

# MIを使ったポリマー 素材の開発

高分子バリアー素材の開発を例に  
データベースを利用するメリットの解説

2018.9.11

非常勤講師 山本博志

# 高分子のバリアー性

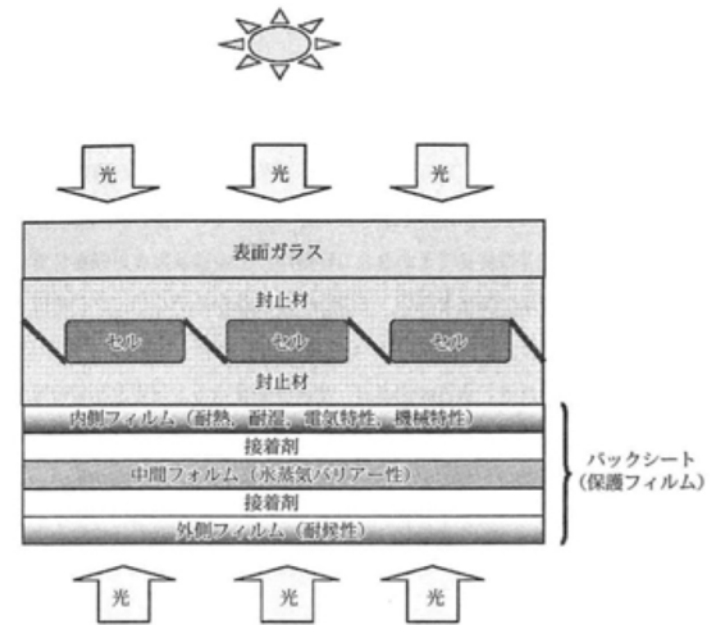


図1 太陽光発電モジュールの構造

太陽電池用のバックシート

# 医薬品、食品の包装材

フィルムの種類	ガス透過度 <sup>a)</sup> (ml/m <sup>2</sup> ・24hr・atm/25μm)			PCO <sub>2</sub> /PO <sub>2</sub>	水蒸気透過度 (g/m <sup>2</sup> ・24hr/25μm) 40℃, 90%RH
	PO <sub>2</sub>	PN <sub>2</sub>	PCO <sub>2</sub>		
	PVDC (VDC-MA共重合体)	1.5 <sup>b)</sup>	—	—	—
BVOH (BVA ケン化物)	2 <sup>b)</sup>	—	—	—	30
OV (PVDCコート延伸PVA)	3 <sup>b)</sup>	—	—	—	4
MXD6 (m-キシリレンアジバミド)	4 <sup>b)</sup>	—	—	—	23
PAN	5 <sup>b)</sup>	—	—	—	20
PVDCコートONy	10 <sup>c)</sup>	—	—	—	5
PVDCコートセロハン	15 <sup>c)</sup>	—	—	—	11
PVDCコートOPP	15 <sup>c)</sup>	19	44	2.9	5
ONy	30 <sup>b)</sup>	—	—	—	90
CNy	40	14	175	4.4	300
セロハン	40	16	50	1.3	750
PVDC (VDC-VA共重合体)	60 <sup>d)</sup>	12	380	6.3	5
PET	110	13	320	2.9	22
PVC	200	55	550	2.8	5
OPP	2500	315	8500	3.4	4
HDPE	2900	660	9100	3.1	22
CPP	3800	760	12600	3.3	23
PC	4700	790	17000	3.6	170
PS	5500	880	14000	2.5	130
LDPE	7900	2800	42500	5.3	36
BVA (VA10%)	9960 <sup>b)</sup>	—	52300	5.3	80
BVA (VA15%)	11400 <sup>b)</sup>	—	71160	6.2	200
BVA (VA21%)	12960 <sup>b)</sup>	—	96840	7.5	520
ポリブタジエン	49920 <sup>b)</sup>	—	362400	7.3	~ 600
ポリイソブレン	61200 <sup>b)</sup>	—	402000	6.6	~ 280
ポリ4メチルペンテン1	84840 <sup>b)</sup>	—	243360	2.9	47
ポリジメチルシロキサン	1590000 <sup>b)</sup>	—	8515200	5.4	~4800



テーブルを  
デジタル化

# 各種ポリマーの酸素・炭酸ガス透過性

表1 各種ポリマーの酸素・炭酸ガス透過性<sup>1)10)</sup>

種 類	厚さ ( $\mu\text{m}$ )	(単位: $\text{cc}/\text{m}^2 \cdot 24 \text{h}/\text{atm}$ )			
		酸素透過度		炭酸ガス透過度	
		25°C	35°C	25°C	30°C
エチレン-ビニルアルコール コポリマー (エチレン 56%)	15	0.2	0.5	1.1	
アクリロニトリルコポリマー (アクリロニトリル 70%)	25	12	20	25	
ビニリデンクロライドコポリマー	25	16		13	
ナイロン 6	20	85	140	450	
ナイロン 66	25	77	140	140	
ナイロン 11	25	520		2,300	
ナイロン 12	25	1,100		3,200	
ポリエチレンテレフタレート (二軸延伸)	12	64	165	175	820
ポリエチレンテレフタレート	25	43		430	
ポリエステル (PETG)	50	50		150	
ポリアリレート(テレフタル酸 -ビスフェノール A)	30	86		660	
ポリウレタン	25	2,700		14,000	
ポリ塩化ビニル (無可塑)	25	125		760	
ポリ塩化ビニル(可塑剤30%)	50	1,820		120,000	
ポリアセタール	50	97			
ポリメチルメタクリレート	50	150			
ポリカーボネート	50	1,800		10,100	
ポリスチレン	25	8,100		37,000	45,000
ポリタクロトリフロロエチレン	25	26			180
ポリテトラフロロエチレン	25	17,600			48,000
ポリふっ化ビニル	50	260			
ポリふっ化ビニリデン	50	26			
ポリイミド	25	390			620
ポリブタジエン	50	29,900			179,000
ポリエチレン (密度 0.92)	50	3,900	7,200	16,500	450,000
ポリエチレン (密度 0.955)	25	2,900		7,600	9,400
ポリプロピレン	20	8,100		37,000	
ポリ 4 メチルペンテン-1	50	32,000		95,000	
アイオノマー	25	7,700			
ポリエステルエラストマー	50		17,000		65,000
ブチルゴム	50	16,900			67,000
ABS 樹脂	50	960			
ポリスルホン	25	3,500		14,000	
三酢酸セルロース	25	2,300		12,600	
エチルセルロース	25	35,000		80,000	
酢酸ブチルセルロース	50	6,900			
ポリジメチルシロキサン	50	130,000			
シリコンゴム	50	720,000		3,700,000	

