

MATERIALS STUDIO – VISIÓN GENERAL

Modelado y simulación para la próxima generación de materiales. Materials Studio® es un completo entorno de modelado y simulación que permite a los investigadores de ciencias de los materiales y química desarrollar nuevos materiales mediante la predicción de las relaciones de la estructura atómica y molecular de un material con sus propiedades y comportamiento. Utilizando Materials Studio, los investigadores de muchas industrias pueden ingeniar materiales con mejor rendimiento de todo tipo, incluyendo productos farmacéuticos, catalizadores, polímeros y compuestos, metales y aleaciones, baterías y células de combustible, nanomateriales y otros.

Materials Studio es el entorno más avanzado pero fácil de utilizar del mundo, para el modelado y la evaluación del rendimiento y comportamiento de materiales. Utilizando Materials Studio, los científicos de Reducción del coste y tiempo asociado con las pruebas físicas y experimentación a través de la “revisión virtual” de las variaciones del material candidato.

- Aceleración del proceso de innovación – desarrollando nuevos materiales, con mejor rendimiento, más sostenibles y rentables que los que pueden obtenerse solo con pruebas físicas y experimentación.
- Mejora de la comprensión fundamental de la relación entre la estructura atómica y molecular con las propiedades y comportamiento del material.
- Potentes funcionalidades informáticas de materiales a través de la adopción de la ciencia de materiales computacional como complemento a la experimentación en laboratorio.
- Automatización y mejores prácticas de compartición con la Materials Studio Collection for Pipeline Pilot, así como la MaterialsScript API.

VISUALIZACIÓN

Los químicos, los científicos de polímeros, y de otros materiales son productivos más rápidamente y con menos esfuerzo utilizando Materials Studio Visualizer, el entorno gráfico de usuario más fácil de usar y más completo para el modelado y la simulación de materiales. Materials Studio Visualizer proporciona capacidades para construir, manipular y ver modelos de moléculas, materiales cristalinos, superficies, polímeros y estructuras de mesoescala. También soporta el rango completo de simulaciones de Materials Studio con funcionalidades para visualizar resultados a través de imágenes, animaciones, gráficos, cuadros, tablas y datos textuales. La mayoría de las herramientas de Materials Visualizar también son accesibles a través del MaterialsScript API, permitiendo que los usuarios expertos puedan crear funcionalidades personalizables y automatizar tareas repetitivas. El cliente Microsoft Windows de Materials Studio Visualizar funciona con un rango de arquitecturas de servidor Windows y Linux para proporcionar una experiencia de usuario altamente productiva.

TECNOLOGÍAS DE SOLUCIÓN

Materials Studio proporciona un completo rango de funcionalidades de simulación desde herramientas cuánticas, atomistas, mesoescalares, estadísticas, analíticas y cristalización. Su amplio abanico de soluciones permite a los investigadores evaluar materiales con varios tamaños de partículas y escalas temporales para predecir propiedades con mayor precisión y evaluar rendimientos en el tiempo más corto posible.

HERRAMIENTAS CUÁNTICAS

Materials Studio proporciona un amplio rango de herramientas basadas en la mecánica cuántica para moléculas y estructuras periódicas, incluyendo métodos funcionales de densidad, escalado lineal DFT, QM/MM y herramientas semiempíricas. Estas herramientas proporcionan resultados precisos para las propiedades estructurales, termofísicas, electrónicas y ópticas de los materiales.

