

### Szczegółowy opis przedmiotu zamówienia – część D

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 dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio dla szeroko pojętej problematyki struktury elektronowej układów molekularnych w stanach podstawowych i wzbudzonych:</b></p> <p>Licencja MolCas 8 (licencja niekomercyjna dla wszystkich użytkowników klastra obliczeniowego (computer center license) na okres co najmniej 5 lat, dla oprogramowania w wersji źródłowej) lub równoważna.</p> <p><b>Warunki równoważności:</b></p> <p>Pakiet oprogramowania do dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio dla szeroko pojętej problematyki struktury elektronowej układów molekularnych w stanach podstawowych i wzbudzonych, zapewniający:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- obliczenia SCF i DFT dla układów zamknięto- i otwartopowłokowych</li> <li>- obliczenia metodami MC-SCF: CASSCF, RASSCF</li> <li>- obliczenia CASPT2, RASSI, MP2, MRCI/ACPF, CCSDT, CHCC/CHT3</li> <li>- obliczenia QM/MM, również z wykorzystaniem metody Monte Carlo (Metropolis)</li> <li>- przeprowadzenie optymalizacji geometrii dla stanów równowagowych i przejściowych z wykorzystaniem technik gradientowych, obliczenia pól siłowych i energii oscylacyjnych</li> <li>- obliczanie gęstości elektronowych</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 2D do SIWZ DZP.381.149.2015.DW (zm)**

<ul style="list-style-type: none"> <li>- obliczanie rozkładu ładunków oraz potencjału elektrostatycznego</li> <li>- obliczanie anizotropowych własności magnetycznych dla dowolnych monojądrowych podukładów i fragmentów</li> <li>- obliczanie energii całkowitej dla dużych układów metodą fragmentacji</li> <li>- przeprowadzanie symulacji metodami dynamiki molekularnej</li> <li>- uwzględnienie wpływu otoczenia: FFPT, PCM, ESPF, Hybrid QM/MM DSM</li> <li>- graficzne interfejsy dla użytkownika: GV GUI (OpenGL), LUSCUS GUI (GTK+)</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 **producenta**, Zamawiający musi mieć prawo do:

- otrzymania udoskonaleń do wersji bieżących oprogramowania (otrzymanie wydań uzupełniających, poprawek programistycznych) bez dodatkowych opłat licencyjnych
- zgłaszania błędów do **producenta**;

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