

xirrus simulation matter^s – Materialeigenschaftensimulation Factsheet

xirrus simulation bietet Ihnen dieses Produkt online an: Sie können auf Knopfdruck und gegen Vorkasse Materialeigenschaften von neuen Materialien und -gemischen berechnen lassen.

Voraussetzungen

In folgenden Situationen ist die Dienstleistung xirrus simulation matters sinnvoll:

Die beteiligten Stoffe sind praktisch oder theoretisch bekannt	
Art der Stoffe	Organische Verbindungen und Polymere (auch biokompatible und biologische), auch Silikone sowie die meisten Lösungsmittel. <ul style="list-style-type: none"> • Reine Stoffe, Gemische und Additive und Funktionalisierungen • Nur geläufige chemische Elemente (im Zweifelsfall nachfragen) • Die Mischung enthält wenig oder keine Salze (Ionen). • Der pH Wert ist nicht extrem (in wässriger Lösung zwischen 5-9) oder irrelevant. • Keine metallischen oder keramischen Materialien
Chemische Struktur	Die chemische Struktur (die Konnektivität) der beteiligten Komponenten ist bekannt, bei Polymeren der ungefähre Polymerisationsgrad (unter 1500 kDa Molekulargewicht). Die Konformation darf unbekannt sein, diese entsteht und ändert während der Simulation.
Reinheit	Die beteiligten Stoffe müssen einigermaßen rein sein – oder die Verunreinigungen eben falls bekannt und berücksichtigt. Verunreinigungen in Spuren können meist vernachlässigt werden. Die Anteile der einzelnen Komponenten sollten mehr als 1 % betragen. Kleinere Anteile können oft vernachlässigt werden, oder – bei wesentlichem erwarteten Beitrag an die Eigenschaften – mit etwas Mehraufwand dennoch berücksichtigt werden. Bitte berücksichtigen Sie einen allfälligen Wasser- oder Lösungsmittelgehalt ebenfalls als weitere Komponente. Bei Polymeren sollte der ungefähre Polymerisationsgrad (Kettenlänge) bekannt sein.
Unsicherheiten	Bestehen Unsicherheiten bezüglich den beteiligten Stoffen, so fragen Sie uns direkt an. Aufgrund unserer Erfahrung können wir abschätzen, wie sie dennoch ans Ziel kommen.
Die gesuchte Materialeigenschaft ist unbekannt oder unbestätigt	
Hypothetisches oder neues Material	Das Material wurde noch gar nicht hergestellt, das Material ist neu oder liegt in einem neuen Gemisch vor, die Charakterisierung steht noch aus. Das Material ist teuer oder aufwendig in der Herstellung. Die zu erwartenden Eigenschaften sollen dennoch prospektiv ermittelt werden.
keine Messung	Experimente zur Ermittlung der fehlenden Grösse sind kostspielig oder zeitaufwändig oder nicht möglich.
keine Literatur	Es liegen keine Literaturwerte vor, oder nicht für die erwünschten Umgebungsbedingungen. Oder vorhandene Literaturwerte werden angezweifelt.

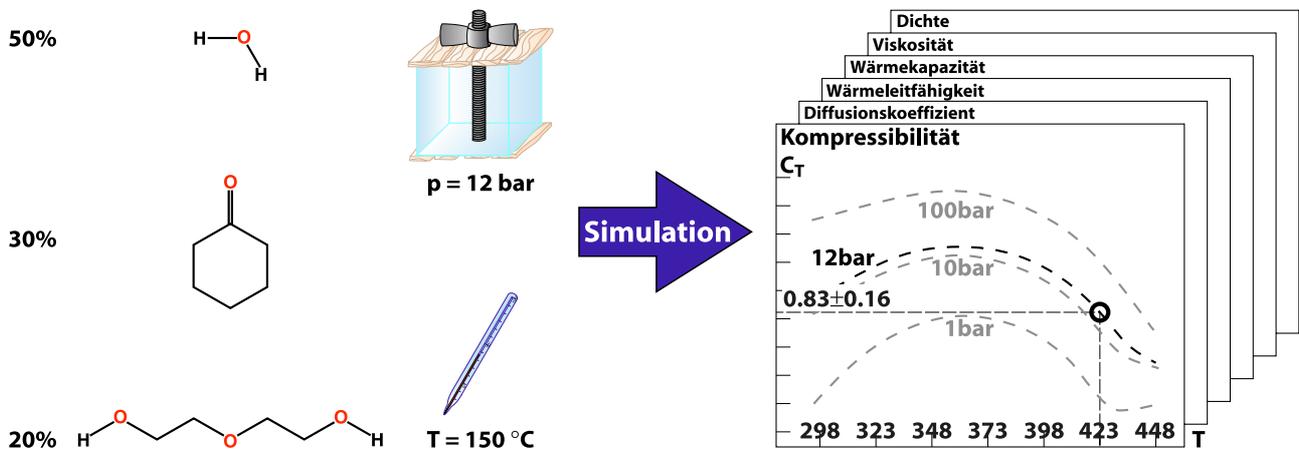
«Oft ist die Kenntnis einer "Hausnummer" der Unkenntnis vorzuziehen»

