



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

PREVENTIVO SCIENTIFICO TRIENNIO 2016-2018

del

DIPARTIMENTO DI FISICA

Approvato dal Consiglio del Dipartimento di Fisica

in data 10 Marzo 2016



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

## Indice

1. PRESENTAZIONE GENERALE .....	3
2. SETTORI DI RICERCA DELLO "EUROPEAN RESEARCH COUNCIL" (ERC).....	5
3. PREVENTIVI RICERCA.....	9
Settore "Fisica delle Interazioni Fondamentali".....	9
Sotto-settore 02A1 "Fisica sperimentale delle Interazioni Fondamentali".....	9
Sotto-settore 02A2 "Fisica teorica delle Interazioni Fondamentali" .....	15
Settore "Fisica della Materia" .....	26
Sotto-settore 02B1 "Fisica sperimentale della Materia".....	26
Sotto-settore 02B2 "Fisica teorica della Materia" .....	41
Sotto-settore 02B3 "Fisica Applicata".....	53
Settore "Astronomia, Astrofisica e Fisica della Terra e Pianeti" .....	58
Sotto-settore 02C1 "Astronomia, Astrofisica e Fisica della terra e Pianeti" .....	58
Settore "Chimica Generale e Inorganica".....	62
Sotto-settore 03B1 "Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici" .....	62



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

1. PRESENTAZIONE GENERALE

Il Dipartimento di Fisica (DSF) dell'Università degli Studi di Cagliari (UniCa) rappresenta l'unico presidio di ricerca accademica e di alta formazione nell'area delle scienze fisiche presente in Sardegna. Come tale, svolgerà un fondamentale ruolo culturale, di formazione, di ricerca e di promozione del territorio.

Il DSF ha, alla data di redazione del presente preventivo, un organigramma di ricerca articolato in:

- 7 professori ordinari (PO)
- 18 professori associati (PA)
- 10 ricercatori a tempo indeterminato (RC-TI)
- 5 ricercatori a tempo determinato (RC-TD)

Afferiscono, inoltre, alla struttura una decina di Assegnisti di Ricerca UniCa, una ventina di Dottorandi e una decina di specializzandi.

Il DSF svolgerà ricerche di punta (sia di base, sia applicate) di carattere sperimentale, teorico e computazionale nei settori della fisica delle interazioni fondamentali, della fisica della materia condensata, della fisica applicata e dell'astrofisica.

I dettagli delle ricerche, della rete delle collaborazioni nazionali ed internazionali e dei diversi progetti attivi sono presentati nelle schede riportate nel seguito. Tali schede sono raggruppate in paragrafi secondo le definizioni dei nuovi raggruppamenti concorsuali. All'interno di ciascun paragrafo, le schede sono ordinate per ordine alfabetico di responsabile scientifico. Le ricerche sono indicizzate secondo lo schema di classificazione adottato dallo "European Research Council" (ERC).

Il DSF collaborerà con l'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN), l'Istituto Nazionale di Astrofisica (INAF), l'Istituto Officina dei Materiali (IOM) e l'Istituto di Scienze dell'Atmosfera e del Clima (ISAC) entrambi del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), ospitandone presso le proprie strutture le locali sezioni.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

## 2. SETTORI DI RICERCA DELLO "EUROPEAN RESEARCH COUNCIL" (ERC)

Le attività descritte in questo preventivo sono classificate secondo lo schema adottato dallo "European Research Council" (ERC) per la definizione dei diversi settori di ricerca. Nel seguito si riporta la sinossi dei soli settori ERC di interesse per il DSF.

### **PE2 Fundamental constituents of matter:**

*particle, nuclear, plasma, atomic, molecular, gas, and optical physics*

PE2\_1 Fundamental interactions and fields  
PE2\_2 Particle physics  
PE2\_3 Nuclear physics  
PE2\_4 Nuclear astrophysics  
PE2\_5 Gas and plasma physics  
PE2\_6 Electromagnetism  
PE2\_7 Atomic, molecular physics  
PE2\_8 Optics and quantum optics  
PE2\_9 Lasers and laser physics  
PE2\_10 Acoustics  
PE2\_11 Relativity  
PE2\_12 Classical physics  
PE2\_13 Thermodynamics  
PE2\_14 Non-linear physics  
PE2\_15 General physics

### **PE3 Condensed matter physics:**

*structure, electronic properties, fluids, nanosciences*

PE3\_1 Structure of solids and liquids  
PE3\_2 Mechanical and acoustical properties of condensed matter  
PE3\_3 Thermal properties of condensed matter  
PE3\_4 Transport properties of condensed matter  
PE3\_5 Electronic properties of materials and transport  
PE3\_6 Lattice dynamics  
PE3\_7 Semiconductors  
PE3\_8 Superconductivity  
PE3\_9 Superfluids  
PE3\_10 Spintronics  
PE3\_11 Magnetism  
PE3\_12 Nanophysics: nanoelectronics, nanophotonics, nanomagnetism  
PE3\_13 Mesoscopic physics  
PE3\_14 Molecular electronics  
PE3\_15 Soft condensed matter (liquid crystals...)  
PE3\_16 Fluid dynamics (physics) PE3\_17 Statistical physics (condensed matter)  
PE3\_18 Phase transitions, phase equilibria  
PE3\_19 Biophysics



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**PE4 Physical and Analytical Chemical sciences:**  
*analytical chemistry, chemical theory, physical chemistry/chemical physics*

PE4\_1 Physical chemistry  
PE4\_2 Nanochemistry  
PE4\_3 Spectroscopic and spectrometric techniques  
PE4\_4 Molecular architecture and Structure  
PE4\_5 Surface science  
PE4\_6 Analytical chemistry  
PE4\_7 Chemical physics  
PE4\_8 Chemical instrumentation  
PE4\_9 Electrochemistry, electro dialysis, microfluidics  
PE4\_10 Combinatorial chemistry  
PE4\_11 Method development in chemistry  
PE4\_12 Catalysis  
PE4\_13 Physical chemistry of biological systems  
PE4\_14 Chemical reactions: mechanisms, dynamics, kinetics and catalytic reactions  
PE4\_15 Theoretical and computational chemistry  
PE4\_16 Radiation chemistry  
PE4\_17 Nuclear chemistry  
PE4\_18 Photochemistry

**PE5 Materials and Synthesis:**  
*materials synthesis, structure-properties relations, functional and advanced materials, molecular architecture, organic chemistry*

PE5\_1 Structural properties of materials  
PE5\_2 Solid state materials  
PE5\_3 Surface modification  
PE5\_4 Thin films  
PE5\_5 Corrosion  
PE5\_6 Porous materials  
PE5\_7 Ionic liquids  
PE5\_8 New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, superconductors  
PE5\_9 Materials for sensors  
PE5\_10 Nanomaterials : nanoparticles, nanotubes  
PE5\_11 Biomaterials synthesis  
PE5\_12 Intelligent materials – self assembled materials  
PE5\_13 Environment chemistry  
PE5\_14 Coordination chemistry  
PE5\_15 Colloid chemistry  
PE5\_16 Biological chemistry  
PE5\_17 Chemistry of condensed matter  
PE5\_18 Homogeneous and heterogeneous catalysis  
PE5\_19 Characterization methods of materials  
PE5\_20 Macromolecular chemistry,  
PE5\_21 Polymer chemistry  
PE5\_22 Supramolecular chemistry  
PE5\_23 Organic chemistry  
PE5\_24 Molecular chemistry



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**PE9 Universe sciences:**

*astro-physics/chemistry/biology; solar system; stellar, galactic and extragalactic astronomy, planetary systems, cosmology; space science, instrumentation*

PE9\_6 Stars and stellar systems

PE9\_10 High energy and particles astronomy – X-rays, cosmic rays, gamma rays, neutrinos

PE9\_11 Relativistic astrophysics

PE9\_15 Space Sciences

**SH2 Institutions, values, beliefs and behaviour:**

*sociology, social anthropology, political science, law, communication, social studies of science and technology*

SH2\_14 History of science and technology

**LS2 Genetics, Genomics, Bioinformatics and Systems Biology:**

*genetics, population genetics, molecular genetics, genomics, transcriptomics, proteomics, metabolomics, bioinformatics, computational biology, biostatistics, biological modelling and simulation, systems biology, genetic epidemiology*

LS2\_11 Computational biology

**LS7 Diagnostic tools, therapies and public health:**

*aetiology, diagnosis and treatment of disease, public health, epidemiology, pharmacology, clinical medicine, regenerative medicine, medical ethics*

LS7\_2 Diagnostic tools (e.g. genetic, imaging)

LS7\_11 Environment and health risks including radiation



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

PREVENTIVO RICERCHE nel

Settore "Fisica delle Interazioni Fondamentali"

Sotto-settore 02A1 "Fisica sperimentale delle Interazioni Fondamentali"



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

**Produzione e caratterizzazione del plasma di quark e gluoni prodotto in collisioni di nuclei accelerati a energie ultrarelativistiche**

### 2. Responsabili

*Alessandro De Falco, Gianluca Usai*

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Gianluca Usai, Alessandro De Falco
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Fiorella Fionda, Ester Casula, Elisa Incani
Collaboratori di enti convenzionati: INFN	Alberto Masoni (Direttore di Ricerca), Corrado Cicalò (Primo Ricercatore) Sabyasachi Siddhanta (Tecnologo) Carlo Puggioni (borsista) Daniele Mura (borsista)

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1	PE2_2	PE2_3
-------	-------	-------

### 5. Parole chiave

Heavy Ion Collisions	Quark Gluon Plasma	ALICE LHC
----------------------	--------------------	-----------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Il gruppo fa parte della collaborazione internazionale ALICE, LHC, CERN. In particolare l'attività viene svolta in collaborazione con gruppi del CERN, gruppi francesi (Saclay, Nantes, Strasburgo, Lione), Torino (INFN, Università), Padova (INFN, Università), Heidelberg.

### 7. Riassunto

La ricerca del gruppo è inserita nel programma di misure dell'esperimento ALICE al LHC del CERN. L'attività è incentrata nell'analisi dei dati della produzione di coppie di muoni e su un progetto per realizzare un nuovo rivelatore di vertice a pixel di silicio. Il gruppo è inoltre impegnato nello studio di un nuovo spettrometro per misure della produzione di muoni a bassa energia al CERN-SPS e nel triennio 2016-2018 si prevede una continuazione ed uno sviluppo di queste attività.

### 8. Inquadramento generale

Nelle collisioni di ioni pesanti (Pb-Pb o Au-Au) ultra-relativistici un gran numero di nucleoni interagiscono depositando grandi quantità di energia (dell'ordine di un GeV o più) in un volume molto piccolo (dell'ordine di un fm<sup>3</sup>). Ciò dà luogo alla formazione di un plasma di gluoni e quark deconfinati di proprietà simili a quello presente nei primi istanti di vita dell'Universo, circa 3μs dopo il big bang. Negli ultimi 20 anni le proprietà di questo plasma sono state studiate prima al CERN SPS e successivamente al collider RHIC a BNL. Attualmente l'acceleratore LHC accelera ioni alle energie più alte mai raggiunte (2.76 TeV/nucleone) e diversi esperimenti (ALICE, CMS e ATLAS) stanno effettuando numerose nuove misure.

### 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

Il gruppo di Cagliari da 15 anni partecipa ad esperimenti focalizzati sulla produzione di coppie di muoni. Queste possono essere prodotte dal decadimento di mesoni leggeri come  $\rho(770)$ ,  $\omega(780)$  e  $\phi(1020)$  o più pesanti come la  $J/\psi(3100)$ , le cui proprietà possono essere modificate in modo anche notevole dal plasma in cui si trovano. La produzione di mesoni dotati di charm e beauty riveste anch'essa un notevole interesse, poiché permette di studiare i meccanismi di produzione, propagazione e adronizzazione dei quark pesanti nel mezzo denso creato nelle collisioni tra ioni pesanti.

### Esperimento ALICE

L'esperimento ALICE è una collaborazione a livello mondiale che coinvolge più di 80 istituti di ricerca e circa un migliaio di ricercatori.

Nel triennio 2016-18 sono previste nuove prese dati con collisioni piombo-piombo e protone-piombo.

Le attività attualmente in corso legate al programma sperimentale approvato che coinvolgono il gruppo di Cagliari sono:

- Partecipazione ai turni di presa dati
- Sviluppo di infrastrutture informatiche basate sulla tecnologia GRID per l'analisi e ricostruzione dei dati.
- Studio della produzione di dimuoni prodotti in collisioni p-Pb e Pb-Pb nella regione delle basse masse ( $M < 1.2 \text{ GeV}/c^2$ )
- Analisi di eventi protone-protone ad alta molteplicità
- Controllo e manutenzione dei rivelatori Muon Arm e Calorimetro a Zero Gradi ZDC

Oltre a tutte queste attività riguardanti il programma sperimentale attualmente in corso, il gruppo di Cagliari è attivamente impegnato anche nella realizzazione di un nuovo rivelatore di vertice a pixel. Questo rivelatore consentirà misure di maggiore precisione della produzione di mesoni e barioni con charm e beauty. Il gruppo di Cagliari è coinvolto nelle seguenti attività:

- Sviluppo e caratterizzazione di nuovi rivelatori a pixel

Responsabilità all'interno dell'esperimento:

- Membro dell'editorial board dell'esperimento (G. Usai)
- Responsabile del Physics Analysis Working group per l'analisi della produzione di coppie di muoni di bassa massa (A. De Falco)

G. Usai è PI del progetto regionale "Study of monolithic pixel sensors for measurements in high energy nuclear collisions at the CERN LHC"

A. De Falco è inoltre responsabile di unità locale del progetto PRIN "Sviluppo di tecnologie per l'ottimizzazione dell'accesso ai dati di LHC, trasferibili ad altri domini scientifici, mediante l'approccio grid e del cloud computing"

### Esperimento NA60

L'esperimento NA60 presso il CERN SPS (diretto da G. Usai) è concluso ma l'analisi dei dati protone-nucleo a 450 GeV è ancora in corso. Si prevede di sottomettere due lavori nel 2016/17.

È attualmente in fase di un nuovo spettrometro per muoni per studiare il ripristino della simmetria chirale e la transizione di fase del primo ordine nel diagramma di fase della materia adronica. È stato sottomesso un nuovo progetto PRIN continuazione del precedente (2011-13) di cui G. Usai è stato PI. La proposta è attualmente in fase di discussione nella comunità italiana nell'ambito dell'iniziativa INFN "What Next".



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Fisica dei quark e dei leptoni: Flavours pesanti in LHCb.  
Rivelatori innovativi per la possibile rivelazione di assioni.

**2. Responsabili**

Biagio Saitta

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Biagio Saitta
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori</b>	Rudolf Oldeman
<b>Assegnisti</b>	
<b>Dottorandi</b>	Violetta Cogoni, Claudia Vacca

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE2_1	PE2_2	
-------	-------	--

**5. Parole chiave**

Fisica del flavour	LHC	Assioni
--------------------	-----	---------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

- W. Bonivento, S. Cadeddu, A. Cardini e A. Lai, ricercatori della locale Sezione dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare e M. Fontana assegnista di ricerca, sono parte integrante del gruppo operando nell'ambito della Convenzione fra l'Università di Cagliari e l'INFN.

- Per l'esperimento LHCb: CERN e circa 50 fra Università e Centri di Ricerca da 14 nazioni (Europa, Brasile, Cina, USA).

Per lo sviluppo di rivelatori (responsabile A. Lai): Università e Sezioni INFN di Padova, Pisa, Ferrara, Napoli.

