



Anno 2013

Università degli Studi di PADOVA >> Sua-Rd di Struttura: "SCIENZE DEL FARMACO - DSF"

C.1.b Grandi attrezzature di ricerca⁽¹⁾

N.1 - Ad uso esclusivo della struttura (scheda inserita dalla Struttura)

Nome o Tipologia	Microscopio Confocale
Responsabile scientifico	CONCONI Maria Teresa
Descrizione ⁽²⁾	Leica TCS SP5
Classificazione ESFR ⁽³⁾	Health and Food Domain
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto ⁽⁴⁾	Interni
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2007
Utenza	Interna allateneo, Esterna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Contratti di ricerca
Altre informazioni utili ⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	05

N.2 - Ad uso esclusivo della struttura (scheda inserita dalla Struttura)

Nome o Tipologia	Spettrometro NMR
Responsabile scientifico	ZAGOTTO Giuseppe
Descrizione ⁽²⁾	Avance III 400 MHz
Classificazione ESFR ⁽³⁾	Health and Food Domain
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto ⁽⁴⁾	Interni
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2010
Utenza	Interna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca
Altre informazioni utili ⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	03

N.3 - Ad uso esclusivo della struttura (scheda inserita dalla Struttura)

Nome o Tipologia	Spettrometro NMR
Responsabile scientifico	ZAGOTTO Giuseppe
Descrizione ⁽²⁾	AMX-3 300 MHz
Classificazione ESFR ⁽³⁾	Health and Food Domain
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto ⁽⁴⁾	Interni

Anno di attivazione della grande attrezzatura	1997
Utenza	Interna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche
Altre informazioni utili ⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	03

N.4 - Ad uso esclusivo della struttura (scheda inserita dalla Struttura)

Nome o Tipologia	Spettrometro di massa
Responsabile scientifico	POLVERINO DE LAURETO Patrizia
Descrizione ⁽²⁾	
Classificazione ESFR ⁽³⁾	Environmental Sciences, Health and Food Domain
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto ⁽⁴⁾	Regionali/Nazionali
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2002
Utenza	Interna allateneo, Esterna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Prestazioni a tariffario
Altre informazioni utili ⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	05

N.5 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Stabulario MOGM-2
Responsabile scientifico	MUCIGNAT Carla
Descrizione ⁽²⁾	Associato a più gruppi di ricerca
Classificazione ESFR ⁽³⁾	Health and Food Domain
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto ⁽⁴⁾	Regionali/Nazionali
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2000
Utenza	Interna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche
Altre informazioni utili ⁽⁵⁾	pubblicazioni, brevetti
Area Scientifica di Riferimento:	05
Dipartimenti in condivisione:	SCIENZE DEL FARMACO - DSF MEDICINA MOLECOLARE - DMM

N.6 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Sistema di microsinterizzazione laser MSL50
Responsabile scientifico	BARIANI Paolo Francesco
Descrizione ⁽²⁾	apparecchiatura associata al Gruppo di ricerca che opera presso il laboratorio TESI di Rovigo e condivisa con altri Gruppi dell'Ateneo

Classificazione ESFR⁽³⁾	Physical Sciences and Engineering
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Altri Fondi
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2013
Utenza	Interna all'ateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Prestazioni a tariffario, Contratti di ricerca
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	progetti e pubblicazioni
Area Scientifica di Riferimento:	09
Dipartimenti in condivisione:	FISICA E ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI" - DFA INGEGNERIA DELL'INFORMAZIONE - DEI INGEGNERIA INDUSTRIALE - DII MEDICINA - DIMED SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF INGEGNERIA CIVILE, EDILE E AMBIENTALE - ICEA SCIENZE BIOMEDICHE - DSB TECNICA E GESTIONE DEI SISTEMI INDUSTRIALI - DTG

