



Sveučilište u Zagrebu
Sveučilišni računski centar

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

Grupa II.

Znanstveni softver za računalnu i kvantnu kemiju općenitog tipa

-

FUNKCIONALNA SPECIFIKACIJA

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

Zagreb, kolovoz 2022. godine

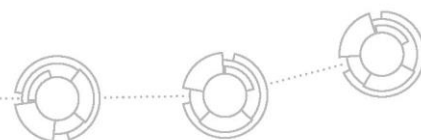


Projekt je sufinanciran sredstvima Europske unije
iz Europskog fonda za regionalni razvoj



Sadržaj

1. TEHNIČKI UVJETI	3
2. LICENCA.....	3
3. FUNKCIONALNOSTI	3
4. NAPREDNE FUNKCIONALNOSTI	4



1. Tehnički uvjeti

Znanstveni softver za računalnu i kvantnu kemiju općenitog tipa (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 sadržavati podršku za ubrzavanje izvođenja pomoću grafičkih procesora (GPU).

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 minimalno 4 godine.

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 biti namijenjen kvantno kemijskom izračunu temeljenom na "ab initio" pristupu i pokrivati što veći broj funkcionala, metoda i osnovnih skupova za računalno kemijski proračun.

Softver mora predviđati molekulske strukture i svojstva, pronaći geometriju minimalne energije kao i prijelazna stanja primijenjena u istraživanju makromolekula, molekularne kinetike, spojeva vezanih uz katalizu, svojstava otopina i fotokemijskih procesa te omogućiti izračun termodinamičkih veličina kemijskih reakcija kao što su entalpija i Gibbsova slobodna energija.

Softver mora omogućiti pripremu ulaznih podataka u obliku tekstualne datoteke, kojim se definiraju algoritmi i njima svojstveni parametri te geometrijska struktura molekularnih sustava potrebna za izvođenje simulacija.

Softver mora omogućiti razdiobu izračuna na traženim kombinacijama molekulske strukture, osnovnih skupova i algoritama u različitim termodinamičkim uvjetima.

Softver mora omogućiti čitanje, transformaciju i vizualizaciju privremenih rezultata, iterativnog podešavanja hiperparametara izabranih algoritama i osnovnih skupova, procjenu resursnih zahtjeva radi efikasnijeg izvođenja simulacija te prebacivanje zapisa geometrijske strukture molekula u više formata putem naredbi.

Modeli i algoritmi kojima se Softver služi moraju omogućiti izračunavanje pojava vezanih uz elektronska pobuđena stanja, a koja su važna u istraživanjima reakcijskih mehanizama i puteva reakcija, fotokemijskih razgradnji spojeva, fluorescencije, bioluminiscencije i drugih.

Softver mora omogućiti:

- modeliranje procesa na plohama potencijalne energije pobuđenog stanja,



- izračunavanje energije pobuđenog stanja (ZINDO metoda, SA-CI metoda),
- predviđanje ultraljubičastog/vidljivog spektra te vibronskog spektra,
- predviđanje molekulske strukture pobuđenih prijelaznih stanja,
- predviđanje reakcijskih puteva sljedeći izračunate intrinzične reakcijske koordinate (IRC).

Modeli i algoritmi kojima se Softver služi moraju se moći primijeniti i na istraživanja u molekularnoj spektroskopiji, pri čemu Softver mora omogućiti predviđanja:

- kružnog dikroizma,
- infracrvenog spektra,
- Ramanovog spektra,
- ultraljubičastog/vidljivog spektra,
- spektra mikrovalne spektroskopije,
- spektra nuklearne magnetske rezonance i konstanti spinskog sprezanja,
- emisijskih spektara za pobuđena stanja,

Program mora sadržavati metode za modeliranje kemijskih spojeva i procesa:

- metodu teorije funkcionala gustoće,
- metode Hartree-Fock i post-Hartree-Fock ,
- polu-empirijske metode za izračune osnovnog energijskog stanja,
- molekulske mehanike,
- metode za analizu pobuđenih stanja,
- metode za analizu ionizacijskih potencijala,
- metode za analizu elektronskih afiniteta,
- visoko-precizne energijske modele.

4. Napredne funkcionalnosti

Softver mora omogućiti integraciju sa softverima namijenjenim kvantno-kemijskom računu.

Softver mora omogućiti analitiku HF i DFT frekvencija.

Softver mora podržavati:

- polu-direktne, konvencionalne i direktne algoritme,
- algoritam EDIIS u kombinaciji s CDIIS uz kvadratnu konvergenciju SCF,
- optimizaciju uz pomoć algoritma GEDIIS s redundantnim algoritmom za unutarnje koordinate u velikim sustavima,
- algoritam za polu-empirijske optimizacije,
- računalnu metodu ONIOM,
- optimizaciju s miješanim internim ili Kartezijevim koordinatama,
- metodu zamrzavanja po fragmentima za optimizaciju ONIOM,
- metodu zamrzavanja atoma u pojedinim optimizacijama prema vrsti, fragmentu, ONIOM sloju ili ostatku,



- optimizaciju QST2/QST3 prijelazne strukture.

