

## 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	<p><b>Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio dla struktur krystalicznych i innych układów o symetrii translacyjnej:</b></p> <p>Licencja Crystal 14 (licencja akademicka bez ograniczeń czasowych dla oprogramowania w wersji dla systemów Unix/Linux/Intel MacOSX z rozszerzeniem MPP) lub równoważna.</p> <p><b>Warunki równoważności:</b></p> <p>Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio dla struktur krystalicznych i innych układów o symetrii translacyjnej, zapewniający:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- obliczenia metodami HF-SCF: RHF, UHF</li> <li>- 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)</li> <li>- obliczenia z uwzględnieniem analitycznych pierwszych pochodnych względem współrzędnych jąder oraz parametrów komórki elementarnej</li> <li>- obliczenia polaryzowalności oraz hiper-polaryzowalności</li> <li>- optymalizacja geometrii</li> <li>- obliczanie częstości harmonicznych, dyspersji fononów, fononowych struktur pasmowych, intensywności widm IR/Raman, eksploracja geometrii oraz energii dla wybranych drgań normalnych</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”

**Załącznik nr 2C do SIWZ DZP.381.149.2015.DW**

<ul style="list-style-type: none"> <li>- obliczanie częstości anharmonicznych dla wiązań X-H</li> <li>- automatyczne obliczenia tensorów elastyczności, fotoelastyczności, piezoelektryczności</li> <li>- modelowanie roztworów stałych</li> <li>- obliczenia z uwzględnieniem pseudopotencjałów</li> <li>- konsystentne podejście do wszystkich układów periodycznych, w tym układów cienkowarstwowych, polimerów, nanorurek, dużych cząsteczek</li> <li>- automatyczna edycja geometrii, z uwzględnieniem redukcji symetrii, przesunień, podstawień, dodawania i usuwania atomów</li> <li>- analiza struktury pasmowej, gęstości stanów, gęstości ładunków, gęstości spinowych</li> <li>- analiza populacyjna, mapy gęstości elektronowej</li> <li>- obliczanie multipoli atomowych, pola i gradientu pola elektrycznego</li> <li>- obliczanie rozkładów gęstości elektronowej w przestrzeni pędów oraz przekrojów Comptona</li> <li>- obliczanie potencjału elektrostatycznego i jego pochodnych</li> <li>- obliczanie własności dielektrycznych</li> <li>- analiza topologiczna rozkładu gęstości ładunków</li> <li>- dynamiczna alokacja pamięci, pełne zrównoleglenie kodu</li> </ul>		
---	--	--

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