

### **UTEM DEPARTAMENTO DE ABASTECIMIENTOS DEPARTAMENTO DE ABASTECIMIENTOS**

Teléfonos Fax Casilla

### Rut 70.729.100-1

Señor(es)	VASP SOFTWARE GMBH
R.U.T	87-6
Dirección	SENSENGASSE 1090 WIEN AUSTRIA
Fono	+4314277-51402 Fax
Mail	licensing@vasp.at
Ciudad	DESCONOCIDA

Sirva(n)se Remitir a la Orden de la UTEM

**ORDEN DE COMPRA N° 352** 

CASA CENTRAL 13/05/2020

Nº Chilecompra

Pago 30 DIAS FECHA FACTURA

> Fecha Pago Monto % Días 30 4.571.800 100,00 12/06/2020

Fecha Conversión Moneda \$

Valor Conversión

Fecha de Entrega 13/05/2020

Lugar de Entrega

REF. 156262 ID3389 Observación

Nº	Producto	Unidad	Cantidad	Precio	Monto	Monto	Monto	Monto Total
		Medida			Descuento	Recargo	Impuesto	
1	SISTEMAS OPERATIVOS SOFTWARE	UNIDAD	1,00	4.571.800,00	0	0	0	4.571.800
	OBSERVACION: ADQUISICION DE SOFTWARE SOLICITADO POR LA SRA. ELI DIRECCION DE INVESTIGACIO	ZABETH TRONC	COSO A.					

**TOTAL FINAL** 4.571.800

### Solicitudes Asociadas

Año	Número	Sede	Tipo	Centro de Responsabilidad
2020	469	CASA CENTRAL	COMPRA	80100000-006 PY PAI77180024 MODELAMIENTO COMPUTACIONAL DE MATERIALES POLIMÉRICOS Y SE

### Distribución Presupuestaria

Centro de Responsabilidad	Concepto Presupuestario	Monto
80100000-006 PY PAI77180024 MODELAMIENTO COMPUTAC	12252.01ADQUISICIÓN DE PROGRAMAS O LICENCIAS	4.571.800
	Total	4.571.800

Mercadería puesta en:			FACTURAR EN 3 EJEMPLARE ORDEN DE COMPRA. CORRESPONDER A CALIDA ESTIPULADAS.	LA MERCADERIA DEBE
CONFECC. POR	JEFE ABASTEC.	DIRECTOR ADM.	VICERRECTOR ADM. Y FIN.	RECTOR



**Fecha**: 05/05/2020 **Página**: Pág. 1 de 1

### SOLICITUD DE COMPRA

N° Solicitud 469 Año Pptario 2020 Sede CASA CENTF Estado PROCESADA Tipo COMPRA

Fecha Recepción 05/05/2020 Creación 05/05/2020 Trámite Normal Tipo Compra CHILECOMPRA Nº Ext --

Centro Responsabilidad 80100000-006 PAI77180024 MODELAMIENTO COMPUTACIONAL DE MATERIALES POLIMÉRICOS Y SEMICONDUCTOR

Jefe de Centro

Responsable Solicitud ELIZABETH DEL CARMEN TRONCOSO AHUES
Cotizante ELIZABETH DEL ROSARIO PANES MORAGA

Moneda \$ Monto Conversión 1,00 Fecha Conversión 05/05/2020 N° Solicitud Centro 0

 % Descuento
 0,00
 \$ Descuento
 0
 % Recargo
 0,00
 \$ Recargo
 0,00

Observación UNIVERSITAT WEIN, VASP SOFTWARE GMBH

ID3389

€5.000 (VALOR 914.36)

(05.05.20)

Observación Autorización

Producto	Existe				Total Neto	Descuento	Recargo	Impues	sto	То	tal
		Medida		Unitario		Monto	Monto	Descripción	Monto\$		
SISTEMAS	OPER.	ATIVOS S	OFTWARE								
	SI	UNIDAD	1,00	4.571.800,00	4.571.800,00	0	0	0,00	0	4.571.800,00	4.571.800
Observación	SOL	ICITADO P			.4.4 RONCOSO A.						
									Total	4.571.800,00	4.571.800

### Distribución Solicitud

Centro de Responsabilidad	Concepto Presupuestario	Monto
80100000-006 PAI77180024 MODELAMIENTO COMPUTACIONAL DE MA	12252.01 ADQUISICIÓN DE PROGRAMAS O LICENCIAS	4.571.800
	Total	4.571.800

Jefe Centro de Responsabilidad



Fecha Emisión: 08/05/2020 Pag. 1 de 1

# COMPROBANTE COMPROMISO PRESUPUESTARIO

AÑO: 2020	PERÍODO:5	SEDE : CASA C	CASA CENTRAL	N°: 5352	FECHA:06/05/2020
Origen Cbte.:	Origen Cbte.: BIENES Y SUMINISTROS Operación	Operación : SOLICITUD DE COMPRA	Identificación:	Identificación: PROVEEDOR 887989796-6 VASP SOFTWARE GMBH	VASP SOFTWARE GMBH
Documento:	SOLICITUD DE COMPRA	N° Docto :469	Fecha Doct	Fecha Docto: 06/05/2020	
Glosa :	: Movimiento Presupuestario de Solicitud de Compra.	de Solicitud de Compra.			
Responsable :	Responsable : LABRA GONZALEZ HUGO ESTEBAN	BAN	Estado: Ca	Comprometido	

