



创腾科技



全面预测任意组份的混合溶液热力学性质

Biovia COSMOlogic 系列产品

AI Driven
Innovation & Quality

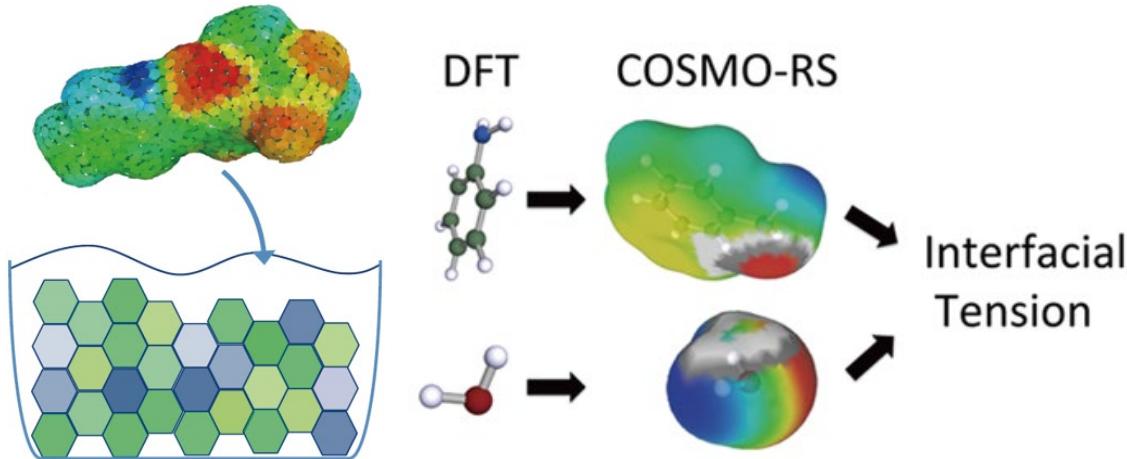
功能简单易用

计算高效便捷

智能创新带动卓越品质 · 共领行业数字创新新纪元

Biovia COSMOlogic产品线

COSMOtherm	基于COSMO-RS理论, 调用量子化学计算结果或 COSMObase 数据库, 可计算得到所有与化学工程、化工和环境分析及生命科学建模相关的热力学数据。
COSMOmic	预测胶体和生物膜中的溶质(可以是离子)的性质。
COSMOperm	专门预测薄膜渗透率的工具。
COSMOplex	适用于预测复杂自组织非均相体系的性质。
COSMObase	包含13157种化合物及超过53000个构象异构体的数据库。
COSMObaseLL	包含421个阳离子和109个阴离子的离子液体数据库。
COSMObaseFF	包含2000多种香料和香精数据库。
COSMOquick	无需进行昂贵的量化计算即可产生 COSMOtherm 计算所需的σ-profile, 快速精确进行溶解度预测, 溶剂和共晶的筛选工作。
COSMOconf	自动搜索COSMO溶剂化效应和气相环境中的构象异构体。



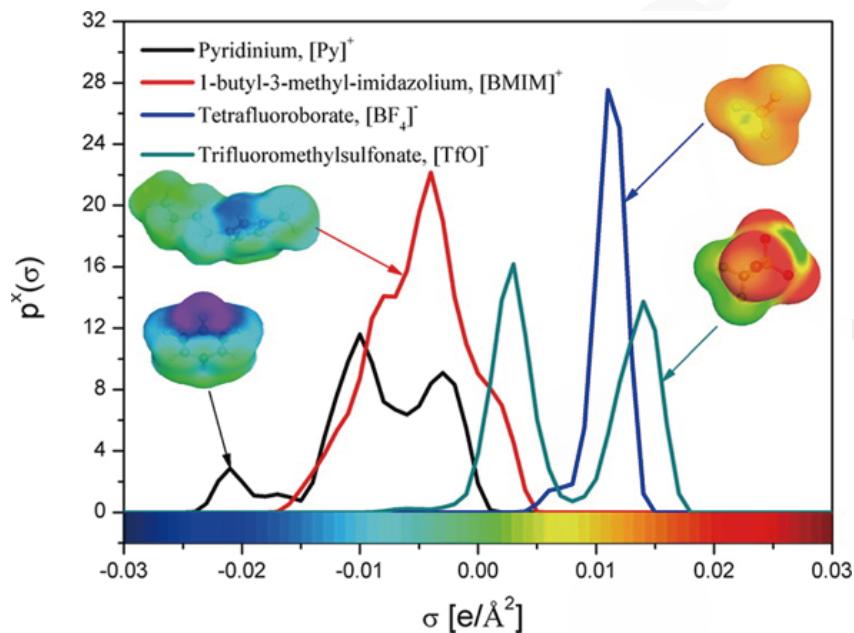
■ Reference: J. Chem. Theory Comput. 2014, 10, 3401–3408

产品简介

Biovia COSMOlogic系列产品是一套在COSMO-RS理论基础上发展起来的适用于任意混合物体系的软件。它基于量子化学计算得到的精确性较高的数据来预测溶液的热力学性质，包括：活度系数、[汽液(VL)、液液(LL)、固液(SL)]平衡、共沸点、蒸馏分离性、溶解度[气体、液体、固体(包括晶体)]、蒸汽压、汽化热、亨利常数、溶质在两个任意溶剂中的分配系数、混合热(混合物的过剩焓及自由焓)、溶液中反应热力学、化学势、化学势梯度、纯化合物的密度与粘度等。与常规的分子动力学(Molecular Dynamic)相比，COSMO-RS技术被证明更为准确，并且计算速度比MD提高了3到4个数量级。该理论将量子化学和统计热力学以其独特的方式相结合为客户在溶剂(包括离子溶剂)筛选，药物分子筛选，锂离子

