals), 'Process' (describing production from acetylene via a mercury-salt-catalyzed process, now obsolete, and modern two-stage and one-stage processes using ethylene oxidation), and 'Pitfalls' (warning that older processes based on acetylene chemistry can form acetylides, a potential ignition source for fire or explosion, and that excessive corrosion of iron or steel may result from oxidation of acetaldehyde to acetic acid).

○ 主な構造材に関する情報

「Incompatibilities by Material」タブに表示される主な構造材(タブの左側に表示される)を選択し、さらに「Incompatibility Summary」タブ(「Incompatibilities by Material」タブ内の右側にある)内に示される化学物質を選択すると、選択した構造材と原料等との反応性に関する情報が表示される。

Incompatibilities by Chemical	Incompatibilities by Material	References	"Library"	Elastomers	About This Information																															
Material "Family" (click to select family)																																				
ALUMINUM ALLOYS	Incompatibility Summary <table border="1"> <thead> <tr> <th>Chemical List</th> <th>Potential Hazard Considerations</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Acetaldehyde</td> <td rowspan="20">Aluminum alloys A91100, A93003, A95052, A95154, and A96061 are used for a variety of equipment handling acetic acid as product. In the storage of glacial acid, a haze may develop, and heating coils should be of S31603 construction to prevent hot-wall attack. Corrosion behavior is variable in dilute solutions and adversely affected by the influence of anhydride, halide, or heavy metal contamination. (Dillon 192)</td> </tr> <tr> <td>Acetate Esters</td> </tr> <tr> <td>Acetic Acid</td> </tr> <tr> <td>acetic anhydride</td> </tr> <tr> <td>Acetone</td> </tr> <tr> <td>acrolein</td> </tr> <tr> <td>acrylic acid</td> </tr> <tr> <td>alkanolamines</td> </tr> <tr> <td>alkylamines</td> </tr> <tr> <td>alkylene polyamines</td> </tr> <tr> <td>Ammonia</td> </tr> <tr> <td>ammonium chloride</td> </tr> <tr> <td>ammonium fluoride</td> </tr> <tr> <td>ammonium nitrate</td> </tr> <tr> <td>ammonium phosphate</td> </tr> <tr> <td>ammonium sulfate</td> </tr> <tr> <td>caprolactan</td> </tr> <tr> <td>carbon tetrachloride</td> </tr> <tr> <td>Caustic Soda</td> </tr> <tr> <td>Chlorine</td> </tr> <tr> <td>chromic acid</td> </tr> <tr> <td>ethyl alcohol</td> </tr> <tr> <td>ethyl benzene</td> </tr> <tr> <td>ethylene dichloride</td> </tr> <tr> <td>ethylene glycols</td> </tr> <tr> <td>ethylene oxide</td> </tr> <tr> <td>fatty acids</td> </tr> <tr> <td>fluorocarbons</td> </tr> </tbody> </table>					Chemical List	Potential Hazard Considerations	Acetaldehyde	Aluminum alloys A91100, A93003, A95052, A95154, and A96061 are used for a variety of equipment handling acetic acid as product. In the storage of glacial acid, a haze may develop, and heating coils should be of S31603 construction to prevent hot-wall attack. Corrosion behavior is variable in dilute solutions and adversely affected by the influence of anhydride, halide, or heavy metal contamination. (Dillon 192)	Acetate Esters	Acetic Acid	acetic anhydride	Acetone	acrolein	acrylic acid	alkanolamines	alkylamines	alkylene polyamines	Ammonia	ammonium chloride	ammonium fluoride	ammonium nitrate	ammonium phosphate	ammonium sulfate	caprolactan	carbon tetrachloride	Caustic Soda	Chlorine	chromic acid	ethyl alcohol	ethyl benzene	ethylene dichloride	ethylene glycols	ethylene oxide	fatty acids	fluorocarbons
Chemical List						Potential Hazard Considerations																														
Acetaldehyde						Aluminum alloys A91100, A93003, A95052, A95154, and A96061 are used for a variety of equipment handling acetic acid as product. In the storage of glacial acid, a haze may develop, and heating coils should be of S31603 construction to prevent hot-wall attack. Corrosion behavior is variable in dilute solutions and adversely affected by the influence of anhydride, halide, or heavy metal contamination. (Dillon 192)																														
Acetate Esters																																				
Acetic Acid																																				
acetic anhydride																																				
Acetone																																				
acrolein																																				
acrylic acid																																				
alkanolamines																																				
alkylamines																																				
alkylene polyamines																																				
Ammonia																																				
ammonium chloride																																				
ammonium fluoride																																				
ammonium nitrate																																				
ammonium phosphate																																				
ammonium sulfate																																				
caprolactan																																				
carbon tetrachloride																																				
Caustic Soda																																				
Chlorine																																				
chromic acid																																				
ethyl alcohol																																				
ethyl benzene																																				
ethylene dichloride																																				
ethylene glycols																																				
ethylene oxide																																				
fatty acids																																				
fluorocarbons																																				
COPPER ALLOYS																																				
LEAD																																				
LEAD ALLOYS																																				
LIGHT ALLOYS																																				
NICKEL ALLOYS																																				
NIObIUM																																				
NOBLE METALS																																				
NON-METALLICS																																				
OTHER METALS AND ALLOYS																																				
REACTIVE AND REFRACTORY METALS																																				
STAINLESS STEELS																																				
STEEL AND CAST IRON																																				
TANTALUM																																				
TITANIUM																																				
ZIRCONIUM																																				

