



**UNIVERSITA' di CAGLIARI**  
**Dipartimento di Fisica**

**PREVENTIVO SCIENTIFICO TRIENNIO 2013-2015**  
**del**  
**DIPARTIMENTO DI FISICA**

**Approvato dal Consiglio del Dipartimento di Fisica**  
**in data 17.12.2012**



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**INDICE**

<b>1. Presentazione generale</b>	pag. 3
<b>2. Settori di Ricerca dello "European Research Council" (ERC)</b>	pag. 4
<b>3. Preventivi scientifici</b>	
<b>Settore "Fisica delle Interazioni Fondamentali"</b>	
Sotto-settore 02A1 "Fisica sperimentale delle Interazioni Fondamentali"	pag. 6
Sotto-settore 02A2 "Fisica teorica delle Interazioni Fondamentali"	pag. 11
<b>Settore "Fisica della Materia"</b>	
Sotto-settore 02B1 "Fisica sperimentale della Materia"	pag. 20
Sotto-settore 02B2 "Fisica teorica della Materia"	pag. 35
Sotto-settore 02B3 "Fisica Applicata"	pag. 48
<b>Settore "Astronomia, Astrofisica e Fisica della Terra e Pianeti"</b>	
Sotto-settore 02C1 "Astronomia, Astrofisica e Fisica della terra e Pianeti"	pag. 53
<b>Settore "Informatica"</b>	
Sotto-settore 01B1 "Informatica"	pag. 56



## UNIVERSITA' 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:

- 8 professori ordinari (PO)
- 14 professori associati (PA)
- 18 ricercatori a tempo indeterminato (RC-TI)
- 3 ricercatori a tempo determinato (RC-TD)

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



UNIVERSITA' 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  
PE2\_16 Metrology and measurement  
PE2\_17 Statistical physics (gases)

**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



UNIVERSITA' 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, electrodialysis, 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



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

PREVENTIVO RICERCHE nel  
**Settore "Fisica delle Interazioni Fondamentali"**  
Sotto-settore 02A1 "Fisica sperimentale delle Interazioni Fondamentali"



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Produzione e caratterizzazione del plasma di quark e gluoni in collisioni di ioni ultrarelativistici

**2. Responsabili**

Alessandro De Falco, Gianluca Usai

**3. Partecipanti**

Professori ordinari	Giovanna Puddu
Professori associati	Gianluca Usai
Ricercatori TI e TD	Alessandro De Falco
Assegnisti di ricerca	Cristina Terrevoli
Dottorandi	Ester Casula, Alberto Collu, Elisa Incani, Masha Razazi, Sabyasachi Siddhanta
Collaboratori di enti convenzionati: INFN	Alberto Masoni (Direttore di Ricerca), Corrado Cicalò (Primo Ricercatore)

**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), 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. Nel triennio 2013-2015 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 3ms 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 importanti misure in questo nuovo dominio di energie mai esplorate prima.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

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

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  $f(1020)$  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. Durante il 2013 avrà luogo una nuova misura per studiare le collisioni protone-piombo. Le attività legate al programma sperimentale approvato che coinvolgeranno il gruppo di Cagliari sono:

- Partecipazione alla presa dati per la misura delle collisioni protone-piombo
- Sviluppo di infrastrutture informatiche basate sulla tecnologia GRID per l'analisi e ricostruzione dei dati
- Studio della produzione di coppie di muoni prodotti in collisioni Pb-Pb nella regione delle basse masse ( $m < 1.2 \text{ GeV}/c^2$ )
- Sviluppo di tecniche per la sottrazione del fondo combinatoriale nello spettro di massa delle coppie di muoni.
- Controllo e manutenzione dei rivelatori Muon Arm e Calorimetri 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 proposta di costruzione di un nuovo rivelatore di vertice a pixel e microstrip. Il progetto è stato approvato dal comitato scientifico LHCC del CERN nell'autunno del 2012. Questo rivelatore dovrebbe consentire misure di elevata precisione della produzione di mesoni e barioni con charm e beauty. Il gruppo di Cagliari sarà coinvolto nelle seguenti attività:

- Studio della produzione di barioni con beauty
  - Studio e caratterizzazione di nuovi rivelatori a pixel
- Responsabilità all'interno dell'esperimento:
- Conveener del working group per la definizione del nuovo programma di misure per il periodo 2018-2025 col nuovo rivelatore di vertice a pixel e microstrip ed editor della lettera di intenti (G. Usai)
  - Responsabile del Physics Analysis Working group per l'analisi della produzione di coppie di muoni di bassa massa (A. De Falco)

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) concluderà l'analisi dei dati protone-nucleo nel 2013. G. Usai è responsabile di un progetto PRIN *Ripristino della simmetria chirale e ricerca del punto critico della QCD: misure della produzione di dileptoni in collisioni nucleari al SPS del CERN* dedicato allo studio di un nuovo spettrometro per estendere le misure effettuate da NA60 nell'intervallo di energia 20-160 GeV/nucleone al CERN SPS. Le attività che coinvolgono il gruppo di Cagliari sono:

- Simulazioni Monte Carlo per ottimizzare lo spettrometro a pixel e le stazioni traccianti per i muoni
- Studio della produzione di muoni in funzione dell'energia nell'intervallo 20-160 GeV/nucleone e della centralità.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Fisica dei quark e dei leptoni: Flavours pesanti in LHCb e bersagli polarizzati per esperimenti di neutrino

**2. Responsabile**

Biagio Saitta

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Biagio Saitta
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Giulia Manca Rudolf Oldeman
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	

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

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

**5. Parole chiave**

Fisica del Flavour	LHC	Neutrini
--------------------	-----	----------

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

- W. Bonivento, S. Cadeddu, A. Cardini, A. Contu e A. Lai, ricercatori della locale Sezione dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, 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 il progetto sul neutrino: Università e INFN Padova.

**7. Riassunto**

Nei prossimi tre anni, utilizzando i dati raccolti dall'esperimento LHCb al CERN, il gruppo sarà impegnato in una serie di attività legate alla fisica dei "sapori" pesanti ed in particolare in misure di sezioni d'urto di produzione, fisica del charm e decadimenti rari di mesoni B. Il gruppo prenderà inoltre parte attiva alla fase cosiddetta di "upgrade" dell'esperimento LHCb, traendo vantaggio della notevole esperienza di alcuni suoi membri nello sviluppo di rivelatori e nell'elettronica. Ci si aspetta inoltre che gli studi di fattibilità per la realizzazione di un bersaglio polarizzato per la fisica del neutrino saranno completati entro lo stesso periodo temporale, gettando le basi per un nuovo esperimento su larga scala.

**8. Inquadramento generale**

La fisica cosiddetta del "flavour" (sapore) è alla base di un certo numero di questioni importantissime 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



## UNIVERSITA' di CAGLIARI Dipartimento di Fisica

accurato per separarla dalla tipica scala di Planck? La produzione di particelle contenenti il quark  $b$  ad LHC è adesso un ordine di grandezza maggiore di quanto non sia stato accumulato in passato a qualunque macchina acceleratrice e sarà dunque possibile effettuare misure di precisione senza precedenti e rivelare l'eventuale presenza di decadimenti estremamente rari.

Nel Modello Standard delle interazioni elettrodeboli, neutrini left-handed interagiscono principalmente con elettroni (o nuclei) left-handed, a causa della struttura di Lorentz V-A della corrente. Questa caratteristica che rende possibile modificare il rateo di interazioni deboli controllando la polarizzazione del bersaglio, potrebbe costituire l'inizio di una nuova generazione di esperimenti con fasci di neutrini.

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

*Analisi nell'ambito dell'esperimento LHCb.* Il nuovo campione di dati registrato nel 2012, sarà utilizzato per aggiornare e migliorare misure già fatte e per intraprendere nuove analisi. In particolare ci si attende di:

- aggiornare la misura della sezione d'urto di produzione della Upsilon, includendo la polarizzazione e la misura degli stati eccitati  $\chi_b$
- analizzare il decadimento del mesone D neutro in due muoni e due pioni, traendo vantaggio della capacità del rivelatore di identificare muoni, con lo scopo di ottenere il miglior limite al mondo, come già fatto nel 2012 per il decadimento  $D \rightarrow \mu\mu$ .
- Completare lo sviluppo di metodi innovativi per la misura dei rapporti assoluti di decadimento del barione  $\Lambda_c$ .
- Porre limiti stringenti al decadimento raro  $B_s \rightarrow \mu\tau$  che avviene tramite violazione del numero leptonico.

*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. Se necessario, occorrerà sviluppare nuovi rivelatori con risoluzione spaziale maggiore di quella attuale e nuova elettronica digitale.

Un certo numero di componenti il gruppo hanno ruoli di riconosciuta responsabilità all'interno della collaborazione internazionale e saranno quindi in posizione di assicurare il raggiungimento di questi obiettivi.

**Neutrini:** Gli studi per la realizzazione di un bersaglio attivo (quindi che funzioni anche come rivelatore) per interazioni di neutrino, in cui lo stato di polarizzazione degli elettroni è controllato attraverso un campo magnetico esterno, hanno dimostrato nel 2012 che è possibile ottenere circa 80% della polarizzazione massima permessa ponendo piccoli cristalli di scintillatore GSO in un campo magnetico esterno di circa 4 T alla temperatura criogenica di 4K. Per i prossimi anni si prevede di:

- estendere le misure a cristalli di dimensione maggiore già in nostro possesso.
- rivelare (tramite uno SQUID), simultaneamente al segnale ottico di scintillazione, il cambio di magnetizzazione causato dall'energia rilasciata nel cristallo GSO da elettroni o fotoni
- completare gli studi sulle prestazioni a basse temperature di Avalanche Photo Diodes (APD)
- simulare gli effetti di nuovi tipi di interazione di neutrino (correnti right-handed, momento magnetico) per sottolineare e stimare in maniera quantitativa i vantaggi di un bersaglio polarizzato.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

PREVENTIVO RICERCHE nel  
**Settore "Fisica delle Interazioni Fondamentali"**  
Sotto-settore 02A2 "Fisica teorica delle Interazioni Fondamentali"



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Buchi neri e la corrispondenza gravità/teorie di gauge

**2. Responsabile**

MARIANO CADONI

**3. Partecipanti**

Professori ordinari	
Professori associati	MARIANO CADONI
Ricercatori TI e TD	
Assegnisti di ricerca	
Dottorandi	MATTEO SERRA

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

PE2_1	PE2_11	
-------	--------	--

**5. Parole chiave**

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

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

P. Pani, IST , Lisbona, Portogallo; S. Mignemi, Dip. Matematica, Università di Cagliari

**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. Proprietà nonperturbative della QCD
4. Entropia microscopica di buchi neri ed altri oggetti estesi

**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 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.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**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.

1. Descrizione olografica dei sistemi critici

(In collaborazione con M. Serra e P. Pani)

Recentemente 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'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 teorie di campo ( per esempio calcolando esponenti critici e proprietà di trasporto) della dualità.

2. Corrispondenza Domain wall/soluzioni cosmologiche

( In collaborazione con S. Mignemi)

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.

3. Proprietà nonperturbative della QCD

(In collaborazione con G. D'Appollonio, U. D'Alesio e F. Murgia(INFN))

Questa linea di ricerca si propone di utilizzare la dualità gravità/teorie di gauge per lo studio delle proprietà non perturbative della cromodinamica quantistica, in particolare le funzioni di struttura adronica ed altre osservabili di spin in processi adronici polarizzati ad alte energie. In particolare abbiamo in programma di analizzare lo scattering di adroni in modelli olografici per studiare le asimmetrie di spin muovendoci lungo due linee principali: a) Lo studio dei correlatori adronici nel contesto della descrizione duale. b) Lo studio di asimmetrie azimutali e di spin singolo con particolare attenzione ai meccanismi non perturbativi che potrebbero causarle.

