**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** | **Pakiet oprogramowania do dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio dla szeroko pojetej problematyki struktury elektronowej układów molekularnych w stanach podstawowych i wzbudzonych:**  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.  **Warunki równoważności:**  Pakiet oprogramowania do dokładnych obliczeń kwantowo-chemicznych typu ab-initio dla szeroko pojetej problematyki struktury elektronowej układów molekularnych w stanach podstawowych i wzbudzonych, zapewniający:   * obliczenia SCF i DFT dla układów zamknięto- i otwartopowłokowych * obliczenia metodami MC-SCF: CASSCF, RASSCF * obliczenia CASPT2, RASSI, MP2, MRCI/ACPF, CCSDT, CHCC/CHT3 * obliczenia QM/MM, również z wykorzystaniem metody Monte Carlo (Metropolis) * przeprowadzenie optymalizacji geometrii dla stanów równowagowych i przejściowych z wykorzystaniem technik gradientowych, obliczenia pól siłowych i energii oscylacyjnych * obliczanie gęstości elektronowych * obliczanie rozkładu ładunków oraz potencjału elektrostatycznego * obliczanie anizotropowych własności magnetycznych dla dowolnych monojądrowych podukładów i fragmentów * obliczanie energii całkowitej dla dużych układów metodą fragmentacji * przeprowadzanie symulacji metodami dynamiki molekularnej * uwzględnienie wpływu otoczenia: FFPT, PCM, ESPF, Hybrid QM/MM DSM * graficzne interfejsy dla użytkownika: GV GUI (OpenGL), LUSCUS GUI (GTK+) | **1** |  |

**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:

* 1. otrzymania udoskonaleń do wersji bieżących oprogramowania (otrzymanie wydań uzupełniających, poprawek programistycznych) 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.

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

upoważnionej do składania oświadczeń w imieniu Wykonawcy