



LiqCryst 2019

- Produktinfo -

Inhalt:

Übersicht

Funktionen

Datenvorhersage

Datenanalyse

Suchfunktionen

Suche nach Substanzen/ Verbindungen

Suche nach Eigenschaften

Suche nach Referenzen

Analysen und Vorhersagen

Vorhersage von Phasenverhalten und Ähnlichkeiten

Vergleichsanalyse

Struktureditor

Übersicht

LiqCryst ist die weltweit umfangreichste Flüssigkristall-Datenbank und eine der größten numerischen Materialendatenbanken überhaupt. LiqCryst kann physikalische Eigenschaften von chemischen Verbindungen durch statistische Extrapolation von gegenwärtig bekannten ähnlichen Verbindungen vorhersagen.

LiqCryst bietet eine vollständige Dokumentation von Informationen über aktuell bekannte Flüssigkristalle. Ziel von LiqCryst ist es, die Eigenschaften von Flüssigkristallen zu analysieren und zu vergleichen. Die aus dieser Analyse gewonnenen Erkenntnisse geben einen Einblick in die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen und können zur Vorhersage der physikalischen Eigenschaften neuer Verbindungen verwendet werden. LiqCryst ist daher nicht nur ein Nachschlagewerk, sondern ein Hilfsmittel, mit dem Anwendern die zielgerichtete Herstellung auf bestimmte Anwendungen hin zugeschnittener Verbindungen erleichtert.

Mit LiqCryst bieten wir Wissenschaft und Unternehmen eine hochqualitative Datenbank und damit ein wichtiges Instrumentarium der Flüssigkristallforschung mit zahlreichen Analysemöglichkeiten, wie Strukturvergleich, Datenauswertung und Datenvorhersage.

LiqCryst erfasst Stoffdefinitionen (Namen, Registrierungsnummern, Strukturzeichnungen) und umfangreiche chemische, physikalische und biologische Eigenschaftswerte für numerische Auswertungen. Chemische Strukturen sind dabei vielfältig suchbar, klassisch durch Atome und Bindungen, aber auch Fragment-Listen (Ringe, Brücken und Endgruppen) und Line-Notations (einzeilige Strukturtextbeschreibung).

In LiqCryst finden Sie Daten flüssigkristalliner Verbindungen zu Strukturen und physikalischen Eigenschaften von Flüssigkristallen, sowie eine Vielzahl von Literaturreferenzen zu

- 114.670 Verbindungen
- 129.753 Referenzen
- 448.126 Eigenschaften

Für alle Verbindungen sind Informationen zu Phasenschemata, Phasenumwandlungstemperaturen, elastischen Konstanten, spontanen Polarisierungen und Referenzen zu Literatur über spektroskopische Eigenschaften vorhanden. Zu mehr als 39.000 Verbindungen lassen sich Daten über die nematische Phase abrufen. Neben Informationen zu 18.000 chiralen Verbindungen liefert LiqCryst für über 6.000 Verbindungen auch Daten zur ferroelektrischen smektischen C*-Phase.

