



AVVISO N. 305/2017
selezione pubblica, per titoli ed esami, per l'attribuzione di
n. 1 assegno di ricerca "post dottorale" (categoria B)
presso il Dipartimento Energia.

Il Politecnico di Torino intende attribuire n. 1 assegno per lo svolgimento di attività di ricerca nell'ambito del programma di ricerca: **"Modellazione e simulazione molecolare di interfacce per una migliore comprensione della meccanica del contatto e delle sue applicazioni energetiche"**, di cui alla scheda allegata.

Campi di ricerca:	Engineering; Physics; Chemistry.
Settore Scientifico Disciplinare:	ING-IND/10 – Fisica Tecnica Industriale
Durata assegno:	1 anno
Importo lordo assegno:	Euro 22.000,00 annui lordi.

La domanda di partecipazione alla selezione, redatta sull'apposito modulo e corredata della documentazione indicata nel bando generale per l'attribuzione di assegni di ricerca, dovrà essere presentata presso l'Area Risorse Umane e Organizzazione - Ufficio Valutazioni Comparative e Assegni di ricerca – stanza n. 6 – **dal lunedì al giovedì dalle ore 9.00 alle ore 12.00 e dalle ore 14.00 alle ore 16.00, il venerdì dalle ore 9.00 alle ore 12.00**, ovvero inviata via posta, corriere o tramite fax, allegando copia di un documento di riconoscimento in corso di validità, al n. 0110905919, **entro le ore 16.00 del giorno 21/12/2017**. La data di arrivo sarà comprovata dal timbro a calendario apposto dall'ufficio. Non saranno ritenute valide le domande pervenute oltre il suddetto termine.

La selezione verrà effettuata, per titoli e colloquio, secondo il programma d'esame sotto indicato:

Titolo di studio richiesto per la partecipazione:	Dottorato di ricerca in settori attinenti al programma di ricerca, o titolo universitario straniero equivalente.
Campi su cui dovranno vertere i titoli:	– Conoscenze di trasmissione del calore, trasporto di massa e termodinamica applicata; – Capacità di programmazione mediante linguaggi di alto livello (ad esempio Matlab, Python); – E' richiesta una esperienza pregressa con una tecnica di simulazione numerica della dinamica molecolare (Molecular Dynamics - MD) ed i relativi software: in particolare, la familiarità con LAMMPS (o GROMACS) sarà un valore aggiunto; – E' richiesta una esperienza pregressa in merito al calcolo delle funzioni radiali di distribuzione (Radial Distribution Function – RDF) e dei potenziali medi di interazione (Potential of Mean Force – PMF), in modo da poter inizializzare correttamente i modelli per la dinamica molecolare a "grana grossa" (Coarse-Grained Molecular Dynamics - GCMD); – Buona comprensione della fisica delle nanostrutture e precedenti esperienze con il calcolo ad alte prestazioni (High-Performing Computing - HPC) sono auspicabili; – Expertise in heat and mass transfer and applied thermodynamics is mandatory; – Proficiency in high-level programming language (e.g. Matlab,



	Python); – Previous experience with molecular dynamics (MD) technique and software is required, and a proved experience with LAMMPS (or GROMACS) will be a plus; – Previous experience about computing radial distribution functions (RDFs) and potential of mean forces (PMFs) is required, in order to properly parametrize models for coarse-grained molecular dynamics (GCMD); – Good understanding of the physics of nanostructures and previous experience with high-performing computing (HPC) is highly desirable.
Temì del colloquio:	Il colloquio verterà sulla valutazione delle capacità dei candidati in merito alla modellazione numerica multi-scala dei fenomeni molecolari rilevanti per una migliore comprensione della meccanica del contatto, in particolare per comprendere l'idrofobia/idrofilia delle superfici, l'adesione e l'attrito superficiale. Il colloquio verterà sulla dinamica molecolare classica (Molecular Dynamics - MD) e sugli strumenti più adatti alla sua simulazione numerica, in particolare LAMMPS e GROMACS. Particolare enfasi verrà posta sulle tecniche per l'accelerazione delle simulazioni, basate sul concetto di "grana grossa" (Coarse-Grained Molecular Dynamics – GCMD). Il colloquio approfondirà le proprietà molecolari dei fluidi in prossimità delle pareti e le loro configurazioni in funzione delle proprietà delle superfici stesse. Saranno discussi richiami di trasmissione del calore, in particolare conduzione ed irraggiamento, e termodinamica, nonché le applicazioni in ambito energetico. I candidati/e dovranno dimostrare una buona conoscenza della classificazione MODA (MATERIALS MODelling) adottata dal European Materials Modelling Council (EMMC, https://emmc.info/). Saranno, inoltre, discussi i titoli ammessi a valutazione e accertata la conoscenza della lingua inglese e per i cittadini stranieri anche di quella italiana. The interview will focus on evaluating candidate capacities on multi-scale numerical modeling of relevant molecular phenomena for a better understanding of contact mechanics, in particular to understand surface hydrophobicity/hydrophilicity, adhesion and surface friction. The interview will focus on the molecular dynamics (MD) and the simulation tools most suitable for its numerical simulation, in particular LAMMPS and GROMACS. Particular emphasis will be placed on techniques for accelerating simulations, based on the concept of coarse-grained molecular dynamics (GCMD). The interview will deepen the molecular properties of fluids near surfaces and their structural configurations depending on the surface properties. Heat transfer, in particular conduction and radiation, and thermodynamics, as well as applications in the energy field will be discussed. Candidates will have to demonstrate a good understanding of the MODA classification (MATERIALS MODelling) adopted by the European Materials Modeling Council (EMMC, https://emmc.info/).

