



INSTITUTUL NATIONAL DE
CERCETARE – DEZVOLTARE PENTRU
OPTOELECTRONICA



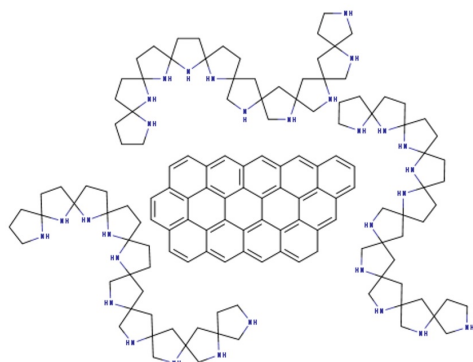
Certificat nr.: AJAEU/09/11337

Str. Atomistilor Nr.409, C.P. MG-5, Cod 077125, Magurele - Ilfov, Telefon/Fax: 021.457.45.22, E-mail:inoe@inoe.inoe.ro, http://inoe.inoe.ro

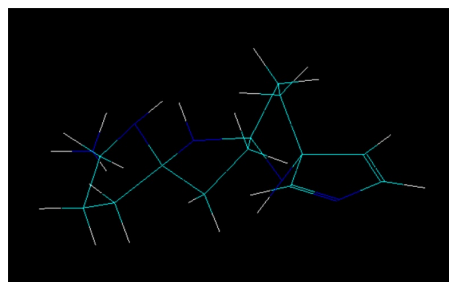
FIȘĂ TEHNICĂ

"Modelarea reactiilor de sinteza prin utilizarea programelor dedicate
(MarvinBean si HyperChem) "

Domeniul de utilizare: <i>Optospintronica</i>	
Tip: <i>Studiu stiintific</i>	Brevete:
Status: <i>Nou</i>	Data: <i>2023/11/20</i>
Proiectant: <i>INOE 2000 - Optospintronica</i>	Executant: <i>INOE 2000 - Optospintronica</i>



a)



b)

Date tehnice: Au fost utilizate programele MarvinBean (Chemaxon, Budapesta, Ungaria) si HyperChem (HypercubeUSA, Florida, SUA) pentru a modela structura si orientarea spatiala a compusilor utilizati in plasmonica. In figura 3 se observa diferentele dintre cele doua programe pentru polimerul polipirol, utilizat la sinteza structurilor grafena-polimeri semiconductori: MarvinBean este utilizat pentru o vedere de ansamblu si pentru o orientare 2D a structurii in timp ce HyperChem poate sa redea structura tinand cont de excluziunea sterica a moleculelor.