



Virtuálna organizácia výpočtovej chémie bola vytvorená na prevádzkovanie molekulárneho simulátora GEMS (Grid Enabled Molecular Simulator). Na grid už bolo prenesených niekoľko aplikácií, ktoré bežia v produkčnom režime. V súčasnosti prebiehajú snahy preniesť na infraštruktúru EGEE ďalšie aplikácie a podporiť širšiu spoluprácu medzi výskumnými skupinami v oblasti výpočtovej chémie.

Aplikácia **GEMS** slúži na implementáciu simulačného prostredia, ktoré umožní študovať reakčnú dynamiku zložitých chemických systémov.

ABCtraj počíta pozorovania reakcií atóm-diatóm v plynnej fáze. Udalosti sú generované technikami Monte Carlo. Program je spojený s virtuálnym molekulárnym prostredím, ktoré znázorňuje výstupy simulácie na monitoroch virtuálnej reality.

Venus počíta krížové prierezy a rýchlostné koeficienty elementárnych chemických reakcií simulovaním kolízií medzi atómami a molekulami, ktorých počítačové podmienky sú vzorkované použitím schémy Monte Carlo. Pre každú kolíziu sú riešené Hamiltonove rovnice, ktoré určujú pohyb atómov od reaktantov ku produktom.

Aplikácia **DI-Poly** vykonáva simuláciu molekulárnej dynamiky zložitých systémov. Pre oblasť výpočtovej chémie a pre spoločnosti z oblasti výpočtovej biológie je *de-facto* štandardom.

Aplikácia **RWAVEP** počíta kvantové pravdepodobnosti chemických reakcií použitím prístupu založeného na špeciálnych sadách vlnových funkcií (wavepackets). Pre rôzne množiny počiatkových podmienok sú generované rôzne udalosti.

V blízkej budúcnosti sa budú vo virtuálnej organizácii CompChem rozvíjať ďalšie aplikácie, napr.:

- **COLUMBUS** - balík programov pre vysoko-úrovňové *ab initio* výpočty molekulárnych elektronických štruktúr. Programy sú v prvom rade určené na rozsiahle multi-referenčné výpočty základných a excitovaných elektronických stavov atómov a molekúl.
- **GAMESS** - program pre molekulárnu kvantovú chémiu *ab initio*, ktorý dokáže počítať vlnové funkcie SCF. Korekcie korelácií k týmto SCF vlnovým funkciám obsahujú interakciu konfigurácií, teóriu perturbácií druhého rádu, prístupy typu „coupled-cluster“, ako aj teóriu priblíženia funkcionálu hustoty.

VO CompChem bude okrem toho experimentovať so systémom **CHARON** a vybaví grid prispôsobiteľným používateľským rozhraním, ktoré uspokojí špecifické požiadavky komunity výpočtových chemikov.

EGEE má záujem spolupracovať aj na ďalších aplikáciách. Navštívte, prosím, Používateľský a aplikačný portál <http://egeeena4.lal.in2p3.fr/>, kde nájdete informácie o možnosti spolupráce, ako aj viac informácií o aplikáciách, ktoré v súčasnosti bežia na EGEE.