

pirika.comの研究記録

# Pirika News

## 京都家族旅行



双子の息子はもう23歳になる。一人は3月から社会人。もう一人は、あと1年は京都で学生をしている。最後の家族旅行になりそうなので皆んなで京都に集まった。

12月の初めの週、紅葉が綺麗でめっちゃ混む季節に酔狂だと思う。

地元民の息子に行きたいところを聞かれた時に”混んでいない所”を指定した。



pirika.com の副社長と。

もう一つ、私が大ファンの(京都)科捜研の女の聖地巡礼も頼んだ。多分、ロケ地などはよっぽどの物好きでない限り行かないだろう。

ねじりまんぼという、レンガ造りのトンネルがある。レンガの組み方に特徴がある。”ねじり”とあるようにレンガが真っ直ぐではなくねじった形に積み重ねてある。



捻ることによって重さが垂直にかからず、耐久性が上がる。



もし、積水化学工業京都研究所（科捜研の京都地方検察庁）からハンセンの溶解度パラメータの講演会を頼まれたら、大幅値引きでやってあげるのにな。

後は、息子がバイトしている料亭で、豪勢に食事した。るり溪というところに足を伸ばした。そちらも人は少なく楽しめた。

## 懲役2時間

今年の3月で65歳になる。体力は衰える一方だ。  
そこで週に2-3回、懲役2時間を課している。  
今更運動したところで、体力が向上している実感はない。  
やってなんとか維持。やらなかったら衰える一方。  
ジムでの汗かき。  
新聞配達でもした方が、同じ汗をかいてもお金になる。

## デフレ・インフレ

失われた30年ってなんだろう。  
デフレ？  
ものの値段が落ちる。  
でも、物価は生鮮食品を除いたものの値段で決まる。  
テレビの値段が下がる、携帯の値段が下がると物価は下がる。  
そんなものは普通の人は興味ない。  
3-10年にいつペン買うかどうかだ。  
なぜ、テレビや携帯の値段が下がるのだろうか？  
多くの理由は、競争に負けた企業が、ダンピングするからだ。  
ダンピングしなければ売れないからだ。  
安物買の銭失いでもいい人が買えばいい。  
  
今は、インフレになって食べ物の値段がどんどん上がる。  
普通に毎日使う買い物の代金が上がる。  
スーパーでカゴに入れるかどうか迷う。  
わかっていないのは、政治家と日銀だけか。

## コンサル業

去年はコンサル業の会社が倒産が最多だったと新聞に書いてあった。  
自分もコンサル業なので他のコンサル業は何をしているのかは気になっていた。

新聞によると、こうしたコンサルは、補助金の申請書の書き方などを指南するような会社だったようだ。

自分が大学教えている時に、学生がコンサル業に就職したいとかいう話は聞いたことがあった。そんな化学のことを何も知らないで、どんなコンサルができる？って笑い飛ばしていた。でも補助金の申請書作りぐらいなら大学卒業直後でもできるかもしれない。

まー、誰にでもできるような仕事だから、無くなっても不思議はない。いわゆる、ブルシット・ジョブが無くなっただけのことか。

5公5民とか言って税金が高くなっているのはみんなが実感している。どこにそのお金が消えていくのか不思議だったけど、そういうことかって納得した。

そうしたコンサルを受けても、生産性は向上しない。給料が上がらないわけだ。

自分のコンサルは、特許などを通じて世界と戦っていくためのものだ。

## HSPiP用のマニュアルの翻訳

2025年の1月1日からHSPiPを値上げした。それに伴い、e-Bookの日本語翻訳版、How to Useの日本語翻訳版をつけることにした。

今の時代、英語のマニュアルを翻訳するだけなら、Deep Lを使えば簡単にできる。ところが、マニュアル作成はそこまで簡単ではない。英語のマニュアルに従って、実際に操作を行う。そしてスクリーンショットをとり、説明と合わせていく。Abbott先生は機能を加えたり消したりしてもマニュアルを直していないことも多々ある。結構時間がかかってしまった。概要のページをつけておく。

# HSPiPの使い方概要ー日本語版

メニューバー: ユーティリティーで説明

HSPiP 6th Edition 6.0.0

No.	Solvent	δD	δP	δH	Score	RED	MVol	CAS	SMILES
7	Acetone	15.5	10.4	7	1	0.726	73.8	67-64-1	CC(C)=O
92	1-Butanol	15	5.7	15.8	0	1.229	92	71-36-3	CCCCO
115	Gamma Butyrolactone	18	16.6	7.4	1	0.770	75.5	96-46-0	O=C1CCC...
148	Chlorobenzene	19	4.3	2	1	0.977	102.1	108-90-7	CC1=CC=...
255	Diethyl Ether	14.5	2.9	4.6	0	1.318	104.7	60-29-7	CCOCC
306	1,4 Dioxane	17.5	1.8	9	1	0.987	85.7	123-91-1	C1COCCO1
326	Ethanolamine	17	15.5	21	0	1.282	60.3	141-43-5	OCCN
375	Ethylene Glycol Monobuty...	16	5.1	12.3	1	0.993	131.8	111-76-2	CCCCOC...
491	Methyl Isobutyl Ketone	15.3	6.1	4.1	0	1.002	125.8	108-10-1	CC(C)C(C)...
531	Nitrobenzene	20	10.6	3.1	1	0.656	102.7	98-95-3	O=[N+]([O]...
532	Nitroethane	16	15.5	4.5	1	0.956	72	79-24-3	CC[N+](=O)...
584	Propylene Carbonate	20	18	4.1	0	1.000	85.2	106-32-7	O=C1OCC1...
637	Toluene	18	1.4	2	0	1.243	106.6	108-88-3	CC1=CC=...
649	Trichloroethylene	18	3.1	5.3	1	0.889	90.1	79-01-6	[H](C)(C)=...