Funktionen

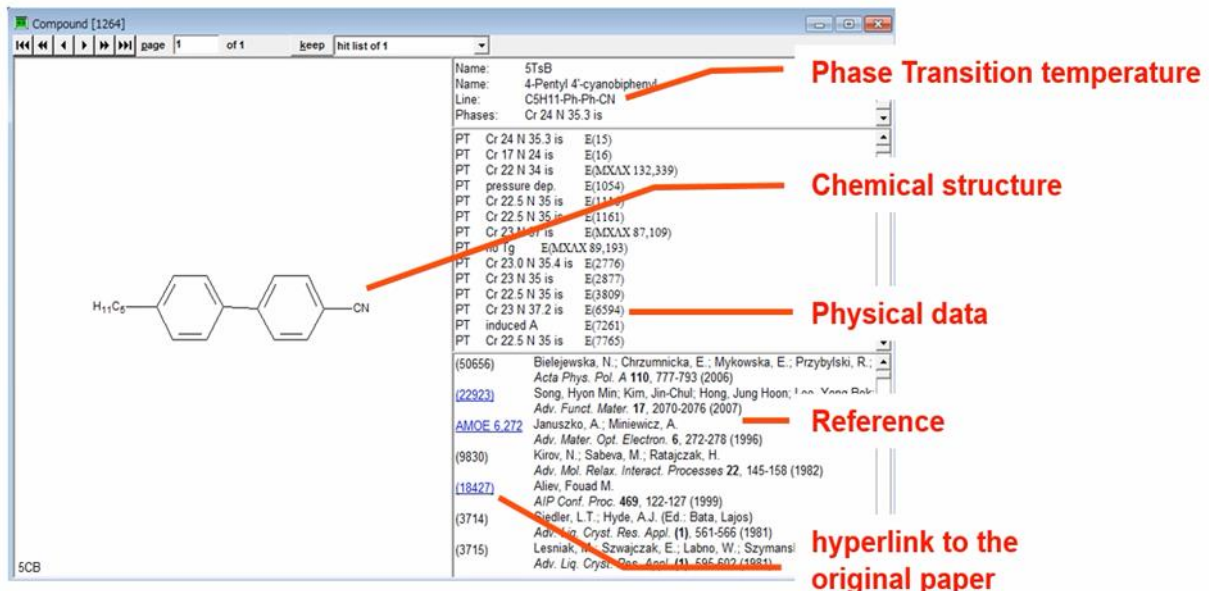
LiqCryst ist eine Microsoft Windows-basierte Anwendung, die einen einfachen Zugriff auf eine einzigartige Datenbank mit Strukturen und Eigenschaften von flüssigkristallinen Verbindungen ermöglicht.

Folgende Suchparameter sind möglich:

- (Sub-)Strukturen
- Klassifikationen und Eigenschaftsprofile
- Chemische Ähnlichkeiten
- Phasensequenzen
- Phasenübergangstemperaturen
- physikalischen Messungen oder Referenzen
- (numerische) physikalische Messwerte
- Referenzen (Patente, Produktbeschreibungen, Autoren, Gesetz, Kataloge).

Dabei kann die Suche nicht nur nach (Sub-)Strukturen durchgeführt werden, die durch Atome und Bindungen definiert sind, sondern auch nach (Sub-)Strukturen, die durch eine Liste von Fragmenten (Ring, Brücke, Flügelgruppe, Polymerbackbone) definiert sind. Ferner können physikalische Daten wie Übergangstemperaturen, Mesophasen-Typen numerisch als Suchanfrage verwendet werden. Auch eine Suche über Trivialnamen, Autoren Patentdatum und spezifische Zeitschriften ist möglich.

Tendenzen und Abweichungen innerhalb homologer Reihen lassen sich grafisch darstellen.



The screenshot displays the following information:

- Name:** 4-Pentyl 4'-cyanobiphenyl
- Line:** C5H11-Ph-Ph-CN
- Phases:** Cr 24 N 35.3 is
- Phase Transition Temperatures (PT):**
 - Cr 24 N 35.3 is E(15)
 - Cr 17 N 24 is E(16)
 - Cr 22 N 34 is E(MXAX 132,339)
 - pressure dep. E(1054)
 - Cr 22.5 N 35 is E(1144)
 - Cr 22.5 N 35 is E(1161)
 - Cr 23 N 37 is E(MXAX 87,109)
 - Cr 19 is E(MXAX 89,193)
 - Cr 23.0 N 35.4 is E(2776)
 - Cr 23 N 35 is E(2877)
 - Cr 22.5 N 35 is E(3809)
 - Cr 23 N 37.2 is E(6594)
 - induced A E(7261)
 - Cr 22.5 N 35 is E(7765)
- Chemical Structure:** A biphenyl ring system with a pentyl group (H₁₁C₅) on one ring and a cyano group (CN) on the other.
- References:**
 - (50656) Bielejewska, N.; Chrzumnicka, E.; Mykowska, E.; Przybylski, R.; *Acta Phys. Pol. A* **110**, 777-793 (2006)
 - (22923) Song, Hyon Min; Kim, Jin-Chul; Hong, Jung Hoon; Lee, Yoon Bok; *Adv. Funct. Mater.* **17**, 2070-2076 (2007)
 - AMQE 6,272 Januszko, A.; Miniewicz, A.; *Adv. Mater. Opt. Electron.* **6**, 272-278 (1996)
 - (9830) Kirov, N.; Sabeva, M.; Ratajczak, H.; *Adv. Mol. Relax. Interact. Processes* **22**, 145-158 (1982)
 - (18427) Aliev, Fouad M.; *AIP Conf. Proc.* **469**, 122-127 (1999)
 - (3714) Siedler, L.T.; Hyde, A.J. (Ed.: Bata, Lajos) *Adv. Liq. Cryst. Res. Appl.* (1), 561-566 (1981)
 - (3715) Lesniak, J.; Szwajczak, E.; Labno, W.; Szymanski; *Adv. Liq. Cryst. Res. Appl.* (1), 595-602 (1981)

