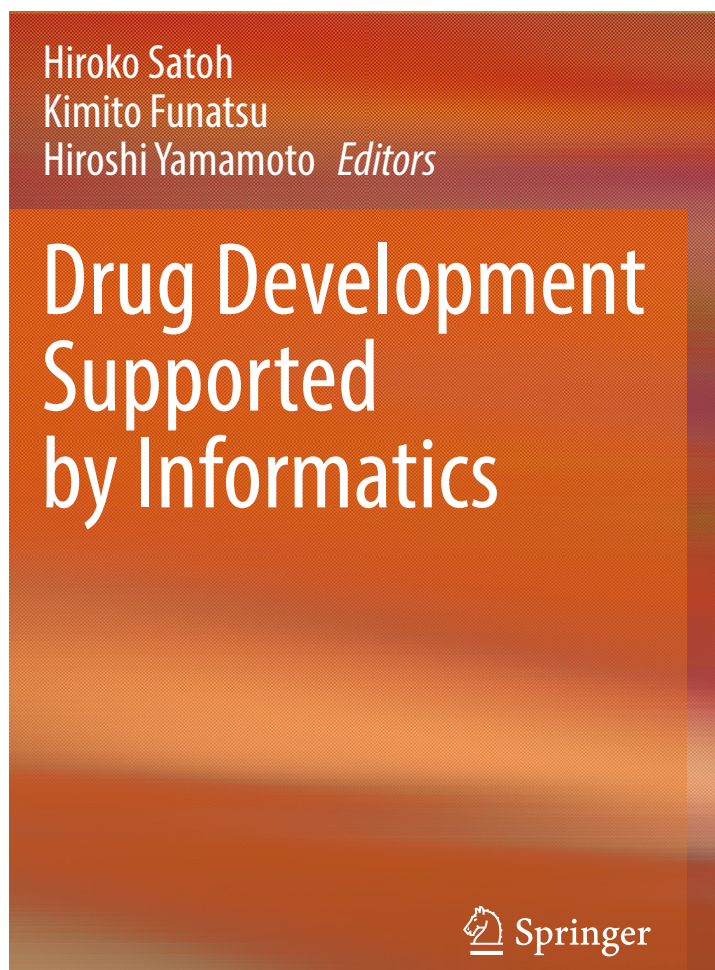


pirika.comの研究記録

Pirika News



私もEditorを務めた書籍がSpringerから出版された。

他のEditorはこの分野なら知らない人はいない、船津公人先生。

もう一人は佐藤寛子先生。

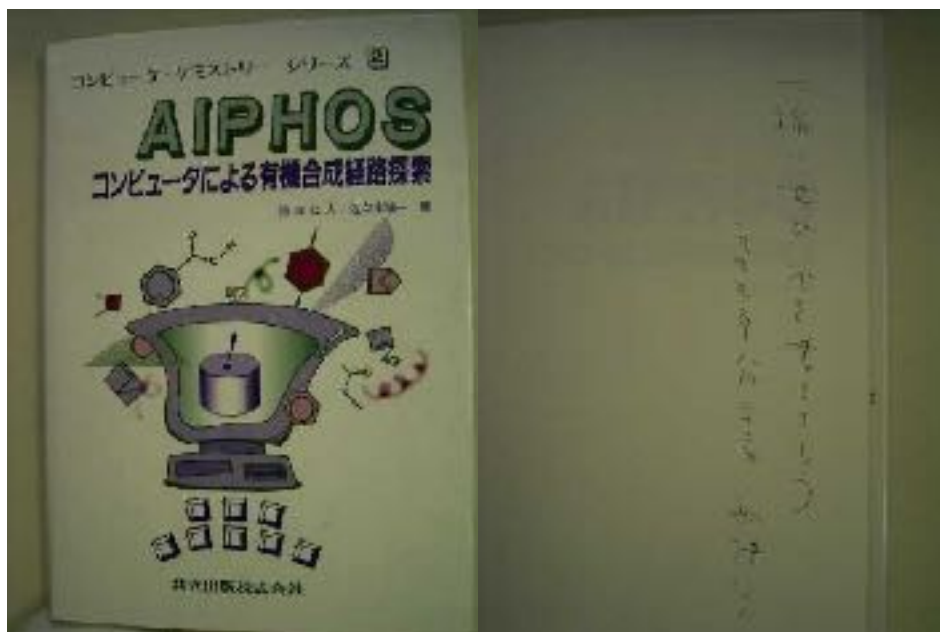
出会ったのはもう25年以上前になるか。3人は情報化学の分野で頑張っていた。

とはいつても、私は企業の研究者。表に出ることはなく、黙々と励んでいた。

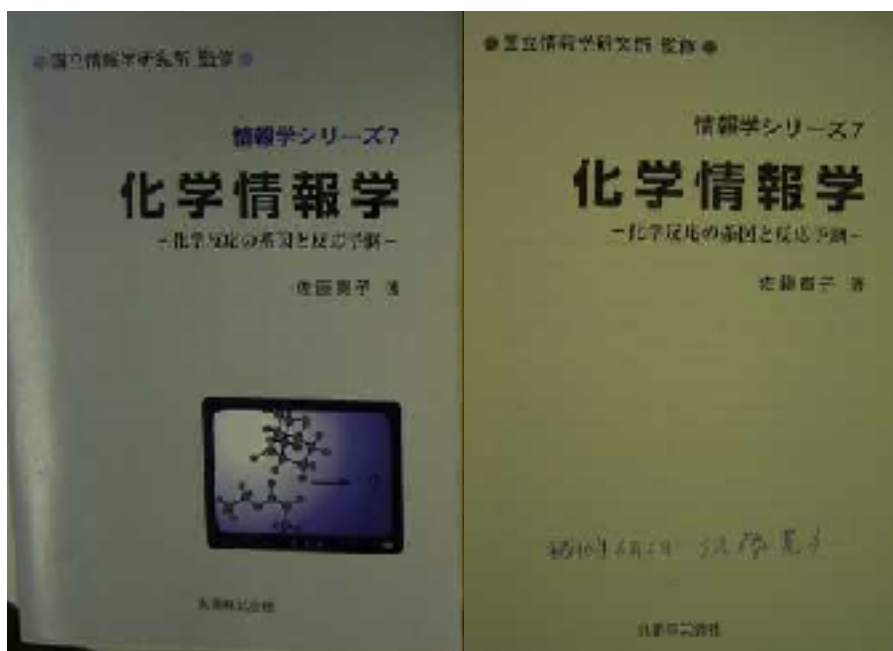
船津先生や佐藤先生はご自身の本を出版しながら頑張っておられた。

先生方には色々励ましていただきながら、2007年に博士号をいただいた。船津先生に副査をお願いした。

船津先生に頂いたサイン本



佐藤先生に頂いたサイン本



ひよんな事から、3人で本を編集することになった。

編集作業も初めての経験だし、自分でも2章を書かなくてはならない。しかも英語で。他の先生の英語の原稿をチェックして、校正する。気が遠くなるような作業だった。Deep Lが英語を助けてくれたのが本当に助かった。

そんな本が出版されたのは本当に感慨深い。

アマゾンで予約販売(編集者には献本や著者割引もあるらしいが喜び勇んでポチしてしまった)した現物は先月届いた。

まだ、支払いとかは残っているが大方は終了。

そしたら、まー、世界のSpringer。やたらとメールが増えた。

On behalf of the conference committee, I extend a warm welcome to you to be a Distinguished Speaker at the "6th Edition of the Advanced Chemistry World Congress" (Adv. Chemistry 2025) scheduled for March 27-28, 2025 in London, UK. We were impressed with your prior work on **"Screening Methods for Drugs Using Chemoinformatics Methods for Beginners"** and feel that your insights and perspectives would be of immense value to the conference attendees.

ロンドンでの学会か。3月だとまだ寒いなー。

We are pleased to inform you that Clinical Investigation and Clinical Studies (ISSN:3065-3355), a peer-reviewed open-access journal, is currently accepting manuscript submissions. Our journal serves as a platform for original research, reviews, and case studies related to Clinical Investigation and Clinical Studies, fostering knowledge exchange and advancement in the field. We recently had the opportunity to review your manuscript, **"Screening Methods for Drugs Using Chemoinformatics Methods for Beginners,"** and found it to be very compelling. We would like to welcoming you to consider publishing your work with us.