Centro Responsabilidad	Concepto Presupuestario	Tipo Dcto.	N° Dcto.	Fecha	Monto CP
80100000-006 PY PAI77180024 MODELAMIENTO COMPU	0100000-006 PY PAI77180024 MODELAMIENTO COMPU 12252.01 ADQUISICIÓN DE PROGRAMAS O LICENCIAS SOLICITUD DE COMPR	SOLICITUD DE COMPRA	469	06/05/2020	4.571.800

Totales: 4.571.800

and on ac ch

Nombre de reconocimiento (DN): c=CL, o=E-Sign S.A., ou=Terms of use at www.esign-la.com/ acuerdoterceros, cn=Hugo Esteban Labra González, email=hlabra@utem.d Fecha: 2020.05.11

# DISPONIBILIDAD PRESUPUESTARIA ANTICIPADA MERCADO PUBLICO

Nº 348

A : SR. HUGO LABRA GONZÁLEZ

JEFE UNIDAD CONTROL PRESUPUESTARIO

DE : MAURICIO CORTES ORDENES

JEFE DEPARTAMENTO DE ABASTECIMIENTO

MAT. : TRATO DIRECTO: ADQUISICIÓN SOFTWARE VASP V 5.4.4.

FECHA: SANTIAGO, DICIEMBRE 02 DE 2019.

De acuerdo a la petición del Centro de Costo en documento adjunto, solicito a usted, la aprobación presupuestaria anticipada, para efectuar la contratación de servicio indicado.

Centro de Costo

: PROYECTO PAI 77180024 CONICYT "MODELAMIENTO COMPUTACIONAL DE MATERIALES POLIMÉRICOS Y SEMICONDUCTORES TERCIARIOS PARA APLICACIONES EN SUSTENTABILIDAD Y ENERGÍAS RENOVABLES: FORTALECIMIENTO DEL PROGRAMA INSTITUCIONAL DE FOMENTO A LA I+D+i, UTEM.



SANTIAGO, (3 0 DIC. 2019

# RESOLUCION Nº 04090 EXENTA

VISTOS: lo dispuesto en la Ley № 19.239; en el D.S. № 130 de 2017 y en la letra d) del artículo 11 y 12 del D.F.L. № 2 de 1994, ambos del Ministerio de Educación; en la Ley № 19.886 y su Reglamento; el memorándum № 383, de fecha 18 de noviembre de 2019 de la Director de Investigación; y lo solicitado por el Jefe del Departamento de Abastecimiento, mediante memorando № 750 de fecha 26 de diciembre de 2019;

### **CONSIDERANDO:**

1.- Que el Reglamento de la Ley Nº 19.886, en su artículo 10, numeral 7º, letra E dispone, como circunstancia para proceder al Trato o Contratación Directa, el hecho de que el servicio que se intente contratar, sólo pueda prestarlo el proveedor que sea titular de los respectivos derechos de propiedad intelectual, industrial, licencias, patentes y otros;

- 2.- Que en el contexto de la ejecución de proyecto PAI77180024, del Programa de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación de la Universidad Tecnológica Metropolitana (PIDi), se requiere la realizar un acuerdo de licenciamiento que permita a la UTEM hacer uso del software VASP V.5.4.4., de propiedad de la Universidad de Viena (Universitat Wien).
- 3.- Que dicha licencia es fundamental para el desarrollo de las actividades de investigación desarrolladas por el mencionado proyecto, toda vez que de acuerdo a lo señalado por doña Katerine Paredes, investigadora encargada, el software permite realizar cálculos basados en la química cuántica de sistemas cristalinos (3D) y slabs, (2D), entre otros, usando bases extendidas, específicamente ondas planas. De esto modo, se diferencia de otros programas de química computacional para sólidos, como CRYSTAL, el cual usa bases tipo aprofundizar de esta manera las propiedades fisicoquímicas de diferentes materiales, como por ejemplo sólidos cristalinos.
- 4. Que de acuerdo a los antecedentes a la presente resolución, la Univesitat Wien es la institución titular de los derechos intelectuales sobre el software, por lo que es necesario su contratación vía directa con dicho proveedor.



### RESUELVO:

Autoricese la contratación de un acuerdo de licenciamiento para el uso del software VASP V.5.4.4., para el Programa de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Investigación de la Universidad Tecnológica Metropolitana, tal como figura en los detalles que se encuentran en los antecedentes acompañados al memorando individualizado precedentemente, al proveedor "UNIVERSITAT WIEN", por un valor de € 5.000- (cinco mil euros), exento de IVA, con cargo ai centro de costo proyacto PAI 77189024 CONICYT.

El memorando individualizado, junto a los documentos que le acompañan, entre los que se encuentran la cotización presentada por el adjudicatario y la disponibilidad presupuestaria anticipada Nº 348, se adjuntan a la presente resolución formando parte integrante de la misma.

