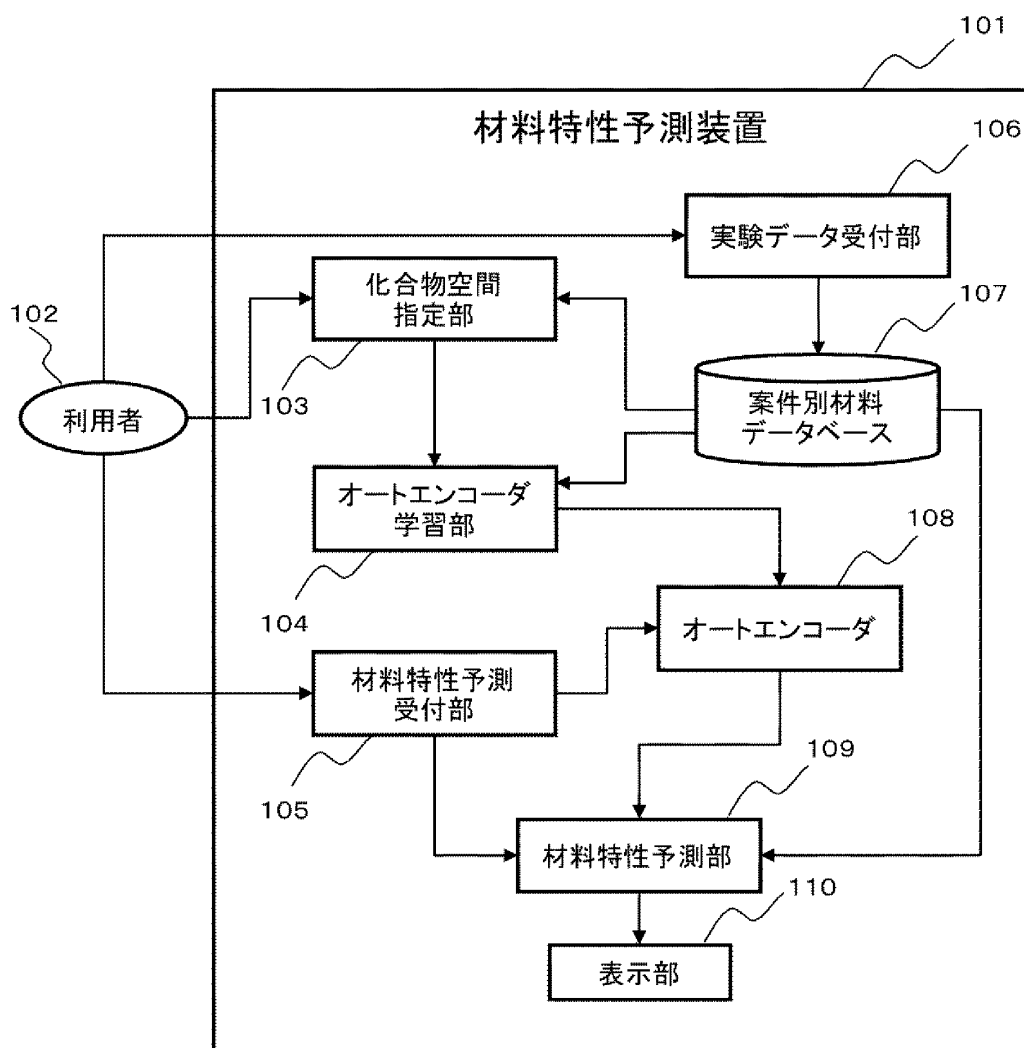


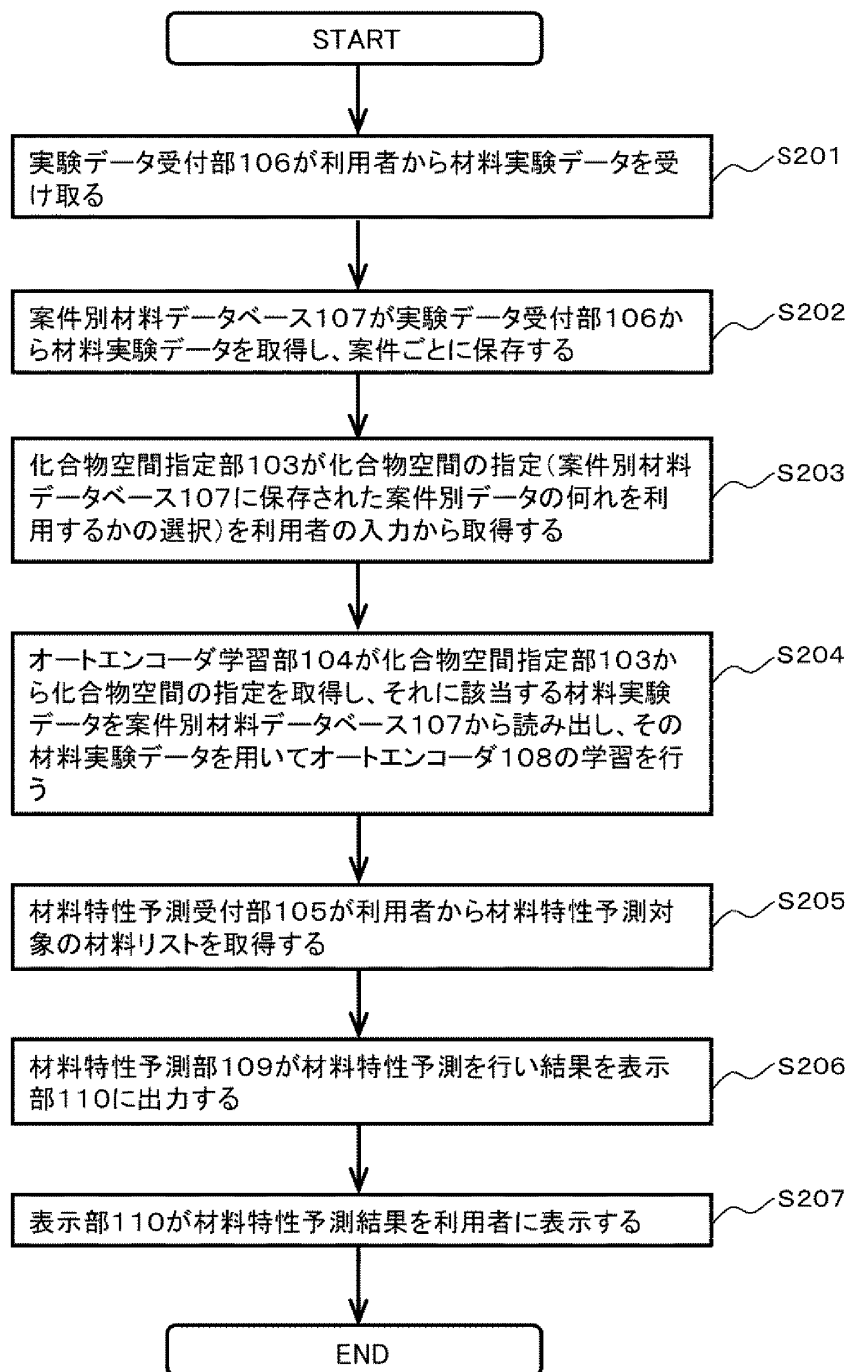
[図1]

図1



[図2]

