

VIRT&L-COMM.8.2015.5
MASTER-UP

Molecular Applications to Science, Technology, E-learning & Research
University of Perugia srl

Aprile 2004: il primo spinoff dell' Università di Perugia

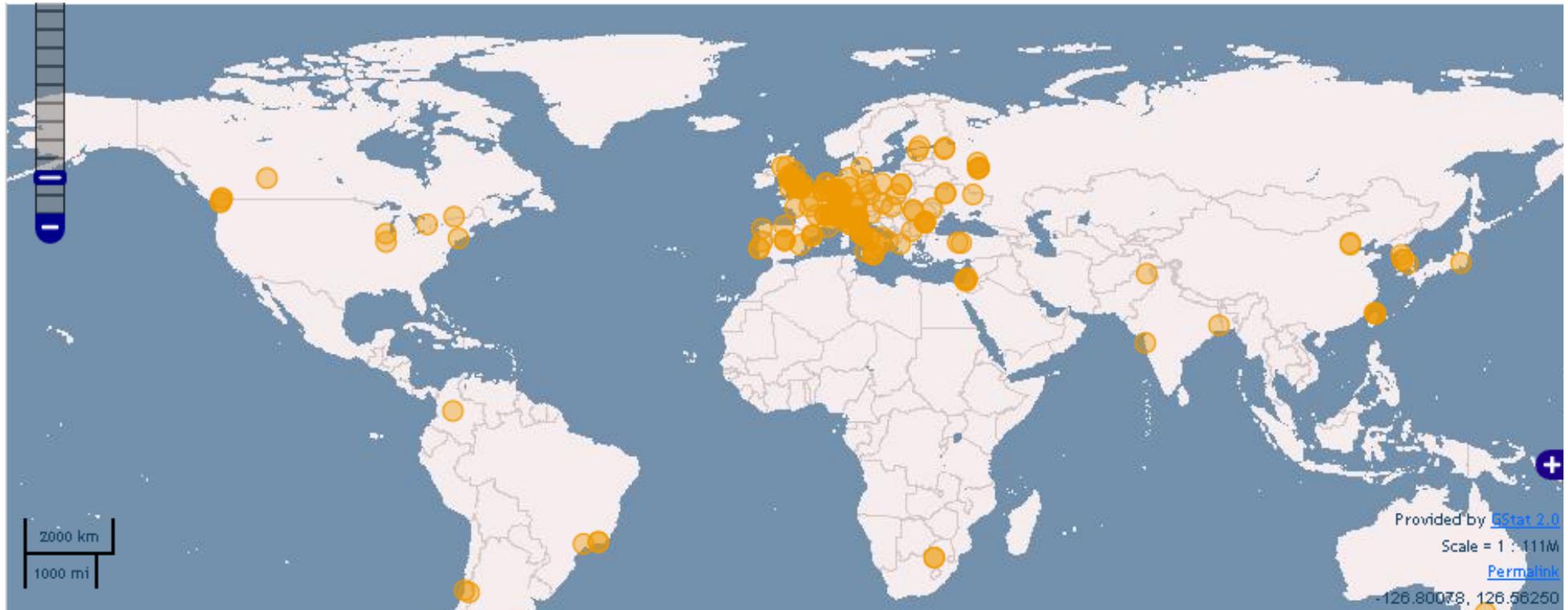
Antonio Laganà, Osvaldo Gervasi, Carlo Manuali,
Noelia Faginas Lago, Leonardo Pacifici, Antonio
Riganelli, Alessandro Costantini, Dimitris
Skouteris, Sergio Rampino