Registrese y comuníquese

PATRICIO BASTÍAS ROMÁN

MINISTRO DE FE SECRETARIO GENERAL

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA METROPOLITANA

LUIS PUNTO FAVERIO RECTOR

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA METROPOLITANA

DISTRIBUCIÓN:

Secretaria General
Vicerrectoria Académica
Vicerrectoria de Administración y Finanzas
Vicerrectoria de Transferencia Tecnológica y Extensión

Vicerrectoria de Investigación y Postgrado
Dirección General de Análisis Institucional y Desarrollo Estratégico

Contraloría Interna

Dirección Jurídica Dirección de Finanzas

Dirección de Administración

Departamento de Abastecimiento

Programa de Fomento a la Investigación Desarrollo e Innovación

Unidad de Adquisiciones



### UNIVERSIDAD TECNOLOGICA METROPOLITANA DEPARTAMENTO DE ABASTECIMIENTO

### **MEMORANDUM N° 750**

SR PABLO CAÑON THOMAS

DIRECTOR JURÍDICO

DE

MAURICIO CORTÉS ORDENES

JEFE DEPARTAMENTO DE ABASTECIMIENTO

FECHA:

SANTIAGO, diciembre 26 de 2019

Sr. Director

Adjunto documentación, en referencia a solicitud de trato directo para la adquisición de 01 software VASP V.5.4.4., la que se encuentra en el marco de ejecución del Proyecto PAI77180024, del Programa Institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación de la Universidad Tecnológica Metropolitana

Especificamente, este software permite realizar cálculos basados en la química cuántica de Sistemas cristalinos (3D) y slabs, (2D) entre otros, usando bases extendidas, especificamente ondas planas, a través de uso de herramientas metodológicas de la química computacional implementadas en el Programa VASP

UNIVERSITAT WIEN
RUT. Proveedor Extranjero
e-mail. licensing@vasp.at
€.5 000 (\$4.162.750.- IVA Incluido)
Art 10 N°7 LETRA K

Saluda atentamente.

OLUGIC

JETE DEPTO ABASTECIMIENTO

☆

MAURICO CORTES ORDENES

3 0 DIC 2019

Adj. Antecedentes MCO/MOC/epm c.c.Archivo



UNIVERSIDAD TECHOLÓGICA TO DECLARA O DIRECCION DUR DOCA NO PROCESO DE SALIDA DE CONTROLOGICA D

Calle Dieciocho N° 161, 2° Piso, Santiago Centro Anexos Mesa de Ayuda: 7715 6 7759



UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA METROPOLITANA DEPARTAMENTO DE ABASTECIMIENTO UNIDAD DE ADQUISICIONES

### **TERMINOS DE REFERENCIAS GENERALES**

### REQUERIMIENTOS DE COMPRA DE BIENES Y/O CONTRATACIÓN DE SERVICIOS

La Universidad Tecnológica Metropolitana, en el marco de la ejecución del Proyecto PAI 77180024, CONICYT, de la Investigadora Responsable Katerine Paredes Gil, necesita adquirir el "Software VASP" de acuerdo a las especificaciones indicadas a continuación.

### ESPECIFICACIONES:

Vasp 5.4.4 Licencia académica.

### **DISPONIBILIDAD PARA PAGO**

€ 5000 (\$ 4.120.000 aprox.)

### MODALIDAD DEL PAGO

Debe realizarse por transferencia bancaria a:

Titular de la Cuenta: VASP Software Gmbh UnitCredit Namk Austria AG Bnaco.

UnitCredit Bank Austria Ag, Stephansplatz 7ª, 1010 Wien, Austria AT41 1200 0100 2505 6911 Assdress:

IBAN:

BIC (SWIFT): **BKAUATWW** 

Se debe especificar el número de pedido en el motivo de la transferencia (1757).

Se pagará posterior a la emisión de la factura, la cual deberá contar con el VºBº y timbre del responsable

del centro de costos

La Universidad realizará el pago vía transferencia bancaria internacional a la cuenta del proveedor.

### MODALIDAD DE LA COMPRA O SERVICIO

La Universidad emitirá al proveedor adjudicado la respectiva Orden de Compra una vez tramitada la Resolución de adjudicación por trato directo.

### DESPACHO DE BIENES Y CONDICIONES DE EMBALAJE

El software corresponde a un intangible descargable desde el servidor del proveedor, el cual proporcionara un usuario y clave una vez recibidos los pagos correspondientes.

MOTIVO DE LA CONTRATACIÓN
El "software VASP" debe ser adquirido para la ejecución del proyecto PAI 77180024 relacionado con el modelamiento computacional de Materiales. Especificamente, este software permite realizar calculos de química cuantica de sistemas cristalinos (3D) y slabs, (2D), entre otros, usando bases extendidas, específicamente ondas planas, siendo, el único en su área. Por lo tanto, los desarrolladores presentan exclusividad. Su unica forma de adqusición es a través de www.vasp.at (licensing@vasp.at), asociado a los autores, los cuales pertenecen a la Universidad de Viena en Austria.

### VALIDEZ DE LAS COTIZACIONES

90 días corridos

Katerine Paredes Gil

Profesora asistente e Investigadora Media Jornada. Departamento de Química

Programa institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación Universidad Tecnológica Metropolitana

Santiago, 11 de Noviembre de 2019



### INFORME PARA PROCEDIMIENTO REGULADO EN LA RESOLUCIÓN Nº03713/2014 LEY DE TRANSPARENCIA

Según lo dispuesto en el artículo 4º de la resolución exenta № 03713 de 2014, que aprueba el Procedimiento de Compra de Bienes y/o Contratación de Servicios de conformidad a lo establecido en el artículo 10 Numeral 7, letra "K" del Reglamento de la Ley de Compras Públicas, para la Universidad Tecnológica Metropolitana, Doña Elizabeth Troncoso Ahués, Directora de Investigación, por medio del presente informe comunica al Jefe del Departamento da Abastecimiento, que en el marco de la ejecución proyecto PAI 77180024 de Conicyt adjudicado por la UTEM, denominado "Modelamiento Computacional de Materiales Poliméricos y Semiconductores terciarios para Aplicaciones en Sustentabilidad y Energías Renovables: Fortalecimiento del Programa institucional de Fomento a la I+D+I, UTEM", del cual es responsable el Investigador Katerine Paredes Gil, declara que para la presente contratación concurren circunstancias en que la utilización del procedimiento de licitación pública podría poner en riesgo el objeto y la eficacia del proyecto de que se trata.