Producto	Descripción
CASTEP	CASTEP simula las propiedades de sólidos, interfaces y superficies para un amplio rango de materiales incluyendo cerámicas, semiconductores y metales utilizando un método funcional de densidad de onda plana.
DMol³	DMOL ³ se utiliza para modelar la estructura electrónica y propiedades de moléculas orgánicas e inorgánicas, cristales moleculares, sólidos covalentes, sólidos metálicos y superficies infinitas utilizando DFT.
DFTB+	DFTB+ es un módulo semi-empírico para simular propiedades electrónicas de los materiales. Utiliza una aproximación de enlace fuerte basado en la teoría funcional de densidad para permitir precisión de mecánica cuántica en tamaños de sistemas más grandes.
NMR CASTEP	NMR CASTEP predice desplazamientos químicos NMR y tensores de gradiente de campo eléctrico a partir de los primeros principios. El método puede ser aplicado para calcular los desplazamientos NMR tanto de moléculas como sólidos para un amplio rango de materiales incluyendo cerámicas y semiconductores.
ONETEP	ONETEP es un código DFT escalado lineal, que permite cálculos precisos de primeros principios en sistemas de hasta miles de átomos.
QMERA	QMERA utiliza el método QM/MM combinando la precisión de un cuanto con la velocidad de un cálculo de campo de fuerza. Esta aproximación facilita realizar cálculos precisos en sistemas muy grandes con un esfuerzo sustancialmente inferior.
VAMP	VAMP es capaz de predecir rápidamente muchas propiedades físicas y químicas para sistemas moleculares orgánicos e inorgánicos utilizando un método orbital molecular semi-empírico. VAMP es una aproximación intermedia ideal entre los métodos del campo de fuerza y el de primeros principios.

HERRAMIENTAS DE SIMULACIÓN CLÁSICA

Materials Studio ofrece una amplia variedad de métodos basados en interacciones clásicas entre átomos y moléculas. Éstas incluyen Dinámica Molecular, Dinámica Lattice y varios métodos basados en Monte Carlo así como la provisión de campos de fuerza.

Producto	Descripción
Adsorption Locator	Adsorption Locator encuentra los lugares de adsorción de baja energía para moléculas tanto en sustratos periódicos como no periódicos.
Amorphous Cell	Amorphous Cell es un conjunto de herramientas computacionales que permite construir modelos representativos de sistemas amorfos complejos y predecir propiedades clave.
Blends	Blends predice diagramas de fase y parámetros de interacción para mezclas líquido-líquido, polímero-polímero y polímero-aditivo, equilibrios de fase y tecnología de separaciones.

HERRAMIENTAS DE SIMULACIÓN CLÁSICA (continuación)

Producto	Descripción
Conformers	Conformers proporciona algoritmos de búsqueda conformacional y herramientas de análisis para caracterizar conformación molecular y flexibilidad.
COMPASS	COMPASS es un campo de fuerza que permite una predicción precisa de propiedades estructurales, conformacionales, vibracionales y termofísicas para un amplio rango de moléculas en aislamiento y en fases condensadas, y bajo un amplio rango de condiciones de temperatura y presión.
Forcite Plus	Forcite Plus ofrece métodos de mecánica molecular y dinámica para moléculas y sistemas periódicos. La herramienta incluye un amplio rango de funcionalidades de análisis para predecir propiedades mecánicas, difusividad, estructura local, variaciones de densidad, densidad de energía cohesiva, funcional de autocorrelación dipolar y más. Los campos de fuerza soportados son COMPASS, CVFF, PCFF, Dreiding y Universal.
GULP	GULP es un método para optimización, cálculo de propiedades y dinámica de materiales. Incluye un amplio rango de campos de fuerza para metales, óxidos, minerales semiconductores así como campos de fuerza de mecánica molecular para sistemas covalentes. También se proporcionan herramientas de ajuste de campos de fuerza para desarrollar parámetros para materiales personalizables.
Sorption	Sorption proporciona un medio para predecir propiedades fundamentales necesarias para investigar fenómenos de adsorción y separación, como isothermas de sorción y constantes de Henry.

HERRAMIENTAS DE SIMULACIÓN MESOESCALAR

Los métodos de mesoescala en Materials Studio están basados en una aproximación de grano grueso, por el que los grupos de átomos son remplazados por esferas. Estos métodos permiten el modelado del comportamiento en escalas de longitud y tiempo que van más allá de los rangos de las herramientas clásicas.

Producto	Descripción
MesoDyn	MesoDyn es un método funcional de densidad clásico para el estudio del comportamiento de grandes escalas de longitud y tiempo para sistemas fluidos complejos, en particular la separación de fase y estructura de sistemas polímeros complejos.
Mesocite	Mesocite es un módulo de simulación de grano grueso par el estudio de materiales en escalas de longitud que van de nanómetros a micrómetros y escalas de tiempo desde nanosegundos a microsegundos. Mesocite puede proporcionar propiedades estructurales y dinámicas de fluidos en equilibrio, sometidas a cizalladura o en geometrías confinadas.

