

PROTOCOLLO DI ACCORDO TRA il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie ("DCBB") dell'Università di Perugia e la PLC System S.r.l. ("PLC") di Acerra

PREMESSO che

- a) nell'ambito del progetto di dottorato Europeo ITN-EJD-642294 TCCM (*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*) (Allegato 1) il Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie dell'Università di Perugia, (di seguito indicato come "DCBB") p.IVA 00448820548, Via Elce di Sotto 8, Perugia, qui rappresentato dal Direttore Prof. Francesco Tarantelli e dal responsabile scientifico del progetto Prof. Antonio Laganà, è beneficiario principale e sovrintende alla ricerca "Calcolo in rete per la modellistica ab initio dell'immagazzinamento chimico di energie alternative" (come da allegato A) dell'Early-Stage Researcher (ESR) Carles Martí;
- b) il citato ESR dovrà condurre la propria ricerca presso il DCBB per un periodo di 20 mesi operando per un periodo di 3 mesi sull'apparato sperimentale PROGEO attualmente installato presso la PLC System S.r.l., (di seguito indicata come "PLC") c.f. 07073510633, p.iva 03242081218, sita in Zona ASI- Località Pantano, 80011 Acerra (Napoli) qui rappresentata dal Sig. Francesco Esposito, Amministratore Unico;
- c) al fine di facilitare sin dall'inizio l'integrazione tra le attività di sviluppo teorico computazionale e le relative verifiche sperimentali di PROGEO si ritiene opportuno collocare il citato apparato sperimentale presso idonea struttura dell'Ateneo di Perugia.

SI CONCORDA CHE

- 1) ai fini delle attività di stage, sviluppo teorico computazionale e verifiche sperimentali relative al suddetto progetto PLC trasferirà a proprie spese alla struttura dell'Ateneo individuata PROGEO e la strumentazione e i materiali necessari al suo corretto funzionamento (come da allegato B) assicurando il supporto presso la propria struttura e, ove necessario, presso l'Università di Perugia del proprio personale;
- 2) il trasferimento di PROGEO avrà la durata di 3 (tre) anni a decorrere dalla data di consegna del progetto restando inteso che, una volta decorsi i primi 12 (dodici) mesi, PLC potrà in qualsiasi momento e a suo insindacabile giudizio risolvere il presente protocollo di accordo e ritirare l'apparato sperimentale, senza che DCBB abbia nulla a che pretendere;
- 3) in caso di risoluzione da parte di PLC ai sensi del punto 2) che precede, quest'ultima si impegna a garantire che il lavoro del dottorando coinvolto prosegua presso la nuova sede dove il progetto dovesse essere trasferito fino al termine di durata di 3 (tre) anni suddetto;
- 4) PROGEO sarà sempre ispezionabile da PLC in date determinate di comune accordo;
- 5) i nominativi dei soggetti che saranno coinvolti nel progetto, oltre al personale del DCBB e della struttura ove PROGEO sarà allocato, sono indicati nell'allegato C. Eventuali variazioni verranno comunicate dal responsabile scientifico del DCBB alla PLC e dovranno essere autorizzate per iscritto da quest'ultima prima dell'effettivo coinvolgimento;
- 6) il DCBB verserà alla PLC per le esigenze del progetto la somma di Euro 3.600,00 (tremilaseicento/00) in un'unica soluzione a mezzo bonifico bancario entro mesi 9 dalla data del trasferimento dell'apparato
- 7) il DCBB si impegna a considerare strettamente confidenziali tutti i documenti e le informazioni comunicate da PLC relative al progetto e prenderà ogni precauzione al fine di salvaguardare tale riservatezza. Il DCBB imporrà tale obbligo anche ai soggetti coinvolti nel progetto vietando loro ogni uso abusivo delle informazioni ricevute.
- 8) il presente protocollo di accordo sarà disciplinato dalla legge italiana e per ogni controversia nascente dalla interpretazione o esecuzioni del presente protocollo sarà esclusivamente



competente il Foro di Napoli;

- 9) Le parti, ai fini della normativa in materia di riservatezza dei dati personali, prestano reciprocamente il proprio consenso al trattamento dei propri dati, unicamente finalizzato all'esecuzione del presente protocollo di accordo.

Perugia 30/10/2015

PLC SYSTEM S.r.l.