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



UNIVERSITA' 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**

Ricercatori TI	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. Boggione (Torino), A. Prokudin (Jefferson Lab, USA), E. Leader (Imperial College, UK), I. Scimemi (Univ. Complutense, Madrid, Spagna), gruppi sperimentali (PAX, COMPASS, HERMES, JLAB, STAR, PHENIX, BELLE, BABAR)

**7. Riassunto**

- Estrazione delle distribuzioni dipendenti da impulso trasverso (TMD) da dati sperimentali in processi di SIDIS ed  $e^+e^-$ , con corretta evoluzione in  $Q^2$ ;
- Ruolo delle TMD in asimmetrie di spin singolo (SSA) per la produzione inclusiva di un singolo adrone o di un adrone in un jet in urti protone-protone;
- TMD e SSA nella dualità tra teorie di gauge e teorie di stringhe

**8. Inquadramento generale**

L'interpretazione degli urti leptone-nucleone ad alta energia nell'ambito del modello a partoni e della QCD ha contribuito in modo rilevante alla nostra conoscenza sulla struttura dei nucleoni. Queste informazioni sono codificate nelle "Parton Distribution Functions" (PDF) - estratte dai dati e non calcolabili - che danno la densità in numero di partoni in un protone con una frazione  $x$  di impulso longitudinale. Tuttavia, molti aspetti della struttura del nucleone non sono rivelati dalle PDF. Ad esempio non rispondono alle domande: i quark nel nucleone hanno un moto orbitale? Come sono distribuiti spazialmente all'interno del protone? Esiste una correlazione tra il moto dei quark, il loro spin e lo spin del protone?

Un tentativo sistematico di rispondere a queste domande è iniziato circa dieci anni fa, con esperimenti dedicati e nuove idee teoriche. L'innovazione principale consiste nello studiare osservabili fisiche sensibili alla struttura trasversa del nucleone. Per nucleoni veloci le proprietà trasverse (rispetto alla direzione di moto), in spin e impulso, offrono nuove informazioni. Queste proprietà, insieme a quelle longitudinali già disponibili, permettono una ricostruzione 3-dimensionale della struttura del protone, codificata nelle TMD. Inoltre, queste stesse funzioni risultano rilevanti nella descrizione di asimmetrie di spin singolo che non trovano altrimenti spiegazione negli usuali teoremi di fattorizzazione collineare al twist dominante. L'attività di ricerca quindi si articolerà prevalentemente su questi due fronti.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

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

Le TMD contengono informazioni sul moto intrinseco di quark e gluoni all'interno di un nucleone in moto relativistico. Quando si aggiunga lo spin all'impulso, esse descrivono le correlazioni tra l'impulso dei partoni, il loro spin e lo spin del nucleone. 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.

In tutte le analisi di TMD svolte finora l'evoluzione di QCD è stata considerata solo a livelli semplificati. Grazie a recenti sviluppi questa può essere ora inclusa in modo corretto e sistematico nell'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 implementazione di codici numerici dedicati.

[12-18 mesi]

Numerose Asimmetrie di Spin Singolo (SSA) sono state osservate, da molto tempo e a energie diverse, in processi adronici inclusivi, come  $pp \rightarrow \pi X$ , con uno dei protoni polarizzato trasversalmente e il pione prodotto con un grande impulso trasverso ( $p_T$ ). Una loro descrizione fenomenologica, basata sulla generalizzazione della fattorizzazione collineare al caso delle TMD, è 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. [9-12 mesi]

Proseguirà l'analisi della produzione di jet a grandi  $p_T$  in collisioni  $pp$ , dove, attraverso la distribuzione azimutale di pioni nel jet, è possibile separare il contributo degli effetti Sivers e Collins e studiarne l'universalità. [4-6 mesi]

Si completerà uno studio fenomenologico dei dati di RHIC di SSA a rapidità centrale con la determinazione di un vincolo sulla funzione di Sivers dei gluoni. [4-6 mesi]

In collaborazione con M. Cadoni, G. D'Appollonio (U. Cagliari) e F. Murgia (INFN-Ca) verrà inoltre avviata un'attività di ricerca complementare sulla dualità tra teorie di gauge e teorie di stringhe, con particolare attenzione ad una migliore comprensione di alcune proprietà non perturbative della cromodinamica quantistica (QCD), come le distribuzioni partoniche, le TMD ed altre osservabili di spin in processi adronici polarizzati ad alte energie. Analizzeremo la diffusione di adroni in modelli olografici per studiare le asimmetrie di spin seguendo due linee principali: a) studio dei correlatori adronici in descrizione duale. b) studio di asimmetrie azimutali e di spin singolo con particolare attenzione ai meccanismi non perturbativi che potrebbero causarle. [12-18 mesi]



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Teoria delle stringhe in spazitempo curvi e ad alta energia

**2. Responsabile**

Giuseppe D'Appollonio

**3. Partecipanti**

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

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

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

**5. Parole chiave**

Superstringhe e D-brane	Corrispondenza AdS/CFT	Campi di spin elevato
-------------------------	------------------------	-----------------------

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

Paolo Di Vecchia, Nordita, Stockholm, Sweden;  
Rodolfo Russo, Queen Mary, University of London, London, UK;  
Gabriele Veneziano, Collège de France, Paris, France.

**7. Riassunto**

Questo progetto è dedicato allo studio della teoria delle stringhe in prossimità della sua scala caratteristica, la scala di Planck, e in spazitempo curvi che, come quelli generati dalle D-brane, possiedono una descrizione microscopica. L'analisi delle ampiezze di stringa verrà utilizzata per chiarire la quantizzazione in una metrica esterna e le simmetrie di gauge delle teorie di campo con spin elevato.

**8. Inquadramento generale**

Le simmetrie della teoria delle stringhe rappresentano una vasta generalizzazione dell'invarianza di gauge e dell'invarianza per diffeomorfismi familiari in teoria dei campi. Queste simmetrie e le loro conseguenze dinamiche non sono manifeste in teoria delle perturbazioni. In modo simile a livello perturbativo non è evidente in che modo la teoria delle stringhe riesca ad evitare le difficoltà che si incontrano negli approcci semiclassici alla gravità quantistica, come quella di riconciliare evoluzione unitaria e proprietà semiclassiche della metrica di buco nero. La matrice S della teoria delle stringhe nel limite di alta energia rappresenta un punto di partenza naturale per cercare di risolvere questi problemi, come sottolineato in passato da D. Amati, M. Ciafaloni e G. Veneziano e da D. Gross e F. Mende.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

Nella sua formulazione perturbativa la teoria delle stringhe definisce, ordine per ordine nella costante di accoppiamento, la matrice  $S$  di una teoria quantistica relativistica di un numero infinito di campi di massa e spin crescente. La teoria ha una struttura molto rigida che riflette i vincoli imposti dall'introdurre in modo consistente in una teoria relativistica una scala di lunghezza fondamentale. L'unico tipo di interazione che ad esempio risulta possibile è l'unione e la divisione tra stringhe in un vertice con tre stringhe, processo incluso automaticamente nell'integrale di Polyakov che definisce la matrice  $S$ . L'unicità della teoria a livello microscopico contrasta con la varietà quasi sterminata dei possibili stati di vuoto, le soluzioni classiche che descrivono la configurazione dei campi di massa nulla. Il calcolo perturbativo dello spettro e delle ampiezze di diffusione richiede infatti la scelta di uno stato di vuoto e, in particolare, di una metrica.

Il limite di alta energia rappresenta il contesto naturale per studiare le singolarità spaziotemporali e le simmetrie della teoria delle stringhe. In questo limite la tensione della stringa diviene trascurabile e tutti i modi di vibrazione possono essere considerati effettivamente di massa nulla. Le ampiezze di diffusione elastiche ed inelastiche degli stati dello spettro massivo, sia ad angolo fissato che a momento trasferito fissato, verranno calcolate ed utilizzate per individuare i gradi di libertà rilevanti ad alta energia, chiarire la forma dei vertici di interazione delle teorie di campo di spin elevato e studiare l'ipotizzato meccanismo di rottura della simmetria che dovrebbe portare all'emergere della scala di Planck e alla riduzione della simmetria di gauge a quella del solo settore a massa nulla.

Il limite di alta energia coincide inoltre con il limite di forte accoppiamento della gravità e permette di studiare le correzioni di stringa classiche e quantistiche alla relatività generale. Questo verrà fatto partendo da due semplici processi: la collisione di due stringhe ad energie dell'ordine della scala di Planck e la diffusione di una stringa nel background generato da un sistema di D-brane. Dal punto di vista semiclassico entrambi i processi implicano una perdita di unitarietà, causata nel primo caso dalla formazione di un buco nero, nel secondo dalla caduta della stringa nella singolarità. Una trattazione completa di questi processi in teoria delle stringhe dovrebbe permettere di provare l'esistenza di una matrice  $S$  unitaria e di individuare la dinamica microscopica descritta in modo solo approssimato dalla quantizzazione nella metrica esterna.

Lo studio della dinamica delle stringhe in spazitempo curvi trova importanti applicazioni anche nella dualità tra teorie di gauge e teorie di stringhe. Lo spettro e le ampiezze di stringa nello spazitempo duale ad una teoria di gauge descrivono infatti la dinamica della teoria di campo a forte accoppiamento. In collaborazione con M. Cadoni, U. D'Alesio e F. Murgia (INFN-CA) studieremo alcuni aspetti non perturbativi di teorie di campo simili alla QCD per le quali si conosce lo spazitempo duale. Analizzeremo soprattutto i meccanismi all'origine delle asimmetrie di spin e le funzioni di distribuzione dei partoni a piccoli  $x$ .



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Interazioni di neutrini esotici e nuovi esperimenti di oscillazione su base corta.

**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>	

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

PE2_2	PE2_3	
-------	-------	--

**5. Parole chiave**

neutrini	sterili	
----------	---------	--

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

Laboratori Nazionali del Gran Sasso, Princeton University

**7. Riassunto**

Calcolo delle possibili conseguenze dell'esistenza di neutrini sterili su futuri esperimenti, su base corta, di oscillazioni dei neutrini.

**8. Inquadramento generale**

Le sezioni d'urto dei neutrini, nell'ambito del Modello Standard, sono ben note e reperibili in letteratura. I dati attualmente disponibili costituiscono un punto di riferimento per determinare ed analizzare i dati che saranno prodotti dai nuovi esperimenti sulle oscillazioni dei neutrini.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

Il programma di ricerca intende prendere in considerazione l'esistenza di uno o più neutrini "sterili" (non previsti nell'ambito del modello standard delle interazioni elettrodeboli) ed mettere in evidenza le conseguenze che la loro esistenza avrà per i nuovi esperimenti di oscillazione su piccola scala (short baseline) dei neutrini.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

PREVENTIVO RICERCHE nel  
**Settore "Fisica della Materia"**  
Sotto-settore 02B1 "Fisica sperimentale della Materia"



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

NeOS: Spettroscopia ottica NIR funzionale alla rilevazione dell'attività neuronale

**2. Responsabile**

Alberto Anedda

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Alberto Anedda, Gian Luigi Gessa
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Marcello Salis
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Marco Marceddu

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

PE4_3	PE3_19	LS5
-------	--------	-----

**5. Parole chiave**

Spettroscopia ottica	Biofisica	neuroscienze
----------------------	-----------	--------------

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

Dr Giancarlo Colombo, CNR Istituto di Neuroscienze, Cagliari

**7. Riassunto**

Il progetto si propone di studiare e in prospettiva di sviluppare, un ad approccio innovativo basato su tecniche di spettroscopia ottica nel vicino IR (NIR) al fine di evidenziare l'attività neuronale in funzione degli stimoli ricevuti dalle diverse zone cerebrali. Particolare attenzione sarà dedicata all'identificazione delle aree responsabili del piacere e della sofferenza.