測定条件: 25°Cまたは 30, 35°C, ドライ

➡ テーブルを  
デジタル化

# 結晶性、温度の影響

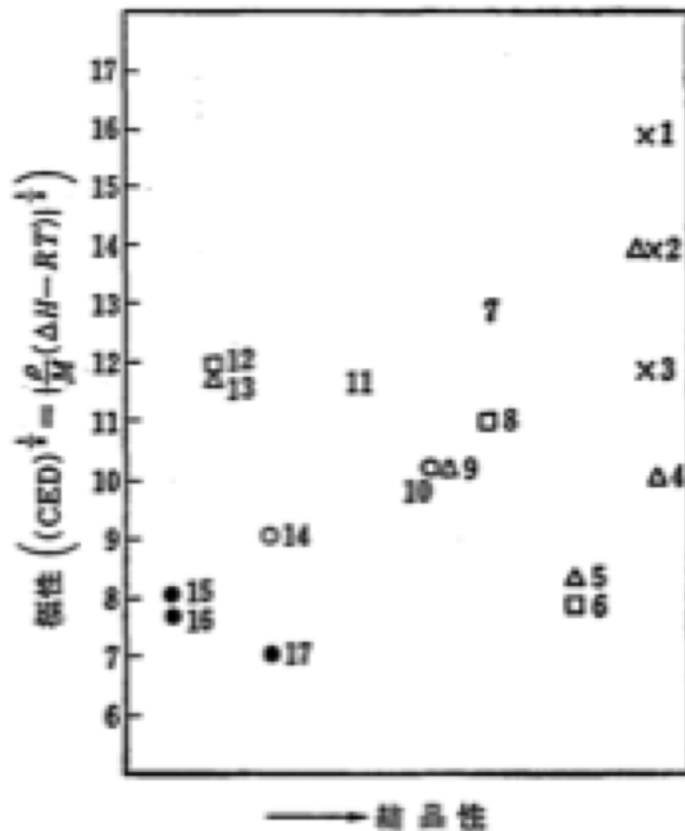


図 2.5 高分子の膜性・結晶性と気体透過性

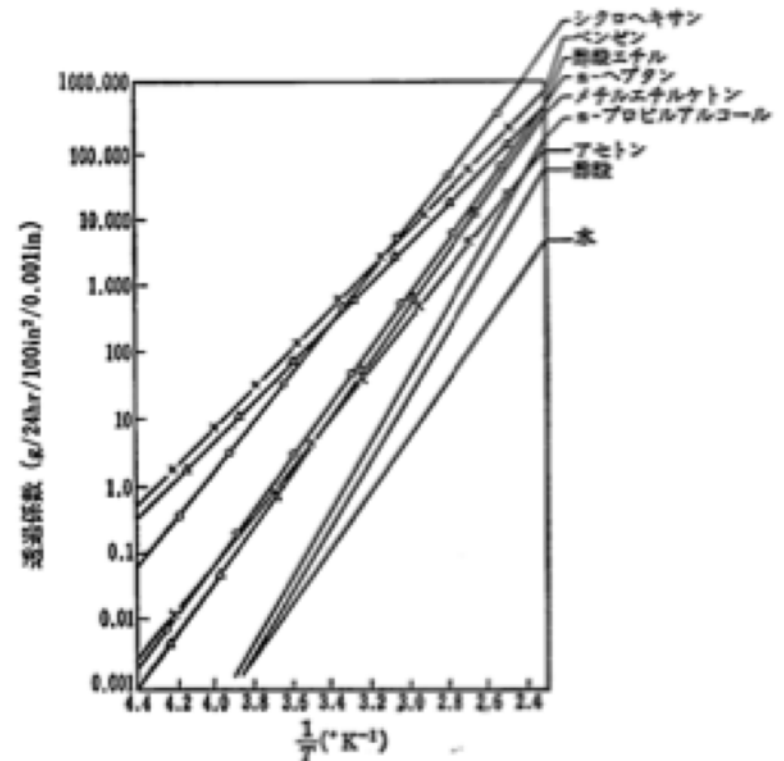


図 2.9 ポリエチレンの各種液蒸の透過係数に対する温度の影響

新しい機能膜



グラフを  
デジタル化

# 膜の厚み、相対湿度の関係

→ グラフを  
デジタル化

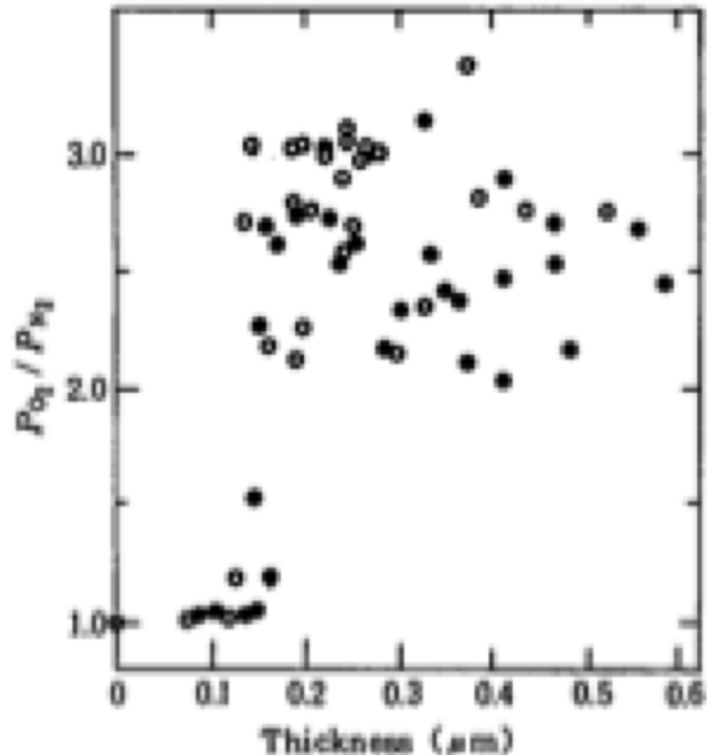


図 2.1.11 ジメチルシロキサンの 3 量体 (PM<sub>2</sub>), 4 量体 (PD<sub>4</sub>) をプラズマ重合した膜の厚さと酸素の分離性 (○ : PM<sub>2</sub>, ● : PD<sub>4</sub>)

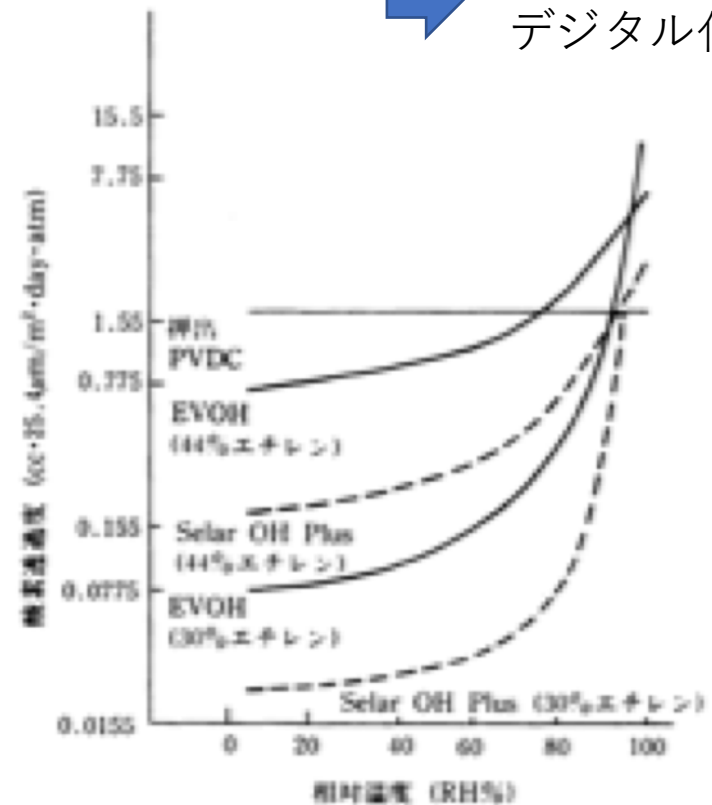


図 3 各種ポリマーの 20℃ における酸素透過度

# 様々な書籍、文献

材料	酸素	水蒸気
	(ml/m <sup>2</sup> ・24H・atm)	(g/m <sup>2</sup> ・24H/30μ)
LDPE	10000.	15
HDPE	5000.	5
未延伸 PP	4000.	9
延伸 PP	2500.	5
PS	6000.	112
PVC	240.	40
延伸 PET	40.	15
延伸 PA	30.	134
PAN	15.	80
PVDC	3.	3
EVOH 33mol%	1.	50
延伸 EVOH33mol%	0.2	20
EVOH 44mol%	2.	20
PVA	0.2	1000

表1 エンジニアリングプラスチックの熱変形温度とガス透過度

	熱変形温度 (°C/18.5kg/cm <sup>2</sup> )	ガス透過度 (cc(g)・25.4μm/m <sup>2</sup> ・day・23°C)		色調
		酸素	水蒸気	
液晶ポリマー	179	0.18(19μm)	1.0(19μm)	透明褐色
ポリアリレート	171	390	20	透明
ポリエステルカーボネート	162	4000	80	透明
ポリカーボネート	132	4700	170	透明
非晶性ナイロン	124	70	80	黄色
アセタルコポリマー	110	230	203	白濁
MXD6 ナイロン	96	10		透明
ナイロン66	78	65	270	透明
ナイロン6(未延伸)	78	40	310	透明
アクリルニトリル	73	12	78	黄色
PET(未延伸)	66	160	62	透明
硬質PVC	66	78	14	やや白濁
PET-G	63	390	62	透明
ポリプロピレン	58	3700	4	白濁
PBT	54	33	19	透明
EVOH	極めて低い	5		透明
PVDCコポリマー	極めて低い	8		透明

Vol22\_No1\_1バリア材料EVOH(エバル TM)の誕生と発展の物語

フィルムの種類	ガス透過度** (ml/m <sup>2</sup> ・24hr・atm/25μm)			PCO <sub>2</sub> /PO <sub>2</sub>	水蒸気透過度 (g/m <sup>2</sup> ・24hr/25μm) 40°C, 90%RH
	PO <sub>2</sub>	PN <sub>2</sub>	PCO <sub>2</sub>		
PVDC (VDC-MA共重合体)	1.5 <sup>a)</sup>	—	—	—	1
EVOH (EVA ケン化物)	2 <sup>a)</sup>	—	—	—	30
OV (PVDCコート延伸PVA)	3 <sup>a)</sup>	—	—	—	4
MXD6 (m-キシリレンアジバミド)	4 <sup>a)</sup>	—	—	—	23
PAN	5 <sup>a)</sup>	—	—	—	20
PVDCコートOnly	10 <sup>a)</sup>	—	—	—	5
PVDCコートセロハン	15 <sup>a)</sup>	—	—	—	11
PVDCコートOPP	15 <sup>a)</sup>	19	44	2.9	5
Only	30 <sup>a)</sup>	—	—	—	90
CNY	40	14	175	4.4	300
セロハン	40	16	50	1.3	750
PVDC (VDC-VA共重合体)	60 <sup>a)</sup>	12	380	6.3	5
PET	110	13	320	2.9	22
PVC	200	55	550	2.8	5
OPP	2500	315	8500	3.4	4
HDPE	2900	660	9100	3.1	22
CPP	3800	760	12600	3.3	23
PC	4700	790	17000	3.6	170
PS	5500	880	14000	2.5	130
LDPE	7900	2800	42500	5.3	36
EVA (VA10%)	9960 <sup>a)</sup>	—	52300	5.3	80
EVA (VA15%)	11400 <sup>a)</sup>	—	71160	6.2	200
EVA (VA21%)	12960 <sup>a)</sup>	—	96840	7.5	520
ポリブタジエン	49920 <sup>a)</sup>	—	362400	7.3	~ 600
ポリイソブレン	61200 <sup>a)</sup>	—	402000	6.6	~ 280
ポリイメチルペンテン1	84840 <sup>a)</sup>	—	243360	2.9	47
ポリジメチルシロキサン	1590000 <sup>a)</sup>	—	8515200	5.4	~4800