論文発表か。

I am writing on behalf of the conference committee to welcome you to be a Distinguished Speaker at the "3rd Global Congress on Advances in Addiction Medicine and Mental Health" held on June 23-24, 2025 at Berlin, Germany. We are reaching out to you because of your previous work on **"Screening Methods for Drugs Using Chemoinformatics Methods for Beginners"**.

6月のベルリンはいいぞー

まー、何が言いたいかというと、先生に海外での学会発表を提供して箔をつけさせる。

そんな事をビジネスにしている輩は、本が出れば直ぐにアクセスしてくる。

私はこの所、日本の2つの学会誌に寄稿したが、まー、リアクションは3年に一回あるか無いかだ。

読む人がいない訳ではない。でもレスポンスしない。私のHPの記事も同じだ。

レスポンスは無い。まーレスポンスが詐欺メールなら無いほうがマシだが。

日本の学会、というか、全体だけど、このコミュ障害って何なのだろう。

ものすごく、珍しく、学生からメールが来る。丁寧に返信しても、ぷつぷつ。エチケットもマナーもなっていないメールを書いてくる。先生はそんなことも教えないのだろうな。

3度目の決算

合同会社、pirika.comは12月1日が創立記念日だ。

当日は豪勢な特別食を用意しよう。

逆にいうとその日は会計年度の締め日になる。

今年も順調に黒字決算の予定だ。

なんといっても、何かを仕入れている訳では無い。ソフトを売る、コンサルをするという知的作業だけで収入を得ている会社の強みだ。経費として書籍やコンピュータに金がかかるが、微々たるもの。支出は僕とカミさんへの給料がメイン。

ありがたいことだ。

内部留保は最後に会社をたたむ時に退職金にしようか。

まー、最後をどうするかは最近悩む。

HSPの技術もどうするか？

一緒にやっているHansen先生やAbbott先生が「どこかソフトウェア会社に売っばらう」という判断をするなら従う。

NIMSとの国研とか大学が引き継ぐなら？ どうだろうなー。

年間の総売り上げを考えると、まだPublic Domainに置くという選択肢はないか。

MOPACやCOSMO-RSがpublicになって、最近少し考える。

HSPiPソフト販売体質からの脱却

1年目はHSPiPソフト販売がほとんどメインの収益だった。

今年は2/3ぐらいまで減っただろうか。

コンサルや講習会の比率を増やしている。今もこの記事は名古屋の大企業での講演会に向かう新幹線の中で書いている。

コンサルや講習会は無闇には増やせない。

増やしすぎて現役の時より時間を使うなら、隠遁した意味がない。

あと1社とか思っていて、話が進み始めたが、2ヶ月ぐらい音沙汰がない。今回の講演で先に手をあげるところがあれば、そちらでも良いし。

表面処理に関する講演会

HSPを使った表面の解析。25°Cが判らなくする。

パワーで100枚の資料を2週間前に送り、配布してもらう。参加者は対面で30人ぐらい。ネットで180人ぐらい？。

HSPの簡単な説明。

液体の表面張力、ポリマーの臨界表面張力の推算とHSPを使った表面張力の成分わけ。

固体（ガラスや無機物）は分散試験を行なった後にはHSP値は得られるが、臨界表面張力のデータはほとんど見つからない。そうした成分が接した時の界面張力。これを(臨界)表面張力、HSPから解き明かしていく。そうした一通りの説明をした。

ポイントは、この部分。任意の構造の液体の表面張力を任意の温度、圧力でHSPを使って推算する式構築した。自作のHSP-MIRAIというソフトを使って24変数を決めてしまう。

$$ST = 0.155 * ((dD+1)^{1.203} * ((1-Tr)+1)^{3.738} * ((1-Pr)-1)^{0.465} * ((MW/Vol)-1)^{0.243} * (Ovality-1)^{-0.488} + 0.035 * (dP+1)^{1.416} * ((1-Tr)+1)^{1.274} * ((1-Pr)-1)^{-0.465} * ((MW/Vol)-1)^{0.147} * (Ovality+1)^{0.488} + 0.174 * (dHAcid+1)^{0.659} * ((1-Tr)+1)^{1.042} * ((1-Pr)+1)^{0.159} * ((MW/Vol)+1)^{0.451} * (Ovality+1)^{-0.104} + 0.0436 * (dHbase+1)^{1.216} * ((1-Tr)+1)^{0.42} * ((1-Pr)-1)^{0.510} * ((MW/Vol)+1)^{0.451} * (Ovality+1)^{-0.740}$$

