



Виртуалната организация в областта на изчислителната химия беше създадена с цел стартирането на молекулярен симулатор в гريد-средата (Grid Enabled Molecular Simulator, GEMS). Вече са разработени няколко приложения, като усилията на организацията са насочени към разработване на нови приложения, както и към разширяване на сътрудничеството между отделните изследователски групи, работещи в тази област.

Целта на приложението **GEMS** е изучаване на динамиката на реакциите в сложни химични системи.

ABCtraj отчита наблюдаващите се величини в атомно-диатомните взаимодействия в газообразно състояние. Програмата е свързана с виртуална среда, в която резултатите от симулациите се извеждат на монитори.

Venus отчита сеченията и стойностите на коефициентите, характеризиращи елементарни химични реакции, чрез симулиране на взаимодействията между атоми и молекули, чиито начални условия са моделирани по метод Монте Карло.

Приложението **DI-Poly** провежда симулации на молекулярната динамика в сложни системи. В действителност, това приложение е стандарт сред изследователските общности в областта на изчислителната химия и изчислителната биология.

Приложението **RWAVEP** отчита квантово-механичните вероятности на химични реакции, като се използва подходът на [вълновите пакети](#) (вълновият пакет е математическа функция, която описва вероятностната позиция и момента на елементарните частици). Генерират се различни събития за различни набори от начални условия.

В близко бъдеще виртуалната организация ще разработи и други приложения като:

- **COLUMBUS** – колекция от програми за сложни [ab initio](#) пресмятания. Програмите са предназначени за задълбочени пресмятания при основно и възбудено състояние на електронните обвивки на атоми и молекули.
- **GAMESS** – програма за пресмятания на SCF (self-consistent field) вълнови функции в областта на [ab initio](#) квантова химия. Корелационните корекции на тези функции включват конфигурационно взаимодействие, пертурбационна теория от втори ред и клъстерни подходи, а така също и приближения от функционалната теория на плътностите.

Виртуалната организация ще експериментира със системата **CHARON**, за да се свърже с гريد-средата чрез потребителски интерфейс, разработен в съответствие с изискванията на изследователската общност в тази област.

Проектът EGEE е отворен и за други приложения. Повече информация за приложенията и за това как да се включите в проекта ще намерите в **User and Application Portal** на страницата <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>.