



Dr. Filippo De Angelis

Istituto CNR di Scienze e Tecnologie Molecolari (CNR-ISTM), Sede di Perugia



Computational Laboratory for Hybrid/Organic Photovoltaics

Via Elce di Sotto, 8 I-06123, Perugia, ITALY.

Tel. + 39 075 585 5523 - Fax +39 075 585 5606

E-mail filippo@thch.unipg.it - Web page: www.clhyo.org

Relazione Annuale Attività CNR presso il CECAM

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 18 nodi distribuiti tra i vari paesi aderenti. Di seguito viene presentato l'elenco dei nodi con i relativi paesi di afferenza:

- **CECAM-AT**
- **CECAM-FI**
- **CECAM-FR-MOSER**
- **CECAM-FR-RA**
- **CECAM-FR-GSO**
- **CECAM-DE-MM1P**
- **CECAM-DE-JUELICH**
- **CECAM-DE-MMS**
- **CECAM-DE-SMSM**
- **CECAM-IRL**
- **CECAM-ISR**
- **CECAM-IT-SIDE**
- **CECAM-IT-SMART**
- **CECAM-IT-SIMUL**
- **CECAM-NL**
- **CECAM-ES**
- **CECAM-UK-HARTREE**
- **CECAM-UK-JCMAXWELL**

Per l'Italia i nodi sono SIMUL-Istituto Italiano di Tecnologia (IIT), SMART - Scuola Normale Superiore (SNS), e SIDE - Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA).

Il CECAM raccoglie numerose Istituzioni Europee, di seguito elencate:

Austria	CMS (Center for Computational Materials Science)
Belgium	F.R.S.-FNRS (Fonds de la Recherche Scientifique) FWO (Fonds Wetenschappelijk Onderzoek-Vlaanderen)
Finland	Aalto University
France	CEA (Commissariat à l'Energie Atomique) CNRS (Centre National de la Recherche Scientifique)

Germany	DFG (Deutsche Forschungsgemeinschaft) MPG (Max Planck Gesellschaft) FZJ (Forschungszentrum Jülich GmbH)
Ireland	IUA (Irish Universities Association)
Israel	TAU (Tel Aviv University)
Italy	CNR (Consiglio Nazionale delle Ricerche) IIT (Italian Institute of Technology) SISSA (Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati) SNS (Scuola Normale Superiore)
Spain	MICINN (Ministerio de Ciencia e Innovación)
Switzerland	EPFL (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne) FNS-SNF (Fonds National Suisse de la Recherche Scientifique; Schweizerischer Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung)
The Netherlands	NWO (The Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek) UvA (Universiteit van Amsterdam)
United Kingdom	STFC (Science and Technology Facilities Council) EPSRC (Engineering and Physical Sciences Research Council)

L'Italia partecipa al CECAM Council con quattro Istituzioni, il CNR e le tre Istituzioni legate ai nodi ovvero IIT, SNS e SISSA. 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 2015 sono stati organizzati 48 workshop, di cui 6 hanno visto l'organizzazione da parte di ricercatori e ricercatrici CNR, si veda Appendice A. Per il 2016 sono in programma o sono già stati effettuati 53 workshops, di cui 5 vedono ricercatori e ricercatrici CNR tra gli organizzatori, Appendice A. Numerosi sono inoltre i ricercatori CNR anche tra gli invited speaker e i partecipanti alle iniziative CECAM. Attualmente è aperta la call for workshop proposals per il 2017, <http://www.cecarn.org/submitting.html>. Per favorire la più ampia partecipazione possibile da parte del personale CNR, sono stati inviati diversi messaggi alla comunità scientifica, offrendo informazioni e sostegno alle proposte.

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. 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 modelling 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 modelling 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.

Nel 2015-2016 si sono svolte due riunioni (Novembre 2015 e Aprile 2016) del CECAM Council, nelle quali il CNR ha partecipato con i propri rappresentanti. Durante le due riunioni sono state lanciate le linee guida per le future attività CECAM ed è stato finalizzato il processo di selezione del nuovo Direttore del CECAM. Inoltre si è rinegoziata la membership fee per la partecipazione del CNR al CECAM, omogeneizzando la quota versata dal CNR a quella versata dagli altri Enti partecipanti, con un notevole risparmio economico per l'Ente previsto per le successive sottoscrizioni.