Las circunstancias que concurren en esta contratación corresponden a las mencionadas en el artículo 3º de la resolución Nº 03713/2014, en el/los numeral/es que a continuación se indican:

- Cuando por la naturaleza de la adquisición se requiera efectuar una compra inmediata, atendida la eficacia y objeto de ella o de la contratación del servicio, dados los plazos involucrados en el proyecto.
- Precios preferenciales ofrecidos por un proveedor, considerando las particularidades de un proyecto.
- Especialización ofrecida por un determinado proveedor en compra de bienes o contratación de servicios específicos y selectos.
- Adquisición de bienes o contratación de servicios ofrecidos en el extranjero, que se realicen por importación directa del proveedor o mediante convenios con entidades extranjeras.
- Adquisiciones de alimentos perecibles en actividades docentes, de investigación, o extensión en terreno.
- Arrendamiento de animales o maquinaria agricola o forestal en lugares apartados, fronterizos o de dificil acceso.
- Adquisición de bienes o contratación de servicios para la ejecución de proyectos cuyos resultados generan certificaciones y/o acreditaciones de productos con estándares predefinidos, a fin de asegurar la mantención de los niveles de calidad acreditada.
- Contratación de servicios o adquisición de bienes que por su complejidad técnica, su especificidad o por sus estándares de calidad y seguridad, hagan ineficiente el mecanismo de la licitación pública.
- Adquisición de bienes que deben ser compatibles con otros que hayan sido o estén siendo utilizados en el respectivo proceso, atendida la metodología y resultados del mismo.
- 10. Adquisición de bienes o contratación de servicios relacionados con creaciones artísticas que requieren insumos muy específicos o la contratación de servicios personalísimos que se encuentran avalados por la experticia del artífice, para la ejecución de obras artísticas.
- 11. Razones ajenas a la voluntad de los encargados del proyecto que obligue a efectuar gastos en forma anticipada o no contemplada en el cronograma del mismo, y que por tal circunstancia se debe anticipar o incurrir en gastos extras.
- En general cualquier otra circunstancia de carácter grave, excepcional y extraordinaria, en que la utilización del procedimiento de licitación pública pueda poner en riesgo el objeto y la eficacia del provecto.

Dichas circunstancias tienen lugar en la presente contratación, en virtud de los siguientes fundamentos:

- 1 Cuando por la naturaleza de la adquisición se requiera efectuar una compra inmediata, atendida la eficacia y objeto de ella o de la contratación del servicio, dados los plazos involucrados en el proyecto.
- Especialización ofrecida por un determinado proveedor en compra de bienes o contratación de servicios específicos y selectos.
- Adquisición de bienes o contratación de servicios ofrecidos en el extranjero, que se realicen por importación directa del proveedor o mediante convenios con entidades extranjeras.
- Adquisición de bienes o contratación de servicios para la ejecución de proyectos cuyos resultados generan certificaciones y/o acreditaciones de productos con estándares predefinidos, a fin de asegurar la mantención de los niveles de calidad acreditada.

En relación a lo anterior, la adquisición del software VASP es necesaria para la ejecución del proyecto "Modelamiento Computacional de Materiales Poliméricos y Semiconductores terciarios para Aplicaciones en Sustentabilidad y Energías Renovables: Fortalecimiento del Programa institucional de Fomento a la I+D+I, UTEM", ya que este proyecto se enmarca en el cálculo de propiedades fisicoquímicas de materiales 2D y 3D a través del uso de herramientas metodológicas de la Química Computacional implementadas en el programa VASP. Por lo tanto, para la ejecución y entrega de resultados del proyecto es necesario realizar la compra durante el primer año de ejecución de éste, de manera inmediata, y atendido con eficacia. (Fundamento 1)

Especificamente, este software permite realizar cálculos basados en la química cuántica de sistemas cristalinos (3D) y slabs, (2D), entre otros, usando bases extendidas, especificamente ondas planas. De este modo, se diferencia de otros programas de química computacional para solidos, como CRYSTAL, el cual usa bases tipo gausianas. Ambos programas a su vez, pueden llegar a ser complementarios y son necesarios para estudiar con profundidad, este tipo de materiales. Por lo tanto, no existe otro software en el mercado que permita profundizar de esta manera las propiedades fisicoquímicas de diferentes materiales, como por ejemplo los sólidos cristalinos. Es por esto, que la licencia académica del software VASP es solamente distribuida por VASP software GmbH, siendo esta empresa proveedores únicos de este programa. (Fundamento 3 y 4)

Es importante mencionar, que la compra de este software será realizada através del proyecto PAI77180024, la cual fue predefinida en la postulación del proyecto, y este no puede ser cambiado. Finalmente, los resultados generarados con este software permitiran incrementar la capacidad científica para la Universidad. (Fundamento 7)

Por lo antes señalado, se solicita la compra o contratación del siguiente bien o servicio, en base a las especificaciones que se anexan al presente informe:

Cotización : Quote\_UTEM

Certificado de Impuesto: Tax\_Certificate\_UTEM

Acuerdo de Licencia : Vasp\_License

Se acompañan como antecedentes del presente informe los siguientes documentos:

1. Cotización

2. Acuerdo oficial de la Licencia Académica.

Katerine Paredes Gli
Profesora asistente e Investigadora Media Jornada.