注 a) ガス透過度および水蒸気透過度はすべて厚さ25μmに換算した値。  
 ガス透過度の測定条件および測定法: 25°C, 50%RH, ASTM1456-66.  
 b) 27°C, 65%, 同圧酸素電極法。  
 c) PVDCコートの値はコート剤の種類、量により異なる。  
 d) 共重合比、可塑剤の量により異なる。無可塑剤はさらに低い値となる。

## 40\_727ガスバリア

プラスチックフィルムのガス透過性 (物理性食品包装材料 資料参考) (単位: PO <sub>2</sub> ・PN <sub>2</sub> ・PCO <sub>2</sub> は ml/m <sup>2</sup> ・24hr・atm/25μm)				
プラスチックフィルム	酸素	窒素	炭酸ガス	水蒸気
低密度ポリエチレン (LDPE)	2000~2600	6000~8000	6000~40000	10~18
高密度ポリエチレン (HDPE)	170~700	500~3000	7000~8000	4~6
結晶性ポリプロピレン (iPP)	700~2100	3000~6000	4000~12000	7~9
ポリオレフィン (PE)	1000~1400	4000~6000	10000~27000	10~13
ポリエチレン (PE-LD)	10~40	30~150	100~300	10~200
ポリエチレンテレフタレート (PET)	20~60	100~500	500~600	20~50
ポリプロピレン (PP)	2~2	70~80	70~80	2~4
ポリ塩化ビニル (PVC-硬質)	20~80	80~300	300~800	2~3
ポリ塩化ビニル (PVC-軟質)	30~300	1000~8000	1500~10000	20~60
EVOH	0~2	—	—	20~30
ポリカーボネート (PC)	200~700	1000~6000	7500~20000	30~100
ポリメチルメタクリレート (PMMA)	14000~17000	60000~70000	17000~20000	85~107
ポリオキシエチレン (PEA)	10~40	—	—	42
ポリメチルシロキサン	8000	1000	1000	15~60
その他	—	—	—	—



テーブルを  
デジタル化

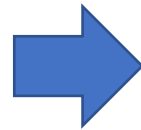
ハイバリアー性包装材料の製法と設計加工技術

# データはたくさん集まる

酸素や水蒸気をバリアーするにはどんなポリマーが良いかはソートすればわかる。

では、もっと良くするには？の問いにどう答えるか？

結晶性の影響  
温度の影響  
膜の厚みの影響  
湿度の影響  
添加物の影響  
積層化の影響



こうしたテキスト情報、  
画像情報が（将来はAIに  
よって自動的に）収集される。



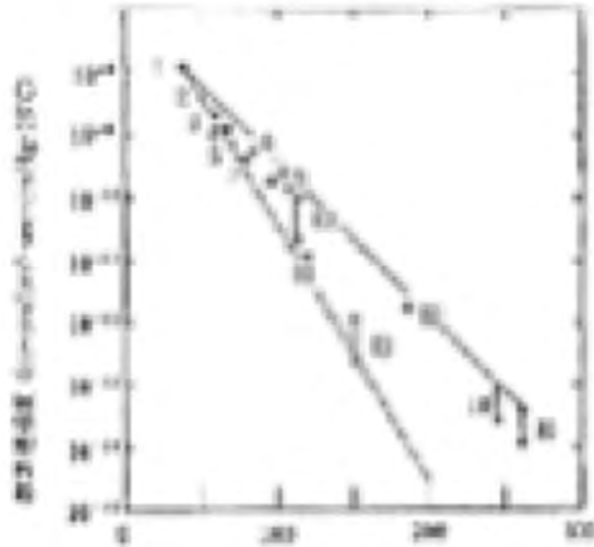
一つ一つは小さな表計算用の  
テーブル

テーブルをDBにするメリットは？



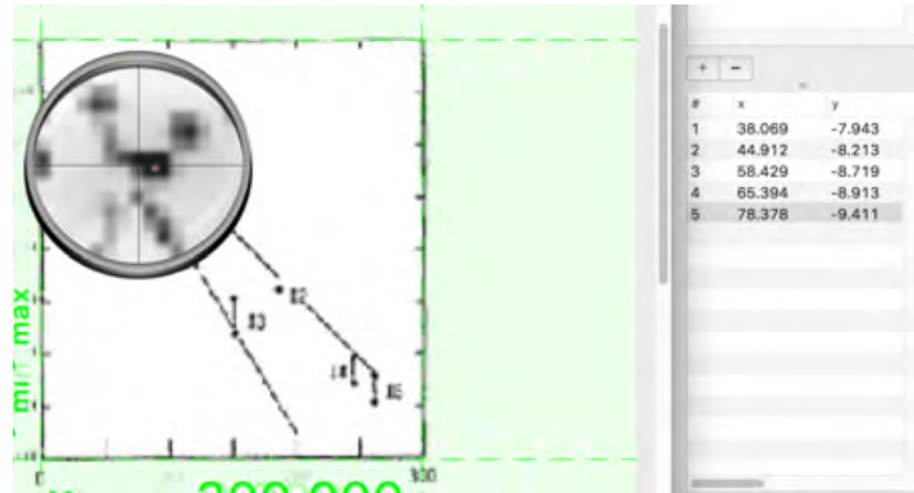
# ガスバリアー・フィルム

グラフ・データのデジタル化



樹脂の種類別透過係数 (log PO2) (g/dm³)

- |                  |             |
|------------------|-------------|
| 1. ポリエチレン        | 21. ポリプロピレン |
| 2. ポリプロピレン       | 22. ポリブチレン  |
| 3. エチレン酢酸ビニル共重合体 | 23. ポリブチレン  |
| 4. ポリブチレン        | 24. ポリブチレン  |
| 5. ポリ酢酸ビニル       | 25. ポリブチレン  |
| 6. ポリ酢酸ビニル       | 26. ポリブチレン  |
| 7. ポリ酢酸ビニル       | 27. ポリブチレン  |
| 8. ポリ酢酸ビニル       | 28. ポリブチレン  |
| 9. ポリ酢酸ビニル       | 29. ポリブチレン  |
| 10. ポリ酢酸ビニル      | 30. ポリブチレン  |



Name	logPO2	CED
Polyethylene	3.1931	11162
Polypropylene	2.8921	9581
Poly(vinyl alcohol)	-2.3979	43384.9
Polyoxyethylene	2.7226	15640
Poly(vinyl fluoride)	2.6212	12537.3
Polyacrylonitrile	-1.0000	35717.1
Poly(cis-1,4-butadiene)	3.5237	15497.2
Poly(vinyl chloride)	0.9777	15376.2
Polymethacrylonitrile	-0.3010	35486
Poly(vinyl acetate)	1.7782	15571.5
Poly(methyl acrylate)	2.0969	23036.3
Polychloroprene	2.8129	26151.4
Poly(vinylidene chloride)	0.1139	35204.5
Polytetrafluoroethylene	2.8451	19050.6
Poly(methyl methacrylate)	1.2304	22805.2
Polystyrene	2.6532	38935.3

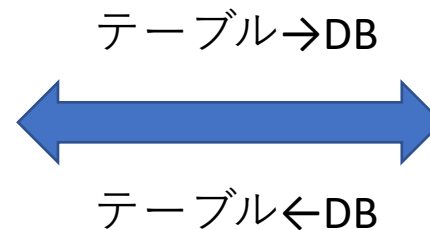
ガスバリアー入門講座 基礎編 5

出典不明の古いグラフ

# テーブルのDB化

テーブルとデータベースの違い。 → 特に違いはない

Name	logPO2	CED
Polyethylene	3.1931	11162
Polypropylene	2.8921	9581
Poly(vinyl alcohol)	-2.3979	43384.9
Polyoxyethylene	2.7226	15640
Poly(vinyl fluoride)	2.6212	12537.3
Polyacrylonitrile	-1.0000	35717.1
Poly(cis-1,4-butadiene)	3.5237	15497.2
Poly(vinyl chloride)	0.9777	15376.2
Polymethacrylonitrile	-0.3010	35486
Poly(vinyl acetate)	1.7782	15571.5
Poly(methyl acrylate)	2.0969	23036.3
Polychloroprene	2.8129	26151.4
Poly(vinylidene chloride)	0.1139	35204.5
Polytetrafluoroethylene	2.8451	19050.6
Poly(methyl methacrylate)	1.2304	22805.2
Polystyrene	2.6532	38935.3