**7. Riassunto**

Nei prossimi tre anni, utilizzando i dati raccolti dall'esperimento LHCb al CERN negli anni 2011-2012 arricchiti da nuovi dati all'energia nel centro di massa più alta mai raggiunta ad un acceleratore, il gruppo sarà impegnato in una serie di attività legate alla fisica dei "sapori" pesanti ed in particolare alla studio del "charm" e di decadimenti rari di mesoni B. Il gruppo sarà inoltre parte attiva nella fase cosiddetta di "upgrade" dell'esperimento LHCb, in particolare per ciò che riguarda il rivelatore di muoni, traendo vantaggio della notevole esperienza di alcuni suoi componenti nello sviluppo di rivelatori e nell'elettronica.

Si prevede anche lo sviluppo di rivelatori innovativi a fibre scintillanti nell'ambito del progetto INFN denominato "Axioma".

**8. Inquadramento generale**



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

La fisica cosiddetta del “flavour” (sapore) è alla base di alcune questioni importanti nel campo della fisica delle particelle e della cosmologia: Qual è l’origine della asimmetria fra la materia e l’antimateria nell’Universo? Qual è la soluzione del problema della “*gerarchia*”, ossia di quel meccanismo attraverso cui le correzioni quantistiche alla massa del bosone di Higgs richiedono un aggiustamento estremamente accurato per separarla dalla tipica scala di Planck?

Con l’osservazione del Bosone di Higgs, è stato completato il quadro delle particelle previste nell’ambito del Modello Standard ma, ad oggi, con pochissime eccezioni (una delle quali è il fenomeno delle oscillazioni di neutrino), non si ha evidenza di processi non spiegabili nell’ambito di questo modello e che quindi richiederebbero l’esistenza di ciò che viene denominato *nuova fisica*.

Oltre alla osservazione in seguito a produzione diretta di nuove particelle predette da modelli teorici che vanno oltre il modello standard e tuttora possibile alle nuove energie raggiunte nelle collisioni protone-protone all’acceleratore LHC, segnali di nuova fisica possono essere ottenuti indirettamente attraverso lo studio di decadimenti di mesoni o barioni contenenti quark pesanti che siano rari (o proibiti) nel Modello Standard. Questi decadimenti, se mediati da nuove particelle, avverrebbero ad un tasso maggiore di quanto atteso nel modello standard.

La produzione di particelle contenenti quark pesanti (b e c) nell’esperimento LHCb è adesso ordini di grandezza maggiore di quanto non sia stato accumulato in passato a qualunque macchina acceleratrice e con il campione arricchito con una quantità ancora maggiore di nuovi dati ad energia più elevata sarà possibile effettuare misure di precisione senza precedenti e rivelare la presenza di anomalie in decadimenti estremamente rari. Una piccola deviazione dalle predizioni del Modello Standard è stata riscontrata in una osservabile legata alla distribuzione angolare nei prodotti del decadimento  $B \rightarrow K^* \mu \mu$ . Inoltre il rapporto fra questo decadimento e l’equivalente  $B \rightarrow K^* e e$  e sembra essere diverso dall’unità suggerendo violazioni della universalità leptonica.

L’*assione* è una particella postulata per risolvere il problema della violazione della simmetria CP nella Cromodinamica Quantistica. Esso potrebbe essere uno dei componenti della materia oscura (fredda). Tuttavia esso non è mai stato osservato.

Ci si propone di sviluppare, su una scala temporale di qualche anno, rivelatori in grado di osservare segnali della interazione di queste particelle.

## 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

*Analisi nell’ambito dell’esperimento LHCb.* Il nuovo campione di dati registrato nel 2015-2017 sarà utilizzato per aggiornare e migliorare misure già fatte e per intraprendere nuove analisi. In particolare ci si attende di:

- Aggiornare la misura del rapporto fra le frazioni di decadimento  $B \rightarrow K^* \mu \mu$  e  $B \rightarrow K^* e e$ .
- Aggiornare la misura della frazione assoluta del decadimento  $\Lambda_c \rightarrow p K \pi$  usando il metodo sviluppato a questo scopo.
- Misurare per la prima volta il rapporto relativo di decadimento  $B \rightarrow p \pi \pi \Sigma_c(2520)$  e, nell’ipotesi che alcune condizioni sulla polarizzazione siano soddisfatte, misurare lo spin della  $\Sigma_c(2520)$ .
- analizzare il decadimento del mesone D neutro in due muoni e in due muoni + due pioni, traendo vantaggio della capacità del rivelatore di identificare muoni, con lo scopo di ottenere il miglior limite al mondo per questi decadimenti.
- Migliorare gli algoritmi di identificazione dei muoni.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

*Upgrade di LHCb* – Parziali modifiche e sostituzioni dei rivelatori dell'esperimento LHCb sono previste per la fase di presa dati del 2019, nella quale ci si aspetta di acquisire ad una frequenza di 40 MHz invece dell'attuale 1MHz. Il gruppo sarà coinvolto nelle modifiche necessarie al sistema di rivelazione dei muoni che richiede cambiamenti nella elettronica usata per la lettura. Un certo numero di componenti il gruppo ricopre ruoli di riconosciuta responsabilità all'interno della collaborazione internazionale assicurando il raggiungimento di questi obiettivi.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

CONSUNTIVO RICERCHE nel

Settore "Fisica delle Interazioni Fondamentali"

Sotto-settore 02A2 "Fisica teorica delle Interazioni Fondamentali"



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

Black holes and the gravity/gauge theory correspondence

### 2. Responsabili

MARIANO CADONI

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	MARIANO CADONI
<b>Ricercatori</b>	
<b>Assegnisti</b>	
<b>Dottorandi</b>	EDGARDO FRANZIN, MATTEO TUVERI, PARUL JAIN

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1 Fundamental interactions and fields	PE2_11 Relativity	
--	-------------------	--

### 5. Parole chiave

Buchi neri	Corrispondenza gravità/ teorie di gauge	
------------	---	--

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

S. Mignemi, Dip. Matematica, Università di Cagliari, V. Cardoso IST, Lisbona, P. Olla CNR

### 7. Riassunto

Intendiamo usare la corrispondenza gravità /teorie di gauge per studiare diversi problemi attuali della fisica teorica delle alte energie.

1. Descrizione olografica dei sistemi critici
2. Corrispondenza Domain wall/soluzioni cosmologiche
3. Entropia microscopica di buchi neri ed altri oggetti estesi
4. Entropia di entanglement dei buchi neri
5. Rapporto viscosità entropia in teorie di campo con duali gravitazionali

### 8. Inquadramento generale

Nei limiti di  $N$  grande la congetturata corrispondenza tra teorie delle stringhe in AdS/ teorie di gauge si riduce ad una corrispondenza tra gravità di Anti- de Sitter (AdS) nel bulk e una teoria di campo nel bordo (corrispondenza gravità/ teorie di gauge). In questa forma la dualità è un potente strumento



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

da due diversi punti di vista. Infatti da un alto consente di descrivere teorie di campo fortemente accoppiate semplicemente studiando una teoria della gravità classica. Dall'altro consente di ottenere informazioni sul regime semiclassico di sistemi gravitazionali molto interessanti come i buchi neri semplicemente studiando la teoria di campo duale. Non a caso negli ultimi anni questa corrispondenza è stata usata per descrivere olograficamente una varietà di sistemi che vanno dai superconduttori, trasporto di carica nei metalli, sistemi critici, proprietà non perturbative della QCD e la derivazione dell'entropia microscopica e di entanglement dei buchi neri. Sicuramente metodi olografici sono attualmente tra i metodi più promettenti per risolvere diversi problemi della fisica teorica delle alte energie.

## 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

L'attività di ricerca nei prossimi tre anni sarà focalizzata su diverse tematiche, problemi ed applicazioni della corrispondenza gravità /teorie di gauge. Segue una breve descrizione delle attività di ricerca previste.

### Descrizione olografica dei sistemi critici

È stato dimostrato che l'Hyperscaling violation è una proprietà olografica molto generale di un'ampia classe di teorie della gravità di Einstein-Maxwell accoppiata in vari modi ad un campo scalare che si ha quando il potenziale si comporta in modo esponenziale. Il nostro scopo è quello di dare una descrizione olografica generale dell' l'Hyperscaling violation nei sistemi critici. Questo sarà realizzato lavorando sia sul versante gravitazionale (per esempio derivando soluzioni esatte analitiche o numeriche) sia sul versante delle teoria di campo ( per esempio calcolando esponenti critici e proprietà di trasporto come la conduttività ed il rapporto tra viscosità ed entropia) della dualità.

### Corrispondenza Domain wall/soluzioni cosmologiche

Una proprietà molto interessante di un'ampia classe di modelli della gravità di Einstein accoppiata con un campo scalare, che abbiamo studiato recentemente, è l'esistenza di soluzioni di Domain wall che descrivono solitoni che interpolano tra spazi di AdS ed una metrica scale-covariant. D'altra parte la corrispondenza DW/soluzioni cosmologiche implica che queste soluzioni dovrebbero avere dei duali che sono soluzioni dipendenti dal tempo e che potrebbero essere importanti per applicazioni cosmologiche ( per esempio inflazione e il problema dell'energia oscura). Il nostro scopo principale è quello di derivare queste soluzioni cosmologiche e di studiarne le proprietà.

### Entropia microscopica di buchi neri ed altri oggetti estesi

Questa linea di ricerca prevede di usare la corrispondenza gravità / teorie di gauge per il calcolo sia dell'entropia statistica che dell'entropia di entanglement di buchi neri ed altri oggetti estesi. Anche se negli ultimi anni sono stati fatti molti progressi in questa direzione ci sono ancora molti problemi aperti. In particolare uno dei nostri scopi è quello di avere una comprensione più dettagliata della



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

relazione che esiste tra i tre tipi di entropia di un buco nero: termodinamica, statistica(Boltzmann), entanglement (Von Neumann)).





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

*Struttura 3-dimensionale del nucleone e asimmetrie di spin singolo trasverso*

### 2. Responsabile

*Umberto D'Alesio*

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Umberto D'Alesio
-----------------------------	------------------

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1	PE2_2	
-------	-------	--

### 5. Parole chiave

Struttura del nucleone	Moto intrinseco dei partoni	Quark e gluoni (QCD)
------------------------	-----------------------------	----------------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

F. Murgia (INFN-CA), M. Anselmino, M. Boglione (Univ. Torino), A. Prokudin (Penn State Univ, USA), E. Leader (Imperial College, UK), I. Scimemi (Univ. Complutense, Madrid, Spagna),

C. Pisano (Univ. Pavia), M. Echevarria (NIKHEF, Amsterdam), gruppi sperimentali (PAX, COMPASS, HERMES, JLAB, STAR, PHENIX, BELLE, BABAR)

### 7. Riassunto

- Estrazione (update) di distribuzioni dipendenti da impulso trasverso (TMD) da dati sperimentali in processi di SIDIS ed  $e^+e^-$ , con evoluzione in  $Q^2$  e correzioni cinematiche;
- Stime di asimmetrie di spin singolo (SSA) in processi di Drell-Yan e di produzione inclusiva di bosoni carichi
- SSA in  $l p \rightarrow \pi X$  e ruolo dello scambio di fotone quasi reale
- Ruolo delle TMD in SSA per la produzione inclusiva di un singolo adrone o di un adrone in un jet in urti protone-protone;
- Effetti di dipendenza dai processi e non universalità delle TMD

### 8. Inquadramento generale

La comprensione della struttura tridimensionale del nucleone rappresenta l'obiettivo ultimo di molti programmi sperimentali in corso e futuri così come di diverse attività teoriche in fisica adronica. I processi fisici considerati sono essenzialmente la diffusione di leptoni ad alte energie su protoni e neutroni e le collisioni inelastiche tra adroni. Lo schema teorico in cui sono studiati è la QCD. Le sezioni d'urto sono date, secondo i teoremi di fattorizzazione, come convoluzioni delle interazioni partoniche elementari (calcolabili perturbativamente nel Modello Standard), con distribuzioni partoniche (PDF) e funzioni di frammentazione (FF). Queste sono quantità incognite, ma la loro evoluzione con la scala dura dei processi,  $Q$ , può essere calcolata in QCD perturbativa. Informazioni indipendenti sulle FF possono essere ottenute da altri processi come l'annichilazione di elettroni e positroni in coppie di adroni. Per molto tempo, le PDF e le FF sono state considerate come processi collineari inclusivi (non perturbativi), corrispondenti a una rappresentazione unidimensionale del nucleone. Recentemente è divenuto chiaro che per comprendere molti dati sperimentali, in particolar modo quelli che coinvolgono gradi di libertà di spin, è necessario tener conto anche dei gradi di libertà trasversi, e cioè



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

del moto intrinseco di quark e gluoni all'interno del nucleone. Questo apre il via allo studio della struttura tridimensionale del nucleone.

L'informazione tridimensionale completa delle distribuzioni partoniche è codificata nelle distribuzioni partoniche dipendenti dal momento trasverso (TMD-PDF). Nelle osservabili sperimentali queste sono spesso convolute con le funzioni di frammentazione dipendenti dal momento trasverso (TMD-FF). Una conoscenza completa delle distribuzioni partoniche deve anche includere le loro dipendenze dallo spin partonico, legato a correlazioni di spin-orbita delle interazioni forti. All'ordine dominante in  $1/Q$  ci sono 8 TMD-PDF e, per adroni di spin zero, 2 TMD-FF.

Negli ultimi 10-15 anni le misure di asimmetrie azimutali nei processi SIDIS ( $l p \rightarrow l' h X$ ) ottenute dalle Collaborazioni sperimentali di HERMES, COMPASS e JLab, insieme alle analisi teoriche, hanno definitivamente rivelato il ruolo delle TMD e permesso le prime estrazioni di alcune di esse.

Risultati recenti dalle Collaborazioni Belle e BaBar nei processi  $e+e- \rightarrow h_1 h_2 X$ , hanno mostrato il ruolo delle TMD-FF. Dati importanti sono attesi per i processi di Drell-Yan in corso di studio a COMPASS e RHIC. Grandi attese sono poi legate alla realizzazione del futuro Electron Ion Collider negli USA e dell'esperimento AFTER al CERN.

Le proprietà delle TMD in QCD, ed in particolare la loro evoluzione con  $Q^2$ , sono state recentemente formulate in modo sistematico, anche se le attuali analisi fenomenologiche sono controverse e richiedono quindi ulteriori sviluppi. Siamo quindi in un periodo importante di transizione da una prima fase che ha stabilito l'evidenza sperimentale e il contesto teorico delle TMD, verso una fase di precisione dell'esplorazione della struttura tridimensionale del nucleone.

### 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Delle 8 TMD indipendenti al twist dominate, oltre alle 3 che sopravvivono nel limite collineare, le più investigate sono le funzioni di Sivers e di Boer-Mulders, che danno, rispettivamente, il numero di partoni non polarizzati (trasversalmente polarizzati) in un protone trasversalmente polarizzato (non polarizzato). Simili correlazioni esistono nel processo di frammentazione: in particolare, la funzione di Collins dà il numero di adroni non polarizzati creati nell'adronizzazione di un quark trasversalmente polarizzato.

Recenti sviluppi teorici sull'evoluzione in QCD delle TMD permetteranno di migliorare le loro attuali estrazioni mediante l'analisi di dati per processi di diffusione profondamente anelastica semi-inclusivi (SIDIS) e di annichilazione  $e^+e^-$ . Sarà quindi sviluppata un'estesa procedura di fit, con lo sviluppo di codici numerici dedicati alle nuove e aggiornate estrazioni delle funzioni di Sivers e di Collins [12-15 mesi].