Departamento de Química Programa Institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación Universidad Tecnológica Metropolitana

### JUSTIFICACIÓN TÉCNICA

Se solicita la compra de un "Software VASP", de acuerdo a lo descrito a continuación:

a) Especificaciones Técnicas de la Compra o Contratación: Software VASP. Licencia académica.

### b) Justificación de la Solicitud:

El "Software VASP" debe ser adquirido para la ejecución del proyecto PAI77180024 denominado "Modelamiento Computacional de Materiales Poliméricos y Semiconductores terciarios para Aplicaciones en Sustentabilidad y Energías Renovables: Fortalecimiento del Programa institucional de Fomento a la I+D+I, UTEM". Este busca entender y predecir las propiedades fisicoquímicas de diveros materiales usando la química computacional. Específicamente, este software permite realizar cálculos basados en la química cuántica de sistemas cristalinos (3D) y slabs, (2D), entre otros, usando bases extendidas, especificamente ondas planas. De este modo, se diferencia de otros programas de química computacional para solidos, como CRYSTAL, el cual usa bases gaussianas para el calculo de propiedades. Ambos programas a su vez, pueden llegar a ser complementarios y son necesarios para estudiar con profundidad, este tipo de materiales.

### c) Solicitud Adquisición:

Se desea adquirir el software: VASP software. Licencia académica.

Valor: € 5.000 (\$ 4.120.000 aprox).

Proveedor: Universität Wien, VASP Software GmbH Condiciones de Pago: Transferencia bancaria internacional. Financiamiento: Proyecto PAI77180024 - CONICYT.

### d) Criterios de selección:

El criterio de selección se relaciona con el hecho de que el software VASP presenta exclusividad tanto en su desarrollo, como en su venta y distribución.

**VASP Software GmbH** Sensengasse 8 1090 Wien, AUSTRIA Tel: +43 1 4277-51402



VASP Software GmbH Dr. Doris Vogtenhuber Tel: +43 1 4277-51402 E-Mail: licensing@vasp.at

Dra. Katherine Paredes Gil Chemistry Department Universidad Tecnológica Metropolitana Ignacio Valdivieso #2409 San Joaqin, Santiago Chile

Vienna

2019-10-29

Quotation for VASP Quotation Nr. 19-0348

Dear Dra, Katherine Paredes Gil

Please find below, our quotation for a permanent license for the use of the VASP software by academic institutions for 6 users.

Item	Description	Qty.	Unit Price in Euro
1	Permanent license for the use of the VASP software by academic institutions for 6 users Free upgrade to VASP.6 upon release of VASP.6 Free updates for 3 years	1	5.000,00
	Sum net of any taxes (net license fee)		5.000,00

### Please note:

- The offer is valid under the conditions that the sale is regarded as a business to business electronic service sale and the customer is qualified as a taxable person. We ask you to provide us with the signed and thereby confirmed Tax Certificate. The net price applies on the condition that the service recipient will be liable to file and pay all taxes due in Chile to the tax subtodition is a Chile to the tax
- authorities of Chile.

  The licensee is legally responsible for the correctness of the data given on the Tax Certificate. Any recourse claims of the Austrian Tax Authorities will be forwarded to the licensee directly. This offer is valid subject to signature of the accompanying "Tax Certificate" and transfer of the withholding tax in Chile of 0% (0.- Euro) to the local tax authorities of the licensee. Payment to the VASP Software GmbH will be the fee net of any taxes.
- Access to the code and to the PP-data-base shall be made available through an electronic
- download portal only.

  Download will become possible only after signature of the license agreement and transfer of the license fee in full and payment of the withholding tax. If paid by bank transfer, the invoice number must be quoted in the transfer.
- Bank fees need to be covered in full by the licensee, payment by credit card is not accepted.

This offer is valid until January 29th, 2020.

With best regards,

### Vasp Software GmbH

Prof. Dr. Georg Kresse

I accept the quotation (name and signature of authorized agent):

Bank Account - IBAN AT41 12000 10025056911 Handelsgericht Wien - Firmenbuch FN 498953f- UID ATU73748956 E-Mail: licensing@vasp.at - URL www.vasp.at