Appendice A

Partecipazione di ricercatori CNR alle attività CECAM 2015-2016

2015

Emergent structural and electronic phenomena at interfaces of nanoscale oxides

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

April 8, 2015 - April 10, 2015

- Jacek Goniakowski
Institut des Nanosciences de Paris, France, France
- Alessandro Fortunelli
Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Institute for the Chemistry of Organometallic Compounds (ICCOM), Pisa, Italy, Italy
- Henrik Grönbeck
Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden
- Alex Shluger
University College London, United Kingdom

Computational Many-Body physics in the era of artificial gauge fields

Location : LMU Munich (Theresienstr 37, 80333 Munich, Germany)

April 8, 2015 - April 10, 2015

- Lode Pollet
LMU Munich, Germany
- Massimo Capone
International School for Advanced Studies (SISSA), Italy
- Andrea Trombettoni
CNR-IOM DEMOCRITOS and SISSA (Trieste), Italy

Electron-vibration coupling : theoretical and numerical challenges

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

May 27, 2015 - May 29, 2015

- Andrea Marini
National Research Council, Italy
- Xavier Gonze
Université Catholique de Louvain, Belgium
- Claudia Draxl
Humboldt-Universität Berlin, Germany

The Physics of Protein Self-Assembly

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

June 22, 2015 - June 24, 2015

- Jennifer McManus
National University of Ireland Maynooth, Ireland
- Neer Asherie
Yeshiva University, USA
- Patrick Charbonneau
Duke University, USA

- Emanuela Zaccarelli
CNR-ISC Istituto dei Sistemi Complessi, Italy

Perovskite solar cells: the quest for a theoretical description

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

August 25, 2015 - August 28, 2015

- Paolo Umari
University of Padova, Italy
- Edoardo Mosconi
Istituto CNR di Scienze e Tecnologie Molecolari (CNR-ISTM), Italy
- Filippo De Angelis
CNR, Italy
- Jacky Even
INSA Rennes, UMR FOTON, 20 avenue des buttes de Coesmes, CS 70839, 35708 Rennes Cedex 7, France
- Giacomo Giorgi
University of Tokyo, Japan

Computational plasmonics: an ab initio and multiscale perspective

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

November 2, 2015 - November 4, 2015

- Stefano Corni
CNR-NANO, Institute of nanoscience, Modena, Italy
- Arrigo Calzolari
CNR-NANO, Institute of nanoscience, Modena, Italy

2016

Structural and Functional Annotation of Bioinorganic Systems: Perspectives and Challenges from Theory and Experiments

Location : CECAM-IT-SNS

May 23, 2016 - May 25, 2016

- Giuseppe Brancato
Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy
- Vincenzo Barone
Scuola Normale Superiore Pisa, Italy
- Paolo Carloni
German Research School for Simulation Sciences Julich, Germany
- Alessandra Magistrato
CNR-IOM@SISSA, Italy
- Giuseppe Legname
Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste, Italy
- Rachel Nechushtai
Hebrew University of Jerusalem, Israel, Israel

Atomistic simulations in prebiotic chemistry – a dialog between experiment and theory

Location : CECAM-FR-IDF, University Pierre and Marie Curie, Paris, France

June 20, 2016 - June 22, 2016

- A. Marco Saitta
University Pierre and Marie Curie, Paris, France

- Fabio Pietrucci
UPMC - Sorbonne Paris, France
- Judit Sponer
Institute of Biophysics, Brno, Czech Republic
- Franz Saija
Istituto per i Processi Chimico-Fisici - CNR, Italy
- Rodolphe Vuilleumier
Ecole Normale Supérieure, Paris, France

Interface processes in photochemical water splitting: Theory meets experiment

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

September 27, 2016 - September 30, 2016

- Mariachiara Pastore
CNR-ISTM & CNRS, France
- Ilaria Ciofini
CNRS, France
- Stefano Fabris
CNR-IOM DEMOCRITOS Simulation Center and SISSA, Trieste, Italy
- Simone Piccinin
CNR-IOM DEMOCRITOS Simulation Center, Trieste, Italy

Computational methods towards engineering novel correlated materials

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

October 24, 2016 - October 26, 2016

- Markus Aichhorn
Institute of Theoretical and Computational Physics, University of Technology Graz, Austria
- Gianluca Giovannetti
CNR-IOM and Sissa, Italy
- Philipp Hansmann
Max Planck Institute for Solid State Research, Germany

Ultra-fast phenomena in quantum physics: a challenge for theory & experiment

Location : CECAM-HQ-EPFL, Lausanne, Switzerland

April 11, 2016 - April 15, 2016

- Andrea Marini
CNR-ISM, Italy
- Gianluca Stefanucci
University of Rome, Tor Vergata, Italy, Italy
- Cristian Manzoni
IFN-CNR Dipartimento di Fisica, Politecnico di Milano, Italy
- Deborah Prezzi
CNR-NANO, Modena, Italy