



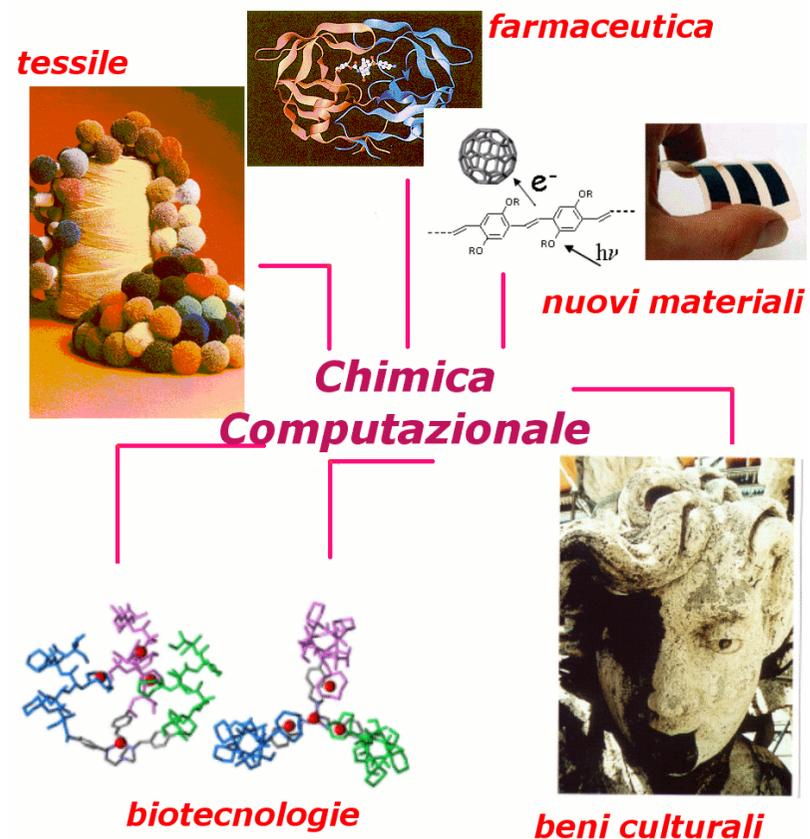
Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Dipartimento di Scienze Chimiche
Università degli Studi di Padova

Antonino Polimeno

Chimica Computazionale

- Materiali funzionalizzati
- Biotecnologie
- Chimica farmaceutica
- Tessile
- Beni culturali
- Microfluidica
- Nanomedicina
- Chemiometria
- Chimica verde

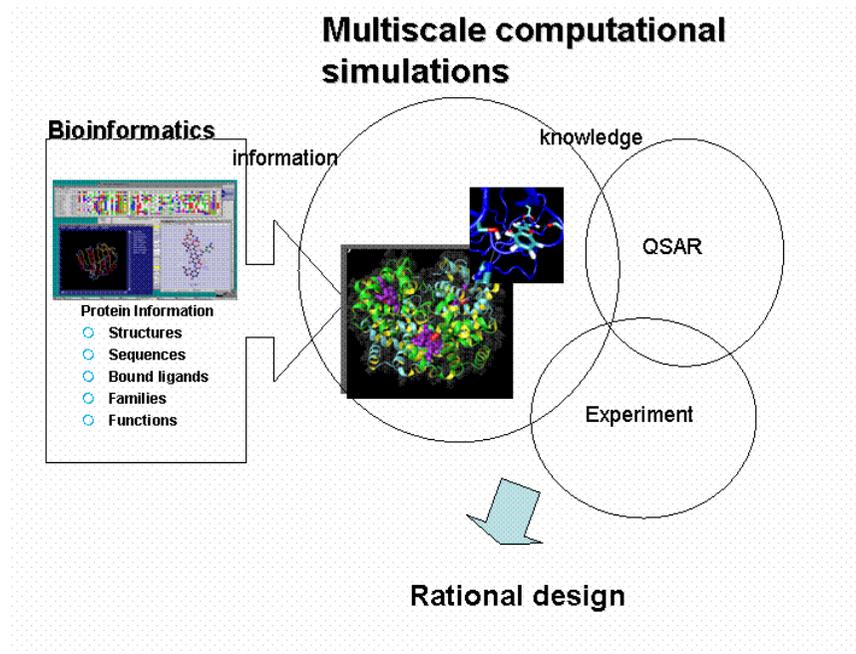


Aree di competenza / 1

- **Metodi ab initio multiscala** (teoria del funzionale della densità)
- **Metodi misti** meccanica molecolare + meccanica quantistica
- **Funzioni localizzate** (PBC e NPBC)
- Simulazioni **Monte Carlo** e **dinamica molecolare**
- **Modelli continui** per lo studio di effetti di campo medio dell'intorno
- **Modelli di materiali** funzionalizzati, superfici solide ed interfacce
- **Approcci stocastici** per lo studio di processi cinetici
- **Simulazioni coarse-grained** per nano e microscala
- **Approcci statistici** per integrazione e razionalizzazione di dati (QSAR)
- **Calcolo di proprietà** ottiche, elettroniche di sistemi isolati e periodici

