**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** | **Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych metodami *ab-initio* dla dużych układów:**  **TURBOMOLE V7.0** (**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.**  **Warunki równoważności:**  Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych metodami *ab-initio* dla dużych układów zapewniający:   * obliczenia dla układów w stanie podstawowym metodami *HF, DFT, MP2, CCSD(T)* * obliczenia dla układów w stanie wzbudzonym metodami *RPA, TDDFT, CIS(D), CC2, ADC2* * optymalizacja geometrii dla stanów podstawowych i wzbudzonych * obliczenia energii stanu podstawowego metodami z uwzględnieniem jawnej korelacji : *MP2-F12, PNO-MP2-F12, MP3-F12, MP4(F12\*), CCSD(F12), CCSD(F12\*), CCSD(F12(T), CCSD(F12\*)(T)* * obliczenia DFT dla układów periodycznych * optymalizacja geometrii, wyszukiwanie stanów przejściowych * obliczenia metodami dynamiki molekularnej * obliczenia dla widm IR, UV/VIS, Ramana, CD * obliczenia wielkości fizykochemicznych * obliczenia w modelu rozpuszczalników COSMO * akceleracja obliczeń metodą RI (Resolution-of-the Identity): *RI-DFT, RI-MP2, RI-CC2, RI-ADC(2), RI-CIS(D) and RI-CIS(D∞) , RI-JK* * obliczenia równoległe z wykorzystaniem *SMP, OpenMP, Fork, MPI, Global Arrays* * wymagana dostępność interfejsu graficznego tego samego producenta   Oprogramowanie zoptymalizowane do pracy na platformie systemowej Linux/32 i 64 bit. | **1** |  |

**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:

* 1. otrzymania nowych wersji oprogramowania i udoskonaleń do wersji bieżących oprogramowania (otrzymanie nowych edycji oprogramowania, wydań uzupełniających, poprawek programistycznych) wraz z licencją bez dodatkowych opłat licencyjnych
  2. 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