機能別プログラム

Chapter4

M O DIY QSAR 3D0 SFB SFP

Show Master Dataset

Wireframe 3D Plot

D-Min 12.5 P&H-Max 25

Classic Hansen Genetic Algorithm Fitting

Data points Double Sphere

Good is small

Split High/Low @ 1.000

Use Log fit

Radius for Data fit 6.0

Fit to Exponential MVC

Show Fit Show Distance

Donor/Acceptor

NVol Correction

Sphere Rad. Chk

Show Selected

ESC Alert

OD Fit

Fit Explorer

"Inside" 8 Info Both only Font Medium

Double-Click Radius 8.0 Limit

Total Compounds = 19

# 1. Sphereプログラム

HSPiPのメインプログラムです。ポリマー、薬、無機物がどのような”ハンセン溶解球”を持っているかを探索するプログラムです。(使い方マニュアル 2 - 42 page)

## 機能別プログラム

### M : 2. マテリアル機能

HSPiPには、市販されているポリマーのデータベースが搭載されています。自分で得たHSPを登録して3DOなどで利用します。(使い方マニュアル 43 - 58 page)

### O : 3. 溶媒最適化プログラム

ある特定のHSPに合致する2成分、もしくは、より複雑な混合溶媒の組成を決めるプログラムです。3DOもここに含めています。(使い方マニュアル 59 - 104 page)

## 4. 拡散モデル・シミュレータ

ユーティリティーに移動しました。(使い方マニュアル 105 - 118 page)

### DIY : 5. (Do It Yourself) プログラム

自分でやってみよう。溶媒の分子構造からハンセンの溶解度パラメータを推算したり、溶媒設計上必要な物性値を得るプログラムは、DIYにまとめられています。(使い方マニュアル 119 - 169 page)

### QSAR : 6. QSARツール

QSAR(定量的構造活性相関)とは、医薬品などの分子設計によく使われる言葉で、分子の構造とその薬理活性を定量的に関係付ける方法論です。ここでは、例えば自分だけの溶解性を予測する式を構築しようとした時に、YMBが作り出した物性値を組み合わせることでQSAR式を作るためのツールです。(使い方マニュアル 170 - 207 page)



## 3DOプログラム

3次元の溶媒Optimizerプログラムです。マテリアル機能の中で説明します。(使い方マニュアル 53 - 58 page)

## SFB : 7. SFBox-FEプログラム

SFBoxフロントエンドを使用すると、ワーゲニンゲン大学のチームが開発した Scheutjens-Fleer (SF) 理論を使用して、ポリマー/表面で高度な自己無撞着場 (SCF) 計算を実行できます。新しいプログラム(Ver. 5.3から) ですので、まだ資料は少ないです。(使い方マニュアル 208 - 218 page)

## SFP :

マニュアルにはSFPの記載はありません。

## 8. ユーティリティー

ユーティリティーはメニューバーにまとめられています。(使い方マニュアル 219 - 253 page)

# 1. Sphereプログラム

HSP/6 6th Edition 6.0.04 Licensed to: [redacted]


No.	Solvent	δD	δP	δH	Score	RED	MVol	CAS	SMILES
7	Acetone	15.5	10.4	7	1	0.726	73.8	67-64-1	CC(C)=O
92	1-Butanol	16	5.7	15.8	0	1.229	92	71-36-3	CCCCO
115	Gamma Butyrolactone	18	16.6	7.4	1	0.770	76.5	96-48-0	O=C1CCC...
148	Chlorobenzene	19	4.3	2	1	0.977	102.1	108-90-7	ClC1=CC=...
255	Diethyl Ether	14.5	2.9	4.6	0	1.318	104.7	60-29-7	CCOCC
306	1,4-Dioxane	17.5	1.8	9	1	0.987	85.7	123-91-1	C1COCCO1
326	Ethanolamine	17	15.5	21	0	1.282	60.3	141-43-5	OCCN
375	Ethylene Glycol Monobuty...	16	5.1	12.3	1	0.993	131.8	111-76-2	CCCCOC...
491	Methyl Isobutyl Ketone	15.3	6.1	4.1	0	1.002	125.8	108-10-1	CC(C)C(C)...
531	Nitrobenzene	20	10.6	3.1	1	0.656	102.7	98-95-3	O=[N+]([O]...
532	Nitroethane	16	15.5	4.5	1	0.956	72	79-24-3	CC([N+])([O]...
584	Propylene Carbonate	20	18	4.1	0	1.080	85.2	108-32-7	O=C1OC(C)...
637	Toluene	18	1.4	2	0	1.243	106.6	108-88-3	CC1=CC=...
649	Trichloroethylene	18	3.1	5.3	1	0.889	90.1	79-01-6	[H]C(Cl)=...