# Steuerbescheinigung / Tax Certificate des Schuldners der Vergütung für den Gläubiger of the debtor of the remuneration to the creditor

esetzesstelle betrettend Qualtensteuer if applicable tax act concerning withholding tax)	nach-
article No. 59 of Decree Law No. 824 of Income Tax Law	
ranzami	
s Office. Servicio de impuestos Internos (SII)	
etails des Schuldners der Quellensteuer ( <u>Zahlungsveroflichteter der l</u> stalls of the Dettor ( <u>Paver of Upansa Fee</u> )	Izenzen)
Bitle kreuzen Sie zutrettendes Feld an	
Please ack the approache box	1
Natürliche Person Körperschaft Anderer Rechtsträger Individual Corporation Other entity	
Name: Universidad Tecnologica Metropolitana Name.	
Anschrift: Ignacio Valdivieso #2409, San Joaqin, Sant	iago
Staat:	
Stale. Chile	
Steuernummer des Schuldners Taxpayer identification number of the debitor Rut 70729100-1	
Körperschaft Corporation Name:	VASP Software Gritch
Corporation Name:	VASP Software GrifbH Sentengasso 8, 1090 Vienna
Corporation Name: Name Anschrift:	Nec (DOS ROMBETTS
Corporation Name: Name: Anschrift: Ad ess. Staat:	Sensengasso 5, 1090 Vienna
Corporation Name: Name: Anschrift: Acress. Staat: State: UID-Nummer des Gläubigers. Tanpayer VAT number of the creditor int der Tätigkest / Zahlungsgrund:	Semiengasse 8, 1090 Vienna Austra
Corporation Name: Name: Anschrift: Acress. Staat: State: UID-Nummer des Gläubigers.	Semtengarso 8, 1090 Vvenna Austra: ATL73748956 Licerso Fee  ") Zahlungsbestätigung in der Anlage
Corporation  Name: Name: Anschriff: Adress. Staat: State: UID-Nummer des Gläubigers. Taxpayer VAT number of the creditor  uit der Tätigkest / Zählungsgrund: ype of activity / reason for payment:	Semiengasse 8, 1090 Vienna Austre A1L73748956
Corporation  Name: Name  Anschriff: Act ess. Staat: Slate: UID-Nummer des Gläubigers. Taxpayer VAT number of the creditor int der Tätigkest / Zahlungsgrund: ype of activity / reason for payment:	Semtengarso 8, 1090 Vvenna Austra: ATL73748956 Licerso Fee  ") Zahlungsbestätigung in der Anlage

Lattern that the information I have provided in this certificate is accurate to the best of my knowledge and basef and that I have not issued any off tax certificate for the remainerations as stated above.

Ort / place Datum / date Uniterachrit (in Blockbuchstaben), Firmenstampel Signature or seal (in printed letters), company stamp

	VASP Software GmbH ("VG" in the following) and the
ineral.	unded Teconingues Metropolitaes
	\$ 1.00 cases of the contract o
(L)	censee" in the following) conclude the following Agreement.
1.	Grant of license, scope of license
11	Subject to the terms and conditions of this Agreement, the Licensee acquires a non-exclusive perpetual academic or non-profit license for the use of the software-package VASP (Vienna abinitio aimulation package) for ab-initio total-energy and molecular-dynamics calculations, version VASP 5.4.4, with a free upgrade to VASP.6.1 when available, for the research group: Computational Chemistry applied to Material Science and Catalysis. Department: Programs Instancional de Fomento a la 1-12-4 (PIDs)
12.	Under this license the use of the software is restricted to a maximum of 6 (sax) named users tresearchers or students), all belonging to this research group and to the same organizational unit and working at the same location. The license does not cover the use of VASP by collaborators working in other research groups, organizational units or institutions.
13	The incense covers access to the VASP software. The VASP software includes the source-code, the program documentation, and the data-base for pseudopotentials and PAW-potentials (in the following PP-data-base), as well as any VASP executables obtained by download or by compiling

2. Transfer prohibited, no access to third parties

specified in this Agreement.

2.1 The license is not transferable to any other research group of the ficensee or a third party without the prior written consent of VG. VG reserves the right to refuse authorization of such a transfer

the source code. VG shall retain all right, title, copyright and other proprietary and intellectual property rights to the VASP software. Licensee does not acquire any rights other than those

- 2.2 Licensee may not rent out, lease, self or subheense the VASP software or any part thereof. The Licenses guarantees that the VASP software or paris thereof shall not be made accessible to third parties without the explicit written consent of VG.
- 2.3 All installations of the VASP software must be accessible only to the authorized named users. Installation of VASP software on the cloud is only allowed, if the cloud provider guarantees full protection of the VASP software against access by unauthorized users, and if the terms of the cloud provider do not infringe any of the rights set out in this Agreement.
- 3. Delivery of the source-code and PP-data-base
- 3.1 Access to the code and to the PP-data-base shall be made available through a download account of the VG after the beence fee has been paid in full to VG

Please insert here the name of the institution concluding this agreement with the VG. This institution must be a legal person and the agreement must be signed by an authorized representative. Please insert here the name and affiliation of the research group for which the hoense is acquired.

3.2 The Lucensee guarantees that the password for this account will be known only to one primary contact-person and shall not be communicated to anyone else. The Licensee will be hable for any losses incurred by VG caused by the violation of this clause.

### 4. Administration of users, electronic database

- 4.1 VG will store the names, addresses, and email addresses of the Licensee, research group leader, primary contact person and of the named users, who are authorized to use the VASP software, electronically in a database. For that purpose the names and email addresses of the users must be communicated by the research group to VG. The primary contact person can delete and add new users, as long as the licensed number of users is not exceeded.
- 4.2 Postings on the user forum or access to precompiled VASP executables on high performance computer centres are restricted to registered named users only. VG can use the database to communicate updates, bug fixes, and VASP related events to the research group leader and printing contact-person. Upon request, the name of the signatories and printing contact-person will be removed from the database. In this case it will no longer be possible to access the download account of VG and the Licensee will not receive access to any further updates and new releases of VASP 6.X. The Licensee can continue to use already downloaded copies of the software as long as the contract is not infringed.