电池，化工流程设计等领域内的研究提供支持，帮助用户快速准确地预测溶液的热力学性质。

Biovia Materials Studio软件中量子力学模块DMol³可以与**Biovia COSMOlogic**系列中的**COSMOtherm**模块联动，将前者计算得到的COSMO文件作为后者的输入。满足客户对特殊溶液体系(溶剂或溶质分子不包含在**COSMObase**数据库中)实现从微观到宏观的多尺度模拟需求，降低新产品开发成本，缩短新产品研发周期。



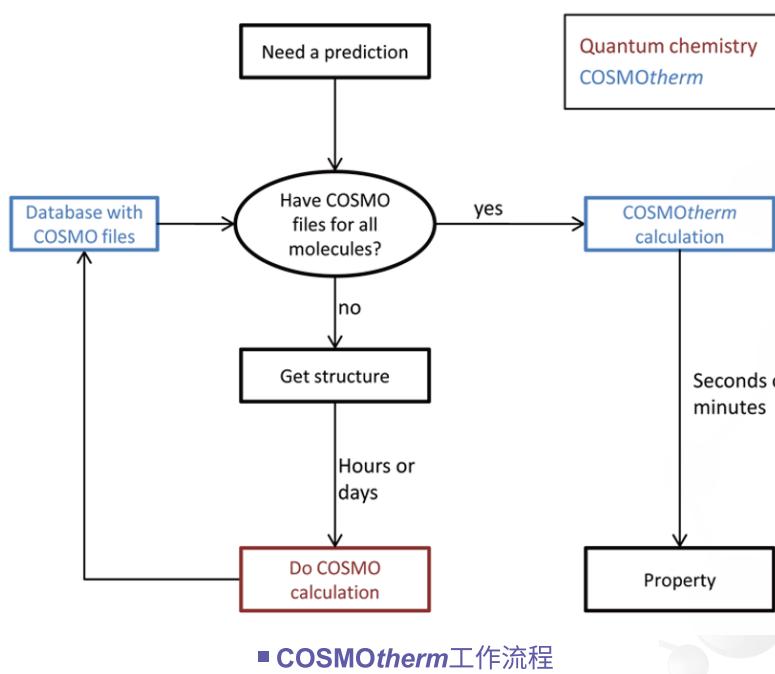
- 使用**COSMOtherm**预测离子液体热容，图中为四种最具代表性的离子液体阳离子和阴离子
- Reference: Ind. Eng. Chem. Res. 2015, 54, 12987–12992

Biovia COSMOtherm

基于COSMO-RS理论, 开箱即用的化工热力学性质预测软件

COSMO-RS是使用一系列方程来计算液体中分子的化学势差的理论。这种化学势差将转化为诸如溶解度, 活性或蒸气压之类的特性。COSMO-RS相比UNIFAC或NRTL等基团贡献法模型能够更好地处理分子内的相互作用。它的主要优势在于: 使用量子化学软件(例如DMol³)生成电荷密度表面(σ -surface)更为精确地描述模型中每个分子及其与其他分子之间的关系。因此, 基于该理论的**COSMOtherm**可应用于数据库中缺少相关参数的特殊体系研究, 例如极化取代基与分子内氢键的电子推挽式作用。**COSMOlogic**软件的普适性和高预测性是COSMO-RS理论将量子化学和统计热力学独特结合的直接结果。没有其他方法能够以如此的精确度来预测如此广泛的性能变化。

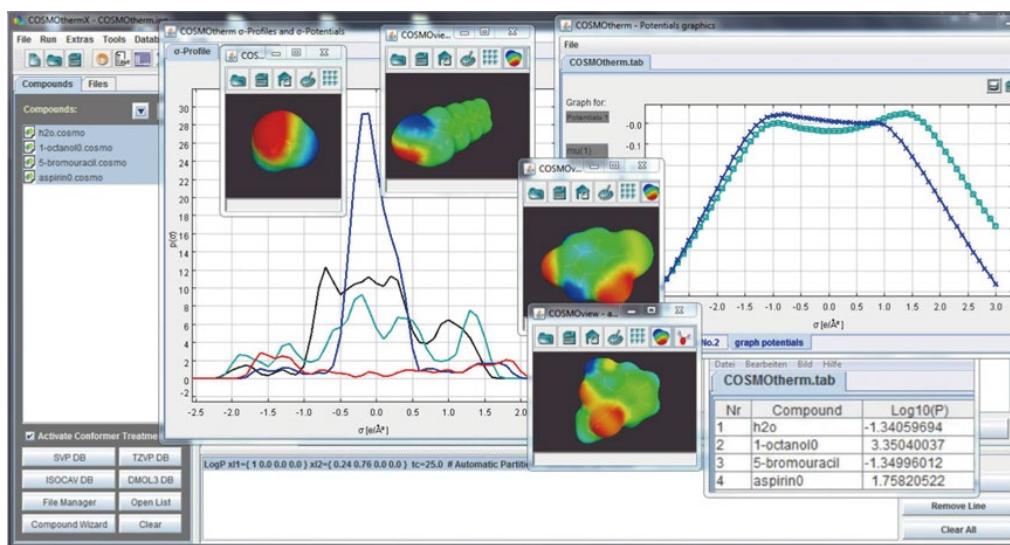
COSMOtherm是第一款将COSMO-RS理论(由A. Klamt于1995年在拜尔工作时提出)应用于预测溶液热力学性质的通用型工具。它以其特有的方式将量子化学和热力学结合在一起, 通过计算不同温度下纯相或混合相液体中分子的化学势来预测分子在特定溶液环境中的活跃程度。与其他的方法例如分子动力学方法(MD)相比, **COSMOtherm**通过应用热力学一致性方程能够快速准确地预测与浓度、温度相关的性质, 包括溶解度、分配系数、蒸气压和相图等。目前**COSMOtherm**已在化工、制药、消费品以及香料香水相关的工业领域中得到了广泛应用。