N.7 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Sistema di sonda per microanalisi chimica e heating stage
Responsabile scientifico	BARIANI Paolo Francesco
Descrizione⁽²⁾	apparecchiatura associata al Gruppo di ricerca che opera presso il laboratorio TESI di Rovigo e condivisa con altri Gruppi dell'Ateneo
Classificazione ESFR⁽³⁾	Physical Sciences and Engineering
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Altri Fondi
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2013
Utenza	Interna all'ateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Prestazioni a tariffario, Contratti di ricerca
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	progetti e pubblicazioni
Area Scientifica di Riferimento:	09
Dipartimenti in condivisione:	FISICA E ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI" - DFA INGEGNERIA DELL'INFORMAZIONE - DEI INGEGNERIA INDUSTRIALE - DII MEDICINA - DIMED SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF INGEGNERIA CIVILE, EDILE E AMBIENTALE - ICEA SCIENZE BIOMEDICHE - DSB TECNICA E GESTIONE DEI SISTEMI INDUSTRIALI - DTG

N.8 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Sistema misura basato su profilometria ottica in modalità interferometrica e confocale
Responsabile scientifico	BARIANI Paolo Francesco
Descrizione⁽²⁾	Sistema completo di computer di controllo, sistema di assorbimento delle vibrazioni, servizio di installazione. Apparecchiatura associata al Gruppo di ricerca che opera presso il laboratorio TESI di Rovigo e condivisa con altri Gruppi dell'Ateneo
Classificazione ESFR⁽³⁾	Physical Sciences and Engineering
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Altri Fondi
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2012

Utenza	Interna allateneo, Esterna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Prestazioni a tariffario, Contratti di ricerca
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	progetti e pubblicazioni
Area Scientifica di Riferimento:	09
Dipartimenti in condivisione:	FISICA E ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI" - DFA INGEGNERIA DELL'INFORMAZIONE - DEI INGEGNERIA INDUSTRIALE - DII MEDICINA - DIMED SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF INGEGNERIA CIVILE, EDILE E AMBIENTALE - ICEA SCIENZE BIOMEDICHE - DSB TECNICA E GESTIONE DEI SISTEMI INDUSTRIALI - DTG

N.9 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Sistema di lavorazione Ultraperciso a 5 assi - KUGLER Micromaster 3X
Responsabile scientifico	BARIANI Paolo Francesco
Descrizione⁽²⁾	apparecchiatura associata al Gruppo di ricerca che opera presso il laboratorio TESI di Rovigo e condivisa con altri Gruppi dell'Ateneo
Classificazione ESFR⁽³⁾	Physical Sciences and Engineering
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Altri Fondi
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2010
Utenza	Interna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Prestazioni a tariffario, Contratti di ricerca
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	progetti e pubblicazioni
Area Scientifica di Riferimento:	09
Dipartimenti in condivisione:	FISICA E ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI" - DFA INGEGNERIA DELL'INFORMAZIONE - DEI INGEGNERIA INDUSTRIALE - DII MEDICINA - DIMED SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF INGEGNERIA CIVILE, EDILE E AMBIENTALE - ICEA SCIENZE BIOMEDICHE - DSB TECNICA E GESTIONE DEI SISTEMI INDUSTRIALI - DTG

N.10 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Sistema SEM ambientale
Responsabile scientifico	BARIANI Paolo Francesco
Descrizione⁽²⁾	apparecchiatura associata al Gruppo di ricerca che opera presso il laboratorio TESI di Rovigo e condivisa con altri Gruppi dell'Ateneo
Classificazione ESFR⁽³⁾	Physical Sciences and Engineering
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Interni
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2010
Utenza	Interna allateneo, Esterna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Prestazioni a tariffario, Contratti di ricerca
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	progetti e pubblicazioni

Area Scientifica di Riferimento:	09
Dipartimenti in condivisione:	FISICA E ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI" - DFA INGEGNERIA DELL'INFORMAZIONE - DEI INGEGNERIA INDUSTRIALE - DII MEDICINA - DIMED SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF INGEGNERIA CIVILE, EDILE E AMBIENTALE - ICEA SCIENZE BIOMEDICHE - DSB TECNICA E GESTIONE DEI SISTEMI INDUSTRIALI - DTG

