



Sveučilište u Zagrebu
Sveučilišni računski centar

Znanstveni softver za potrebe projekta Hrvatski znanstveni i obrazovni oblak (HR-ZOO)

Grupa VI.

Znanstveni softver za simulacije kondenzirane tvari

-

FUNKCIONALNA SPECIFIKACIJA

Ovaj projekt sufinanciran je sredstvima Europske unije iz Europskog fonda za regionalni razvoj

Zagreb, kolovoz 2022. godine

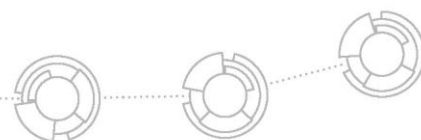


Projekt je sufinanciran sredstvima Europske unije
iz Europskog fonda za regionalni razvoj



Sadržaj

1. TEHNIČKI UVJETI	3
2. LICENCA.....	3
3. FUNKCIONALNOSTI	3



1. Tehnički uvjeti

Znanstveni softver za simulacije kondenzirane tvari (u daljnjem tekstu Softver) mora podržavati operacijski sustav Red Hat Enterprise Linux 8, koji će se koristiti na HR-ZOO infrastrukturi i napredne računalne resurse HR-ZOO infrastrukture.

Softver će biti instaliran isključivo na računalnim resursima u HR-ZOO infrastrukturu na sjedištu HR-ZOO ZG2.

Softver mora omogućiti paralelno izvođenje na računalnom klasteru za računarstvo visokih performansi.

Softver mora omogućiti rad u komandno linijском sučelju.

2. Licenca

Softver moraju moći koristiti svi korisnici HR-ZOO infrastrukture – članovi znanstvene i akademske zajednice za potrebe istraživanja i obrazovanja. Korisnici neće koristiti Softver u komercijalne svrhe.

Licenca mora omogućiti korištenje svih funkcionalnosti Softvera na neograničeno vremensko razdoblje te na neograničenoj količini računalnih resursa.

Licenca mora omogućiti pristup svim nadogradnjama unutar minimalno 4 godine.

Ponuditelj je dužan osigurati kontakt za podršku u periodu od minimalno 4 godine putem kojeg će biti moguće prijaviti i riješiti sve potencijalne nejasnoće i probleme u korištenju Softvera.

3. Funkcionalnosti

Softver mora omogućiti provođenje proračuna u području računalne i kvantne kemije te simulacije kondenzirane tvari.

Softver mora omogućiti proračune osnovnog elektronskog stanja:

- metodama Hartree-Fock, DFT, DFT-D3 i DFT-D4 s GGA, meta-GGA, hibridnim, dvostruko-hibridnim i lokalno-hibridnim funkcionalima,
- RI-K aproksimacija za metode Hartree-Fock, DFT i TDDFT,
- metode post-DFT,
- metode zasnovane na aproksimaciji prirodnih orbitala veze,
- metoda GW, RI-GW i Bethe-Salpeter,
- obradu relativističkih efekata s metodama X2C i DKH, spinsko-orbitalno sprezanje, te metode X2C-NMR i X2C-TDDFT,
- COSMO izračune za solvacijske efekte,
- metodu čvrste veze GFN2-xTB i polje sila UFF.

Softver mora omogućiti modele i algoritme za proračune, simulacije i predviđanja:

- infracrvenog spektra,
- Ramanovog spektra,
- ultraljubičastog/vidljivog spektra,
- spektra kružnog dikroizma,
- apsorpcijskog spektra,
- predviđanja boja,



- proračuna polarizibilnosti,
- kemijskih pomaka u nuklearnoj magnetskoj rezonanci,
- konstanti sprege,
- fluorescencije.

Softver mora omogućiti pronalaženje lokalnog minimuma te provedbu globalne optimizacije strukture.

Softver mora omogućiti pronalaženje prijelaznih stanja i optimizaciju reakcijskog puta.

Softver mora omogućiti prikaz struktura elektronskih vrpca te poznavati rad s gustoćama stanja.

Softver mora omogućiti rad s molekulskim sustavima koristeći se periodičnim rubnim uvjetima za 3D, 2D i 1D teoriju funkcionala gustoće te metodu Hartree-Focka.