COSMOtherm的主要功能

COSMOtherm能够快速准确预测纯净物以及混合物的各种热力学性质，包括：

- 液体、固体和气体的溶解度
- 活度系数、两相分配(如LogP)、液体萃取
- 不同混合物中的构象异构体
- 液-液、汽-液和固-液平衡相图
- 蒸气压、溶剂化自由能、亨利定律常数
- 不同溶剂的pKa与化学反应平衡
- 高分子的溶解性
- 胶束和薄膜中的分配系数
- 界面张力与普通吸附
- 土壤吸附性以及其他环境相关性质
- 表面张力,临界胶团浓度

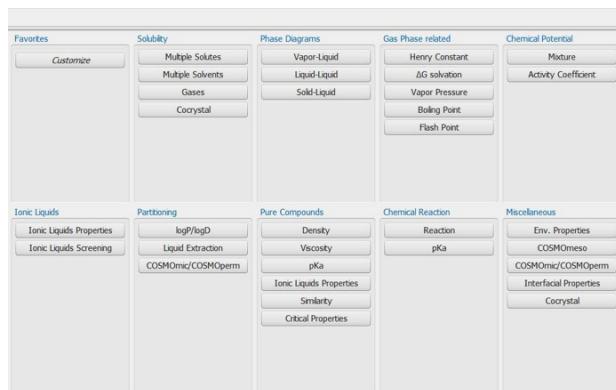


- 使用COSMOtherm计算分配系数, σ表面、σ曲线和σ电位
- Reference: Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science 8.1 (2018): e1338.

COSMOtherm的主要特性

■ 功能强大易用

- 1) COSMOtherm具有直观易用的图形界面,所需计算的大量液相平衡性质均直接分类罗列在面板中,例如溶解度,相图,气相性质,化学势,离子液体,分配系数,化学反应等。
- 2) 命令行版本可以实现批处理功能并能够与已有的计算工作流无缝衔接。
- 3) COSMOtherm的最大优点是它的通用性和高预测性,用户无需担心特殊情况下的参数缺失以及参数是否适用新体系的问题。
- 4) 程序运行报错生成的error code对应具体的原因都能够 在图形界面以及手册中查阅。



■ 简单明了的溶液热力学性质计算界面

■ 计算高效便捷

- 1) 所需参数较少,COSMOtherm所需参数比密度泛函方法(DFT)多,但是比基团贡献法要少2~3个数量级。

Method	Type	Parameter classification	Approx. No.
Hartree Fock	Ab-Initio		0
BP86	DFT	functional	<20
M06	DFT	functional	50
COSMO or PCM	CSM	element radii	20 + Bondi
COSMO-RS	COSMO-RS	universal and element specific	50 + COSMO
ClogP	GC	group interactions	1500
UNIFAC	GC	group interactions	> 5000
MMFF94	MD	stretch, angle, torsion, ...	> 4000

- 2) 相比基团贡献法,有机化学中所有相关元素在COSMOtherm中都已被参数化,不会缺少用于描述有机物元素间相互作用的参数,COSMO-RS方法更具普适性。

- 3) 能够区分构象异构体之间的差异,使计算结果更为准确。

- 4) COSMO-RS方法对于复杂的新型化合物同样适用,能预测的化合物远远超出拟合数据集的范围。在其他方法无法正确预测一些性质的情况下,COSMOtherm是解决问题的有效工具。

- 5) 对每个分子进行一次耗时的DFT计算后,都可将COSMO计算数据存入数据库中便于重复利用。

- 6) 在已经获得COSMO文件前提下,计算在几秒到几分钟之内即可得完成。

Biovia COSMObase

基于量化计算结果的大型溶剂与化合物的数据库

COSMObase是**COSMOtherm**计算所需的化合物信息数据库。它由13157种多种化合物基于量化计算得到的COSMO文件组成,其中囊括了几乎所有常见的工业溶剂,所有的小分子(如水,丙酮,二氯甲烷等),复杂物质(如油类,脂肪酸酯,乙二醇等)以及多个领域中的有机无机高分子常见物质和所有功能性的组群(如烷属烃、烯属烃、炔烃、醇、醚、醛酮类、酸类、硝基和氨基化合物、芳烃基和杂环化合物、硫磺、磷光体等)。**COSMOtherm**可以直接调用数据库中基于量化水平的溶液相关数据来计算混合物热力学性质,减少大量用于DFT计算的时间,提高效率,降低成本。

COSMObase数据库中所有化合物都可以通过它们的化学文摘/登记号(CAS/RN)、SMILES表达式以及化学式和分子量进行索引,从而可以方便查找出这些化合物相关的信息。每种化合物的信息都由三个文件组成:一个气相能量(不使用COSMO模型计算得到的量化结果信息).energy文件,一个.COSMO文件(含分子表面电荷密度信息的分子结构)以及含物理性质数据的.vap文件(纯净化合物数据信息如蒸气压)。用户只需将数据库文件路径添加到**COSMOthermX (COSMOtherm可视化图形界面)**的路径设置中,就能在图形界面中方便快捷调用所需化合物的信息。对于数据库中没有包含的化合物,还可以借助量化方法例如Materials Studio中**DMol³**模块中的PBE泛函与DNP基组来计算得到。

The screenshot shows a software interface for selecting compounds. At the top, there's a search bar for 'Single molecule search' and a list search area with 'Skip' and 'Cancel Search' buttons. Below these are sections for 'Enter / paste list of molecules:' and 'Supported wildcards for Name / CAS:'. The main area is a table with columns: Sel., COSMO name, Database label, Charge, Conformers, CAS Number, MW, Formula, SMILES, BP(°C), and MP(°C). The table lists various compounds like h2o, 1-octanol, 4-aminonitrobenzene, etc., each with its respective parameters. Buttons at the bottom include 'Export Selection', 'Add Selection & Close', and 'Cancel'.