Red arrows in the image point from labels to specific data points:

- Phase Transition temperature:** Points to the PT list.
- Chemical structure:** Points to the biphenyl structure.
- Physical data:** Points to the PT list.
- Reference:** Points to the list of references.
- hyperlink to the original paper:** Points to the reference list.

Datenanalyse

Eine der wichtigsten Funktionen von LiqCryst ist die Analyse von Strukturen und Eigenschaften der Flüssigkeitskristalle. Dazu besteht eine Vielzahl von Vergleichsmöglichkeiten, die sowohl auf Moleküle als auch auf Fragmente angewendet werden können. LiqCryst ermöglicht eine einfache statistische Analyse von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen, z.B. können zwei Substrukturen durch ihre Übergangstemperaturen verglichen werden. Ferner lassen sich etwa Namensbestandteile oder einzelne Fragmente von Substanzen vergleichen. Dies ist auch für Strukturzeichnungen möglich, welche mittels des Struktureditors (s.u.) erstellt oder importiert werden können. Gleiches gilt für Ringe oder homologe Reihen.

Datenvorhersage

LiqCryst ermöglicht die Vorhersage von Daten. So können die Temperaturen von Phasenübergängen neuer Verbindungen prognostiziert werden, indem eine statistische Extrapolation von Daten bereits vorhandener ähnlicher Verbindungen erfolgt.

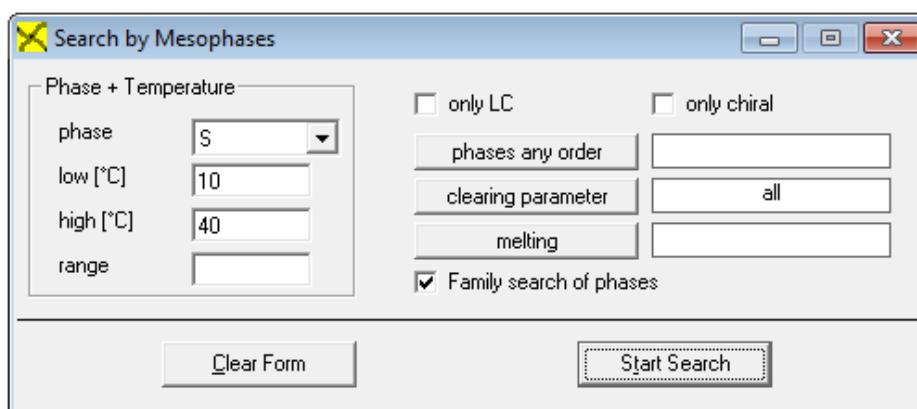
Suchfunktionen

Neben der Datenanalyse sind die umfangreichen Suchmöglichkeiten eine der wichtigsten Funktionen von LiqCryst. Neben der Schnellsuche (einzeiliges Freitextfeld) stehen folgende Suchfunktionen zur Verfügung:

Suche nach Substanzen/ Verbindungen

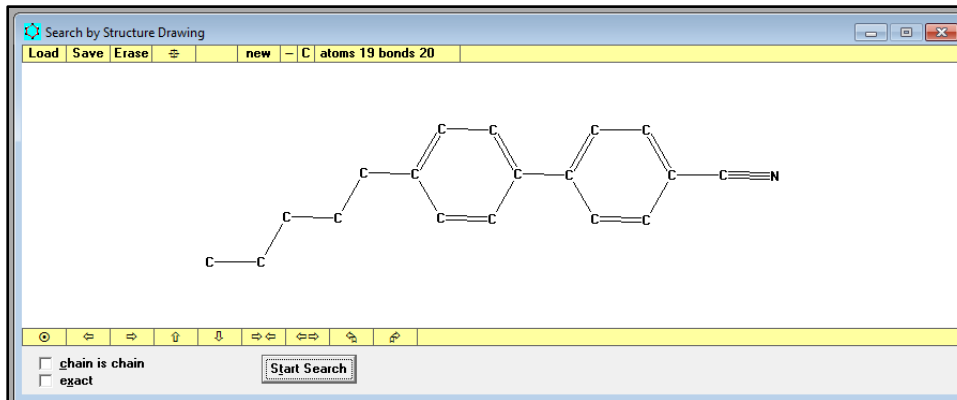
Die Suche nach Substanzen/ Verbindungen knüpft an Namen, Summenformel oder Masse an. Ferner möglich sind die folgenden Suchparameter:

- Mesophasen: Suche nach Flüssigkristallen mit identischem oder ähnlichem Phasenverhalten.
Eine "Search by Mesophase" basiert in der Regel auf einem bestimmten Phasenverhalten, so dass eine Liste von Verbindungen entsteht, die alle ähnliche Phasenübergänge aufweisen. Die Suche kann um eine bestimmte Phase mit oder ohne Temperaturgrenzen erfolgen (diese können in Form eines Temperaturbereichs und/oder von Hoch- und Tieftemperaturwerten erfolgen).



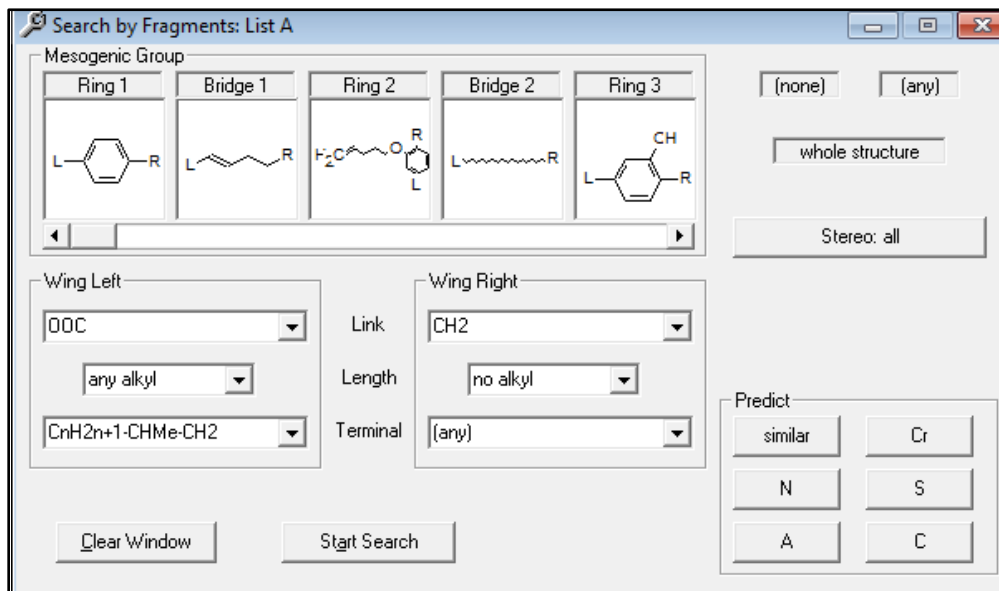
- Line-Notation: Suche nach Substanzen oder (Sub-)Strukturen anhand einer Line-Notation. (z.B. C5-Ph-PH-CN für 5CB)

Die „Search by Structure-Drawing“-Suche basiert auf der Zeichnung eines Flüssigkristallmoleküls. Mit der Suche können Sie entweder ein zuvor gespeichertes Molekül bearbeiten oder ein neues erstellen.