○ 構造材等との混合危険に関する文献情報

「References」タブ内に、構造材等との混合危険に関する文献情報が表示される。

Incompatibilities by Chemical	Incompatibilities by Material	References	"Library"	Elastomers	About This Information
List of References:					
1. Dillon, C. P. 2004. Materials Selection for the Chemical Process Industries, 2 nd Ed. Materials Technology Institute. 2. ELASTOMERS Title: Selecting the Best Elastomer - New Applications, Process Changes, Failure Analysis A Methodology for Chemical and Hydrocarbon Process Engineers Author: Dupont Dow elastomers Chapter: Properties of Elastomers, Chemical Resistance of Elastomers ----- GENERAL > NACE International - The Corrosion Society (NACE International, The Corrosion Society. (2002). Corrosion Survey Database (COR•SUR). NACE International.) : Houston, Texas USA Phone: +1 281-228-6223 or +1 800-797-6223 Fax: +1 281-228-6300 firstservice@nace.org ----- > DECHEMA: (Kreysa, G. Schütze, M.. (2008). DECHEMA Corrosion Handbook - Revised and Extended 2nd Edition. DECHEMA) Contact info. - http://www.dechema.de/en/kontakt_en.html?highlight=contact To email - http://www.dechema.de/en/Contact-p-196-receiver-%22info%22.html Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. Theodor-Heuss-Allee 25 60486 Frankfurt am Main					

○ エラストマーとの混合危険に関する文献情報

「"Library"」タブ内に、エラストマーとの混合危険に関する文献情報が表示される。

Incompatibilities by Chemical | Incompatibilities by Material | References | "Library" | **Elastomers** | About This Information

Document List
Click once on document name below to show at right

Click once on document name at right to download document to your computer

Selection Methodology for Process Change

Chemical Resistance of Various Elastomers Rating Chart

Selection Methodology for Process Change

○ エラストマーとの混合危険に関する情報

「Elastomers」タブ内に表示される主なエラストマー（タブの左側に表示される）を選択すると、選択したエラストマーと主な化学物質との反応性に関する情報が早見表の形で表示される（「Elastomers」タブ内の「Elastomer List」タブ）。

Incompatibilities by Chemical | Incompatibilities by Material | References | "Library" | **Elastomers** | About This Information

Use the elastomer "Key" data listed here to access additional chemical compatibility information contained in reference files available under the "Library" tab.