Sel.	COSMO name	Database label	Charge	Conformers	CAS Number	MW	Formula	SMILES	BP(°C)	MP(°C)
<input type="checkbox"/>	h2o	Default-TZVP	0	1	7732-18-5	18.0	H2O	O	100.0	0.0
<input type="checkbox"/>	1-octanol	Default-TZVP	0	7	111-87-5	130.2	C8H18O	OCCCCCCC	-15.5	
<input type="checkbox"/>	4-aminonitrobenzene	Default-TZVP	0	1	100-01-6	138.1	C6H...	Nc1ccc(cc...	332.0	147.0
<input type="checkbox"/>	1,4-dinitrobenzene	Default-TZVP	0	1	100-25-4	168.1	C6H...	O=N(=O)c...	297.0	174.0
<input type="checkbox"/>	ethylbenzene	Default-TZVP	0	1	100-41-4	106.2	C8H10	CCc1cccc1	136.1	-94.9
<input type="checkbox"/>	styrene	Default-TZVP	0	1	100-42-5	104.2	C8H8	C=Cc1cccc1	145.0	-31.0
<input type="checkbox"/>	benzylamine	Default-TZVP	0	3	100-46-9	107.2	C7H9N	NCc1cccc1	185.0	10.0
<input type="checkbox"/>	benzonitrile	Default-TZVP	0	1	100-47-0	103.1	C7H5N	N#Cc1cccc1	191.1	-12.7
<input type="checkbox"/>	4-pyridinecarboxylic acid	Default-TZVP	0	1	100-48-1	104.1	C6H4N2	N#Cc1ccn...	213.5	79.0
<input type="checkbox"/>	benzylalcohol	Default-TZVP	0	4	100-51-6	108.1	C7H8O	OCc1cccc1	205.3	-15.2
<input type="checkbox"/>	benzaldehyde	Default-TZVP	0	1	100-52-7	106.1	C7H6O	O=Cc1ccc...	179.0	-26.0
<input type="checkbox"/>	n-methylaniline	Default-TZVP	0	1	100-61-8	107.2	C7H9N	CNc1cccc1	196.2	-57.0
<input type="checkbox"/>	cyclohexanone	Default-TZVP	0	1	100-64-1	113.2	C6H...	ON=C1CC...	206.0	90.0
<input type="checkbox"/>	anisole	Default-TZVP	0	1	100-66-3	108.1	C7H8O	COc1cccc1	153.7	-37.5

■ COSMObase中基于TZVP基组的化合物数据库



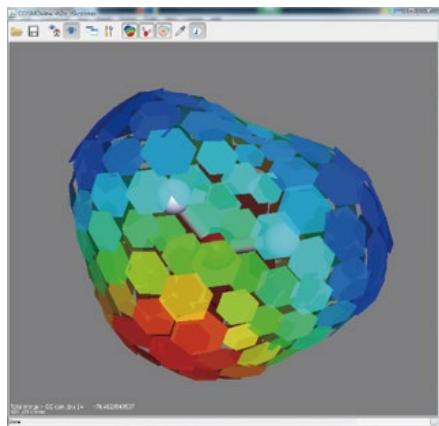
COSMObase的主要功能

■ COSMObase

COSMObase是**COSMO**数据库的核心部分。它包括几乎所有常见的溶剂,从小分子到大而复杂混合物,涵盖具有各种官能团的物质种类(例如烃、醇、醚、羰基、酸、酯、胺、酰胺、硝基化合物、杂环、卤代化合物等等)。

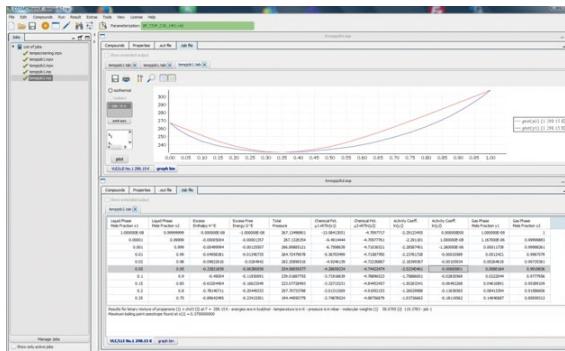
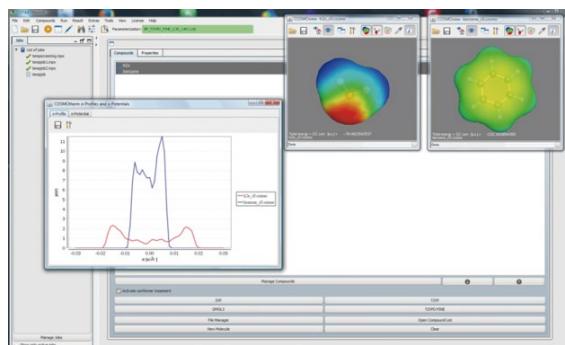
■ COSMObaseIL

COSMObaseIL是典型离子液体中阴离子和阳离子信息的数据库。当前数据库中包含421种阳离子和109种阴离子,通过将它们组合能够形成大量具有潜在应用的离子液体。

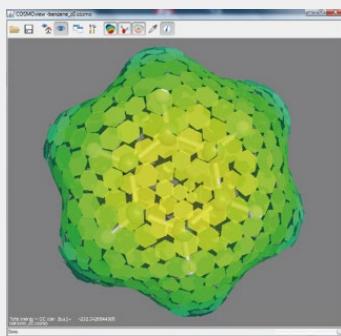


■ COSMObaseFF

COSMObaseFF是包含有2000多种香料和香精信息,是快销品企业和香料香水公司急需的专业数据库。



■ COSMObase数据可视化效果



COSMObase的主要特点

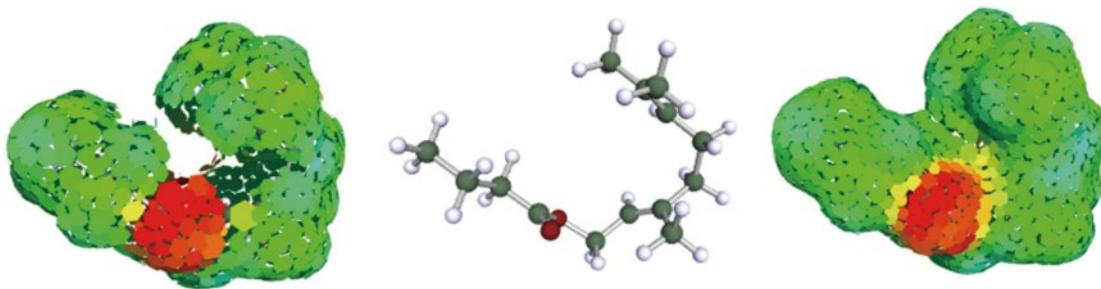
- 1) 包含多达13157种不同的化合物信息;
- 2) 包含超过53000个构象异构体可供调用;
- 3) 包含4200多个熔点和3600多个沸点数据;
- 4) 可以通过CAS登记号搜索其中7600多种化合物;
- 5) 支持导入DMol³等量化软件计算的COSMO文件。

