**Szczegółowy opis przedmiotu zamówienia – część C**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **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 typu ab-initio dla struktur krystalicznych i innych układów o symetrii translacyjnej:**  Licencja Crystal 14 (licencja akademicka bez ograniczeń czasowych dla oprogramowania w wersji dla systemów Unix/Linux/Intel MacOSX z rozszerzeniem MPP) lub równoważna.  **Warunki równoważności:**  Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio dla struktur krystalicznych i innych układów o symetrii translacyjnej, zapewniający:   * obliczenia metodami HF-SCF: RHF, UHF * obliczenia DFT z wykorzystaniem semi-lokalnych funkcjonałów, funkcjonałów hybrydowych (B3PW, B3LYP, HSE06, HSEsol, LC-wPBE, LC-wPBEsol, wB97, wB97-X, M05, M05-2X, M06, M06-2X, M06-HF, M06-L, B2-PLYP, mPW2-PLYP, B2GP-PLYP), poprawkami dla oddziaływań dyspersyjnych (DFT-D2) * obliczenia z uwzględnieniem analitycznych pierwszych pochodnych względem współrzędnych jąder oraz parametrów komórki elementarnej * obliczenia polaryzowalności oraz hiper-polaryzowalności * optymalizacja geometrii * obliczanie czestości harmonicznych, dyspersji fononów, fononowych struktur pasmowych, intensywności widm IR/Raman, eksploracja geometrii oraz energii dla wybranych drgań normalnych * obliczanie częstości anharmonicznych dla wiązań X-H * automatyczne obliczenia tensorów elastyczności, fotoelastyczności, piezoelektryczności * modelowanie roztworów stałych * obliczenia z uwzględnieniem pseudopotencjałów * konsystentne podejście do wszystkich układów periodycznych, w tym układów cienkowarstwowych, polimerów, nanorurek, dużych cząsteczek * automatyczna edycja geometrii, z uwzglednieniem redukcji symetrii, przesunieć, podstawień, dodawania i usuwania atomów * analiza struktury pasmowej, gęstosci stanów, gęstości ładunków, gęstości spinowych * analiza populacyjna, mapy gestości elektronowej * obliczanie multipoli atomowych, pola i gradientu pola elektrycznego * obliczanie rozkładów gęstości elektronowej w przestrzeni pędów oraz przekrojów Comptona * obliczanie potencjału elektrostatycznego i jego pochodnych * obliczanie własności dielektrycznych * analiza topologiczna rozkładu gęstości ładunków * dynamiczna alokacja pamięci, pełne zrównoleglenie kodu | **1** |  |

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