

【HSPiP Ver.6 の機能について】

(<https://www.hansen-solubility.com/downloads.php> にある情報の機械翻訳)

- コア HSP パラメータは、Y-MB24 アルゴリズムを使用して計算されるようになりました。いつものように、新しい Y-MB では平均値が向上しますが、特定の推定値が悪化する例が見つかる可能性があります。バージョン間を交換できるように、Ver.6 を新しいフォルダーにインストールしました。
- 過去のバージョンでも使用してきた Y-MB は非常に優れていたため、Ver.6 では大きな変更を加えていません。改善点は、以前の Y-MB では問題があった、大型の多機能分子に対するものです。
- 一部の非コアパラメータは、以前の Y-MB を使用して計算されます。ほとんど使用されていなかった HSP@T オプションは削除されました。もちろん、標準的な T 計算はプログラム全体で利用できます。
- 3D ファイル (molfile など) の Y-MB へのロードが合理化されました。これにより、一部のあいまいなファイル形式をロードする機能は失われていますが、一般的なファイル形式についてはより信頼性が高くなります。必要に応じて、OpenBabel を使用して、使用されている .mol、.sdf、または .pdf 形式に事前変換できます。
- P = ポリマー形式は、製薬 API やナノ粒子などの他のデータを保存するために常に使用されてきました。しかし、それを「P」と呼ぶことで、一部のユーザーが混乱する事があったため、これを M = 材料とポリマーに変更しました。機能は同じですが、一部のコントロールの名前が変更され、ユーザーがデータの取得元を示すリンクを保存するために、「Further Comments」列の名前が「Source」に変更されています。
- 過去のバージョンでは「指数に合わせる」が選択されていない場合、データポイントの近似には、結果を表示するグラフィックスがありませんでしたが、これが追加されました。結果が奇妙に見える場合がありますが、それは、フィッティングの焦点がセット全体ではなく、適切な値にあるためです。
- S ボタンをクリックすると、選択した溶媒を表示するための S+ オプションがあります。溶媒の選択がどの程度適切であるかを示すいくつかの指標と、溶質の適切な測定値が得られる可能性を高めるために 1 つまたは 2 つの溶媒を変更する方法が得られます。この新

しい機能の使用方法を確認するには、ヘルプで「S+」を検索してください。

- データ値がある場合、S ボタンを押すと、最大値からの距離によって溶媒が色分けされて表示されます。
- マウスが内部の溶媒を識別できなかった 3DO ワイヤフレームの機能が修正されました。
- DIY では、分子をメイン溶媒テーブルおよび Solvent Optimizer に追加するオプションが追加されました。
- 最初の列で同じ溶媒を使用したグリッドには、最初の列以降の溶媒について 100%:0% の重複エントリが含まれます。これらのエントリは削除されました。

【技術的な問い合わせについて】

映像工房クエスチョンは HSPiP の販売を担当しております。このため申し訳ありませんが、技術的なご質問にはお答えすることが出来ません。

技術的な質問については以下の、ソフトウェア制作元までお問い合わせ下さい。

<https://www.hansen-solubility.com/contact.php>

charles.hansen@get2net.dk