Biovia COSMOconf

高效便捷的构象异构体搜索工具

■ COSMOconf的主要功能：

COSMOconf是搜索生成构象异构体的便捷工具。使用软件内置的特殊算法可以将数量众多的构象异构体缩小为一小组相关构象，为**COSMOtherm**提供最相关的构象异构体作为计算输入提高性质预测的准确性。与其他大多数的构象搜索算法不同，它能够完整地处理气相、极性和非极性溶剂中的相关构象。

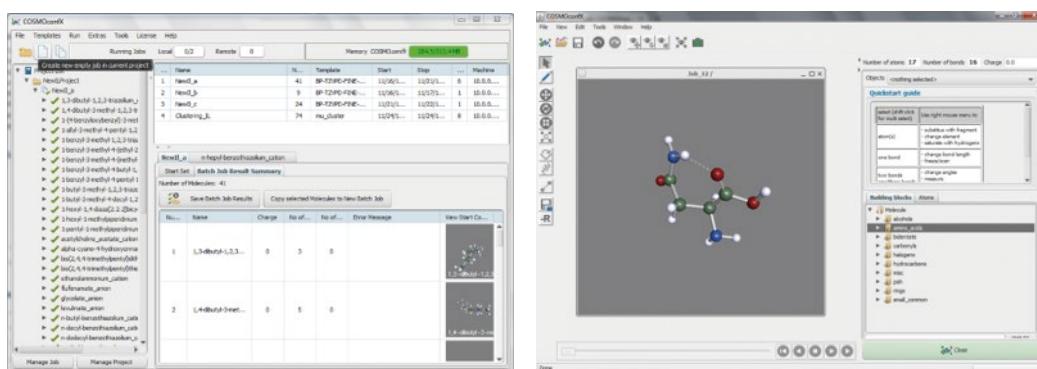


■ 右图为精细描述后的丁酸香叶酯凸起表面的表面电荷等值面图

■ Reference: Journal of computational chemistry 39.21 (2018): 1648-1655.

■ COSMOconf的主要特点：

- 1) 根据不同溶剂中化学势(μ)的相关性来自动选择构象异构体；
- 2) 调用密度泛函理论(DFT)计算结果，预测结果具有良好的准确性和鲁棒性；
- 3) 可以计算超过100个原子的大分子；
- 4) 支持用户自定义构象搜索算法；
- 5) 命令行版本支持自动化批处理搜索。



■ COSMOconf异构体筛选界面



Biovia COSMOquick

不依赖量化计算, 快速预测溶液热力学性质

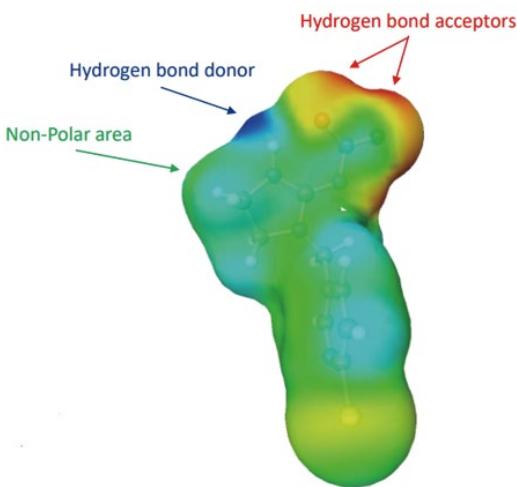
■ COSMOquick的主要功能

COSMOquick是无需进行耗时昂贵的量子化学计算即可快速预测溶液热力学性质的工具。它为用户提供准确的溶解度预测(它内置了一套新型、高效、准确的预测溶解度的算法——只需少量的实验数据进行参考就能得到溶质在新溶液中的准确溶解度)、快速的共晶和溶剂化物筛选、基于COSMO-RS的描述符以及定量构效关系模型(Quantitative Structure-Property Relationship, QSPR)等。另外, **COSMOquick**还可以基于**COSMObase**中的13157种化合物的 σ -profiles, 在损失非常小的精度的前提下, 只花不到一秒便可快速生成新化合物的近似 σ -profiles, 作为**COSMOtherm**中热力学性质计算的输入文件。

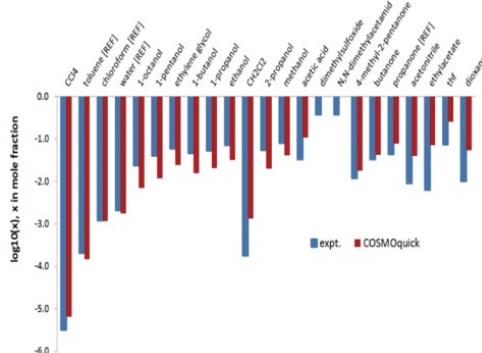
■ COSMOquick的主要特点

- 1) 高精准预测溶解度;
- 2) 高效筛选共晶(几秒内筛选100-1000个共晶体);