図2



[図3]

図3

材料実験データをアップロードします。

ファイル:

参照

OK キャンセル

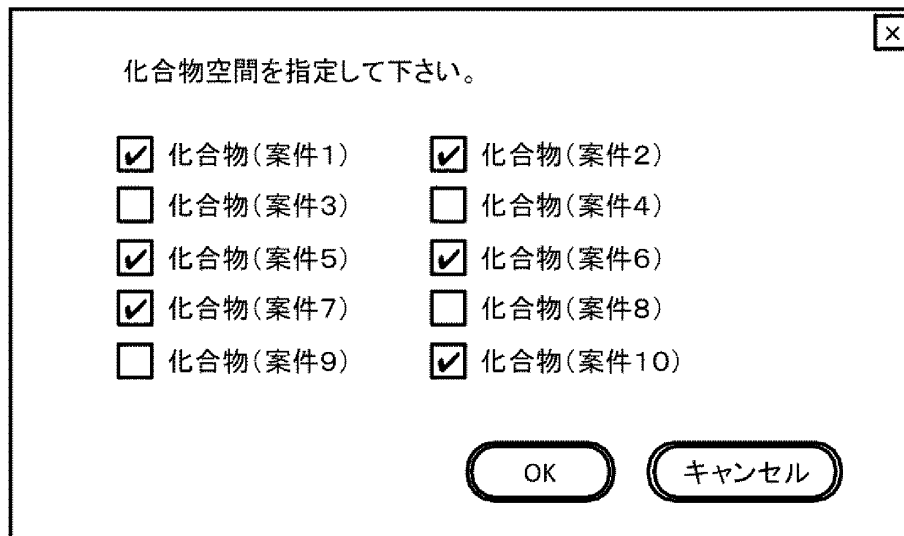
[図4]

