

MOLEKULATERVEZÉS SPEKTRÁLIS TULAJDONSÁGOK ALAPJÁN

Kémiai rendszerek minőségi és mennyiségi jellemzését elsősorban spektroszkópiák használatával érhetjük el. Amennyiben a kémiai részecske spektroszkópiai sajátosságai technikai okokból nem mérhetőek spektrális tulajdonságaik számíthatóak. A kvantumkémiai számítások robusztussága miatt a számított spektrum alkalmas szerkezetazonosításra, molekulák spektrális tulajdonságainak prediktálására is.

SZÁMÍTHATÓ SPEKTRÁLIS SAJÁTSÁGOK

- Gázfázisú mikrohullámú spektrum
- IR-, Raman-, UV/Vis-, VCD -spektrumok



SZOLGÁLTATÁSOK

- Többkomponensű rendszerek termodinamikai paramétereinek nagy pontosságú előrejelzése
- Mérési elvek meghatározása, mérőműszerek tervezése



ESZKÖZÖK

- Gaussian szoftvercsomag
- AMS szoftvercsomag
- Dalton szoftvercsomag
- ORCA szoftver



REFERENCIÁK

- Femtomics Kft. – idegsejtes környezetben neurotranszmitter molekulák kétfotonos felszabadításához szükséges antennamolekulák tervezése
- Borsodchem Zrt. – MDI és TDI termékek és melléktermékek on-line mérési lehetőségei