**8. Inquadramento generale**

La spettroscopia ottica funzionale nella regione NIR (fNIR) rappresenta una sfida stimolante per lo studio anche in condizioni dinamiche, dell'attività cerebrale e propone lo sviluppo di una tecnica non invasiva per l'imaging diagnostico. La metodica prevede l'utilizzo di un raggio laser che, mediante eccitazione trans cranica, incide selettivamente su diverse zone funzionali del cervello; esse, reagendo allo stimolo luminoso, permettono di individuare e localizzare gli specifici compiti cognitivi di loro attinenza. Le misure presuppongono l'analisi delle caratteristiche (intensità, modulazione di fase) della radiazione NIR che ha interagito con l'area cerebrale dove è presente una variazione dell'attività neuronale dovuta a un evento correlato. Una diversa e più intrigante strategia potrebbe risiedere nella rilevazione della diffusione di un'eccitazione impulsata (50-200 ms) che potrebbe essere correlate alla variazione delle proprietà ottiche della zona eccitata in conseguenza di un cambiamento del potenziale transmembranico o del suo volume cellulare. Attualmente questa tecnica è applicata, sperimentalmente, alla determinazione dell'oxyemoglobina (O<sub>2</sub>Hb) e della deoxyemoglobina (HHb) che si riscontrano nella funzionalità neuronale. La base di quest'approccio fisiologico può essere ricercata nell'interazione tra l'attività neuronale e i livelli di ossigenazione legati alle condizioni emodinamiche.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

Questo progetto si propone di evidenziare la funzionalità cerebrale e l'attività neuronale associata con particolare attenzione all'identificazione delle aree responsabili del piacere e della sofferenza.

La ricerca sarà condotta in collaborazione con esperti nel campo delle neuroscienze dell'Università di Cagliari (prof. Gianluigi Gessa) e dell'Istituto di Neuroscienze del CNR (dott. Giancarlo Colombo. Questa sinergia scientifica rappresenta un'opportunità per costruire un'area trasversale di ricerca nel campo vasto della biofisica ed è potenzialmente in grado di iniziare nuove collaborazioni internazionali. La collaborazione si articolerà tenendo conto delle specifiche competenze nel campo dei fisici e dei neurologi.

Il progetto prevede tre anni di attività così distribuite:

I anno:

Durante il primo anno di attività è prevista la caratterizzazione sistematica della diffusione fNIR da parte di tessuti neuronali. Questi risultati permetteranno di individuare le basi fisiche del meccanismo di diffusione, attualmente non ancora univocamente determinato, che potrebbe coinvolgere processi alla Mie, di riflettività o di emissioni fluorescenti o Raman. Saranno, inoltre, valutati differenti approcci dedicando particolare attenzione alla variazione delle proprietà di coerenza della luce diffusa rispetto a quelle dell'eccitazione.

Il anno:

sulla base dei risultati conseguiti, in collaborazione con i ricercatori di neuroscienze, sarà elaborato e portato a termine un protocollo sperimentale che riguarderà: lo sviluppo di un apparato sperimentale dedicato, l'identificazione di opportuni tessuti neuronali che ne permettano una semplice eccitazione. Questa parte del programma sarà condotta su campioni in vitro.

III anno:

L'ultimo anno di attività sarà la parte più ambiziosa dell'intero progetto: la misura dell'attività cerebrale in vivo. In questa fase, poiché essa è essenzialmente basata sulla risposta neurologica di soggetti in vita, sarà indirizzata dai colleghi di neuroscienze per i quali i fisici eseguiranno le misure sperimentali e la caratterizzazione dei segnali ottici diffusi al fine di evidenziare e, quindi escludere, risposte spurie.

Gli esperimenti conclusivi, eseguiti su soggetti in vivo, prevederanno l'utilizzo delle metodologie sviluppate al fine di individuare il comportamento delle zone neuronali deputate al piacere e alla sofferenza.

In questa fase sarà obbligatorio verificare che le tecniche di misura sviluppate possano essere applicate in modo non invasivo e che risultano innocue per i soggetti sotto esame. Da un punto di vista etico questa condizione è ineludibile.

Il team di ricerca partecipa inoltre all'attività proposta dagli altri membri dell'OSG (Dr C.M. Carbonaro, Dr. P.C. Ricci).



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Nano Materiali per la Fotonica e le Energie Rinnovabili

**2. Responsabili**

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

**3. Partecipanti**

<b>Full professors</b>	
<b>Associated professors</b>	G.Bongiovanni, A.Mura
<b>Assistant professors</b>	F.Quochi, M.Saba
<b>Post docs</b>	V.Demontis, C. Figus, D. Marongiu
<b>Ph. D. students</b>	F.Artizzu, M.Aresti, V.Calzia, F.Chen

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

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

**5. Parole chiave**

Nanomateriali	Fotonica	Energie rinnovabili
---------------	----------	---------------------

**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**

Il nostro obiettivo è lo sviluppo di nuovi materiali per le energie rinnovabili e per applicazioni fotoniche avanzate. Sono previste le seguenti attività di ricerca: (i) progettazione, sintesi, caratterizzazione e modellizzazione di nanocristalli colloidali semiconduttori per celle solari avanzate e per la produzione di combustibili mediante conversione diretta dell'energia solare, (ii) progettazione, fabbricazione e caratterizzazione di random nanolaser e laser a plasmoni di superficie (spasers); sintesi e caratterizzazione di complessi di terre rare con efficiente emissione nel vicino infrarosso.

**8. Inquadramento generale**

I nanocristalli semiconduttori e i semiconduttori molecolari hanno bassi costi di produzione e sono facilmente processabili. Inoltre hanno proprietà elettroniche e di emissione ottica che possono essere facilmente controllate anche attraverso la scelta delle loro dimensioni. Essi sono stati concepiti per numerose applicazioni quali, ad esempio, la conversione dell'energia solare, le sorgenti luminose a basso consumo, l'informazione quantistica, i circuiti



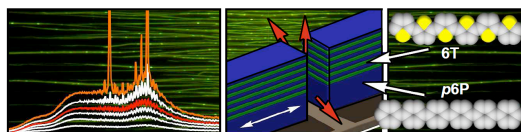
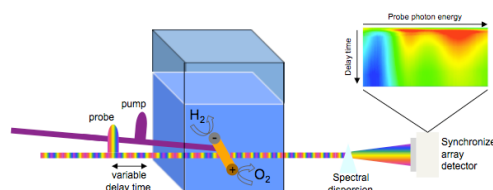
UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

nanofotonici e la formazione delle immagini in biologia. L'attività di ricerca programmata è rivolta (i) allo sviluppo di nanocristalli processabili in soluzione per la produzione a basso costo di energia dal sole e (ii) allo sviluppo di nuove sorgenti luminose molecolari con applicazioni nelle comunicazioni ottiche, nei sensori per sostanze chimiche e nell'imaging ottico.

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

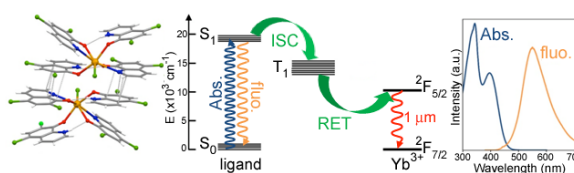
I fenomeni fisici rilevanti per l'utilizzo dei materiali nanostrutturati nell'optoelettronica sono l'assorbimento ottico, la ricombinazione ed il trasporto della carica. Con il nostro lavoro di ricerca sperimentale intendiamo correlare queste proprietà con quelle morfologiche e strutturali. I risultati ottenuti saranno utilizzati per la scelta dei materiali più promettenti e per la loro sintesi.

Riguardo i nanomateriali per la conversione dell'energia solare, il nostro obiettivo principale sarà dimostrare che nanocristalli eterostrutturati e prodotti da soluzione sono capaci di assorbire efficacemente la radiazione luminosa dello spettro solare e trasformarla in energia elettrica (effetto fotovoltaico) o in energia chimica (produzione di combustibili solari e di idrogeno). Saranno sviluppati esperimenti basati sull'assorbimento transiente al fine di seguire i processi fotofisici su scale temporali dal picosecondo al millisecondo.



Riguardo ai materiali per l'emissione luminosa, saranno studiate nanofibre epitassiali eterostrutturate a base di oligomeri organici al fine di realizzare nanolasers. Il nostro obiettivo è di realizzare laser a bassa soglia con regione attiva minore della lunghezza d'onda di emissione sfruttando l'accoppiamento dell'emissione con plasmoni di superficie. Cercheremo anche di osservare l'effetto Purcell che prevede l'accorciamento del tempo di decadimento radiativo in oligomeri posti a distanza nanometrica da opportune strutture metalliche che supportano modi plasmonici di superficie.

Saranno progettati e studiati nuovi materiali molecolari emettitori ed amplificatori di luce nelle finestre ottiche infrarosse per le telecomunicazioni, dove attualmente la rigenerazione del segnale ottico è ottenuta sfruttando le proprietà di emissione di ioni Erbio dispersi in fibre ottiche. Film contenenti ioni lantanidi ad alta concentrazione sono, di contro, soggetti alla formazione di aggregati metallici che riducono l'efficienza d'emissione dello ione. Il nostro approccio al problema prevede di assemblare film di complessi di Erbio dove lo ione lantanide è circondato da leganti organici. Questo fa sì che per gli atomi di Erbio la molecola organica agisca come elemento passivante e solubilizzante e, contemporaneamente, come antenna che assorbe in modo efficiente la radiazione e successivamente trasferisce l'energia acquisita allo ione.





UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Nanostrutture di silice fluorescenti per applicazioni in fotonica e biomedicina

**2. Responsabile**

Carlo Maria Carbonaro

**3. Partecipanti**

<b>Ricercatori TI e TD</b>	C.M. Carbonaro R. Corpino
----------------------------	------------------------------

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

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

**5. Parole chiave**

Spettroscopia ottica	silice	Nanomateriali
----------------------	--------	---------------

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

Prof. M. Monduzzi, Dr. A. Salis, Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università di Cagliari

Prof. S. Gerard, Prof. Y. Ouerdane, Laboratoire Hubert Curien (Université de Saint-Etienne)

**7. Riassunto**

Il progetto di ricerca propone lo studio di nanostrutture di silice per la realizzazione di ibridi organico-inorganici con possibili applicazioni nell'ambito della fotonica e della biomedicina. La matrice ospite è la silice mesoporosa che grazie all'elevata area superficiale consente di ospitare concentrazioni elevate di molecole organiche fluorescenti per ottenere sistemi con elevata efficienza di emissione.

**8. Inquadramento generale**

I nanomateriali mesoporosi a porosità controllata sono oggetto di studio per la progettazione e realizzazione di ibridi organico/inorganici per applicazioni tecnologiche, ad esempio in fotonica (laser a coloranti) e biomedicina (sonde fluorescenti). La silice mesoporosa rappresenta un sistema ideale per l'introduzione di opportune molecole funzionalizzanti (coloranti) data la trasparenza nel visibile e vicino UV, la resistenza meccanica e termica, l'inerzia chimica e l'elevata biocompatibilità. Il processo sol-gel consente di realizzare nanostrutture di silice con forma, porosità, superficie specifica e proprietà tessiture controllate. Le due principali problematiche che limitano l'efficienza dei nanosistemi studiati fino ad oggi sono il fenomeno di rilascio del colorante e la formazione di aggregati dovuta all'elevata concentrazione di colorante. La realizzazione di nuove nanostrutture mesoporose a porosità controllata con elevata efficienza di emissione rappresenta l'obiettivo della ricerca, in particolare per applicazioni come laser a colorante a stato solido o nanosonde fluorescenti per imaging cellulare.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

L'attività di ricerca si inquadra nell'ambito delle tematiche di interesse del Gruppo di Spettroscopia Ottica (OSG) del Dipartimento di Fisica, di cui il team di ricerca fa parte. Il progetto si propone di sviluppare nanostrutture di silice fluorescenti con l'obiettivo di individuare i parametri chimico-fisici che possano consentire la realizzazione di nanostrutture ad elevata efficienza di emissione per possibili applicazioni nel campo della fotonica e delle tecnologie di immagine per biomedicina. In particolare è nostro interesse studiare la morfologia e le proprietà tessiturali della matrice, l'interazione colorante-matrice ospite al fine di determinare una piattaforma multifunzionale con uno o più protocolli di sintesi in grado di consentire la realizzazione di nano e micro particelle ultrafluorescenti da impiegare come mezzo attivo in laser a colorante a stato solido o come nanosonde per l'imaging cellulare. Nello specifico, il progetto si propone di superare due forti limitazioni tipiche dei sistemi ibridi organico-inorganico, il limite di concentrazione, inteso come la concentrazione oltre la quale si manifestano fenomeni di aggregazione che riducono l'efficienza di emissione, e il rilascio da parte delle matrici delle molecole di colorante in funzione dell'interazione con specifici ambienti, causa di riduzione della concentrazione di molecole fluorescenti. A tal fine, si propone lo studio e l'ottimizzazione di metodiche di sintesi per la produzione di silici mesoporose ordinate i cui parametri morfologici, strutturali e tessiturali consentano di massimizzare l'efficienza di emissione del colorante attraverso due azioni: il confinamento delle molecole organiche teso a ridurre i fenomeni di aggregazione e l'ancoraggio delle stesse su superfici funzionalizzate ad hoc per inibire il rilascio. In alternativa la seconda azione sarà anche perseguita mediante sealing delle micro-nano particelle mediante gusci esterni o funzionalizzazione della superficie in relazione allo specifico ambiente (superfici idrofobe in acqua). Infine si propone di valutare la possibilità di bi-funzionalizzare le matrici introducendo, oltre al colorante, anche nanoparticelle metalliche per sfruttare l'interazione plasmonica per aumentare l'efficienza di fluorescenza. Il progetto ha una durata temporale di tre anni ed è articolato in 3 moduli che comprendono: la sintesi, funzionalizzazione e caratterizzazione di materiali mesoporosi ordinati (MMO) a base silice con struttura ordinata e porosità controllata; l'immobilizzazione chimica e/o fisica delle molecole di colorante e la valutazione delle proprietà ottiche delle molecole immobilizzate; la preparazione e caratterizzazione di ibridi bi-funzionalizzati. La ricerca proposta ha un forte carattere multidisciplinare e verrà condotta in collaborazione con il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche. Il progetto è stato proposto all'interno dei bandi RAS per la ricerca di base (annualità 2012) ed è in fase di valutazione.