図4

402	403	401	404	405	406	407
案件1						
通し番号	構造式 (SMILES)	実験条件1	実験条件2	材料特性1	材料特性2	
1	<chem>CO[Si](C)(OC)N1CCCCC1</chem>	0.785	44.2	4.12	-12.5	
2	<chem>CCN(CC)[Si](C)(OC)OC</chem>	0.914	35.9	1.56	29.1	
3	<chem>O=C1C=CC(=O)C=C1</chem>	0.258	16.8	-0.374	35.5	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
案件2						
通し番号	構造式 (SMILES)	実験条件1	実験条件2	材料特性1	材料特性2	
251	<chem>CCCC[Si](C)(OC)OC</chem>	0.407	20.6	2.09	19.8	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
案件3						
通し番号	構造式 (SMILES)	実験条件1	実験条件2	材料特性1	材料特性2	
670	<chem>CCO[Si](OCC)(OCC)N(CC)CC</chem>	1.06	56.4	5.18	-8.07	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	

[図5]

図5



化合物空間を指定して下さい。

☒ 化合物(案件1)	☒ 化合物(案件2)
☐ 化合物(案件3)	☐ 化合物(案件4)
☒ 化合物(案件5)	☒ 化合物(案件6)
☒ 化合物(案件7)	☐ 化合物(案件8)
☐ 化合物(案件9)	☒ 化合物(案件10)

OK キャンセル

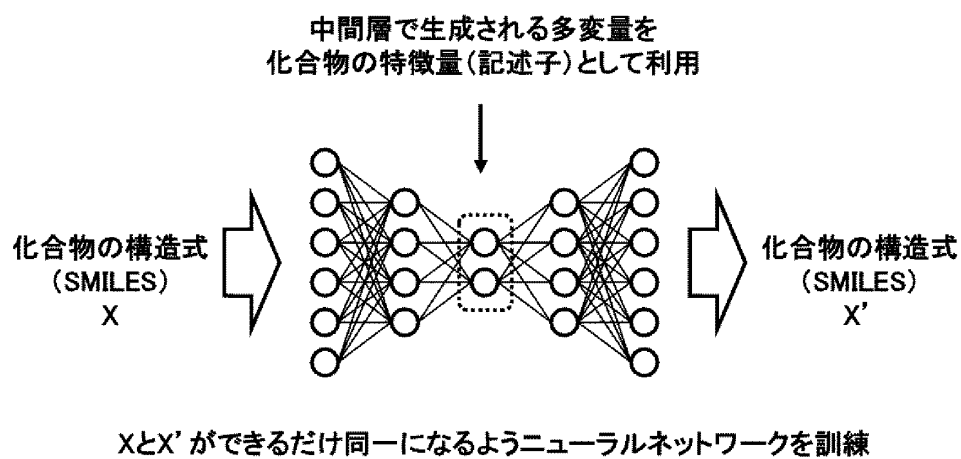
[図6]

図6

案件2	
通し番号	構造式(SMILES)
1	<chem>CO[Si](C)(OC)N1CCCCC1</chem>
2	<chem>CCN(CC)[Si](C)(OC)OC</chem>
3	<chem>O=C1C=CC(=O)C=C1</chem>
⋮	⋮
案件3	
通し番号	構造式(SMILES)
251	<chem>CCCC[Si](C)(OC)OC</chem>
⋮	⋮
案件5	
通し番号	構造式(SMILES)
670	<chem>CCO[Si](OCC)(OCC)N(CC)CC</chem>
⋮	⋮

[図7]

