

SZCZEGÓŁOWY OPIS PRZEDMIOTU ZAMÓWIENIA

ZADANIE NR 1

I. Przedmiot zamówienia

Przedmiotem zamówienia jest dostawa oprogramowania **do wizualizacji struktur krystalicznych na poziomie atomowym i badania struktury krystalicznej** w ramach projektu pn. "Nowoczesne technologie materiałowe stosowane w przemyśle lotniczym"- nr projektu POIG.01.01.02-00-015/08 - umowa nr POIG.01.01.02-00-015/08-00 z dnia 15 grudnia 2008r. o dofinansowanie projektu kluczowego realizowanego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka, lata 2007-2013, Priorytet 1. Badania i rozwój nowoczesnych technologii, Działanie 1.1 Wsparcie badań naukowych dla budowy gospodarki opartej na wiedzy, Poddziałanie 1.1.2 Strategiczne programy badań naukowych i prac rozwojowych

II. Parametry techniczne

Program na podstawie danych struktury krystalicznej (takich jak grupa przestrzenna, komórka elementarna, parametry atomowe, lub dane z pliku (np. CIF - Crystallographic Information File z „IUCr journals”)):

- umożliwia tworzenie rysunków (zdjęć) o wysokiej jakości do prezentacji lub publikacji,
- pozwala zrozumieć zasady budowy struktur krystalicznej,
- na różne sposoby tworzy wizualizację budowy struktur krystalicznych,
- pozwala na jednoczesną pracę z wieloma strukturami.

Lista funkcji:

Program musi posiadać parametry i możliwości nie gorsze niż:

1. Pliki wejściowe i wyjściowe:

a) Binarny format dokumentu:

- Obsługa kryształów i struktur molekularnych (tj. z i bez symetrii translacyjnej).
- Przechowywanie wielu zbiorów danych o strukturze takich jak m.in.:
 - parametry atomowe,
 - parametry komórki i grupy przestrzennej (opcjonalnie),
 - anizotropowe parametry przemieszczenia,
 - parametry wiązań (wiązania, wiązania wodorowe H, połączenie bez wiązań)
 - dane chemiczne i bibliograficzne (tj. m.in. autor, referencje, pochodzenie bazy danych).
- Obsługa wielu zdjęć dla danego zestawu struktury. Zapis własnych zbudowanych i zaprojektowanych struktur krystalicznych.

b) Liczba atomów, wiązań, wielościanów itp. nieograniczona programowo. Ograniczenie może być tylko sprzętowe, np. pamięć RAM.

c) Możliwość ręcznego wprowadzenia i aktualizacji danych chemicznych, krystalograficznych i bibliograficznych.

d) Import lub kompatybilność z poniższymi formami danych:

- Diamond 3/4 (.diamdoc),
- Diamond 2 (.dsf),
- Diamond Endeavour (.edf, .ds1),
- CRYSTIN (.cry),
- Cambridge Structural Database (.csd, .dat),
- Brookhaven Protein Data Bank (.pdb, .ent),
- SHELX-93 (.ins, .res, .dat),
- Krystalograficzne informacje (.cif),
- XYZ - współrzędne kartezjańskie (.xyz),
- Sybyl MOL i MOL2 - MDL Molfile (.mol, .mdl),
- Cerius2 CSSR (.cssr),
- X'Pert Plus (.idf);
- Kplot (.kpl, .dat),
- Endeavour Molecule (.emo).

- e) Możliwość eksportu danych o strukturze do formatów m.in.:
- CIF,
 - Schakal,
 - XYZ.
- f) Asystent do tworzenia i renderowania fotorealistycznych scen z cieniami, odbiciami, teksturą, tłem, grafiką i innymi elementami graficznymi.
- g) Możliwość eksportu grafiki struktury w 3D w formacie VRML.
- h) Możliwość eksportu grafiki struktury w 2D, z szerokością, wysokością i rozdzielczością zdefiniowaną przez użytkownika, w formatach min.:
- Windows Metafile (WMF),
 - bitmapy (BMP),
 - GIF, JPG lub PNG, z możliwością połączenia w formacie HTML.
- i) Opcje typu Wytnij, Kopiuj, Wklej dla zestawów danych pomiędzy dokumentami (wraz z powiązаныmi grafikami).
- j) Wyszukiwanie danych chemicznych, krystalograficznych lub bibliograficznych:
- w wybranych typach plików w wybranych katalogach,
 - w krystalograficznej bazie danych (COD), w tym (między innymi) AMCSD ("American Mineralogist Crystal Structure Database"), jak również plików CIF z czasopisma IUCr (www.crystallography.net).
- k) Konfigurowalna lista zestawów danych struktury w dokumencie:
- w tabeli,
 - w postaci złożonej struktury.
- l) Kodowanie kolorami zbiorów danych w celu odróżnienia struktur.
- m) Miniatury zdjęć struktur wybranego zestawu danych lub całego dokumentu.
- n) lista ostatnio otwieranych dokumentów z miniaturami.
- o) Lista atomów: hierarchiczna lista atomów w obrazie struktury, grup lub cząsteczek.
- p) Drukowanie wybranych zbiorów danych, arkusza danych, tabel lub obrazów struktury.
- r) Możliwość kopiowania zestawów danych tekstowych za pomocą schowka systemu.
- s) Eksport arkusza danych i tabel w formacie HTML.