All'interno della tematica proposta si inseriscono anche il progetto Visiting Professor (RE doped silica fibers: fundamental and applicative aspects) di cui il responsabile è titolare e l'organizzazione del congresso internazionale "SiO<sub>2</sub> Advanced Dielectrics and Related Devices –10th edition" che si svolgerà a Cagliari nel giugno 2014.

Tutti i membri dell' OSG (A. Anedda, P.C. Ricci, M. Salis, M. Marceddu) sono coinvolti nell'attività di ricerca proposta.

Il team di ricerca partecipa inoltre all'attività proposta dagli altri membri dell'OSG (A. Anedda, P.C. Ricci, si vedano le rispettive schede per i dettagli).



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Proprietà magnetiche di nanomagneti

**2. Responsabile**

Giorgio Concas

**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>	Giuseppe Muscas

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

PE3_12	PE3_11	PE4_2
--------	--------	-------

**5. Parole chiave**

nanomagneti	nanoparticelle	ferriti
-------------	----------------	---------

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

ISM-CNR, Unita` di Montelibretti (RM)

**7. Riassunto**

L'obiettivo della presente proposta progettuale e` la preparazione e lo studio di sistemi magnetici a bassa dimensionalita', come nanoparticelle magnetiche e magneti molecolari.

**8. Inquadramento generale**

Tra le nanoparticelle magnetiche, sono rilevanti le nanoparticelle formate da un ossido o i nanocompositi di due diversi ossidi. Tra i magneti molecolari, si segnalano i nanomateriali molecolari multifunzionali, costituiti da un complesso anionico di metalli di transizione (componente magnetico) e da una molecola organica (componente conduttore elettrico). La determinazione della dipendenza delle proprietà magnetiche dalla struttura (dimensioni e forma delle nanoparticelle e struttura delle molecole) e` un obiettivo primario della proposta.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

Le proprietà saranno investigate tramite misure di magnetizzazione DC e AC con un magnetometro SQUID-based e tramite lo studio locale dell'ordine magnetico del Fe con la spettroscopia Mössbauer del Fe-57. Lo studio delle proprietà è completato dalla caratterizzazione strutturale. Il gruppo proponente ha una vasta esperienza pluriennale nella caratterizzazione magnetica di nanoparticelle e di materiali molecolari, in collaborazione con ricercatori dell'Area chimica specializzati nella preparazione degli stessi.

Tra le nanoparticelle magnetiche, risultano particolarmente interessanti le nanoparticelle di ossidi di metalli di transizione (Fe, Co, Ti) che accoppiano un ossido ferrimagnetico a uno ferroelettrico, come le nanostrutture ferrite/perovskite. Questo accoppiamento produce l'effetto magnetoelettrico, che è l'induzione di magnetizzazione da un campo elettrico o l'induzione di polarizzazione da un campo magnetico. Lo studio di queste nanoparticelle richiede una loro approfondita caratterizzazione sia dopo la fase di preparazione delle nanoparticelle che dopo eventuali trattamenti successivi.

Tempistica:

- a) preparazione e studio delle ferriti nanocristalline nel primo anno;
- b) preparazione e studio delle perovskiti nanocristalline nel secondo anno;
- c) preparazione e studio delle nanostrutture ferrite/perovskite nel terzo anno.

Risultati attesi:

- a) determinazione della dipendenza dei parametri magnetici dalle dimensioni e dalla forma delle nanoparticelle;
- b) determinazione della dipendenza dei parametri magnetici dalla morfologia dei nanocompositi;
- c) determinazione della dipendenza dei parametri magnetici dalla struttura delle molecole.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Perovskiti funzionali nanostrutturate: fenomeni emergenti all'interfaccia e effetto di dimensione finita sulle transizioni ferroiche.

**2. Responsabili della linea di ricerca:**

Alessandra Geddo Lehmann e Francesco Congiu

**3. Partecipanti**

Ricercatori TI e TD	Francesco Congiu Alessandra Geddo Lehmann
---------------------	--

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

PE3_11	PE5_4	PE5_10
--------	-------	--------

**5. Parole chiave**

Transizioni ferroiche	Ossidi perovskitici	Materiali nanostrutturati
-----------------------	---------------------	---------------------------

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

Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Genova

Dipartimento di Fisica, Università di Genova

CNR-SPIN-Napoli

CNR-Trieste

CNR-Rome

**7. Riassunto**

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

**8. Inquadramento generale**

Sebbene le perovskiti siano note in gran numero da molti anni, periodicamente se ne scoprono di nuove con proprietà inaspettate, cosicché il loro studio rimane un campo altamente competitivo a livello internazionale. Argomenti caldi sono le transizioni di fase strutturali, la ferroelasticità, la ferroelettricità, le proprietà magnetoelettriche o più in generale multiferroiche, la ricerca di ferroelettrici non a base di piombo, i nuovi fenomeni emergenti all'interfaccia in eterostrutture epitassiali. 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 parte di un progetto recentemente finanziato (Prin 2010 "Interfacce tra ossidi: nuove proprietà emergenti, multifunzionalità e dispositivi per l'elettronica e l'energia-OXIDE").



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

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

La ricerca si articolerà secondo le seguenti tre linee principali:

Topic 1. Questa sezione è dedicata allo studio del magnetismo all'interfaccia tra ossidi. Ci concentreremo su un effetto di accoppiamento tra interfacce di immenso impatto tecnologico e di grande interesse fondamentale, l'exchange bias (EB). Tale effetto verrà ricercato i) in eterostrutture nelle quali un ferromagnete (FM) è interfacciato con un gas elettronico bidimensionale (2DEG) e ii) in eterostrutture tra un FM e una perovskite ferroelettrica e/o magnetoelettrica. La collaborazione sul tema sarà particolarmente stretta con i partner di CNR-Napoli e CNR-Trieste nel PRIN OXIDE.

Topic 2. Questa sezione sarà dedicata allo studio degli effetti di riduzione delle dimensioni di grano sulle transizioni di fase magnetiche di perovskiti nanocristalline con formula generale  $RE_{1-x}A_xMnO_3$  (RE=La, terra rara; A=catione bivalente). In particolare studieremo il passaggio da ferromagnete a superparamagnete nel caso RE=La e A=Ca, e la destabilizzazione dello stato di ordinamento di carica e associato antiferromagnetismo nelle fasi "half-doped" ( $x=0.5$ ) con RE=Pr,Nd,Er,Ho,Yb.

Topic 3\*. In questa sezione studieremo il ruolo che la polarizzazione spontanea in un cristallo ferroelettrico può rivestire nel migliorare le proprietà fotocatalitiche del cristallo stesso. L'efficienza di fotoconversione di un materiale semiconduttore è principalmente limitata dalla ricombinazione delle coppie elettrone-buca fotogenerate; la probabilità di ricombinazione può diminuire drasticamente in un materiale ferroelettrico, il cui campo interno generato dalla polarizzazione spontanea può convogliare cariche di segno opposto in regioni diverse del sistema. I ferroelettrici hanno perciò potenziale impiego in dispositivi fotocatalitici (p.es. per la scissione dell'acqua per la produzione di idrogeno molecolare) e fotovoltaici. Il nostro scopo principale sarà produrre, in forma di nanoparticelle, un fotoconvertitore ferroelettrico innovativo attivo nel visibile. A questo scopo ci concentreremo su una classe di perovskiti stratificate con formula generale  $A_nB_nO_{3n+2}$  (A=catione bivalente o trivalente, B metallo di transizione a valenza mista), le cui temperature di Curie sono le più alte tra tutti i composti ferroelettrici conosciuti. La particolare stabilità dello stato ferroelettrico promette di poter conservare polarizzazione spontanea anche riducendo le dimensioni cristalline al livello nanometrico richiesto per massimizzare la superficie attiva del catalizzatore.

Le nanoparticelle (Topic 2 e Topic 3) saranno sintetizzate per mezzo di tecniche di chimica dolce, le eterostrutture epitassiali (Topic 1) saranno prodotte mediante PLD e MBE dai partner del PRIN OXIDE. Le nanoparticelle verranno caratterizzate mediante diffrazione di raggi X per polveri, magnetometria SQUID, HRTEM, SEM. Le eterostrutture epitassiali saranno caratterizzate con diffrazione di raggi X ad alta risoluzione e magnetometria SQUID.

\*Progetto in corso di valutazione ((Regione Autonoma della Sardegna, L.R. 7, Progetti di Ricerca Fondamentale o di base, annualità 2012).



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Studio del Si poroso per applicazioni tecnologiche

**2. Responsabile**

Guido MULA

**3. Partecipanti**

Professori ordinari	
Professori associati	
Ricercatori TI e TD	Guido MULA
Assegnisti di ricerca	
Dottorandi	

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

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

**5. Parole chiave**

Silicio poroso	Drogaggio	Caratterizzazione
----------------	-----------	-------------------

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

- A. Falqui, R. Ruffilli, Nanochemistry, Istituto Italiano di Tecnologia, Genova
- A. Pezzella, Dip. di Scienze Chimiche, Univ. Federico II di Napoli, Napoli
- M. Mascia, S. Palmas, Dip. di Ingegneria Meccanica, Chimica e dei Materiali, Univ. Cagliari, Cagliari

**7. Riassunto**

Nel triennio 2013-2015 ci si propone di approfondire lo studio del drogaggio del Si poroso con terre rare e con altri elementi con caratterizzazioni ottiche, strutturali ed elettrochimiche. Ci si propone inoltre di studiare le potenzialità del Si poroso come materiale per applicazioni fotovoltaiche mediante impregnazione con molecole organiche.