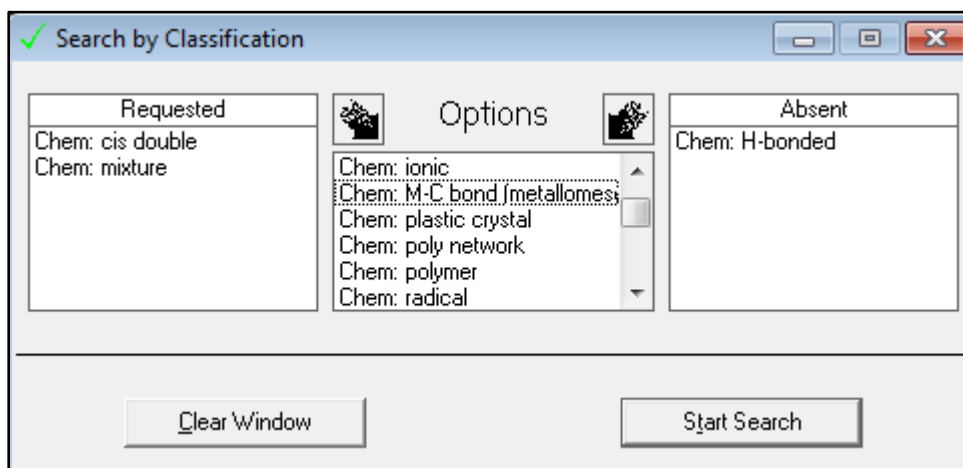
- „Search by Fragments“: Suche nach Flüssigkristallen auf Basis von Molekülfragmenten (funktionellen Gruppen).

Dabei wird eine chemische Substruktur erstellt, indem eine Struktur für die verschiedenen Abschnitte des Moleküls ausgewählt wird.



- „Search by Classification“ allgemeine Suche nach Gruppen von Flüssigkristallen, die bestimmte Klassifizierungsmerkmale miteinander teilen.

Eine „Search by Classification“ beinhaltet als erweiterte Suchoption eine Auswahl wichtiger Eigenschaften von Flüssigkristallmolekülen. Für die genauere Eingrenzung des Suchergebnisses können aus dieser Auswahl Eigenschaften angefordert oder ausgeschlossen werden, um sicherzustellen, dass entweder alle oder keine der in der Suche gefundenen Moleküle das ausgewählte Merkmal aufweisen.



Suche nach Eigenschaften

Die „Search by Properties“ ermöglicht die Suche anhand physikalischer Eigenschaften, bspw. Dichte oder Phasenübergangstemperatur. Als Suchparameter kommen Zahlen, Zahlenbereiche oder Textfragmente in Betracht.

Suche nach Referenzen

„Search by References“ bezieht sich auf Patentnummern, Literaturquellen, Jahrgänge, Zeiträume, Bände oder Autoren.

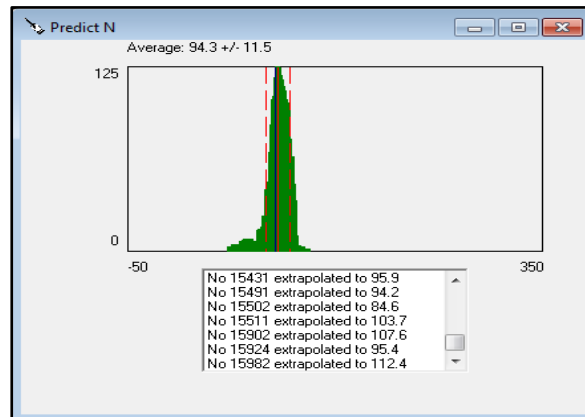
Analysen und Vorhersagen

Vorhersage von Phasenverhalten und Ähnlichkeiten

Die Funktion "Predict by Similarity" nutzt Ähnlichkeiten zwischen Molekülen aus, um numerisch Phasenübergangstemperaturen vorherzusagen.