Nino Zehnder, Even AG, Zürich

Vorgehen und Resultate

Bestellung	Sie übermitteln uns Ihre Materialdaten (Molekülstrukturen) via online-Formular: www.xirrus.ch/matters Für Spezialfälle nehmen Sie direkt mit uns Kontakt auf (siehe Fusszeile)	
Umgebung	Sie bestimmen die Umgebungsbedingungen (Druck und Temperatur).	
Eigenschaft	Sie bestellen die gewünschten Materialeigenschaften aus folgender Liste:	
	Dichte	in [kg/m ³]
	Viskosität (Scherviskosität)	in [N · s/m ²]
	Wärmekapazität	in [kJ/mol/K]
	Wärmeleitfähigkeit (Annahme: isotrop)	in [kJ/m/K/s]
	Diffusionskoeffizient	in [cm ² /s]
	Kompressibilität (isotherm) Elastizitätsmodul	in [kJ/mol/nm ³] in [kN/mm ²]
	Weitere Eigenschaften sind unter Umständen auch möglich. Bitte fragen Sie uns an oder benützen Sie das Eingabefeld für Bemerkungen.	
Bestätigung und Rechnung	Wir bestätigen Ihnen die beteiligten Komponenten, Bedingungen und bestellte Eigenschaften nach der Übernahme in die Simulationssoftware, um Übermittlungsfehler zu eliminieren.	
Vorauszahlung	Sie bezahlen uns den erforderlichen Betrag im Voraus. Die Simulation startet, sobald der Geldeingang verbucht wird.	
Simulation	xirrus simulation matters simuliert Ihr Material bei durch Sie definierten Umgebungsbedingungen (Druck, Temperatur) in mikroskopisch ausreichender Grösse und Zeit, analysiert die Resultate und berechnet die erforderlichen Eigenschaften.	
Lieferzeit	Das Resultat können Sie im Normalfall innert einiger Tage erwarten. Da die Simulation, Analyse und Statistik auf molekularer Ebene viel Rechenleistung verlangen, kann es mitunter Tage oder Wochen dauern, bis das Resultat berechnet ist.	
Resultat Genauigkeit	Die erzielbare Genauigkeit solcher Simulationen ist methodisch begrenzt (z. B. Abweichungen der Dichte bis 5%) Die Aussagekraft ist wie bei Experimenten auch, durch die Modellgrenzen bedingt.	
Garantie	Bei nachweislich grosser Abweichung (um mehr als den Faktor 10 vom in vergleichbaren Berechnungen üblichen Fehler abweicht.) von mindestens drei unabhängig publizierten, aber übereinstimmenden Literaturwerten [überprüfbare Quellen] und Ihrer Bekanntgabe innerhalb von zwei Monaten nach Lieferung, erhalten Sie Ihr Geld zurück. Ein solcher Fall hilft uns nämlich, allfällige Modellgrenzen festzustellen und die Modelle bei Bedarf zu verbessern.	

