



Hesaplamalı Kimya Sanal Organizasyonu Grid Enabled Molecular Simulator (GEMS) 'ü çalıştırması için kurulmuştur. Çeşitli uygulamalar gride aktarılmış ve üretimde çalışır durumdalar. EGEE altyapısına yeni ilave uygulamalar katma çabaları devam etmektedir ve hesaplamalı kimya araştırma grupları arasında daha geniş bir işbirliği teşvik edilmektedir.

**GEMS** uygulaması kompleks kimyasal sistemlerin reaksiyon dinamiklerini inceleyecek simülasyon çevresinin yerleştirilmesinde kullanılmaktadır.

**ABCtraj** gaz fazında oluşan atom-diatom reaksiyonlarının sonuçlarını hesaplar. Olaylar Monte Carlo teknikleri kullanılarak yaratılır. Program, sanal monitörlerde simülasyon sonuçlarını gösteren moleküler sanal gerçeklik çevresine bağlanır.

**Venus** ilk durumları Monte Carlo ile örneklenen atomlar ve moleküller arasındaki çarpışmaları simüle ederek kesit alanlarını ve oran katsayılarını hesaplar. Her çarpışmada atomların hareketini yönlendiren Hamilton denklemleri ürünlere olan reaksiyonlar incelenerek çözülür.

**DI-Poly** uygulaması kompleks sistemlerin moleküler dinamik simülasyonlarını yapar. Bu hesaplamalı kimya ve hesaplamalı biyoloji topluluklarında *de-facto* (fiili) bir standarttır.

**RWAVEP** uygulaması wavepacket yaklaşımını kullanarak kimyasal reaktif quantum olasılıklarını hesaplar. Çeşitli ilk durum kümeleri için farklı olaylar yaratılır.

**GAMESS** – SCF dalga fonksiyonlarını hesaplayabilen *ab initio* moleküler quantum kimya programıdır. Bu SCF dalga fonksiyonları için bağıntı düzeltmeleri şunları içermektedir: yapılanış etkileşimi, ikincil Perturbation Teorisi ve Coupled-Cluster yaklaşımları.

**GAUSSIAN** – su ana kadar kimya alanında yapılmış olan ve bundan sonrası için de önem taşıyan araştırmalarda bilim adamları tarafından sıkça kullanılan elektronik yapı programları bütünüdür. Kuantum mekaniğinin temel yasalarından başlayarak, Gaussian değişik durumlarda moleküler sistemlerin özelliklerini tahmin etmede kullanılıyor. Gaussian ticari bir üründür ve lisans kısıtlamalarından dolayı kullanımı sadece Gaussian Sanal Organizasyonuna açıktır. Ayrıntılı üyelik bilgisi web sayfasında <http://egee.grid.cyfronet.pl/Gaussian> bulunabilir.

Yakın gelecekte aşağıda yer alan uygulamalar gibi başka uygulamalar da hesaplamalı kimya sanal organizasyonuna (CompChem VO) kurulacaktır.

- **COLUMBUS** – yüksek seviyeli *ab initio* (başlangıçtan itibaren) moleküler elektronik yapı hesaplamaları için programlar

topluluğudur. Programlar ilk olarak elektronik zeminde çoklu-başvuru hesaplamaları için tasarlanır.

- **Dalton SCF**, MP2 veya MCSCF dalga fonksiyonlarını kullanarak moleküler özelliklerin hesaplanması için oluşturulmuş güçlü bir kuantum kimya programıdır. Özellikle moleküler potansiyel enerji yüzeyi çalışmaları, hem statik hem dinamik incelemeler için manyetik ve frekans-bağımlı elektrikte bu program kendini göstermiştir.
- **CPMD** - Car-Parrinello Molecular Dynamics kodu, özellikle abinit moleküler dinamikler için tasarlanmış, Fonksiyonel Yoğunluk Teorisinin gerçekleştirilmesi, paralelleştirilmiş düzlem dalgasıdır.
- **ACES II** - Advanced Concepts in Electronic Structure yüksek seviye kuantum kimyasal abinit hesaplamalarını gerçekleştiren programlar serisidir. Çok vücut pertürbasyon teorisi (MBPT) gibi çok-vücut tekniklerini kullanan özellikler ve elektron korelasyonunu ele alan birleştirilmiş küme tekniklerinin yanı sıra, atomik ve moleküler enerjilerin doğru hesaplanmasında da kullanılması önemli özelliğidir.
- **Turbomole** abinit elektronik yapı hesaplamaları için bir paket programdır. Turbomole'un göze çarpan özellikleri şu şekildedir: ayarlanabilir temel hafıza ve disk alanı istemleriyle yarı doğrudan algoritmalar, bütün nokta gruplarının tam kullanımı, verimli integral hesaplanması, sayısal entegrasyon için kararlı ve doğru gridler. Turbomole ticari bir pakettir ve kullanımı sadece ayrı bir sanal organizasyona açıktır.
- **NAMD** büyük biyomoleküler sistemlerin yüksek başarılı simülasyonları için tasarlanmış paralel, nesneye yönelik bir moleküler dinamikler kodudur.

Bunlara ek olarak CompChem VO, hesaplamalı kimya topluluklarının belirli ihtiyaçlarını yerine getirebilmek için gridi özel kullanıcı arayüzüyle arayüzlemek için **CHARON** sistemi ile deneyler yapacak.

EGEE diğer uygulamalara da açıktır. Katılım koşulları ve EGEE'deki uygulamalar hakkında daha fazla bilgi için <http://egeena4.lal.in2p3.fr/> 'deki kullanıcı ve uygulama portalına bakınız.