SEMINARI PROGETTO CRESCO – ANNO 2009

WORKSHOP

Scienza dei materiali computazionale: tecnologia e innovazione a livello atomico

Centro ENEA di Portici, 10 giugno 2009

Uno dei settori che ha maggiormente beneficiato della disponibilità di supercomputer con prestazioni dell'ordine di decine di TFlops, come per esempio CRESCO (www.cresco.enea.it) recentemente installato in ENEA Portici, è la modellistica molecolare per la progettazione, studio e ottimizzazione di nuovi materiali e molecole complesse. Modelli fisico-matematici, fino a poco tempo fa intrattabili sia analiticamente che numericamente, sono oggi alla base delle nuove metodiche computazionali che permettono analisi accurate a livello atomico di un ampio spettro di fenomeni e processi macroscopici di interesse anche industriale. Questo ha permesso alla Scienza dei Materiali Computazionale di divenire uno strumento di lavoro efficace e risolutivo per esempio nel settore delle nanotecnologie con ricadute trasversali su applicazioni in ambito energia, ambiente, elettronica, farmacologia etc. Tra gli altri, i codici di calcolo CPMD e CP2K, disponibili in ambiente ENEA-GRID e di cui sfruttano i servizi, permettono di studiare l'evoluzione temporale di materiali e molecole e loro interazioni, in diverse condizioni termodinamiche tenendo conto esplicitamente delle proprietà elettroniche di ogni atomo.

PROGRAMMA

10.00	10.15	**Silvio Migliori** Responsabile Progetto CRESCO, ENEA	*Saluto*
10.15	11.00	**Mauro Boero** Istituto di Chimica e Fisica dei Materiali, IPCMS-CNRS, Strasburgo	*CPMD: progettazione e caratterizzazione al computer di materiali innovativi*
11.00	11.30	**Mohamed Fawzi** Istituto di Chimica, Università di Berlino, Berlino	*CP2K: stato dell'arte e applicazioni*
11.30	12.00	**Andrea Marmiroli, Augusto Benvenuti** Numonyx, Agrate Brianza (MI)	*Materiali e processi alla scala nanometrica per memorie non volatili*
12.00	12.30	**Stefano Morganti** TecnoMarche, Ascoli Piceno	*Indirizzi per applicazioni e sviluppi delle nanotecnologie e dei nuovi materiali nel territorio marchigiano*
12.30	13.00	**Mauro Boero** Istituto di Chimica e Fisica dei Materiali, IPCMS-CNRS, Strasburgo	*CPMD: prospettive e ricadute industriali*
PRANZO			
14.00	14.30	**Marco Falzetti** Piattaforma Tecnologica Europea EuMaT, Roma	*Il ruolo della Piattaforma Tecnologica Europea sui Materiali Avanzati per l'Ingegneria (EuMaT) nel contesto delle attività di modellistica dei materiali*
14.30	15.00	**Andrea Bernardi** Istituto ENI Donegani, Novara	*Celle solari polimeriche: stato dell'arte e attività di ricerca presso ENI*
15.00	16.30	**Mohamed Fawzi** Istituto di Chimica, Università di Berlino, Berlino	*CP2K: stato dell'arte e suo uso efficiente*

Per informazioni: Massimo Celino, ENEA, email: massimo.celino@enea.it, tel.: 0630483871
Per motivi organizzativi si prega di registrarsi su www.cresco.enea.it