カード型データベース

テーブルはDBの表現の一つ。  
各行のことをレコード  
各列のことをフィールド  
と呼ぶ。

DB化する前に、ポリマーを識別する  
コードをつけておいたほうが良い。

# 識別コード

横浜国大 授業用ソフトウェアーYMSB

Name	logPO2	CED
Polyethylene	3.1931	11162
Polypropylene	2.8921	9581
Poly(vinyl alcohol)	-2.3979	43384.9
Polyoxyethylene	2.7226	15640
Poly(vinyl fluoride)	2.6212	12537.3
Polyacrylonitrile	-1.0000	35717.1
Poly(cis-1,4-butadiene)	3.5237	15497.2
Poly(vinyl chloride)	0.9777	15376.2
Polymethacrylonitrile	-0.3010	35486
Poly(vinyl acetate)	1.7782	15571.5
Poly(methyl acrylate)	2.0969	23036.3
Polychloroprene	2.8129	26151.4
Poly(vinylidene chloride)	0.1139	35204.5
Polytetrafluoroethylene	2.8451	19050.6
Poly(methyl methacrylate)	1.2304	22805.2
Polystyrene	2.6532	38935.3

YNU-YMB16a  
info:  
Run Level: HSPiP Special user  
Experimental BP: -9999.99 K  
Temperature Ref: 298.15 °C  
 Show Charge  
Smiles Notation: XCCX  
Functional Group List: CH2CH2 1  
PCode Search: PCode=50000 Polyethylene  
MW BP[K] MP[K] AntA  
AntB AntC Tc[K]  
PrIMPai Vcfcm^3l IonKow  
Clear Properties  
to YSB

Copyright Hansen-Solubility.com

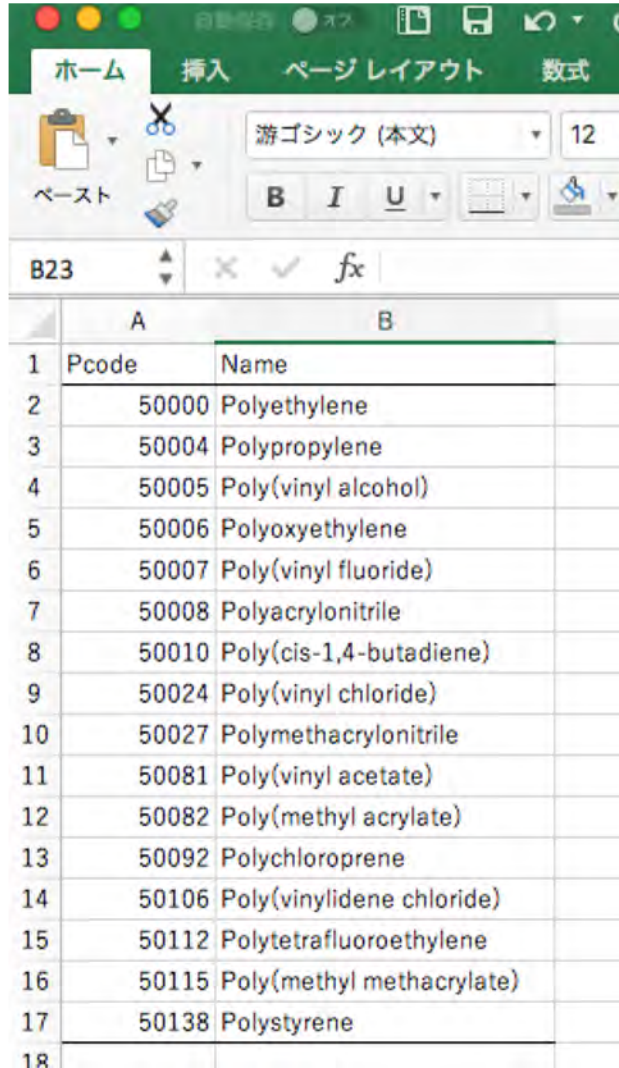
各ポリマーの識別コードを  
求めておく。

識別コードは、PolyInfoコードでも良い

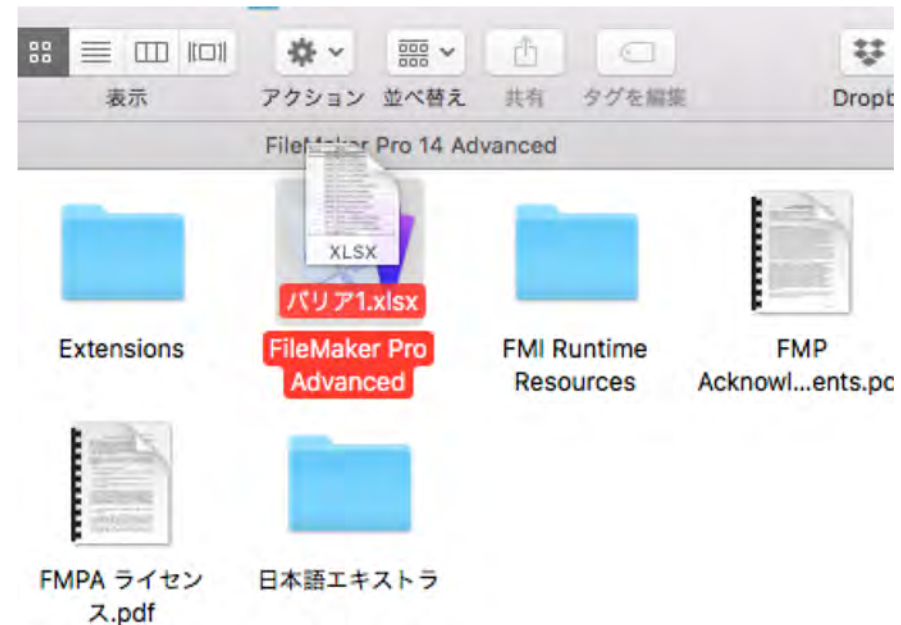
分子や高分子のユニットを描くと  
Hansenの溶解度パラメータ(HSP)  
研究Grの使っているコードを  
表示する。

この識別コードを用いてDBに  
横串を刺す。

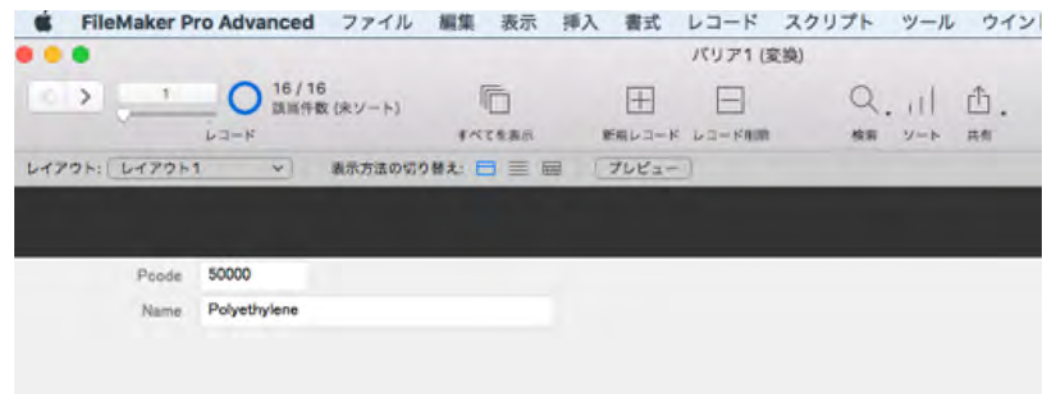
# Excelのテーブルをデータベースへ



	A	B
1	Pcode	Name
2	50000	Polyethylene
3	50004	Polypropylene
4	50005	Poly(vinyl alcohol)
5	50006	Polyoxyethylene
6	50007	Poly(vinyl fluoride)
7	50008	Polyacrylonitrile
8	50010	Poly(cis-1,4-butadiene)
9	50024	Poly(vinyl chloride)
10	50027	Polymethacrylonitrile
11	50081	Poly(vinyl acetate)
12	50082	Poly(methyl acrylate)
13	50092	Polychloroprene
14	50106	Poly(vinylidene chloride)
15	50112	Polytetrafluoroethylene
16	50115	Poly(methyl methacrylate)
17	50138	Polystyrene
18		