Elastomer Name	Key	Selected Elastomer Info & Properties	Chemical	Key	Elastomer Compatibility
BUTADIENE STYRENE, BUTADIENE	SBR	Key Category SBR Non-CPI BR	Acids, Concentrated	BR	Fair-Good
BUTYL	IIR		Acids, Concentrated	SBR	Poor-Good
CHLORINATED POLYETHYLENE	CM	Chemical Group Styrene Butadiene Copolymer - SBR Poly Butadiene - BR	Acids, Dilute	BR	Fair-Good
EPICHLOROHYDRIN	CO, ECO		Acids, Dilute	SBR	Fair-Good
ETHYLENE ACRYLIC	EA	Generally Resistant to: Similar to Natural Rubber	Acids, Inorganic	BR	Good Dilute, Good Conc.
ETHYLENE PROPYLENE	EPR,		Acids, Inorganic	SBR	Good Dilute, Fair-Good Conc.
ETHYLENE VINYL ACETATE	EVA	Generally Attacked by: Similar to Natural Rubber	Acids, Organic	BR	Good Dilute, Poor Conc.
FLUORO ELASTOMER	FPM		Acids, Organic	SBR	Good Dilute, Poor-Good Conc.
FLUOROCARBON	FKM	User Notes:	Acids, Oxidizing	BR	Poor Dilute, Poor Conc.
FLUOROSILICONE	FVMQ		Acids, Oxidizing	SBR	Poor Dilute, Poor Conc.
HYPALON	CSM	Alcohols	BR	Fair-Good	
NATURAL RUBBER, ISOPRENE	NR	Alcohols	SBR	Good	
NEOPRENE	CR	Aldehydes	BR	Good	
NITRILE	NBR	Aldehydes	SBR	Poor-Fair	
POLY ACRYLATE	ACM	Alkalies, Concentrated	BR	Fair-Good	
POLYSULFIDE	T	Alkalies, Concentrated	SBR	Fair-Good	
SILICONE	VMQ, SI	Alkalies, Dilute	BR	Fair-Good	
URETHANE	AU, EU	Alkalies, Dilute	SBR	Fair-Good	
		Amines	BR	Poor-Good	
		Amines	SBR	Poor-Good	
		Animal and Vegetable Oils	BR	Poor-Good	
		Animal and Vegetable Oils	SBR	Poor-Good	
		Brake Fluid, Non-Petroleum Based	BR	Poor-Good	
		Brake Fluid, Non-Petroleum Based	SBR	Poor-Good	
		Chlorinated Hydrocarbons	BR	Poor	
		Chlorinated Hydrocarbons	SBR	Poor	
		Diester Oils	BR	Poor	
		Diester Oils	SBR	Poor	
		Esters, Alkyl Phosphate	BR	Poor	

「Chemical List」タブ（「Elastomer List」タブの右にある）内では、主な化学物質から主なエラストマーとの反応性に関する情報が表示される。

Incompatibilities by Chemical		Incompatibilities by Material		References	"Library"	Elastomers	About This Information
Elastomer List		Chemical List		Use the elastomer "Key" data listed here to access additional chemical compatibility information contained in reference files available under the "Library" tab.			
Chemical Name	click to select chemical	Elastomer	Elastomer Family	Key	Elastomer Compatibility		
ACIDS, CONCENTRATED		Butadiene Styrene, Butadiene	Styrene Butadiene Copolymer - SBR	BR	Fair-Good		
ACIDS, DILUTE		Butadiene Styrene, Butadiene	Styrene Butadiene Copolymer - SBR	SBR	Poor-Good		
ACIDS, INORGANIC		Butyl	Isobutylene Isoprene Polymer - IIR	IIR	Fair-Excellent		
ACIDS, ORGANIC		Chlorinated Polyethylene	General Use, Non-CPI, Mid-Performance	CM	Good-Excellent		
ACIDS, OXIDIZING		Epichlorohydrin	Copolymer - CO	CO, ECO	Poor-Fair		
ALCOHOLS		Ethylene Acrylic	General Use, Non-CPI, Mid-Performance	EA	Poor-Fair		
ALDEHYDES		Ethylene Propylene	Ethylene Propylene Copolymer - EPR	EPR, EPDM	Excellent		
ALKALIES, CONCENTRATED		Ethylene Vinyl Acetate	General Use, Non-CPI, Mid-Performance	EVA	Poor-Fair		
ALKALIES, DILUTE		Fluorocarbon	High Performance Elastomers - FKM	FKM	Good-Excellent		
AMINES		Fluorosilicone	High Performance Elastomers, Fluorinated	FVMQ	Good		
ANIMAL AND VEGETABLE OILS		Hypalon	Chloro-sulfonated Polyethylene - CSM	CSM	Good-Excellent		
BRAKE FLUID, NON-PETROLEUM BASED		Natural Rubber, Isoprene	Natural Rubber - NR	IR	Poor-Good		
CHLORINATED HYDROCARBONS		Natural Rubber, Isoprene	Natural Rubber - NR	NR	Fair-Good		
DIESTER OILS		Neoprene	Chloroprene Polymer - CR	CR	Poor		
ESTERS, ALKYL PHOSPHATE		Nitrile	Butadiene Acrylonitrile Copolymer - NBR	NBR	Fair-Good		
ESTERS, ARYL PHOSPHATE		Poly Acrylate	Copolymer of Acrylic Ester and Acrylic Halide -	ACM	Poor-Fair		
ETHERS		Polysulfide	Organic Polysulfide Polymer - T	T	Poor		
HALOGENATED SOLVENTS		Silicone	Organic Silicone Polymer - VMQ	VMQ, SI	Poor-Fair		
HYDROCARBON OIL, HIGH ANILINE		Urethane	Urethane Polymer - AU, EU	AU, EU	Poor		
HYDROCARBON OIL, LOW ANILINE							
HYDROCARBONS, ALIPHATIC							
HYDROCARBONS, AROMATIC							
HYDROCARBONS, HALOGENATED							
KETONES							
L.P. GASSES AND FUEL OILS							
LACQUER SOLVENTS							