Are di competenzaa / 2

- Sviluppo di tecnologie di grid computing in ambito chimico
- Metodi 'misti' QM/MM, coarse-grained
- Nuove metodologie per il calcolo multiscala





Risorse / 1

Hardware

- **Cluster- α** (20 nodi / 39 cpu) - **Arrhenius**: 5 nodi AMD Opteron Processor 246, 2Ghz, 2 cpu, 4GB ram HD SATA 80GB; 6 nodi Intel Xeon CPU 2.00GHz, 2 cpu, 1GB ram HD SCSI 18GB; 8 nodes Intel Pentium III CPU family 1.2MHz, 2 cpu, 1GB ram HD SCSI 18GB; 6 nodi Intel Xeon CPU 2.4GHz, 2 cpu, 1GB ram HD SCSI 36GB; 1 nodo AMD Opteron Processor 852, 2.4 GHz, 4 cpu, 8Gb ram HD SCSI 140GB; Infiniband; OS Linux Red Hat
- **Cluster- β** (71 nodi / 284 cpu) - **Avogadro**: 71 nodi (blade) Intel Woodcrest Dual Core, 4 cpu, 2.6 GHz, 2 HD SAS da 72 Gb; Infiniband; OS Linux Red Hat

Software

- **SO base**: Linux RedHat 3.0
- **Compilers** (64bit): Intel C++ Compiler per Linux, Intel Fortran Compiler per Linux, Portland Fortran; gnu cc
- **Libraries**: LAPACK, ScaLAPACK, BLAS, CBLAS, CLAPACK, ATLAS, GNU Library, FFTW, //Ellpack, PETSc
- **Software QM, MD**
- I cluster sono situati al pianterreno del DiSC, in un'area apposita (60 m², termostatazione, gruppi di continuit  2 \times 40 KWH + 20 KWH).



Risorse / 2

- **Area:** chimica teorica e computazionale / modeling di materiali / biosistemi
- **Persone:** Antonino Polimeno, Maurizio Casarin, Alessandro Bagno, Andrea Vittadini, Giacomo Saielli, Stefano Moro, Giorgio Moro, Diego Frezzato, Alberta Ferrarini
- **Sede:** Dipartimento di Scienze Chimiche, Via Marzolo 1, 35131 Padova
- **Web:** <http://www.chimica.unipd.it/licc>

Prospettive e *desiderata* / 1

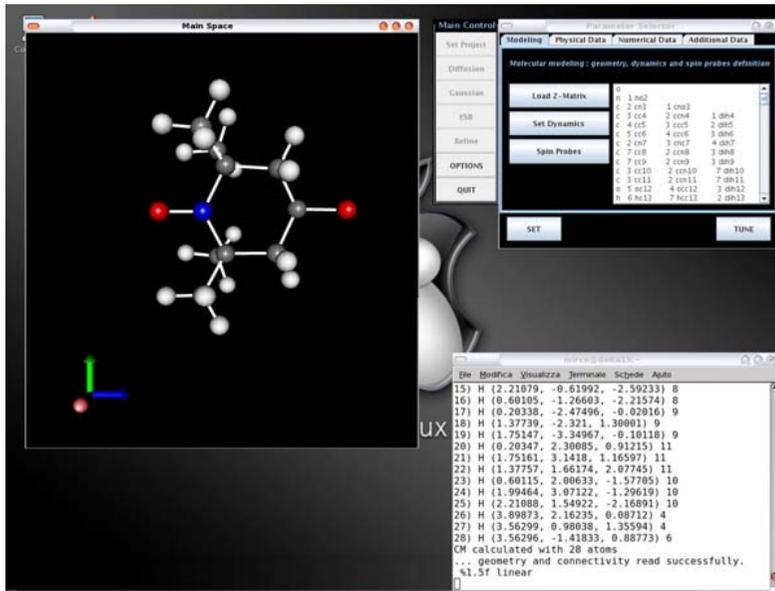
- Iniziative campus-grid
- Condivisione di competenze gestionali
- Ingegnerizzazione software
- Sviluppo ed ottimizzazione di codici di calcolo per nuove piattaforme computazionali
- Partecipazione ad iniziative nazionali per la costituzione di network dedicati al calcolo chimico e per le scienze dei materiali
 - Il LICC è uno dei nodi del **Virtual Italian Laboratory for Large-scale Applications in a Geographically distributed Environment (VILLAGE) - INSTM**
 - Il LICC partecipa a vari progetti di ricerca in ambito chimico (e.g. INSTM-CNR PROMO)