Total Compounds = 19

Buttons: Classic Hansen, Genetic Algorithm, Fitting, Data points, Double Sphere, Good is small, Split High/Low @ 1.000, Use Log fit, Radius for Data fit 6.0, Fit to Exponential, MVC, Show Fit, Show Distance, Donor/Acceptor, MVol Correction, Sphere Rad. Chk, Show Selected, ESC Alert, OB Fit, Fit Explorer, Inside 3, Info Both only, Font Medium, Double-Click Radius 8.0, Limit.

3D Plot: Empty wireframe plot with axes D, H, P. Values: D (5-25), H (5-25), P (5-25).

プログラムを立ち上げると上図のような画面になります。これをメイン・フォームと呼びます。左上のテーブルを溶媒テーブルと呼びます。ここには溶解性試験を行った溶媒を入力し、Scoreの列にその溶媒が試験体を溶解、膨潤、分散したかどうかの値を入力します。

データが準備できましたら  計算ボタンを押すと、Sphereプログラムが走り、ハンセンの溶解球を探索し、結果を表示します。

No.	Solvent	δD	δP	δH	Score	RED	MVol	CAS	SMILES
7	Acetone	15.5	10.4	7	1	0.396	73.8	67-64-1	CC(C)=O
92	1-Butanol	16	5.7	15.8	0	1.208	92	71-36-3	CCCCO
115	Gamma Butyrolactone	18	16.6	7.4	1	0.901	76.5	96-48-0	O=C1CCC...
148	Chlorobenzene	19	4.3	2	1	0.966	102.1	108-90-7	ClC1=CC=...
255	Diethyl Ether	14.5	2.9	4.6	0	1.035	104.7	60-29-7	CCOCC
306	1,4-Dioxane	17.5	1.8	9	1	0.965	85.7	123-91-1	C1COCCO1
326	Ethanolamine	17	15.5	21	0	1.871	60.3	141-43-5	OCCN
375	Ethylene Glycol Monobuty...	16	5.1	12.3	1	0.886	131.8	111-76-2	CCCCOC...
491	Methyl Isobutyl Ketone	15.3	6.1	4.1	0	0.667	125.8	108-10-1	CC(C)C(C)...
531	Nitrobenzene	20	10.6	3.1	1	0.849	102.7	98-95-3	O=[N+]([O]...
532	Nitroethane	16	15.5	4.5	1	0.825	72	79-24-3	CC([N+])([O]...
584	Propylene Carbonate	20	18	4.1	0	1.298	85.2	108-32-7	O=C1OC(C)...
637	Toluene	18	1.4	2	0	1.149	106.6	108-88-3	CC1=CC=...
649	Trichloroethylene	18	3.1	5.3	1	0.815	90.1	79-01-6	[H]C(Cl)=...

In= 11 Out= 8 Total= 19  
 δD= 17.1 δP=9.4 δH=6.8  
 δTot = 20.6 R= 8.3  
 Fit= 0.947  
 Wrong In= 1  
 Methyl Isobutyl Ketone  
 Wrong Out= 0

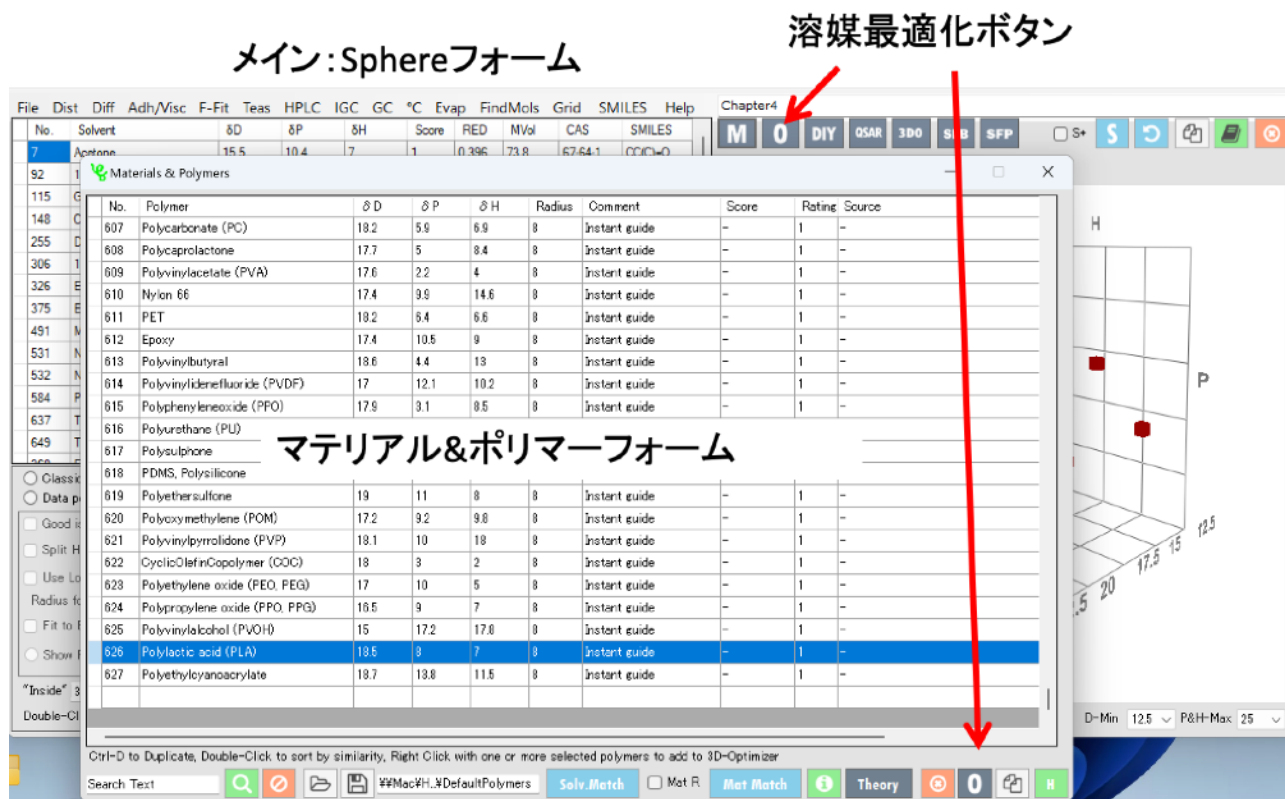
3D Plot: Wireframe plot with axes D, H, P. A green sphere is shown, representing the Hansen solubility sphere. Values: D (5-25), H (5-25), P (5-25).





