

Esiti bando progetti di calcolo DPM@CASPUR

In data 20 Maggio 2008 si è riunita presso la sede del consorzio CASPUR sita in via dei Tizii 6, 00185 ROMA, la Commissione mista CNR-CASPUR per l'assegnazione delle risorse di calcolo inerenti il bando DPM@CASPUR pubblicato in data 20 Aprile 2008. La commissione era così composta: Vincenzo Barone (Presidente), Amedeo Palma (membro), Nico Sanna (membro).

Il bando suddetto, come esplicitamente indicato nella nota di annuncio, è stato dedicato a gruppi di ricerca CNR afferenti al Dipartimento di Progettazione Molecolare, ed in particolare al Progetto Dipartimentale "Modelling predittivo delle funzionalità in sistemi nanostrutturati di interesse biologico e tecnologico".

Per esigenze legate alle modalità di attuazione delle attività sui sistemi di calcolo CASPUR e CNR facenti parte della convenzione CASPUR-DPM in atto, la Commissione ha deciso all'unanimità la riduzione delle ore di calcolo assegnate di ca. il 20% rispetto a quanto previsto nel bando (83000 ore in luogo di 100000 ore) e di conseguenza è stato ridotto il periodo di usufrutto delle risorse di calcolo dal 1 Luglio 2008 al 31 Dicembre 2008.

L'elenco dei partecipanti al bando DPM@CASPUR a cui verrà notificato per posta elettronica il risultato della valutazione della Commissione e le istruzioni per la fruizione del servizio, nonché l'esito della valutazione, viene riportato in ordine di ricevimento nella tabella allegata.

<i>Proponente</i>	<i>Istituto</i>	<i>Titolo</i>	<i>Area</i>	<i>Ore richieste</i>	<i>Ore assegnate</i>	<i>Esito valutazione</i>
De Rosa M. Cristina	ICRM	<i>Predicting the structural model for human TCR-collagenII-MHC complex</i>	Life Science	8000	5000	Approvato
Pochetti Giorgio	IC	<i>Proprietà strutturali ed energetiche del complesso inibitore-metalloproteinasi di matrice</i>	Chemistry	3000	3000	Approvato
Miliardi Danilo	IBB	<i>MD simulations of the early steps of Islet Amyloid Polypeptide (IAPP) aggregation: molecular routes to Type 2 Diabetes pathogenesis</i>	Chemistry / Life Science	30000	8000	Approvato
Venturini Alessandro	ISOF	<i>Incorporazione di peptidi nelle membrane fosfolipidiche: Studio Modellistico mediante calcoli di Dinamica Molecolare</i>	Chemistry / Life Science	5000	5000	Approvato
Caliandro Rocco	IC	<i>Crystallographic computing</i>	Chemistry / Life Science	5000	5000	Approvato
Monti Susanna	IPCF	<i>Sequence-specific DNA sensing on Si surfaces</i>	Chemistry / Life Science	20000	20000	Approvato
Ienco Andrea	ICCOM	<i>Calcoli sulla reattività dell'idrogeno molecolare su centri metallici</i>	Chemistry	4000	4000	Approvato
Ghio Caterina	IPCF	<i>Computer simulations of antioxidants and metal cations in water</i>	Chemistry / Physics	8000	8000	Approvato
Degli Esposti Alessandra	ISOF	<i>Individuazione dell'origine delle proprietà ottiche di complessi del Cu(I)</i>	Chemistry	5000	5000	Approvato
Amodeo Pietro	ICB	<i>Novel multiscale approach for Molecular Dynamics: a "coarse-grained" model based on analysis of collective motions in all-atom simulations</i>	Chemistry / Life Science	30000	8000	Approvato
La Penna Giovanni	ICCOM	<i>L'inibizione dell'idrogenasi da parte di ossigeno</i>	Chemistry / Life Science	6000	6000	Approvato
Vitagliano Luigi	IBB	<i>Stability and evolution of amyloid fibers and oligomers in apolar and membrane environments</i>	Chemistry / Life Science	15000	6000	Approvato
TOTALE				139000	83000	