Imidacloprid

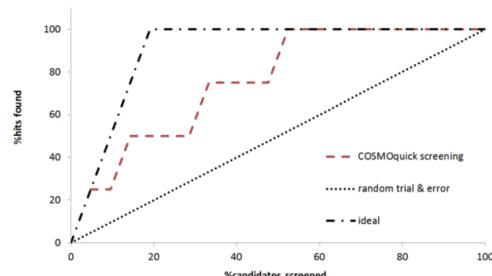


- 3) 可研究气体和小分子在聚合物、溶剂中的吸附;
- 4) 利用机器学习预测分子性质(例如熔点、熔融焓);
- 5) 可进行ADME性质计算, 例如分配系数和水中的溶解度;
- 6) 可以生成近似局域 σ -profiles, 用于**COSMOtherm**计算;
- 7) 无需基于量化计算结果便可进行性质预测。



■ COSMOquick预测扑热息痛在不同溶剂中的溶解度

■ Reference: Ind. Eng. Chem. Res. 2012, 51, 14303–14308



■ COSMOquick获取的富集用于吲哚美辛共晶筛选

■ Reference: Journal of pharmaceutical sciences, 2012, 101(10): 3687-3697.

COSMOmic (COSMOtherm插件)

描述胶束与生物薄膜中溶质的性质

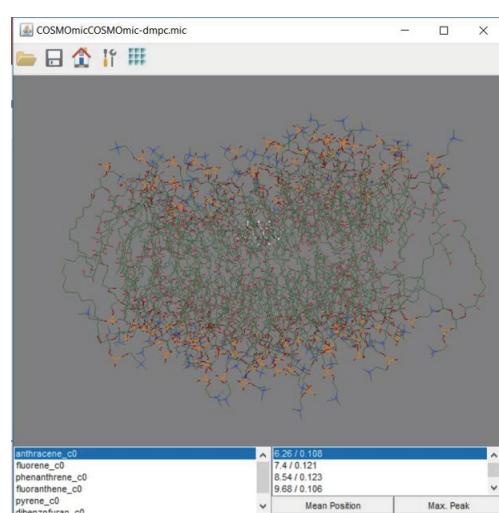
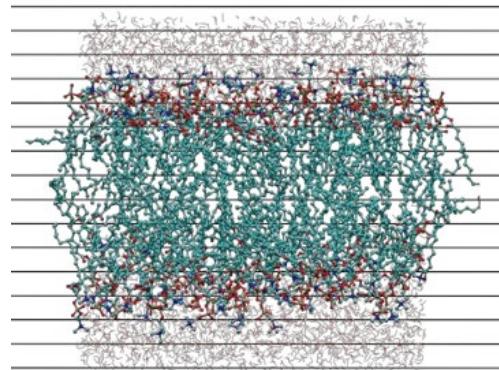
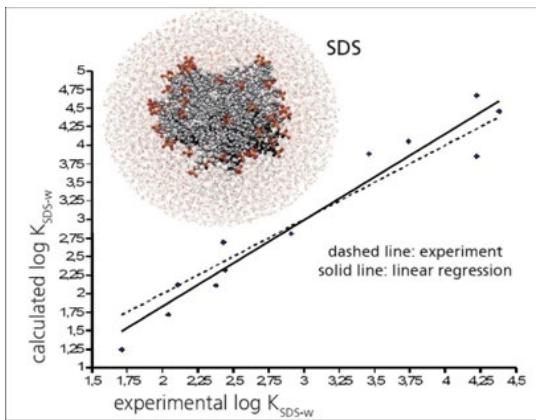
COSMOmic是**COSMOthermX**的插件,它将胶束或生物膜看作液体层,无需额外拟合参数即可有效地预测溶质在溶液中的分配系数。基于分子动力学计算膜和胶束得到的现有数据,在几分钟内即可得到任意溶质的log P和自由能分布曲线。膜或胶束内部分子的COSMO文件只需生成一次即可用于所有溶质,而无需重新计算。

■ COSMOmic的主要功能

COSMOmic将胶束和生物膜切分成薄层系统,每一层都作为液相处理,通过给定该薄层中的分子的原子组成来定义,可给出有关胶束体系、生物膜中中性粒子和离子的概率分布,得到生物膜中溶质的自由能图。

■ COSMOmic的主要特点

- 1) 可计算胶束体系的分配系数;
- 2) 可计算溶质分布图;
- 3) 可计算通过膜或胶束的自由能分布曲线;
- 4) 可处理中性和离子性溶质;
- 5) 可处理球形、圆柱形和层状胶束;
- 6) 自带适用于常见胶束的模型,例如SDS和DMPC;
- 7) **COSMOmic**集成于**COSMOthermX**中,操作便捷,结果通过可视化图形呈现。



COSMOperm (COSMOTHERM插件)

预测生物膜的渗透性

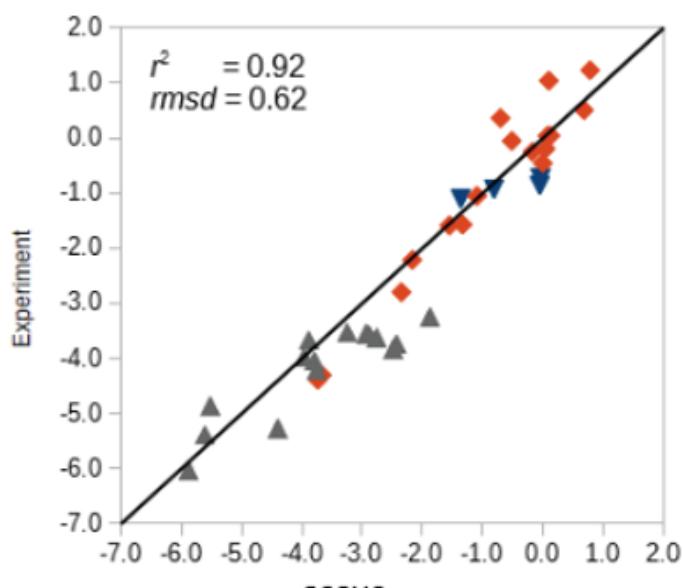
全新添加入**COSMOmic**的功能模块, 可通过快速(耗时仅几分钟)计算溶质穿膜的扩散系数和自由能曲线来评估膜的渗透性, 避免耗时(数周甚至更久)的分子动力学模拟, 并可通过结合中性和(去)质子化态的电阻预测溶质渗透对于pH值的依赖性。