Prospettive e *desiderata* / 2

- Un laboratorio dedicato permette:
 1. un più **agile impiego di risorse** per problemi di medie dimensioni, rispetto alla difficoltà di gestione in remoto delle risorse, più estese ma condivise, di un centro di calcolo
 2. la possibilità di avviare **esperienze formative** in loco per studenti, dottorandi e ricercatori, e quindi di costituire pool locali di esperti in chimica computazionale
 3. la possibilità di un **impiego razionale di risorse** di calcolo altrimenti disperse, mediante soluzioni basate sui sistemi grid
 4. l'avvio di **esperienze di integrazione** di competenze e risorse con altre componenti presenti in Ateneo



Main Control

Modeling Physical Data Numerical Data Additional Data

Molecular modeling : geometry, dynamics and spin probes definition

Load Z-Matrix

Set Dynamics

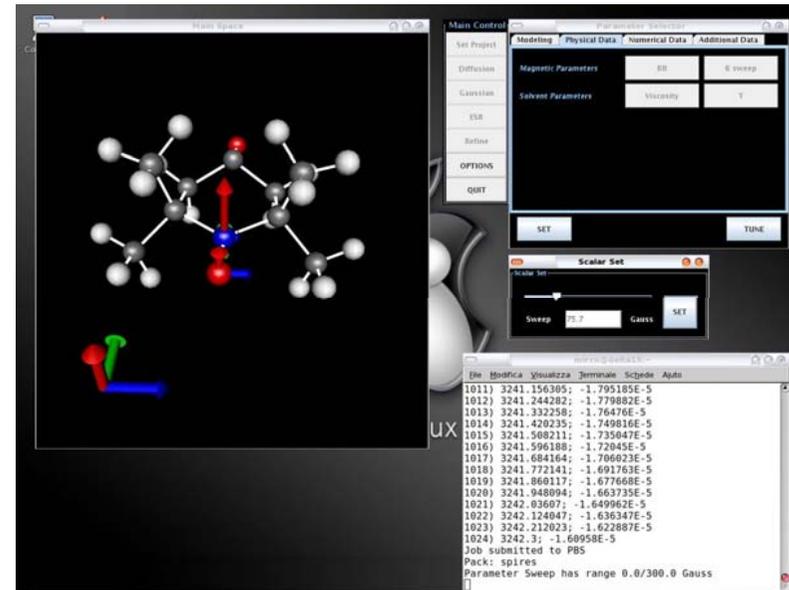
Spin Probes

OPTIONS

QUIT

```

15) H (2.21079, -0.61992, -2.59233) 8
16) H (0.60105, -1.26603, -2.21574) 8
17) H (0.20338, -2.47496, -0.02016) 9
18) H (1.37739, -2.321, 1.30801) 9
19) H (1.75147, -3.34967, -0.10118) 9
20) H (0.20347, 2.30085, 0.91215) 11
21) H (1.75161, 3.1418, 1.16597) 11
22) H (1.37757, 1.66174, 2.07745) 11
23) H (0.60115, 2.09633, -1.57705) 10
24) H (1.99484, 3.07122, -1.29619) 10
25) H (2.21088, 1.54922, -2.16991) 10
26) H (3.89873, 2.16235, 0.08712) 4
27) H (3.56299, 0.98038, 1.35594) 4
28) H (3.56296, -1.41833, 0.48773) 6
CM calculated with 28 atoms
... geometry and connectivity read successfully.
%1.5f linear
  
