CMAST Workshop: Computational MAterials Science and Technology @CRESCO ENEA

Data: 13/04/2015 -- *Orario:* 9:00-16:00

Presso: Salone Centrale della Sede Legale dell'ENEA, Via Giulio Romano 41, Roma

Scopo: La modellistica molecolare, tramite l'utilizzo intensivo di supercomputer ad alto parallelismo, permette il design e la caratterizzazione di nuovi materiali e molecole complesse per applicazioni in diversi settori tecnologici anche di interesse industriale. Le sfide provenienti dalla nuova programmazione Europea e dai settori applicativi rende necessario condividere competenze e strumenti per avviare una nuova progettualità. Quindi a valle della pubblicazione del Report CRESCO 2013, la comunità di utenti nel settore della modellistica molecolare dell'infrastruttura ENEA CRESCO si riunisce per discutere lo stato dell'arte e le prossime sfide.

Programma

Welcome coffee

9.00 Benvenuto, G. P. Celata, ENEA, Responsabile Unità Tecnica Tecnologie Avanzate per l'Energia e l'Industria
9:10 Apertura dei lavori, S. Migliori, ENEA, Responsabile Unità Tecnica ICT
9:20 Il Laboratorio Virtuale CMAST, M. Celino, ENEA

Prima sessione – Ricerca industriale: le nuove direzioni

9:30 Human Interface and IoT, A. Di Matteo, STMicroelectronics
9.50 Molecular modelling of new active materials for next generation PhotoVoltaic devices, L. Longo, ENI
10.10 SRMs materiali e processi, A. Di Cosmo, AVIO

Seconda sessione – Proprietà chimico-fisiche I

10.30 Theoretical spectroscopy by ab-initio methods, A. Mosca Conte, Università di Roma Tor Vergata
10:45 Multiscale simulations for electronic devices, A. Di Carlo, Università di Roma Tor Vergata
11:00 Electronic properties of two-dimensional materials and their interfaces, G. Cantele, CNR
11:15 Magnetic properties from ab initio electronic structure: applications to metal- and semiconductor-based spintronics materials, P. Alippi, CNR

11.30 Break (15 minuti)

Terza Sessione – Proprietà chimico-fisiche II

11:45 Molecular and materials synergistic computing: a virtual research environment, A. Laganà, Università di Perugia
12:00 Atomistic modeling in nanoscience at Sapienza-SBAI department, G. Zollo, Università di Roma Sapienza
12:15 Support of surface lab activities by ab-initio calculations in ENEA, F. Buonocore, ENEA
12:30 The modeling of "new generation" ionic liquids with ab-initio and classical molecular dynamics, E. Bodo, Università di Roma Sapienza

12.45 Pranzo (1:45 h)

Quarta Sessione – Polimeri, Biosistemi e calcolo parallelo

14:30 Structure-based design and simulation of biomolecules for nanobiotechnology applications, C. Arcangeli, ENEA
14:45 Approcci computazionali per lo studio dei sistemi biologici, A. Marabotti, Università di Salerno
15:00 Hybrid Particle Field Molecular Dynamics: sviluppo, applicazioni e calcolo parallelo ad alte prestazioni, G. Milano, Università di Salerno
15.15 Computational challenges in the modeling of highly flexible protein-DNA complexes: the p53 tetramer example, N. Besker, CINECA

Comitato organizzatore: C. Arcangeli, F. Buonocore, M. Celino, ENEA
Web page: http://www.enea.it/it/comunicazione/events/cmast_13apr15/Cresco