Beispiel einer Eigenschaftsbestimmung durch Simulation



Warum xirrus simulation matter^s?

erhellend	Viele Materialeigenschaften verhalten sich nicht linear zu den Umgebungsbedingungen, das macht eine Extrapolation eher schwierig, vor allem wenn dazu nicht genügend Anhaltspunkte vorhanden sind.
günstig	Hohe Temperaturen oder Drücke stellen hohe Anforderungen an Experimente und Messtechnik. Nicht jede Situation erlaubt diese Ausrüstung oder einen Messauftrag.
prospektiv	Gerade in der Planungs- und Entwicklungsphase können neue Materialien virtuell analysiert werden.
einfach	Online bestellen: www.xirrus.ch/matters

Online Bestellung von xirrus simulation matters[®]

Um online eine xirrus simulation matters Bestellung aufzugeben, sind folgende Schritte und Überlegungen nötig:

Definition der Substanz, des Substanzgemischs

Sie haben drei Möglichkeiten, die Substanz zu identifizieren:

- Eingabe eines eindeutigen Namens
- Spezifikation des SMILES-Strings, einer Zeichensprache für chemische Formeln
- Zeichnen einer chemischen Struktur im Formel-Editor

Eindeutiger chemischer Name

Bitte verwenden Sie nach Möglichkeit die systematische chemische Nomenklatur nach IUPAC (wie z. B. 2,3,4-Trimethylhexan) oder einen eindeutigen Trivialnamen (z. B. Norbornan) damit wir die Komponente eindeutig identifizieren können. Bezeichnungen nach INCI, wie sie vor allem bei kosmetischen Inhaltsstoffen verwendet werden, können meist auch eingesetzt werden.

Bitte vermeiden sie unklare Trivialnamen oder Abkürzungen.

SMILES-String

Wenn Sie den SMILES-String und den chemischen Namen nicht kennen, jedoch die molekulare Struktur darstellen können, zeichnen Sie einfach das betreffende Molekül mit dem Editor für die jeweilige Komponente. Beim Schliessen des Editors wird automatisch der SMILES-String erstellt.

Polymere: Bei Polymeren zeichnen sie die monomere Einheit und geben die Replikation der Einheit beidseits mit dem speziellen Atomtyp R an. Das geht durch Selektion des Endes mit Auswahlrechteck oder Lasso, so dass nur das endständige Atom ausgewählt wird. Das Pseudo-Atom R findet sich im Menü Atome unter Pseudoatome. Der SMILES enthält dann * [und evtl. eine Masse, die Sie ignorieren können] für das Stellvertreter-Atom. Vergessen Sie nicht, den Polymerisierungsgrad im Feld für den Namen der Komponente zu erwähnen.

Biopolymere (Peptide und Genfragmente) sind sehr geeignet für die Art der Simulation, jedoch sind lange Sequenzen ausserhalb der Reichweite dieses Auftragsvolumens. Haben Sie spezielle Fragen zu Interaktionen und Eigenschaften von Biopolymeren nehmen Sie am besten direkt mit uns Kontakt auf und lassen Sie Ihren Fall individuell abklären.

Weitere Komponenten

Um weitere Komponenten des Gemischs einzugeben, klicken Sie auf den entsprechenden Link, worauf ein Eingabebereich für die zusätzliche Komponente aufklappt. Sie können beliebig viele Komponenten definieren, aber beachten Sie den steigenden Preis für das umfangreichere System.

Mit weiteren Komponenten verfahren Sie genau gleich. Zusätzlich müssen Sie entweder die Molverhältnisse zu den anderen Komponenten als ganzzahlige Einheiten angeben, so wie Sie das bei chemischen Reaktionen auch vorzugsweise tun würden, oder einfach die Massenanteile deklarieren, so dass diese gemeinsam 100 % ausmachen.

Beachten Sie dabei, dass keine Komponente unter 1 % Massenanteil haben kann, weil wir auf eine gewisse statistische Menge in der Simulation angewiesen sind, um überhaupt eine

verlässliche Aussage zu makroskopischen Grössen berechnen zu können.

Chiralität

Sie haben die Möglichkeit, Chiralität zu berücksichtigen. Dies kann von Bedeutung sein, wenn Sie chirale Komponenten verwenden. Im Werkstoff-Umfeld ist das selten der Fall, im bio- und medizinischen Bereich (Life-Science) kann das entscheidend sein.

Wenn Sie nicht wissen, was Chiralität bedeutet, können Sie hier getrost «nein» wählen.

Geben Sie hier an, dass wir die Chiralität (Händigkeit, Enantiomorphie) berücksichtigen sollen, führt das generell zu einer aufwendigeren Simulation. Die Berücksichtigung der Chiralität ist nur sinnvoll, wenn chirale Komponenten vorkommen. Unsere Empfehlungen können Sie der Tabelle entnehmen, welche sie in der online-Hilfe finden.