2. Tworzenie struktur:

- a) Asystent, który pomaga stworzyć obraz struktury od podstaw lub modyfikować obraz.
- b) Kreator automatycznego tworzenia struktur - interaktywne zmiany budowanej struktury oraz kierunku przeglądania.
- c) Konwersja między kryształem a strukturami molekularnymi, czyli dodanie lub usunięcie informacji o komórce elementarnej i symetrii.
- d) Wypełnianie komórki elementarnej, wielu komórek, dowolnego zakresu komórek lub sfer wokół wybranego atomu centralnego.
- e) Wypełnianie prostokątnych obszarów zdefiniowanych przez użytkownika w obrębie ekranu.
- f) Wypełnianie wzdłuż płaszczyzny (hkl) lub pomiędzy płaszczyzną a ściankami układu współrzędnych.
- g) Wybór atomów do budowy podsięci.
- h) Tworzenie otoczenia atomu.
- i) Analiza wiązań i histogramy pokazujące rozkład odległości między wybranymi rodzajami atomów i od parametrów wiązania, łącznie z automatycznym obliczaniem i sprawdzeniem przedziałów odległości.
- j) Tworzenie wiązań automatycznie lub ręcznie między dwoma atomami.
- k) Wybieranie atomów służących do budowania złożonych struktur.
- l) Tworzenie sfer koordynacyjnych w zakresie wybranych atomów centralnych i ich odwracanie.
- m) Automatyczne generowanie cząsteczek lub zakończeń fragmentów.
- n) Definicja jednostki cząsteczkowej.
- o) Generowanie cząsteczek z jednostek molekularnych w pozycjach symetrii-równoważne.
- p) Tworzenie struktur (np. prostopadłościan, kula, warstwy).
- r) Definiowanie wiązań, wiązań wodorowych H lub kontaktów bez wiązań. Tworzenie wiązań wodorowych i kontaktów.
- s) Wycinanie, kopiowanie i wklejanie elementów strukturalnych między różnymi strukturami:
- mogą być kopiowane fragmenty obrazu struktury (lub całego obrazu),
 - skopiowany fragment można wkleić do pustego lub do innego obrazu tego samego zestawu danych.
- t) Wieloletapowe funkcje Undo i Redo.

3. Wizualizacja:

- a) Schematy konstrukcyjne ze wzorem obrazu i wyświetlania ustawień do szybkiego zastosowania dla innych obrazów struktury.
- b) Układy okien (regularne, do wydruku, do tworzenia mapy bitowej z danego wymiaru x i y i rozdzielczości w DPI).
- c) Zmienny współczynnik powiększenia.
- d) Modele, łącznie lub pojedynczo przyporządkowane do jednego lub grupy atomów takich jak:
 - regularne,
 - elipsoide,
 - przestrzenne,
 - sfer atomów lub wiązań w zależności od promienia atomu.
- e) Definiowanie widoku wzdłuż zadanych osi lub względem osi specjalnych.
- f) Projekcja centralna lub równoległa, wyświetlanie stereo.
- g) Fotorealistyczne renderowanie modeli dla zdefiniowanych przez użytkownika źródeł światła i właściwości materiałów.
- h) Zmiana kolorów, stylów i promieni grup atomów i wiązań. Możliwy indywidualny styl dla każdego pojedynczego atomu.
- i) Zmiana promienia atomu i długości wiązań.
- j) Fragmenty wiązań opcjonalnie lub dwukolorowe.
- k) Etykietowanie atomów i wiązań.
- l) Tworzenie wielościannów:
 - wokół centralnego atomu lub wokół wybranych grup atomów,
 - zbudowane z wybranych atomów ligandów.
 - przezroczyste, opcjonalnie lub kreskowane płaszczyzny.
- m) Definicja płaszczyzn sieciowych i kierunków dla wybranych atomów.
- n) Dodawanie wektorów do atomów np. moment magnetyczny.
- o) Różne kolory dla zróżnicowania stopnia utlenienia.