### 3. 溶媒最適化プログラム

ある特定のHSPに合致する2成分、もしくはより複雑な混合溶媒の組成を決めたい時にはO Optimize（最適化）プログラムを使ってください。



すると Solvent Optimizer form（溶媒最適化フォーム）が開き、今選んでいる溶媒が自動的にターゲット溶媒として設定されます。そのターゲットになるハンセンの溶解度パラメータ（HSP）と同じHSPを持つ混合溶媒を探索するのが溶媒最適化プログラムです。

1 2 3 O Pw Tw L のボタン（例えば2）を押すと最適な2種類の溶媒の組みと比率が求まります。

溶媒ペア

Solvent	δD	δP	δH	MVol	Other Names	RER	Weight	Vol%	Distance
Ektasolve Eeh	15.6	4	5	150	Mixture of ethyl-hexyl eth...	0.3	100	74.0	1.28
Isophorone	17	8	5	150.3	3,5,5-Trimethyl-cyclohex...	2	100	26.0	2.61
Methyl Iso-Butyl Carbinol	15.4	3.3	12.3	127.2	MIBCOL	27	100		7.59
Methyl Iso-Amyl Ketone	16	5.7	4.1	141.3	MIAC	50	100		1.14
Methyl Ethyl Ketone (M...	16	9	5.1	90.2	2-Butanone	380	100		4.00
Methyl Iso-Butyl Ketone...	15.3	6.1	4.1	125.8	4-Methyl-pentan-2-one	162	100		1.99

比率



## 5. DIY(Do It Yourself) プログラム

自分でやろう(DIY)

自分だけの化合物のHSP値を推算したり，興味深い物性値を調べたいならDIYプログラムを使ってください。

The screenshot shows the DIY program interface. At the top, a menu bar includes 'DIY' (highlighted with a red arrow). Below it, a toolbar contains buttons for 'M', 'O', 'DIY', 'QSAR', '3DO', 'SFB', and 'SFP'. The main window is titled 'Y-MB' and contains several sections:

- Input Section:** 'SMILES or InChI inp' field contains 'CCCCO' (highlighted with an orange arrow and labeled '1. SmilesかInChIを入力する'). Below it, 'Formula' is 'C4H10O' (highlighted with an orange arrow and labeled '3. 原子団に分割').
- Properties Table:** A table on the left lists properties: δD (16.0), δP (6.5), δH (18.3), δHD/A (11.2/15.2), δTot (25.2), Environmental (Antoine A: 7.336, B: 1311.3, C: 192.5), VP @25°C (20.3), VP @°C 25 (20.3), RFR (34.2), Flash point (42), η @25°C (1.4), Log(OHR) (-11.08), log(Kow) (0.9), log(S) (1.17).
- 3D Model:** A ball-and-stick model of 1-butanol is shown with HSP values: δD (-0.293), δP (0.030), δH (0.034), δD/A (0.012), δTot (0.015), δH/A (0.013), δTot/A (0.014), δTot/H (0.015), δTot/D (0.016).
- Right Panel:** A vertical list of properties: MP °C (-69.4), BP °C (106.5), RI (1.395), Density (0.8003), MVol (92.6), MWt (74.1), Ovality (1.3), MCI/NRB (2.41 | 2), HAC (5), QMin (-0.293), QMax (0.132), DM (1.964). Buttons for 'Lead 3D File', 'Reset 3D View', and 'Bonds' are at the bottom.
- Calculation Button:** A blue button with a calculator icon is on the right side (highlighted with an orange arrow and labeled '2. 計算ボタン').

