

Для эксплуатации приложения GEMS (Grid Enabled Molecular Simulator – "Молекулярный симулятор на основе грид-технологий") основана виртуальная организация вычислительной химии CompChem. В грид-инфраструктуре размещены и работают в режиме нормальной эксплуатации ещё несколько приложений для вычислительной химии. Готовится размещение в инфраструктуре EGEE новых приложений; принимаются меры к расширению сотрудничества между научными группами, работающими в области вычислительной химии.

Приложение **GEMS** используется для моделирования динамики реакций в сложных химических системах.

ABCtraj рассчитывает наблюдаемые величины атом-диатомного взаимодействия в газообразной фазе. События генерируются методом Монте-Карло. Программа подключена к среде молекулярной виртуальной реальности, где на мониторы выводятся результаты моделирования.

Venus рассчитывает сечения и коэффициенты скорости элементарных химических реакций, моделируя столкновения атомов и молекул при начальных условиях, полученных методом Монте-Карло. Для каждого столкновения – от исходных элементов до продуктов реакции – решаются уравнения Хэмилтона, описывающие движение атомов.

Приложение **DI-Poly** моделирует молекулярную динамику сложных систем. Оно стало стандартом де-факто в сообществах вычислительной химии и вычислительной биологии.

Приложение **RWAVEP** выполняет квантовомеханические расчёты вероятности разных химических реакций, применяя подход, основанный на понятии волнового пакета. Для разных наборов исходных состояний генерируются разные события.

В ближайшем будущем виртуальная организация CompChem развернёт новые приложения, например:

- **COLUMBUS** – комплект программ для сложных расчётов *ab initio* электронной структуры молекул. Программы предназначены, главным образом, для расширенных многоссылочных расчётов основного и возбуждённых состояний электронной оболочки атомов и молекул.
- **GAMESS** – программа для выполнения *ab initio* расчётов в области квантовой молекулярной химии, позволяющая вычислять волновые функции SCF. Возможны следующие корреляционные поправки к этим волновым функциям: учёт зависимости взаимодействия от конфигурации; поправки на основе теории возмущений второго порядка; поправки на основе представлений о спаренных кластерах; возможно также приближение в рамках функциональной теории плотности.

Кроме того, виртуальная организация CompChem будет экспериментировать с системой CHARON, чтобы создать настраиваемый пользователем интерфейс с гридом, отвечающий специфическим требованиям сообщества вычислительной химии.

В EGEE приветствуются заявки на размещение новых приложений. Узнать подробнее о том, как включиться в проект, а также о приложениях, работающих в EGEE, можно на пользовательском портале о приложениях: <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>