

TeraChem

TeraChem jest pakietem firmy PetaChem, służącym do obliczeń metodami *ab initio* i Teorii Funkcjonałów Gęstości (ang. *Density Functional Theory, DFT*) i zaprojektowanym tak, aby wykorzystać możliwości obliczeniowe procesorów graficznych.

Dostępne metody obliczeniowe pakietu są ograniczone głównie do wyznaczania energii i jej pierwszych pochodnych (gradientów). Jednakże kombinacja dostępnych metod wraz z możliwościami procesorów graficznych czyni z pakietu perfekcyjne narzędzie symulacji ewolucji układów w czasie, w trakcie obliczeń dynamiki molekularnej (BOMD, ang. *Born Oppenheimer Molecular Dynamics*), w szczególności dla dużych układów.

Dodatkowo, obliczenia wykorzystujące DFT mogą być wzbogacone o poprawki dyspersyjne (DFT-D3 and DFT-D2). TeraChem może być również wykorzystany w obliczeniach optymalizacji geometrii, jak i do poszukiwania geometrii stanów przejściowych. W niedługim czasie pakiet umożliwi również wykonywanie obliczeń dla stanów wzbudzonych metodami TDDFT.

Strona producenta: www.petachem.com/products.html

Dokumentacja producenta: [TeraChem Users Guide](#)