



Virtuální organizace výpočetní chemie byla založena, aby provozovala simulátor GEMS (Grid Enabled Molecular Simulator). Na grid již bylo přeneseno několik aplikací, které běží v ostrém provozu. V současné době je snaha přenést na infrastrukturu EGEE také další aplikace a propagovat širší spolupráci mezi výzkumnými skupinami z oblasti výpočetní chemie.

Aplikace **GEMS** slouží k implementaci simulačního prostředí, které dovolí studovat reakční dynamiku složitých chemických systémů.

Aplikace **ABCtraj** počítá pozorovatelné jevy reakcí mezi atomy/diatomy v plynné fázi. Události jsou generovány technikami Monte Carlo. Program je napojen také na prostředí virtuální reality molekul, které zobrazuje výsledky simulace na virtuálních monitorech.

Aplikace **Venus** počítá průsečíky a rychlostní koeficienty elementárních chemických reakcí simulací kolizí mezi atomy a molekulami, jejichž iniciační stavy jsou vzorkovány s využitím schématu Monte Carlo. U každé kolize jsou řešeny hamiltonovské rovnice, které řídí pohyb atomů od reaktantů až po produkty.

Aplikace **DI-Poly** provádí simulaci molekulární dynamiky složitých systémů. V oblasti výpočetní chemie a výpočetní biologie se jedná *de facto* o standard.

Aplikace **RWAVEP** počítá chemické reakční kvantové pravděpodobnosti pomocí přístupu založeného na speciálních sadách vlnových funkcí („wavepackets“). Pro různé sady iniciačních podmínek jsou generovány různé události.

V blízké budoucnosti budou v rámci virtuální organizace výpočetní chemie nasazeny i další aplikace, například:

- **COLUMBUS** – kolekce programů pro vysokoúrovňové *ab initio* výpočty molekulární elektronové struktury. Programy jsou určeny především pro rozsáhlé multireferenční výpočty základních a excitovaných stavů atomů a molekul.
- **GAMESS** – program pro molekulární kvantovou chemii *ab initio*, který dokáže počítat vlnové funkce SCF. Korelační korekce těchto vlnových funkcí SCF zahrnují konfigurační interakci, perturbační teorii druhého řádu, přístupy typu „coupled-cluster“ i aproximaci využívající teorii hustotních funkcí.

Virtuální organizace výpočetní chemie bude dále experimentovat se systémem **CHARON** a grid vybaví přizpůsobitelným uživatelským rozhraním, které uspokojí požadavky této komunity.

Infrastruktura EGEE bude ochotně sloužit dalším možným aplikacím. Více informací o tom, jak se zúčastnit, a další informace o aplikacích, které běží na infrastruktuře EGEE, naleznete na portálu pro uživatele a aplikace na adrese <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>.