|  |
| --- |
| **CZĘŚĆ**  **ZESTAW OPROGRAMOWANIA DLA PROGRAMU KOŚCIUSZKO** |

Przedmiotem postępowania jest przedłużenie ważności posiadanych licencji oprogramowania umożliwiające aktualizację poniższego oprogramowania przez okres 12 miesięcy.

Jeżeli oferent zaproponuje inne rozwiązanie niż wskazane w opisach zgodne z wymienionymi kryteriami równoważności musi zapewnić pełne wdrożenie oferowanego rozwiązania, przeszkolenie użytkowników i administratorów systemu oraz zapewnić pełną współpracę z używanym obecnie środowiskiem informatycznym, a w szczególności z oprogramowaniem wskazanym poniżej.

Posiadane oprogramowanie:

1. **Oprogramowanie typu: COSMOtherm (windows)**

Program komputerowy (Oprogramowanie nr 1) ma pozwalać na przewidywanie i obliczanie właściwości cieczy i ich mieszanin w oparciu o zasady chemii kwantowej (obliczenia COSMO) i termodynamiki (COSMO-RS). Program ten musi pozwać na obliczenie potencjału chemicznego dowolnej cząsteczki w czystej lub zmieszanej cieczy.

Wymagany zakres przewidywanych właściwości:

* rozpuszczalność cieczy, ciał stałych i gazów
* współczynniki aktywności, rozdzielanie dwufazowe, ekstrakcja cieczowa
* zachowania fazowe: równowaga ciecz-ciecz, ciecz-para i ciecz-ciało stałe
* prężność par, wolna energia solwatacji, stała Henry'ego
* pka, zależność równowagi reakcji chemicznych od rozpuszczalnika
* napięcia międzyfazowe, adsorpcja, właściwości środowiskowe

Program komputerowy musi pozwalać na prowadzenie przewidywań ww. właściwości na podstawie struktur molekularnych związków chemicznych tworzących analizowany system, bez konieczności uzupełniania go o zewnętrzne dane mierzone eksperymentalnie.

Program musi pozwalać na przewidywanie ww. właściwości jako funkcji stężenia i temperatury, stosując spójne równania termodynamicznie.

Program musi oferować łatwy w użyciu interfejs graficzny.

Program musi pracować w środowisku Windows.

Program komputerowy musi być w pełni kompatybilny ze wszystkimi wymienionymi niżej oprogramowaniami (Oprogramowania nr 2-5).

**2. Oprogramowanie typu: COSMOconf (windows)**

Program komputerowy (Oprogramowanie nr 2) ma służyć do generowania plików cosmo konformerów związków chemicznych kompatybilnych z Oprogramowaniem nr 1. Program ten musi bazować na predefiniowanych procedurach, zoptymalizowanych pod kątem generowania najbardziej stabilnych konformerów, redukować ogromną liczbę możliwych konformerów do małego zestawu najbardziej stabilnych konformacji w zdefiniowanych rozpuszczalnikach, posiadać wysoką dokładność dzięki zastosowaniu obliczeń teorii funkcjonaly gęstości (DFT), posiadać możliwość prowadzenia analiz konformacyjnych na dużych cząsteczkach (ponad 100 atomów).

Program musi oferować interfejs graficzny.

Program musi pracować w środowisku Windows.

Program komputerowy musi być w pełni kompatybilny z Oprogramowaniem nr 1 Oprogramowania nr 3-5.

**3. Oprogramowanie typu: COSMObaseIL (windows)**

Oprogramowanie nr 3 ma stanowić molekularną bazę danych typowych anionów (przynajmniej 100 anionów) i kationów (przynajmniej 400 kationów) cieczy jonowych, tak aby ich niezależne kombinacje pozwalały na uzyskanie zestawu przynajmniej 11 000 tyś. potencjalnych cieczy jonowych. Baza danych musi być kompatybilna z Oprogramowaniem nr 1.

Każdy związek stanowiący bazę danych musi być reprezentowany przez zestaw pliku cosmo (zwierając ego informacje o powierzchni związku chemicznego), pliku energii związku dla fazy gazowej oraz pliku właściwości fizycznych związku chemicznego. Wymaga się aby związki stanowiące bazę można było wyszukiwać według nazw chemicznych, mas cząsteczkowych oraz numerów rejestrów CAS.

Baza danych musi pracować w środowisku Windows.

Program komputerowy musi być w pełni kompatybilny z Oprogramowaniami nr 1-2 oraz Oprogramowaniami nr 4-5.

**4. Oprogramowanie typu: TURBOMOLE/TmoleX (windows i linux)**

Program (Oprogramowanie nr 4) musi być nowoczesnym pakietem chemii kwantowej do obliczeń struktury elektronowej *ab initio* dowolnych związków chemicznych. Program musi pozwalać prowadzić kalkulacje w oparciu o teorię funkcjonału gęstości (DFT) oraz metody Hartree-Fock, MP2, TDDFT, DFT + Dyspersja, SCS / SOS-MP2, CC2, SCS / SOS-CC2, CCSD, CCSD (T), oraz RI dla obliczeń DFT, MP2 i CC2.

Wymaga się aby program umożliwiał dokładne prognozowanie energii konformacyjnych, struktur klastrowych, stanów wzbudzonych, stanów przejściowych związków chemicznych.

Program musi łatwo integrować się z Oprogramowaniami nr 1-3 oraz Oprogramowaniem nr 5, oraz pozwalać na czytanie i generowanie plików kompatybilnych z tymi oprogramowaniami.

Program musi pozwalać na import/eksport i wizualizację następujących formatów plików: .xyz, sdf, ml2, mol2, pdb, .chem3d .car., Arc, .cosmo, .energy, coord, .cml.

Program musi być obsługiwany przez łatwy w obsłudze graficzny interfejs użytkownika, musi pozwalać na uruchamianie zadań lokalnie i na zdalnym serwerze, musi posiadać zdefiniowaną standardową procedurę obliczeniową (szablon pracy), posiadać prosty wbudowany system kolejkowania dla zadań lokalnych i zdalnych.

Program musi pracować w środowisku Windows oraz Linux.