Strettamente legato a questo obiettivo, saranno inoltre calcolate stime per le asimmetrie di spin singolo (SSA) in processi di Drell-Yan e in produzione inclusiva di bosoni W. Queste, confrontate con i prossimi dati dagli esperimenti a COMPASS e a RHIC, permetteranno un importante, e ancora mancante, test dell'atteso cambio di segno della funzione di Sivers in processi di Drell-Yan rispetto al SIDIS. [6-8 mesi]

Sempre nell'ambito di una maggiore comprensione delle TMD ed in particolare della loro componente non perturbativa, verrà sviluppato ulteriormente lo studio degli spettri in  $q_T$  nei processi di Drell-Yan non polarizzato. [6-9 mesi]

Numerose SSA sono state osservate, da molto tempo e a energie diverse, in processi adronici inclusivi, come  $pp \rightarrow \pi X$ , con il pione prodotto con un grande impulso trasverso. Una loro descrizione fenomenologica, basata sulla generalizzazione della fattorizzazione collineare al caso delle TMD, è



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

stata sviluppata e applicata con successo. La questione se le stesse funzioni di Sivers e Collins, estratte da dati in processi per cui vale la fattorizzazione (come il SIDIS), possano o no, e quanto, contribuire alle SSA osservate in collisioni pp è tuttora aperta e sarà oggetto di studio e ulteriore approfondimento. [6-9 mesi]

Proseguirà l'analisi della distribuzione azimutale di pioni nei jet prodotti di jet a grandi  $p_T$  in collisioni pp, con particolare attenzione ai nuovi risultati sperimentali da RHIC, per avere un'altra fonte di informazione sulla trasversità e testare allo stesso tempo l'universalità delle TMD. [6-9 mesi]

Si studierà inoltre il ruolo dello scambio di fotone quasi reale nelle SSA in  $l p \rightarrow \pi X$  (6 mesi), così come possibili origini di non universalità delle TMD, includendo interazioni di stato iniziale e finale nei processi adronici di produzione inclusiva di pioni, jet, fotoni e stati legati del charm (12-15 mesi).



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Dinamica delle stringhe in spazitempo curvi e ad alta energia

**2. Responsabili**

Giuseppe D'Appollonio

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori</b>	
<b>Assegnisti</b>	
<b>Dottorandi</b>	

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE2_1	PE2_2	
-------	-------	--

**5. Parole chiave**

Superstringhe e D-brane	Corrispondenza olografica	Campi di spin elevato
-------------------------	---------------------------	-----------------------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

Paolo Di Vecchia, Nordita (Stoccolma) e Niels Bohr Institute (Copenhagen)

Rodolfo Russo, Queen Mary University London (London)

Gabriele Veneziano, Cern(Geneva) e College de France (Paris)

**7. Riassunto**

Scopo di questa ricerca è capire come il limite classico delle interazioni gravitazionali, descritto dalla curvatura dello spaziotempo, emerga dalle ampiezze di stringa e in che modo la dinamica delle stringhe modifichi la gravità classica quando questa diviene inapplicabile (in prossimità ad esempio di una singolarità spaziotemporale come quelle cosmologiche) o quando esiste una tensione tra i principi della meccanica quantistica e la descrizione geometrica dello spaziotempo (ad esempio in presenza di un orizzonte degli eventi).

**8. Inquadramento generale**

La teoria delle stringhe rappresenta uno degli approcci più promettenti per ottenere una descrizione quantomeccanica delle interazioni gravitazionali. Lo spettro della teoria include una particella con massa nulla e spin due, identificabile con il gravitone, insieme ad un numero infinito di particelle massive con spin elevato. La serie perturbativa della teoria, un'espansione in superfici di Riemann di genere crescente, permette di definire una matrice di diffusione unitaria. Il costante progresso fatto nel corso degli anni nello studio della teoria ha portato a capire con sempre maggior precisione quali caratteristiche essenziali una teoria quantistica della gravità dovrebbe possedere. La scoperta forse



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

più profonda è la dualità olografica tra la dinamica della teoria delle stringhe in uno spaziotempo curvo e la dinamica di una teoria di campo quantistica sul bordo di quello spaziotempo.

### **9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

La nostra ricerca mira a chiarire come la teoria delle stringhe modifichi la descrizione geometrica classica dello spaziotempo quando questa o non è applicabile o porta a risultati inconsistenti con i principi della meccanica quantistica.

Il metodo scelto è quello di studiare processi di alta energia nello spaziotempo piatto concentrandosi in particolare sulla collisione di due stringhe chiuse molto energetiche o sulla collisione di una stringa chiusa con un gruppo di D-brane. In questo modo si ha un punto di partenza ben definito: la matrice  $S$  che assicura, in linea di principio, l'unitarietà del processo. Anche se lo spaziotempo è inizialmente piatto, la curvatura viene indotta dinamicamente dalla grande energia che rende dominante l'interazione gravitazionale tra stringa e stringa e tra stringa e brana.

L'alta energia rende necessario risommare i contributi dell'intera serie perturbativa per ottenere risultati consistenti. Come mostrato da Amati, Ciafaloni e Veneziano per le collisioni stringa-stringa la risommazione dei termini dominanti in energia dà come matrice  $S$  un operatore iconale. Quando il raggio di curvatura dello spaziotempo effettivo è piccolo rispetto alla lunghezza di stringa, questo operatore dà una descrizione accurata della dinamica per ogni valore del parametro di impatto. Nel caso opposto l'iconale descrive solo il limite di grandi parametri di impatto. Lo studio di collisioni che portino alla formazione di un buco nero rimane quindi un problema aperto e complesso, in quanto richiede di estrarre dalle ampiezze di stringa tutta una serie di contributi sottodominanti in energia.

Negli ultimi anni la mia ricerca è stata incentrata sul sistema stringa-brana. Questo sistema è un laboratorio eccellente per studiare l'emergere di una geometria effettiva in teoria delle stringhe dato che le D-brane possiedono sia una descrizione microscopica in termini di stringhe aperte, valida a debole accoppiamento, sia una descrizione geometrica in termini di spaziotempo curvi detti brane nere estreme, valida a forte accoppiamento. Abbiamo mostrato come dalle ampiezze di stringa si possa ricostruire la metrica esterna all'ordine dominante e sottodominante ed analizzato in dettaglio il primo effetto che segnala una deviazione dalla gravità classica, l'eccitazione dei modi massivi della stringa indotta dalle forze di marea.

I passi successivi di questo programma di ricerca sono lo studio dell'assorbimento della stringa chiusa da parte delle D-brane [18 mesi] e l'analisi degli effetti delle forze di marea all'ordine sottodominante [18 mesi]. Per quanto riguarda il primo punto vogliamo identificare a livello quantistico e semiclassico lo stato di stringa aperta creato sulla brana, dapprima ad albero e poi tenendo conto della frammentazione indotta dagli ordini successivi della serie perturbativa. Una volta ottenuto questo risultato dovrebbe essere possibile costruire una matrice  $S$  unitaria che, in un'approssimazione di risonanze strette, tenga conto simultaneamente della diffusione elastica, delle forze di marea e del processo di assorbimento. Vorremmo inoltre verificare se il sistema di D-brane eccitato rappresenta la descrizione microscopica delle metriche di brana nera quasi estrema. Per quanto riguarda il secondo punto vogliamo stabilire se l'accordo tra ampiezze di stringa e metrica esterna persiste o meno all'ordine sottodominante e ideare dei metodi che permettano di descrivere in modo quantitativo l'ampiezza a piccoli parametri di impatto.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

*Fisica astroparticellare: Materia oscura e WIMP, direzionalità del segnale in DarkSide,*

**2. Responsabile**

*Alberto Devoto*

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	Alberto Devoto
<b>Ricercatori TI e TD</b>	
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	Matteo Cadeddu, Mauro Caravati

**4. Settori Ricerca ERC (European Reserach Council)**

PE2_2	PE2_4	
-------	-------	--

**5. Parole chiave**

Materia Oscura	Direzionalità	
----------------	---------------	--

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

M. Lissia, M. Razeti, ricercatori presso la sezione di Cagliari dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN) sulla base dell'accordo tra l'INFN e l'Università di Cagliari sono parte integrante del gruppo. Partecipano all'esperimento DarkSide che si svolge presso i Laboratori Nazionali del Gran Sasso ricercatori provenienti da 10 Paesi (Europa, Brasile, Cina, Stati Uniti d'America).

**7. Riassunto**

Nei prossimi 3 anni continuerà la presa dati con il rivelatore attualmente in uso (denominato DarkSide-50) e la loro analisi. Contemporaneamente, sulla base delle esperienze acquisite verrà dato inizio alla progettazione e realizzazione di un rivelatore di dimensioni molto maggiori –denominato DarkSide-20K.

**8. Inquadramento generale**

L'esistenza della materia oscura proposta negli anni 30, è accettata come l'unica possibile spiegazione di molti fenomeni astrofisici e cosmologici. La comunità scientifica ritiene che circa 85% della materia presente nell'universo è di un tipo che non emette o assorbe onde elettromagnetiche: la materia oscura. La maggioranza dei fisici ritiene che essa sia costituita da WIMP (weakly interacting massive particles) di natura sconosciuta. Sono numerosi gli esperimenti che, utilizzando diverse tecnologie, cercano di osservare tali particelle. DarkSide è tra gli esperimenti che vogliono osservarla direttamente tramite le collisioni degli WIMP con i nuclei del rivelatore. Sono pertanto necessarie la



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

massima purezza del materiale usato per la realizzazione del rivelatore e l'assenza di qualsiasi possibile fonte "rumore" (quali debolissime tracce di radioattività). In considerazione del fatto che gli WIMP hanno una piccola probabilità di interagire, è necessario utilizzare rivelatori di grandi dimensioni. I risultati finora ottenuti da DarkSide-50 indicano che un rivelatore di maggiori dimensioni –quale DarkSide 20K-potrebbe fornire importanti contributi in questo settore.

**9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

L'obiettivo della ricerca impone la massima purezza e sensibilità sia nel materiale usato nella costruzione dell'infrastruttura del rivelatore e soprattutto nel materiale utilizzato nella sua parte sensibile. DarkSide 50 ha già mostrato, nel corso del 2015, che le tecniche sviluppate dalla collaborazione per l'eliminazione dall'Argon dell'isotopo 39, ne riducono drasticamente il contenuto e conseguentemente abbassano notevolmente il "rumore di fondo" da esso prodotto.

Il progetto prevede una fase iniziale nella quale verranno realizzati sia il grande contenitore del rivelatore, sia i fotomoltiplicatori in grado di rivelare i segnali luminosi prodotti nelle collisioni all'interno del rivelatore.

Nell'arco del triennio 2016-2018 la collaborazione, ed in particolare il gruppo di Cagliari, parteciperà alla realizzazione dell'impianto necessario per produrre l'Argon privo dell'isotopo 39. Si tratta della costruzione di una torre di distillazione di oltre 300 metri di altezza che sarà realizzata in Sardegna. La purificazione dell'Argon si prevede inizierà nella prima metà del 2017. In collaborazione con il Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Chimica e dei Materiali dell'Università di Cagliari verrà studiata l'efficacia del processo di purificazione e si aspettano i primi risultati sulla qualità dell'argon nel corso del 2018.

Il gruppo locale si occuperà anche dello studio teorico e successivamente sperimentale della direzionalità delle particelle WIMP.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

CONSUNTIVO RICERCHE nel

Settore "Fisica della Materia"

Sotto-settore 02B1 "Fisica sperimentale della Materia"





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

*Nanomateriali per la fotonica e l'energia sostenibile*

**2. Responsabili**

G.Bongiovanni, A.Mura, F.Quochi, M.Saba

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	G. Bongiovanni
<b>Professori associati</b>	A. Mura, F. Quochi, M. Saba
<b>Ricercatori</b>	
<b>Assegnisti</b>	D. Marongiu
<b>Dottorandi</b>	X. Chang, V. Sarritzu, N. Sestu

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE3_12	PE4_3	PE5_4
--------	-------	-------

**5. Parole chiave**

Nanomateriali	Fotonica	Energia sostenibile
---------------	----------	---------------------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

C.Simbrunner, H.Sitter, W.Heiss, Institute of Semiconductor and Solid State Physics, Johannes Kepler University Linz (A); N.S.Sariciftci, Linz Institute for Organic Solar Cells (LIOS) Physical Chemistry Johannes Kepler University Linz(A); H.-G.Rubahn, Mads Clausen Institute, South Danish University Sonderborg (DK); M.A.Loi, Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen, Groningen, (NED); H. Yanagi, Nara Institute of Science and Technology (NAIST), Nara (JP); M.V.Kovalenko, D.V.Talapin, Department of Chemistry, University of Chicago, Chicago, USA; A. Mattoni, Istituto Officina dei Materiali del Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR-IOM) Unità SLACS, Monserrato, (IT); C.Cannas, A.Corrias, F.Casula, P.Deplano, M.L.Mercuri, A.Musinu, A.Serpe, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Monserrato (IT).

**7. Riassunto**

Sviluppiamo materiali innovativi per l'energia sostenibile e la fotonica. La ricerca consisterà nella progettazione e lo studio fotofisico dei seguenti materiali: (i) perovskiti ibride metal-organiche per celle solari, LED e laser; (ii) nanolaser basati su materiali organici con l'apporto di plasmoni di superficie; (iii) complessi di lantanidi per l'emissione di luce infrarossa e di strutture porose metal-organiche con composti luminescenti al fine di realizzare sensori di molecole.

**8. Inquadramento generale**

I nanomateriali ed i semiconduttori molecolari sono materiali a basso costo e facili da realizzare, le cui proprietà elettroniche ed ottiche dipendono dalla dimensione. Tra le applicazioni di maggior spicco e per i nanomateriali sono l'energia, l'illuminazione, informazione quantistica, nanofotonica e la biologia.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### **9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Le perovskiti ibride di alogeni sono semiconduttori innovativi che combinano i pregi dei materiali organici, quali la preparazione semplice e di basso costo, con quelli posseduti dai composti inorganici, come la robustezza ed il trasporto ambipolare ad alta mobilità. Prevediamo l'utilizzo di tecniche di spettroscopia ultraveloce come assorbimento transiente e fotoluminescenza risolta in tempo, impiegando impulsi laser di varia durata e ripetizione, per studiare i fenomeni optoelettronici nelle perovskiti. Il risultato scientifico sarà la conoscenza dei parametri del materiale che controllano il tempo di vita degli stati eccitati ed i canali di ricombinazione parassita, allo scopo di migliorare l'efficienza di emissione della luce e quella di fotoconversione.

Studieremo come materiali per nanolaser le fibre epitassiali eterostrutturate composte da oligomeri organici. Il nostro obiettivo sarà l'azione laser a bassa soglia e con un volume attivo inferiore alla dimensione della lunghezza d'onda ottica. Tale regime sarà esplorato attraverso l'accoppiamento dell'emissione ottica con plasmoni di superficie; cercheremo di dimostrare l'effetto Purcell, cioè la diminuzione del tempo di vita radiativo per gli oligomeri che stiano a distanza nanometrica da strati metalli che supportano modi plasmonici.

