

SYNTHIA

データシート

Synthiaは先進の定量的構造物性相関 (Quantitative Structure-Property Relationships; QSPR) を用いることにより高分子の物性を計算します。候補高分子のあらゆる物性を速やかにスクリーニングし、コポリマーブレンドの物性予測を可能にします。

SYNTHIAは何をするのか？

Synthiaは既知の相関関係を用いてあらゆる高分子物性を評価します。このような経験的な相関メソッドを用いることにより、数多くの高分子あるいは組成の異なるコポリマーにおいて、目的とする物性を速やかにスクリーニングできます。QSPRは膨大な数の物性を速やかに提供でき、かつモデリングツールとしては最も操作しやすいメソッドです。

定量的構造物性相関を理解することにより、合成・性能評価すべき候補高分子に優先順位をつけることができます。以前のQSPRアプローチは、官能基の寄与を用いた実測の構造物性相関に統計的内挿法を適用するものでした。このようなアプローチによる物性予測は特定の既知化学基で構成される高分子にしか適用できませんでした。

SynthiaはQSPRにおいて著しい進歩を遂げました。Synthiaは位相に関する情報、特にグラフ理論から得られる結合性指数を用いています。それゆえ、個々の元素や結合を基礎の本質に据えたメソッドであると言えます。官能基の寄与に関するデータベースを必要とすることなく9種（炭素、水素、窒素、酸素、ケイ素、硫黄、フッ素、塩素、ホウ素）の元素から構成される高分子の物性を予想することが可能です。

Synthiaはダウ・ケミカル社のJozef Bicerano博士の研究成果に基づいたものであり、実際の研究において広く活用されてきました。

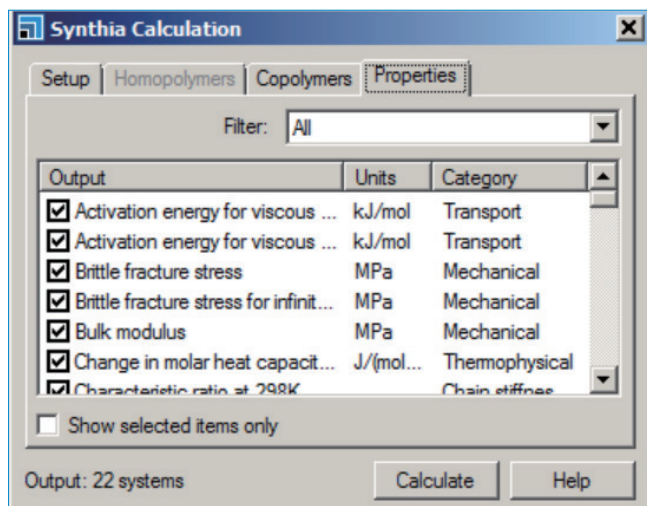
	A	B	C	D	E	F	G	H
	Monomer 1	Mole fraction 1	Monomer 2	Mole fraction 2	Temperature	Molecular weight	Repeat unit molecular weight (Synthia)	Repeat unit length (Synthia)
1	ethylene	0.00000000	oxymethylene	1.00000000	298	1.000000e+005	44.05339813	3.1222722
2	ethylene	0.00000000	oxymethylene	1.00000000	298	1.000000e+005	30.02639771	2.1988945
3	ethylene	0.10000000	oxymethylene	0.90000000	298	1.000000e+005	42.45345688	3.0615210
4	ethylene	0.10000000	oxymethylene	0.90000000				
5	ethylene	0.20000000	oxymethylene	0.80000000				
6	ethylene	0.20000000	oxymethylene	0.80000000				
7	ethylene	0.30000000	oxymethylene	0.70000000				
8	ethylene	0.30000000	oxymethylene	0.70000000				
9	ethylene	0.40000000	oxymethylene	0.60000000				
10	ethylene	0.40000000	oxymethylene	0.60000000				
11	ethylene	0.50000000	oxymethylene	0.50000000				
12	ethylene	0.50000000	oxymethylene	0.50000000				
13	ethylene	0.60000000	oxymethylene	0.40000000	298	1.000000e+005	38.95375524	2.7977855

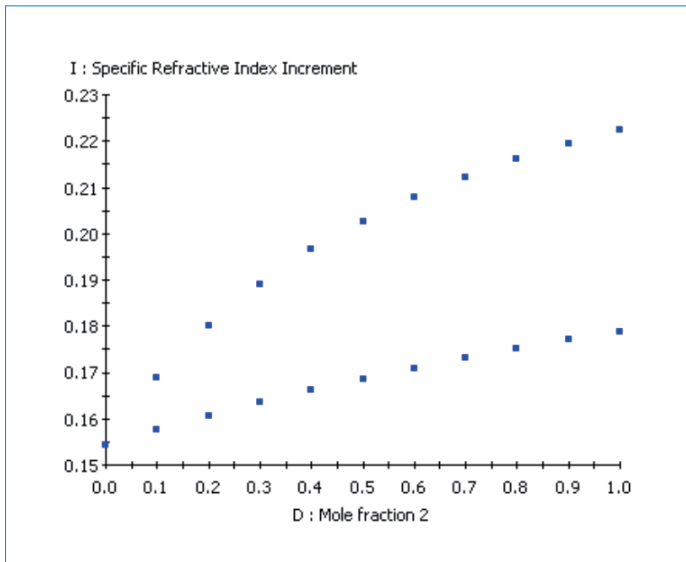
Synthiaの結果はスタディテーブルに保存され、スタディテーブルツールを利用して結果の保存、プロット、分類ができます。スタディテーブル上でモノマーを編集し物性をアップデートすることにより新規の繰り返しユニットのスクリーニングを速やかにこなすメソッドが構築できます。

MATERIALS STUDIOの利点

特徴

- 経験的なメソッドの活用による高分子物性の速やかな予測
- バルク状アモルファスホモポリマーやランダムコポリマーの熱力学的、機械的、輸送の物性を広範囲に予測
- 関心対象となる物性が報告されていない新規高分子に対する予測
- ホモポリマー／コポリマー両者に対し、スタディテーブルや図表による計算結果を検討
- スタディテーブルに構造記述子およびQSARライセンスを導入し、カスタム相関関係を作成
- 以下の物性の計算
 - 構造物性
 - 熱力学的物性
 - 電子的、光学的、磁気的物性
 - 機械的物性
 - 高分子鎖の剛性およびもつれの物性
 - 輸送物性





AcrylamideとN-benzyl methacrylamide (上線) および N-methyl methacrylamide (下線) のモル分率に対する屈折率

参考文献

J. Bicerano, Prediction of Polymer Properties, Third Edition, Marcel Dekker Inc. : New York (2002).

ダッソー・システムズの**3D**エクスペリエンス・プラットフォームでは、**12**の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、**3D**エクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語) をご参照ください。



©2014 Dassault Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTED, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および INETVIBES はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の登録商標または商標です。その他のブランド名や製品名は、各所有者の商標です。画面による表示の承認が必要です。