### Benchmarks

- 5.1 If the Licensee uses the VASP software for benchmarking, numbers must be kept confidential and the results of the benchmark tests must not be published or communicated to third parties without written permission of the VG.
- 5.2 After prior written permission of the VG, benchmarks may be also performed by external staff or companies, if the Licensee can ensure that access to the code is for a hunted period and hinned to persons involved in the benchmarking. The Licensee must also ensure that the external staff or company will remove all their copies of the VASP software after benchmarking.

### 6. Madifications, add-ons

If the VASP software is modified in any way, for instance if new routines are added or existing routines or algorithms are modified the Licensee agrees to make these modifications available to VG. VG. receives a non-exclusive, perpetual license to use these software-developments, including the right to include them in future releases of VASP, modify, distribute and sublicense these modifications or transfer this non-exclusive becase to any other entity. If VG does not mend to include the modifications in future versions of VASP, VG may give an explicit written consent to the Licensee to distribute the modifications as add-ons. Add-ons are modifications or additions to the functionality of VASP that are executed by the main code and use part of the VASP source code. The add-ons must be distributed under an appropriate license not infringing the rights laid out in this Agreement. Distribution of the add-ons under a copyleft license (c.g. GPL) is explicitly forbidden.

### 7. Copyright notice

In future publications of work performed using VASP, the use of the software shall be properly acknowledged, e.g. in the form

"The calculations have been performed using the Vienna ab-initio simulation package VASP X.x  $\{1,2\}$ "

[1] G. Kresse and J Furthmuller, Phys. Rev. B 54, 11 169 (1996).

if the PAW potennais are used, reference shall be made to

121 G Kresse and D Joubert, Phys Rev B 59, 1758 (1999).

if special features implemented in VASP have been used, relevant publications as listed in the VASP documentation shall be ented

### N. License fee, payment terms

- 8.1 The Licensee accepts to pay to VG a license fee of Furo 5000 (five thousand) promptly after the signature of this Agreement. Any local taxes, sales taxes, value added taxes (of applicable), import fees, bank charges need to be covered by the Liceasee and are not included in this fee.
- 8.2. This license fee is strongly discounted and applies only to academic institutions with undergraduate teaching or non-profit research institutions. The Licensee may use VASP exclusively for non-profit research. If Licensee wishes to use VASP in contractual research in cooperation with or for industry or military institutions, the conditions will have to be renegotiated.
- x > in the event of default in payment, VG shall be entitled to charge default interest in the amount of 8% per annum. In addition, the Liceasce must reimburse all dunning and collection expenses and legal fees incurred and necessary for the appropriate legal prosecution.

### 9. Termination

- 9.1. The license may be terminated by VG with immediate effect for good cause, if the Licensee fails to comply with any material provision of this Agreement, in particular, if the Licensee infringes VG's copyrights or if the license fee is not paid in full despite a reminder and explination of a reasonable grace period.
- 9.2 In case of termination, the Licensor must delete all copies of the software that are in his possession of control and has no claim to reimbursement of payments made. All provisions of this Agreement relating to disclaimers of warranties, limitation of liability and all of VG's proprietary rights shall survive (ermination.

### 10. Maintenance, support

The becase does not cover any mustienance service for the software or support, although complimentary updates to new releases of VASP.6.X will be made available without additional charge for 3 years after the date of the signature of this Agreement

### 11. Representations and warranties

- 11.1 The VASP software including the source code is provided "as is" and VG makes no representations and warranties, express or implied, with respect to the software. In particular, VG does not represent and warrant that the software will meet the Licensee's requirements and that the operation of the software will be ununterrupted or completely error free.
- 11.2 VG shall have no warranty obligations become with respect to any error attributable to the use of the software in an environment for which it was not designed, or attributable to modifications of the software by Licensee.

### 12. Liability

To the maximum extent permitted by applicable law, in no event shall VG be liable for any direct, indurect, incidental, consequential, special, paintive or other damages whatsoever, in connection with or arising out of the use, misuse or mability to use the software, including, without limitation, damages for loss of business revenue, profits, use, data or other economic advantage, however such damages arise, whether for breach of contract or in tori, even if VG has been advised of the possibility of such damages. In no event shall VG's hability to Licensee bereunder, whether in contract, tort (including negligence) or otherwise, exceed the hoense fee actually paid by Licensee for the software.

### 13. Indemnification

Subject to the limitations provided for in clause 12 (hability), VG will defend and indemnify become against a claim that the VASP software infringes upon any intellectual property right of a first party provided that, (a) Licensee nouties VG in writing within 14 days of the claim, (b) VG has sole control of the defence and all related settlement negotiations; and (c) Licensee provides VG with the assistance, information and authority necessary to perform VG's obligations under this clause. VG shall have no liability for any claim of infringement based on the combination, operation or use of the VASP software licensed under this Agreement with other software, hardware or other materials not furnished by VG, if such infringement would have been avoided by the use of the VASP software without such software, hardware or other materials. In the event the VASP software is legally held or is believed by VG to infringe, VG shall laive the option, at its expense and at its sole discretion, to alternatively. (a) modify the VASP software to be non-infringing or (b) obtain for Licensee a license to continue using the VASP software. Am further claims of Licensee shall be excluded.