Progetteremo inoltre strutture metal-organiche altamente porose e studieremo la loro fotofisica attraverso misure di luminescenza transiente e assorbimento da stato eccitato, allo scopo di sviluppare nuove piattaforme per la sensoristica chimica. Impiegheremo leganti organici luminescenti e ioni lantanidi che emettano nel vicino infrarosso Er(III) ed Yb(III) per identificare attraverso la spettroscopia ottica l'adsorbimento di piccole molecole, tipicamente inquinanti dell'aria, alla superficie delle strutture.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

*Nuove nano-architetture fluorescenti per applicazioni in fotonica.*

### 2. Responsabili

Carlo Maria Carbonaro, Riccardo Corpino, Daniele Chiriu

### 3. Partecipanti

<b>Ricercatori</b>	<i>Carlo Maria Carbonaro, Riccardo Corpino, Daniele Chiriu</i>
--------------------	--

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE4_1	PE4_3	PE5_6
-------	-------	-------

### 5. Parole chiave

Nanomateriali	Fotonica	Spettroscopia ottica
---------------	----------	----------------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

*M.F. Casula, C. Cannas, A. Salis, Dept. of Chemical and Geological Sciences, University of Cagliari; A. Corrias, G. Mountjoy, School of Physical Sciences, University of Kent; D. Carta, Fac. of Physical Sciences and Engineering, University of Southampton; A. Falqui, A. Casu, King Abdullah University of Science and Technology, M. Cannas, S. Agnello, Dept. of Physics, University of Palermo; S. Gerard, Y. Ouerdane, Laboratoire Hubert Curien, Univ. de Saint-Etienne; L. Malfatti, Faculty of Architecture, University of Sassari; A. Paleari, Dept of Materials Sciences, University of Milano-Bicocca*

### 7. Riassunto

Il progetto di ricerca propone lo studio di nuove nano-architetture fluorescenti al fine di ingegnerizzare nuovi ibridi organico/inorganico per applicazioni nell'ambito della fotonica (LED bianchi e mezzi attivi per nano-laser). I composti fluorescenti selezionati sono i Carbon-dots (CDs), nanoparticelle a base carbonio le cui proprietà di luminescenza possono essere accordate in lunghezza d'onda mediante confinamento quantico e funzionalizzazione superficiale. Al fine di ottenere applicazioni in fotonica, i CDs saranno incorporati in opportune matrici ospite, come ad esempio silici mesoporose ordinate.

### 8. Inquadramento generale

I Carbon-dots (CDs) sono una nuova famiglia di nanoparticelle a base carbonio che hanno recentemente attratto l'interesse della comunità scientifica per la loro capacità di emettere fluorescenza intensa e accordabile in lunghezza d'onda. Inoltre questi composti sono altamente solubili in acqua, poco o per nulla tossici, sono fotostabili e versatili dal punto di vista della fotochimica. Tali caratteristiche lasciano prevedere ampie prospettive di applicazione nei settori dell'imaging medicale, dell'optoelettronica, della fotocatalisi e del fotovoltaico.

Le procedure di sintesi chimico fisica dei CDs sono in generali facili, a basso costo e "green", tutti i materiali organici o inorganici contenenti atomi di C sono infatti potenziali sorgenti per i CDs, dal



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

carbone di miniera alla fuliggine di candela, al succo d'arancia o alle patate. Tuttavia la struttura, la composizione chimica e quindi le proprietà ottiche dei CDs dipendono in gran parte dai metodi di sintesi e dai precursori. Inoltre, i CDs contengono, di norma, grandi concentrazioni di ossigeno (20-40%) sulla superficie, e spesso l'azoto viene utilizzato come drogante per migliorare le performance di emissione. Fino ad oggi gli studi in letteratura si sono focalizzati sulle proprietà dei CDs in fase liquida, in genere acqua. Solo recentemente si è rivolta l'attenzione allo sviluppo di materiali in fase solida contenenti CDs, in vista di possibili applicazioni delle loro proprietà di emissione allo stato solido.

### **9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Il progetto intende studiare i nano-composti a base carbonio (C-dots, CDs) per applicazioni allo stato solido nell'ambito dell'illuminotecnica e dei mezzi laser. Seguendo le indicazioni della chimica verde e le priorità individuate da H2020, l'uso di CDs potrebbe contribuire a ridurre l'uso di metalli pesanti (Cd, Sb, Pb, etc.) noti per la elevata tossicità, o di elementi delle terre rare (La, Er, Ga, etc.), individuati come materiali critici da H2020 e ampiamente utilizzati in fotonica. Ad oggi l'efficienza quantica dei CDs nel range blue/verde è quasi competitiva con quella dei quantum dots come CdSe/ZnS, tuttavia l'emissione nel rosso o vicino IR risulta ancora deficitaria. Il primo obiettivo del progetto è quindi superare questo deficit per progettare matrici contenenti CDs con efficiente emissione di luce bianca. Mediante sintesi chimica e trattamenti fisici saranno prodotti CDs la cui emissione sia accordabile in lunghezza d'onda su selezionati colori al fine di ottenere la composizione di luce bianca. Si cercherà di aumentare l'efficienza di emissione sia attraverso opportuna funzionalizzazione della superficie sia attraverso l'accoppiamento plasmonico con nanoparticelle metalliche. Diversi approcci sintetici basati sul metodo sol-gel (sintesi a uno/due stadi, impregnazione e trattamenti post-sintesi, produzione di CDs in matrici porose) saranno utilizzati al fine di inglobare elevate concentrazioni di CDs in ibridi organico/inorganico o in matrici polimeriche.

Le proprietà dei materiali, in termini di rendering del colore e della temperatura, stabilità chimica e termica, potranno essere modificate grazie alla flessibilità dei metodi di sintesi. La matrice di elezione è la silice porosa ordinata, per via della elevata area superficiale che consente l'introduzione di grandi concentrazioni di CDs fluorescenti. L'analisi delle interazioni CD-matrice rispetto al confinamento chimico/fisico degli emettitori è un argomento chiave della ricerca proposta, per colmare il gap di conoscenze relative al comportamento di CDs in matrici solide.

L'attività di ricerca è pianificata su un periodo di 3 anni ed è suddivisa in 3 unità di lavoro (WP). WP1: sintesi, funzionalizzazione e caratterizzazione di silici mesoporosi ordinate a porosità controllata. WP2: sintesi e caratterizzazione di CDs con differenti procedure chimico/fisiche e a partire da diversi precursori. WP3: intrappolamento dei CDs nelle matrici di silice e caratterizzazione delle proprietà spettroscopiche.

La ricerca proposta ha carattere multidisciplinare e sarà portata avanti in stretta collaborazione con il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche di UNICA e altre collaborazioni scientifiche del gruppo di ricerca. Il progetto è in valutazione nell'ambito del bando nazionale PRIN 2015.

#### **1. Titolo della linea di ricerca**

Proprietà magnetiche di nanomagnetici

#### **2. Responsabile**

Giorgio Concas



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	Giorgio Concas
<b>Ricercatori TI e TD</b>	
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	

### 4. Settori Ricerca ERC (European Reserach Council)

PE3_1	PE3_8	PE3_10
-------	-------	--------

### 5. Parole chiave

Magnetismo	Nanomateriali	Materiali molecolari
------------	---------------	----------------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

ISM-CNR, Unity of Montelibretti (RM)

Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università di Cagliari

### 7. Riassunto

L'obiettivo di questo progetto è lo studio delle proprietà magnetiche di sistemi a bassa dimensionalità, come nanomateriali magnetici e materiali molecolari multifunzionali.

### 8. Inquadramento generale

La determinazione della dipendenza delle proprietà magnetiche dalle dimensioni e forma delle nanoparticelle e dalla struttura delle molecole è l'obiettivo di questo progetto. Nanoparticelle magnetiche rilevanti sono formate da un ossido o sono nanocompositi di due diversi ossidi. Nanomateriali molecolari multifunzionali sono costituiti da un complesso anionico di metalli di transizione (componente magnetico) e da una molecola organica (componente conduttore elettrico).



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### **9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Le proprietà magnetiche di nanomateriali e materiali molecolari saranno studiate utilizzando il magnetometro SQUID (MPMS XL5 della Quantum Design, USA) del gruppo di ricerca. Il magnetometro misura la magnetizzazione dc (direct current) per campi magnetici applicati sino a 5 T, in un intervallo di temperatura da 400 K a 1.9 K, con una sensibilità per il momento magnetico di  $10^{-6}$  erg/G. Questo permette di determinare se il materiale si trovi in uno stato disordinato (diamagnetico o paramagnetico) oppure ordinato (antiferromagnetico o ferromagnetico). Misurando la magnetizzazione in funzione della temperatura, si possono determinare le temperature di transizione magnetiche (di Néel o di Curie). Misurando invece la magnetizzazione in funzione del campo, si possono determinare il ciclo di isteresi e i parametri caratteristici di un ferromagnete (campo coercitivo, magnetizzazione residua e di saturazione), fondamentali ai fini di possibili applicazioni. I materiali contenenti Fe possono essere anche studiati mediante spettroscopia Mössbauer del Fe-57. Il gruppo ha in dotazione tre spettrometri Mössbauer per misure a bassa temperatura da 300 K a 4 K (con un criostato a elio liquido) e ad alta da 300 K a 1000 K (con una camera sotto vuoto). Questa spettroscopia vede lo stato di ordine magnetico; essa permette anche di misurare la frazione di volume ordinato, se diversa dal 100%; questo non è possibile con il magnetometro SQUID.

Verranno studiati, inoltre, aspetti particolarmente rilevanti quali:

- la possibilità di interplay tra gli elettroni di conduzione delocalizzati e i momenti magnetici localizzati;
- l'effetto di un campo magnetico sulle proprietà di trasporto di un conduttore ferromagnetico;
- la possibile coesistenza di ferromagnetismo o antiferromagnetismo e superconduttività nei materiali molecolari.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

Perovskiti ferroiche: relazioni tra struttura e proprietà di bulk, film sottili e nanoparticelle.

### 2. Responsabili

Geddo Lehmann Alessandra e Congiu Francesco

### 3. Partecipanti

Professori ordinari	
Professori associati	
Ricercatori	2
Assegnisti	
Dottorandi	

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_8	PE5_6	PE3_10
-------	-------	--------

### 5. Parole chiave

Perovskiti	Ferroicità	Transizioni di fase
------------	------------	---------------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

CNR-SPIN-Napoli

Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università di Salerno

CNR-Rome

### 7. Riassunto

Le perovskiti ferroiche presentano un ampio spettro di interessanti proprietà, quali (anti)ferroelettricità, (anti)ferromagnetismo, magnetoelettricità, superconduttività. Come tali, esse sono versatili materiali funzionali. La nostra ricerca si propone lo studio di alcune classi di perovskiti funzionali, preparati in forma di bulk, nanoparticelle, film sottili e eterostrutture epitassiali.

### 8. Inquadramento generale

Sebbene le perovskiti siano note in gran numero da molti anni, periodicamente se ne scoprono proprietà inaspettate, cosicché il loro studio rimane un campo altamente competitivo a livello internazionale. Esempi sono la magnetoresistenza colossale scoperta in ossidi di Mn a terra rara e le interessanti proprietà fotovoltaiche scoperte in alogenuri ibridi organici/inorganici. Argomenti caldi sono le transizioni di fase strutturali, le risposte colossali a stimoli esterni in relazione alla microstruttura, la ferroelasticità, la ferroelettricità, le proprietà magnetoelettriche o più in generale multiferroiche, la ricerca di piezoelettrici/ferroelettrici non contenenti piombo, i nuovi fenomeni emergenti all'interfaccia in eterostrutture epitassiali, le potenzialità dei materiali fotovoltaici ferroelettrici, le proprietà emergenti di pareti tra domini ferroici. La nostra ricerca si inserisce in tale stimolante panorama generale. A livello nazionale, in particolare, uno dei temi da noi proposti, dedicato al magnetismo di interfaccia, è stato oggetto di un progetto appena conclusosi (PRIN



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

“Interfacce tra ossidi: nuove proprietà emergenti, multifunzionalità e dispositivi per l’elettronica e l’energia-OXIDE”).

### 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

1) Proprietà di interfaccia tra ossidi perovskitici (2016).

1a) Saranno studiate le proprietà magnetiche e di trasporto di manganiti magnetoresistive epitassiali contenenti interfacce naturali sotto forma di pareti tra domini ferroelastici. Le proprietà non-bulk delle pareti tra domini ferroici sono un tema emergente della ricerca sui materiali perovskitici funzionali. Porteremo a termine lo studio di magnetismo e trasporto di carica in film di La-Sr-Mn-O con domini ferroelastici di tipo stripe. Questo tema è stato già nostro oggetto di ricerca e di esperimenti durante il biennio 2014-2015, all’interno del PRIN "OXIDE" appena conclusosi.

1b) Sarà portata a termine la ricerca sui film epitassiali di Pr-Ca-Mn-O su NdGaO<sub>3</sub> in diverse orientazioni cristallografiche, iniziata alla fine del PRIN OXIDE. La ricerca si propone di evidenziare effetti di prossimità all’interfaccia film-substrato tramite misure di exchange bias e per confronto tra magnetometria SQUID e MOKE.

2) Transizioni di fase in perovskiti del manganese nanostrutturate (2016-2017).

2a) Saranno concluse le ricerche e gli esperimenti sullo studio dell’effetto magnetocalorico quale mezzo di indagine per il riconoscimento delle transizioni di fase puramente magnetiche o magnetostutturali/magnetoelastiche in perovskiti di Mn magnetoresistive. Verranno pubblicati i risultati riguardanti il sistema Pr-Ca-Mn-O per la composizione Pr<sub>0.5</sub>Ca<sub>0.5</sub>MnO<sub>3</sub>, studiato in forma di particelle di dimensione al di sopra del limite superparamagnetico.

2b) Verranno concluse e pubblicate le ricerche sul sistema multiferroico Ho-Ca-Mn-O, sempre per la composizione half-doped, con un confronto tra transizioni magnetiche in stato bulk e in nanoparticelle.

3) Perovskiti ferroelectriche per fotovoltaico e fotocatalisi: sintesi e caratterizzazione strutturale e dielettrica (2016-2018).

Nel campo delle perovskiti ferroiche ferroelectriche, durante il trinennio realizzeremo la sintesi e la caratterizzazione di materiali con potenzialità nel campo della conversione di energia solare. Si tratta di un tema non nuovissimo, ma che ha avuto un nuovo slancio e ha sollevato un rinnovato interesse dopo la recente scoperta delle interessantissime proprietà di fotoconversione degli alogenuri organici/inorganici con incipiente ferroelectricità. I materiali saranno scelti in base al valore della loro soglia di assorbimento. Nel caso di ossidi, verranno preparati campioni ceramici per sintesi allo stato solido e successiva sinterizzazione di pastiglie dense. La caratterizzazione strutturale verrà effettuata per diffrazione di raggi X su polveri. La caratterizzazione dielettrica verrà effettuata tramite un tetser Radiant per la misura di loop P(E) e tramite la misura di costante dielettrica in funzione di frequenza e temperatura. I possibili candidati saranno poi sottoposti a verifica della risposta a illuminazione.





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Si poroso per applicazioni tecnologiche

**2. Responsabili**

Guido Mula

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori</b>	<i>Guido Mula</i>
<b>Assegnisti</b>	
<b>Dottorandi</b>	<i>Mariavitalia Tiddia</i>

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE5_6	PE5_8	PE4_1
-------	-------	-------

**5. Parole chiave**

Silicio poroso	Ibridi organico-inorganico	Terre rare
----------------	----------------------------	------------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

- A. Falqui, (BESE), KAUST, Jeddah, Kingdom of Saudi Arabia
- A. Pezzella, Dip. di Scienze Chimiche, Univ. Federico II di Napoli, Napoli
- M. Mascia, S. Palmas, A. Vacca, DIMCM, Univ. Cagliari
- N. Gambacorti, T. Printemps, P. Bleuet, CEA, LETI, MINATEC Campus, Grenoble, France
- F. d'Acapito, CNR-IOM-OGG c/o LISA - ESRF, Grenoble, Francia

**7. Riassunto**

Nel triennio 2016-2016 concentreremo le nostre attività di ricerca sugli ibridi organico-inorganico tra polimeri (per esempio polianilina e melanine) e silicio poroso. Queste strutture saranno studiate principalmente con mezzi ottici, elettrici, elettrochimici e strutturali. Affronteremo anche il tema della litografia su campioni di PSi funzionalizzati con nitrobenzene. Continueremo anche lo studio del drogaggio elettrochimico di PSi con terre rare e metalli per il miglioramento dell'efficienza di fotoluminescenza e studio di altre caratteristiche anche strutturali del materiale.

