

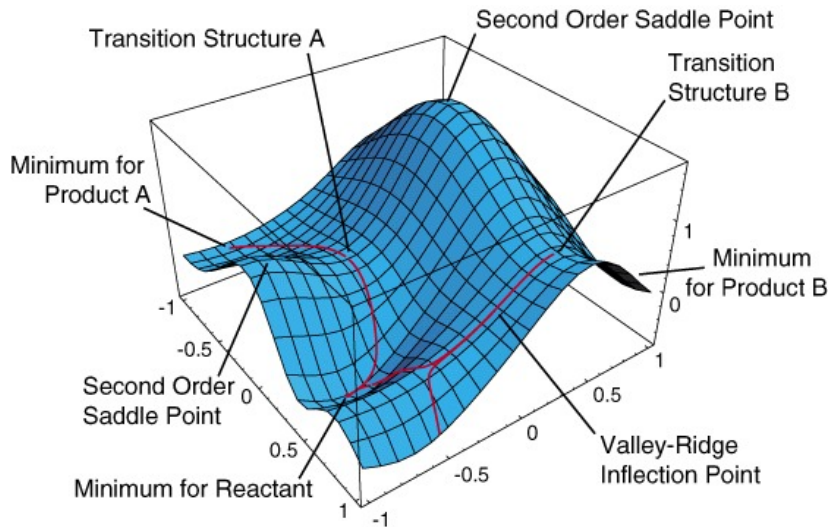
Исследование поверхности потенциальной энергии молекул. Поиск переходных состояний.

Новиков Георгий

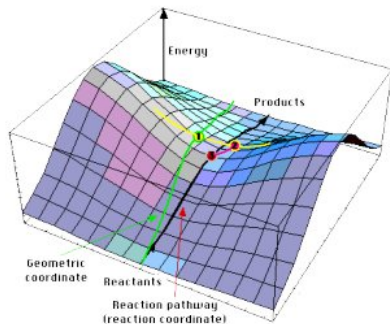
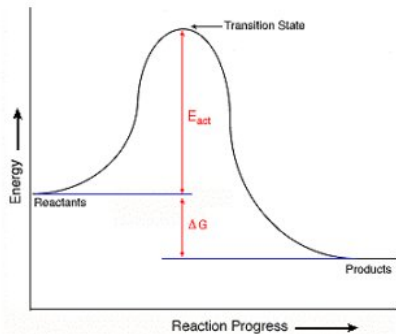
Научный руководитель:
Рязанцев Михаил Николаевич
СПБАУ РАН, (Академический университет), с.н.с. лаборатории
нанобиотехнологий

2017

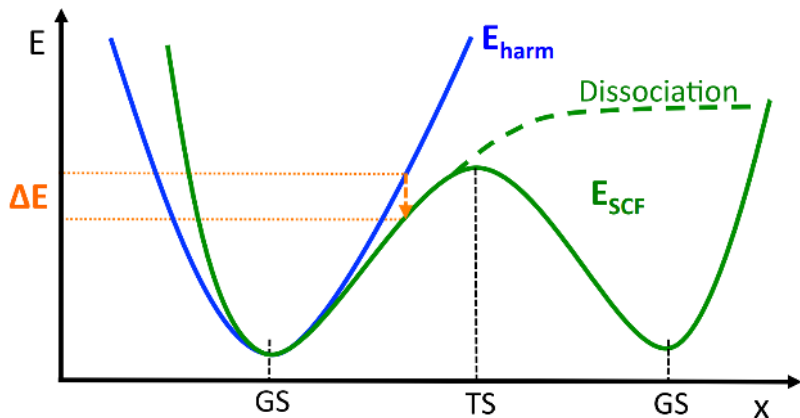
Поверхность потенциальной энергии



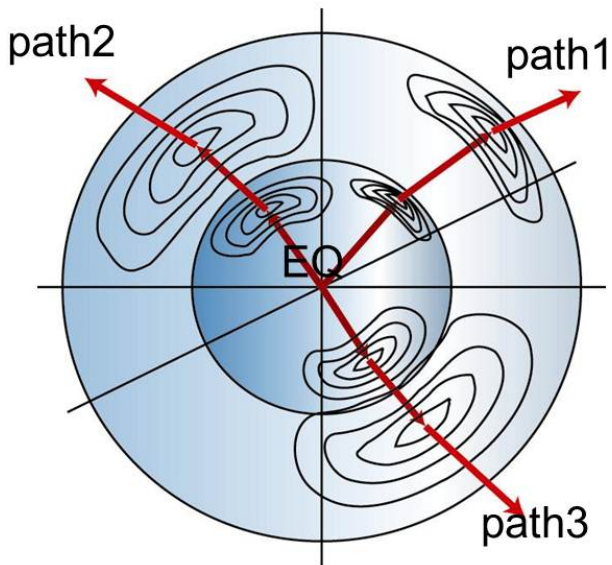
Переходное состояние



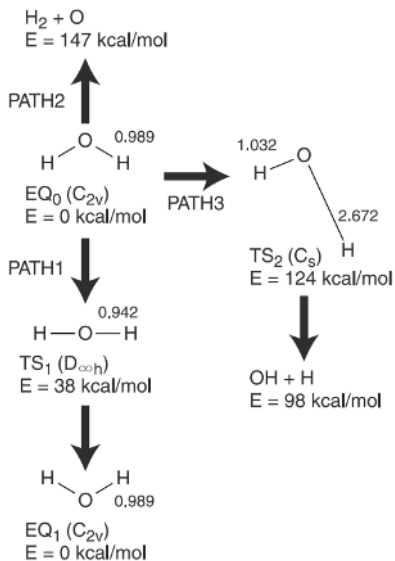
Scaled Hypersphere Search



Scaled Hypersphere Search



GRRM для молекулы воды



Этен