4. Animacja:

- a) Ruch obrazu struktury:
 - Tryby pracy:
 - obrót wzdłuż osi X, Y i Z,
 - przesunięcie poziome i/lub pionowe,
 - zmiana współczynnika rozszerzenia,
 - widok perspektywy.
 - Kontrola animacji:
 - mysz,
 - klawiatura,
 - klawiatura numeryczna.
 - Możliwość kontroli przyspieszenia ruchu.
 - Ruch, który może być przerywany i wznowiany.
- b) Obrót atomu, przesunięcie i zmiana współczynnika powiększenia.
- c) Rejestrator, który pomaga tworzyć sekwencje wideo, np. jako pliki AVI.

5. Obliczenia i analiza:

- a) Podgląd sąsiedztwa atomu ze zmiennym promieniem podglądu sfery.
- b) Obliczanie widm proszkowych:
 - zmiana parametrów dyfrakcyjnych:
 - typ promieniowania: X-ray, neutrony, elektrony,
 - długość fali,
 - korekta PR,
 - zakres kąta 2θ ,
 - schemat dyfrakcji (konfigurowane mogą być style, kolory i grubość linii).
 - tabela parametrów odbicia w zakresie 2θ .
- c) Obliczanie odległości i kątów:
 - w konfigurowalnej tabeli, dla wybranych typów atomowych i zakresu odległości,
 - wokół wybranego atomu w danym obrazie struktury,
 - graficzne przedstawienie odległości jako kolorowy histogram.
- d) Interaktywny pomiar odległości, kątów i kątów skrętnych (z uwzględnieniem niepewności standardowych).
- e) Pomiar cech geometrycznych (z uwzględnieniem niepewności standardowych):

- kąt pomiędzy dwoma płaszczyznami (hkl) lub płaszczyzną przechodzącą przez 3 lub więcej atomów.
- kąt pomiędzy dwoma liniami,
- kąt pomiędzy normalną do powierzchni a linią,
- odległości między płaszczyzną atomową a linią,
- centrowanie zbioru atomów,
- płaszczyzna lub liniowość dla zestawu atomów.

f) Zawartość obrazu struktury.

g) Informacje o obiekcie, który jest zaznaczony na rysunku lub w konstrukcji.

h) Domeny Dirichleta dla wybranego atomu sieci.

i) Sąsiadujące atomy i wierzchołki dla wybranej bryły Voronoja.

6. Inne:

a) Dostęp do bazy danych COD („Crystallography Open Database”), w tym AMCSD („American Mineralogist Crystal Structure Database”) jak również pliki CIF (z „IUCr journals”). Baza nie starsza niż z 2012 roku i nie mniejsza niż 150,000 wpisów,

b) Instalacyjna płyta CD/DVD

c) Podręcznik (manual) w wersji zarówno elektronicznej jak i wydrukowanej książkowej w kolorze.

d) Kompatybilność z systemem Windows 7 64bit – program musi działać pod tym systemem.

e) Automatyczna aktualizacja online.

Przykładowy program spełniający powyższe wymagania: Diamond v4 Crystal Impact©

ZADANIE NR 2:

Zakup bibliotek programu Comsol Multiphysics w ramach realizacji Projektu Kluczowego „**Nowoczesne technologie materiałowe stosowane w przemyśle lotniczym**”, Program Operacyjny Innowacyjna Gospodarka, Priorytet 1. Badania i Rozwój Nowoczesnych Technologii, Działanie 1.1 Wsparcie badań naukowych dla budowy gospodarki opartej na wiedzy, Poddziałanie 1.1.2 Strategiczne programy badań naukowych i prac rozwojowych (zadanie badawcze ZB 10).

Zakup oraz dostawa następujących bibliotek programu Comsol Multiphysics licencji FNL (Floating Network License) wraz z minimum 17 miesięczną subskrypcją:

1. COMSOL Multiphysics
2. Heat Transfer Module
3. Material Library,
4. Structural Mechanics Module,
5. AC/DC Module,
6. CAD Import Module
7. Semiconductor Module

Zamawiający posiada aktualną licencję ww. oprogramowania o numerze: 9300064

Termin dostawy: do 14 dni od dnia podpisania umowy.



**INNOWACYJNA
GOSPODARKA**
NARODOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI



UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

