



El Secretariado de Infraestructura para la Investigación (SIPI)

INFORMA

Adquisición de Software Avanzado de Simulación

El [Instituto de Química Fina y Nanoquímica](#) de la UCO (**IUNAN**) ha incorporado software avanzado de simulación con cargo al proyecto **SOMM17-6116** concedido por la Consejería de Economía y Conocimiento de la Junta de Andalucía para Ayudas para el Fortalecimiento de Institutos Universitarios de Investigación de las Universidades Andaluzas, Centros e Infraestructuras para la adquisición del sello «Severo Ochoa» o «María Maeztu», en el ámbito del Plan Andaluz de Investigación, Desarrollo e Innovación (PAIDI 2020), cofinanciada con fondos FEDER, cuyo Responsable Científico es el investigador *Francisco José Romero Salguero*.

OBJETIVO y FUNCIONALIDAD DEL EQUIPAMIENTO ADQUIRIDO

Características del equipamiento adquirido.

Materials Studio incluye un entorno gráfico de usuario —Materials Studio Visualizer— en el que los investigadores pueden construir, manipular y visualizar modelos de moléculas, materiales cristalinos, superficies y estructuras mesoescalares. Materials Studio Visualizer se complementa con un extenso conjunto de métodos de solución que incluye cuántica, atómica (o clásica) mesoescala y estadístico, que permiten a los investigadores evaluar materiales con varios tamaños de partículas y escalas temporales. También incluye herramientas para evaluar estructuras de cristales y crecimiento de cristales

Valor añadido e impacto científico-tecnológico de la adquisición

Esta licencia incluye el uso de 1 usuarios flotante para todos los paquetes incluidos dentro de la 'suite' de Materials estudio que se pueden resumir en cuatro conjuntos de módulos:

- 1) BIOVIA Materials Studio Academic Base;
- 2) BIOVIA Materials Studio Academic Quantum;
- 3) BIOVIA Materials Studio Academic Classical and Mesoscale
- 4) BIOVIA Materials Studio Academic Crystallization.

Técnicas o investigaciones que el equipo permitirá desarrollar o abordar.

Con Materials Studio se puede:

- Acelerar la innovación: Materials Studio permite a los equipos de científicos e investigadores de materiales desarrollar nuevos materiales de mejor rendimiento a menor coste, de forma más rápida y eficiente que utilizando solo métodos de prueba y experimentación.
- Reducir los costes: Los clientes de Materials Studio han indicado una reducción de hasta 10 veces en el número de experimentos requeridos para introducir un nuevo material.
- Mejorar la eficiencia: Automatiza tareas de modelado repetitivas o tediosas creando protocolos de modelado y simulación reutilizables.
- Colaborar: Captura y comparte el conocimiento y los métodos de los expertos para hacer que la ciencia computacional sea más consistente en todos los contornos geográficos y organizativos

Equipo responsable y potencial de utilización por parte de otros grupos de investigación.

El instrumento lo gestiona el Instituto Universitario de Nanoquímica (IUNAN) y se encuentra disponible para investigadores tanto de la propio UCO como de OPIs y empresas privadas que lo soliciten.