N.11 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Difrattometro a raggi X per cristallo singolo
Responsabile scientifico	DOLMELLA Alessandro
Descrizione⁽²⁾	Gemini EXcalibur E Diffractometer System
Classificazione ESFR⁽³⁾	Health and Food Domain, Material and Analytical Facilities
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Interni
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2009
Utenza	Interna all'ateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	03
Dipartimenti in condivisione:	SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF

N.12 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Spettrometro di Massa
Responsabile scientifico	DE FILIPPIS Vincenzo
Descrizione⁽²⁾	Perkin Elmer "Mariner Biospectrometry workstation 5220"
Classificazione ESFR⁽³⁾	Health and Food Domain, Material and Analytical Facilities
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Interni
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2000
Utenza	Interna all'ateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	05
Dipartimenti in condivisione:	SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF MEDICINA MOLECOLARE - DMM

N.13 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Spettrometro di Massa
-------------------------	-----------------------

Responsabile scientifico	LICINI Giulia Marina
Descrizione⁽²⁾	AB Sciex 4800 Plus MALDI/TOF/TOF+ Analyzer
Classificazione ESFR⁽³⁾	Health and Food Domain, Material and Analytical Facilities
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Interni
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2010
Utenza	Interna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	03
Dipartimenti in condivisione:	SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF

N.14 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Sistema Integrato per Microcalorimetria a scansione differenziale
Responsabile scientifico	DE FILIPPIS Vincenzo
Descrizione⁽²⁾	Alfatech VP-DSC, VP-ITC, THERMO VAC
Classificazione ESFR⁽³⁾	Health and Food Domain, Material and Analytical Facilities
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Interni
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2007
Utenza	Interna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche
Altre informazioni utili⁽⁵⁾	
Area Scientifica di Riferimento:	05
Dipartimenti in condivisione:	SCIENZE CHIMICHE - DiSC SCIENZE DEL FARMACO - DSF SCIENZE BIOMEDICHE - DSB

N.15 - In condivisione con altre strutture (scheda inserita dall'Ateneo)

Nome o Tipologia	Comunità di Chimica Computazionale di Padova/Computational Chemistry Community in Padua (C3P)
Responsabile scientifico	POLIMENO Antonino
Descrizione⁽²⁾	più gruppi di ricerca anche di altri dipartimenti , CNR con contributo per ora di utilizzo
Classificazione ESFR⁽³⁾	e-Infrastructures
Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto⁽⁴⁾	Interni, Regionali/Nazionali, Altri Fondi
Anno di attivazione della grande attrezzatura	2008
Utenza	Interna allateneo, Esterna allateneo
Applicazioni derivanti dall'utilizzo dell'attrezzatura	Progetti di ricerca, Collaborazioni scientifiche, Contratti di ricerca
	Sono state prodotte pubblicazioni scientifiche. La Comunità di Chimica Computazionale di Padova/Computational Chemistry Community in Padua (C3P) è un laboratorio del Dipartimento di Scienze Chimiche (DiSC) dell'Università degli Studi di Padova dedicato alla modellazione in silico di sistemi molecolari, nanosistemi e biosistemi, nell'ambito delle scienze molecolari, della scienza dei materiali e della biochimica molecolare. La facility comprende in data odierna cinque raggruppamenti di nodi di calcolo gestiti come cluster indipendenti (Avogadro, Avogadro - R, Dalton, Marie, Pierre) ed include una co-proprietà di un cluster situato presso il Dipartimento di

Fisica ed Astronomia (Gollum). Le attività del C3P sono documentate presso il sito web del DISC, all'indirizzo <http://www.chimica.unipd.it/c3p>

Le risorse computazionali del C3P sono riservate in primis agli afferenti del Dipartimento di Scienze Chimiche, ad altri Dipartimenti dell'Ateneo patavino, ad enti di ricerca ed imprese. Il C3P partecipa inoltre a esperienze di grid e cloud computing, promuove la creazione di pacchetti software e librerie dedicate alla chimica computazionale, e contribuisce ad iniziative di training per gli studenti in Chimica, Chimica industriale, Scienza dei Materiali, STAM e Beni Culturali delle lauree di primo e secondo livello, nonché della Scuola di Dottorato in Scienze Molecolari e Scienza ed Ingegneria dei Materiali.