HERRAMIENTAS ESTADÍSTICAS

Las herramientas estadísticas son ideales para cribar compuestos rápidamente relacionando rasgos moleculares directamente para cantidades observadas experimentalmente.

Producto	Descripción
QSAR	La integración de QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationships) en Materials Studio proporciona acceso a un amplio rango de descriptores y capacidades de análisis avanzadas para ayudar a generar relaciones de actividad de estructura de alta calidad. QSAR incluye un amplio abanico de descriptores incluyendo descriptores topológicos y electro-topológicos. Además, los descriptores Jurs permiten examinar la distribución de carga sobre superficies de disolvente; los Descriptores VAMP amplían aún más el rango de descriptores 3D en aquellos que incluyen interacciones electrónicas; y GFA aplica un método de algoritmo genético sofisticado para calcular relaciones de actividad de estructura cuantitativa.
QSAR Plus	QSAR Plus añade la potencia de los Descriptores DMol3 para calcular índices de reactividad y energías precisas para QSAR. También se incluyen redes neuronales (<i>Neural Networks</i>) para construir modelos no lineales y modelos que sean más resistentes a conjuntos de datos ruidosos que otros métodos de construcción de modelos. También puede ser utilizado con conjuntos de datos en los que faltan varios valores, y puede utilizarse para construir modelos ponderados para predecir múltiples propiedades físicas..
Synthia	Synthia calcula propiedades de homo- y copolímeros utilizando Quantitative Structure-Property Relationships (QSPRs) avanzadas. Permite a los investigadores filtrar rápidamente candidatos de polímeros para un amplio rango de propiedades.

HERRAMIENTAS ANALÍTICAS Y CRISTALIZACIÓN

Las herramientas analíticas y de cristalización se utilizan para investigar, predecir y modificar estructuras de cristales y crecimiento de cristales.

Producto	Descripción
Morphology	Morphology permite predecir la morfología del cristal a partir de la estructura atómica de un cristal. Morphology permite predecir la forma del cristal, el análisis de la estabilidad de superficie del cristal, el desarrollo de aditivos a medida, y el control de solventes y efectos de impurezas.
Polymorph Predictor	Polymorph Predictor permite predecir polimorfos potenciales de un compuesto dado directamente desde la estructura molecular.
Polymorph	Polymorph se ha desarrollado para utilizarlo con moléculas bastante rígidas, no iónicas o moléculas iónicas compuestas principalmente de carbono, nitrógeno, oxígeno e hidrógeno. La aproximación está basada en la generación de posibles arreglos de empaquetamiento de todos los grupos de espacio razonable para buscar los mínimos de baja altura en la energía de red.
Motif	Motif analiza información de conectividad en cristales moleculares, proporcionando un método de análisis cualitativo y cuantitativo de las topologías de enlaces de hidrógeno. En combinación con las capacidades predictivas de Materials Studio Polymorph, Motif permite categorizar y puntuar estadísticamente las estructuras propuestas. Conecta con Cambridge Structural Database explotando la funcionalidad Mercurio de los Centros de Datos Cristalográficos de Cambridge.
Reflex	Reflex simula patrones de difracción de rayos X, neutrones y polvo de electrones basándose en modelos de materiales cristalinos. Reflex Plus ofrece un paquete completo para la determinación de estructuras de cristales para datos de difracción de polvo de media a alta calidad.
Reflex QPA	Reflex QPA extiende la funcionalidad de Reflex para análisis de fase cuantitativo, permitiendo la determinación de la proporción de diferentes fases, incluyendo tanto sistemas inorgánicos como orgánicos, en una mezcla basada en datos de difracción de polvo.
X-Cell	X-Cell es un algoritmo de indexación eficiente para datos de difracción de polvo de media a alta calidad. X-Cell utiliza un procedimiento de dicotomía específica de extinción para realizar una búsqueda exhaustiva del espacio de parámetros para establecer una lista completa de todas las posibles soluciones de celda unidad.