**8. Inquadramento generale**

Il Si poroso è un materiale con elevato potenziale per numerose applicazioni grazie a diverse sue caratteristiche: alta superficie sviluppata (fino a  $900\text{m}^2/\text{cm}^3$ ), flessibilità nei parametri di formazione, rapidità di processo, biocompatibilità, ... La notevole superficie interna pone diversi problemi di non facile soluzione, primi fra tutti la comprensione delle reazioni chimiche alla superficie del materiale quando all'interno dei pori vengono inserite molecole organiche o sostanze inorganiche. Nonostante i processi di formazione siano controllati, manca ancora una comprensione dettagliata dei fenomeni coinvolti. Inoltre, anche quando la morfologia è sostanzialmente identica (come nel caso del Si mesoporoso di tipo  $n^+$  o  $p^+$ ) ci sono differenze di comportamento non ancora oggetto di studio approfondito.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

Nel triennio 2013-2015 ci si propone di approfondire le ricerche sul processo di formazione del Si poroso e delle sue applicazioni tecnologiche. I principali filoni di ricerca saranno tre:

- 1) Studio del Si poroso impregnato con molecole organiche per applicazioni nel fotovoltaico. A questo scopo si prevede di testare diverse molecole organiche, a partire dalla melanina, al fine di migliorare il range spettrale di assorbimento della matrice porosa e l'efficienza di fotoconversione. I parametri principali, oltre alla sostanza utilizzata, saranno le modalità di impregnazione, le dimensioni dei pori e le modalità di realizzazione dei contatti per le misure dell'effetto fotovoltaico. I campioni saranno caratterizzati mediante studi elettrochimici, di fotocorrente e strutturali.
- 2) Studio del Si poroso impregnato con terre rare e altri metalli. In questa linea di ricerca ci si propone di approfondire la comprensione del processo di drogaggio per via elettrochimica del Si poroso. In particolare, si vogliono studiare i parametri di formazione e i meccanismi di formazione al fine di migliorare l'omogeneità dei campioni e ottimizzare le loro performance. Verranno esaminati diversi elementi, a partire dalle terre rare, anche in funzione delle proprietà della superficie interna dei pori (per esempio livello di ossido). Lo studio verrà effettuato mediante caratterizzazioni elettrochimiche, di spettroscopia ottica e strutturali.
- 3) La complessità dei fenomeni coinvolti nei processi d'impregnazione e/o drogaggio del Si poroso generato dalla notevole superficie interna dei pori, fa sì che esistano relativamente pochi studi dettagliati dei processi coinvolti. Una tecnica ben adatta allo studio delle proprietà di materiali porosi è la spettroscopia di impedenza elettrochimica, che è molto sensibile alle proprietà di superficie dei materiali ed è quindi indicata nel caso di materiali porosi nei quali la superficie interna dei pori è poco accessibile. Per questo, verranno studiati processi di formazione/impregnazione/drogaggio di campioni di Si poroso che implicano modifiche dello stato superficiale dei campioni utilizzando analisi combinate di spettroscopia di impedenza elettrochimica in regime galvanostatico, evoluzione del processo elettrochimico con riferimento ai parametri di formazione, spettroscopia ottica e caratterizzazioni strutturali.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Caratterizzazione ottica e strutturale di semiconduttori nano-strutturati per optoelettronica.

**2. Responsabile**

Pier Carlo Ricci

**3. Partecipanti**

--

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

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

**5. Parole chiave**

Nanostrutture	Proprietà Ottiche	Semiconduttori
---------------	-------------------	----------------

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

- Prof. A. Rizzi, Physics Department Georg-August University of Göttingen
- Dr. F. Fumagalli e Dr. G. Gulleri, Micron Semiconductor Italia S.R.L.
- Prof. S. Ardizzone e Dr. G. Cappelletti, Dipartimento di Fisica Chimica e elettrochimica – Università di Milano.
- Dr. S. Cuesta-Lopez, Advanced Materials - University of Burgos
- Prof. A. Bonfiglio, Dr F. Delogu e Dr. S. Palmas, DIEE e DICM, Università di Cagliari

**7. Riassunto**

L'attività di ricerca sarà rivolta allo studio delle proprietà ottiche e strutturali semiconduttori nanostrutturati quali GaN, InGaN, Silicio e nuove strutture organico\inorganico. Le tecniche di indagine utilizzate principalmente saranno: spettroscopia Raman e tecniche di caratterizzazione ottica quali fotoluminescenza, fotoluminescenza risolta in tempo, termoluminescenza e fotocorrente.

**8. Inquadramento generale**

La ricerca di base su nuovi materiali semiconduttori e in semiconduttori nanodimensionati è fortemente richiesta per le grandi potenzialità di applicazione in diversi campi dell'elettronica e dell'optoelettronica. La continua necessità della riduzione delle dimensioni spaziali dei circuiti integrati genera effetti secondari legati anche ai ricoprimenti dielettrici delle nanostrutture di silicio, quali stress nel semiconduttore o difetti nel dielettrico (SiO<sub>2</sub>, SiN) stesso. Le proprietà legate alle ridotte dimensioni possono esse impiegate anche per lo sviluppo di nuovi dispositivi LED con emissione accordabile in lunghezza d'onda in funzione sia della geometria della nanostruttura che della composizione composti di ternari a base di Nitruro.

Inoltre, anche l'uso di nanostrutture ibride organico/inorganico in dispositivi elettronici quali LED e transistor ad effetto di campo è diventato un approccio potenzialmente molto importante per incrementare la versatilità di questi dispositivi e, contestualmente ridurre i loro costi di produzione.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

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

L'attività di ricerca si inquadra nell'ambito delle tematiche di interesse del Gruppo di Spettroscopia Ottica (OSG) del Dipartimento di Fisica, di cui il responsabile di ricerca fa parte. La ricerca si articolerà su tre tematiche principali riguardanti lo studio e lo sviluppo di nuovi materiali nanostrutturati semiconduttori per applicazioni in elettronica e optoelettronica. La novità della ricerca riguarderà sia lo studio di effetti secondari legati alla dimensionalità del semiconduttore, sia lo sviluppo di nuovi materiali ibridi. In particolare le tre linee di ricerca avranno una durata triennale e si possono identificare in:

- Studio degli effetti di stress e di difettività in nanostrutture di Silicio
- Studio delle proprietà ottiche e strutturali di biosensori organici a effetto di campo.
- Studio delle proprietà di emissione di materiali nanostrutturati a base di Nitruro.

La prima di queste tematiche, svolta in collaborazione con la Micron Semiconductor Inc., consiste nello studio di monocristalli di Silicio mediante spettroscopia Raman e di Luminescenza. La prima di queste tecniche verrà utilizzata per stimare in maniera non distruttiva, lo stress indotto dalle particolari condizioni di crescita dei rivestimenti dielettrici (spessore dell'ordine dei nanometri) di campioni "flat" e nanostrutturati. Contemporaneamente si svolgeranno misure di luminescenza e luminescenza risolte in tempo, anche in funzione della temperatura, per studiare la natura dei difetti strutturali interni al dielettrico di ricoprimento.

Lo studio delle proprietà ottiche e strutturali di biosensori organici a effetto di campo. viene effettuato in collaborazione con il DIEE e il DICM dell'Università di Cagliari e con il dipartimento di Chimica dell'Università di Sassari, all'interno del progetto "BIOFET" finanziato dalla Regione Autonoma della Sardegna (codice CRP -27388). Il progetto si inquadra nell'ambito applicativo dell'elettronica organica, più specificamente della sensoristica basata su semiconduttori organici e mira a studiare da diversi punti di vista le interfacce che costituiscono un dispositivo a effetto di campo per la rilevazione di specie in soluzione. In particolare ci si occuperà di indagare con metodi ottici (Raman, luminescenza) le superfici di metallo funzionalizzato organicamente, con lo scopo di valutarne il ricoprimento e il tipo di legame, lo spessore, la densità dei film depositati e la natura di eventuali difettività.

La terza tematica di ricerca sarà svolta in collaborazione con il dipartimento di Fisica dell'Università di Gottinga e si inquadra nello sviluppo di eterostrutture nanostrutturate  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ , volta allo sviluppo di nuovi materiali LED con emissione accordabile nel visibile. Più in particolare ci si occuperà di mettere in relazione le proprietà di emissione con le proprietà strutturali effettive e di stimare l'efficienza quantica delle strutture ottenute, con lo scopo di fornire opportuni feedback di preparazione. All'interno della tematica proposta si inserisce anche il progetto Visiting Professor ("Optical and structural properties of GaN-based hetero- nanostructures") di cui il responsabile è titolare.

Tutti i membri dell' OSG (A. Anedda, C.M. Carbonaro, R. Corpino, M. Salis, M. Marceddu) sono coinvolti nell'attività di ricerca proposta.

Il responsabile di questa ricerca partecipa inoltre all'attività proposta dagli altri membri dell'OSG (C.M. Carbonaro A. Anedda) si rimanda alle rispettive schede per i dettagli).



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Studio da principi primi di superconduttori ad alta  $T_c$

**2. Responsabile**

Fabio Bernardini

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Sandro Massidda
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Fabio Bernardini
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Marco Monni
<b>Dottorandi</b>	

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

PE3_8		
-------	--	--

**5. Parole chiave**

Proprietà elettroniche	Superconduttività	Magnetismo
------------------------	-------------------	------------

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

Halle, Max Planck Institute (Prof. E. K. U. Gross)

Università di Parma (Prof. R. De Renzi)

Università di Genova (Prof.ssa M. Putti)

Università di L'Aquila (Dott. G. Profeta, Prof.ssa A. Continenza)

**7. Riassunto**

Si studieranno materiali superconduttori ad alta  $T_c$  a base di ferro. Lo studio di natura computazionale basato sull'approccio DFT, si concentrerà sulla relazione esistente fra magnetismo e superconduttività. A tale scopo si interpreteranno dati sperimentali di magnetoresistenza e  $\mu$ SR resi disponibili dai nostri partner sperimentali.

**8. Inquadramento generale**

Si studierà la superconduttività nei ferro-pnictidi, una classe di superconduttori scoperta nel 2008, la cui  $T_c$  raggiunge 55 K. Questi materiali sono importanti perché sono un esempio di superconduttore ad alta  $T_c$  la cui correlazione elettronica non rende impossibile lo studio da principi primi delle proprietà elettroniche con l'approccio DFT. Si suppone che il meccanismo di superconduzione sia mediato da interazioni di tipo magnetico. È quindi importante indagare la relazione esistente fra superconduttività e magnetismo in questi materiali.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

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

Lo scopo della attività di ricerca che svolgeremo in questo triennio è lo studio della relazione esistente fra magnetismo e superconduttività nei superconduttori ad alta  $T_c$ . La nostra indagine si concentrerà sui ferro-pnictidi anche se la scoperta di nuovi materiali potrebbe ampliare la nostra indagine. Grazie alla collaborazione con i partner sperimentali di Genova (Prof. M. Putti) e di Parma (Prof. R. De Renzi) avremo a disposizione dati sperimentali sulle proprietà magnetiche di composti 1111 ( $\text{REFeAsO}$ ,  $\text{RE}=\text{La,Ce,Pr,Sm}$ ) 122 ( $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ ) ed 11 ( $\text{FeTe,FeSe}$ ). Si tratta essenzialmente di dati di magnetoresistenza, effetto Hall, resistività la cui interpretazione è alla base della comprensione della struttura a bande di questi materiali. In particolare siamo interessati a studiare in che modo la comparsa/scomparsa della fase magnetica influisce sulla struttura a bande e sulla topologia della superficie di Fermi.

A questi dati di carattere macroscopico si aggiunge lo studio del magnetismo a livello microscopico con la tecnica della muon spin rotation  $\mu\text{SR}$ . Questa tecnica permette l'indagine a livello microscopico dell'intensità dei campi magnetici percepiti da un muone nella regione interstiziale di un solido. L'interpretazione di questi dati è meno diretta di quella data dalla spettroscopia Mössbauer e richiede l'identificazione del sito di localizzazione del muone. Si tratta quindi di una tipica tecnica dove la collaborazione fra indagine teorico-computazionale basata sulla DFT e indagine sperimentale si complementano bene. Studieremo quindi le proprietà magnetiche microscopiche dei ferro-pnictidi già menzionati confrontandoli con i dati sperimentali. Questa seconda parte della nostra attività non si limiterà ai soli ferro-pnictidi dato che la tecnica è del tutto generale e permette di studiare qualunque materiale magnetico e non. In entrambe le indagini si usufruirà delle collaborazioni esistenti con i gruppi dell'Aquila e del Max-Planck in Halle, data la loro esperienza nello studio teorico della superconduttività sia nei ferro-pnictidi che nello studio di materiali magnetici. In collaborazione con l'Istituto Max-Planck di Halle studieremo una nuova metodologia di predizione di materiali superconduttori basata sull'utilizzo combinato della teoria SCDFT e di un algoritmo di ricerca basato sul così detto *minimal hopping method*.

