



В то время как основные принципы экспериментальной химии остаются неизменными последние несколько десятилетий, расширяющаяся доступность вычислительных мощностей означает, что сегодня химики могут исследовать и моделировать более сложные молекулы при меньших затратах. Задав свойства предполагаемой молекулы, химик может найти ее наиболее вероятную структуру, вычислив самую низкоэнергетичную из всех возможных конфигураций. Определив наиболее стабильную структуру, можно детально рассчитать свойства молекулы. Эта информация может быть использована в ряде других областей знаний,

например – в биологии, астрофизике, технике.

Существуют много прикладных программных средств, которые могут быть использованы в среде EGEE грид. Большинство из них доступно через виртуальную организацию “Вычислительная Химия” в EGEE. Есть также коммерческие приложения, требующие членства в виртуальных организациях Gaussian или Turbomole. Ниже перечислены все прикладные пакеты.

ABCtraj – вычисляет свойства атом-диатомных реакций в газовой фазе. События генерируются с использованием алгоритмов Монте-Карло. Результаты расчетов могут быть показаны с помощью среды виртуальной молекулярной реальности на виртуальных мониторах.

COLUMBUS – комплекс программ для расчетов *ab initio* молекулярных электронных структур высокого уровня. Программы предназначены в основном для расширенных мульти-реперных расчетов основных электронных состояний и возбужденных состояний атомов и молекул.

CPMD — распараллеленная плосковолновая-псевдопотенциальная реализация теории функционала плотности, в частности, для *ab initio* расчетов молекулярной динамики.

Dalton – мощная программа квантовой химии для расчетов свойств молекул с помощью волновых функций SCF, MP2 и MCSCF. Предназначена, в основном, для расчетов магнитных и (зависящих от частоты) электрических свойств и поверхностей потенциальной энергии молекулярных систем как в статических, так и в динамических исследованиях

DL-Poly – моделирование молекулярной динамики сложных систем. Де-факто стандарт в вычислительной химии и вычислительной биологии.

GAMESS – программа для *ab initio* расчетов в молекулярной квантовой химии, вычисляющая волновые функции SCF. Корреляционные поправки к этим волновым функциям включают конфигурационные взаимодействия, теорию возмущений второго порядка, связанные кластеры, а также аппроксимацию теории функционала плотности.

Gaussian – набор программ для расчетов электронных структур, широко используемый исследователями как в устоявшихся, так и в развивающихся областях химии. Основываясь на базовых законах квантовой механики, Gaussian предсказывает свойства молекулярных систем в разнообразных условиях. Это коммерческий продукт, и в силу лицензионных ограничений доступен только через виртуальную организацию Gaussian. Детальная информация относительно членства в ней размещена на сайте <http://egee.grid.cyfronet.pl/Gaussian>

MCTDH – алгоритм общего характера для решения уравнений Шредингера с временной зависимостью в расчетах многомерных динамических систем, состоящих из отдельных частиц. MCTDH может определить квантовое движение ядер молекулярной системы на одной или нескольких связанных поверхностях потенциальной энергии. По своей природе, MCTDH является приближенным методом, однако он может дать такую же точность, как любой другой конкурирующий метод, но его вычислительная эффективность ухудшается с увеличением точности.

NAMD – параллельная объектно-ориентированная программа для расчетов в молекулярной динамике, предназначенная для моделирования больших биомолекулярных систем.

NEWTON-X – программный пакет общего назначения для молекулярной динамики возбужденных состояний, включающий неадиабатические методы (Tully's surface hopping). Модульная структура пакета позволяет легко использовать его вместе с другими пакетами квантовой химии, которые используют энергетические градиенты и неадиабатические связанные векторы. В текущей версии NEWTON-X рассчитывает динамику, используя пакеты COLUMBUS и TURBOMOLE.

RWAVEP – программа для расчета квантовых вероятностей химических реакций, использующая метод волновых пакетов. Для различных наборов начальных условий генерируются различные события.

TURBOMOLE – программный пакет для *ab initio* расчетов электронных структур. Отличительными особенностями пакета являются: полупрямые алгоритмы с настраиваемыми требованиями по использованию памяти и дискового пространства, полное использование точечных групп, эффективные интегральные вычисления, стабильные и точные решетки для численного интегрирования. Turbomole является коммерческим пакетом, и доступен только через самостоятельную виртуальную организацию.

Venus – расчет сечений и коэффициентов скорости элементарных химических реакций с помощью моделирования столкновений атомов и молекул, начальные состояния которых генерируются методом Монте-Карло. От реагентов до продукта реакции для каждого столкновения решаются уравнения Гамильтона, определяющие движение атомов.

WIEN2k – программный пакет для расчетов электронных структур в твердом веществе, использующий теорию функционала плотности (DFT). Основан на методе (линеаризованных) присоединенных плоских волн полного потенциала ((L)APW) + локальных орбиталей (lo), что является одной из наиболее точных схем для расчетов зонных структур. В DFT может быть использована локальная аппроксимация (спиновой) плотности (LDA) или улучшенная версия генерализованной аппроксимации градиента (GGA). Пакет WIEN2k использует полностью электронную схему, включая релятивистские эффекты и имеет много достоинств. Грид-порт пакета включает прототип последовательности операций для работы в гриде. Пакет разрешено использовать только обладателям действительной лицензии WIEN2k.

CHARON – грид-интерфейс, удовлетворяющий специфические требования научных сообществ.

Сайты приложений

EGEE охотно рассмотрит другие приложения. Детальная информация для потенциальных участников приведена на сайте

<http://technical.eu-egee.org/index.php?id=392>

Более полная информация о приложениях, работающих в EGEE приведена на сайте

<http://technical.eu-egee.org/index.php?id=148>