

BIOVIA COSMOtherm

分子液相溶解性质预测

产品手册



热力学性质预测

BIOVIA COSMOtherm是用于预测液体混合物热力学性质的软件。调用量子力学计算结果预测化学工程，化学和环境分析相关的溶液热力学性质。能够预测溶解度，活度系数和蒸气压力等。

无需实验数据即可预测

BIOVIA COSMOtherm基于COSMO-RS理论模型，无需实验数据即可精准预测热力学性质。所有预测信息均源自化合物COSMO文件，这些文件可以用量子化学程序（例如TURBOMOLE）生成并存储复用。

客户收益

- 虚拟预测指导实验，有效节约实验时间
- 引入虚拟筛选快速评价海量数据，扩大采样空间有效筛选潜在溶剂、助溶剂，夹带剂和其他添加剂。
- 广泛适用，拓展新兴化学领域无需额外调整。

主要应用领域

- 化学工程
- 药物设计与开发
- 化学
- 环境科学
- 配方
- 量子化学

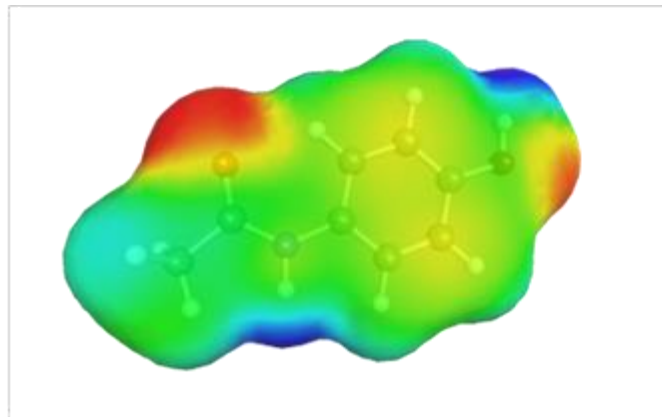
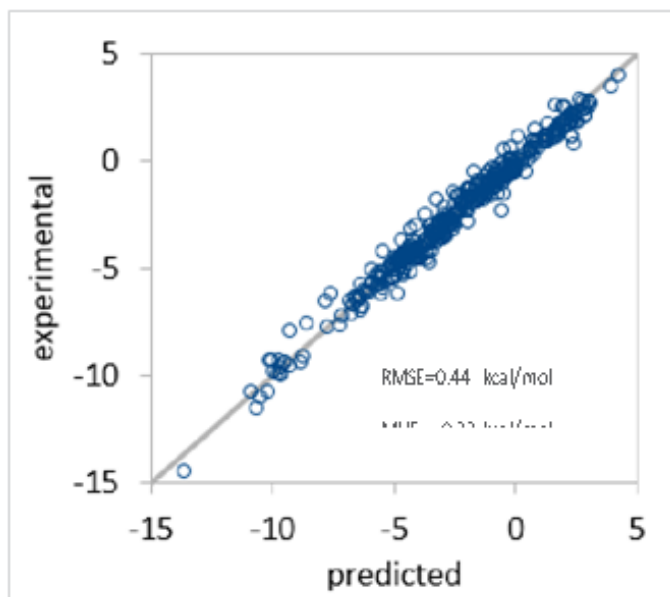


图1：扑热息痛分子COSMO表面

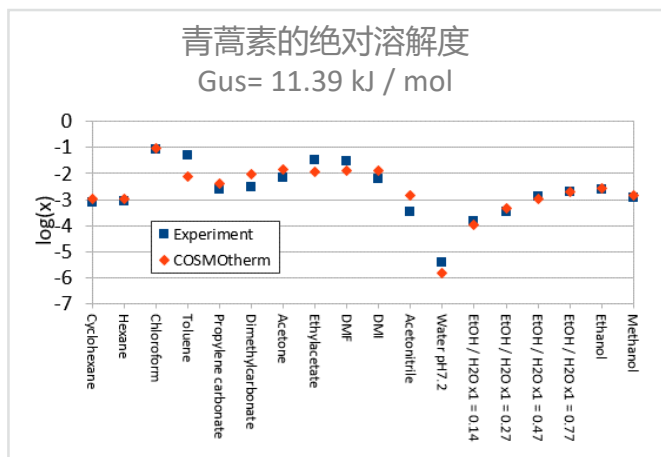
- 溶解度（固体，液体和气体）
- 溶解自由能和蒸汽压
- 一般活性和分配系数
- 多相多组分液体分配（萃取）
- 液相酸度系数 pK_a 和化学反应平衡
- 不同混合物中的构象布居
- 汽液平衡(VLE)、液液平衡(LLE)、固液平衡(SLE)相图
- 液-液界面转移自由能
- 土壤吸附和其他环境特性
- 界面张力，临界胶束浓度
- 胶束，微乳液和生物膜（基于BIOVIA COSMOplex）