YYMB法ではHSP値の推算、溶媒を選択する上で重要な溶媒の熱力学的物性値の推算を行うことができます。分子構造の入力は、Smiles, InChI, Molファイルなどから行うことができます。その他の推算として、HSE(健康と安全そして環境)、共沸と蒸気圧、界面活性剤、溶解性などを扱うことができます。

今回のver.6からY-MBの推算結果は大きく変わりました。これまで大きな分子、多官能の分子で推算値がオーバーシュートしてしまう問題を解決した為です。その分、小さな分子の推算値が少し悪くなります。しかし、小さな分子の多くはオフィシャルのHSP値があるので問題ないと考えています。

Polymerタブでは構造のはっきりしているポリマーのデータベースとY-PBによる推算値を提供しています。

## 6. QSARツール

↑ QSAR

Chemical	SMILES	Retention	δD	δP	δH	δHDon	δHAcc	MWt	Density
oxalic acid	O=C(O)C(O)=O	8.068	17.84	13.83	26.23	22.1	16.9	90	1.526
L-tartaric acid	OC([C@H](O)[C@@H](O)C(=O)O)C(=O)O	8.579	17.81	14.02	29.21	22	19.1	150.1	1.569
formic acid	[H]C(O)=O	8.831	14.16	8.55	13.28	11.2	9.7	46	1.163
L-malic acid	O=C(O)CC(O)C(O)=O	4.597	17.74	12.57	26.01	20.1	17	134.1	1.491
L-ascorbic acid	O=C1C(O)=C(O)[C@H](O)C(O)C1O	5.002	20.31	14.23	25.82	19.9	20.5	176.1	1.061
lactic acid	CC(O)C(O)O	5.622	17.45	11.12	22.39	17.9	15.2	90.1	1.22
acetic acid	CC(=O)O	5.967	15.2	6.58	13.62	9.8	8.1	60.1	1.045
maleic acid	O=C/C=C(O)/C(=O)O	7.191	18.16	10.78	23.02	18.3	13.2	116.1	1.352
citric acid	OC(C(O)O)C(O)C(=O)O	8.008	17.6	11.36	25.99	22.3	15.3	192.1	1.555
succinic acid	OC(CCC(O)=O)=O	8.279	17.31	10.61	21.83	17.5	13	110.1	1.29

Retention = -54 + 2.77.δD + 3.39.δP - 1.22.δHDon - 3.47.δHAcc + 0.0398.MVol + 31.5.Ovality

Sig Figs 3    R²=0.683    ΔR²=n/a    RMS=3.08    MAE=2.39    RE%=31.8

QSAR(定量的構造活性相関)とは、医薬品などの分子設計によく使われる言葉で、分子の構造とその薬理活性を定量的に関係付ける方法論です。例えば自分だけの溶解性を予測する式を構築しようとした時に、YMBが作り出した物性値を組み合わせてQSAR式を作る為のツールです。メイン・フォームからQSARを選択します。(このツールはver. 5からの機能で、4.1.07にはありません。)

HSPiP Dataのフォルダーの中にQSARフォルダーが作成されています。そこから拡張子がhsqのファイルを読み込んでみましょう。

hsqのデータはQSARで解析が終わったものが例題として保存されています。この例では、有機酸のHPLCの保持時間を例に、YMBの吐き出した計算値から保持時間を予測するQSAR式を構築しています。

$\log(\text{保持時間}) = -54 + 2.77. \delta D + 3.39. \delta P - 1.22. \delta HDon - 3.47. \delta HAcc + 0.0398. MVol + 31.5. Ovality$   
 というQSAR式が得られました。

HSPiP-QSARの得意とする分野は、やはり、溶解性に関するもので、HSPや分子体積、卵形度(Ovality)などを使うと高い相関関係を持つQSAR式を構築できます。

自分だけの推算式を構築する非常に有用なツールです。

解析に必要なデータは、SMILESの構造式と目的とする数値をタブ区切りのテキストデータとして準備するだけです。

## 3DOプログラム

何種類かのポリマーの最適溶媒を、3次元(3D)的に最適化(Optimize)するプログラムです。ポリマー機能の中で説明します。

大きなメッシュ球:コンポーネント

3次元の混合溶媒設計

CAS	SMILES	Formula	δD	δP	δH
75-07-0	CC([H])=O	C2H4O	14.7	12.5	7.9
107-29-9	C/C=N/O	C2H5NO	16.3	4	20.2
60-35-5	CC(N)=O	C2H5NO	17.3	18.7	19.3
103-94-4	CC(=O)NC1=	C8H9NO	20.6	14.4	13.5
64-19-7	CC(O)=O	C2H4O2	14.5	8	13.5
108-24-7	CC(OC)C=	C4H8O3	16	11.7	10.2
67-64-1	CC(C)=O	C3H6O	15.5	10.4	7
75-85-5	CC(C)O)C#N	C4H7NO	16.6	12.2	15.5
3376-35-0	CC(=NO)C	C4H9NO	14.7	4.6	4.6
75-05-8	CC#N	C2H3N	15.3	18	6.1
98-86-2	CC(C1=CC=	C8H8O	18.8	9	4
127-06-0	CC(=NO)C	C3H7NO	16.3	3.7	10.9
1515-76-0	CC(=O)OC=	C6H8O2	16.1	4.4	8.3
50-79-2	CC(=O)OC1=	C9H8O4	19	6.9	9.7
88-15-3	CC(C1=CC=	C8H8O5	19.1	12.2	9.3
77-89-4	CCOC(=O)C=	C14H22	16.6	3.5	8.6
123-54-6	CC(C)C(O)=	C5H8O2	16.1	10	6.2
506-96-7	CC(Br)=O	C2H3BrO	16.7	10.6	5.2
75-36-5	CC(C)=O	C2H3CO	16.2	11.2	5.8
74-86-2	[H]C#C([H]	C2H2	14.4	4.2	11.9
557-99-3	O=C(F)C	C2H3FO	14.7	14	5.7