### 14. Final Provisions

- 14.1 The terms of this Agreement shall prevail over any terms or conditions of the Licensee.
- 14.2 This Agreement shall be governed by and construed in accordance with Austrian law without reference to its conflict of law rules. The application of the United Nations Convention on Contracts for the International Sale of Goods is hereby expressly excluded.
- 14.5 Any disputes arising out of or in connection with the present Agreement, including disputes relating to its validity, breach, termination or outlity, shall be submitted to the International Court of Arbitration of the International Chamber of Commerce and shall be finally settled under the Rules of Arbitration of the International Chamber of Commerce by one arbitrator appointed in

accordance with the said Rules. The arburation shall take place in Vienna. The language of the arburation shall be English

34.4 If any provision of this Agreement shall be declared invalid, void, or anenforceable, the validity and binding effect of any remaining portion will not be affected, and the remaining portions of this Agreement will remain in full force and effect as if this Agreement had been executed with said provision eliminated. The invalid provision shall be replaced by a provision which comes as close as possible to the will of the parties within the framework of what is legally possible and which best corresponds in its economic effect to the invalid provision.

For the VASP Software GmbH

Georg Kresse Sensengasse 8, A-1090 Wien, Austr	ia
Signature and Date:	
For the Licensee	Satalia Hersan Luper, Coordanier PIDs
Name and capacity in which acting.	Universadad Tecnologica Metropolitana. Programa Institucional de Fomento s la IsDai (PITRI)
Institution.	Ignacio Valdeviese 2409, Sastiago Chile
Address of Institution	
Signature and Date	Lilly
herewith confirm that they have rea	rimary-contact-person responsible for the unsuffation of VASP of the contract in full. They understand that under this beense med users and that the possword to the VG download account whatsoever reason
For the research group entitled to us	c VASP  Computational Chemistry applied to Material Science and Catalysis. Experiment Programs Institutional de Formento a In-Des (PIFA)
Research group	Ignacos Valdavieno 2409
Address of Research group:	
Name.	Drs. Karherine flancius Git
Signature and Date.	okatomctoredes GI Nov 4-2019

Primury-contact-person responsible for the installation of VASP at the insulation (leave blank, if the primury contact-person and the signatory for the research group are identical)									
Name			٠,		••	******	,	,	
Signature and Date	****			<i>,,</i> .	٠.,	••			
The second secon		Not all our life of transmission	***************************************		(7000 1 10				



### Memorandum N°6 / 2019

A: Elizabeth Troncoso ahués

Directora de Investigación

De: Katerine Paredes Gil

Investigador Media Jornada Programa Institucional de Fomento a la I+D+i

Referencia: Solicitud de compra software VASP proyecto PAI77180024

Fecha: Noviembre 11 de 2019

Estimada Directora,

Cordial Saludo,

El presente Memorándum tiene como objetivo solicitar la compra del software de química computacional VASP a través de la metodología de Trato Director.

La compra está relacionada con el ítem de Gastos de Operación, para el desarrollo del proyecto PAI77180024 del 2019.

Estas compras se realizarán a través del centro de costos 80100000-006. Cuenta corriente 975428802 del Banco Scotiabak.

Sin otro particular y esperando una respuesta positiva, se despide:

Katerine Paredes Gil

Profesora asistente e investigadora Media Jornada. Departamento de Química

Programa Institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación
Universidad Tecnológica Metropolitana



### **MEMORANDUM N° 383 / 2019**

A: SR. JOSÉ CORTES ORDENES

JEFE DEPARTAMENTO DE ABASTECIMIENTO

DE: SRA. ELIZABETH TRONCOSO AHUÉS

DIRECTORA DE INVESTIGACIÓN

REFERENCIA: ADQUISICIÓN SOFTWARE CRYSTAL, PROYECTO PAI77180024

FECHA: SANTIAGO, 18 DE NOVIEMBRE DE 2019.

Estimado Sr. Cortés:

Junto con saludarle, solicito a usted gestionar la contratación a través de Trato Directo del siguiente servicio:

Cantidad Producto		Producto	Proveedor	Monto	
١	1	Software VASP V.5.4.4	VASP Software GmbH	€ 5.000,00	

La solicitud se encuentra en el marco de ejecución del proyecto PAI77180024 (Directora Responsable Sra. Katerine Paredes Gil), cuyo Centro de Costos es 80100000-006, Cta. Corriente N°97548802, Banco Scotiabank. Por lo anterior, los gastos deben ser imputados a dicho Centro de Responsabilidad.

Finalmente informo a usted que se adjuntan como antecedentes los siguientes documentos:

- Memo N°6 Investigadora Responsable Proyecto PAI77180024 Katerine Paredes Gil
- Formulario Letra K
- Términos de Referencia
- Justificación Técnica
- Cotización VASP Software GmbH
- Certificado de Impuestos
- Acuerdo de adquisición entre UTEM y VASP Software GmbH

Agradeciendo su atención y gestión, le saluda muy atentamente,

Dra. Elizabeth Troncogo Mués
Directora de Investigación VRIP
Vicerrectoría de Investigación (Postgado

OGIC

Universidad Tecnológica Metropolitaria

ETA/fuw