

Míg a kísérleti kémia alapelvei változatlanok maradtak az utóbbi néhány évtizedben, a számítási erőforrásokhoz való jobb hozzáférés azt eredményezi, hogy a mai vegyészek alacsonyabb költségek mellett sokkal összetettebb molekulákat képesek megvizsgálni és modellezni, mint régen. Az érdeklődés tárgyát képező molekula beazonosítása után a vegyészek megpróbálják megtalálni annak legvalószínűbb felépítését.

Ehhez meghatározzák a legkisebb energiakonfigurációhoz tartozó molekula alakot. A legstabilabb struktúra megtalálásával a kutatók ki tudják számítani a molekula tulajdonságait. Ez az információ felhasználható más, kapcsolódó tudományágak kutatói számára is: például műszaki, biológiai és asztrofizikai területeken.

Számtalan számítógépes kémiai alkalmazás áll rendelkezésre az EGEE Griden. Az alkalmazások többsége az EGEE Computational Chemistry elnevezésű virtuális szervezetén keresztül érhető el. Kereskedelmi csomagok is elérhetők a Gaussian vagy a Turbomole virtuális szervezetben való részvétellel. Az elérhető csomagok listája lentebb látható.

Az **ABCtraj** gáz fázisú anyagokban az atom-diatom reakciók tulajdonságait számolja. Az eseményeket Monte Carlo technikával generálja. A program egy molekuláris virtuális valósághoz kapcsolódik, amely virtuális monitorokon mutatja az események kimenetelét.

A **COLUMBUS** egy olyan programkollekció, amely molekuláris elektronszerkezetek magas szintű *ab initio* szimulációjára használható. A programokat elsődlegesen kiterjesztett, multireferenciás számítások elvégzésére tervezték, melyeket gerjesztetlen vagy gerjesztett állapotban lévő atomokon és molekulákon végezhetünk.

A **CPMD** (Car-Parrinello Molecular Dynamics) egy párhuzamosított síkhullám/pszeudopotenciál implementációja a sűrűségfüggvény elméletnek (DFT), kifejezetten *ab initio* molekula dinamikára tervezve.

A **Dalton** egy hatékony kvantumkémiai program molekulatulajdonságok számítására, SCF, MP2 vagy MCSCF hullámfüggvényekkel. A program erősségei közé főként a mágneses és (frekvenciafüggő) elektromos tulajdonságok területei és a molekuláris potenciális energiafelületek tanulmányozási lehetőségei tartoznak, statikus és dinamikus megfigyelésekre egyaránt.

A **DL-Poly** alkalmazás komplex rendszerek molekuláris dinamika szimulációját végzi. Ez egy de-facto szabvány a számítógépes kémia és a számítógépes biológia közösségben.

A **GAMESS** az *ab initio* molekuláris kvantumkémia számára kifejlesztett program, amely SCF hullámfüggvények számítására képes. Az ezen SCF hullámfüggvényekre alkalmazott korrelációs korrekciók közé tartoznak a konfigurációs kölcsönhatás, másodrendű perturbációs elmélet és csatolt klaszter módszerek, valamint a sűrűségfüggvény elméleten alapuló közelítés is.

A **Gaussian** elektronszerkezetekkel dolgozó programok gyűjteménye, amely széleskörűen használt a kémia megalapozott és kialakulóban lévő területein dolgozó tudósok körében. A kvantummechanika alaptörvényeitől kezdve a Gaussian megjósolja molekuláris rendszerek tulajdonságait különböző feltételek mellett. A Gaussian egy kereskedelmi termék és ezért használata engedélyköteles, így a hozzáférés csak a Gaussian virtuális szervezeten keresztül lehetséges. A részvétellel kapcsolatos részletes információkért látogassa meg a <http://egee.grid.cyfronet.pl/Gaussian> weblapot.

Az **MCTDH** egy általános algoritmus az időfüggő Schrödinger egyenlet megoldására olyan többdimenziós dinamikai rendszerekre, melyek megkülönböztethető részecskékből állnak. Az MCTDH így meg tudja határozni molekuláris rendszerek atommagjainak kvantumozott mozgását, amely egy vagy több csatolt elektronikus potenciál energiafelületen jelenik meg. Természetéből adódóan az MCTDH egy közelítő módszer. Habár megoldható, hogy olyan pontos legyen, mint bármelyik versenytársa, számítási hatékonysága leromlik a növekvő pontossággal.

A **NAMD** egy párhuzamos, objektumorientált, molekuláris dinamikát számító kód, amit nagy biomolekuláris rendszerek nagyteljesítményű szimulációjára terveztek.

A **NEWTON-X** egy általános célú programcsomag gerjesztett állapotú molekuláris dinamika számításra, beleértve a nem adiabatikus folyamatokat (Tully féle felületugrás). Az NX moduláris fejlesztése lehetővé teszi, hogy könnyen hozzákapcsolhassuk más kvantumkémiai csomaghoz, ami energia gradienseket és nem adiabatikus párosító-vektorokat szolgáltat. A jelenlegi verziójában az NX a COLUMBUS és a TURBOMOLE programok felhasználásával végez dinamikai számításokat.

A **RWAVEP** alkalmazás kémiai reakciós kvantum-valószínűségeket számít, a hullámcsomag szemlélettel. A különféle kezdeti feltételekhez más-más eseményt generál.

A **TURBOMOLE** *ab initio* elektronszerkezet számításokra alkalmas programcsomag. A TURBOMOLE kiemelkedő tulajdonságai: fél-közvetlen algoritmusok, állítható memória és tárolókapacitás igényekkel; az összes pontcsoport teljes kihasználása; hatékony integrálszámítás; stabil és pontos rácsok a numerikus integráláshoz. A TURBOMOLE egy kereskedelmi csomag, amely egy elkülönített virtuális szervezeten keresztül érhető el.

A **Venus** elemi kémiai reakciók hatáskeresztmetszeti és sebességi állandóját számítja atomok és molekulák ütközéseiből, melyek kezdeti feltételeit Monte Carlo módszerrel generálják. Minden ütközésben az atomok mozgását meghatározó Hamilton egyenletek megoldásával kaphatók meg a reagensekből a termékek.

A **WIEN2k** programcsomag szilárd anyagok elektronszerkezeti számításait végzi a sűrűségfüggő elméletet (DFT) alkalmazva. Alapját az (L)APW+lo (linearized augmented plane-wave + local orbitals) módszer képezi, amely egyike a leggyorsabb sávszerkezeti számításoknak. A DFT-ben a helyi (spin) sűrűségbecslés (Local density approximation (LDA)), illetve az általánosított gradiensbecslés továbbfejlesztett verziója használható. A WIEN2k csak elektronokból álló séma, amely többek közt relativisztikus hatásokat tartalmaz. A Grides verzió egy Grid munkafolyamat prototípust foglal magában. A felhasználók csak érvényes Wien2k licensszel használhatják a programot.

A **CHARON** egy Grid interfész, amely biztosítja a különböző közösségek által támasztott konkrét követelményeket.

Az alkalmazás weboldalai:

Az EGEE örömmel fogad további alkalmazásokat. A részvétellel kapcsolatos további információkért látogassa meg a weboldalt: <http://technical.eu-egee.org/index.php?id=392>.

Az EGEE-n futó alkalmazásokról való bővebb felvilágosításért látogassa meg az EGEE weboldalt: <http://technical.eu-egee.org/index.php?id=148>.

A csompról elérhetőségei:

Mariusz Sterzel (Cyfronet), email: m.sterzel@cyf-kr.edu.pl