温度

圧力

密度

球形度

この式は ST=STd+STp+SThacid+SThbaseの形になっている。そこで表面張力の分散項 (Dispersion)成分STdが得られる。必要なHSPや臨界温度、臨界圧力、分子体積、OvalityはYMB24Pro4MIで分子構造から推算する。これで25°C、1気圧の呪縛から逃れられる。

同様にポリマーの臨界表面張力も分割する。

$$\gamma_c = 0.0191 * (\delta D+1)^{0.00243} * ((MW/PVol)+1)^{-0.634} * (VolSdM+1)^{-0.0024} * (298/Tg+1)^{-0.353} + 1.448 * (\delta P+1)^{0.00243} * ((MW/PVol)+1)^{0.00243} * (VolSdM+1)^{-0.423} * (298/Tg+1)^{1.177} + 0.001 * (\delta Hacid+1)^{0.00243} * ((MW/PVol)+1)^{-0.634} * (VolSdM+1)^{0.00243} * (298/Tg+1)^{-0.100} + 0.000906 * (\delta Hbase+1)^{0.00243} * ((MW/PVol)+1)^{-0.634} * (VolSdM+1)^{-0.423} * (298/Tg+1)^{1.177}$$

密度

体積 倒置/主鎖

温度

温度依存性は、ポリマーのTg(ガラス転移温度) を使って実装した。必要な物性値はYMB24Pro4MIを用いて構造のみから推算する。

本来の反転授業では資料をよく読んでから参加する。そこで授業では応用や議論が主になる。

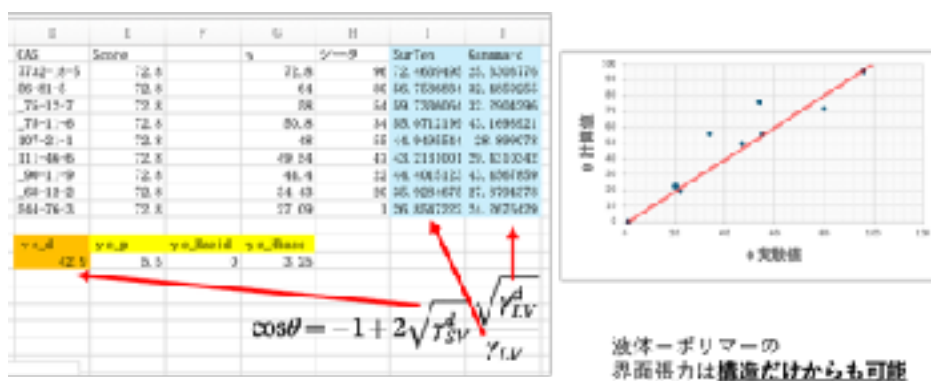
資料で得た知識とソフトウェア(YMB24Pro4MI)があったら応用問題を解く。今回はPPSと無機物のコンポジットの設計を試みた。

$$\cos\theta = -1 + 2\frac{\sqrt{\gamma_{SL}^d} \sqrt{\gamma_{LV}^d}}{\gamma_{LV}}$$

