**Szczegółowy opis przedmiotu zamówienia – część A**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **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 struktury molekularnej, reaktywności, widm elektronowych, oscylacyjnych oraz NMR:**  Licencja Q-CHEM 4.3 (licencja bez ograniczeń czasowych na klaster 44 węzłów dla maksymalnie 6 grup badawczych pracujących na tym klastrze z różnych lokalizacji geograficznych, ze wsparciem technicznym (QMP) na okres 5 lat, lub równoważna  **Warunki równoważności:**  Pakiet oprogramowania do obliczeń kwantowo-chemicznych struktury molekularnej, reaktywności, widm elektronowych, oscylacyjnych oraz NMR zapewniający:   * zintegrowany interfejs graficzny z kontekstowym systemem pomocy, umożliwiający konstruowanie molekuł, generowanie plików wejściowych do obliczeń oraz wizualizacje wyników * obliczenia metodami SCF dla stanów podstawowych: RHF, UHF, ROSHF, z wykorzystaniem analitycznych pierwszych i drugich pochodnych odpowiednio dla optymalizacji geometrii oraz analizy częstości harmonicznych, z ulepszeniami dla poprawy zbieżności (DIIS, Initial Guessing, MOM, DM, RCA) * obliczenia DFT z wykorzystaniem następujących funkcjonałów: Slater, Beckee '88 (B), GGA91 (Perdew '91, PW91), Gill '96, Gilbert and Gill '99 (GG99), Handy and Cohen's OPTX (HC\_OPTX), VWN (#5 parameterization), Lee-Yang-Parr (LYP), LYP (EDF1 parameterization), Perdew-Zunger '81 (PZ81), Perdew '86 (P86), Wigner, EDF1 and Becke(EDF1), PBE, SOGGA, SOGGA11, B3LYP, B3PW91, B3LYP5, SOGGA11-X, BMK, MPW1B95, MPWB1K, PW6B95, PWB6K, M05, M05-2X, M06, M06-2X, M06-HF, M08, M11, B3tLap, BR89BR94hyb, TPSSh, M06-L,M11-L, PK06, BR89, B94, TPSS, LRC-ωPBEPBE, LRC-ωPBEhPBE, ωB97, ωB97X, ωB97X-D, CAM-B3LYP, * obliczenia typu Constrained DFT * obliczenia DFT z wykorzystaniem kwadratur numerycznych oraz analitycznych pierwszych i drugich pochodnych odpowiednio dla optymalizacji geometrii oraz analizy częstości harmonicznych * obliczenia metodami Linear Scaling: mrXC, FTC, CFMM, LinK, ART, Grid Based Integration, Dual Basis * obliczenia całek dwuelektronowych metodami COLD PRISM oraz J Matrix Engine * obliczenia metodami MP2, Local MP2, RI-MP2, Dual-basis RI-MP2, SOS-MP2, MOS-MP2, Attenuated MP2 * obliczenia metodami sprzężonych klasterów: CCSD, EOM-CCSD, CCSD(T), CCSD(2), QCISD, QCISD(T), QCISD(2), OD, OD(T), OD(2), VOOCC, VOD, VOD(T), VQCCD, VOD(2), CCVB * obliczenia dla stanów wzbudzonych: metodami CIS/XCIS, TD-DFT, EOM-CCS * automatyczna optymalizacja geometrii i struktur przejściowych * wyznaczanie widm oscylacyjnych z poprawkami anharmonicznymi, z wykorzystaniem calkowania po trajektoriach oraz kwaziklasycznej dynamiki molekularnej * obliczenia parametrów widm NMR o skalowalności liniowej * analiza populacyjna, analiza gęstości elektronowych, analiza AIMPAC, analiza rozkładu gęstości w przestrzeni pędów * modelowanie efektów rozpuszczalnika: model Onsagera, Langevina, SS(V)PE, SM8, PCM, COSMO * obliczanie poprawek relatywistycznych oraz poprawek adiabatycznych i BSSE * analiza oddziaływań międzymolekularnych: SCF-MI, SCF-MI/RS, EDA, COVP * wizualizacja wiązań niekowalencyjnych (Johnson/Yang) * wykorzystanie pseudopotencjalów * obliczenia QM/MM * wsparcie OpenMP dla SCD/DFT, MP2, CC, * transformacji całkowych * akceleracja GPU dla RI-MP2 | **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