

DSF: Obiettivi ed attrezzature per il calcolo scientifico

Il calcolo scientifico nel DSF è svolto per i seguenti scopi:

1. Modellistica molecolare di sostanze bioattive finalizzata alla progettazione razionale di nuovi farmaci (molecular modeling + drug design);
2. Analisi statistica di descrittori molecolari per il riconoscimento di relazioni struttura/proprietà e struttura/attività (QSAR e chemiometria);
3. Studio delle interazioni intermolecolari responsabili del riconoscimento substrato-recettore tra macromolecole biologiche (docking);
4. Caratterizzazione ab initio e quasi ab initio di proprietà elettroniche di complessi di coordinazione (calcoli HF e DFT);
5. Valutazione virtuale di librerie di composti, anche di tipo combinatoriale, finalizzata alla predizione di proprietà farmacologiche e tossicologiche (in silico ADME/Tox, Virtual screening).

Data la disponibilità sia commerciale che in open source di applicativi dedicati, di norma il software necessario all'esecuzione delle elaborazioni **NON** viene sviluppato in casa.

Attrezzature di calcolo attualmente a disposizione

Le principali risorse di calcolo sono:

1. 2 Dual AMD/Opteron64;
2. 4 Intel Quad Q6600;
3. 1 Silicon Graphics O2;
4. 1 AMD/Opteron64.

Persone

In termini di personale strutturato sono attivi tre gruppi di ricerca, in ciascuno dei quali è incardinato un Professore Associato. Sono inoltre attivi tre post-doc e nove dottorandi.

Utilizzo delle attrezzature

Pressoché massimale.

Attrezzature di calcolo di potenziale interesse

È di interesse avere accesso ad un'architettura di calcolo, parallelo o di tipo distribuito, con un consistente numero di nodi collegati tra loro in modo efficiente e veloce.

Assistenza tecnica

1 tecnico informatico di Dipartimento + 1 system administrator per il gruppo MMS.

Costi

> 3000 € / anno.