**9. Inquadramento generale**

Il Si poroso (PSi) è un materiale molto versatile utilizzato in una vasta gamma di applicazioni. Recentemente, la sua applicazione per i dispositivi ibridi ha attirato una crescente attenzione da parte della comunità scientifica. Data la particolare struttura della struttura interna dei pori del PSi, è una grande sfida scientifica riuscire a capire i meccanismi di impregnazione e i processi di formazione delle interfacce ibride. La struttura dendritica del PSi implica una forte dipendenza dei campi elettrici



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

interni dalla posizione esatta all'interno della struttura e una notevole difficoltà nel controllare accuratamente la capacità delle soluzioni di impregnazione di penetrare completamente i pori.

La struttura complessa dei pori è anche all'origine della mancanza di informazioni sufficienti a spiegare la mancanza di luminescenza efficiente nel PSi:Er. Il miglioramento del sistema PSi:Er richiede quindi una migliore conoscenza dei meccanismi alla base della penetrazione delle soluzioni con Er all'interno della struttura porosa e può essere raggiunto solo attraverso una migliore caratterizzazione dei campioni.

### **9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Nel triennio 2016-2018 intendiamo studiare eterogiunzioni bulk ibride realizzate mediante l'inserimento dei polimeri nella matrice PSi e migliorare la caratterizzazione di sistemi PSi:Er. Più in dettaglio:

1) *Ricerca sulle giunzioni ibride.* Le giunzioni saranno fabbricate a partire da campioni PSi incontaminati o leggermente modificati e da polimeri come melanine e polianilina. La caratterizzazione dei campioni sarà effettuata in vari modi: riflettività ottica, microscopia elettronica a scansione, fotoconducibilità, scansioni I-V, spettroscopia di impedenza elettrochimica. L'attività di ricerca sarà anche imperniata sull'effetto di modifica chimica ed elettrochimica della superficie interna dei pori PSi per migliorare la stabilità dell'interfaccia organico-inorganico. Infatti, la breve vita dei dispositivi è incongruente con la durata dei componenti della giunzione ed è legata alla instabilità dell'interfaccia per ragioni chimiche e strutturali. La modifica della superficie dei pori e / o il processo di fabbricazione di polimeri e la loro composizione saranno realizzati con l'obiettivo di comprendere e ottimizzare l'efficienza e la stabilità degli ibridi.

2) *La ricerca sulle PSi drogato.* Il processo di fabbricazione di PSi:Er per ottenere una forte fotoluminescenza necessita di una conoscenza precisa degli effetti di ogni fase di fabbricazione sui risultati finali. L'obiettivo principale della nostra ricerca sarà sulla caratterizzazione dei campioni in funzione dei vari parametri di processo, per la quale si prevede di utilizzare, in aggiunta ad altre tecniche, la tomografia elettronica 3D per ottenere informazioni strutturali dettagliate su nanoscala. Abbiamo anche intenzione di ottenere una mappatura dettagliata della PL dei campioni (prevediamo di raggiungere una risoluzione spaziale dell'ordine di alcune centinaia di nm) sia sulla superficie superiore che sulla sezione trasversale, al fine di individuare un percorso verso l'ottimizzazione delle strutture PSi:Er dal punto di vista della PL. Per raggiungere questo obiettivo, modificheremo il processo di impregnazione elettrochimica con l'Er, il trattamento termico e altri parametri in ciascuna delle delicate fasi del procedimento di fabbricazione.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

*Caratterizzazione ottica e strutturale di nuovi materiali per l'optoelettronica*

**2. Responsabile**

*Pier Carlo Ricci*

**3. Partecipanti**

--

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE3_12	PE3_1	PE4_1
--------	-------	-------

**5. Key words**

Nanostrutture	Proprietà Ottiche	Materie prime critiche
---------------	-------------------	------------------------

**6 Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

- A. Rizzi - Physics Department Georg-August University of Göttingen
- S. Cuesta-Lopez, Advanced Materials - University of Burgos
- J. A. De Toro Sanchez - UCLM
- F. Beolchini - Università Politecnica delle Marche - UNIVPM
- S. Fuendling, A. Waag Technische Universität Braunschweig;
- Maria Luisa Grilli (ENEA).

**7. Riassunto**

L'attività di ricerca sarà focalizzata allo studio e allo sviluppo di nuovi materiali e sistemi privi di materie prime critiche (CRM) da utilizzare in elettronica e optoelettronica. La ricerca sarà collegata alle attività del commitment Europeo (EIP) RESET. Il tema del riciclo e di nuova vita dei CRM da scarti sarà comunque affrontato. I materiali saranno disegnati, e caratterizzati mediante tecniche di indagine strutturale e ottiche mediante, Spettroscopia Raman, Luminescenza in stato stazionario e risolta in tempo. Tali misure saranno studiate anche in funzione della temperatura

**8. Inquadramento generale**

Le materie prime sono fondamentali nella maggior parte delle applicazioni tecnologiche, ma alcune di loro sono stata recentemente definita dalla Commissione europea come "critiche" per l'elevato rischio di carenza di approvvigionamento previsto nei prossimi 10 anni, e contemporaneamente, per la loro importanza nel settore europeo.

Al giorno d'oggi, diversi dispositivi utilizzano composti con i CRM come elementi fondamentali, nell'illuminazione, (nei LED, OLED, CFL: terre rare, come Ce, Y, Eu e Tb, come CRM), per optoelettronica, come strati conduttivi trasparenti (Indio come CRM), materiali magnetici permanenti (in SmCo, NdFeB). E' quindi necessaria una ricerca sia di base che applicata per supportare lo sviluppo di nuove soluzioni con un contenuto di CRM ridotto o completamente eliminato, mantenendo o migliorando le prestazioni dei dispositivi finali.

**9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Il contesto dell'attività di ricerca proposta rientra nell'ambito delle attività di ricerca del consorzio Europeo (EIP) RESET: Raw Elements Substitution in Electronic and optoelectronic Technologies.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

Le attività di ricerca si svilupperanno su tre temi principali:

- Sistemi ibridi (organico/ossidi metallici)
- Nanostrutture per luminescenza magneticamente indotta
- Nuovi fosfori per LED a base GaN tridimensionali

Il primo progetto, sviluppato in collaborazione con l'università di Gent, il centro ricerche FBK di Trento e il dipartimento di Chimica dell'Università di Cagliari, riguarderà lo studio di diversi sistemi ibridi rappresentati da una struttura organica e una struttura di ossido metallico. La realizzazione di un sistema tenderà a migliorare le proprietà ottiche degli ossidi metallici. Le nuove strutture permetteranno di realizzare dei fosfori basandosi su un più efficiente trasferimento di energia dall'organico alla terra rara drogante dell'ossido metallico tramite il cosiddetto effetto antenna. Una seconda causa di miglioramento delle proprietà ottiche riguarderà anche la stabilizzazione dei difetti superficiali.

La luminescenza indotta magneticamente (MIL) è un campo di ricerca all'avanguardia che richiede la conoscenza trasversale di diversi campi specifici della scienza dei materiali, dal magnetismo alle proprietà delle nanostrutture, dalla caratterizzazione strutturale alla luminescenza. Solo pochi mesi fa (Giugno 2015) è stato dimostrato in alcune pubblicazioni ad alto Impact Factor che l'effetto MIL può essere relativamente facile da ottenere utilizzando materiali magnetici, integrati in strutture flessibili laminate, e accoppiate con piezo materiali fotonici.

La ricerca su questo argomento è proprio all'inizio e studi mirati sono il primo passo per una comprensione effettiva del processo e per lo sviluppo di nuovi sistemi. Su queste basi lo all'interno di una rete internazionale può essere strategica sia dal punto di vista della ricerca di base che per applicazioni innovative future. Questo studio sarà sviluppato in stretto contatto con il gruppo di Applied Nanomagnetism dell'Universidad de Castilla - La Mancha (Spain).

Il tema di nuovi sistemi di illuminazione e in particolare riguardanti tecnologia LED sarà fondamentale nei prossimi anni. Tuttavia, è necessaria una drastica riduzione dei consumi di energia e costi di produzione. Di conseguenza, la ricerca in questo campo ha grande interesse da un punto di vista scientifico. In questa tematica si vuole sviluppare nuovi fosfori ibridi organici/inorganici integrati efficienti strutture 3D InGaN. Lo studio avverrà in collaborazione con l'università tecnica di Braunschweig (TUBS). Al fine di fornire una "standard definito", sia strutture planari che strutture 3D (sviluppate da TUBS) saranno integrate con nuovi fosfori ibridi sviluppati da Università degli Studi di Cagliari.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

*Sviluppo di tecniche spettroscopiche per l'indagine non distruttiva dei reperti archeologici*

**2. Responsabili**

Marcello Salis

**3. Partecipanti**

<b>Assistant professors</b>	<i>Daniele Chiriu</i>
-----------------------------	-----------------------

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE4-2		
-------	--	--

**5. Parole chiave**

Spettroscopia ottica	Luminescenza	
----------------------	--------------	--

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

Nadali Davide (Università degli Studi di Roma "La Sapienza"); Polcaro Andrea (Università degli studi di Perugia)

**7. Riassunto**

Il progetto di ricerca propone lo sviluppo di una strumentazione portatile integrata che unisca la tecnica della spettroscopia micro-Raman, XRF e OSL per le indagini situ di reperti archeologici non trasportabili. Le prime due tecniche sperimentali consentono lo studio strutturale e composizionale dei reperti agevolando l'identificazione della loro regione geografica di origine. La tecnica OSL rende possibile una approssimativa datazione dei reperti esaminati, integrando le precedenti informazioni con quelle relative al corrispondente periodo storico.

**8. Inquadramento generale**

L'analisi di reperti archeologici per mezzo di tecniche non invasive e non distruttive è un argomento di rilevante interesse nel campo dei beni culturali. A questo proposito è assodata l'importanza della spettroscopia Raman nell'identificazione di pigmenti usati in epoca antica per le pitture parietali e per le decorazioni delle terrecotte. A ciò si aggiunge la spettroscopia XRF che fornisce uno dei più accurati ed economici metodi analitici non distruttivi per la determinazione della composizione chimica di molti materiali e che può essere potenziata in combinazione con la spettroscopia Raman. Le suddette tecniche forniscono informazioni di carattere strutturale e composizionale dei campioni, utili per l'identificazione della loro regione geografica di origine. Ulteriori ed importanti informazioni possono essere estratte in modo non invasivo analizzando la luminescenza prodotta per eccitazione ottica dei cristalli dielettrici (quarzi, silicati, alluminosilicati ecc.) contenuti nei reperti. Infatti, ricostruendo il build up della luminescenza mediante l'analisi OSL è possibile implementare una promettente tecnica di datazione dei reperti archeologici.

**9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi.**

La ricerca sarà dedicata alla realizzazione di un setup sperimentale integrato per le caratterizzazioni di reperti archeologici. La messa a punto del sistema sarà effettuata utilizzando materiali di origine certificata ottenuti mediante la collaborazione con ricercatori di Roma e Perugia.

Primo anno:



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

Il primo passo per la realizzazione del setup sperimentale prevede l'assemblaggio di uno spettrometro Raman (IR) portatile con uno spettrometro XRF, in configurazione micro- e macro-, con la possibilità di generare mappe di composizione dei campioni analizzati. I dati raccolti saranno analizzati in collaborazione con ricercatori dell'università di Roma e Perugia per un'accurata caratterizzazione archeologica.

Secondo anno:

Il secondo anno della ricerca sarà dedicato allo studio di una tecnica basata sull'OSL che, utilizzando appositi modelli cinetici dei processi elettronici nei materiali e tenendo conto dei dati NORM (Naturally Occurred Radiative Materials) del contesto geografico, sia capace di fornire una datazione approssimata dei materiali analizzati. Il successo di questa fase della ricerca porterà all'implementazione della tecnica OSL sul sistema realizzato nel precedente anno.

Terzo anno:

In stretta sinergia con le collaborazioni coinvolte in questo progetto, il terzo anno della ricerca sarà dedicato alla messa a punto del setup integrato con una estesa campagna di misure a confronto con i dati sicuri già presenti nella letteratura del settore.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

CONSUNTIVO RICERCHE nel  
Settore "Fisica della Materia"  
Sotto-settore 02B2 "Fisica teorica della Materia"



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

*Studio dei parametri nascosti nei superconduttori non convenzionali*

**2. Responsabili**

Fabio Bernardini

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	<i>Fabio Bernardini</i>
<b>Ricercatori</b>	
<b>Assegnisti</b>	
<b>Dottorandi</b>	

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE3_6 Macroscopic quantum phenomena: superconductivity, superfluidity, etc	PE3_4 Electronic properties of materials, surfaces, interfaces, nanostructures, etc.	PE5_2 Solid state materials
--	--	-----------------------------

**5. Parole chiave**

Superconduttività convenzionale	non	Superconduttori a base di ferro	Interazione superconduttività magnetismo	fra e
------------------------------------	-----	------------------------------------	--	----------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

Brian M. Andersen, Niels Bohr Institute, University of Copenhagen.

A. Cano, Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux CNRS, Francia

Prof. N. Saini, Dipartimento di Fisica, Università di Roma "La Sapienza"

Dr. S. Sanna, Dipartimento di Fisica, Università di Pavia.

A. Martinelli, SPIN-CNR, Genova.

**7. Riassunto**

Si studierà l'origine della superconduttività non convenzionale nei superconduttori a base di ferro. Ci si concentrerà sulla comprensione del ruolo giocato dai così detti parametri nascosti. I calcoli basati sulla teoria del funzionale densità saranno utilizzati per calcolare i parametri  $U$  (repulsione Coulombiana) e  $t$  (parametro di hopping) utilizzati nella modellistica delle interazioni magnetiche.

**8. Inquadramento generale**

Fin dalla sua scoperta nel 1911 la superconduttività è rimasta un argomento affascinante e misterioso. Nel corso degli ultimi decenni sono state scoperte diverse nuove classi di superconduttori non convenzionali, come cuprati, e ferro-pnictici / calcogenuri, fermioni pesanti e materiali attinidi. Ad oggi, anche dopo grandi sforzi di ricerca, non tutte le classi di materiali superconduttori sono pienamente comprese. Si sono accumulati indizi su fatto che questi materiali condividono una





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

fenomenologia comune basata sulla competizione / interazione tra di spin, carica e ordinamento orbitale che è spesso in gioco nei superconduttori non convenzionali. Fluttuazioni di un ordine soppresso sono spesso invocati come origine dell'interazione alla base della superconduttività. Una variante di questo quadro concettuale è quello di coinvolgere fluttuazioni quantistiche intorno a un Quantum Critical Point dove due ordini concorrenti vengono soppressi a temperatura zero.

### 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Lo scopo della mia attività è quello di svelare i così detti parametri fisici nascosti che governano la superconduttività non convenzionale nei superconduttori a base di ferro (IBS). In particolare lo scopo principale è quello di comprendere e quantificare quale grado di libertà tra spin, la carica o la struttura sono determinanti per distruggere / indurre la superconduttività in questi materiali.

Questo obiettivo ambizioso può essere affrontato attraverso il raggiungimento dei seguenti obiettivi intermedi:

- 1) Identificare le regioni del diagramma di fase in cui le fluttuazioni magnetiche dominano.
- 2) Verificare le caratteristiche di ordinamento di carica ed esplorare le sue dinamiche.
- 3) Identificare il ruolo delle distorsioni locali (orbitali o indotte dal reticolo) nella formazione del legame superconduttivo.