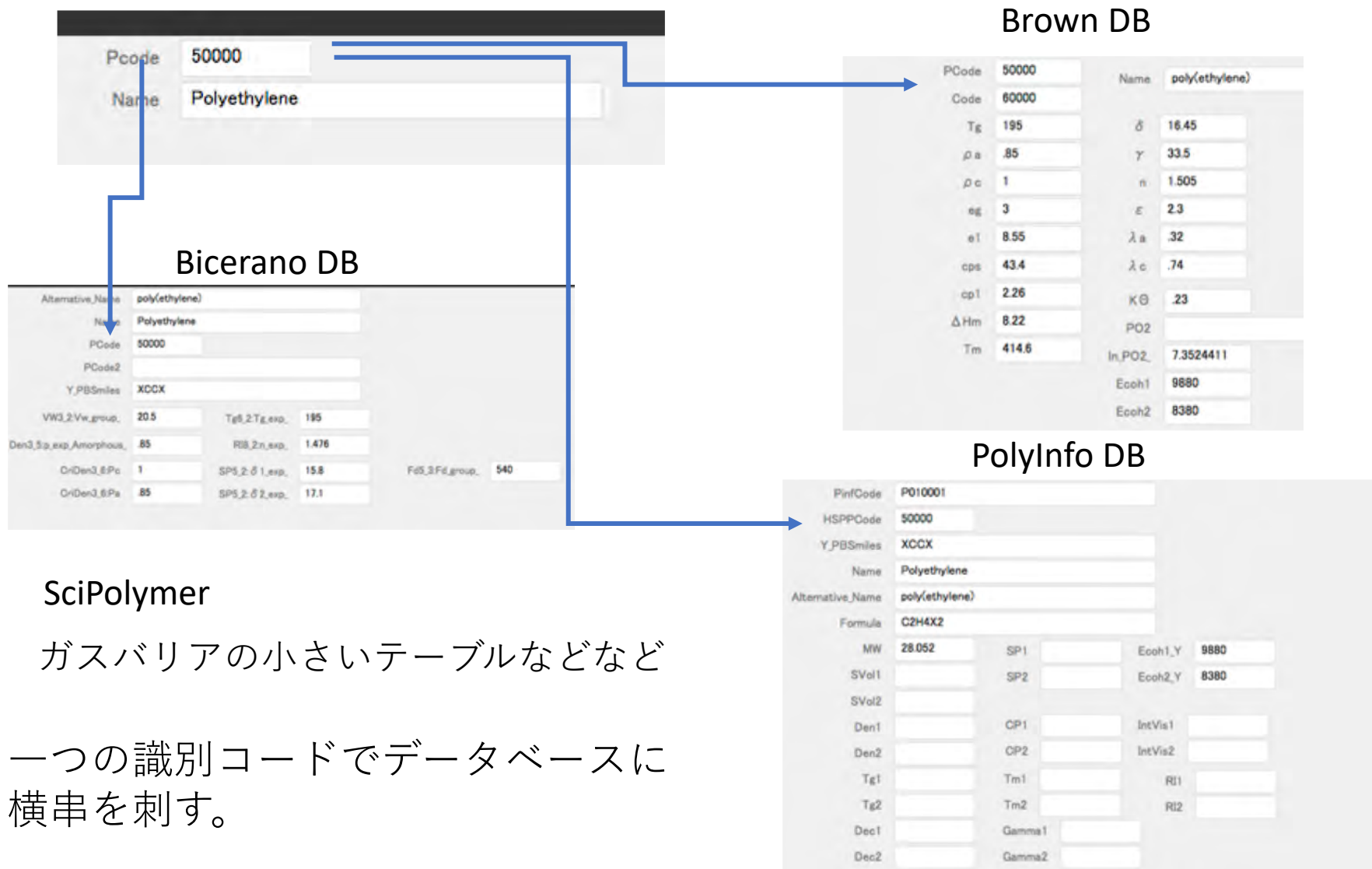


ExcelのファイルをFilemakerProにドロップ



データベース化される

# データベースのリレーショナル化



# リレーショナル化の利点

Pcode	50000	
Name	Polyethylene	Structure
Y_PBSmiles	XCCX	
In_PO2	7.3524411	Brown DB
P_O2_E	1560	SciPoly DB

様々なデータベースから必要なデータを1つのカードにまとめる事ができる。

# 溶解度パラメータと凝集エネルギー密度

Pcode: 50000  
 Name: Polyethylene  
 PinfCode: P010001

**SP値**

$\delta$ : 16.45  
 $\delta_1$ : 15.8,  $\delta_2$ : 17.1  
 SP1: , SP2:   
 $\delta_1$ : 15.8,  $\delta_2$ : 17.1  
 SP1: 14.8, SP2: 19.9

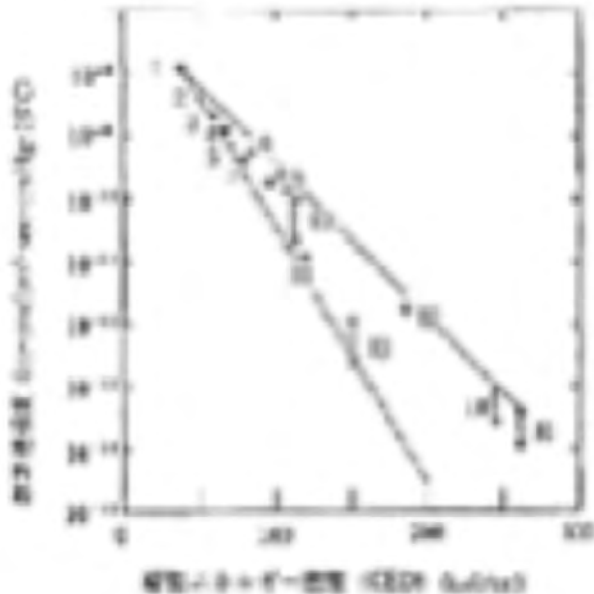
**凝集エネルギー密度**

Ecoh1: 9880, Ecoh2: 8380, Brown  
 Bicerano  
 PolyInfo  
 SciPolymer  
 Van Krevelen  
 Web Polymer

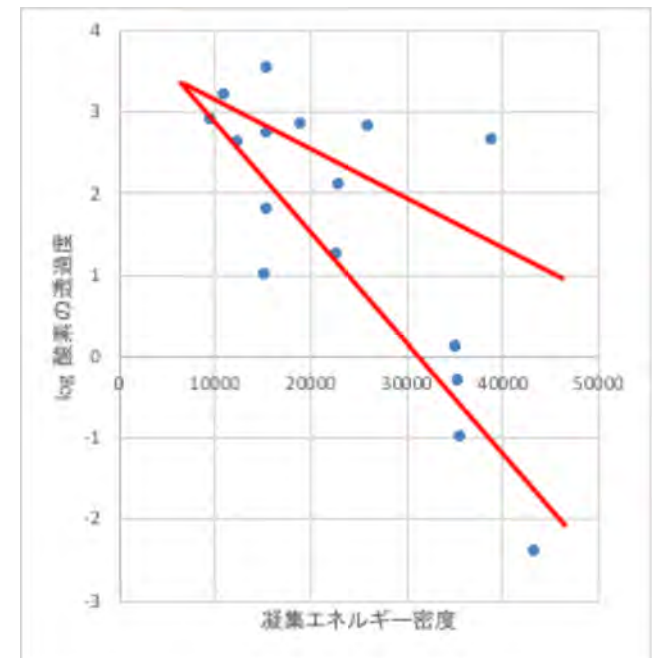
Ecoh1: 9880, Ecoh2: 8380  
 E\_COH1\_E: 9880, E\_COH2\_E: 8380  
 CohE1: 7100, CohE2: 12800