示例: 313 有机化合物的 G_{hydr} 预测精度展示

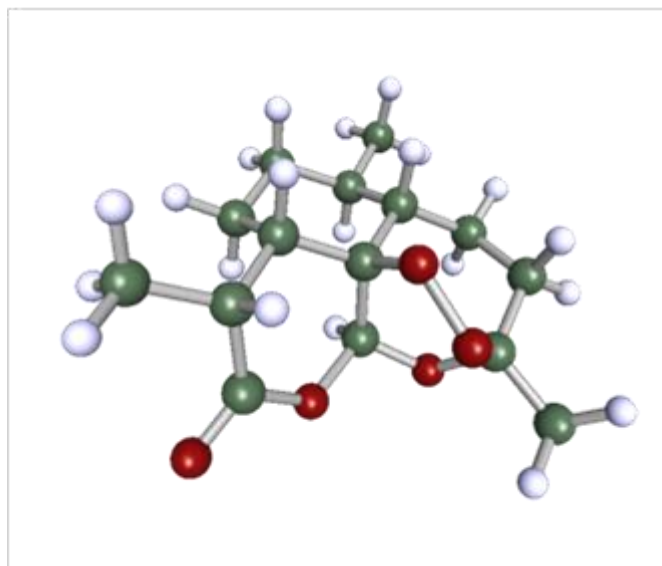
溶解度和配分函数

寻找合适的溶剂，助溶剂或反溶剂是化学工作者经常面临的工作挑战。BIOVIA COSMOtherm使您能够在实验室测量之前筛查大量候选物和混合物。相对溶解度和分配系数可以进行筛选，而无需实验数据。



使用BIOVIA COSMOtherm能够

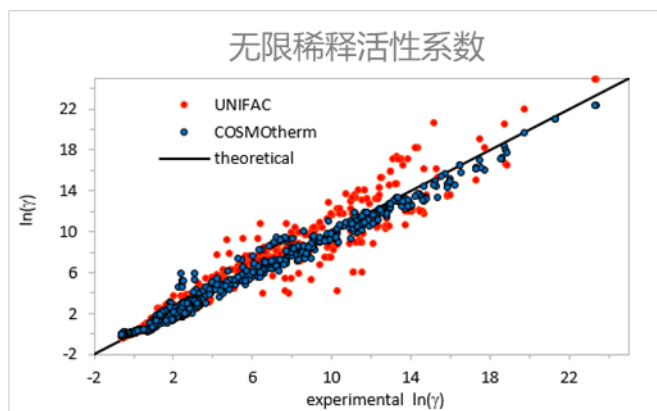
- 筛选最佳溶剂或溶剂组合
- 优化分配行为，例如，用于液相分离
- 寻找合适的夹带剂或助溶剂



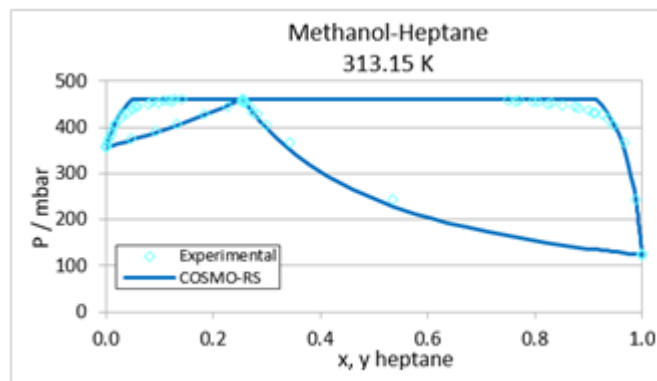
活度系数和相图

缺乏有效实验数据时，化学工程师通常会依赖预测。

BIOVIA COSMOtherm可以预测不同温度和浓度条件下任意混合物中溶质的活度系数。这些预测结果能够与实验或预测的蒸气压一起，用以绘制完整相图。由于其物理方法的良好通用性，BIOVIA COSMOtherm甚至能够可靠预测多种复杂分子的相关性质。