Le tendenze di questi tre ingredienti devono essere indagate attraverso lo studio del diagramma di fase di materiali IBS accuratamente selezionati. Concentrerò la mia attenzione sulla famiglia 1111 (es. LaFeAsO). In questi materiali superconduttività e magnetismo possono essere modificati tramite sostituzione di Fe con Mn e di La con terre rare.

I parametri nascosti che governano la superconduttività non convenzionale possono essere svelati individuando le regioni di coesistenza delle diverse fasi ordinate e il comportamento dei loro parametri d'ordine e temperature di transizione

(temperature Neel, temperature critiche  $T_c$ , carica ordini e locali transizioni strutturali, ecc). Particolare attenzione sarà dedicata allo studio di correlazione tra le fluttuazioni di spin e  $T_c$ .

I calcoli DFT forniranno la struttura a bande elettronica per i sistemi studiati all'interno di una collaborazione teorico-sperimentale consolidata con il Dipartimento di Fisica dell'Università di Pavia e il laboratorio SPIN-CNR di Genova. Particolare attenzione sarà dedicata l'effetto della pressione chimica sul rapporto

$U/t$  tra la repulsione di Coulomb e integrale di hopping. Ciò permette di capire se la soppressione di ordine magnetico è dovuto ad una riduzione della

Correlazione elettronica. I valori ottenuti per  $U$  e  $t$  saranno di importanza fondamentale nella descrizione dell'interazione magnetica in spazio reale in presenza di impurezze di Mn secondo il modello RKKY.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

## 1. Titolo della linea di ricerca

Proprietà elettroniche ed ottiche dei materiali (dalle molecole biologiche ed organiche ai cristalli inorganici)

## 2. Responsabili

Prof. Giancarlo Cappellini

## 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	Giancarlo Cappellini
Ricercatori	Andrea Bosin
Assegnisti	Elena Molteni
<b>Dottorandi</b>	Roberto Cardia

## 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_5	PE3_7	PE2_8
-------	-------	-------

## 5. Parole chiave

Fisica dello Stato Solido	Spettroscopia teorica	Molecole organiche e biologiche
---------------------------	-----------------------	---------------------------------

## 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Dr.ssa Maurizia Palumbo, Dipartimento di Fisica, Università di Roma "Tor Vergata"

Prof. Giovanni Onida, Dipartimento di Fisica, Università di Milano

Dr. J. Furthmüller, IFTO-FSU Jena, Germany

Prof. Gian-Marco Rignanese, NAPS, Université Catholique de Louvain, Belgium

Dr. D. Chiriu, Dipartimento di Fisica, UniCa

## 7. Riassunto

Il progetto di ricerca proposto ha a che fare con il calcolo delle proprietà ottiche ed elettroniche dei seguenti sistemi:

A) Sistemi cristallini a largo gap: il caso delle fluoriti

B) Molecole organiche e biologiche.

Tali tematiche vengono affrontate mediante tecniche di simulazione numerica.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

## 8. Inquadramento generale

Le tecniche spettroscopiche giocano un ruolo fondamentale nello studio delle proprietà ottiche ed elettroniche di solidi, molecole ed atomi.

L'introduzione di codici di calcolo detti ab-initio per il calcolo delle proprietà elettroniche di sistemi localizzati ed estesi ha implementato la capacità di comprensione degli spettri ottici ed elettronici di sistemi differenti.

Infatti tali codici di calcolo che non hanno bisogno di parametri esterni permettono il calcolo accurato delle transizioni elettroniche di differente natura e simmetria nei solidi e nelle molecole. L'utilizzo di tali tecniche di spettroscopia teorica è uno dei fini principali del presente piano di ricerca.

## 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

I codici di calcolo a primi principi dedicati al calcolo delle proprietà spettroscopiche dei materiali possono essere di differente natura: schemi DFT-LDA e DFT-GW per gli stati fondamentali ed eccitati, TD-DFT o BSE per il calcolo degli spettri ottici.

Maggiori informazioni sulle tecniche, la loro origine, le comparazioni con i dati sperimentali può essere trovato sul sito della collaborazione ETSF (European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF) ) <http://www.etsf.eu>.

Il programma di ricerca che vorremmo affrontare in collaborazione con colleghi di ETSF consiste delle seguenti parti:

A) Proprietà elettroniche ed ottiche di sistemi a larga gap: le fluoriti cubiche.

Cristalli ionici con la struttura della fluorite hanno tipicamente grandi valori del band-gap e presentano una vasta regione in frequenza di trasparenza.

Dopo aver studiato le caratteristiche del CdF<sub>2</sub> e del BaF<sub>2</sub>, intendiamo estendere i nostri interessi a sistemi differenti (e.g. MgF<sub>2</sub> o SrF<sub>2</sub>). Inoltre pensiamo di effettuare confronti tra differenti codici computazionali sulle proprietà di stato fondamentale, di stato eccitato ed ottiche di sistemi cristallini di bulk per testare quale è quello che presenta le migliori prestazioni per quanto riguarda il risparmio delle risorse computazionali. Tali azioni tenderanno a delineare quale è il metodo più efficiente per attaccare sistemi più complessi (e.g. superfici, difetti di volume o di superficie, interfacce) che possono giocare un ruolo importante per le applicazioni ed i materiali costituiti da fluoriti.

B) Proprietà elettroniche ed ottiche di molecole organiche e biologiche

L'uso delle suddette tecniche computazionali è stato di importante negli ultimi anni per il calcolo delle proprietà elettroniche ed ottiche di molecole interessanti in differenti settori di ricerca: dalla astrochimica e astrobiologia alla scienza dei materiali ed ai beni culturali. Tra le specie molecolari di interesse per i suddetti campi quelle a base carbonacea sono di importanza fondamentale: in particolare gli idrocarburi aromatici policiclici (PAHs) ed i loro derivati dovrebbero costituire una delle famiglie più abbondanti nello spazio. Tali molecole sono di interesse anche per le applicazioni in optoelettronica se considerate in fase solida. Inoltre vorremmo considerare anche biomolecole come le nucleobasi

(e.g. timina (DNA) e uracile (RNA)) che risultano importanti per studi di astrobiologia e astrochimica e per potenziali applicazioni nella scienza dei materiali. Per ricerche nell'ambito dei beni culturali vorremmo anche affrontare lo studio con tecniche differenti di sistemi/composti organici come la cellulosa ed i benzochinoni.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Teoria e simulazione di nanomateriali

**2. Responsabile**

Luciano Colombo

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Luciano Colombo
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori</b>	Claudio Melis
<b>Assegnisti</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>È in programma l'assunzione di 1-2 assegnisti su fondi di progetto</li></ul>
<b>Dottorandi</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>Riccardo Dettori</li><li>È in programma il coinvolgimento di 1-2 dottorandi</li></ul>

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE3_3	PE3_7	PE5_10
-------	-------	--------

**5. Parole chiave**

Simulazioni atomistiche	Nanomateriali	Trasport termico
-------------------------	---------------	------------------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

- Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC), Spain
- Universitat Autònoma de Barcelona, Spain
- Catalan Institute for Nanoscience and Nanotechnology (CIN2), Barcelona, Spain
- University of California at Davis (USA)
- Institute for Polymer Physics, MPI-Mainz, Germany
- École Polytechnique, Palaiseau, France
- Institut d'Électronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN-CNRS), Lille, France
- Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway
- Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati (SISSA), Trieste, Italy
- Università di Milano-Bicocca, Italy
- Istituto Officina dei Materiali (CNR), Cagliari, Italy
- Istituto Nazionale di Ricerca Metrologica (INRIM), Torino, Italy

**7. Riassunto**

Studieremo nuovi nanomateriali per applicazioni tecnologiche avanzate, mediante la combinazione di metodi teorici e computazionali allo stato dell'arte. Ci occuperemo, in particolare, di materiali per la produzione di energia per conversione termoelettrica e fotovoltaica, di trasporto termico alla nanoscala (anche in sistemi 2D), di proprietà elastiche di nanocompositi, di materiali per la ricerca metrologica. Prevediamo, altresì, lo sviluppo di nuovi metodi teorici e computazionali.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

## 8. Inquadramento generale

Le simulazioni atomistiche moderne consentono comprensione quantitativa e progettazione razionale delle proprietà fisiche dei più complessi materiali.

Ciò è dovuto a diversi fattori: la ricerca teorica ha trasformato concetti astratti in algoritmi che la ricerca applicata ha poi convertito in codici numerici; i potenti computer moderni hanno reso possibile la loro applicazione a sistemi reali; il sistematico confronto tra i risultati di laboratorio e le simulazioni ha consentito di sviluppare confidenza su queste ultime, ormai credibilmente applicabili allo studio quantitativo di sistemi e problemi di grande complessità.

Testimonia questo grande successo il fatto che la simulazione atomistica viene al giorno d'oggi applicata a problemi di fisica, chimica, biologia ed ingegneria semplicemente inimmaginabili fino a pochi anni fa.

La nostra ricerca si inquadra in questo paradigma scientifico e sarà finalizzata alla produzione di nuova conoscenza utile per applicazioni tecnologiche avanzate.

## 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

- Trasporto termico in vetri

Le proprietà fisiche dei materiali vetrosi, di grande importanza applicativa, sono intermedie tra quelle dei liquidi e quelle dei solidi. In particolare, la loro conducibilità termica segue una dipendenza dalla temperatura che ancora sfugge alla nostra comprensione. Utilizzeremo dinamica molecolare di non equilibrio (NEMD) ed equazioni di trasporto alla Boltzmann per studiare il trasporto di calore in modelli realistici di silice per impieghi in microelettronica.

- Trasporto termico di interfaccia

All'interfaccia si manifestano i fenomeni della resistenza termica di Kapitza (KR) e della rettificazione termica (TR), entrambi ancora scarsamente compresi. Utilizzando NEMD studieremo i fenomeni KR e TR per interfacce tra semiconduttori e per interfacce ibride polimero-semiconduttore per possibili applicazioni termoelettriche.

- Trasporto termico in fogli atomici

Simulazioni NEMD verranno utilizzati per lo studio del trasporto di calore in sistemi 2D (grafene, BN, MoS<sub>2</sub>, ...) con realistica complessità strutturale (cioè, includenti difetti, bordi di grano, superfici limite).

- Campi elastici di superficie

Integrando simulazione atomistica, calcoli da primi principi ed elasticità di continuo studieremo i campi elastici generati alla superficie di nanoparticelle di silicio curve, sotto sforzo, oppure contaminate od ossidate, così come riscontrato in nanocompositi o in campioni per ricerca metrologica.

- Dissipazione termica in liquidi complessi

Applicheremo un innovativo schema teorico che consenta di simulare un vero esperimento di spettroscopia "pump&probe" in liquidi a legame idrogeno, anche di interesse biologico. In particolare, intendiamo caratterizzare a livello atomistico modalità e tempistiche di dissipazione di luce laser inizialmente assorbita da uno specifico grado di libertà molecolare e successivamente trasferita a tutti gli altri, sia intra- sia inter-molecolari, ricavando così informazioni importanti sulla dinamica del processo.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

*Ossidi ferroelettrici e semiconduttori non-convenzionali per l'elettronica*

### 2. Responsabile

Vincenzo Fiorentini

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	Vincenzo Fiorentini
<b>Ricercatori TI e TD</b>	
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	
<b>Laureandi</b>	Andrea Urru

### 4. Settori Ricerca ERC

PE3_5 Electronic strct.	PE3_11 Magnetism	PE3_12 Nanostuff
-------------------------	------------------	------------------

### 5. Parole chiave

Teoria da principi primi	Multiferroicità	Magnetismo
--------------------------	-----------------	------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

- CNR-SPIN Genova: crescita di interfacce di ossidi
- CNR-ISM Roma: ossidi per l'elettronica
- Uni Parma: ossidi per l'elettronica
- Luxembourg institute of Science and Technology: ferroelectrics

### 7. Riassunto

*Per un futuro prevedibile continueremo lo sviluppo e applicazione di nuovi metodi ab initio a due grosse famiglie di materiali: a) sistemi con ordine magnetico, dipolare, orbitale, di carica, etc. e b) ossidi semiconduttori a grande gap. Le applicazioni di nostro interesse attuale sono, per il primo gruppo, i ferroelettrici non convenzionali e metallici, e per il secondo le leghe di Ga2O3 con In2O3 e Al2O3. Collaborazioni sperimentali e teoriche sono già avviate.*

### 8. Inquadramento generale

La nostra attività si posiziona all'intersezione della teoria avanzata da principi primi e l'applicazione a sistemi per l'elettronica all-oxide del futuro. Utilizziamo sia metodi convenzionali (LDA,GGA,GGA+U) che altri più avanzati (ibridi, SIC), che ci permettono di descrivere materiali che resistono ai primi. Di questi sistemi calcoliamo le strutture e le proprietà elettroniche, ottiche, magnetiche, e di trasporto,



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

usando anche una nostra versione della teoria Bloch-Boltzmann del trasporto, e altri modelli di magnetismo che utilizzano parametri calcolati ab initio. Usiamo occasionalmente modelli di free energy per la stabilità di fase.

Una prima attività riguarda materiali 'visionari', che a parte il loro interesse di base, potrebbero aprire nuove strade di applicazione, ad esempio a memorie ad alta densità e multistato. Un secondo filone riguarda materiali meno avventurosi ma ugualmente difficili, gli ossidi soluzione solida con cationi del gruppo III, che sono importanti nell'elettronica di potenza e nell'ottica UV.

## **9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

### ***Ferroelectrici metallici***

I ferroelectrici sono caratterizzati da instabilità (tipicamente fononiche) che producono un momento di dipolo permanente. Una domanda annosa che stiamo affrontando è se queste instabilità sopravvivono se il materiale viene drogato con cariche libere, trasformandosi gradualmente in un semiconduttore degenere o cattivo metallo, e fino a che livello di drogaggio. Una domanda correlata ma distinta che stiamo considerando è: esiste un materiale nativamente ferroelectrico e al contempo nativamente metallico in fase singola? È difficile fare previsioni su tempi e modi della ricerca, che sono completamente imprevedibili al momento; alcuni elementi preliminari suggeriscono buone possibilità di ottenere una predizione per una fase stabile in tempi non lunghi, e sperabilmente una sua verifica sperimentale entro la fine del triennio 16-18.

### ***Stabilità di fase di leghe di ossidi semiconduttori per l'elettronica UV***

Gli ossidi semiconduttori wide-gap  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  e  $\text{In}_2\text{O}_3$  sono di grande interesse per l'elettronica UV e visibile rispettivamente. Un terzo ingrediente pure di interesse è  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Le leghe che questi composti formano permettono di combinarne le proprietà a piacere. La miscibilità dei composti a generica concentrazione è molto poco nota, soprattutto dato che i tre composti sono caratterizzati da diverse strutture, e ovviamente nulla si sa sulle strutture adottate in funzione delle concentrazioni. Il nostro obiettivo è esplorare il problema con modelli free-energy calcolando l'energia ab initio, e chiarire la situazione per  $\text{GaInO}$  e successivamente per  $\text{GaAlO}$ . Naturalmente il problema è di lunga lena, dato che ci sono tre strutture in competizione per il solo  $\text{Ga}_2\text{O}_3$ , per non parlare del paradigmaticamente politipico  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Nel triennio 16-18 contiamo di ottenere un quadro ragionevolmente completo del diagramma di fase delle due leghe.

### ***Proprietà ottiche e anisotropia in $\text{Ga}_2\text{O}_3$ e $(\text{GaInAl})_2\text{O}_3$***

Quelle ottiche sono un tipico esempio di proprietà aggiustabili con la composizione delle leghe di semiconduttori. Come al punto precedente, ci si scontra con il fatto che le diverse strutture cristallografiche producono diverse strutture elettroniche. Nel caso del  $\text{Ga}_2\text{O}_3$ , ad esempio, è noto il fenomeno dell'anisotropia dell'assorbimento ottico, ma la sua origine è ignota (e stiamo lavorandoci): lo stesso fenomeno potrebbe presentarsi, molto probabilmente in forma ulteriormente complicata, in funzione della concentrazione nelle leghe ternarie. Anche questo è un nostro oggetto di studio per il triennio 16-18.