DBからExcel  
 テーブルへ  
 も簡単

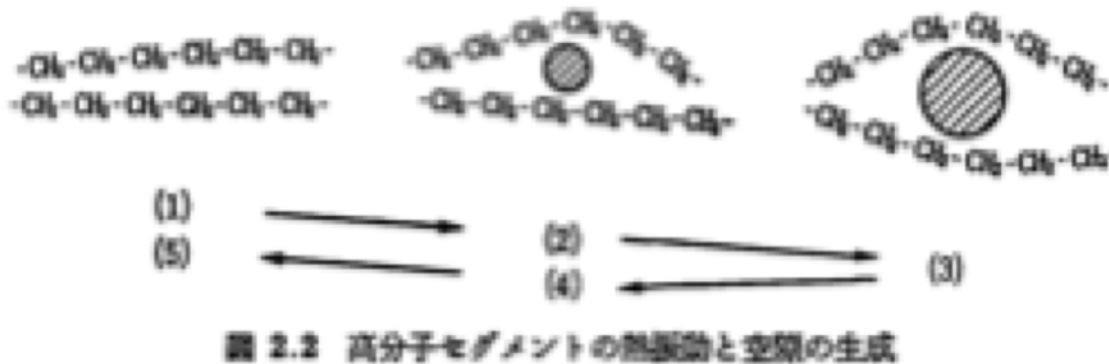


DBに基づく  
 最新データ



# 理論的な背景の検討

新しい機能膜



Tgの高いポリマーのセグメントは熱振動しにくい

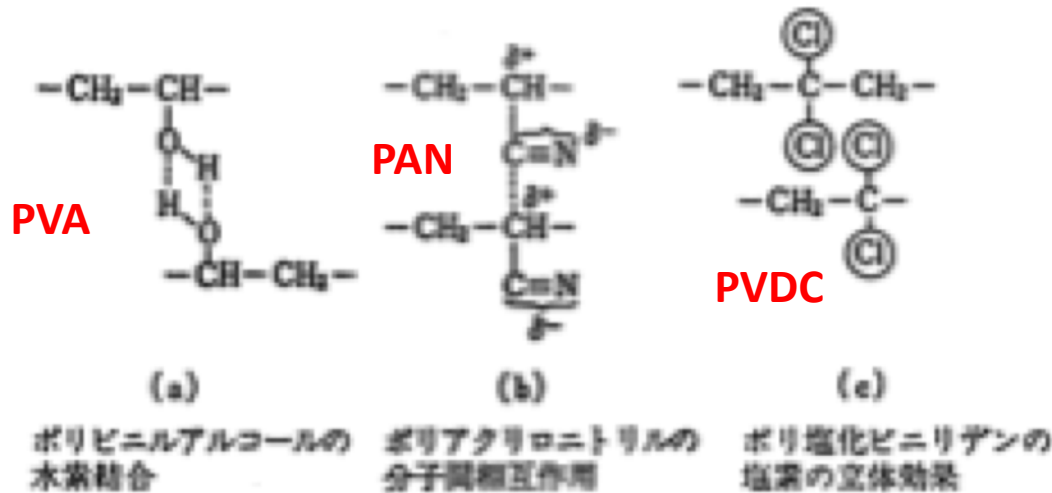


図 2.3 高分子分子間相互作用および置換基の立体効果

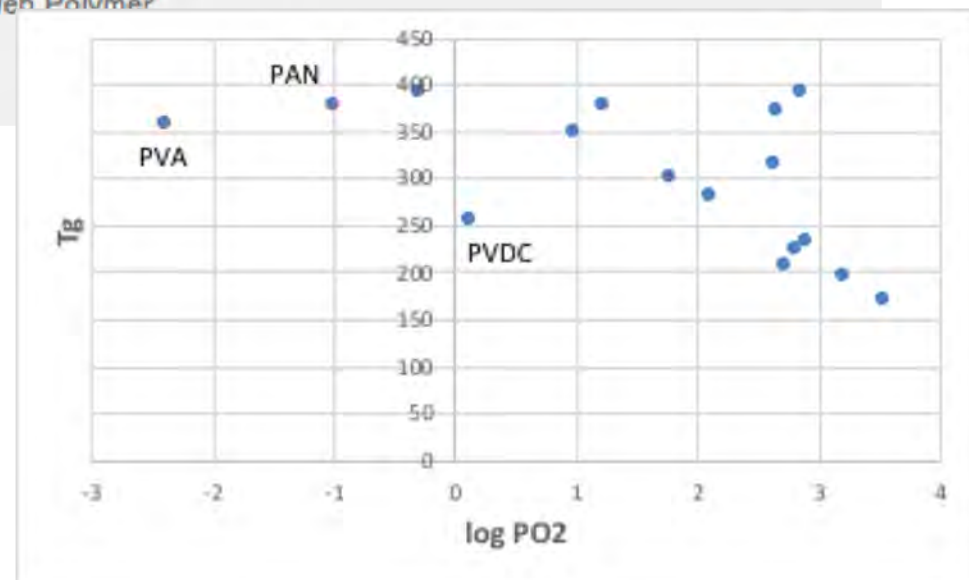
PVA:ポリビニルアルコール  
 PAN:ポリアクリロニトリル  
 PVDC:ポリビニリデン  
 クロライド



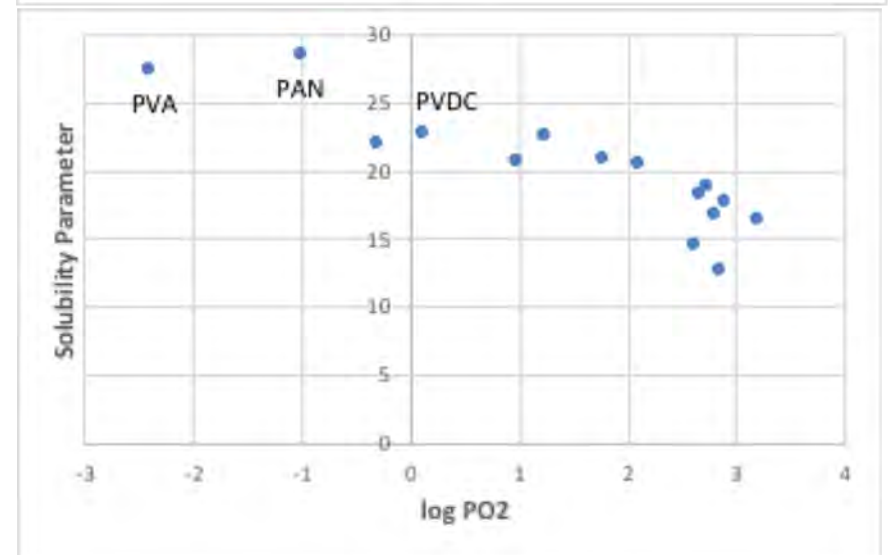
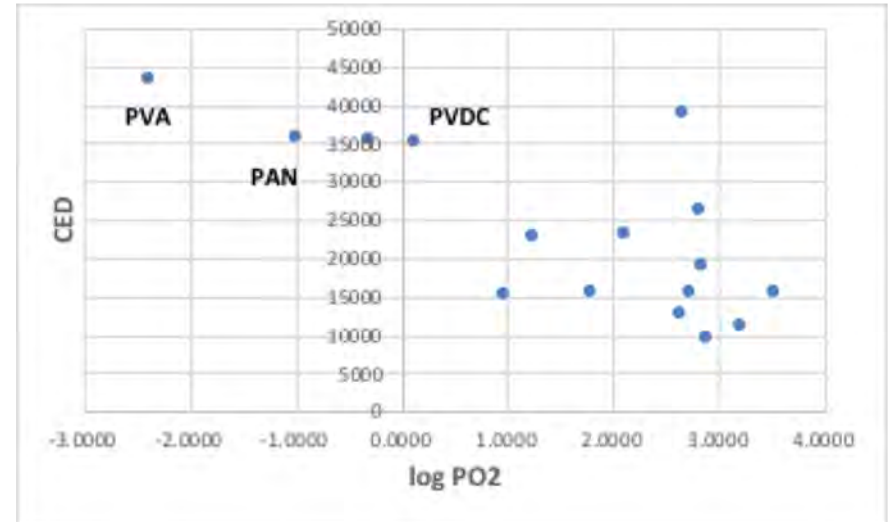
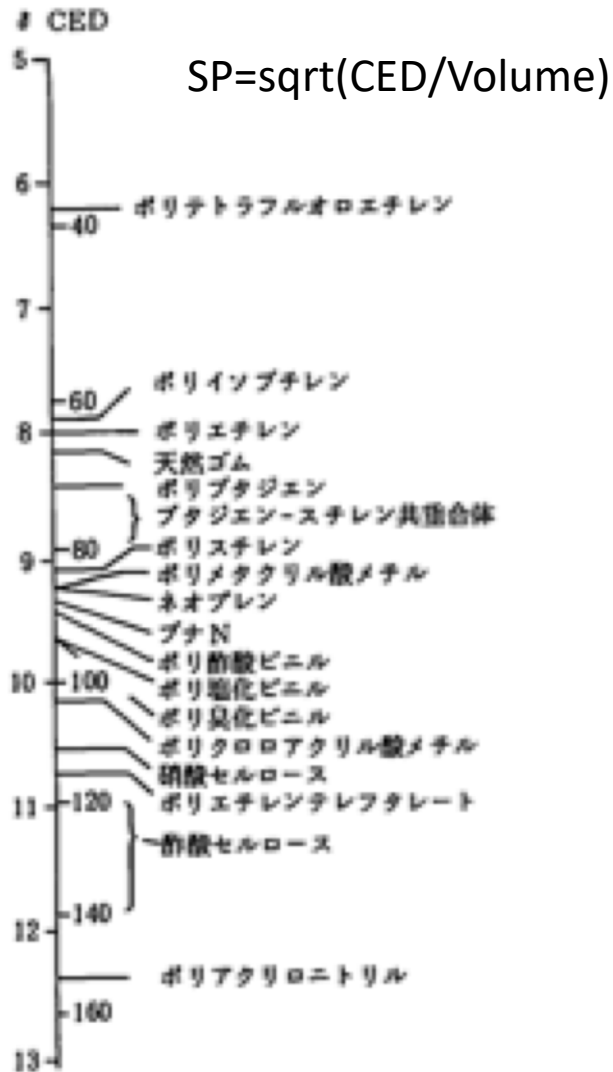
# リレーショナルDBからTg

