

## **SPECYFIKACJA**

Program przeznaczony do obliczeń właściwości elektronów, fononów, optycznych, termicznych oraz mechanicznych dla nanostruktur oraz materiałów przy wykorzystaniu metod takich jak DFT, DFTB oraz pół-empirycznych Slater-Koster. Liczba licencji minimum 2 stanowiska + 5 licencji obliczeniowych na minimum 256 wątkach. Licencja na co najmniej 1 rok.

Wymagania dla oprogramowania do zaawansowanych obliczeń zakresu właściwości nanostruktur oraz materiałów na poziomie atomowym:

### **Możliwość analizy następujących materiałów:**

- Materiały i związki nieorganiczne;
- Materiały organiczne;
- Ciała stałe.

### **Typy obliczeń:**

- Optymalizacja geometrii: minimum lokalne, minimum globalne, stany przejściowe;
- Obliczanie ładunków atomów, długości i rzędów wiązań;
- Obliczanie i analiza widm IR oraz UV-VIS;
- Obliczanie momentów dipolowych i kwadrupolowych cząsteczek, a także (hiper)polaryzowalności;
- Symulacja zjawisk zależnych od czasu;
- Obliczanie i analiza właściwości pasmowych.

### **Metody obliczeniowe:**

- Metoda DFT, w szczególności oparta o LCAO;
- Metody pół-empiryczne, w szczególności Extended Hückel oraz Slater-Koster;
- Mechanika molekularna;
- Dynamika molekularna;
- Obsługa obliczeń dla elektrostatycznych modeli(FFT, FFT2D z uwzględnieniem okresowości układu);
- Kontrola zmiany ciśnienia oraz temperatury w trakcie symulacji;
- Funkcja Greena dla układów z 2 punktami pomiarowymi;
- Obliczenia krzywej I-V dla układów sztywnych i elastycznych;
- Analiza mechanizmów transportu w szczególności :
  - Spadki napięcia;
  - Gęstość prądowa oraz ścieżki transmisji;
  - Charakterystyki pasmowe;
  - Widmo przewodnictwa, wektory i wartości własne.

### **Interfejs graficzny z następującą funkcjonalnością:**

- Tworzenie cząsteczek, kryształów, nanostruktur oraz urządzeń;
- Wizualizacja wyników, uruchamianie obliczeń z poziomu interfejsu graficznego;

- Dostęp z poziomu interfejsu do baz danych cząsteczek, kryształów oraz materiałów i ich właściwości;
- Możliwość dołączenia własnej bazy danych opartej o technologię MongoDB lub MySQL;
- Odczytywania i analizowania wyników obliczeń w 2D/3D zależnie od rodzaju danych;
- Możliwość pisania skryptów do obliczeń w języku python;
- Obsługa (do importowania i eksportowania) dla zewnętrznych programów typu: VASP, QuantumEspresso, GPAW, LAMMPS;
- Obsługa systemu Windows oraz Linux z zewnętrznym serwerem licencji typu „floating”;
- Obsługa wielowątkowości wraz z wsparciem bibliotek Intel MPI oraz Intel MKL.

**Program musi prawidłowo działać po zainstalowaniu go na systemie komputerowym o następujących parametrach:**

- Procesor Intel Core 2 Duo 2.0 GHz lub lepszy;
- 8 GB RAM;
- 1.6 GB miejsca na dysku;
- Karta graficzna wspierająca sprzętowo OpenGL;
- System: Windows 10 64bit lub Linux 64bit.

**Dostawca musi zapewnić wsparcie techniczne przez okres co najmniej jednego roku od daty dostawy.**