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

*Problemi d'interesse biologico e farmacologico: studio con tecniche computazionali*

### 2. Responsabili

Paolo Ruggerone

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	<i>Paolo Ruggerone</i>
<b>Ricercatori</b>	<i>Andrea Bosin, Giuliano Mallocci, Attilio V. Vargiu</i>
<b>Assegnisti</b>	<i>Giovanni Serra</i>
<b>Dottorandi</b>	<i>Ramaswamy Venkata Krishnan</i>

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_19	LS2_11	PE4_13
--------	--------	--------

### 5. Parole chiave

Resistenza batterica	Proteine	Simulazioni
----------------------	----------	-------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

- *Dipartimento di Scienze della Vita e dell'Ambiente, Università di Cagliari*
- *Jacobs University, Brema (Germania)*
- *University of Berkeley, Berkeley (USA)*
- *Goethe Universität, Francoforte sul Meno (Germania)*
- *University of Birmingham, Birmingham (UK)*
- *Utrecht University, Utrecht (NL)*
- *Weizmann Institute of Science, Rehovot (Israel)*
- *Université Pierre et Marie Curie - Sorbonne, Parigi (F)*
- *Basilea Pharmaceutica Ltd., Basilea (Svizzera)*
- *Microbiotix Inc., Worcester (USA)*
- *Angelini Farmaceutica, Pomezia (IT)*

### 7. Riassunto

Nei prossimi anni continueremo lo studio dei sistemi di efflusso batterico, cioè, le proteine che contribuiscono a ridurre la concentrazione di composti antimicrobici nei batteri, applicando varie tecniche computazionali e ampliando la tipologia di queste macchine proteiche complesse. Inoltre, estenderemo il database di proprietà chimico-fisiche e dinamiche di composti antimicrobici. Una nuova linea di ricerca riguarda le proteine virali che inibiscono l'attivazione del sistema immunitario. Infine, svilupperemo un protocollo volto a migliorare il potere predittivo del docking molecolare.

### 8. Inquadramento generale





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

Le linee di ricerca preventivate si collocano nell'ambito di progetti nazionali/internazionali finanziati e prevedono una forte interazione con gruppi sperimentali.

Lo studio dei sistemi di efflusso batterici è motivato dal continuo aumento della resistenza batterica agli antibiotici. Sono proprio tali sistemi che contribuiscono alla sopravvivenza di ceppi batterici sempre più resistenti. La comprensione a livello microscopico del loro funzionamento rappresenta un prezioso aiuto per la sintesi di composti capaci di limitare, evitare, o inibire l'azione di tali sistemi.

Il secondo filone di ricerca riguarda proteine essenziali per il virus Ebola, virus caratterizzato dall'estrema mortalità per l'uomo. Lo scopo è di identificare possibili inibitori di tali proteine, partendo anche qui dalle conoscenze microscopiche.

Infine, il terzo filone nasce dall'esigenza di avere tecniche computazionali sempre più attendibili per affrontare i problemi sopradescritti. In particolare ci occuperemo di sviluppare un protocollo per aumentare il potere predittivo di tecniche di molecular docking.

### **9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Le attività che svolgiamo si basano sull'uso di varie tecniche computazionali che vanno dal docking molecolare e metodi bioinformatici a tecniche di simulazione di dinamica molecolare classica e metodi quantistici. Inoltre, viste le dimensioni e le scale temporali delle proteine e dei processi di nostro interesse, ci prefiggiamo di acquisire familiarità con tecniche coarse-grained per simulare sistemi molto grandi per tempi lunghi. Più in dettaglio:

#### Resistenza batterica

- a) Studio dei processi di cattura, selezione ed estrusione di composti antimicrobici da parte di sistemi di efflusso della famiglia RND dei batteri *E. coli* e *P. aeruginosa*. È prevista una forte interazione con partner industriali (2016-2018).
- b) Simulazione del processo di assembling delle componenti proteiche del sistema di efflusso RND di *E. coli* (2017-2018).
- c) Studio delle caratteristiche strutturali e dinamiche di sistemi di efflusso delle famiglie MFS e SME, proteine la cui azione è stata proposta essere in sinergia con altri sistemi di efflusso (2017-2018).
- d) Sviluppo di un database di proprietà chimico-fisiche e dinamiche di composti antimicrobici. Tale database conterrà anche i file necessari per eseguire simulazioni di dinamica molecolare e sarà pubblico (2016-2018).

#### Proteine virali

- a) Tramite simulazioni di dinamica molecolare classica si identificheranno i residui essenziali per l'interazione fra la proteina VP35 e l'RNA, interazione che è alla base della mancata attivazione del sistema immunitario (2016-2018).
- b) Caratterizzazione microscopica dell'interazione fra i residui rilevanti identificati nel punto precedente e molecole che possono svolgere una funzione inibitrice, impedendo la formazione del complesso VP35/RNA (2017-2018).

#### Protocollo di docking

- a) Messa a punto e test di una tecnica computazionale per generare strutture di proteine simili a quelle in complesso con ligandi, ma utilizzando strutture sperimentali di apo-proteine. Utilizzo e test di diversi programmi "site-finder" che permettono di trovare siti putativi di legame data



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

- una struttura di una proteina e in assenza di altre informazioni sperimentali (2016-2017).
- b) Costruzione di un database relazionale di strutture di proteine che sarà messo a disposizione della comunità scientifica allo scopo di migliorare l'efficienza e la attendibilità del docking (2017-2018).



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

CONSUNTIVO RICERCHE nel  
Settore "Fisica della Materia"  
Sotto-settore 02B3 "Fisica Applicata"



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Fisica applicata alla medicina, biologia e farmacologia: simulazioni di proprietà di trasporto in pori e canali biologici

**2. Responsabile**

Matteo Ceccarelli

**3. Partecipanti**

<b>Full professors</b>	
<b>Associate professors</b>	Matteo Ceccarelli
<b>Assistant professors</b>	Andrea Bosin, Mariano A. Scorciapino, Giuliano Mallocci
<b>Post-docs</b>	Igor Bodrenko, Susruta Samanta, Tommaso D'Agostino, Giovanni Serra
<b>PhD students</b>	Silvia Acosta Gutierrez, Dehbia Benkerrou, Alessandro Pira

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE3_19	LS1_8	PE4_11
--------	-------	--------

**5. Parole chiave**

protein channels	Molecular simulations	Dynamics	Rational drug design
------------------	-----------------------	----------	----------------------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

- Jacobs University, Bremen (Germania)
- University of St. Andrews, St. Andrews (UK)
- Università di Catania
- Università di Padova
- CNR Genova

**7. Riassunto**

Nei prossimi anni centreremo le nostre ricerche sullo studio delle proprietà di trasporto di ioni e piccole molecole attraverso membrane di batteri e organelli cellulari all'interno di collaborazioni nazionali e internazionali.

**8. Inquadramento generale**

Le sfide future della medicina richiedono lo sviluppo di nuove strategie in cui sarà predominante lo studio a livello molecolare per meglio comprendere i processi a quella scala e progettare farmaci più efficaci.

Nel campo degli antinfettivi c'è una necessità urgente di scoprire nuove molecole per combattere quei patogeni che sono riusciti a sviluppare diverse forme di resistenza. Nel campo dei tumori c'è la necessità di esplorare nuove frontiere a livello cellulare. Entrambi richiedono l'uso combinato di informazioni a livello biologico e strutturale per permettere una progettazione razionale di nuovi



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

agenti terapeutici. Il nostro gruppo e' attivo su questi due argomenti grazie a collaborazioni nazionali e internazionali, in cui forniamo le nostre competenze sullo studio delle proprieta di trasporto utilizzando simulazioni molecolari. La modellizzazione molecolare, grazie a nuovo hardware e algoritmi sempre piu sofisticati, riesce oggi ad arrivare alla scala del sub-millisecondo, che viene considerata rilevante per i processi biologici a livello cellulare.

**9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Nel campo degli antifettivi, il nostro primo obiettivo e' capire come gli antibiotici con carattere polare permeano i batteri Gram-negativi. Con l'uso della modellizzazione molecolare andremo ad analizzare il meccanismo di filtraggio di una speciale famiglia di canali proteici, le porine, per ricavare i parametri molecolari che modulano la permeazione delle molecole. Una volta ottenuta una verifica sperimentale, potremo ricercare tra i composti conosciuti tutte quelle molecole che hanno una struttura ottimale per la permeazione attraverso le porine. Un'altra possibile strategia e' quella di utilizzare quei sistemi che i batteri predispongono per catturare nutrienti, come ad esempio gli ioni ferro, per introdurre molecole attraverso una strategia "Cavallo di Troia", coniugando gli antibiotici a quei vettori che legano il ferro. In questo caso si potranno usare antibiotici gia conosciuti, ma che falliscono per problemi di permeazione. (2 progetti EU in corso, 1 progetto EU sottomesso)

Nel campo delle ricerche sul cancro il nostro obiettivo primario e' di studiare i mitocondri e i lisosomi come possibili obiettivi di nuove terapie. Questi due organelli giocano un ruolo centrale in diversi processi cellulari scambiando ioni e piccole molecole con il citoplasma attraverso canali selettivi. Poiche questi canali sono coinvolti nello sviluppo di diverse patologie, tra le quali i tumori, sono da considerarsi dei potenziali obiettivi di terapie farmacologiche. Allo stesso tempo sono poco studiati. I nostri studi si incentreranno su un poro del mitocondrio, il canale VDAC, che si esprime con 3 diverse isoforme nelle cellule umane, e il canale TPC dei lisosomi, con 2 diverse isoforme. La modellizzazione molecolare combinata con l'elettrofisiologia (collaborazioni) ci permettera di identificare quelle regioni dei canali che controllano il loro funzionamento e quindi potenziale obiettivo delle terapie farmacologiche. (1 progetto EU sottomesso, 1 progetto nazionale sottomesso)



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

**FISICA APPLICATA ALLA MEDICINA E AI BENI ARTISTICI E AMBIENTALI**

### 2. Responsabile

*Paolo Randaccio*

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Paolo Randaccio
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Viviana Fanti

### 4. Settori Ricerca ERC (European Reserach Council)

PE2_16 Metrology and measurement	LS7_8 Radiation therapy	LS7_2 Diagnostic tools (e.g. genetic, imaging)
----------------------------------	-------------------------	--

### 5. Parole chiave

Dosimetria delle radiazioni ionizzanti	Archeometria	Luce di sincrotrone
--	--------------	---------------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Progetto INFN SYRMA\_CT: sezioni INFN di TS, PI, CA, NA, FE, BO, Elettra, Azienda Ospedaliera Universitaria Ospedali Riuniti Trieste, Università di Sassari.

Progetto INFN AXIOMA: sezioni INFN di FE, LNL, LNS, NA, PD, PI.

### 7. Riassunto

La linea di ricerca si articola in diversi sotto-progetti:

1. Sviluppo e applicazione di nuove tecniche dosimetriche.
2. Tecniche per la datazione di reperti archeologici.
3. Sviluppo di tecniche di mammografia tomografica con luce di sincrotrone.
4. Sviluppo di tecniche spettroscopiche su sistemi freddi per la rivelazione di Assioni Cosmologici.

### 8. Inquadramento generale

1. Nella moderna radioterapia si hanno distribuzioni spaziali di dose complesse che necessitano lo sviluppo di versatili dosimetri tridimensionali utilizzabili nell'uso clinico e che posseggano l'accuratezza e la risoluzione necessaria alla verifica di distribuzioni di dose complesse.
2. Le ceramiche contengono cristalli di Silice e feldspati che presentano il fenomeno della termoluminescenza. I reperti ceramici sepolti per lunghi periodi sono soggetti all'irraggiamento dovuto ai radioisotopi naturali presenti nel terreno, come conseguenza i cristalli suddetti assorbono una dose che può essere misurata tramite la termoluminescenza.
3. La mammografia con luce di sincrotrone ha due aspetti fondamentali:
  - la radiazione monocromatica permette una sostanziale riduzione di dose in quanto la parte di bassa energia dello spettro usato in mammografia convenzionale viene totalmente assorbito dai tessuti senza contributo alla formazione dell'immagine;
  - l'elevata coerenza spaziale del fascio rende visibili gli effetti di contrasto di fase, quando c'è un'adeguata distanza tra oggetto e detector. Tali effetti aumentano la visibilità dei dettagli piccoli e/o di basso contrasto.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

4. Si vuole studiare la fattibilità di un sistema di rilevazione di particelle che sfrutta le transizioni stimulate da laser con emissione di fluorescenza in cristalli dopati con terre rare (InfraRed Quantum Counter).

**9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

1. L'attività è incentrata sulla ricostruzione di sezioni tomografiche da scansioni ottiche lineari. Sarà costruito un sistema di scansione costituito da due distinti apparati: il primo per la rotazione del fantoccio cilindrico intorno al suo asse, il secondo per la illuminazione del fantoccio con un fascio parallelo ottenuto con uno specchio parabolico e focalizzato su un sensore CCD con uno specchio analogo. Inoltre si intende caratterizzare il dosimetro basato su rivelatori OSLD, utilizzati nella radiologia e noti come lastre a fosfori.
2. Il nostro gruppo ha iniziato un'attività di archeometria in collaborazione con il dipartimento di Archeologia dell'Università di Cagliari utilizzando strumentazione e conoscenze nel campo della radioattività ambientale e la dosimetria delle radiazioni. L'attività si è concretizzata finora in una tesi di laurea, una tesi di Master post-laurea e alcune presentazioni in congressi locali.
3. L'obiettivo di SYRMA-CT è di mantenere la leadership italiana nella mammografia in contrasto di fase estendendo il programma clinico della linea SYRMEP alla tomografia della mammella. La struttura della sala radiologica, già disegnata per essere compatibile con la tomografia, andrà adeguata alla nuova metodica, così come il sistema di controllo della dose e dell'esecuzione dell'esame. Aspetto critico per il successo del progetto sarà l'ottimizzazione dosimetrica che implica la scelta dell'energia (nel range 20-34 keV), della risoluzione spaziale del detector (risoluzione spaziale di base 65 micron), spessore della fetta (Max 2 mm), numero di proiezioni tomografiche. Ci si aspetta di poter sfruttare ancora gli effetti contrasto di fase per poter aumentare la visibilità di piccoli dettagli (edge enhancement) o di strutture di basso contrasto (phase retrieval). Il gruppo di Cagliari si occupa della ricostruzione delle immagini tomografiche e dell'ottimizzazione della qualità delle immagine al variare dei parametri di acquisizione.
4. Si prevede l'utilizzo di materiale drogato con lantanidi come scintillatore "coerente", basato sull'amplificazione per emissione stimolata, per depositi di energia relativamente elevata (per esempio raggi X o particelle ionizzanti). Lo sviluppo di scintillatori coerenti con ottima risoluzione temporale è utile anche per applicazioni diverse dalla rivelazione di materia oscura, come ad esempio la PET, tomografia ad emissione di positroni.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

CONSUNTIVO RICERCHE nel

Settore "Astronomia, Astrofisica e Fisica della Terra e Pianeti"

Sotto-settore 02C1 "Astronomia, Astrofisica e Fisica della terra e Pianeti"





UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Studio teorico e osservativo di Stelle di Neutroni e Binarie X

**2. Responsabili**

Luciano Burderi

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	<i>Nicolò D'Amico</i>
<b>Professori associati</b>	<i>Luciano Burderi</i>
<b>Ricercatori</b>	<i>Alessandro Riggio</i>
<b>Assegnisti</b>	<i>Andrea Sanna</i>
<b>Dottorandi</b>	<i>Francesca Loi</i> <i>Sara Loru</i> <i>Fabiana Scarano</i>

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE9_10	PE9_11	PE9_13
--------	--------	--------

**5. Parole chiave**

Astrofisica delle Alte Energie	Radioastronomia	Pulsar
--------------------------------	-----------------	--------

**6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca**

Dipartimento di Fisica, Università di Palermo

INAF Osservatorio Astronomico di Cagliari

INAF Osservatorio Astronomico di Roma

Universität Erlangen-Nürnberg, Sternwartstraße 7, 96049 Bamberg, Germany

Institut de Cie`ncies de l'Espai (IEEC-CSIC), Barcelona, Spain

**7. Riassunto**

I principali temi della nostra attività di ricerca riguardano l'Astrofisica delle Alte Energie e la Radioastronomia, e in particolare lo studio di sistemi binari contenenti un oggetto compatto (stella di neutroni debolmente magnetizzata o un buco nero) e le radio pulsar. La ricerca condotta in questo campo si basa principalmente su osservazioni ottenute con gli strumenti messi a bordo di satelliti per astronomia X e gamma e osservazioni nella banda radio da osservatori terrestri.

