

## Szczegółowy opis przedmiotu zamówienia – część A

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 struktury molekularnej, reaktywności, widm elektronowych, oscylacyjnych oraz NMR:</b></p> <p>Licencja Q-CHEM 4.3 (licencja bez ograniczeń czasowych na klaster 48 węzłów dla maksymalnie 6 grup badawczych pracujących na tym klastrze z różnych lokalizacji geograficznych, ze wsparciem technicznym (QMP) na okres 5 lat, lub równoważna</p> <p><b>Warunki równoważności:</b></p> <p>Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych struktury molekularnej, reaktywności, widm elektronowych, oscylacyjnych oraz NMR zapewniający:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- zintegrowany interfejs graficzny z kontekstowym systemem pomocy, umożliwiający konstruowanie molekuł, generowanie plików wejściowych do obliczeń oraz wizualizacje wyników</li> <li>- obliczenia metodami SCF dla stanów podstawowych: RHF, UHF, ROHF, z wykorzystaniem analitycznych pierwszych i drugich pochodnych odpowiednio dla optymalizacji geometrii oraz analizy częstości harmonicznych, z ulepszeniami dla poprawy zbieżności (DIIS, Initial Guessing, MOM, DM, RCA)</li> <li>- obliczenia DFT z wykorzystaniem następujących funkcjonałów: Slater, Beckee '88 (B), GGA91 (Perdew '91, PW91), Gill '96, Gilbert and Gill '99 (GG99), Handy and Cohen's OPTX (HC_OPTX), VWN (#5</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 2A do SIWZ DZP.381.149.2015.DW**

<p>parameterization), Lee-Yang-Parr (LYP), LYP (EDF1 parameterization), Perdew-Zunger '81 (PZ81), Perdew '86 (P86), Wigner, EDF1 and Becke(EDF1), PBE, SOGGA, SOGGA11, B3LYP, B3PW91, B3LYP5, SOGGA11-X, BMK, MPW1B95, MPWB1K, PW6B95, PWB6K, M05, M05-2X, M06, M06-2X, M06-HF, M08, M11, B3tLap, BR89BR94hyb, TPSSh, M06-L, M11-L, PK06, BR89, B94, TPSS, LRC-<math>\omega</math>PBEPBE, LRC-<math>\omega</math>PBEhPBE, <math>\omega</math>B97, <math>\omega</math>B97X, <math>\omega</math>B97X-D, CAM-B3LYP,</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- obliczenia typu Constrained DFT</li> <li>- obliczenia DFT z wykorzystaniem kwadratur numerycznych oraz analitycznych pierwszych i drugich pochodnych odpowiednio dla optymalizacji geometrii oraz analizy częstości harmoniczných</li> <li>- obliczenia metodami Linear Scaling: mrXC, FTC, CFMM, LinK, ART, Grid Based Integration, Dual Basis</li> <li>- obliczenia całek dwuelektronowych metodami COLD PRISM oraz J Matrix Engine</li> <li>- obliczenia metodami MP2, Local MP2, RI-MP2, Dual-basis RI-MP2, SOS-MP2, MOS-MP2, Attenuated MP2</li> <li>- obliczenia metodami sprzężonych klasterów: CCSD, EOM-CCSD, CCSD(T), CCSD(2), QCISD, QCISD(T), QCISD(2), OD, OD(T), OD(2), VOOCC, VOD, VOD(T), VQCCD, VOD(2), CCVB</li> <li>- obliczenia dla stanów wzbudzonych: metodami CIS/XCIS, TD-DFT, EOM-CCS</li> <li>- automatyczna optymalizacja geometrii i struktur przejściowych</li> <li>- wyznaczanie widm oscylacyjnych z poprawkami anharmonicznymi, z wykorzystaniem całkowania po trajektoriach oraz kwaziklasycznej dynamiki molekularnej</li> </ul>	
--	--

**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 2A do SIWZ DZP.381.149.2015.DW**

<ul style="list-style-type: none"> <li>- obliczenia parametrów widm NMR o skalowalności liniowej</li> <li>- analiza populacyjna, analiza gęstości elektronowych, analiza AIM-PAC, analiza rozkładu gęstości w przestrzeni pędów</li> <li>- modelowanie efektów rozpuszczalnika: model Onsagera, Langevina, SS(V)PE, SM8, PCM, COSMO</li> <li>- obliczanie poprawek relatywistycznych oraz poprawek adiabatycznych i BSSE</li> <li>- analiza oddziaływań międzymolekularnych: SCF-MI, SCF-MI/RS, EDA, COVP</li> <li>- wizualizacja wiązań niekowalencyjnych (Johnson/Yang)</li> <li>- wykorzystanie pseudopotencjałów</li> <li>- obliczenia QM/MM</li> <li>- wsparcie OpenMP dla SCD/DFT, MP2, CC,</li> <li>- transformacji całkowych</li> <li>- akceleracja GPU dla RI-MP2</li> </ul>		
---	--	--

**Wymagania dodatkowe:**

Usługa wsparcia technicznego i aktualizacji co najmniej 60 miesięcy (5 lat). W ramach świadczenia usługi wsparcia technicznego i aktualizacji dla oprogramowania przez Wykonawcę, Zamawiający musi mieć prawo do:

- otrzymania udoskonaleń do wersji bieżących oprogramowania (otrzymanie wydań uzupełniających, poprawek programistycznych) bez dodatkowych opłat licencyjnych
- 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

**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