

# АЛГОРИТМ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОСНОВНОСТИ ПО ШКАЛЕ ЙОДА

Оптимизация  
геометрии  
структуры

Построение  
модели  
основности

ChemCraft

AIMAll



Firefly 8.0.1.

Statistica

Изображение  
структуры  
молекулярного  
комплекса

Расчет квантово-  
топологических  
характеристик  
электронной  
плотности

Оценка  
качества  
моделиро-  
вания