

ИПХФ РАН

Основные направления использования химических приложений в ГРИД ННС

NAMD

MOLPRO-2010

GAMESS

GAUSSIAN +Linda

VASP 5.2

ABINIT

- теория элементарных химических процессов
- строение молекул и структура твердых тел,
- создание материалов с заранее заданными свойствами,
- кинетика и механизмы сложных химических реакций,
- нанотехнологии,
- создание биологически активных веществ и лекарственных препаратов,
- биотехнологии
- и многое другое....