Umgebungsbedingungen

Definieren Sie hier die Temperatur und den Druck, bei welchem wir die Materialeigenschaften bestimmen sollen. Normalerweise hängen die Materialeigenschaften von den Umgebungsbedingungen ab (beispielsweise wird ein Kunststoff bei Erwärmung weicher).

Sie können auch mehrere Umgebungsbedingungen definieren, zum Beispiel um eine «Messreihe» zu simulieren. Dies löst dann mehrere separate Simulationen derselben Substanz bei den genannten Umgebungsbedingungen aus, also nicht einfach eine Extrapolation. Dies ist gerade bei neuartigen Materialien entscheidend, die ungewöhnliche Eigenschaften aufweisen (beispielsweise sich bei Erwärmung erhärten).

Gewünschte Eigenschaften

Wählen Sie schliesslich aus, welche Eigenschaften wir bestimmen sollen. In der online Hilfe sind die Einheiten genannt, welche wir berechnen.

Angaben überprüfen

Klicken Sie hier, um Ihre Angaben auf Vollständigkeit zu überprüfen. Fehlende oder inkonsistente Eingaben werden Ihnen angezeigt. Die Überprüfung erfolgt auch automatisch beim Absenden der Bestellung.

Bemerkungen

Geben Sie hier allfällige Bemerkungen zu Ihrer Bestellung oder zu Ihrem Material, oder Ihre Fragen an.

Adressierung

Geben Sie an, an wen wir die Bestätigung und Resultate richten sollen.

Grundlagen von xirrus simulation matters^s

Simulation	xirrus simulation matters simuliert Ihr Material bei durch Sie definierten Umgebungsbedingungen (Druck, Temperatur) in mikroskopisch ausreichender Grösse und Zeit, analysiert die Resultate und berechnet die erforderlichen Eigenschaften. Die Simulation erfolgt unter thermodynamischen Gleichgewichtsbedingungen, bei konstantem Druck und konstanter Temperatur (sog. NPT-Ensemble). Die voreingestellten Werte entsprechen den Standardbedingungen eines Labors.
Molekül-Dynamik-Simulation	xirrus simulation matters basiert auf klassischer Moleküldynamik-Simulation. Berechnet werden alle Moleküle mit ihren Atomen und Bindungen als physikalische Modelle mit der Beweglichkeit der Strukturen und der physikalischen Dynamik, die sich im Verlauf der Zeit aufgrund der thermischen Bewegung ergibt. Salopp gesagt, die Atome spielen Billard in 3D. Die angebotenen Eigenschaften für Materialien lassen sich aus den molekularen Bewegungen mittels statistischer Thermodynamik errechnen. Ja, das ist alles sehr kompliziert. Deshalb wollen wir Ihnen auch nicht die Bedienung der Programme erklären, sondern Sie einfach den Nutzen daraus ziehen lassen. Als produktive Software verwenden wir GROMOS und Gromacs. Das sind im wissenschaftlichen Umfeld bewährte Produkte.
Kraftfeld (Modell)	Die Molekülmodelle bauen auf atomaren Bestandteilen und Molekülfragmenten auf. Sie wurden über Jahre entwickelt und verfeinert. Wir verwenden GROMOS-Kraftfelder und Erweiterungen.
Phase, Aggregatzustand	Der Aggregatzustand (fest, flüssig, gasförmig) eines Stoffes hängt von den Umgebungsbedingungen (Druck, Temperatur) ab. Er entsteht in der Simulation von alleine. Wir beginnen mit einem homogenen, zufällig erzeugtem Gemisch – wie es in echt auch vorkommt.
Know-how	Viel Know-how und Erfahrung von xirrus fliesst in die Bereitstellung neuer Modelle und neuer Kombinationen von Modellen, sowie in die Parameter und in den Service.
Spezialfälle	Gerne führen wir für Sie auch Simulationen durch, die von diesen Standardvorgaben abweichen (z. B. Nichtgleichgewichts-Simulationen, oder konstantes Volumen statt konstantem Druck). Nehmen Sie mit uns Kontakt auf, damit wir die Details besprechen können.
Andere Vorhaben	Wir helfen Ihnen, molekular bedingte oder auf anderen Einzelteilen basierte komplexe Probleme zu verstehen und zu lösen. Gerne besprechen wir mögliche Abklärungen mit Ihnen persönlich oder stellen unsere Methoden vor. Ein guter Einblick über unsere Tätigkeit vermittelt Ihnen unser Video auf www.xirrus.ch/video .