

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>Pakiet oprogramowania do dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio przy pomocy metod uwzględniających korelację elektronową:</p> <p>Licencja MolPro 2012.1 (licencja niekomercyjna bez ograniczeń czasowych dla wszystkich użytkowników klastra obliczeniowego z możliwością pracy równoległej na wszystkich węzłach (Molpro service site license, parallel execution, Cat.no.9), oprogramowanie w wersji źródłowej) lub równoważna.</p> <p>Warunki równoważności:</p> <p>Pakiet oprogramowania do dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio przy pomocy metod uwzględniających korelację elektronową, zapewniający:</p> <ul style="list-style-type: none"> - obliczenia QVCC - obliczenia MR-CI z wewnętrzną kontrakcją (MRCIC) - obliczenia metodami wieloreferencyjnymi z jawną korelacją: RS2-F12, MRCI-F12 - obliczenia metodami sprzężonych klasterów z uwzględnieniem jawnej korelacji - obliczenia rozszerzoną metodą wielostanowego CASPT2 - obliczenia Density Fitted CAS-SCF, CAS-PT2, LCCSD(T), LUCCSD(T), LRPA, MP2, RS2 - obliczenia LCC z uwzględnieniem orbitali wirtualnych: OSV- 	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 DZP.381.149.2015.DW

<p>LCCSD(T)</p> <ul style="list-style-type: none">- obliczenia Density Fitted z z jawną korelacją: DF-LMP2-F12, DF-LCCSD(T)-F12- obliczenia DF-DFT- obliczenia SAPT(CCSD)- obliczenia Stochastic FCI (FCIQMC)		
--	--	--

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