

**CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire)**  
**Relazione sulle attività - Anno 2021**

**Filippo De Angelis**

**1. Introduzione**

Il CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire, <http://www.cecaml.org/>) è un'organizzazione Europea che promuove la ricerca di frontiera nell'ambito delle scienze computazionali dedicate alla simulazione atomistica e molecolare applicata alla fisica ed alla chimica della materia condensata, alla scienza dei materiali ed alla chimica biologica e medica. Il CECAM è organizzato in un quartiere generale, sito presso l'EPFL di Losanna, Svizzera, e di 17 nodi distribuiti tra i vari paesi aderenti. Di seguito viene presentato l'elenco dei nodi con i relativi paesi di afferenza:

- [CECAM-AT](#)
- [CECAM-DE-JUELICH](#)
- [CECAM-DE-MMIP](#)
- [CECAM-DE-MMS](#)
- [CECAM-DE-SMSM](#)
- [CECAM-ES](#)
- [CECAM-FI](#)
- [CECAM-FR-GSO](#)
- [CECAM-FR-MOSER](#)
- [CECAM-FR-RA](#)
- [CECAM-IRL](#)
- [CECAM-ISR](#)
- [CECAM-IT-SIMUL](#)
- [CECAM-IT-SISSA-SNS](#)
- [CECAM-NL](#)
- [CECAM-UK-DARESBURY](#)
- [CECAM-UK-JCMAXWELL](#)

## Di seguito si riporta l'elenco delle Istituzioni partecipanti.

Austria	<b>CMS</b> (Center for Computational Materials Science)
Belgium	<b>F.R.S.-FNRS</b> (Fonds de la Recherche Scientifique) <b>FWO</b> (Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen)
China	<b>IoP</b> (Chinese Academy of Sciences) <b>CSRC</b> Beijing
Finland	<b>Aalto University</b>
France	<b>CEA</b> (Commissariat à l'Energie Atomique) <b>CNRS</b> (Centre National de la Recherche Scientifique)
Germany	<b>DFG</b> (Deutsche Forschungsgemeinschaft) <b>MPG</b> (Max Planck Gesellschaft) <b>FZJ</b> (Forschungszentrum Jülich GmbH)
Ireland	<b>IUA</b> (Irish Universities Association)
Israel	<b>TAU</b> (Tel Aviv University)
Italy	<b>CNR</b> (Consiglio Nazionale delle Ricerche) <b>IIT</b> (Italian Institute of Technology) <b>SISSA</b> (Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati) <b>SNS</b> (Scuola Normale Superiore) <b>UNIBO+CINECA</b> (University of Bologna and the Italian Supercomputer Center)
Slovenia	<b>NIC + UL FMF</b> (National Institute of Chemistry and University of Ljubljana)
Spain	<b>MINECO</b> (Ministerio de Ciencia e Innovación)
Sweden	<b>Uppsala University</b>
Switzerland	<b>EPFL</b> (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne) <b>FNS-SNF</b> (Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique; Schweizerischer Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung)

## 2. Attività significative per l'Italia e per il CNR svolte nel 2021 dall'Organismo di cui si è Rappresentante

L'Italia partecipa al CECAM Council con cinque Istituzioni. L'Italia è di fatto il paese con il maggior numero di Istituzioni nel CECAM Council.

Le attività del CECAM si esplicano tramite le azioni scientifiche dei nodi ed attraverso l'organizzazione di workshop, scuole e conferenze internazionali, per i quali il CECAM offre un sostegno medio di ~12.000 euro ad evento, oltre che sostegno logistico ed organizzativo (segreteria, pagine web, gestione contatti, prenotazione hotel, etc.).

Nel 2021 sono state organizzate 36 workshop, di cui 11 organizzati da ricercatori di istituzioni italiane e ben 5 hanno visto l'organizzazione da parte di ricercatori e ricercatrici CNR, si veda Appendice A.

Per il 2022 sono in programma o sono già stati effettuati svariati workshops, di cui molti vedono ricercatori e ricercatrici Italiani tra gli organizzatori. Numerosi sono inoltre i ricercatori CNR anche tra gli invited speaker e i partecipanti alle iniziative CECAM.

## 3. Attività svolte come Rappresentante nel 2021 all'interno dell'Organismo e indicazioni circa le ricadute sulla comunità scientifica nazionale

Durante il 2021 come rappresentante CNR ho partecipato al CECAM Council Meeting generale, tenutosi presso la sede di Losanna a Novembre 2021. Non ho partecipato di persona non essendo disponibili fondi per la trasferta, ma ho partecipato on line.

Durante il meeting si sono discusse le linee finanziarie per il 2021-2022 e si sono valutate le attività svolte nel 2020. E' stata inoltre attuata la variazione allo statuto del CECAM proposta nel 2018, al fine di favorire attività esercitate da ricercatori appartenenti a stati non Europei. E' stata inoltre lanciata la call per il nuovo direttore CECAM, addivenendo alla formazione di una solida short list. Il nuovo direttore verrà nominato nel 2022.