オレンジ:スイートスポット  
コンポーネントの平均値

水色:2つの溶媒の比率でのHSP  
スライダーで比率を変える

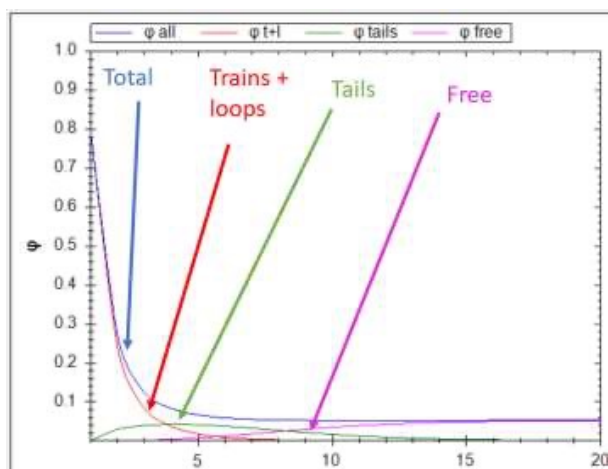
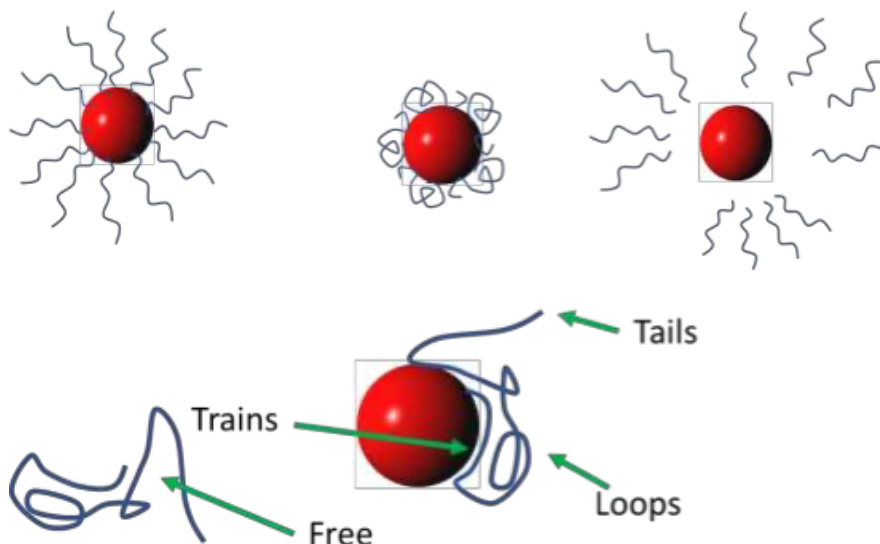


## SFBox-FEプログラム

SFBoxフロントエンドプログラムは、粒子-ポリマー-溶媒の間の関係を解くためのプログラムです。空間に格子を作り、その1つのエッジを粒子として定義します。溶剤やポリマーは、粒子の隣に座る以外に何もできません。次に、ポリマーの個々のビーズ（モノマー単位）が接続されているという明らかな制約の下で、ポリマーの選択した体積分率 $\phi$ （すべてが体積分率で行われます）を、格子内で適切と思われる場所に配置します。他のすべての格子サイトは溶媒で満たされます。

次に、そのシステムのエネルギーを計算します。このためには、全ての組み合わせの、Flory-Hugginsの $\chi$ パラメータが必要になります。


システムのエネルギーが最小になるように、配置を考えていきます。





SFBox Polymer (SFPボタン) の説明はまだ記載がありません。

## ユーティリティー

### 共通のユーティリティー：

テーブルのキャプチャー 

クリアーボタン 

計算ボタン 

詳しい説明 

### メニューバーにあるユーティリティー

File Dist Diff Adh/Visc F-Fit Teas HPLC IGC GC °C Evap FindMols Grid SMILES Help

File ファイルのオープン、セーブ

Dist. HSP距離の計算機

Diff. 拡散シミュレーション (別途説明)

Adh/Visc 接着と粘度の計算機

F-Fit 強制的にFitする

Teas Teasプロット

HPLC HPLC機能

IGC IGC機能

GC GC機能

°C 温度効果計算機

Evap 蒸発計算機

FindMols 分子の探索

Grid グリッド作成

SMILES SMILESの分子構造式

Help How To Useの英語版を開く (英語版には図はありません)

