

## Szczegółowy opis przedmiotu zamówienia – część B

L.p.	Nazwa oprogramowania / minimalne parametry wymagane przez zamawiającego	Ilość	Opis techniczny oferowanego oprogramowania (podać również nazwę i wersję)
1	<p><b>Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych metodami <i>ab-initio</i> dla dużych układów:</b></p> <p><b>TURBOMOLE V7.0</b> (licencja akademicka wraz ze wsparciem i aktualizacją na min. 1 rok, wymagana dożywotnia licencja dla centrum komputerowego obsługującego nie więcej niż trzy instytucje akademickie (uniwersytety)) lub równoważne.</p> <p><b>Warunki równoważności:</b> Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych metodami <i>ab-initio</i> dla dużych układów zapewniający:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– obliczenia dla układów w stanie podstawowym metodami <i>HF, DFT, MP2, CCSD(T)</i></li> <li>– obliczenia dla układów w stanie wzbudzonym metodami <i>RPA, TDDFT, CIS(D), CC2, ADC2</i></li> <li>– optymalizacja geometrii dla stanów podstawowych i wzbudzonych</li> <li>– obliczenia energii stanu podstawowego metodami z uwzględnieniem jawnej korelacji : <i>MP2-F12, PNO-MP2-F12, MP3-F12, MP4(F12*), CCSD(F12), CCSD(F12*), CCSD(F12(T), CCSD(F12*)(T)</i></li> <li>– obliczenia DFT dla układów periodycznych</li> <li>– optymalizacja geometrii, wyszukiwanie stanów przejściowych</li> <li>– obliczenia metodami dynamiki molekularnej</li> <li>– obliczenia dla widm IR, UV/VIS, Ramana, CD</li> <li>– obliczenia wielkości fizykochemicznych</li> </ul>	1	

**Platforma Analiz i Archiwizacji Danych (PAAD)** - Projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka „Dotacje na innowacje”

Uniwersytet Śląski w Katowicach  
ul. Bankowa 12, 40-007 Katowice

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu im. Włodzimierza Trzebiatowskiego  
ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław

**Załącznik nr 2B do SIWZ nr DZP.381.130.2015.DW**

<ul style="list-style-type: none"> <li>– obliczenia w modelu rozpuszczalników COSMO</li> <li>– akceleracja obliczeń metodą RI (Resolution-of-the Identity): <i>RI-DFT</i>, <i>RI-MP2</i>, <i>RI-CC2</i>, <i>RI-ADC(2)</i>, <i>RI-CIS(D)</i> and <i>RI-CIS(D<math>\infty</math>)</i>, <i>RI-JK</i></li> <li>– obliczenia równoległe z wykorzystaniem <i>SMP</i>, <i>OpenMP</i>, <i>Fork</i>, <i>MPI</i>, <i>Global Arrays</i></li> <li>– wymagana dostępność interfejsu graficznego tego samego producenta</li> </ul> <p>Oprogramowanie zoptymalizowane do pracy na platformie systemowej Linux/32 i 64 bit.</p>	
---	--

**Wymagania dodatkowe:**

Usługa wsparcia technicznego i aktualizacji co najmniej 12 miesięcy. W ramach świadczenia usługi wsparcia technicznego i aktualizacji dla oprogramowania przez Wykonawcę, Zamawiający musi mieć prawo do:

- otrzymania nowych wersji oprogramowania i udoskonałów do wersji bieżących oprogramowania (otrzymanie nowych edycji oprogramowania, wydań uzupełniających, poprawek programistycznych) wraz z licencją bez dodatkowych opłat licencyjnych
- asysty technicznej w zakresie problemów, oraz zgłaszania błędów do Wykonawcy;

Na podstawie art. 29 ust. 3 Pzp Zamawiający nie jest w stanie opisać przedmiotu zamówienia w sposób jednoznaczny i wyczerpujący dlatego posługuje się znakami towarowymi.

.....  
data i czytelny podpis lub podpis na pieczęci imiennej osoby  
upoważnionej do składania oświadczeń w imieniu Wykonawcy