3.7 結果のエクスポート

(1) メニューバーの「File」 → 「Export to Excel」を選択する。



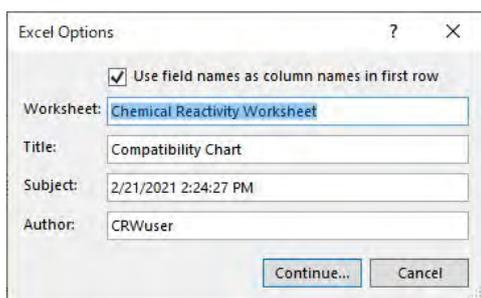
(2) 下記のウィンドウが立ち上がる。エクスポート方法の説明を見る場合には「Instructions」、エクスポートを続ける場合には「Proceed」をクリックする。



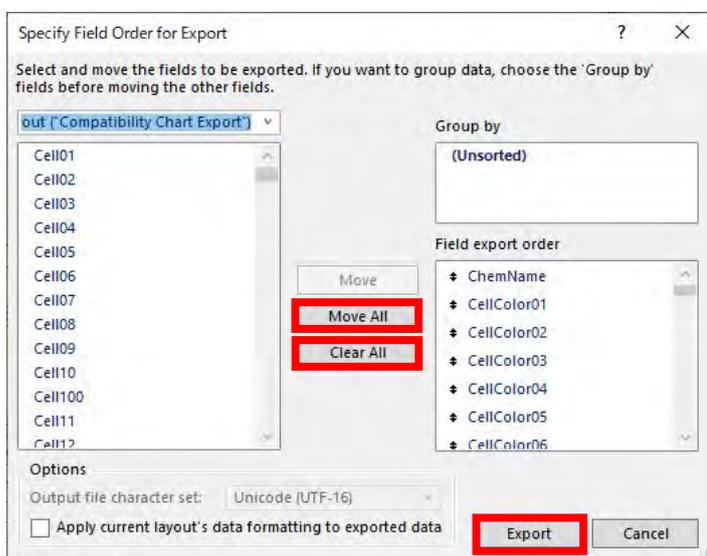
(3) 下記のウィンドウが立ち上がるため、「OK」をクリックする。（書かれている内容は、エクスポートしたデータは「CRW_Data_Export.xlsx」の名前で、CRW プログラムがあるフォルダ（初期設定のままインストールすると、C:\Program Files (x86)\CRW4）に保存される、ということ）。



- (4) 下記のウィンドウが立ち上がるため、ワークシート名(「Worksheet」ボックス)、タイトル(「Title」ボックス)等を入力して、「Continue...」をクリックする。



