**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** | **Pakiet oprogramowania do dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio przy pomocy metod uwzględniających korelację elektronową:**  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.  **Warunki równoważności:**  Pakiet oprogramowania do dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio przy pomocy metod uwzględniających korelację elektronową, zapewniający:   * 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-LCCSD(T) * obliczenia Density Fitted z z jawną korelacją: DF-LMP2-F12, DF-LCCSD(T)-F12 * obliczenia DF-DFT * obliczenia SAPT(CCSD) * obliczenia Stochastic FCI (FCIQMC) | **1** |  |

**Wymagania dodatkowe:**

Usługa wsparcia technicznego i aktualizacji co najmniej 12 miesięcy (1 rok). W ramach świadczenia usługi wsparcia technicznego i aktualizacji dla oprogramowania przez producenta, Zamawiający musi mieć prawo do:

* 1. otrzymania udoskonaleń do wersji bieżących oprogramowania (otrzymanie wydań uzupełniających, poprawek programistycznych, upgrade/update) bez dodatkowych opłat licencyjnych
  2. 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.

*Zamawiający wymaga licencji niekomercyjnej obejmującej wszystkich zarejestrowanych użytkowników (wewnętrznych jak i zewnętrznych) klastra obliczeniowego. Wymagana jest również dostępność kodu źródłowego dla potrzeb optymalizacji instalowanej wersji produkcyjnej oprogramowania*

…………………….................................................................................  
data i czytelny podpis lub podpis na pieczęci imiennej osoby

upoważnionej do składania oświadczeń w imieniu Wykonawcy