■ COSMOperm的主要功能

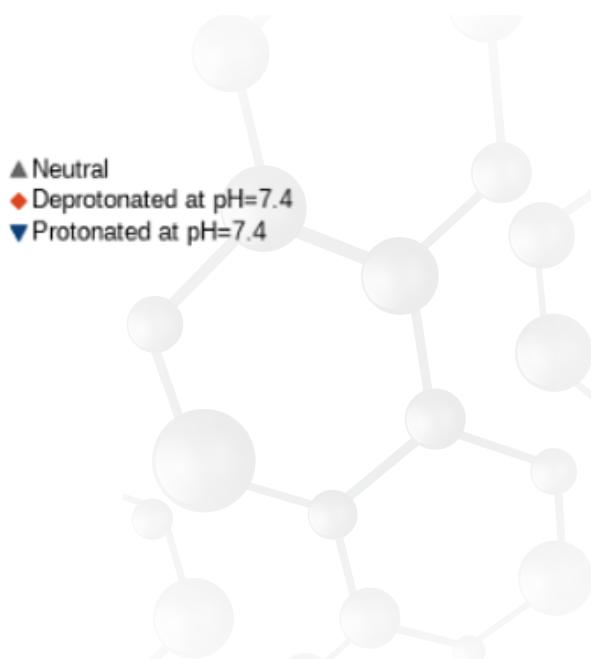
- 1) 可计算膜内固有渗透性质;
- 2) 可计算渗透阻力曲线;
- 3) 可计算局部扩散系数;
- 4) 可计算膜内渗透对pH值的依赖性。

■ COSMOperm的主要特点

- 1) 计算生物膜层中个物质的扩散系数D(z) (例如水、头部极性基团、尾部烷基链);
- 2) 避免耗时数周的分子动力学(MD) 模拟, 只需耗时几分钟就可快速计算扩散系数D(z)和自由能图ΔG(z);
- 3) 通过D(z)和ΔG(z)计算膜内渗透系数P;
- 4) 模型中包含中性和(去)离子化溶质的阻抗性质, 覆盖了膜内渗透的pH值依赖性。



■ COSMOperm预测结果与实验值对比

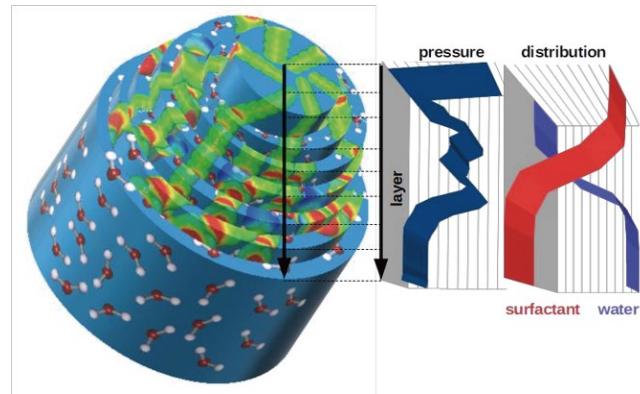


COSMOplex (COSMOTHERM插件)

将COSMO-RS理论扩展到复杂自组织非均匀体系

■ COSMOplex的主要功能

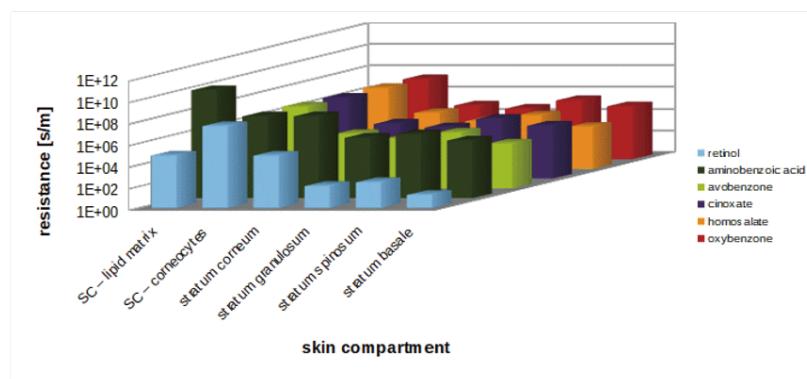
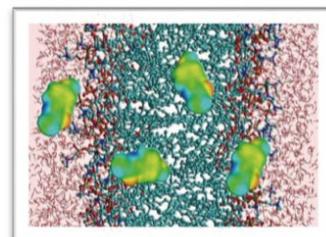
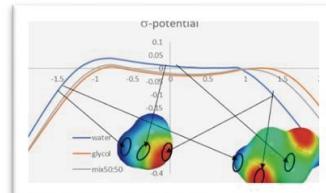
COSMOplex是对被广泛应用的**COSMOmic**方法在非均匀无线稀释状态下的溶质研究的加强和补充。**COSMOplex**在给定的模拟几何构型中,结合化学势对体系压力分布进行描述,使分子发生扩散直至体系达到平衡。**COSMOplex**通过这种方法给出的结果与由分子动力学获取的结果基本一致。而在许多情况下,**COSMOplex**的计算速度比分子动力学快三到四个数量级,涵盖大部分的非均相体系,并且能够从中获取一系列溶液的物理化学性质。