Pcode	50000		
Name	Polyethylene	PinfCode	P010001
Tg6_2:Tg_exp_	195	Bicerano	
Tg	195	Brown	
Tg1		PolyInfo	
Tg2		SciPolymer	
TG_E	195	Van Krevelen	
Tg1	195	Web Polymer	
Tg2			
Tg1	237		
Tg2	253		

ガラス転移温度の高いポリマーは酸素を透過しにくい。  
(ある領域まで)  
PVDCは特異的にTg低い。



# 凝集エネルギー密度？ SP値？



SP値の方がより良く記述される

# 必要なSP値がデータベースに無かったら？

## FilemakerProの計算機能

Pcode 50005

CH2	1	CH3		O_C:O_O		Ph_NH		CHF	
CH_CH3		C2H5		C:O_O_C:O		NH2		CF2	
CH_C5H9		nC3F7		CH_OH	1	CN		CHCl	
CH_C6H11		iC3H7		CH_COOH		C:O_NH		CCl2	
CH_Ph		tC4H9		CH_HC:O		O_O:O_NH		F	
C_CH3_CH3		CH		Ph_COO		NH_C:O_NH		CF3	
C_CH3_Ph		C		O_CH2_O		Ph_C:O_NH		Cl	
_1_4 Ph		cycloC5H9		OH		C:O_NH2		CCl3	
_1_3 Ph		cycloC6H11		Ph_OH		C:O_N			
_1_2 Ph		Ph		C:OH		S			
_4_Benzyl		O		COOH					
CH2_Ph_CH2		C:O		NH					
Ph_CH2_Ph		O_C:O_G		CH_CN					
Ph_Ph		O_C:O_A		CH_NH2					

MWCalc 44.06

Volume Fedors 25.1

Fedors CED 38170      VanKrevelen CED 37833.672      Small F 240.168      VanKrevelen F 1174

VanKrevelen F\_div\_Vol 46.7729084      Small F\_div\_Vol 9.56844622      Fedors SP 38.9963733      VanKrevelen SP 38.8241885

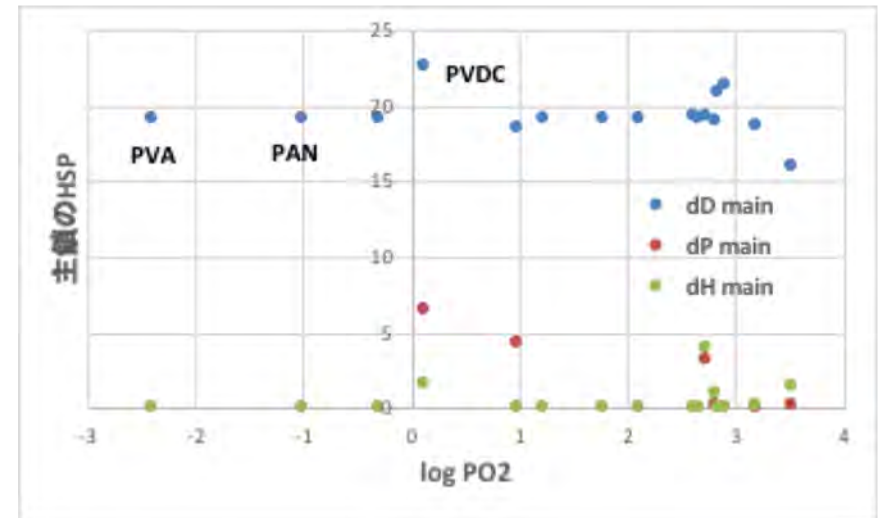
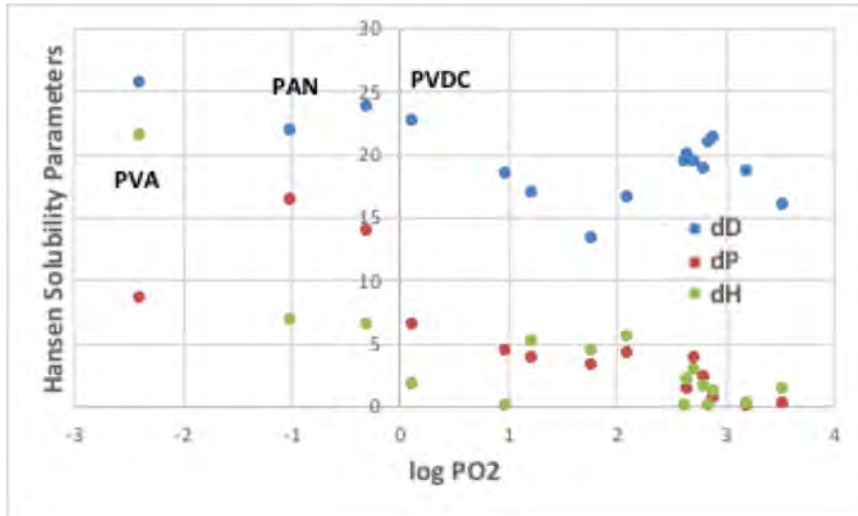
ポリマーを  
構成する  
原子団の数