Prevediamo che lo studio sarà articolato in tre anni con la seguente suddivisione essenzialmente in base al materiale da studiare:

2013 – Indagine sulle proprietà magnetiche dei composti  $\text{FeTe}$  e  $\text{FeSe}$  sotto pressione

2014 – Analisi delle proprietà di trasporto in ferro-pnictidi del tipo 1111 ovvero  $\text{REFeAsO}$  ( $\text{RE}=\text{La,Ce,Pr,Sm}$ )

2015 – Studio delle proprietà magnetiche di  $\text{BaFe}_2\text{As}_2$ ,  $\text{CaFe}_2\text{As}_2$  in funzione del drogaggio. Studio di nuovi superconduttori suggeriti dall'indagine tramite *minimal hopping method*.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Proprietà di eccitazione elettronica ed ottiche di materiali

**2. Responsabile**

Prof. G. Cappellini

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	Giancarlo Cappellini
<b>Ricercatori TI e TD</b>	
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	

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

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

**5. Parole chiave**

Fisica dello Stato Solido	Spettroscopia	Fisica Applicata alla Medicina
---------------------------	---------------	--------------------------------

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

Dr.ssa Maurizia Palummo, Dipartimento di Fisica, II Università di Roma "TorVergata"

Dr. G. Mulas, OAC-INAF, Cagliari, Italy

Prof.F. Bechstedt, Direttore IFTO- FSU Jena ,Germany

Prof.Fabio Finocchi, INSP, UPMC Université Paris 06, CNRS, France

Prof. Lucia Reining, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France

**7. Riassunto**

Il progetto di ricerca in oggetto si articolerà nelle seguenti due linee principali per quanto riguarda le proprietà di eccitazione elettronica ed ottiche di solidi cristallini a larga gap (il caso delle fluoriti) e di molecole di idrocarburi aromatici policiclici (PAHs) e loro derivati.

Tali tematiche verranno affrontate mediante tecniche di simulazione computazionale.

**8. Inquadramento generale**

Le tecniche spettroscopiche sono fondamentali nello studio delle proprietà elettroniche ed ottiche di solidi, molecole ed atomi. Per quanto riguarda la fisica dei solidi sono fondamentali gli spettri di assorbimento ottico, gli spettri di perdita di energia degli elettroni e le misure di riflettività per le superfici per la comprensione della struttura elettronica di materiali fondamentali per le moderne applicazioni dell'optoelettronica. Tale scenario è stato modificato più recentemente dalla possibilità dell'utilizzo di nuovi codici di calcolo, cosiddetti ab-initio, per la determinazione delle proprietà di eccitazione elettronica di sistemi localizzati e sistemi estesi. Tali codici, senza l'utilizzo di parametri esterni, hanno permesso la determinazione accurata delle proprietà che coinvolgono transizioni elettroniche in solidi e molecole di varia natura e simmetria. L'utilizzo di tali tecniche sarà alla base del programma di ricerche che intendiamo svolgere.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

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

I codici di calcolo per la determinazione delle proprietà spettroscopiche, senza l'utilizzo di parametri esterni possono andare dagli schemi DFT-LDA (density functional theory in approssimazione di densità locale per l'energia di scambio e correlazione) a quelli DFT-GW (in cui vengono trattati gli effetti di self-energia elettronici nell'approssimazione GW), TD-DFT (in cui si considera l'evoluzione temporale della densità elettronica) e BSE (in cui l'equazione di Bethe-Salpeter viene utilizzata per la trattazione dell'interazione elettrone-buca). Maggiori informazioni sulle tecniche, la loro genesi, il confronto con i dati sperimentali si possono trovare sul sito <http://www.etsf.eu> della rete ETSF. L'European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF) è una rete di più di 200 ricercatori di spettroscopia teorica. Il programma di ricerche da noi proposto da svolgere in collaborazione con colleghi di ETSF si articolerà nelle seguenti linee:

A) Proprietà elettroniche ed ottiche di sistemi cristallini a larga gap ed in particolare fluoriti

I materiali a larga gap sono molto promettenti per le possibili applicazioni nell'ottica moderna e nell'optoelettronica. I cristalli ionici con la struttura delle fluoriti ad esempio sono caratterizzati da grandi valori per il band-gap e da una altissima caratteristica di trasparenza in un ampio range di frequenze. Per le proprietà di stato fondamentale pensiamo di utilizzare codici basati sullo schema DFT-LDA. Ci occuperemo poi delle eccitazioni di singola particella: per prima cosa pensiamo di utilizzare l'approssimazione GW per l'operatore di self-energia. Quindi potremo affrontare il problema del calcolo per i composti di interesse della funzione dielettrica in differenti approssimazioni di crescente difficoltà (DFT-LDA, GW). Nella fase finale del progetto effettueremo anche dei test per capire la possibilità di effettuare calcoli con inclusione di effetti di interazione elettrone-buca nello spettro di assorbimento ottico.

B) Proprietà elettroniche ed ottiche di PAHs e loro derivati

L'utilizzo delle tecniche computazionali descritte precedentemente ha avuto un'importanza strategica negli ultimi anni per la determinazione delle proprietà di eccitazione elettronica ed ottiche di molecole di interesse per l'astrofisica e l'astrochimica. Tra le specie molecolari di interesse per l'astrochimica sono fondamentali le macromolecole a base carbonacea e fra queste specie una classe estremamente studiata è quella degli idrocarburi aromatici policiclici (PAHs) e dei loro derivati, che si ritiene siano una delle famiglie più abbondanti nello spazio. Alcune di queste molecole sono di importanza fondamentale, anche nella fase solida, per le loro applicazioni in optoelettronica. È quindi evidente la potenzialità di questo tipo di studi in entrambi i settori disciplinari della scienza dei materiali e dell'astrochimica. Inoltre un punto che rende strategico il nostro studio è quello che una buona frazione delle molecole in studio risultano essere cancerogene; i nostri risultati potrebbero quindi essere importanti per possibili interazioni con ricerche a carattere biomedico sugli stessi sistemi. Tra i possibili risultati previsti elenchiamo i seguenti. Studio di famiglie omologhe di PAHs e loro derivati, fullereni, nanostrutture a base di carbonio. Determinazione delle proprietà strutturali. Calcolo delle proprietà di quasi-particella mediante differenze di energie totali (metodo  $\Delta$ -SCF). Proprietà di assorbimento ottico con varie tecniche: studio di tutto lo spettro, fino all'ultravioletto estremo, tramite TD-DFT in spazio e tempo reali e a bassa energia, studio dettagliato delle singole transizioni e della natura delle specifiche eccitazioni elettroniche, tramite TD-DFT in spazio delle frequenze. Sistemi carichi e sistemi neutri, differenze nelle proprietà ottiche e di eccitazione elettronica.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Basi localizzate nello studio delle proprietà di cristalli e cluster.

**2. Responsabile**

Francesco Casula

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Francesco Casula
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori TI e TD</b>	
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	

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

PE3_5	PE3_12	
-------	--------	--

**5. Parole chiave**

Fisica computazionale	Basi localizzate	Cluster
-----------------------	------------------	---------

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

**7. Riassunto**

Confronto tra i risultati ottenuti con metodi da primi principi e con basi localizzate allo scopo di dimostrarne l'utilità nelle indagini sistematiche delle proprietà di materiali e cluster.

**8. Inquadramento generale**



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

Si intende realizzare un confronto tra i risultati ottenuti con funzioni localizzate e con altri metodi da principi primi per studiare i vari punti di forza dei diversi metodi.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Teoria e simulazioni di nanomateriali

**2. Responsabile**

Luciano Colombo

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Luciano Colombo
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Claudio Melis
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	Claudia Caddeo Fabio Manca Maria Ilenia Saba

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

PE3_12	PE3_17	PE5_10
--------	--------	--------

**5. Parole chiave**

Materiali per l'energia	Nano-/bio-meccanica	Simulazione atomistica
-------------------------	---------------------	------------------------

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

- Università di Genova, Modena, Padova, Roma "La Sapienza", Trieste, Politecnico di Milano e SISSA (progetto PRIN-GRAF); Università di Milano (progetto ELDABI)
- Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR): Istituti IOM, IMM e SPIN
- Institut d'Electronique, Microelectronique et Nanotechnologie, Università di Lille (F)
- Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)

**7. Riassunto**

Siamo interessati a sviluppare nuova conoscenza fondamentale sulle proprietà fisiche di nano-materiali di interesse applicativo in campi molto diversi, quali: nano-/opto-elettronica, produzione fotovoltaica e termoelettrica di energia, nano-/bio-meccanica. Utilizzeremo una combinazione di metodi teorici e computazionali tipici della fisica della materia, della meccanica statistica e della meccanica dei continui.

**8. Inquadramento generale**

Il 7FP-EU e la prospettiva "Horizon 2020" pongono al centro dell'interesse europeo da un lato lo sviluppo di nuove tecnologie per la produzione di energia a basso impatto ambientale e dall'altro il miglioramento delle tecnologie bio-medicali.

Questo scenario definisce la necessità di un intenso programma di ricerca su nuovi nano-materiali, le cui caratteristiche chimico-fisiche siano miratamente modificate alla scala dei loro costituenti elementari, in modo da ottenere prestazioni e caratteristiche utili alle suddette sfide tecnologiche. Qui le simulazioni atomistiche giocheranno un ruolo determinate, nella prospettiva nota come *materials-by-design*.

In questo contesto noi intendiamo indirizzare le nostre ricerche di carattere teorico-computazionale verso la comprensione delle proprietà fisiche fondamentali di nano-



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

materiali di interesse tecnologico, quali: grafene, termoelettrici SiGe, silicio nanocristallino, elastomeri dielettrici, biopolimeri.

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

Parola-chiave ENERGIA - Svilupperemo simulazioni atomistiche di grande taglia (sia dinamica molecolare di equilibrio o di nonequilibrio, sia calcoli di struttura elettronica) per lo studio dei seguenti problemi, tutti di immediato interesse applicativo in campo energetico:

- nanomateriali ibridi per applicazioni fotovoltaiche: studieremo la fotofisica delle interfacce tra polimeri organici e nanoparticelle di metalossido, in particolare cercando di capire quali parametri strutturali, chimici e fisici concorrano a definire la massima efficienza di fotoconversione;
- silicio nanocristallino per optoelettronica e fotovoltaica: studieremo gli effetti di confinamento quantico dei portatori in nano-/etero-strutture a base silicio;
- trasporto termico alla nanoscala: studieremo le modalità di flusso termico in nastri di grafene (ipotetici dissipatori di calore in dispositivi ULSI) ed in campioni SiGe nanostrutturati (ipotetici termoelettrici ad alta figura di merito).

Queste ricerche saranno svolte nell'ambito del progetto PRIN 2010-2011 "GRAF".

Parola-chiave NANO-/BIO-MECCANICA - Combineremo metodi di simulazione atomistici (dinamica molecolare e Monte Carlo) e di teoria del continuo elastico per comprendere il comportamento meccanico (in regime sia lineare sia nonlineare) di nano-compositi, di fogli atomici e di sistemi a base polimerica. In particolare ci occuperemo di:

- grafene: caratterizzeremo i moduli di elasticità e la risposta a carico sia di grafene ideale o difettato, sia di grafene (isomero idrogenato del grafene) stechiometrico o non stechiometrico;
- polimeri modello di interesse biologico: studieremo con metodi di meccanica statistica l'elasticità (curva trazione-elongazione) di catene polimeriche di lunghezza finita, nelle condizioni sperimentali corrispondenti a "forza costante" (*ensemble* di Gibbs) o "allungamento costante" (*ensemble* di Helmholtz);
- elastomeri dielettrici: studieremo la fisica dell'impianto di cluster metallici neutri in film polidimetilsilossano (PDMS), caratterizzandone la dipendenza sia dai parametri di impianto (dimensioni, temperatura ed energia del cluster) sia dalle caratteristiche dell'ospite (matrice polimerica tipo "*entangled-melt*" oppure "*cross-linked*"). Determineremo altresì l'evoluzione microstrutturale post-impianto (rugosità di superficie, coalescenza dei cluster impiantati, formazione di nanoporosità);
- materiali nanostrutturati: modellazione multiscala delle proprietà elastiche di nano-compositi, di interfacce a composizione variabile, di sistemi multi-fratturati.