2.1 Hardware

- Avogadro (71 nodi / 284 core): 71 nodi (blade) 2 cpu Intel Woodcrest Dual Core, 4 core, 2.6 GHz, 2 HD SAS da 72 Gb; interconnessione Infiniband; OS Linux Red Hat
- Avogadro R (9 nodi / 72 core): 9 nodi (blade) 2 cpu Intel Woodcrest Quad Core, 8 core, 2.6 GHz, 2 HD SAS da 72 Gb; interconnessione Infiniband; OS Linux Red Hat
- Dalton (14 nodi / 208 core): 8 nodi (blade) 2 cpu Ibm ppc6, 8 core, 1 HD SAS da 140 Gb, interconnessione Infiniband, OS Linux Red Hat; 6 nodi (blade) 2 cpu Intel Xeon X5650, 12 core, 2.6 GHz, 2 HD SAS da 300 Gb, interconnessione Infiniband, OS Linux Red Hat
- Curie (8 nodi / 152 core): 5 nodi 2 cpu AMD Opteron 6128, 16 core, 1 HD SATA da 250 Gb, 2 GPU Tesla S2050, interconnessione Infiniband, OS Scientific Linux; 3 nodi 2 cpu AMD Opteron 6238, 24 core, 1 HD SATA da 500 Gb, 2 GPU Tesla M2075, interconnessione Infiniband, OS Linux Centos;
- Pierre (2 nodi / 96 core): 1 nodo 2 cpu Intel Xeon L5640, 12 core, 2.27 GHz, 2 HD SAS da 140 Gb (in raid 1), 2HD SATA da 1Tb (in raid 1), OS Linux Red Hat; 1 nodo 4 cpu AMD Opteron 6282 SE, 32 core, 5 HD SAS da 600 Gb (in raid 5 + disco di spare), interconnessione Infiniband, OS S. Linux;
- Gibbs (6 nodi/ 96 core) : 6 lame di calcolo modello BL460C G8 con 2 socket xeon 8 core fisici ciascuno per un totale di 16 core, 128GB di RAM 2 dischi sas 10Krpm da 300GB ciascuno, 2 schede di rete 10Gb, 1 switch 48 porte comprensivo di 2 moduli ottici, scheda di rete Infiniband

A queste si aggiunge la facility esterna Gollum (1 nodo / 96 core), in condivisione con il Dipartimento di Fisica: 1 nodo 96 core Intel Xeon E7- 8837, 2.67 GHz, spazio disco 1Tb, SO SUSE Linux Enterprise Server 11

Altre informazioni utili⁽⁵⁾

1.2 Software

SO base: Linux RedHat 4.x, Linux RedHat 5.x, Linux RedHat 6.x, Scientific Linux 6.x, Centos 6.x, SUSE Linux Enterprise Server 11

Compilatori (64bit): Intel C++ Compiler per Linux, Intel Fortran Compiler per Linux, Portland Fortran; gnu cc; ibm xlc-xf

Librerie scientifiche: LAPACK, ScaLAPACK, BLAS, CBLAS, CLAPACK, ATLAS, GNU Library, FFTW, //Ellpack, PETSc

Software chimico quantistico: Gaussian 09, Gamess-US, Quantum Espresso, ADF,ORCA

Software dinamica molecolare, CFD: Gromacs, CHARMM, NAMD, LAMMPS, Amber, OpenFoam, ComSol

Software in house (open source) per spettroscopia computazionale

I cluster sono allocati presso una sala al pianterreno del Dipartimento di Scienze Chimiche: superficie 60 m², pavimento flottante, impianto di condizionamento, 2 gruppi di continuità da 40 KWH + 1 gruppo di continuità da 20 KWH. I cluster possono complessivamente fornire un monte ore di CPU stimabile in circa 6 × 106 ore cpu all'anno. Il C3P è un laboratorio del DISC dedicato alla chimica computazionale ed il suo utilizzo è aperto ai ricercatori dell'area chimica dell'Università di Padova e ad imprese o terzi interessati. Le attrezzature del C3P sono integrate nelle risorse informatiche del DISC.