## 4. Valutazione della partecipazione alla Union in rapporto ai benefici e ai costi della membership

La presenza CNR nel CECAM è fondamentale per mantenere e rinforzare il peso dell'Italia nella comunità computazionale Europea, che di fatto si identifica largamente nel CECAM come principale organismo

organizzativo e di rappresentanza. Da un punto di vista strettamente costo/beneficio, il supporto all'organizzazione degli eventi eccede sicuramente l'ammontare della fee pagata. È quindi ovvio come i benefici anche solo economici nell'accesso a fondi siano nettamente in favore del personale CNR. Sostenendo il CECAM il CNR ha l'opportunità di rinforzare ulteriormente il peso dell'Ente nel calcolo scientifico e nella simulazione, lanciando iniziative in settori di interesse all'interfaccia tra fisica, scienza dei materiali, chimica nonché chimica biologica e medica. Tali attività sono ampiamente riconosciute a livello Europeo e molte call for proposals nel programma H2020 sono inerenti alle scienze computazionali, al modeling ed alla simulazione. Recentemente il CECAM ha coordinato la presentazione di iniziative Europee che hanno attratto considerevoli finanziamenti, quali ad esempio il progetto E-CAM. Questo progetto, finanziato in H2020, si prefigge la creazione di una infrastruttura elettronica (e-infrastructure) dedicata allo sviluppo di software, alla formazione ed alla consulenza nell'ambito del modeling e della simulazione. La partecipazione CNR al CECAM può anche rappresentare un'opportunità di accesso ai finanziamenti Europei altrimenti difficilmente accessibili al singolo ricercatore/ricercatrice operante nel campo del modeling e della simulazione.

#### **5. Valutazioni sulla partecipazione italiana con proposte per migliorare l'interesse e il coinvolgimento**

Mentre in passato si è riscontrata una generale riluttanza da parte del personale CNR non precedentemente coinvolto in iniziative CECAM a presentare domande per workshop finanziati dal CECAM, recentemente numerosi ricercatori e ricercatrici CNR sono state coinvolte nell'organizzazione di workshop. Ritengo personalmente molto importante valorizzare tale opportunità inserendo link alla call for proposals nei siti web dei Dipartimenti del CNR e nel sito Istituzionale dell'Ente.

#### **6. Esperti italiani con ruoli apicali nominati nell'ambito dell'Organismo o in Commissioni e Programmi correlati (di cui si è a conoscenza)**

Il vice-direttore del CECAM è la Dr.ssa Sara Bonella, proveniente dall'Università di Roma La Sapienza.

#### **8. Conclusioni**

Il CECAM si pone come referente Europeo nelle attività di modeling e simulazione computazionale, riconosciute nelle maggiori call H2020 come centrali allo sviluppo scientifico e tecnologico. La partecipazione del CNR al CECAM è strategica sia in quanto permette al personale dell'Ente di essere rappresentato nelle sedi decisionali, sia per avere accesso a finanziamenti per organizzazione di workshop. L'Italia è il paese con il maggior numero di istituzioni membri, potendo quindi esercitare una sinergia favorevole al sistema della ricerca italiana. Si sostiene pienamente la prosecuzione della partecipazione CNR al CECAM.

Firma



Perugia, 21/03/2022

## Appendice A

### Partecipazione di ricercatori e ricercatrici CNR come organizzatori di attività CECAM 2021



October 21, 2021 – October 22, 2021

#### RECENT DEVELOPMENTS IN QUANTUM MONTE CARLO

Type

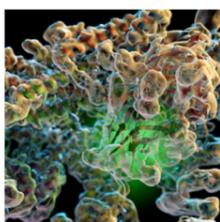
Flagship Workshop

Location

Rome, Italy

Organizer

Fabio Affinito (CINECA),  
Giovanni Bachelet (Sapienza Università di Roma),  
Lilia Boeri (Sapienza Università di Roma),  
David Ceperley (University of Illinois at Urbana-Champaign),  
Irene Iacuitto (CNR),  
Gaetano Senatore (Università degli Studi di Trieste)



October 12, 2021 – October 16, 2021

#### EMERGING THEORETICAL APPROACHES TO COMPLEMENT SINGLE-PARTICLE CRYO-ELECTRON MICROSCOPY

Type

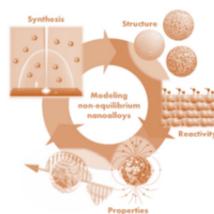
Flagship Workshop

Location

CECAM-IT-SISSA-SNS

Organizer

Michael Feig (Michigan State University, East Lansing),  
Gabriel Lander (Scripps Research),  
Alessandra Magistrato (CNR-IOM@SISSA),  
Giulia Palermo (University of California Riverside),  
Joanna Trylska (University of Warsaw)



July 7, 2021 – July 9, 2021

#### MULTI-APPROACH MODELING OF ALLOY NANOPARTICLES: FROM NON-EQUILIBRIUM SYNTHESIS TO STRUCTURAL AND FUNCTIONAL PROPERTIES

Type

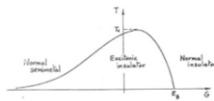
Flagship Workshop

Location

On-line event

Organizer

Vincenzo Amendola (University of Padova),  
Daniel Forrer (ICMATE - CNR),  
Tatiana Itina (CNRS St Etienne (France))



June 21, 2021 – June 23, 2021 (Postponed from 2020-2021 program)

## EXCITONIC AND COMPETING ORDERS IN LOW-DIMENSIONAL MATERIALS

Type

Flagship Workshop

Location

online meeting, hosted by CECAM-HQ

Organizer

Elisa Molinari (Uni Modena e Reggio Emilia & CNR - Istituto Nanoscienze),  
Massimo Rontani (Cnr-Nano)



June 14, 2021 – June 17, 2021 (Postponed from 2020-2021 program)

## NONEQUILIBRIUM DYNAMICAL SOLVENT EFFECTS ON EXCITED STATES: FROM SPECTROSCOPY TO PHOTOREACTIVITY

Type

Flagship Workshop

Location

CECAM-FR-MOSER

Organizer

Johannes Gierschner (Madrid Institute for Advanced Studies),  
Francesca Ingrosso (LPCT UMR 7019 Université de Lorraine-CNRS),  
Mariachiara Pastore (CNRS),  
Giacomo Prampolini (ICCOM-CNR),  
Fabrizio Santoro (ICCOM-CNR)