



Modelling the mineralogical word: how and why



14/15 giugno 2016

Dipartimento di Scienze della Terra,
Aula "Sergio Lucchesi" Sapienza Università di Roma



Giornate di studio organizzate dal Gruppo Nazionale di Mineralogia, con il patrocinio della Società Italiana di Mineralogia e Petrologia e della Società Geochimica Italiana

14 giugno

14:30 -15.30

Registrazione presso il Dipartimento di Scienze della Terra, Aula "Sergio Lucchesi" Sapienza Università di Roma
Piazzale Aldo Moro 5, 00185 Roma

15.30 - 15.40

Saluto del Presidente GNM Paola Comodi
(Università di Perugia)

15:40 -16.40

Keynote talk: **Artem R. Oganov** - (SUNY – Stony Brook)

Discovering new materials, minerals and phenomena with evolutionary algorithms

16:40-17.20

Donato Belmonte – (Università di Genova)
Ab initio thermodynamics of deep mantle processes: the mineral physics perspective

17:20-18.00

Manuele Faccenda – (Università di Padova)
Petrological numerical modelling of the convective Earth

18.00-18.30

Sessione poster e aperitivo scientifico

15 giugno

9:30 -10.10

Claudia Stangarone – (Università di Parma)
Unravelling vibrational frequencies of crystal lattices: quantum mechanical approach and possible application in Planetary Science

10.10-10.50

Marcello Merli – (Università di Palermo)
Catastrophes in the electron density: what happens to a crystal when it approaches the phase transition point

10.50-11.10

Pausa caffè

11.10-11.50

Celestino Angeli – (Università di Ferrara)
Modelling the diffusion process in microporous materials: environmental and technological impacts

11:50-12.10

Marco Bruno - (Università di Torino)
On the simulation of the crystal surfaces

12.10- 13.00

Discussione generale