La facility computazionale è inoltre aperta a progetti di condivisione delle competenze scientifiche e della stessa attrezzatura di calcolo con altre aree scientifiche ed enti interni od esterni all'Università degli Studi di Padova. In particolare, sono incoraggiate le seguenti iniziative

- Grid computing e calcolo geograficamente distribuito nell'ambito del circuito nazionale
 - Partecipazione a progetti universitari, nazionali ed europei per il calcolo e la modellistica nell'ambito della chimica, scienza dei materiali e biosistemi; consulenze e sviluppo di progetti di calcolo applicato a problematiche chimiche
 - Creazione di pacchetti software e librerie dedicate ad attività di ricerca ed applicative, derivanti dal patrimonio esistente dei vari gruppi di ricerca già attivi e dalla proficua collaborazione con ricercatori di altre aree;
 - Iniziative di training per gli studenti in Chimica, Chimica industriale, Scienza dei Materiali delle lauree di primo e secondo livello, nonché della Scuola di Dottorato in Scienze Molecolari e Scienza ed Ingegneria dei Materiali. Il C3P svolge varie attività secondarie generalmente dedicate alla diffusione della cultura chimica computazionale
 - Gestione tecnica delle risorse didattiche di calcolo del DISC (aula di informatica) e del web-server che ospita il sito web del DISC
 - Attività di consulenza per la soluzione di problemi di calcolo, sviluppo di metodologie, interpretazione e visualizzazione di dati.
 - Organizzazione di cicli di seminari dedicati alla modellistica in ambito chimico computazionale
 - Contributo all'organizzazione di scuole ed iniziative didattiche mediante fornitura di risorse computazionali per esercitazioni
- Le attività del C3P sono documentate presso il sito web del DISC, all'indirizzo <http://www.chimica.unipd.it/c3p>

Area Scientifica di Riferimento:

03

Dipartimenti in condivisione:

FISICA E ASTRONOMIA "GALILEO GALILEI" - DFA
 GEOSCIENZE
 SCIENZE CHIMICHE - DiSC
 SCIENZE DEL FARMACO - DSF
 MEDICINA MOLECOLARE - DMM

(1) Si intendono le sole attrezzature a fini di ricerca e di elevato livello di specializzazione; il valore è tipicamente superiore a 100.000 euro (intesi complessivamente, per l'intera attrezzatura); il periodo di acquisizione/utilizzo deve coincidere almeno in parte con l'anno di riferimento. L'aspetto economico di dettaglio viene eventualmente trattato nel quadro III missione. Qui indicare solo l'aspetto scientifico. Vanno mappate anche le attrezzature nella disponibilità dell'ateneo (attraverso eventuali comodati ad es. con imprese o in virtù di accordi di accesso), e non solo quelle di proprietà dell'ateneo. Censire anche le risorse per il calcolo elettronico solo se di particolare rilievo

(2) Descrizione: indicare se è associata a uno/più Gruppi di ricerca; indicare anche se esiste un collegamento con laboratori o centri di ricerca.

(3) Classificazione ESFRI: [Alberatura versione 2012](#) (la versione 2013 non è attualmente disponibile).

(4) Fondi su cui è stato effettuato l'acquisto.

(5) Altre informazioni utili: Ricadute scientifiche di particolare rilievo collegabili all'attrezzatura durante l'anno in corso. Es.: progetti, pubblicazioni, invenzioni, esperimenti, brevetti, private etc.