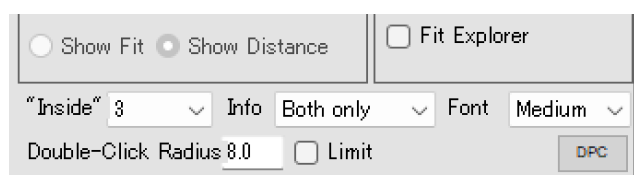
## 単位と温度

HSP値と相互作用半径の単位は(Joules/cm<sup>3</sup>)<sup>1/2</sup> で、これはMPa<sup>1/2</sup>に等しくなります。普通に使われる分子体積(MVol)の単位はcm<sup>3</sup>/moleです。標準的なHSP値は25°Cの値です。

### – 1.234 と 1,234, 小数点の記号について

このプログラムは全世界で使えるようにデザインされているので、.hsdxファイルは値を交換するには有用な方法です。異なった国々では、違う小数点の区切り記号を使っており、それが互換性の問題を引き起こしています。そこで、もしあなたのコンピュータがカンマ、“,” (1,234)を使っていても、スクリーンのテーブル中では“.” (1.234)というフォーマットを使います。もし、数字をカンマで1,234のように打ち込んでも、自動的に“.”のフォーマットに変換されます。

テーブルをコピーしたり、データを自動的に“.”フォーマットのクリップボードに置いたりすると、あなたの数値が“,”を使っていたとするとExcelは混乱するかもしれません。DPCをクリックすると、全ての小数点を“,”に変更するので、Excelはそのデータが数値であると認識するようになります。



## HSPiPのコピー／ペースト

Sphereプログラムを使えば使うほど、HSPの値をプログラムのある場所から他の場所へ移したい事があるでしょう。テーブルのどこか、HSPの値のどこかで、Ctrl-D

(D:Duplicate,複製)を押して、Ctrl-P (Paste, はりつけ)をすれば、HSPの値に加えて体積も、相当する所に転送されます。それは、記憶からタイプするより遥かに容易でしょう。我々がCtrl-DとCtrl-Pを使ったのは、習慣的なCtrl-CとCtrl-Vは習慣的なCopy/Pasteに使いたいだろうと思っただけの事です。

マスターデータベースから行全体をコピーするには、Ctrl-Fを使います。

## ToolTip

HSPiPではマウスを項目に近づけると、ToolTipと呼ばれる方法で使い方や項目の意味が表示されます。

## Keyboard Shortcuts (キーボードのショートカット)

HSPiPを使う上で、便利な小技のリストをまとめておきましょう。

### 一般：

どのテーブルやどの $\delta D$ ,  $\delta P$ ,  $\delta H$ の3つの組でも、Ctrl-DでHSP値が複製 (Duplicate) され、クリップボードに置かれます。クリップボードにHSP値が置かれていれば、Ctrl-Pでテーブルの行や、 $\delta D$ ,  $\delta P$ ,  $\delta H$ の3つの組に貼付け (Paste) されます。どのテーブルでも、列のヘッダーをクリックすると、値が昇順で、もう一度クリックすると降順でソートされます。

### メインフォーム：

Ctrl-O 新しい.hsdファイルを開く

Ctrl-S ファイルを保存する

Ctrl-N 新しいデータセットを作成するプロセスを開始する

### データセット中：

溶媒をダブルクリックすると、その溶媒を一番上に配置して、選んだ溶媒から他の溶媒への距離が示される。

### メインのデータ・テーブル：

行をクリックしてからCtrl-Dすると通常の複製 (HSP と MVolをクリップボードに置く) を行いますが、Ctrl-F をすると、行にあるデータ全てのFullコピーを行います。一つかそれ以上の化合物を選択して右クリックを行うとそれらはSolvent Optimizerにコピーされます。

### 3Dビュー：

回転：マウスをクリックしたまま動かす (ドラッグする)。

拡大・縮小：シフトキーを押しながらドラッグする。

Pan(パン:カメラの見る方向を変える事) コントロールキーを押しながらドラッグする。

Sphereを計算し終わると、HSP[dD, dP, dH]と半径の値がクリップボードにコピーされ、ワードやエクセルに、Ctrl-Pでペーストする準備が整います。

**溶媒の最適化：**

一つかそれ以上の溶媒を、Ctrl-clickすると行が灰色になり、その後の探索に使われなく成ります。メインのデータテーブルからデータを付け加えるには、右クリックします。

**マテリアル/ポリマー：**

ポリマーの上でダブルクリックすると、そのポリマーがテーブルの一番上に配置され、他のポリマーは最初のポリマーとのHSP距離順に並び替えられます。1つ以上のポリマーを選択し、Solv.Matchをクリックすると、ポリマーが3Dプロット上に配置され、両方のポリマーに最小距離となる溶媒の「結合」点を表す金色の点が表示されます。

データセットから溶媒を選択し、Poly.Matchをクリックすると、ポリマーがその溶媒からの距離でソートされます。

Ctrl-OとCtrl-Sは通常のファイルを開いたり保存したりする

## HSPiPについて

このプログラムは、Prof Steven Abbott と Dr Hiroshi Yamamotoによって書かれています。著作権(Copyright © 2008-25)は Steven Abbott と Hiroshi Yamamotoにあります。HSPiPに含まれる eBook はSteven Abbott 教授 と Charles M. Hansen博士によって書かれています。そして著作権は© 2008-2025 Steven Abbott と Charles M. Hansenに属します。The 1<sup>st</sup> Edition was 2008, 2<sup>nd</sup> Edition 2009, 3<sup>rd</sup> Edition 2010, 4<sup>th</sup> Edition 2013, 5<sup>th</sup> Edition 2015, 6<sup>th</sup> Edition 2024.