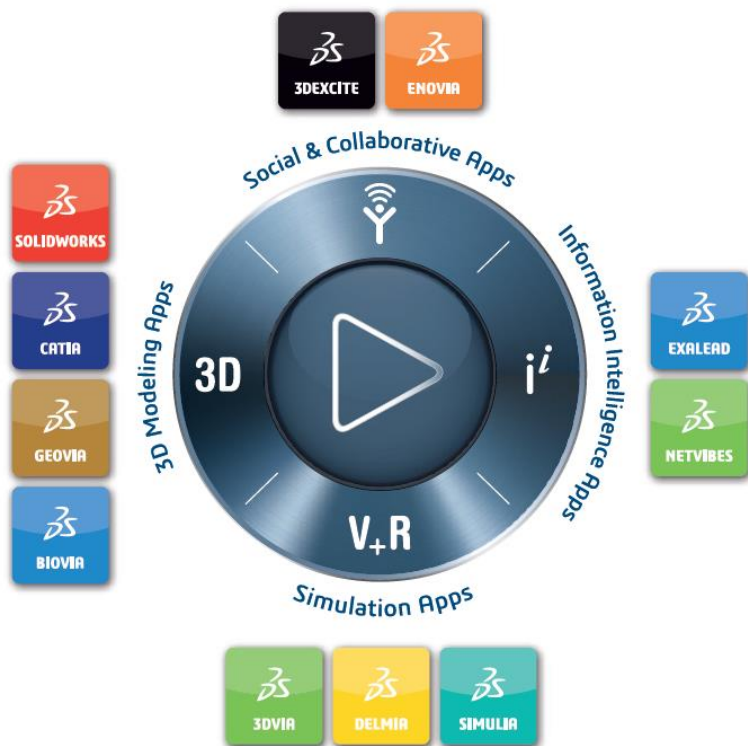


Renan P. Gerber and Rafael de P. Soares, Ind. Eng. Chem. Res. DOI: 10.1021/ie901947m with COSMOtherm1501 predictions



BIOVIA COSMOtherm核心优势

- 含水或复杂溶剂体系的预测准确性（药物或药物候选）
- 开箱即用，精准预测无需系统参数设定或调整
- 化学体系广泛适用，良好的预测性
- 天然蒸汽压预测



我们的 **3DEXPERIENCE®** 平台能为各品牌应用注入强大动力，服务于 11 个行业，并提供丰富多样的行业解决方案体验。

作为一家为全球客户提供 **3DEXPERIENCE** 解决方案的行业领导者，达索系统致力于为企业和客户提供虚拟空间，助力打造可持续创新。其全球领先的解决方案改变了产品在设计、生产和技术支持上的方式。达索系统的协作解决方案更是推动了社会创新，扩大了通过虚拟世界来改进真实世界的可能性。达索系统为 140 多个国家超过 17 万个不同行业、不同规模的客户带来价值。如欲了解更多信息，敬请访问：www.3ds.com。



3DEXPERIENCE®

© 2015 年达索系统。保留所有权利。3DEXPERIENCE®、Compass 图标、3DS 图标、CATIA、SOLIDWORKS、ENOVIA、DELMIA、SIMULIA、GEOVIA、EXALEAD、3D VIA、3DSWMM、BIOVIA、NETVIBES 和 3DEXCITE 是达索系统或其子公司在美国和/或其他国家或地区的注册商标。所有其他商标均由其各自的所有者拥有。使用任何达索系统或其子公司的商标必须经其明确书面批准。

DASSAULT SYSTEMES | The **3DEXPERIENCE®** Company



ACQTEC
研索仪器

研索仪器科技（上海）有限公司

上海市盈港东路7799号虹桥宝龙中心A座2101A室

<http://www.3dsbiovia.com.cn>

info@acqtec.com

+86 (21) 3412 6269

400-050-5810