↑
↑

ポリマーの
臨界面張力
分散項
溶媒の表面張力と
その分散項

J Appl Polym Sci. 2022;139:e52082. にPPSと数種類の接触角のデータが記載されている。その接触角は次式で計算できるとある。



この右側の物性値はY-PBとY-MBを使えば、分子構造だけから推算できる。

$$\gamma_S = \gamma_{SL} + \gamma_L \cos \theta$$

そこで推算だけで接触角を得ることができる。

γ_S、γ_L、cosθが推算できるのでヤングの式からγ_{SL}界面張力が得られる。

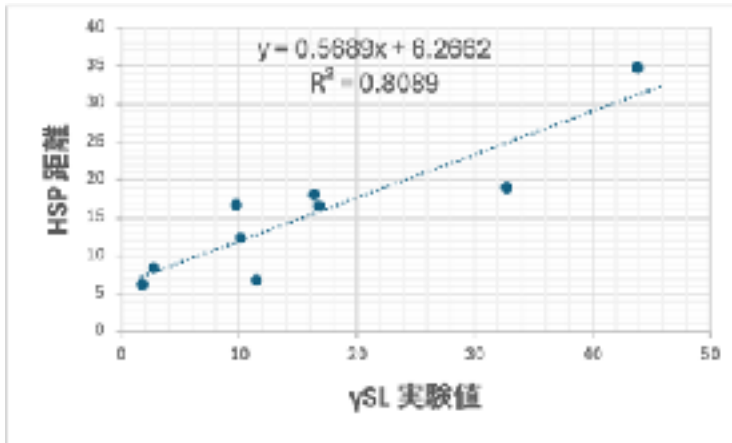
それでは、PPSとガラス繊維、CNT、BN(窒化ホウ素)のγ_{SL}界面張力はどうやって求めることができるだろうか？

