



Sveučilište u Zagrebu  
Sveučilišni računski centar

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

### **Grupa IV.**

## **Znanstveni softver za računalnu i kvantnu kemiju s podrškom za prirodne orbitale**

-

## **FUNKCIONALNA SPECIFIKACIJA**

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

Zagreb, kolovoz 2022. godine



Europska unija  
Zajedno do fondova EU

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



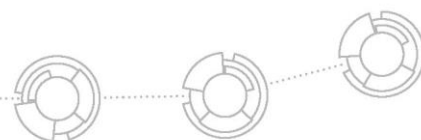
Hrvatski znanstveni i obrazovni oblak



EUROPSKI STRUKTURNI  
I INVESTICIJSKI FONDOVI

## Sadržaj

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



## **1. Tehnički uvjeti**

Znanstveni softver za računalnu i kvantnu kemiju s podrškom za prirodne orbitale (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.

Softver mora omogućiti integraciju s drugim znanstvenim softverom iz područja računalne i kvantne kemije.

## **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 složenih izračuna u području računalne i kvantne kemije s podrškom za prirodne orbitale.

Softver mora rješavati numeričke aproksimacije Schrödingerove valne jednačbe odnosno provoditi izračune iz skupine prirodnih lokaliziranih orbitala (atomskih, hibridnih, orbitala veze te lokaliziranih molekulskih orbitala).

Softver mora omogućiti izračun molekulskih dipolnih momenata u kontekstu prirodnih lokaliziranih molekulskih orbitala i dipolnih momenata prirodnih orbitala veza.

Softver mora omogućiti energetske analize valne funkcije, odnosno analize interakcija između prirodnih orbitala veza.

Softver mora omogućiti analize:

- rezonancijsku,
- steričku,
- indeksa polarizabilnosti veze,
- J-sprezanja,
- više-elektronsku populacijsku,
- efekata zasjenjivanja u nuklearnoj magnetskoj rezonanci,
- dekompozicije energije.