L'Amministratore unico Francesco Esposito

Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie

il Direttore Francesco Tarantelli

il Responsabile scientifico ITN Antonio Laganà



ALLEGATO A

PROGETTO DI DOTTORATO EUROPEO ITN-EJD-642294. TCCM (*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*)

Calcolo in rete per la modellistica ab initio dell'immagazzinamento chimico di energie alternative

Obiettivi: utilizzazione estensiva di calcoli distribuiti per simulazioni ab initio di processi chimici (struttura elettronica, dinamica dei nuclei, stima dell'efficienza degli scambi di massa e di energia) concernenti l'utilizzazione di applicazioni gestite dal workflow GEMS (Grid Empowered Molecular Simulator) che combina l'uso di Calcolo ad alte prestazioni (HPC, High Performance Computing) e ad alto flusso di calcoli (HTC, High Throughput Computing) [1]. Le applicazioni considerate sono finalizzate alla simulazione dei processi di immagazzinamento di energie alternative sotto forma di CH₄ ottenuto grazie alla riduzione della CO₂ [2]. Durante il lavoro di tesi, l'ESR (Early Stage Researcher) fruitore della borsa del progetto verrà addestrato a sviluppare il relativo software concorrente per piattaforme innovative e a comporre le relative procedure computazionali assemblando programmi della organizzazione virtuale COMPCHEM [3].

Risultati attesi: il gruppo di Perugia fornirà all'ESR sia i necessari accessi all'infrastruttura Grid sia le competenze di base per poter utilizzare efficientemente le risorse computazionali. L'impegno verrà esteso allo sviluppo di linee di collaborazione con le relative organizzazioni virtuali, il porting dei codici relativi e l'utilizzazione delle potenzialità delle piattaforme di calcolo eterogenee distribuite [3,4].

Il gruppo di Tolosa contribuirà al progetto mediante studi di teorici della struttura elettronica dei sistemi molecolari coinvolti con particolare riferimento alla necessità di progettare e implementare formati standard (sia pure di fatto) per i dati prodotti dai differenti programmi ab initio e la loro estensione ai calcoli dinamici [5]. Per questo motivo l'ESR inizierà il proprio percorso formativo presso il gruppo di Perugia e vi resterà per i primi 20 mesi. I restanti 16 mesi li spenderà invece a Tolosa.

Mobilità: Nel corso dei 20 mesi passati a Perugia l'ESR fruirà di uno stage di 3 mesi presso la PLC System per accedere all'apparato sperimentale su cui testare le caratteristiche sperimentali e teoriche del progetto

Riferimenti

- [1] C. Manuali, A. Costantini, A. Laganà, M. Cecchi, A. Ghiselli, M. Carpenè, E. Rossi, *Lecture Notes Computer Science* 7333 (2012) 345-357.
[2] E. Garcia, A. Saracibar, A. Laganà, *Theor. Chem. Accounts*. 128 (2011) 727-734.
[3] A. Laganà, A. Riganelli, O. Gervasi, *Lecture Notes in Computer Science* 3980 (2006) 665-674.
[4] C. Manuali, A. Laganà, *Future Generation of Computer Systems*, 27 (2011) 315-318.
[5] E. Rossi et al., *J. Comp. Chem.* 35 (2014) 611-621

ALLEGATO B

STRUMENTAZIONE E MATERIALI NECESSARI AL CORRETTO FUNZIONAMENTO

Schema elettrico connessioni quadro;
Demineralizzatore acqua PIEL;
Gascromatografo Agilent 7820;
Catalizzatore J&M serie KATALCO JM 11-4MR sigillato nel contenitore cilindrico;
Tubi con membrane di separazione AIRANNE per CO₂/CH₄ e H₂/CH₄;
Pompa a membrana Seyber & Rahier SERA;
Connessioni strumentate flessibili non utilizzate.

ALLEGATO C

NOMINATIVI DEI SOGGETTI CHE SARANNO COINVOLTI NEL PROGETTO

Prof. Antonio Laganà
Dr. Leonardo Pacifici
Dr. Carles Marti
Dr. Simone Arca
Dr. Emilio D'Alessandro
PI Sergio Mantovani
Marco Mantovani
Dr. Igor Luisetto
Dr. Simonetta Tuti
Dr. Andrea Capriccioli
Prof. Stefano Falcinelli