**8. Inquadramento generale**

Le binarie X di piccola massa (Low Mass X-Ray Binaries, LMXB) contengono una Stella di Neutroni (NS) con debole campo magnetico ( $< 10^{10}$  Gauss) che accresce materia da una stella compagna di piccola massa ( $< M_{\text{Sole}}$ ). Quasi tutte transienti (luminosità in quiescenza:  $10^{31}$ - $10^{33}$  erg/s; in outburst:  $10^{36}$ - $10^{38}$  erg/s). Se ne deduce che il tasso di accrescimento varia di 5 ordini di grandezza. Le LMXB sono strettamente connesse alle Pulsar Radio al Millisecondo (MSP), una classe, ad oggi, di 294 pulsar



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

con periodi di rotazione inferiori a 10 millisecondi. In base allo "Scenario di Riciclaggio" le MSP sono NS vecchie, ri-accelerate a periodi di millisecondi da una precedente fase di accrescimento di materia e momento angolare. Questo scenario è stato recentemente confermato dalla scoperta di tre MSP di transizione che alternano fasi di MSP a fasi di pulsatori al millisecondo in accrescimento (AMP), che sono sistemi in cui l'emissione di raggi X è generata dall'accrescimento di materia sulla NS, modulata alla sua frequenza di rotazione.

### 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

La nostra Unità include ricercatori con grande esperienza in tutte le bande di interesse (raggi X, radio, ottico, gamma), nonché esperti in evoluzione binaria. In particolare pensiamo di perseguire i seguenti obiettivi:

1. Analisi temporale di futuri outburst di AMP onde ricavare i parametri orbitali e di spin e studiare la loro evoluzione secolare.
2. Analisi spettrale nella banda X delle AMP per determinare le proprietà della regione di emissione.
3. Osservazioni ottiche durante la quiescenza X delle AMP, quando la luminosità di accrescimento è esaurita mentre l'elusiva emissione del dipolo magnetico ruotante è riprocessata dalla stella compagna (che agisce come un bolometro) nella banda ottica.
4. Osservazioni radio in quiescenza delle AMP per individuare pulsazioni coerenti che, pur a lungo cercate, non sono state trovate a tutt'oggi.
5. Sviluppo di modelli teorici evolutivi di LMXB, AMP e MSP. In questo campo intendiamo esplorare il ruolo della pressione di radiazione dell'emissione di dipolo magnetico ruotante che è stato trascurato nella maggior parte degli scenari evolutivi proposti fino ad oggi.
6. La Pulsar Doppia costituisce il miglior banco di prova per le teorie gravitazionali. Intendiamo dunque portare avanti le osservazioni di timing di questo oggetto con la miglior strumentazione disponibile. Ciò permetterà di compiere test senza precedenti della relatività generale e possibilmente di vincolare l'equazione di stato per la materia nucleare.
7. Nel quadro della collaborazione EPTA (European Pulsar Timing Array), saremo in prima linea nel condurre un esperimento senza precedenti, che combinerà le capacità osservative dei più grandi radio telescopi europei. Ciò permetterà di determinare con grandissima accuratezza i tempi di arrivo degli impulsi delle MSP osservate, aprendo la strada alla prima rivelazione diretta del fondo cosmologico di onde gravitazionali.
8. I radiotelescopi dell'EPTA saranno altresì sfruttati per compiere osservazioni a più lunghezze d'onda di un ampio campione di MSP eclissanti. Esse giocano un ruolo primario negli studi evolutivi delle MSP e nella formazione delle MSP isolate.
9. Nel contesto della collaborazione HTRU (High Time Resolution Universe) e SUPERB (SURvey for Pulsars & Extragalactic Radio Bursts), condurremo inoltre una ricerca ultra-profonda di MSP presso il radiotelescopio di Parkes. Alcune delle nuove scoperte saranno utili per i Pulsar Timing Array, altre potranno diventare ulteriori laboratori di relatività generale, altre saranno utilizzate per studiare la formazione di MSP isolate o per indagare la connessione fra AMP e MSP.
10. I database dei satelliti AGILE e Fermi saranno sfruttati per caratterizzare le pulsar gamma radio emittenti, con lo scopo (i) di indagare sulla elettrodinamica delle stelle di neutroni "rotation-powered" e (ii) di identificare pulsar peculiari con proprietà fisiche di transizione rispetto a altre classi di stelle di neutroni.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

11. Condurremo un programma di osservazione (dalla banda radio a quella gamma) per misurare gli spettri risolti spazialmente di un campione di Resti di Supernova e di Pulsar Wind Nebulae (in particolare determinare gli indici e i break nello spettro di sincrotrone). L'obiettivo è quello di riuscire finalmente a determinare se l'emissione d'alta energia da queste strutture estese sia interpretabile con modelli coinvolgenti leptoni ovvero adroni.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

CONSUNTIVO RICERCHE nel

Settore "Chimica Generale e Inorganica"

Sotto-settore 03B1 "Fondamenti delle scienze chimiche e sistemi inorganici"



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 1. Titolo della linea di ricerca

Caratterizzazione strutturale e sviluppo di peptidi antimicrobici e loro analoghi sintetici

### 2. Responsabili

Prof. Mariano Casu e Dott. Mariano Andrea Scorciapino

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	<i>Mariano Casu</i>
<b>Ricercatori</b>	<i>Mariano Andrea Scorciapino</i>
<b>Assegnisti</b>	
<b>Dottorandi</b>	<i>Alessandro Pira, Ilaria Serra</i>

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE4_13	PE4_1	PE4_3
--------	-------	-------

### 5. Parole chiave

Peptidi	Struttura	Spettroscopia
---------	-----------	---------------

### 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Prof.ssa Paula Gameiro, Departamento de Química e Bioquímica da Faculdade de Ciências da Universidade do Porto. L'esperienza di questo gruppo di ricerca permetterà di approfondire alcuni aspetti legati all'indagine del meccanismo d'azione dei peptidi, quali: studio della mobilità laterale dei lipidi di membrana durante l'interazione con il peptide, determinazione del grado di inserimento del peptide in membrana, determinazione quantitativa delle costanti di ripartizione acqua-lipidi relative ai peptidi.

### 7. Riassunto

La ricerca comprende lo studio dei principi che sottendono l'interazione tra peptidi antimicrobici (AMPs) cationici e la componente fosfolipidica della membrana citoplasmatica di batteri e funghi patogeni, essendo la membrana un obiettivo primario del meccanismo microbica dei AMPs.

### 8. Inquadramento generale

Oggi, la resistenza batterica agli antibiotici rappresenta uno dei più urgenti problemi di sanità pubblica mondiale, ed è associato a mortalità e costi elevati. Oltre alle resistenze classiche, acquisite ormai dalla stragrande maggioranza dei patogeni, il problema è accentuato dall'aumento delle infezioni sostenute dai batteri in grado di formare biofilm, in seguito alla colonizzazione di superfici non fisiologiche dell'ospite, e.g. strumenti chirurgici e protesi impiantabili, che costituiscono fino al 60% delle infezioni ospedaliere e per le quali le terapie antibatteriche convenzionali non risultano efficaci. Allo stesso tempo la resistenza agli antibiotici non è stata compensata dall'introduzione di nuove molecole nell'arsenale terapeutico, ed è quindi necessario che strategie alternative si affianchino a quelle tradizionali per trovare nuovi farmaci antibatterici, urgentemente richiesti soprattutto per i patogeni Gram-negativi.



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

### 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Il punto di partenza del progetto è lo studio sistematico di diversi analoghi del SB056, un peptide dendrimerico, progettati al fine di valutare l'effettivo ruolo dei diversi parametri che caratterizzano la classe di questi peptidi, per giungere ad una più profonda conoscenza del loro effettivo meccanismo di azione.

Lo studio sarà concentrato principalmente sulla determinazione del meccanismo di interazione peptide/membrana, ma parte della ricerca sarà dedicata anche alla valutazione dell'attività antimicrobica in vitro dei peptidi sintetizzati rispetto all'originale. Su questi peptidi verranno svolte delle indagini approfondite combinando tecniche sperimentali e di modelling, per meglio comprendere il meccanismo d'azione e la funzione delle diverse unità funzionali, la coda e le unità peptidiche. L'ottimizzazione avrà come obiettivi (i) la lunghezza, (ii) e le insaturazioni della coda, (iii) l'interscambio dei residui carichi Lisina e Arginina all'interno delle catene, (iv) la modulazione della carica netta delle catene.

In particolare, la spettroscopia di fluorescenza sarà utilizzata per raccogliere informazioni sull'associazione peptide/membrana. La formazione di pori, l'attività fusogena e di sequestro di lipidi anionici, verrà studiata per distinguere tra i possibili meccanismi generali proposti per gli AMP. Uno studio combinato NMR/MD fornirà dettagli a livello atomico come la struttura dei peptidi, l'aggregazione, l'interazioni peptide/lipidi, il possibile inserimento del peptide nella membrana o qualsiasi perturbazione della membrana, permettendo di mettere in luce il meccanismo d'azione di queste particolari molecole e la funzione delle diverse unità funzionali del DP, la coda e le catene.

Da un punto di vista scientifico, il presente progetto, permetterà di mettere in evidenza le potenzialità applicative dei peptidi dendrimerici con particolare riguardo alla loro intrinseca modulabilità, gli studi sulla loro struttura, orientamento e organizzazione in ambienti di membrana modello che forniranno informazioni essenziali sui meccanismi microscopici, il riconoscimento peptide-peptide all'interno della stessa e aspetti fondamentali per la comprensione del loro meccanismo d'azione. Questi studi forniranno alla comunità scientifica una migliore comprensione delle caratteristiche strutturali e funzionali da cui dipende l'efficacia e la selettività di questi peptidi antibatterici / antivirali.

#### 1. Titolo della linea di ricerca

Controllo delle proprietà ottiche di materiali funzionali basati su complessi di metalli d- e f-

#### 2. Responsabili

Paola Deplano

#### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	<i>Paola Deplano</i>
<b>Professori associati</b>	<i>M. F. Casula</i>
<b>Ricercatori</b>	<i>Angela Serpe, Luca Pilia (ric A)</i>
<b>Assegnisti</b>	<i>Flavia Artizzu, Davide Espa</i>
<b>Dottorandi</b>	<i>Salahudin Attar</i>

#### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

Pe5_9	PE2_9	PE5_6
-------	-------	-------

## 5. Parole chiave

Chimica di Coordinazione	Ottica	Materiali Molecolari Organizzati
--------------------------	--------	----------------------------------

## 6. Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Numerose collaborazioni internazionali (A. Cannizzo, Berna; A. Vleck, Univ. of London Queen-Mary College; B. Dietzek, Friedrich Schiller Univ., Jena, Germany, ...) principalmente all'interno del progetto COST Action CM1202 "Supramolecular photocatalytic water splitting". Numerose collaborazioni nazionali (D. Roberto, M. Pizzotti, UNIMI; (Istit. Sup. Comunic. e Tec. Inform.); (L. Marchiò UNIPR). Collaborazioni locali all'interno del Dipartimento.

## 7. Riassunto

Il progetto ha come obiettivo la progettazione/sintesi/processamento di molecole fotoattive basate su complessi di metalli d e f e lo studio del modo in cui il contorno molecolare di un sito foto-attivo possa essere modificato per modulare e controllare selezionate funzioni indotte dalla radiazione come l'ottica non lineare del secondo ordine (NLO), luminescenza e attività foto catalitica per la produzione di H<sub>2</sub> da solventi acquosi.

## 8. Inquadramento generale

Materiali molecolari e supra-molecolari foto-attivi sono oggetto di grande interesse con la finalità di comprendere la foto-fisica-chimica di sistemi molecolari complessi, responsabili di trasferimento di energia, separazione di carica, trasferimento elettronico, e isomerizzazione in cromofori interagenti con un ambiente molecolare capace di replicare sistemi naturali. Questi sistemi sono costituiti da un cromoforo disperso in un mezzo molecolare non-continuo e complesso. L'ambiente modula o modifica la risposta del cromoforo all'assorbimento della luce in modo specifico. In questo contesto, i complessi metallici che funzionano da NLO-fori switchabili del secondo-ordine, da fotocatalizzatori per la produzione di H<sub>2</sub> da solventi acquosi e aventi proprietà di luminescenza (compresa la zona spettrale del NIR) sono particolarmente appetibili in relazione alla disponibilità di metodologie chimiche versatili, sostenibili e a basso costo per l'ottenimento delle loro proprietà chimico- fisiche.

## 9. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

La ricerca sarà articolata in due fasi-anni. Fase 1): Preparazione e caratterizzazione di: a) cromofori di ottica di secondo ordine non lineare basato su metallo d<sup>8</sup>ditioleni eterolettici redox o proton NLO-switchabili; complessi multinucleari di metalli f e d/f metals. Preparazione e caratterizzazione di complessi luminescenti basati su ditioleni omolettici di metalli d<sup>8</sup> da studiare come fotocatalizzatori per la produzione di H<sub>2</sub> da solventi acquosi. Preparazione e studio delle proprietà luminescenti di complessi lantanidi multinucleari. Fase 2) L'attività sarà indirizzata al processamento delle specie molecolari in strutture organizzate. Gli NLO-fori



UNIVERSITÀ di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

saranno incorporati e polarizzati in matrici organiche o inorganiche, o su supporti ottici trasparenti, in presenza di un campo elettrico polarizzante e di un appropriato trattamento termico, o per self-assembling. L'effetto di sostituenti chirali sulla organizzazione molecolare nano- e cristallina e quindi sul responso NLO, sarà studiato mediante la tecnica Kurtz-Perry. Le misure NLO saranno eseguite all'Università di Milano. Le proprietà dei complessi luminescenti saranno investigate in matrici ottenute con metodi sol-gel. Verrà investigata la capacità di questo metodo di produrre film e strati otticamente trasparenti con caratteristiche modulabili.

L'attività foto catalitica per la produzione di H<sub>2</sub> sarà studiata in collaborazione col Prof. Benjamin Dietzek presso l' Institute of Physical Chemistry, Friedrich Schiller University, Jena, Germany.

Risultati attesi 1) ottenimento di: a) complessi con responso NLO alto e/o modulabile; b) complessi con proprietà multifunzionali (e.g. NLO e luminescenza); c) complessi come fotocatalizzatori per la produzione di H<sub>2</sub>; 2a) processamento come films sottili dei complessi più promettenti, 2b) comprensione degli aspetti g molecolari e cooperativi capaci di trasformare molecole collettive in un dispositivo otticamente attivo.