SP値や  
凝集エネルギー  
密度を計算

既存の式を利用

# ハンセン溶解度パラメータ(HSP)による解析

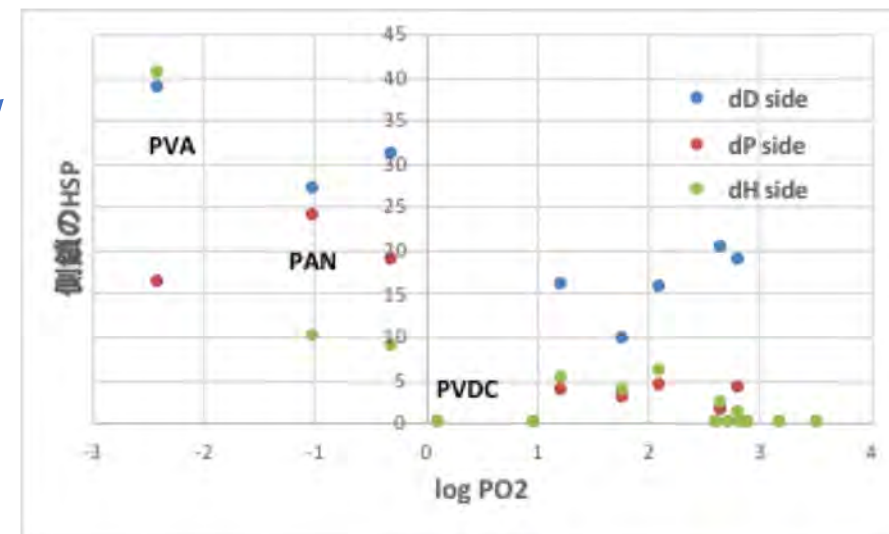


PVDCは $\text{CCl}_2$ を主鎖にカウント

PVAは水素結合項(dH)が大きい  
 PANは分極項(dP)が大きい  
 PVDCは分散項(dD)が大きい



















主鎖の影響は少なく、側鎖のHSP  
 が大きく寄与

MIには一番適している識別子



# 構造化しないことによる構造化

TABLE IX  
SURVEY OF GROUP CONTRIBUTIONS IN ADDITIVE MOLAR QUANTITIES

Group	Z	M	V <sub>r</sub>	V <sub>w</sub>	C <sub>p</sub>	C <sub>f</sub>	ΔS <sub>m</sub>	Y <sub>g</sub>	Y <sub>m</sub>	E <sub>comb</sub>	F <sub>ESM(1)</sub>	F <sub>s</sub>	Group	J	R <sub>LL</sub>	R <sub>GD</sub>	P <sub>LL</sub>	X	U <sub>h</sub>	U <sub>l</sub>	H <sub>h</sub>	ΔG <sup>o</sup>	V <sub>d,1/2</sub>	J/mol		
																								g/mol	cm <sup>3</sup> /mol	cm <sup>3</sup> /mol
<i>Bifunctional hydrocarbon groups</i>													<i>Bifunctional hydrocarbon groups</i>													
-CH <sub>2</sub> -	1	14.03	16.37	10.23	25.55	30.4	(9) <sup>2</sup>	2.7 <sup>4</sup>	5.7 <sup>7</sup>	4.190	272	39.0	-CH <sub>2</sub> -	2.35	4.65	7.83	4.65	11.35	880	675	420	-22,000 + 102 T	9.3			
-CH(CH <sub>3</sub> )-       symm.   asymm.	1	28.05	32.7	20.45	46.5	57.85	9.0	8.0	13.0	10.060	495	78.0	-CH(CH <sub>3</sub> )-       symm.   asymm.	4.7	9.26	15.62	9.26	23.5	1875	1650	1060	-48,700 + 215 T	18.5			
-CH(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )-	1	82.14	82	53.28	110.8	147.5		30.7		(24,000)	1430	208.3	-CH(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )-	25.65	43.77	(25.65)	63.5	(4600)				-73,400 + 548 T	-			
-CH(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> )-	1	96.17	101	63.58	121.2	173.9		41.3		1680	244.9		-CH(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> )-	11.15	30.30	51.75						-18,400 + 680 T	60			
-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -	1	90.12	84	52.62	103.2	144.15	9.5	36.1	48	31,420	1561	211.9	-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -	19.4	29.03	50.97	29.12	62	4000	4050	3600	15,200 + 287 T	56.5			
-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> -	1	42.08	49	30.67	68.0	81.2	19 <sup>3</sup>	8.5726 <sup>5</sup>	12.1736 <sup>5</sup>	13,700	966	117.0	-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> -	7.1	13.87	23.36	13.86	36	2650	2350	1620	-72,000 + 330 T	25.5/35 <sup>6</sup>			
-C(CH <sub>3</sub> )(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )-	1	104.14	100.5	62.84	122.7	167.5		51	54	35,060	1752	250.9	-C(CH <sub>3</sub> )(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> )-	23.8	33.44	58.41	33/72	74.5	6100			61,000 + 402 T	56			
-CH=CH-       trans	2	26.94	27	16.94	37.3	42.8		12.5	3.8	8.0	10,200	454	67.0	-CH=CH-       cis	0.5	8.88	15.50	8.9	13.2	1400			76,000 + 76 T	18		
-CH=C(CH <sub>3</sub> )-       trans	2	40.06	42.8	27.16	60.05	74.22		0.1	7.4	11	14,500	(704)	106.0	-CH=C(CH <sub>3</sub> )-       cis	2.9	13.49	23.24		25.6	2150			42,000 + 183 T	21.5		
-C≡C-	2	24.02	25	16.1			16	9.1	13		71,600	435	56.0	-C≡C-				14	1240			36,000 + 190 T				
	4	82.14	86	53.34	103.2	147.5		19	31		1410	205.9		8.0	25.70	44.00						-96,400 + 578 T				
	4	76.09	65.5	43.32	78.8	113.1	(5)	20/41 <sup>6</sup>	38/56 <sup>6</sup>	25,140	1346	172.9		16.3	25.03	44.8	25.0	50	4100	3300	3200	100,000 + 180 T	51/72 <sup>6</sup>			
	3	76.09	69	43.32	78.8	113.1		25/34 <sup>6</sup>	31/42 <sup>6</sup>	(26,000)	1346	172.9		25.00	44.7			50	4050	3100		100,000 + 180 T	41/65 <sup>6</sup>			
	2	76.09	65.5	43.32	78.8	113.1					1346	172.9		24.72	44.2			50				100,000 + 180 T				
	4	104.14	104	65.62	126.8	166.8	5	54	(67)	(40,000)	1900	250.5		34.8	61.0			75	6100	4800		33,000 + 394 T	82			
	4	90.12	87	54.47	102.75	140.1		35	(45)		(1600)	211.9		20.9	52.7			63				66,500 + 387 T				
-CH <sub>2</sub> -       symm.   asymm.	5	90.12	80	53.55	104.15	143.5				29,330	1618	211.9	-CH <sub>2</sub> -       symm.   asymm.	18.65	29.53	52.06	29.65	61	4980			78,000 + 282 T				
-CH <sub>2</sub> -       -CH <sub>2</sub> -	6	104.14	97	63.78	129.5	173.9		25	47	33,520	1890	250.9	-CH <sub>2</sub> -       -CH <sub>2</sub> -	21.0	34.03	59.32	34.3	73	5860			56,000 + 384 T	7.3			
	9	166.21	150	96.87	182.95	256.6		65	85	54,470	2964	384.8		34.95	54.56	96.9	54.65	111	9080			178,000 + 462 T	(114)			
	8	152.18	134	86.64	157.6	226.2		70	99	90,280	3692	345.8		32.6	58.06	89.6	50.9	100	8300			200,000 + 360 T	122			
	4	228.22	208	130	236	339	10	118	173	(92,500)	4000	518.7		74.9	134.0			152	12650			299,000 + 538 T	93			

## Van Krevelen、原子団寄与法によるポリマー物性の推算

原子団の取り方は研究者によってマチマチ。  
構造化してしまうと、フレキシビリティが無くなる。

# ダイナミックな原子団生成

構造化しないことによって  
フレキシビリティを保つ

## Smiles

C(F)(F)C(F)(F)OCF

FC(F)C(F)(F)OCF

FCOC(F)(F)C(F)(F)

O(CF)C(F)(F)C(F)F

## Polymer Smiles

XCCX

XC(F)(F)C(F)(F)X

目的変数によっては、原子団の取り方を変えないと精度が出ないことがある。

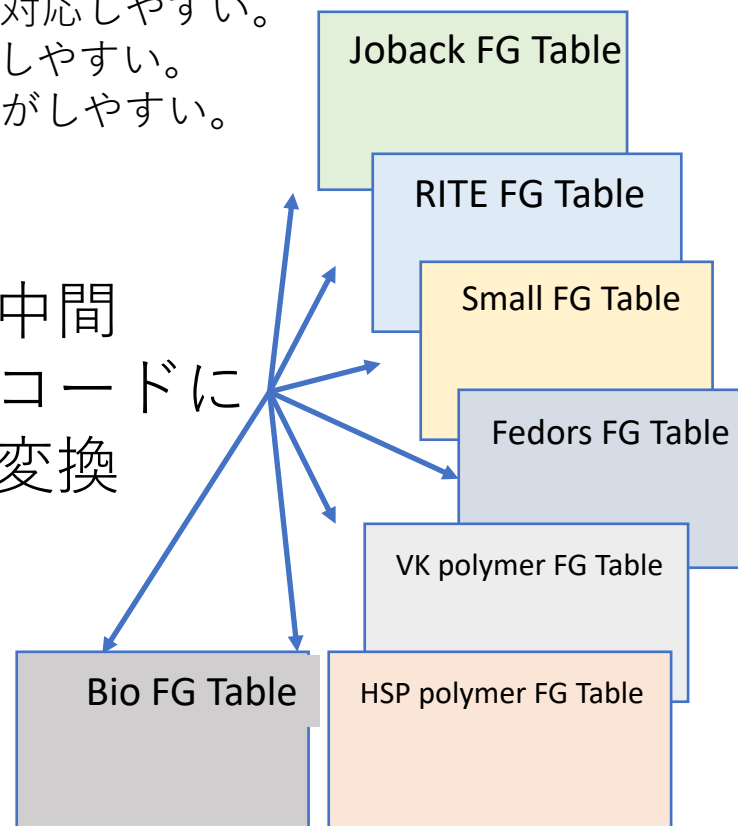
(推算式を構築するまでわからない)

説明変数によっては構造化しない方が  
良いものもある。

人為的なエラーが無い。  
原子団の増減に対応しやすい。  
用途ごとに対応しやすい。  
研究者間の連携がしやすい。

YMB

中間  
コードに  
変換



YMB: Yamamoto Molecular Break

# Polymer Smilesの解析ツール

## Smiles: Simplified Molecular Input Line Entry Syntax

分子を一行で表現できるので、テーブルで扱うのに便利

- 1: 水素は描かない
- 2: 枝分かれは()で表現
- 3: 二重結合は=, 3重結合は#
- 4: 環は適当なところで切断し同じ数字をつける
- 5: ポリマーの繰り返しユニットはXで囲む


Pcode	Name	Psmiles
50000	Polyethylene	XCCX
50004	Polypropylene	XC(C)CX
50005	Poly(vinyl alcohol)	OC(CX)X
50006	Polyoxyethylene	XCCOX
50007	Poly(vinyl fluoride)	XC(CX)F
50008	Polyacrylonitrile	XC(CX)C#N
50010	Poly(cis-1,4-butadiene)	XCC=CCX
50024	Poly(vinyl chloride)	XCC(X)Cl
50027	Polymethacrylonitrile	CC(CX)(X)C#N
50081	Poly(vinyl acetate)	CC(OC(CX)X)=O
50082	Poly(methyl acrylate)	O=C(C(CX)X)OC
50092	Polychloroprene	ClC(CX)=CCX
50106	Poly(vinylidene chloride)	ClC(X)(CX)Cl
50112	Polytetrafluoroethylene	FC(X)(C(X)(F)F)F
50115	Poly(methyl methacrylate)	XCC(C)(C(=O)OC)X
50138	Polystyrene	C1=CC(C(CX)X)=CC=C1



## 原子団のテーブルへ変換

CH2	CH	C	CH:	C:	CH3_C_CH3	O
2	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	1	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	1	0	0	0	0	0
2	0	0	2	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
1	1	0	0	0	0	0
1	1	0	0	0	0	0
2	0	0	1	1	0	0
1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0

# まとめ

表計算のテーブルからDBへ  
DBから表計算のテーブルへ  非常に簡単！

テーブルが増えてきたら、リレーショナルDB化  
横串を刺すための識別コードを定義する。

ツールの作成。

ポリマーの識別は非常に大変。  
描いた構造、**Polymer Smiles**からの検索ツールの開発

**Polymer Smiles**の解析ツール（原子団へ分割）開発

原子団からの物性推算式の開発と、**DB**とのリンク