

L A B O R A T O R I O



LABORATORIO DI FISICA COMPUTAZIONALE DELLA MATERIA CONDENSATA

Responsabili: Prof. Alessandra Continenza, Prof. Carlo Pierleoni

Servizi Offerti

- Calcoli a principi primi di proprietà strutturali, elettroniche e magnetiche di materiali reali: superfici, interfacce, materiali bulks, superreticoli, nanostrutture. I calcoli teorici permettono di avere informazioni accurate sulla struttura e sulle caratteristiche elettriche e magnetiche di solidi e liquidi.
- Predizione di diagrammi di fase per modelli atomistici di materia soffice.
- Predizione dei diagrammi di fase di soluzioni polimeriche con descrizione coarse-grained.
- Sviluppo e validazione di modelli coarse-grained di soluzioni polimeriche.



Risorse Calcolo ad alte prestazioni CINECA

Staff:

**Sergio Ciuchi (PA Uni AQ),
Gianni Profeta (assegnista CNR),
Alessandro Stroppa (Ricercatore TD-CNISM),
Giuseppe D'Adamo (Dottorando Uni AQ)**

Sede: Facoltà di Scienze MM.FF.NN. – Dipartimento di Fisica – via Vetoio – Coppito – L'Aquila

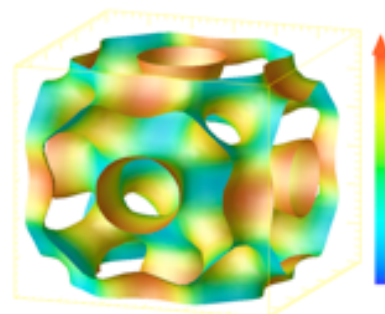
Contatti :

**E mail: alessandra.continenza@univaq.it, carlo.pierleoni@aquila.infn.it
Tel. +39 0862 433055, +39 0862 433056
Fax +39 0862 433033**

Descrizione dell'Attività

L'attività di ricerca di fisica computazionale è rivolta: a) a calcoli /ab-initio/ delle proprietà fondamentali di sistemi condensati: solidi, liquidi, etc; b) allo studio di modelli per la materia soffice (polimeri, soluzioni). La risoluzione delle equazioni fondamentali della meccanica quantistica è effettuata numericamente senza approssimazioni sul potenziale del materiale e dà informazioni molto accurate su tutte le proprietà del sistema (parametri strutturali, proprietà elettroniche, magnetiche, meccaniche, di superficie) nonché diagrammi di fase di materiali innovativi e/o in condizioni estreme. I modelli di Materia Soffice sono studiati con metodi di simulazione di Meccanica

Statistica (Monte Carlo e Dinamica Molecolare).



Strumentazione

Il laboratorio si serve di strutture in sede per il testing in locale di nuovi programmi e di risorse in remoto che vengono usate per il calcolo pesante ad alte prestazioni. Le risorse in remoto vengono ottenute su base annuale tramite progetti approvati da vari enti. Il laboratorio dispone anche di strumentazione propria presso il CASPUR (Roma) che è integrata nel cluster più grande MATRIX del CASPUR stesso e che è gestita dai tecnici del consorzio CASPUR: questo permette di avere pieno accesso alla macchina senza il pesante onere di gestione/manutenzione/update dell'hardware.

- Facilities in sede: cluster- 6 nodi INTEL+ cluster - 16 nodi Athlon
- Facilities in remoto: 4 nodi della macchina Matrix (16 cores) - presso CASPUR
- Tempo calcolo ad alte prestazioni in remoto:
- High Performance Computing Center (CINECA) – progetto europeo DEISA: 1650000 core hours
- High Performance Computing Center (CINECA) – progetto europeo DEISA: 1000000 core hours
- High Performance Computing Center

(CINECA)- ISCRA project: 20000 core hours

- High Performance Computing Center (CASPUR) – Standard Grant: 30000 core hours
- High Performance Computing Center (CASPUR) – Competitive HPC Grant: 1000000 core hours
- NSF grant @ Jaguar (Oak, Ridge USA) 5000000 core hours