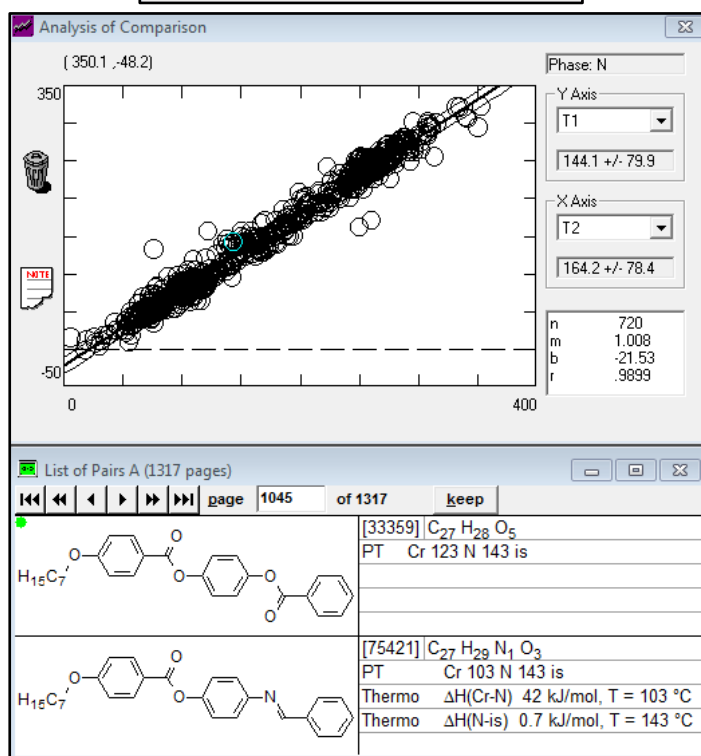
Übergänge:

- Cr: Schmelzpunkt
- N: Nematische Phasenübergangstemperatur
- S: Smektische Phasenübergangstemperatur
- A: Smektische A-Phasenübergangstemperatur
- C: Smektische C-Phasenübergangstemperatur



Vergleichsanalyse

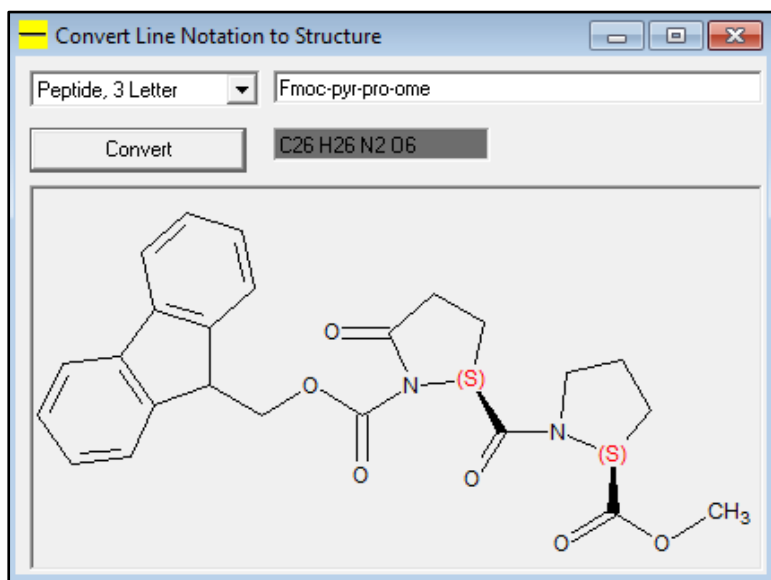
LiqCryst ermöglicht mit der Funktion „Analysis of Comparison“ einfache statistische Analyse von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen, z.B. können zwei Substrukturen durch ihre Übergangstemperaturen verglichen werden. Diese Option ermöglicht die Untersuchung der Paare in Bezug auf das Phasenverhalten.



Struktureditor

Der Struktureditor ermöglicht die grafische Darstellung von Molekülen oder einzelnen Fragmente. Hierbei stehen verschiedene Funktionen zur Verfügung, um den Aufbau solcher Strukturen zu vereinfachen; es können auch fertige Strukturfragmente per Drag & Drop in bestehende Strukturen eingefügt werden.

Zudem ist der Struktureditor auch in der Lage, eine Line-Notation in eine Strukturzeichnung umwandeln - dabei werden drei Varianten von Line-Notations unterstützt: LiqCryst Line-Notation, Protein three-letter peptide und Protein one-letter peptide. Weiterhin lassen sich die grafischen Daten des Struktureditors auch für die Datenanalyse verwenden.



Kontakt:

LCI-Systems GmbH

kontakt@lci-systems.com

+49 (0)40 42 10 43 51