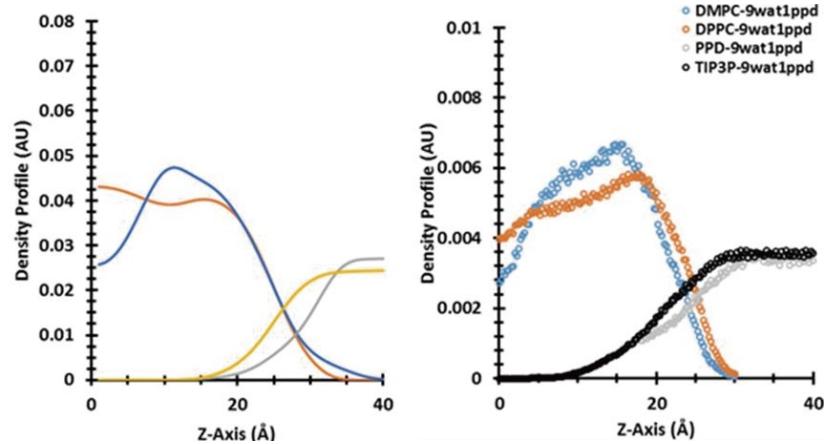
■ COSMOplex的主要特点

覆盖了全系列自组织非均匀系统,可提供一系列物理化学性质的预测

- 1) 无需外部输入即可研究分子自组装;
- 2) 可预测胶束的形成及临界胶束浓度(CMC);
- 3) 适用于膜类体系:可预测膜的形成及其溶质自由能分布,例如细胞膜-水的分配系数;
- 4) 适用于微乳液体系:可预测等效烷基碳数预测(EACN),鱼形相图;
- 5) 结合**COSMOPerm**插件可预测膜渗透以及渗透促进剂的作用;
- 6) 适用于液晶体:可预测温度和电场对晶体各向异性分布的影响;
- 7) 可预测界面张力。



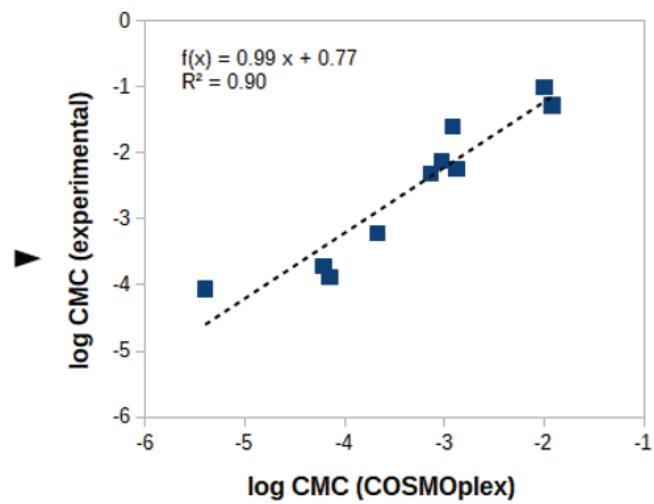
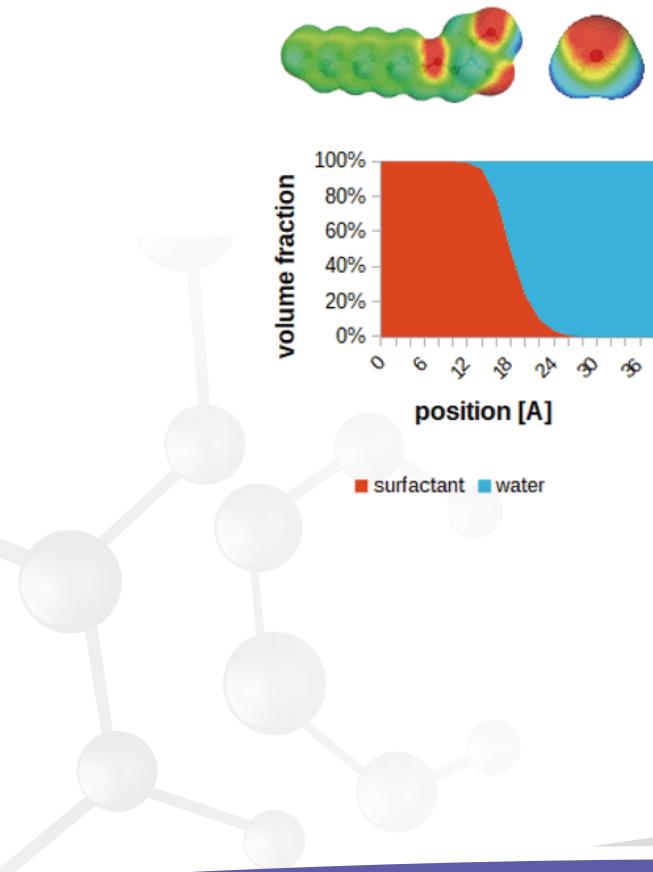
■ COSMOplex皮肤表面渗透模型



■ COSMOplex 操作界面

■ 左图为COSMOplex计算的DMPC+DPPC双层磷脂密度曲线,右图为实验值
算例由(Mark Maupin et al. at Procter&Gamble, Cincinnati)提供

■ 实验Reference: Environmental science & technology 45.14 (2011): 5912-5921.



■ 临界胶束浓度

合作伙伴：

COSMOlogic是创腾科技合作伙伴达索系统的产品，达索系统授权创腾科技有限公司在中国提供上述产品的销售、培训和技术支持。

关于创腾科技：

创腾科技专注于生命科学和材料科学领域信息化的开拓与创新。通过AI及移动互联技术，我们为广大用户提供：计算模拟与数据建模、科研创新及质量合规等全方位的信息化解决方案，全面提升企业的研发效能和数字化转型价值。在中国，已有千余家生命科学和材料科学领域的机构选择了创腾科技的产品和服务，包括国内知名的制药企业、新药研发合同服务企业、石化企业以及高校、科研院所。



创 腾 科 技 | 北京·上海·苏州·广州·成都



北京市中关村科学院南路2号融科资讯中心C座南楼1512室
电话:010-82676188
传真:010-82677178

江苏省苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301室
电话:0512-67509707
传真:0512-67509707

上海市浦东新区张江达尔文路88号半岛科技园11栋4楼
电话:021-51821768
传真:021-51821858

广东省广州市天河区黄埔大道西33号三新大厦16-E房
电话:020-88527961
成都市锦江区东御街19号茂业天地A栋33楼3308号
电话:028-66319683