Opis przedmiotu zamówienia

1. **1 Licencja komercyjna dożywotnia na jedno stanowisko oprogramowania HyperChem lub równoważny o następujących wymaganiach technicznych:**

**Parametry równoważności:**

Rysowanie struktur

Obliczenia:

1. Obliczenia energii przy zdefiniowanej geometrii (single point)
2. Optymalizacja energii układu.
3. Obliczanie widm wibracyjnych.
4. Poszukiwanie stanu przejściowego
5. MD
   1. Klasyczne trajektorie ruchu cząstek
   2. Pola siłowe do opisu kolizji
   3. Badanie wpływu temperatury na proces.
6. Dynamika Langevin
7. Metropolis MC
8. Stany wzbudzone - oddziaływania konfiguracyjne CI.

### Metody obliczeniowe

1. DFT
2. Ab initio QM
   1. Duży wybór funkcji bazowych od STO-1G do D95\*\* (w tym STO-3G, 3-21G\*, 6-31G\*\*)
   2. Dodatkowe funkcje bazy (s, p, d, sp, spd) Możliwość edycji funkcji bazy
3. Półempiryka QM
   1. CNDO
   2. INDO
   3. MINDO/3
   4. MNDO
   5. MNDO/d
   6. AM1
   7. RM1
   8. PM3 (obsługa metali przejściowych)
   9. ZINDO/1
   10. ZINDO/S
4. MM (Mechanika Molekularna)
   1. Cztery pola siłowe do zastosowań ogólnych
   2. Pola siłowe dedykowane dla cząsteczek organicznych (Amber, BIO, OPLS)
5. Techniki sprzężone
   1. Możliwość obliczeń QM na fragmencie układu i traktowanie pozostałe części układu (np. rozpuszczalnika) w sposób klasyczny.

Możliwość obsługi wzorów w formie graficznej:

1. Oznaczanie, obracanie, przesuwanie, zmianę rozmiaru za pomocą myszy
2. Konwersja tworzonych obrazów 2D na 3D
3. Zamiany dowolnego wodory we wzorze strukturalnym na wybrany podstawnik.
4. Dowolne definiowanie długości wiązań, kątów między wiązaniami, katów torsyjnych.
5. Definiowanie atomów, ładunku oraz masy
6. Tworzeni klasterów cząsteczkowych (przesuwanie pojedynczych atomów jaki grup atomów w klasterze.
7. Budowanie białek i kwasów nukleinowych z wykorzystaniem bibliotek aminokwasów i zasad.
8. Badanie solwatacji przy wykorzystaniu periodycznych pudełek symulacyjnych.
9. Import struktur z wielu formatów:
   1. Brookhaven \*.PDB
   2. ChemDraw \*.CHN
   3. MAPC Z-matrix
   4. MDL \*.MOL
   5. ISIS \*.Sketch
   6. Tripos \*.MOL2

Wyświetlanie struktur

1. Wyświetlanie struktur przy wykorzystaniu:
   1. „kulek i patyków"
   2. „kulek i cylindrów"
   3. „sfer"
   4. „patyków"
   5. „rurek"
2. Dowolne definiowanie promieni „sfer" i szerokości „cylindrów"
3. Dodawanie wizualizacji oddziaływań Van der Walsa do dowolnej struktury.
4. Zachowanie perspektywy przy wyświetlaniu.
5. Definiowanie jakości obrazu
6. Wybieranie grupa atomów i ich oznaczenie w celu późniejszej obserwacji
7. Definiowalne etykiety poszczególnych atomów
8. Wyświetlanie szkieletów białek (wstążki, /^-kartki, spirale itp.)
9. Wizualizacja wiązań wodorowych
10. Wyświetlanie momentów dipolowych, wektorów gradientów.
11. Wizualizacja wibracji cząsteczek
12. Termin dostawy max. 3 tygodnie
13. **1 Licencja komercyjna dożywotnia na jedno stanowisko oprogramowanie ChemSketch na potrzeby Laboratorium NMR lub równoważny o następujących wymaganiach technicznych:**

**Parametry równoważności:**

Rysowanie

* Szybkie rysowanie struktur w metodologii „kliknij i przeciągnij”
* Tworzenie wzorów strukturalnych w oparciu o InChI i SMILES
* Generowanie InChI i Smiles dla narysowanych struktur
* Możliwość pracy ze strukturami Markusha
* Wizualizacja reakcji dzięki mapowaniu atomów
* Modyfikacja położenia atomów wodoru w pobliżu innych atomów
* Tworzenie modeli 3D w oparciu o modele 2D
* Rotacja cząsteczek, transformacja przestrzenna zmiana rozmiarów

Poszukiwanie struktur

* Możliwość poszukiwania wzorów strukturalnych w dokumentach zgromadzonych na dyskach. Przeszukiwaniu podlegają pliki: SK2, MOL, SDF, SKC, CHM, CDX, RXN, PDF, DOC, XLS, PPT, CUD, HUD, CFD, NDB, ND5, INT
* Możliwość poszukiwania dokładnie zdefiniowanych struktur lub jej fragmentów

Chemia

* Możliwość definiowania różnych rodzajów wiązań w tym aromatycznych, zdelokalizowanych, pojedyncze, podwójne, potrójne, koordynacyjne
* Automatyczne dodawanie atomów wodoru i ładunku w celu zapełnienia powłoki walencyjnej
* Dostęp (w czasie rzeczywistym, podczas rysowania) do danych na temat wzoru sumarycznego, masy molowej, procentowego składu, refrakcji molowej, gęstości, parachory, objętości molowej
* Wbudowany układ okresowy zawierający opis właściwości fizykochemicznych, NMR, izotopy, i zdjęcia pierwiastków w ich naturalnej formie.
* Możliwość rysowania reakcji i złożonych schematów
* Kalkulator reakcji
* Podgląd tautomerów
* Wbudowana baza danych posiadająca ponad 31 000 wzorów strukturalnych z przypisanymi do nich nazwami systematycznym, zwyczajowymi, handlowymi. Możliwość przeszukiwania bazy w oparciu o zapytania strukturalne i numery CAS, nazwy.
* Możliwość przeszukiwania z poziomu programu baz eMolecules, PubChem, ChemSpider

Raportowanie

* Tworzenie profesjonalnych raportów
* Eksport raportów w formacie PDF
* Wsparcie opcji kopiuj i wklej dla innych aplikacji Windows
* Konwersja wyników pracy do HTML

Pozostałe

* Wsparcie techniczne w języku polskim
* Termin dostawy max. 3 tygodnie