

La Organización Virtual de Química Computacional se creó para ejecutar el Grid Enabled Molecular Simulator (GEMS), un simulador molecular para el Grid. Se han transferido al Grid varias aplicaciones y se han puesto en producción. También se está trabajando para transferir aplicaciones adicionales a la infraestructura EGEE y para fomentar una mayor colaboración entre los grupos de investigación de química computacional.

La aplicación **GEMS** se utiliza para desarrollar un entorno de simulación que permita estudiar la dinámica de reacción de sistemas químicos complejos.

**ABCtraj** calcula las variables observables de las reacciones tipo átomo-diátomo en fase gaseosa. Los sucesos se generan utilizando técnicas Monte Carlo. El programa está vinculado a un entorno de realidad virtual molecular que muestra los resultados de la simulación en monitores virtuales.

**Venus** calcula las secciones transversales y los coeficientes de velocidad de reacciones químicas elementales simulando colisiones entre átomos y moléculas cuyas condiciones iniciales se muestrean utilizando un esquema Monte Carlo. En cada colisión las ecuaciones de Hamilton que regulan el movimiento de los átomos se resuelven desde los reactivos hasta los productos.

La aplicación **DI-Poly** realiza la simulación dinámica molecular de sistemas complejos. Es una norma *de-facto* en las comunidades de química computacional y biología computacional.

La aplicación **RWAVEP** computa probabilidades cuánticas de química reactiva utilizando la teoría del paquete de ondas (wavepacket). Se generan diferentes sucesos para los distintos conjuntos de condiciones iniciales.

En un futuro próximo se implantarán otras aplicaciones en la OV de Química Computacional, como por ejemplo:

- **COLUMBUS** - una colección de programas para cálculos *ab initio* de estructuras electrónicas moleculares de alto nivel. Los programas están diseñados principalmente para realizar cálculos extensos multireferenciales sobre el campo electrónico y los estados de excitación de átomos y moléculas.
- **GAMESS** - un programa para química cuántica molecular *ab initio* que puede computar funciones de ondas SCF. Las correcciones de correlación para estas funciones de onda SCF incluyen la Interacción de Configuración, la Teoría de Perturbación de segundo orden, y los métodos Coupled-Cluster, así como la aproximación a la Teoría de Densidad Funcional.

Además, la OV de Química Computacional experimentará con el sistema **CHARON** para vincular el Grid con una interfaz de usuario



configurable que satisfaga las necesidades específicas de la comunidad de Química Computacional.

EGEE muestra un gran interés en considerar otras aplicaciones. Para más información sobre cómo participar, así como más información sobre las aplicaciones que funcionan con EGEE, visite el Portal de Usuarios y Aplicaciones en <http://egeena4.lal.in2p3.fr/>.