VIRT&L-COMM.8.2015.5

ATTIVITA' DI SUPPORTO ALLA RICERCA

- **Agenzia di sviluppo di strumenti di e-learning (EOL, GLOREP) e di erogazione dei certificati EChemTest[®]** che attestano il livello di competenza in vari campi della chimica come membro del cluster di piccole imprese DRAG (con ARCTUR (Nova Gorica), POLYMECHANON (Salonicco), KREBS (Vienna) ed EXACT LAB (Trieste)) all'interno della organizzazione ombrello europea costituita da **ECTN**;
- **Attività editoriale** nel settore scientifico (**e-magazine VIRT&L-COMM**) di **produzione di materiale scientifico (per congressi) e didattico (dispense e libri)** on demand collegata a prodotti di e-learning (di cui anche al punto 1) offerti in forma personale su web;
- **Supporto alle attività telematiche di EUCHEMS** (organizzazione convegni e gestione editoriale dei atti);
- **Gestione della Virtual Organization COMPCHEM su grid**
- **Sviluppo del progetto industriale PROGEO** (produzione di metano verde (carbon neutro) da CO₂ utilizzando energia derivante da fonti rinnovabili);

WORLDWIDE GRID/CLOUD



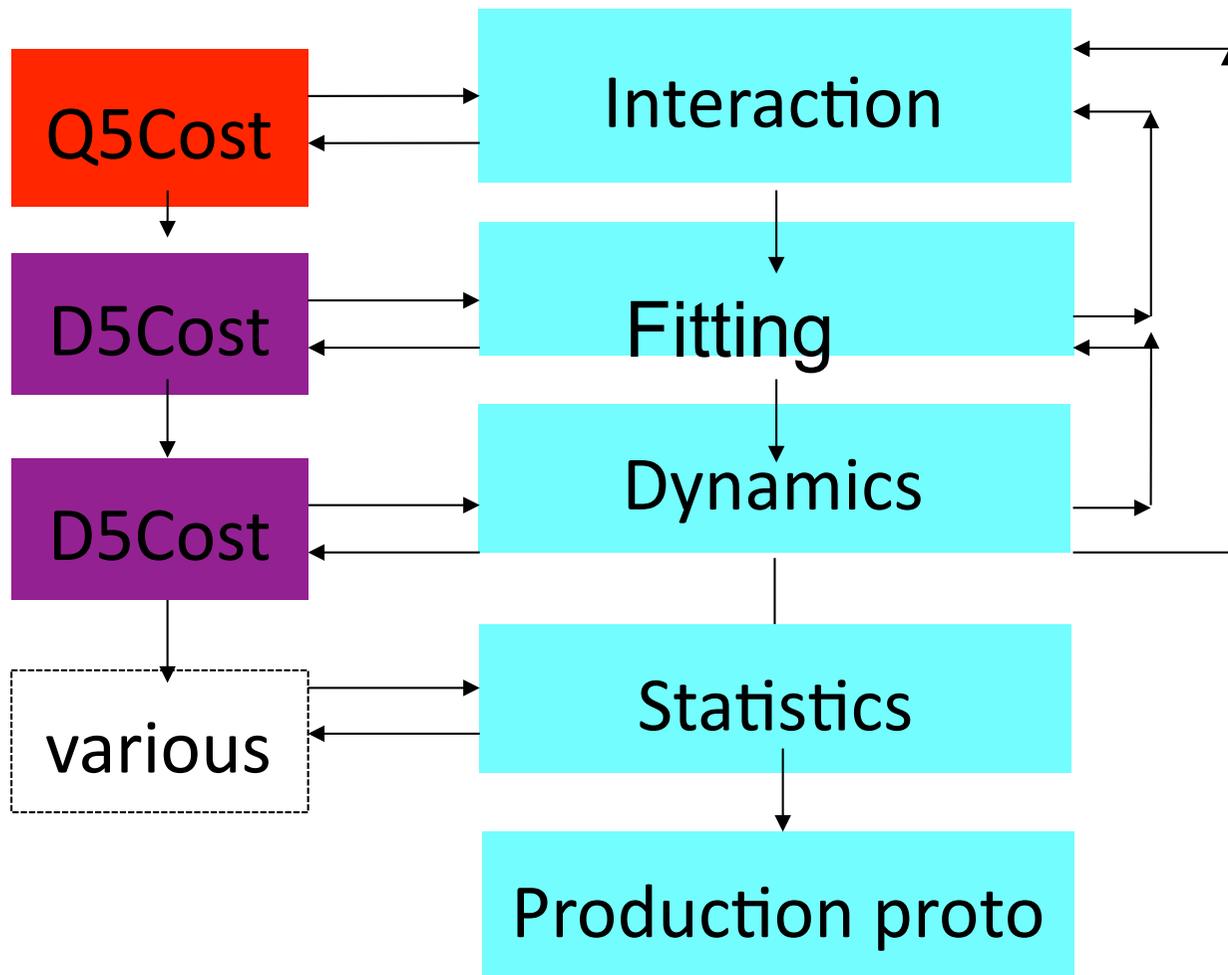
337 sites, 250000 cores, 50 providers

GEMS: THE GRID SIMULATOR



Data formats

Programs

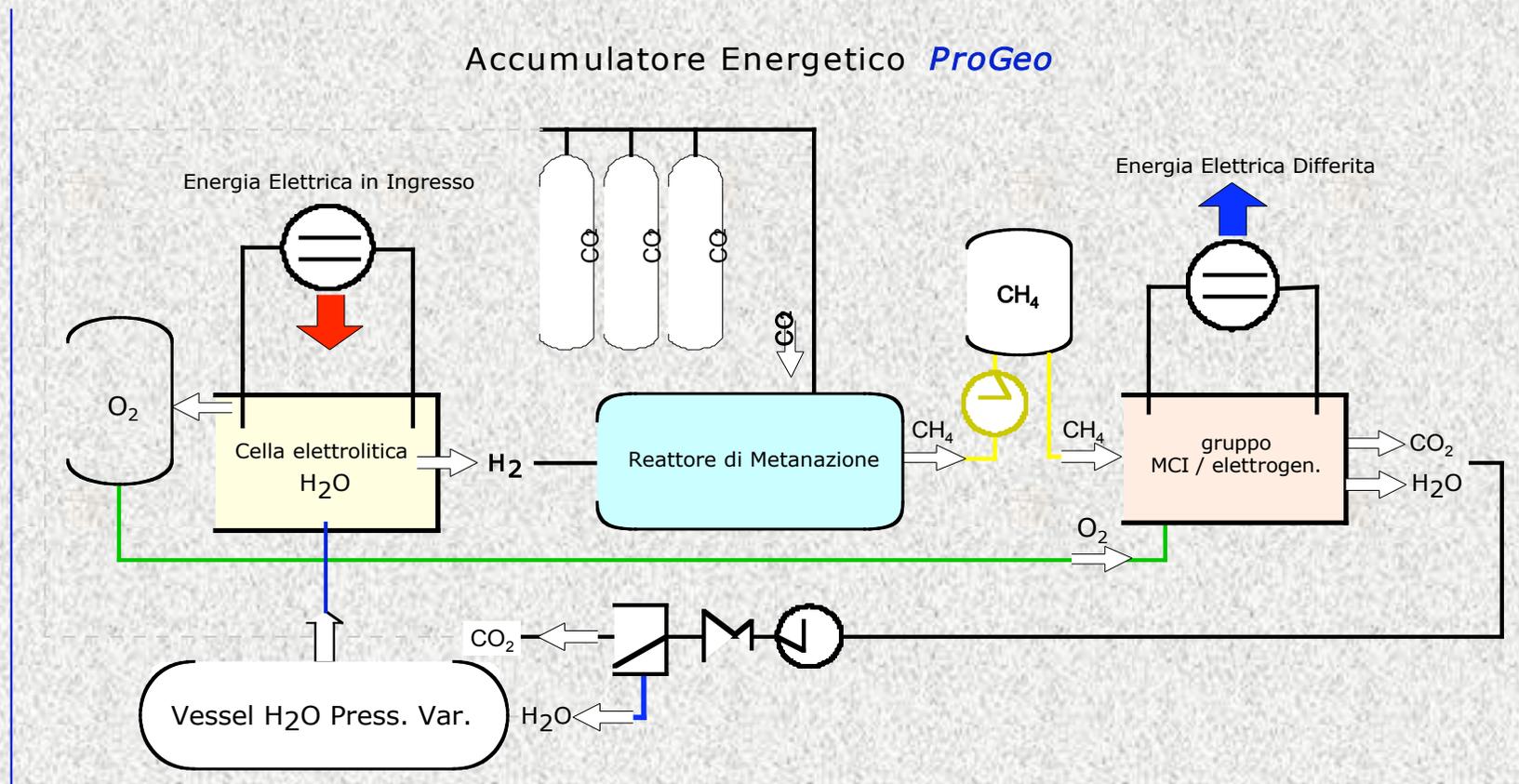


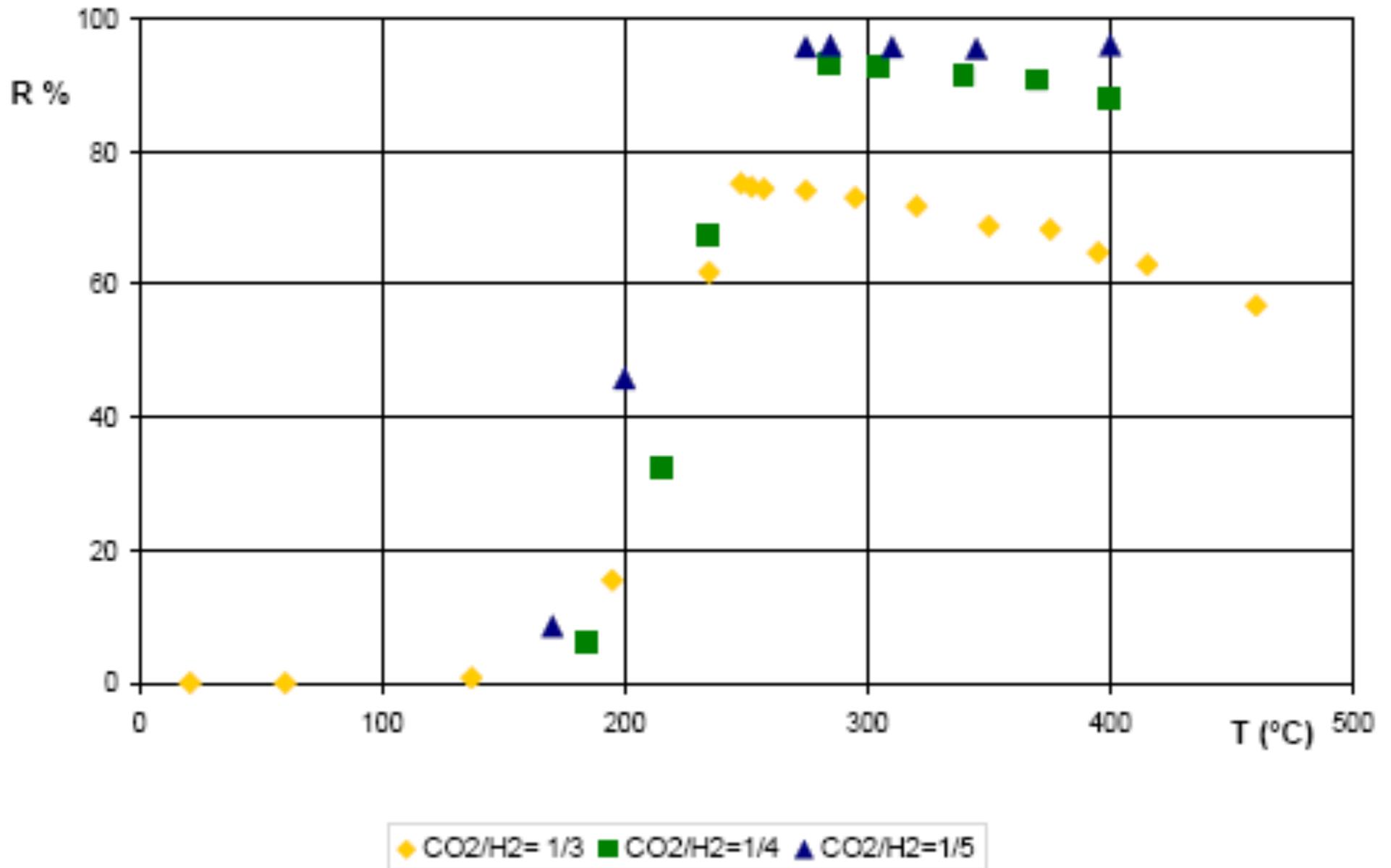
A. Laganà, A. Costantini, O. Gervasi,
N. Fagnas Lago, C. Manuali, S.
Rampino: *COMPChem: progress
towards GEMS a Grid Empowered
Molecular Simulator and beyond*,
**Journal of Grid Computing, 8(4),
571-586 (2010)**