Queste ricerche saranno svolte nell'ambito dei progetti ELDABI e IS CRA "UCIP".

Parola-chiave SIMULAZIONI ATOMISTICHE - Ci occuperemo di sviluppi metodologici ed algoritmici abilitanti simulazioni di grossa taglia ( $O(N) \sim 10^6$ ). In particolare, lavoreremo su:

- algoritmi numerici a bassa complessità (metodi  $O(N)$  e *divide-and-conquer* per calcoli quantistici su sistemi estesi);
- metodi di accelerazione per simulazioni atomistiche;
- algoritmi di "*efficient particle labeling*".



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Ordine, magnetismo, e trasporto in sistemi correlati: teoria e applicazioni

**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>	Francesco Ricci

**4. Settori Ricerca ERC**

PE3_5	PE3_11	PE3_12
-------	--------	--------

**5. Parole chiave**

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

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

- CNR-ISC Roma: nuovi funzionali densità per materiali correlati
- CNR-ISM Roma: materiali per la spintronica
- Università di Liegi e Ginevra: trasporto elettronico in bassa dimensionalità
- Trinity College Dublin: metodi teorici per materiali correlati
- CNR-SPIN Genova: crescita di interfacce di ossidi

**7. Riassunto**

Continueremo lo sviluppo e l'applicazione di nuovi metodi ab initio a sistemi nanostrutturati con ordine magnetico, orbitale, di carica, etc., dove i metodi convenzionali falliscono. Le applicazioni di nostro interesse attuale sono i materiali multiferroici (ferro-elettrici (FE) e ferromagnetici (FM)) non convenzionali, e i nanosistemi di interfaccia ibridi FE/FM per applicazioni al resistive switching. Abbiamo poi collaborazioni nell'area del trasporto elettronico alle interfacce di ossidi, e del diluted-impurity magnetism negli ossidi. Intendiamo poi sviluppare il metodo per estenderci alla fisica degli elementi di transizione delle shell f.

**8. Inquadramento generale**

La nostra attività si posiziona all'intersezione della teoria avanzata da principi primi e l'applicazione a sistemi "visionari" per l'elettronica all-oxide del futuro. A parte il grande interesse e valore di base, sono possibili interessanti applicazioni, ad esempio, a memorie ad alta densità e multistato e a elementi dell'elettronica spin-selective.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

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

I metodi che utilizziamo spaziano dai metodi convenzionali (LDA,GGA,GGA+U) a quelli più avanzati (ibridi, SIC). Usiamo anche una nostra versione della teoria Bloch-Boltzmann del trasporto e altri modelli di magnetismo che utilizzano parametri calcolati ab initio. Questo ci permette di descrivere materiali che resistono ai metodi convenzionali quando necessario. Le nostre attività sono ora descritte brevemente.

**Materiali multiferroici (ferro-elettrici (FE) e ferromagnetici (FM)) non convenzionali**

Lo studio sul doping magnetico del ferroelettrico topologico  $\text{LaTiO}_{3,5}$  verrà esteso ad altre impurezze che producono ferromagnetismo. Si calcoleranno i coefficienti magnetoelettrici vibrazionali in alcuni sistemi particolarmente promettenti (LTO:Mn, LTO:Fe). Ipotizziamo di concludere alcuni (due o tre) di questi studi, già in corso, entro il 2013.

**Nanosistemi di interfaccia ibridi FE/FM**

Abbiamo iniziato lo studio del campo depolarizzante ferroelettrico e dell'accumulazione di carica spin-polarizzata alle interfacce tra ferroelettrici ( $\text{PbTiO}_3$ ) e metalli magnetici ( $\text{SrRuO}_3$ , Co). Pianifichiamo di usare PTO drogato con V (che dovrebbe renderlo FM) per pilotare la carica di interfaccia e il campo depolarizzante in vista di applicazioni p.es. a valvole di spin o a trasporto reso selettivo pilotando la resistività tramite tuning dello stato magnetico. PTO:V e l'interfaccia non-drogata dovrebbero essere conclusi entro il 2013.

**Struttura elettronica e trasporto elettronico alle interfacce di ossidi**

Estendendo i nostri precedenti studi sul sistema paradigmatico  $\text{SrTiO}_3/\text{LaAlO}_3$ , prevediamo di studiare STO  $\delta$ -doped con Nb e le interfacce  $\text{SrZrO}_3/\text{SrTiO}_3$  e  $\text{SrSnO}_3/\text{SrTiO}_3$  per confermare che il meccanismo di localizzazione che produce gas di elettroni bidimensionali alle interfacce di ossidi isolanti con la natura correlata degli orbitali 3d del Ti. Probabilmente due di questi lavori dovrebbero uscire verso fine 2013.

**Diluted-impurity magnetism negli ossidi**

Intendiamo capire il meccanismo del FM indotto da Cr in  $\text{In}_2\text{O}_3$  e  $\text{Sn:In}_2\text{O}_3$  (ITO). Il nostro lavoro preliminare indica che le spiegazioni precedentemente proposte sono errate, e Cr non può diventare FM senza l'assistenza di difetti, probabilmente nativi. L'interesse in questo lavoro è ovvio, dato il vasto uso dell'ITO nella tecnologia opto- e nanoelettronica. Anche qui, il lavoro Cr:ITO si concluderà entro il 2013, e quello dei difetti nativi potrebbe essere ad uno stadio avanzato.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Studio computazionale di sistemi d'interesse biologico e farmacologico

**2. Responsabile**

Paolo Ruggerone

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Paolo Ruggerone
<b>Professori associati</b>	Matteo Ceccarelli
<b>Ricercatori TI e TD</b>	
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Attilio V. Vargiu
<b>Dottorandi</b>	Pierpaolo Cacciotto, Daniela Fadda

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

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

**5. Parole chiave**

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

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

- Jacobs University, Brema (Germania)
- University of Berkeley, Berkeley (USA)
- University of St. Andrews, St. Andrews (UK)
- Karlsruher Institut für Technologie, Karlsruhe (Germania)
- King's College, Londra (UK)

**7. Riassunto**

Nei prossimi anni concentreremo l'attenzione su proprietà di trasporto di molecole attraverso membrane batteriche e mitocondriali umane nell'ambito di un progetto IMI e un progetto PRIN-2010. Inoltre continueremo lo studio delle ossigenasi, enzimi che sono preposti all'ossidazione di substrati, e dei twin arginine translocation systems, incaricati del trasporto di proteine attraverso membrane cellulari e batteriche.

**8. Inquadramento generale**

Come già accennato la nostra ricerca su alcuni dei meccanismi di resistenza batterica si colloca molto bene all'interno del contesto internazionale, vista l'approvazione recente di un progetto IMI della Comunità Europea. L'emergenza associata all'insorgere di ceppi molto resistenti agli antibiotici è stata evidenziata in diversi documenti delle organizzazioni sanitarie internazionali. Lo studio delle proprietà di trasporto attraverso membrane mitocondriali umane ha ricevuto un finanziamento nell'ambito del PRIN-2010. Per gli altri due principali argomenti di ricerca, ossigenasi e twin arginine translocation systems (Tats), essi si collocano nell'ambito di collaborazioni internazionali. Si tratta di sistemi proteici molto complessi e sofisticati che svolgono dei ruoli importanti per quanto riguarda la catalizzazione di processi (ossigenasi) e il trasporto di proteine funzionali all'esterno di



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

cellule e batteri senza provocare la rottura delle membrane (Tats). Pubblicazioni su riviste ad alto impact factor sono già in fase di stampa (Tat, Cell) o in fase di preparazione (ossigenasi).

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

I metodi utilizzati nei nostri studi sono computazionali e presentano diversi gradi di accuratezza e approssimazione. Si va dalle metodologie quantistiche (QM) a principi primi alle simulazioni di dinamica molecolare (MD) classica, dalle tecniche avanzate di campionamento dell'energia libera alle simulazioni di Monte Carlo cinetico, fino all'utilizzo di programmi di docking e più prettamente bioinformatici. Più in particolare:

Resistenza batterica

- a) Studio dei processi di traslocazione di antibiotici attraverso pori batterici e di estrusione di substrati da parte delle efflux pumps (MD classica, Metadinamica, Steered MD, Targeted MD, tecniche QM) (2013-2015);
- b) Uso di programmi di docking e di bioinformatica per individuare i siti di legame di composti in sistemi di efflusso e in pori batterici e le strutture delle suddette proteine in assenza d'informazioni sperimentali strutturali (2013-2015);
- c) Uso di simulazioni di Monte Carlo cinetico per estrarre i parametri cinetici associati alla permeabilità delle membrane batteriche e all'estrusione. Tali simulazioni saranno basate sui dati ottenuti dagli studi dei punti a) e b) (2014-2015).

Permeabilità membrana mitocondriale

- a) Studio della permeazione di molecole attraverso la proteina VDAC della membrana mitocondriale (MD e Metadinamica)
- b) Studio del meccanismo di gating nella proteina VDAC (metadinamica)

Ossigenasi

- a) Studio della diffusione di ossigeno e acqua all'interno della matrice proteica e confronto con densità elettronica da diffusione di raggi X. (MD classica, Metadinamica)

Twin arginine translocation systems

- a) Studio mediante MD classica delle possibili configurazioni di equilibrio delle diverse componenti del sistema che, combinandosi, permettono il passaggio delle proteine attraverso le membrane. Identificazione delle interazioni rilevanti e dei residui cruciali per la stabilità del sistema (2013-2014);
- b) Studio tramite tecniche di simulazione di eventi rari dei processi di assembling delle Tats. Identificazione delle fasi del processo di assembling. (2014-2015).



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Studio dell'implementazione di diagnosi e terapie avanzate in cancerologia, neuropatia, cardiologia

**2. Responsabile**

Mario Caria

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Mario Caria
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	

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

LS7_1 Medical engineering and technology	LS7_2 Diagnostic tools	LS7_10 Public health and epidemiology
--	------------------------	---------------------------------------

**5. Parole chiave**

Elettrofisiologia	Cancerologia	
-------------------	--------------	--

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

**7. Riassunto**

Si intende studiare l'implementazione di procedure innovative nel campo della diagnosi e del trattamento dei tumori, della cardiologia e della neuropatia in ambito ospedaliero. Si intende confrontare l'Health Technology Assesment nei diversi paesi e predire lo sviluppo di tecniche diagnostiche e terapeutiche innovative e studi clinici pilota per portare ad adeguati DRG.

**8. Inquadramento generale**

Attualmente diversi sistemi di HTA sono in uso nel mondo. La loro implementazione varia da paese a paese ed in Italia per macro regioni. Diversi organismi nazionali ed internazionali sovrintendono alla migliore implementazione diffondendosi nei criteri di giudizio. Lo studio e' volto a verificare per diverse patologie che vanno dal tumore al seno a quello della vescica o la diagnosi non invasiva dell'angina sino alla neuropatia periferica, come l'HTA puo' adattarsi alle nuove tecniche proposte. Questo viene fatto attraverso l'analisi degli studi clinici pilota volti a verificare l'HTA e tempi e modi di assegnazione di adeguati DRG.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

Al fine di verificare per diverse patologie che vanno dal tumore al seno a quello della vescica o la diagnosi non invasiva dell'angina sino alla neuropatia periferica, come l'HTA puo' adattarsi alle nuove tecniche proposte, viene fatta l'analisi degli studi clinici pilota volti a verificare l'HTA come pure tempi e modi di assegnazione di adeguati DRG.

Ci si aspetta di analizzare dapprima le nuove terapie per il trattamento delle metastasi o comunque diversi tumori solidi tra i piu' diffusi (mammella, polmone, pelle, etc..). Per essi si verificano studi clinici pilota pe terpaie innovative tra le quali immunoterapie e si associano le relative diagnosi sia per tecniche di imaging che di analisi in vitro.

Si studia la possibilita' ed eventuale implementazione di tests ad hoc associati alla terapia ed un possibile DRG su scala internazionale.

Per questa fase si stima in circa sei mesi, il tempo necessario allo svolgimento dell'attivita'.