Sphere (球) のアルゴリズムは Hansen博士による, Hansen Solubility Parameters: A User's Handbook, CRC Press, Boca Raton FL, 2007に記載されています。

使用ライセンスはプログラムを立ち上げた時に表示される個人に供与されます。使用者が変更になった場合には名前、メールアドレスを連絡して頂ければ登録変更の手続きを行います。使用ライセンスを複数のマシンにインストールし、複数の使用者が使うことは**違法**であることを認識してください。共通のマシンにインストールし複数の使用者が使うことも違法です。

図解やテストとして、このハンドブックからケーススタディのいくつかを供与しました。

Y-MB の方法論はDr. Hiroshi Yamamotoによって開発されました。彼はAbbott/Hansen/Yamamotoチームのコア・メンバーで日本のHSPiP上級開発者であり、Pirika.comの運営者でもあります。HSPに対する新しいアイデアや“thrill seeker:怖いもの見たさ”のパワーツールを探しているなら、<https://www.pirika.com/wp/chemistry-at-pirika-com/hsp>を覗いてみると良いでしょう。

著者らはStefanis-Panayiotou法の完全なデータセットを提供してくれた、Dr Emmanuel Stefanis と Prof. Costas Panayiotouに大変感謝します。Dr Stefanis と Prof. Panayiotou との議論はいつも刺激的で有益でした。Dr. Hiroshi Yamamoto は親切にもStefanis-PanayiotouテーブルのUNIFAC原子団を自動的に決定するプログラムを付け加えてくれました。(最新バージョンではこのルーチンは除去されている。)

Van Krevelen法と Hoy法でHSPを計算する係数はVan Krevelenの著名な本, Properties of Polymers: Their Correlation with Chemical Structure, 1990. から引用しました。この本にはポリマー用の原子団寄与法に関する多くの例題が収録されています。

Dr Richard Valpey III と彼の所属する会社 SC Johnson, Dr Hansenが彼らの為に計算した界面活性剤と香料のHSPを公表する事を許してくれた事に深く感謝します。

Dr Mario Blanco は匂いの感覚の章での貢献に感謝します。

Sandia国立研究所のDr W. Michael Brown, (今は改訂/更新してしまったが) オリジナルのポリマーSmilesのデータセットを使う事を許してくれた事に深く感謝します。

<http://www.es.sandia.gov/~wmbrown/datasets/poly.htm>



以前のバージョンのヘルプでは、このデータセットへのリンクを掲載していましたが、現在はリンクが機能していません。

我々は出版されたデータを例題として使う事を許してくれた全ての方々に感謝します。各々についてはeBookの相当するところで感謝の意を示してあります。

## バグ, 改良の提案

バグレポートや、改良, 提案などは [steven@hansen-solubility.com](mailto:steven@hansen-solubility.com) あてにメールを送ってください。

## 保証

E-Bookの導入部分をここに引用しましょう。

私は、本とソフトウェア中の、いくつかのかなり斬新的な考えに対して個人的な責任をとっています。そこで、あなたがそのアイデアが誤りであることを示すとき、私は次の3つの方法で個人的な保証とします。

- (a) 本/ソフトウェアの関連した部分をアップグレードする。
- (b) 私が間違っていたことを明らかにする。
- (c) (あなたが望むならば) あなたが訂正の提供者であることを明示する。

科学は反証がありうるかによって発展します。そして、書いている時点では、手元の合理的な証拠に基づいていると思われるアイデアへの論駁から、私自身とHSPコミュニティが学ぶ機会を歓迎します。

批判も上記のメールアドレスに送ってください。

## 免責条項

免責：このe-Bookとソフトウェアで使っている理論、例題、式、計算そしてデータセットは長年HSPコミュニティがおこなった広範な理論的な研究そして実験の研究を基にしています。しかし、それらはある特定の問題に対するガイドとしてのみ使うべきです。Hansen-Solubility.com, pirika.comはe-Bookとソフトウェアを使う事によってよって生じた、いかなる障害に対しても責任を負う事はできません。

ベスト・フィットが最高になるように最大限の努力がなされていますが、HSPの3D空間は複雑なので、ユーザーのデータと要求の範囲内で、ベスト・フィットが意味をなすと確信するかはユーザー次第です。特に、反応動力学（分子体積が小さい効果）は時に熱力学

(HSP)を覆す事があります。そこでユーザー自身のデータは間違った結論を内包するかもしれない。表に含まれる分子体積の値を良く見て、ボーダーラインのケースについては自分自身の判断をするように心がけてください。

HSPのデータファイルは長年に渡って開発され続けてきました。全ての価値のあるデータベースと同様、間違いも忍び込んでしまっています。技術的なミスを取り除く為に、かなりの努力が費やされていますが、自分らの応用に関連するHSPが受け入れられるだけの精度を持っているか自身で判断することを求められています。