E. Rossi, S. Evangelisti, A. Laganà, A.
Monari, S. Rampino, M. Verdicchio,
C. Angeli, K. Baldrige, G.L.
Bendazzoli, S. Borini, R. Cimraglia,
P. Kallay, H.P. Luethi, K. Ruud, J.
Sanchez-Marin, A. Scemama, P.
Szalay, A. Tajti, *Code
interoperability and standard Data
Format in Quantum Chemistry and
Dynamics: the Q5/D5cost Data
Model*, **Journal of Computational
Chemistry 35(8): Code
Interoperability 611-621 (2014);**

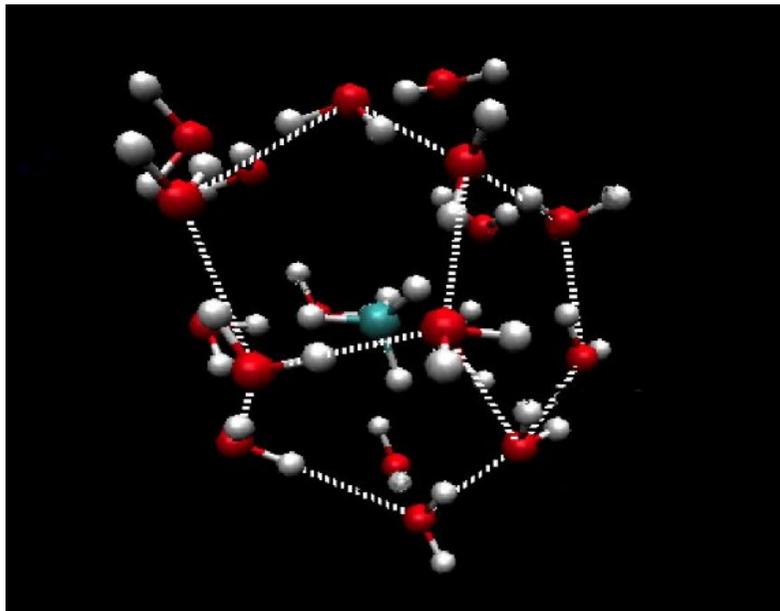
PROGEO: DALLA RICERCA ALL'INNOVAZIONE

- 1) FOTOCATALISI, ELETTROLIZZATORE → H_2
- 2) RIDUTTORE CO_2 → ALCOLI, ALDEIDI E CH_4 (carbon neutro)
- 3) IMMAGAZZINAMENTO e UTILIZZO