I risultati attesi sono sull'evidenza di un possibile DRG su scala internazionale.

Per il tumore all'apparato riproduttivo si analizzeranno lo stato dei sistemi di rilascio con o senza elettrostimolazione ed i farmaci associati e come dosaggi e tempi si devono adattare ai DRG in vigore.

Successivamente si analizzeranno le diagnosi e terapie in ambito neuropatico con particolare riferimento alla elettrofisiologia. Si analizzeranno i progressi fatti sull'ottenimento di DRG specifici per aree geografiche.

Per questa fase si stima in circa sei mesi, il tempo necessario allo svolgimento dell'attivita'.

I risultati attesi sono sull'evidenza di DRG specifici per aree geografiche.

Il settore della cardiologia non invasiva sara' analizzato dal punto di vista delle nuove soluzioni di monitoraggio remoto e l'impatto sulle nuove procedure per il loro HTA. Verra' svolta in tal senso un'analisi delle possibilita' offerte dalle nuove ACO negli USA e come queste avranno un impatto sulle HTA in tutti i settori dove l'EHR e' possibile per la specifica patologia. Nel caso dei pazienti cardiopatici si verifichera' il cambiamento nella loro gestione ed i relativi benefici e se questi portano ad una correzione dell'attuale HTA.

Per questa fase si stima in circa sei mesi, il tempo necessario allo svolgimento dell'attivita'.

I risultati attesi sono sull'evidenza di una correzione dell'attuale HTA.



UNIVERSITA' 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, Loredana Satta
<b>Specializzandi in Fisica Medica</b>	Alessandra Bernardini, Gianluca Daddi, Valentina Del Rio, Walter Flore, Marco Serra

**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	Radioterapia e Medicina Nucleare
--	--------------	----------------------------------

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

Nell'ambito del progetto PRIN 2010-2011 dal titolo: "Sviluppo ed applicazione di nuovi materiali dosimetrici per radiazioni ionizzanti", collaborazione con le unità di ricerca di: Pisa, Milano, Pavia, Palermo, Torino.

**7. Riassunto**

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

- Sviluppo e applicazione di nuove tecniche dosimetriche (PRIN)
- Tecniche per la datazione di reperti archeologici
- Studio dosimetrico nel reparto di Terapia Intensiva Neonatale
- Calcolo dose individualizzata nella terapia medico-nucleare.

**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 radiosensibilità dei bambini è notoriamente pari a tre volte quella degli adulti. Da qui l'esigenza di valutare la dose e quindi il rischio di insorgenza di tumori in età



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

pediatrica, legato alle numerose indagini radiologiche che vengono effettuate nei pazienti prematuri.

4. In terapia medico-nucleare l'attività somministrata è determinata sulla base di protocolli standard, senza tenere conto delle caratteristiche dei diversi pazienti. Il lavoro nasce dalla necessità di valutare ed ottimizzare la dose individuale assorbita dall'organo bersaglio al fine di rendere più efficace il trattamento terapeutico, ma nel contempo limitare la dose agli altri organi e tessuti.

**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 traslazione in due dimensioni del fascio laser e del sistema di lettura. 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 è ancora in fase iniziale e si è concretizzata finora in una tesi di laurea, una tesi di Master post-laurea e alcune presentazioni in congressi locali.
3. Lo scopo di questo sotto-progetto è arrivare ad una corretta valutazione della dose e del rischio finalizzata all'ottimizzazione della dose assorbita. Si effettuerà anche il confronto con le linee guida europee sui criteri di qualità in radiologia diagnostica pediatrica (EUR16261). Dal punto di vista sperimentale si procederà all'esecuzione di misure dirette di ESD (Entrance Skin Dose) in vivo e su fantoccio antropomorfo mediante diversi metodi di misura: TLD (Termo Luminescence Dosimeter), DAP (Dose Area Product) con camera a ionizzazione a trasmissione, OSLD (Optically Stimulated Luminescence Dosimeters), pellicole gafcromiche. Lo studio effettuato con OSLD si collega direttamente al sotto-progetto 1. Per la valutazione della dose efficace e della dose equivalente agli organi del paziente, si utilizzerà un software basato su calcoli Monte Carlo (PCXMC).
4. Per arrivare all'ottimizzazione della dose individuale si procederà innanzitutto a quantificare la distribuzione dell'attività mediante caratterizzazione delle apparecchiature medico-nucleari quali : SPECT-TC e PET, mediante l' utilizzo di specifici fantocci; si effettuerà poi il confronto fra differenti metodi di calcolo quali : MIRD, OLINDA e codici Monte Carlo



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

PREVENTIVO RICERCHE nel  
**Settore "Astronomia, Astrofisica e Fisica della Terra e Pianeti"**  
Sotto-settore 02C1 "Astronomia, Astrofisica e Fisica della terra e Pianeti"



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**1. Titolo della linea di ricerca**

Studio Teorico e Osservativo delle Binarie X Galattiche e delle Stelle di Neutroni

**2. Responsabile**

Luciano Burderi

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	Nicolò D'Amico
<b>Professori associati</b>	Luciano Burderi
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Alessandro Riggio
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	

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

Le principali tematiche di ricerca riguardano l'Astrofisica delle Alte Energie e la Radioastronomia, in particolare i sistemi binari contenenti un oggetto compatto (stella di neutroni o buco nero) e le Radio Pulsar. L'attività di ricerca è basata principalmente su osservazioni ottenute con gli strumenti posti a bordo di satelliti per l'astronomia X e su osservazioni nelle bande radio e gamma.

**8. Inquadramento generale**

Le Binarie X di Piccola Massa (Low Mass X-Ray Binaries) contengono una Stella di Neutroni (NS) con debole campo magnetico ( $< 10^{10}$  Gauss) che accresce materia da un compagno non più massivo del Sole. Quasi tutte transienti (luminosità in quiescenza:  $10^{31}$ - $10^{33}$  erg/s, e di outburst:  $10^{36}$ - $10^{38}$  erg/s). Il tasso di accrescimento varia, corrispondentemente di 5 ordini di grandezza. Le LMXB sono strettamente connesse alle Pulsar Radio al Millisecondo (MSP), una classe di circa 200 pulsar con periodi di rotazione inferiori a 10 millisecondi. Secondo lo 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.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
Dipartimento di Fisica

**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 delle Pulsar al Millisecondo in Accrescimento (AMS) onde ricavare i parametri orbitali e di spin e studiare la loro evoluzione secolare.
- 2) Analisi spettrale nella banda X delle AMS per determinare le proprietà della regione di emissione.
- 3) Osservazioni ottiche durante la quiescenza X delle AMS, 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 AMS per individuare pulsazioni coerenti che, pur a lungo cercate, non sono state trovate a tutt'oggi.
- 5) Osservazioni nella banda gamma, delle AMS che potrebbero portare alla prima scoperta di emissione pulsata anche in gamma.
- 6) Sviluppo di modelli teorici evolutivi di Low Mass X-ray Binaries (LMXB), AMS e Millisecond Radio Pulsar (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.
- 7) 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.
- 8) 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.
- 9) 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.
- 10) Condurremo inoltre una ricerca ultra-profonda di MSP presso il radiotelescopio di Parkes, nel contesto della collaborazione HTRU (High Time Resolution Universe). 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 AMS e MSP.
- 11) 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.
- 12) 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.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

PREVENTIVO RICERCHE nel  
**Settore "Informatica"**  
Sotto-settore 01B1 "Informatica"



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

**1. Titolo della linea di ricerca**

Convergenza e integrazione di paradigmi e infrastrutture computazionali ICT nell'ambito dell'e-Science e al servizio del PMI.

**2. Responsabile**

Andrea Bosin

**3. Partecipanti**

<b>Professori ordinari</b>	
<b>Professori associati</b>	
<b>Ricercatori TI e TD</b>	Andrea Bosin
<b>Assegnisti di ricerca</b>	
<b>Dottorandi</b>	

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

PE6_1	PE6_9	PE6_12
-------	-------	--------

**5. Parole chiave**

e-Science	Basi di dati	Cloud computing
-----------	--------------	-----------------

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

Partecipazione al progetto EU IMI "Molecular basis of the bacterial cell wall permeability" nell'ambito dell'iniziativa "ND4BB Topic 2: Learning from success and failure & Getting Drugs into Bad Bugs".

Partecipazione all'iniziativa FutureGrid finanziata dalla National Science Foundation USA, attraverso il progetto "FG-157: Resource provisioning for e-Science environments" sostenuto con un grant per l'utilizzo dell'infrastruttura di calcolo FutureGrid.

**7. Riassunto**

Nel corso di questa ricerca si intende approfondire lo studio e la realizzazione di nuovi modelli per la convergenza e l'integrazione dei diversi paradigmi e delle diverse infrastrutture computazionali per la fornitura dinamica e su richiesta delle risorse necessarie agli ambienti di e-Science e alle esigenze delle PMI.

**8. Inquadramento generale**

Negli ultimi anni, la disponibilità e i modelli di utilizzo delle risorse computazionali distribuite in rete, disponibili all'utenza scientifica ma non solo, stanno cambiando rapidamente e vedono la coesistenza di paradigmi diversi: high-performance computing, grid, e recentemente cloud. Sfortunatamente, nessuno di questi è riconosciuto come la soluzione definitiva e risulta necessario perseguire convergenza e integrazione di tutti.



UNIVERSITA' di CAGLIARI  
**Dipartimento di Fisica**

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

All'interno del progetto IMI verranno fornite l'infrastruttura di hosting e il supporto informatico per la gestione della tranche decisamente voluminosa di dati primari generati dagli sforzi di modellazione computazionale e molecolare dei work package WP5 e WP2. Inoltre, si lavorerà alla realizzazione di standard consistenti per la gestione dei dati primari da parte dei partner pubblici, attraverso lo sviluppo e l'applicazione di specifici template e workflow di processo. Le attività di progetto si articoleranno nell'arco del quinquennio 2013-2017.

Nell'ambito dell'iniziativa FutureGrid si intende proseguire nella messa a punto dei modelli per la convergenza e l'integrazione dei diversi paradigmi e delle diverse infrastrutture computazionali, della traduzione di tali modelli in prototipi funzionanti e della loro applicazione a casi di studio significativi. In particolare, uno degli obiettivi è quello di promuovere un modello computazionale aperto, flessibile e modulare basato su workflow, per esempio utilizzando il linguaggio BPEL. La progettazione di workflow BPEL, però, risulta non banale anche utilizzando gli editor grafici disponibili e dunque, attingendo al dominio del business, il potenziale della notazione BPMN merita un approfondimento per la sua capacità di generare workflow BPEL direttamente dai modelli BPMN. Inoltre, si vuole estendere il prototipo già sviluppato sia con l'inclusione di altri sistemi di gestione delle risorse che con l'integrazione di motori di workflow BPEL e non-BPEL.

Un filone di indagine maggiormente applicativo riguarda le piattaforme di cloud computing per le piccole e medie imprese (PMI). L'obiettivo specifico è quello di sviluppare piattaforme di cloud computing, e di virtualizzazione, che siano altamente flessibili e adattabili a realtà differenti (applicative, di sistema operativo, impiego di risorse, memorizzazione e accesso ai dati, ecc.) con uno sforzo minimo, e che affrontino e risolvano il problema della sicurezza e della privacy dei dati in un ambiente a cui accedono moltissime aziende (anche concorrenti tra loro). Le piattaforme verranno sviluppate ricorrendo a soluzioni open-source, per evitare che i servizi fornibili siano legati a soluzioni proprietarie, ovvero, in definitiva, alle decisioni commerciali delle aziende fornitrici di software commerciale. La scelta delle soluzioni open-source più adatte, e degli standard da adottare costituirà una parte significativa della attività di ricerca. Infatti, il campo del cloud computing e della virtualizzazione è in rapidissima evoluzione, e non sono ancora emersi standard universali. Pertanto, le varie soluzioni via via disponibili verranno valutate non solo per la loro efficacia, ma soprattutto dal punto di vista della loro adattabilità al mercato potenziale che si vuole indirizzare (aziende, in particolare PMI, sarde), e della semplicità di passaggio da una soluzione all'altra.