残念ながら臨界面張力もないし、その成分分けもできない。

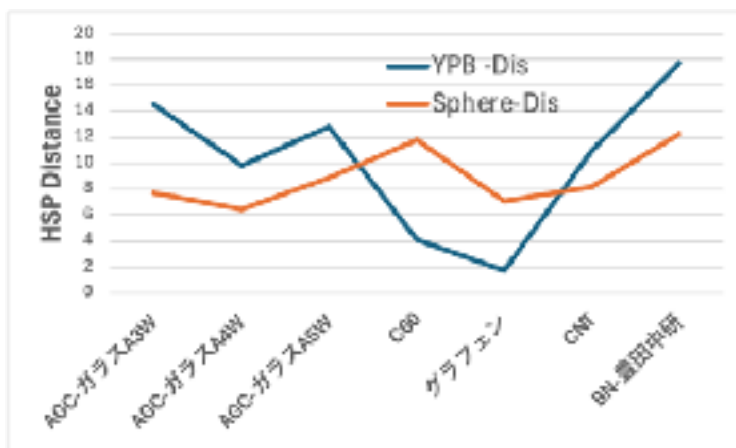
ガラス繊維、CNT、BN(窒化ホウ素)の分散試験からHSPは決定されている。

そこで、PPSとこうした無機物がどれだけHSPが近いかを評価することができる。

先ほどの液体とPPSポリマーの界面張力の実験値とHSP距離をプロットするとそれなりの相関になる。



そこで無機物のHSPとPPSのHSP距離を計算してみた。

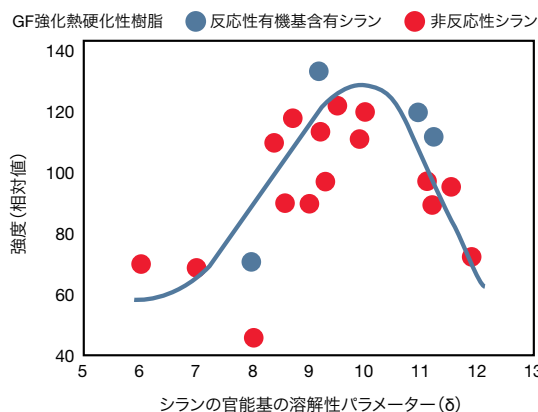


YPB-DISはポリマーのHSPをY-PBで推算したものだ。オレンジのラインはSphere法を用いてHSPを決定したものをを用いた距離だ。

グラフエンなどはよく混じりそうだ。しかし窒化ホウ素は結構HSP距離が長い。

そこで窒化ホウ素の表面をシランカップリング剤で修飾することを考える。

図10 GF強化ポリスチレンの強度とシランカップリング剤の有機官能基のSP値

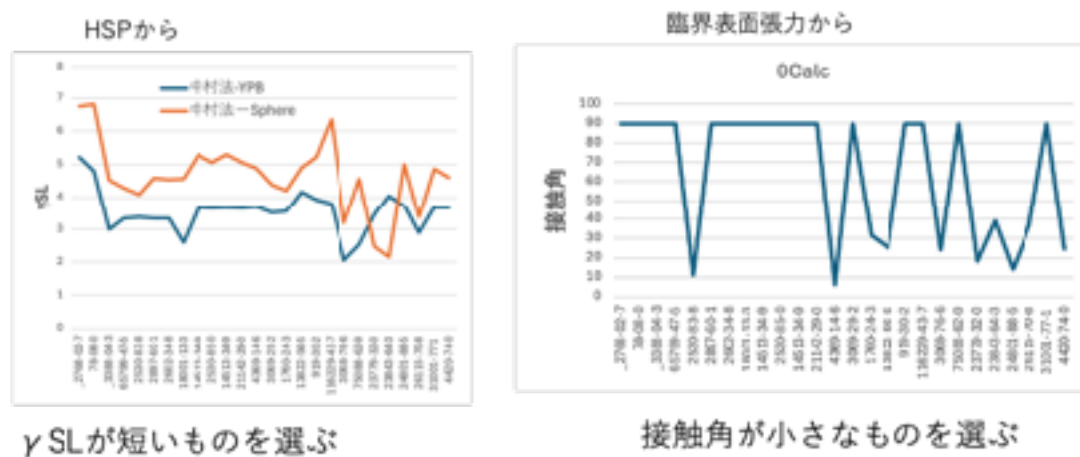


Dowのシラン・カップリング剤のカタログに、ポリマーとシランカップリング剤のSP値が近いときにガラス繊維強化プラスチックの強度が最大になるとある。

そこでChatGPTにシランカップリング剤のテーブル作らせようとしたけど、これはどうにもうまくいかない。

化合物名からCASとSMILESのテーブルをつくった。

後は液体—Polymerと同じなので、HSPの値から γ SLを推算するもよし。接触角を推算するも良い。PPSと相性の良いシランカップリング剤を選択すれば良い。



講演会の翌日、朝からコンサルティング。

新しく分割した物性値を計算できるようにしたYMB24Pro4MIの最新版を配り、計算だけでこうしたことを実際にやってもらった。仕事の生産性を上げるとはこういう事だと思う。

HSPiPに搭載されるか？

こうした（臨界）表面張力の成分分解はHSPiPに搭載されるだろうか？

ふつうの表面張力自体Abbott先生は大嫌いなので、多分乗らないだろう。今私が新しくした、Y-PBの実装自体は終了して、もうリリース待ちだ。

それに追加で分割機能の追加を交渉はしているのだけど、いろいろぐちゃぐちゃ言っているので多分乗らない。当面はYMB24Pro4MIのユーザーだけが使える機能になる。

YMB24Pro4MIの販売価格はとても高い。1年契約で120万に設定している。だからコンサル契約と込みで買うのが前提だ。

MIツールや次世代HSPも含んでいる。他所の会社の一步先を行きたい会社向けのツールなので一般向けではない。もっとも、同じ会社内では自由に使えてしまうので大規模な会社ではお得だ。

HSPiPの購入

もうかれこれ2ヶ月近くMyCommerceからの購入ができなくなっている。正確なことは言えないが、このまま当面、私が販売する事になりそうだ。

現在日本では3-4社再販業者がいる。もしHSPiPを購入したい場合、直接私から見積もりを取って購入するのが一番安く購入できる。

私の会社が合同会社であるとか、指定業者でないから、銀行振込のみだから、掛け売りをしないからとか言った理由で再販業者を使うのも良いだろう。しかし、これらの再販業者は私から見積もりをもらって手数料を上乗せして販売しているので必ず、より高価になる。

指定業者からさらに再販業者、そして私となると更に高価になるが、結構日本の企業はそういう購入の仕方を平気で行う。原材料を買う購買の部署がこうした小さいものまで同じように購入するのだろう。購買コストを下げようなどとは全く考えないようだ。

購入をしたいのだけど、この後、購買が値引き交渉する、とか言ってくるところがある。外から購入してくれとお断りしている。

支払いの直前電話をするから、その電話を受けて自分が自分であることを証明しろという馬鹿な会社もあった。他から購入してくれと言うと、逆ギレされた。

結局はどこから買ってもモノは同じだし、売り主は同じ。面倒がない通販が良かったのだけだ。