CALENDARIO DELLE PROVE:

Affissione valutazione titoli:	elenco	l'11.01.2018 – ore 11,30 alla bacheca del Dipartimento Energia del Politecnico di Torino – Torino - C.so Duca degli Abruzzi, 24
Colloquio:		l'11.01.2018 – ore 12,00 presso il Dipartimento Energia - Politecnico di Torino – Torino – C.so Duca degli Abruzzi, 24

**Titoli:**

Sono valutati, purché in settori attinenti a quello per il quale è bandito l'assegno, i seguenti titoli:

- il dottorato di ricerca fino a 10 punti;
- il voto di laurea fino a 5 punti;
- pubblicazioni fino a 15 punti;
- i diplomi di specializzazione e gli attestati di frequenza di corsi di perfezionamento post laurea conseguiti in Italia o all'estero fino a 10 punti;
- lo svolgimento di documentata attività di ricerca (compresa quella effettuata nell'ambito dello svolgimento della tesi di laurea o di dottorato) presso soggetti pubblici e privati con contratti, borse di studio o incarichi, sia in Italia che all'estero, fino a 20 punti con un massimo di 4 punti all'anno.

Coloro che hanno prodotto domanda dovranno presentarsi nel luogo, giorno ed ora su indicati, muniti di valido documento di riconoscimento.

Il bando generale per l'attribuzione degli assegni di ricerca, cui si rinvia per gli aspetti procedurali, e il "Regolamento per l'attribuzione di assegni per la collaborazione ad attività di ricerca" sono disponibili su internet al seguente indirizzo: <http://www.swas.polito.it/services/concorsi/>.

Torino, 11.12.2017

IL DIRETTORE GENERALE
(Dott. Aldo TOMMASIN)
f.to A. TOMMASIN

**Allegato A)**

DENOMINAZIONE PROGRAMMA DI RICERCA: Modellazione e simulazione molecolare di interfacce per una migliore comprensione della meccanica del contatto e delle sue applicazioni energetiche Modeling and molecular simulation of interfaces for a better understanding of the contact mechanics and its energy applications
ACRONIMO PROGRAMMA DI RICERCA OYSTER
DURATA E DATA DI INIZIO DEL PROGRAMMA DI RICERCA 48 mesi dal 01/02/2018 al 31/01/2022
CONTENUTO E FINALITÀ PROGRAMMA DI RICERCA: Il programma di ricerca riguarda lo sviluppo di strumenti predittivi di modellazione e simulazione per i materiali, validati sperimentalmente, per una migliore comprensione della meccanica del contatto, in particolare per comprendere l'idrofobia/idrofilia delle superfici, l'adesione e l'attrito superficiale da un punto di vista molecolare. Questo programma di ricerca fa parte del progetto OYSTER ("Open characterisation and modelling environment to drive innovation in advanced nano-architected and bio-inspired hard/soft interfaces", H2020 grant, Grant Agreement number: 760827) ed in particolare del pacchetto di lavoro WP3 "Interdisciplinary predictive materials modelling" di cui il Politecnico di Torino è responsabile. The research programme is about developing predictive materials modelling tools validated by experiments for better insights into contact mechanics, namely for understanding hydrophobicity/hydrophilicity, adhesion and friction from the molecular point of view. This research programme is part of the OYSTER research project ("Open characterisation and modelling environment to drive innovation in advanced nano-architected and bio-inspired hard/soft interfaces", H2020 grant, Grant Agreement number: 760827), in particular the WP3 "Interdisciplinary predictive materials modelling" lead by Politecnico di Torino.
PRESTAZIONI RICHIESTE ALL'ASSEGNIISTA DI RICERCA L'assegnista di ricerca dovrà: – Identificare l'architettura generale di modellazione e simulazione, compresi i requisiti HPC, le schede tecniche MODA e la piattaforma di simulazione aperta dell'UE; – Eseguire simulazioni atomistiche (Molecular Dynamics, MD) di interfacce solido/solido e solido/liquido, inclusa la chimica superficiale; – Stimare il potenziale di forza media (Potential of Mean Force, PMF) tra due superfici per investigare l'adesione e, in particolare, i limiti di adesione; – Eseguire simulazioni di dinamica molecolare a "grana grossa" (Coarse Grained Molecular Dynamics, CGMD) mediante campi di forza validati mediante esperimenti; – Farsi carico di tutte le incombenze previste dal piano di lavoro del progetto OYSTER (es. interazioni con i partner, reportistica, incontri di avanzamento, etc). The research fellow will have: – To identify the overall modelling and simulation architecture, including HPC requirements, MODA datasheets and EU Open Simulation Platforms; – To perform atomistic simulations (Molecular Dynamics, MD) of solid/solid and solid/liquid interfaces, including surface chemistry; – To estimate the potential of mean force (Potential of Mean Force, PMF) between two surfaces for investigating adhesion and, in particular, adhesion limits; – To perform coarse-grained molecular dynamics (Coarse Grained Molecular Dynamics, CGMD) simulations by validated coarse-grained force fields; – To take care of all duties expected by the work plan of the OYSTER project (e.g. interactions with partners, reports, progress meetings, deliverables, etc).