```



Main Control

Magnetic Parameters

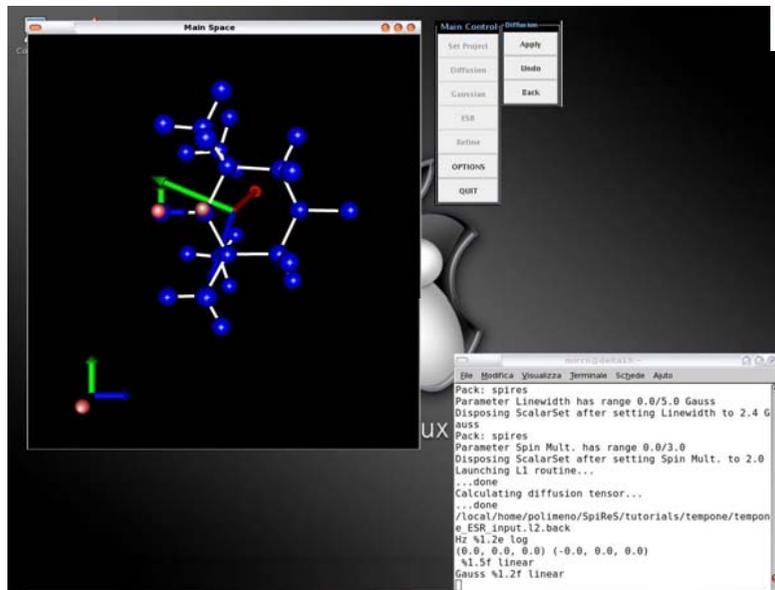
Solvent Parameters

Scalar Set

Sweep 75.7 Gauss

```

1011) 3241.156305; -1.795185E-5
1012) 3241.244282; -1.779882E-5
1013) 3241.332258; -1.76476E-5
1014) 3241.420235; -1.749816E-5
1015) 3241.508211; -1.735047E-5
1016) 3241.596188; -1.72045E-5
1017) 3241.684164; -1.706023E-5
1018) 3241.772141; -1.691763E-5
1019) 3241.860117; -1.677668E-5
1020) 3241.948094; -1.663735E-5
1021) 3242.03607; -1.649962E-5
1022) 3242.124047; -1.636347E-5
1023) 3242.212023; -1.622887E-5
1024) 3242.3; -1.60958E-5
Job submitted to PBS
Pack: spires
Parameter Sweep has range 0.0/300.0 Gauss
  
```

Main Control

Apply

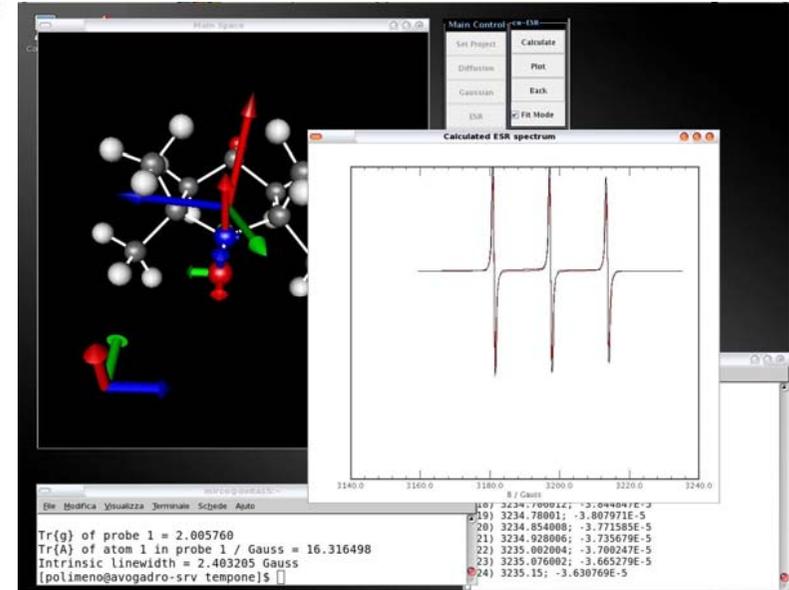
Undo

Back

PACK: SPIRES

```

Pack: spires
Parameter Linewidth has range 0.0/5.0 Gauss
Disposing ScalarSet after setting Linewidth to 2.4 Gauss
Pack: spires
Parameter Spin Mult. has range 0.0/3.0
Disposing ScalarSet after setting Spin Mult. to 2.0
Launching L1 routine...
...done
Calculating diffusion tensor...
...done
/local/home/polimeno/SpiRes/tutorials/tempon/tempon
e_ESR_input.l2.back
Hz %1.2e Log
(0.0, 0.0, 0.0) (-0.0, 0.0, 0.0)
%1.5f linear
Gauss %1.2f linear
  
```



Main Control

Calculate

Plot

Each

Fit Mode

Calculated ESR spectrum

Tr(g) of probe 1 = 2.005760

Tr(A) of atom 1 in probe 1 / Gauss = 16.316498

Intrinsic linewidth = 2.403205 Gauss

```

[polimeno@vavogadro-srv tempon]$
  
```

