

АЛГОРИТМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОСНОВНОСТИ ПО ШКАЛЕ ЙОДА

Оптимизация
геометрии
структурь

Построение
модели
основности

ChemCraft

AIMAll



Firefly 8.0.1.

Statistica

Изображение
структурь
молекулярного
комплекса

Расчет квантово-
топологических
характеристик
электронной
плотности

Оценка
качества
моделиро-
вания

Григорьева Е.А., Барташевич Е.В. Влияние учета растворителя на качество моделирования основности для азотсодержащих соединений по шкале йода. Наука ЮУрГУ [Электронный ресурс]: материалы 68-й научной конференции. Секции естественных наук. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. С. 127-132. Published: JUL 2016.