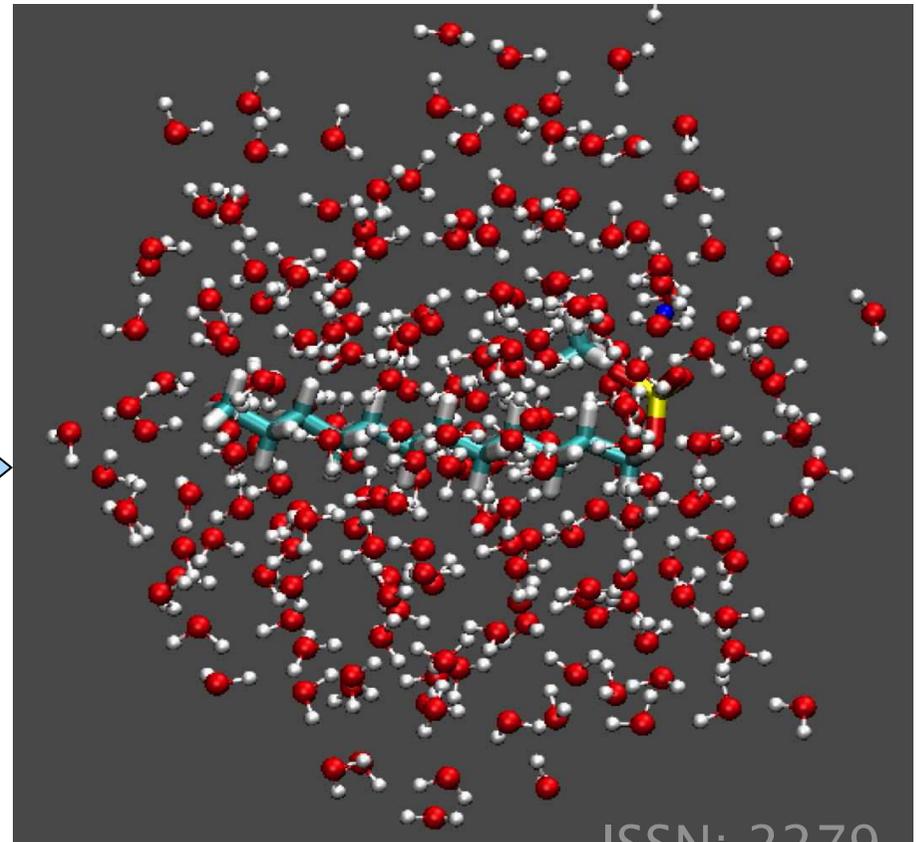
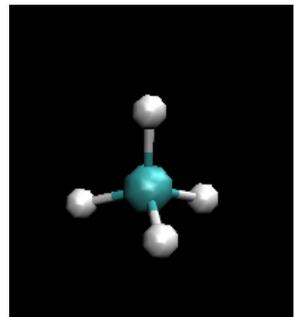
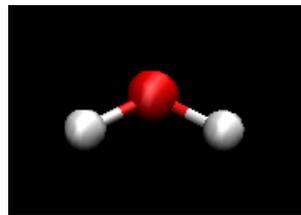
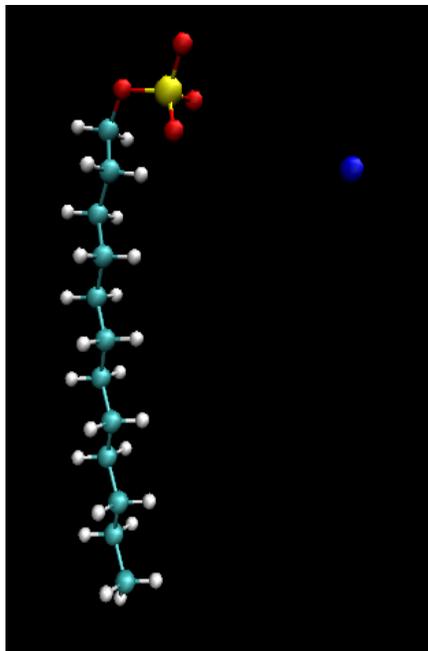


