DATASHEET

MS-SYNTHIA

Synthiaは先進の定量的構造物性相関（QuantitaveStructure-Property Relationships; QSPRs）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。

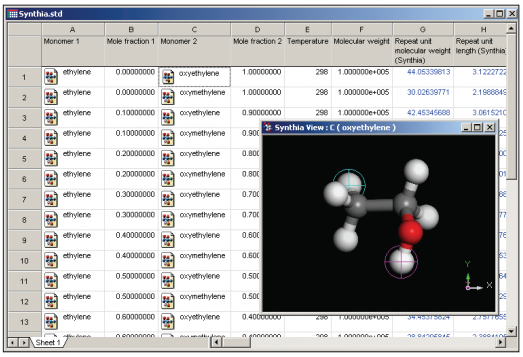
SYNTHIAは何をするのか？

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。



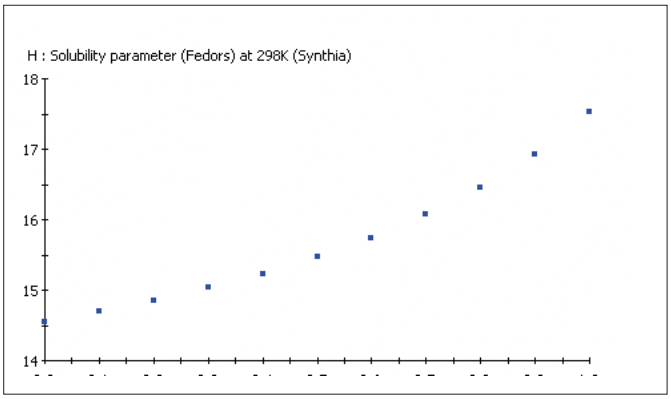
Synthiaの結果はスタディテーブルに保存され、スタディテーブルツールを利用して結果の保存、プロット、分類ができます。スタディテーブル上でモノマーを編集し物性をアップデートすることにより新規の繰り返しユニットのスクリーニングを速やかに行なうメソッドが構築できます。

MATERAILSSTUDIO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、輸送的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



２種類のモノマーユニットから成るランダムコポリマーにおける溶解性パラメーターのモル分率依存度のプロットを示す。 Synthiaモジュールは、このような複雑な物性をも速やかに、かつ容易に算出できます。

Materials Studioに関する詳細については、下記URLを参照してください。

http://accelrys.co.jp/products/materials-studio/

© 2011 Accelrys Software Inc. すべてのブランド名や製品名は、各所有者の商標です。
アクセルリス株式会社 〒 100-0013 東京都千代田区霞が関3-7-1 霞が関東急ビル17F Tel: 03-5532-3800