

Mientras los principios básicos de la química experimental no han cambiado en las últimas décadas, el acceso más sencillo al poder de computación implica que hoy en día los químicos pueden investigar y modelar moléculas más grandes y complejas con un coste menor. Después de identificar una molécula de interés, los químicos tratan de buscar su estructura más probable con la configuración de menos coste energético de todas las posibles capas de la molécula usando la computación. Una vez encontrada la configuración más estable, los químicos pueden calcular las propiedades de las moléculas.

Esta información pueden usarla los científicos de otras muchas disciplinas: como por ejemplo, ingeniería, biología o astrofísica.

Gran parte del software de las aplicaciones de química computacional esta disponible para usarse en el grid de EGEE (Enabling Grids for E-science – Habilitando el Grid para la e-Ciencia). A la mayoría de él se puede acceder a través de la Organización Virtual de Química Computacional de EGEE. Los paquetes de software comercial también están disponibles, pero para acceder a ellos es necesario ser parte de la Organización Virtual Gausiann o Turbomole. Todos los paquetes de software disponibles aparecen en la siguiente lista.

ABCtrai calcula las reacciones de átomo-diátomo en la fase gaseosa. Los sucesos se generan usando las técnicas de Monte-Carlo. El programa esta enlazado con un entorno de realidad virtual molecular que muestra las salidas de la simulación en monitores virtuales. Esto también puede ser ejecutado a través del interface web P-Grade.

COLUMBUS, es una colección de programas para cálculos de estructura molecular electrónica *ad initio* de alto nivel. Los programas están diseñados principalmente para cálculos extendidos multi-referencia de átomos y moléculas electrónicas en estado fundamental y estados excitados.

CPMD — Car-Parrinello Molecular Dynamics code — es una implementación onda plana/pseudopotencial paralelizada de la teoría del funcional de la densidad, diseñada específicamente para dinámica molecular *ad initio*.

Dalton es un poderoso programa de química cuántica para calcular las propiedades moleculares con funciones de onda SCF, MP2 o MCSCF. El programa esta principalmente orientado a las áreas de magnetismo y propiedades eléctricas (dependientes de la frecuencia), y para estudios de superficies de energía potencial molecular, ambos para investigaciones estáticas y dinámicas.

La aplicación **DL-Poly** lleva a cabo la simulación de dinámica molecular de sistemas complejos. Este es un estándar de facto en las comunidades de química computacional y biología computacional.

GAMESS es un programa para química cuántica molecular *ad initio* que puede calcular funciones de onda SCF. Las correcciones de correlación de esas funciones de onda SCF incluyen la Configuración de Interacción, Teoría de la Perturbación de segundo orden, y aproximaciones Coupled-Cluster, así como la aproximación de la Teoría Funcional de Densidad.

Gaussian es un conjunto de programas de estructura electrónica ampliamente usado por los científicos para la investigación en áreas establecidas y emergentes de interés químico. Comenzando desde las leyes básicas de la mecánica cuántica, Gaussian predice las propiedades de sistemas moleculares bajo una variedad de condiciones. Gaussian es un producto comercial y, debido a restricciones de licencia, solo se puede acceder a él a través de la Organización Virtual Gaussian. Puede encontrar información más detallada relacionada con la participación en la pagina web <http://egee.grid.cyfronet.pl/Gaussian>. Experimentos numéricos que usan Gaussian pueden ejecutarse a través del portal web Chempo.

MCTDH es un algoritmo general para resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para sistemas dinámicos multidimensionales consistentes de partículas distinguibles. MCTDH puede determinar el movimiento cuántico del núcleo de un sistema molecular evolucionando sobre una o varias superficies de energía potencial electrónica acoplada. Por naturaleza, MCTDH es un método aproximado. Sin embargo, puede ser tan exacto como otros métodos competitivos, pero su eficiencia numérica se deteriora con el aumento de la exactitud.

NAMD es un código orientado a objeto paralelo de dinámica molecular diseñado para simulaciones de alto rendimiento de grandes sistemas biomoleculares.

NEWTON-X es un conjunto de programas de propósito general para estados excitados de dinámica molecular, incluyendo métodos no adiabáticos (Tully's surface hopping). El desarrollo modular de NX permite enlazar de forma sencilla con muchos paquetes de química cuántica que pueden proporcionar gradientes de energía y asociar vectores no adiabáticos. En la actual versión, NX puede ejecutar dinámicas usando los paquetes de programas de COLUMBUS y TURBOMOLE.



La aplicación **RWAVEP** calcula probabilidades de química reactiva cuántica usando la aproximación de paquete de ondas. Se generan diferentes sucesos de varios sets de condiciones iniciales.

TURBOMOLE es un conjunto de programas para cálculos de estructuras electrónicas *ad-initio*. Las características destacables de TURBOMOLE son: algoritmos semi-directos con requerimientos de memoria principal y espacio de disco ajustable; uso completo de todos los puntos del grupo; evaluación integral de eficiencia; grid estable y seguro para la integración numérica. TURBOMOLE es un paquete comercial y acceder a él es posible a través de una Organización Virtual aparte.

Venus calcula las secciones eficaces y la tasa de coeficientes para reacciones químicas elementales simulando colisiones entre átomos y moléculas cuyas condiciones iniciales son muestras generadas usando el esquema de Monte Carlo. En cada colisión las ecuaciones de Hamilton que gobiernan el movimiento de los átomos y son resueltas desde los reactivos a los productos.

El conjunto de programas **WIEN2k** lleva a cabo cálculos de la estructura electrónica de sólidos usando la teoría del funcional de la densidad (DFT). Está basado en el método LAPW (Linearized Augmented Plane Wave) + método orbitales locales (lo), uno de los esquemas más seguros de cálculos de estructura de bandas. En el DFT, puede utilizarse la aproximación de densidad local (spin) (LDA) o la versión mejorada de la aproximación del gradiente generalizada (CGA). El porte (de portar al grid, no de puerto de ordenador) Grid incluye un prototipo de los flujos de trabajo grid. Solo los usuarios con una licencia válida de Wien2k pueden usarlo.

CHARON es un interface grid para satisfacer los requisitos específicos de las comunidades científicas.

Páginas Web de la Aplicación

EGEE está muy interesado en considerar nuevas aplicaciones. Para obtener más información acerca de cómo participar visite:

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

Para obtener más información sobre las aplicaciones que actualmente se están ejecutando en EGEE visite el siguiente link:

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

Contacto del Grupo

Mariusz Sterzel (Cyfronet), email: [m.sterzel\(at\)cyf-kr.edu.pl](mailto:m.sterzel(at)cyf-kr.edu.pl)