

Raport privind vizita științifică în Departamentul de Materiale al Universității din Oxford, Marea Britanie

Solicitant: Dr. Floare Călin Gabriel

Echipa de cercetare: E4 – Sisteme moleculare și biomoleculare complexe

Tipul acțiunii: Vizită științifică (VS)

Destinația: Oxford, Marea Britanie

Perioada: 18-24 august 2019

Scopul deplasării: Vizita de lucru în Departamentul de Materiale al Universității din Oxford, a avut ca scop:

- Definitivarea acordului de colaborare în cadrul CASTEP Development Group (CDG) și validarea accesului la codul sursă al variantei academice și la sistemul de dezvoltare și de control al versiunilor al CASTEP
- Întâlnire cu Dr. Phil Hasnip și cu întregul grup de dezvoltatori activi ai programului de calcul CASTEP, pentru a stabili strategia colaborării în cadrul CDG și pentru a definitiva planul de cercetare
- Participare la CASTEP Developer Workshop 2019

Activități desfășurate:

CASTEP este un pachet de programe care utilizează teoria funcțională a densității (DFT), cu un set de bază folosind unde plane, pentru a calcula *ab initio* proprietățile electronice ale solidelor cristaline, suprafețelor, moleculelor, lichidelor și a materialelor amorfă. CASTEP permite optimizarea geometriei și dinamică moleculară în sisteme supuse unor operații de simetrie sau unor constrângeri, precum și calcularea unei mari varietăți de proprietăți derivate ale configurației electronice. De interes principal pentru grupul nostru este CASTEP-NMR, o extensie a CASTEP cu ajutorul căreia se pot simula spectrele de rezonanță magnetică nucleară în solide. Scopul principal al CASTEP Developer Workshop a fost de a ne familiariza cu principiile de proiectare și aspectele practice ale implementării DFT în cadrul CASTEP și de a facilita dezvoltarea de instrumente și extensii robuste de înaltă calitate. Workshop-ul a constat din prezentări și sesiuni practice care ne-au permis să lucrăm alături de actualii dezvoltatorii ai CASTEP. Subiectele abordate au fost:

- Principii de proiectare software
- Implementarea DFT în software
- Structura codului CASTEP
- Analiza fișierelor de calcul
- CASTEP în paralel
- Modalități moderne și specifice de testare și depanare a codului

Diversele subiecte au fost prezentate de către dezvoltatorii CASTEP dintre care amintim: Dr. Dominik Jochym (Rutherford Appleton Laboratory, STFC), Dr. Phil Hasnip (Universitatea din York), Dr. Peter Byrne (Universitatea din York), Prof. Stewart Clark (Universitatea din Durham), Prof. Keith Refson (Royal Holloway, Universitatea din Londra). Aceștia au fost prezenți și în timpul sesiunilor practice.

În paralel s-a desfășurat și CASTEP Training Workshop 2019, unde pe lângă cei menționați au mai avut prezentări Dr. Albert Bartok-Partay (STFC Rutherford Appleton Laboratory), Dr. Andrew Morris (University of Birmingham), Prof. Chris Pickard (University of Cambridge), Dr. Simone Sturniolo (STFC Rutherford Appleton Laboratory) și Prof. Jonathan Yates (University of Oxford). Prezentările acestora s-au axat în principal, pe descrierea practică la nivel de utilizator, a modalităților de calcul ale diferitelor proprietăți spectroscopice, cum ar fi spectre IR, Raman, RMN, EELS, un ghid de utilizare a pseudopotențialelor și a funcționalelor de schimb-corelare. S-au prezentat de asemenea și utilitarele AIRSS și MagresView.

Beneficiile vizitei de lucru:

- Încheierea colaborării academice între INCDTIM și CDG.
- În urma semnării acordului de colaborare grupul nostru are acum acces la codul sursă academic actual al programului CASTEP care va putea fi folosit și pentru cercetare. Menționăm că anterior INCDTIM avea o licență pentru varianta CASTEP și CASTEP-NMR integrate în programul Accelrys Materials Studio versiunea 5.5, precum și la codul sursă doar pentru această variantă comercială din anul 2010. Între timp aceste programe de calcul au evoluat în mod semnificativ, procesul de dezvoltare al variantelor academice fiind unul continuu. Acordul actual gratuit ne garantează accesul la cea mai recentă versiune precum și la toate variantele viitoare ale codului de calcul, în cadrul, acum, Biovia Materials Studio, acestea fiind contra cost.
- Familiarizare cu Mercurial, sistemul de dezvoltare și de control al versiunilor al CASTEP, precum și cu platforma BitBucket unde este actualmente întreținut și dezvoltat.
- Compilarea cu succes a CASTEP, atât varianta serială cât și cea paralelă, folosind, în această etapă, compilatorul gfortran și OpenMPI. Vizăm în continuare compilarea utilizând Intel Fortran și librăriile Intel MKL (Math Kernel Library).
- Din multitudinea de direcții de dezvoltare și idei de îmbunătățire și optimizare a CASTEP, în ceea ce ne privește, ne-am ales ca domeniu de studiu în perioada imediat următoare, dezvoltarea unor rutine sau utilitare care să faciliteze interfațarea dintre CASTEP și LiquidLib, o librărie de utilitare pentru analiza simulărilor de dinamică moleculară clasică și *ab initio* în lichid cu aplicații în experimente de împrăștiere a neutronilor.