PROCESSO CENTRALE: LA REAZIONE $H_2 + CO_2$ 

FORMAZIONE DI CLATRATI IDRATI

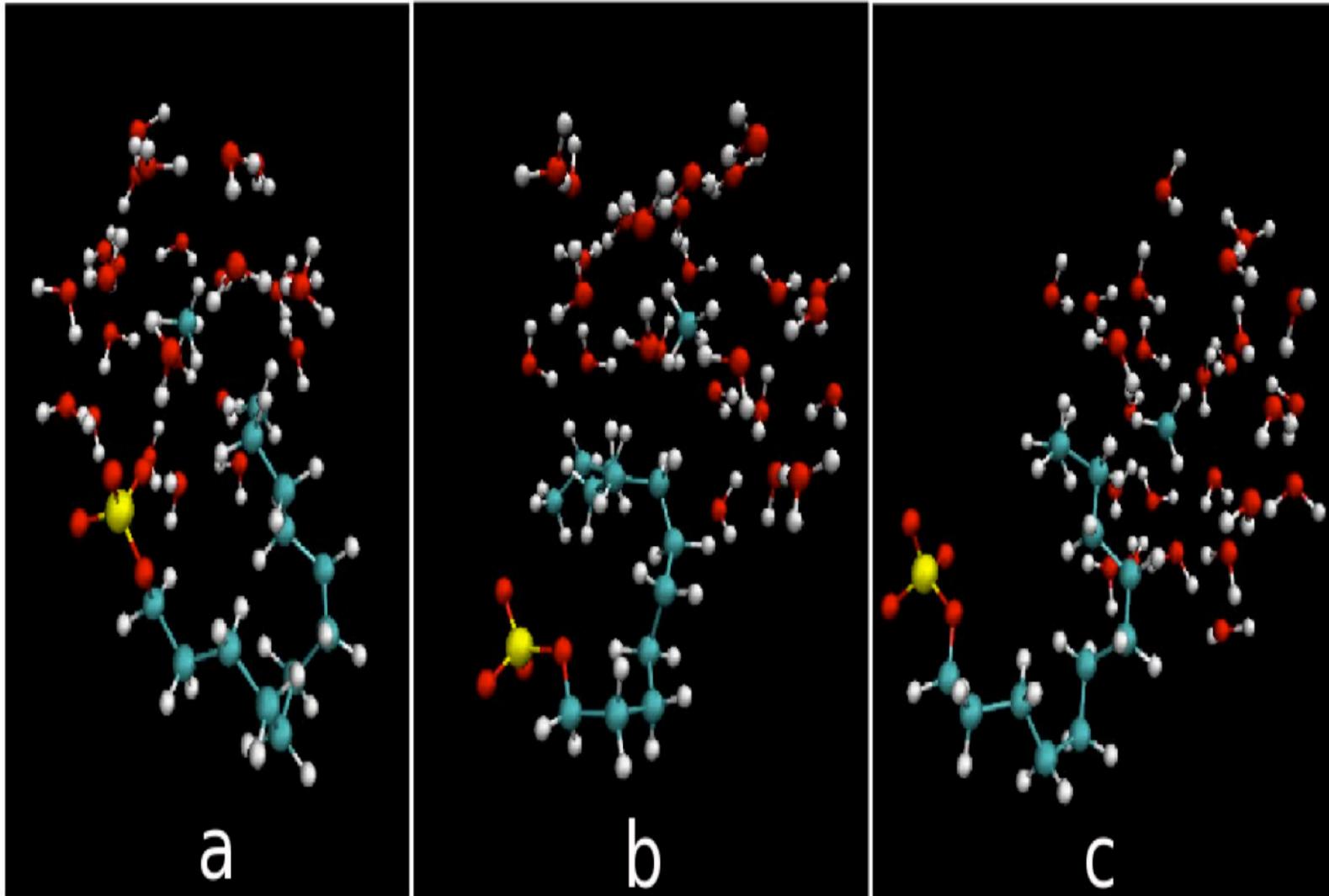


- Interazioni modellate con force fields
- Uso di Molecular DL_POLY per calcoli di dinamica molecolare
- Equilibratura della geometria e minimizzazione dell'energia



VIRT&L-COMM.8.2015.5

IMMAGAZZINAMENTO DEL METANO IN GHIACCIO: EFFETTO “STIRRER” DI SDS



Come sono?

Macroscopicamente SIMILI A GHIACCIO O NEVE,
ma...



VIRT&L-COMM.8.2015.5

Grazie per l'attenzione