図7



[図8]

図8

×

特性予測を実行する材料のリストをアップロードします。

ファイル:

参照

OK

キャンセル

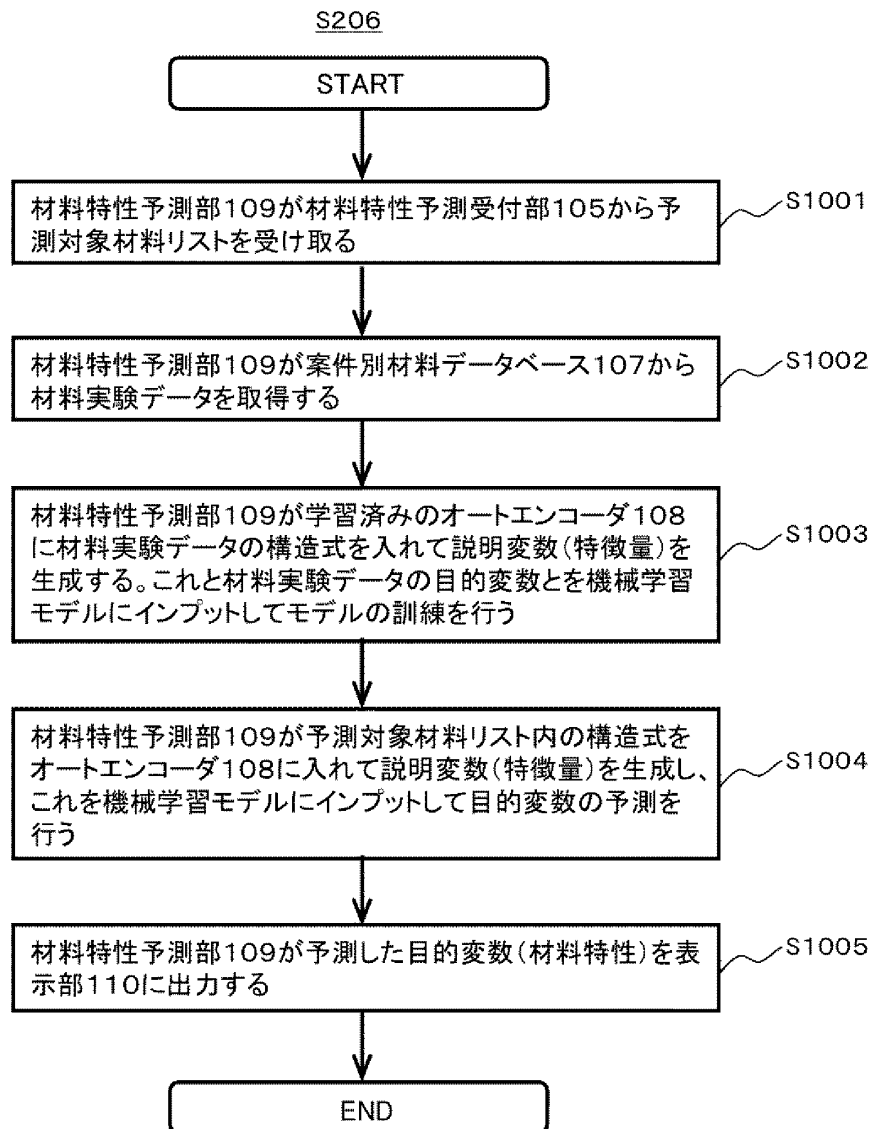
[図9]

図9

901	902
番号	構造式(SMILES)
1	<chem>CO[Si](C)(OC)N1CCCCC1</chem>
2	<chem>CCN(CC)[Si](C)(OC)OC</chem>
3	<chem>O=C1C=CC(=O)C=C1</chem>
⋮	⋮

[図10]

図10



[図11]

図 11

×

材料特性予測結果

番号	構造式 (SMILES)	材料特性1	材料特性2
1	<chem>CO[Si](C)(OC)N1CCCCC1</chem>	4.12	-12.5
2	<chem>CCN(CC)[Si](C)(OC)OC</chem>	1.56	29.1
3	<chem>O=C1C=CC(=O)C=C1</chem>	-0.374	35.5
⋮	⋮	⋮	⋮

保存 終了

[図12]

図12

