

Písemná zpráva zadavatele

Podle § 85 zákona č. 137/2006 Sb., o veřejných zakázkách, ve znění pozdějších předpisů (dále jen „zákon“)

1. Veřejná zakázka

ev č. ve VVZ: 479506

FHI-aims - software pro řešení elektronové struktury molekulárních systémů a pevných látek

Podlimitní veřejná zakázka na dodávky zadávaná ve smyslu § 23 odst. 4 písm. a) a podle § 26 odst. 3 písm. a) zákona č. 137/2006 Sb., ve znění pozdějších předpisů (dále jen „zákon“), v jednacím řízení bez uveřejnění.

Tato veřejná zakázka souvisí s realizací projektu „Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů“, reg.č. CZ.1.05/2.1.00/03.0058, v rámci Operačního programu Výzkum a vývoj pro inovace

2. Identifikační údaje o zadavateli

Název zadavatele	Univerzita Palackého v Olomouci
Sídlo	Křížkovského 8, 771 47 Olomouc
IČO:	619 89 592
Jméno a příjmení osoby oprávněné jednat jménem zadavatele	prof. Mgr. Jaroslav Miller, M.A., Ph.D. rektor UP v Olomouci

3. Předmět veřejné zakázky je:

Předmětem veřejné zakázky je dodávka software FHI-aims v počtu 20 licencí pro akademické prostředí, zajišťující:

1. Výpočty elektronické struktury izolovaných molekul i periodických systémů metodou DFT s pomocí numerických atomových bazových funkcí.
2. Výpočty pomocí GGA (např. PBE, PW91), hybridních (např. B3LYP, PBE0/PBEh, HSE) a double-hybridních DFT funkcionalů.
3. Optimalizaci geometrické struktury molekul a periodických systémů, ab initio molekulární dynamiku, infrastrukturu pro vibrace a fonony.
4. Dobrou paralelizaci výpočtů až k tisícovkám CPU.
5. Mnohočásticové poruchové metody, implementované v bázi lokalizovaných orbitalů, vhodné i pro molekulární systémy: random phase approximation (RPA), G0W0 metodu a její self-konzistentní verzi GW

6. Přibližné metody pro zahrnutí vdW interakcí do metod funkcionálu hustoty (DFT): (Tkatchenko-Scheffler, vdW-DF)
7. Výpočty molekulárních transportních jevů

4. Předpokládaná hodnota veřejné zakázky je 4.000,- EUR bez DPH.

5. Zrušení veřejné zakázky:

Zadavatel zrušil podlimitní veřejnou zakázku na dodávky s názvem „**FHI-aims - software pro řešení elektronové struktury molekulárních systémů a pevných látek**“, zadávanou v jednacím řízení bez uveřejnění dle § 23 odst. 4 písm. a) a podle § 26 odst. 3 písm. a) zákona č. 137/2006 Sb., o veřejných zakázkách, ve znění pozdějších předpisů (dále jen "zákon"), v souladu s § 84 odst. 1 písm. a) zákona, neboť ve lhůtě pro podání nabídek, tj. do 19. 5. 2014 do 09 hodin, zadavatel neobdržel žádnou nabídku.

Zpracovala: Mgr. Petra Jungová

.....
prof. Mgr. Jaroslav Miller, M.A., Ph.D.
rektor UP v Olomouc