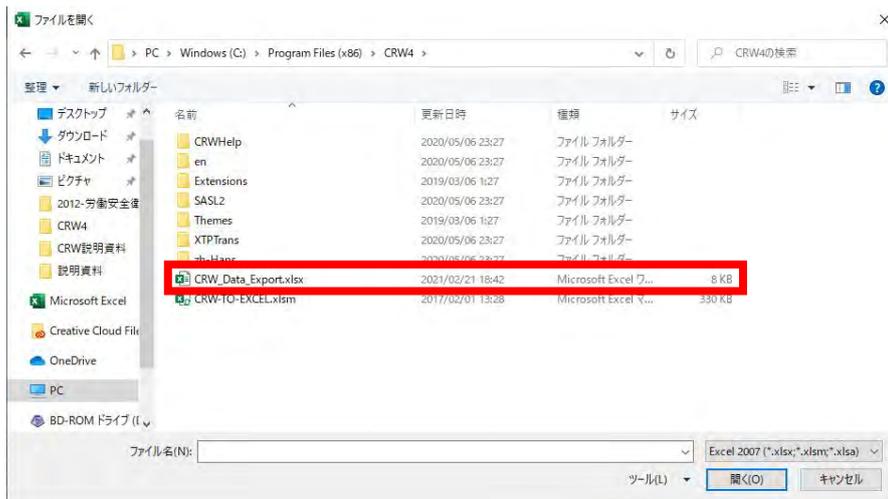
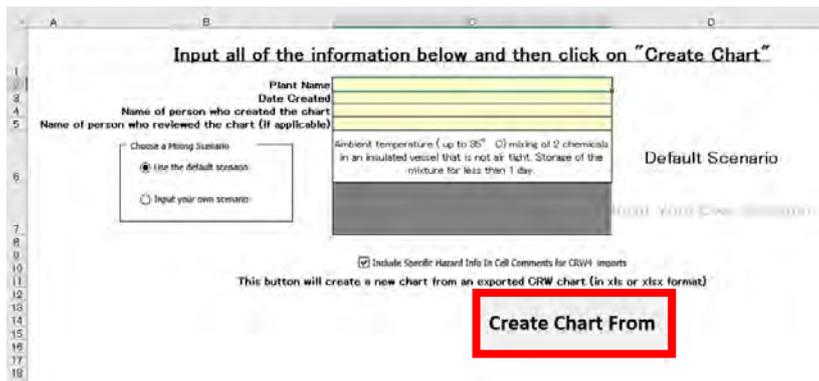
- (5) 下記のウィンドウが立ち上がるため、左のボックスからエクスポートするデータを選択し、「Move」をクリックしてエクスポートするデータを指定する。画面に表示されているマトリクス等をそのままエクスポートするのであれば、「Clear All」をクリックした後に「Move All」をクリックして、すべてのデータを指定すればよい。その後、「Export」をクリックする。



- (6) CRW プログラムがあるフォルダ(初期設定のままインストールすると、C:\Program Files (x86)\CRW4)に、「CRW_Data_Export.xlsx」が保存されている。同じフォルダにある Excel マクロ「CRW-TO-EXCEL.xlsm」を立ち上げる。

 CRW_Data_Export.xlsx	2021/02/21 18:42	Microsoft Excel ワ...	8 KB
 CRW4.cr4	2021/02/21 14:28	FileMaker Pro 12 R...	195,716 KB
 CRW4.exe	2016/02/23 21:25	アプリケーション	7,763 KB
 CRW-TO-EXCEL.xlsm	2017/02/01 13:28	Microsoft Excel マ...	330 KB

(7) 「Create Chart From」ボタンをクリックすると、ファイル指定画面が立ち上がるため、保存されている「CRW_Data_Export.xlsx」ファイルを指定する。



(8) 「名前を付けて保存」ウィンドウが立ち上がるため、ファイル名を指定し、保存する。以下のような Excel ファイルが保存される。2 つの物質間の混合危険に関する詳細情報は、「メモ」機能で記載されている。

3.9 CRW の終了

メニューバーの「File」 → 「Exit」で終了する。

