



UNIVERSITÀ degli Studi di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

PREVENTIVO SCIENTIFICO TRIENNIO 2019–21
del
DIPARTIMENTO DI FISICA

Approvato dal Consiglio del Dipartimento di Fisica
in data 18/09/2020 (Ver. 0.3, 14 settembre 2020)

Indice

I. PRESENTAZIONE GENERALE	4
II. SETTORI DI RICERCA DELLO “EUROPEAN RESEARCH COUNCIL” (ERC) in Dipartimento	6
III. PREVENTIVO RICERCHE	9
1. PREVENTIVO RICERCHE nel Settore 02/A “Fisica delle Interazioni Fondamentali”	10
1.1. Sotto-settore 02/A1 “Fisica sperimentale delle Interazioni Fondamentali”	10
1.1.1. Produzione e caratterizzazione del plasma di quark e gluoni prodotto in collisioni di nuclei accelerati a energie ultrarelativistiche	11
1.1.2. Ricerca diretta di Materia Oscura con rivelatore ad argon liquido	13
1.1.3. Fisica dei quark e dei leptoni: studio di flavours pesanti in LHCb. Rivelatori innovativi con informazione temporale per la fisica delle alte energie.	15
1.2. Sotto-settore 02/A2 “Fisica teorica delle Interazioni Fondamentali”	18
1.2.1. Gravità emergente, Buchi neri e cosmologia	19
1.2.2. Struttura 3D del nucleone e asimmetrie azimutali e di spin singolo trasverso	21
1.2.3. Gravità quantistica, stringhe e teorie di campo conformi	24
2. PREVENTIVO RICERCHE nel Settore 02/B “Fisica della Materia”	26
2.1. Sotto-settore 02/B1 “Fisica sperimentale della Materia”	26
2.1.1. Nanomateriali per la fotonica e l’energia sostenibile	27
2.1.2. Proprietà elettroniche ed ottiche dei materiali (dalle molecole biologiche ed organiche ai cristalli inorganici)	29
2.1.3. Proprietà magnetiche di nanomagnetite	31
2.1.4. Perovskiti ferroiche: relazioni tra struttura e proprietà di bulk, film sottili e nanoparticelle.	33
2.1.5. Studio e applicazioni del Si poroso	35
2.1.6. Scienza dei Materiali e spettroscopia ottica	37
2.2. Sotto-settore 02/B2 “Fisica teorica della Materia”	40
2.2.1. Indagine da principi primi di superconduttori a base di ferro.	41
2.2.2. Fisica del trasporto di energia, carica e massa in nano-materiali	43
2.2.3. Materials design for future energy and nanoelectronic applications	46



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

2.2.4. Ferroelettricità, magnetoelettricità, e termoelettricità in ossidi	49
3. PREVENTIVO RICERCHE nel	
Settore 02/C “Astronomia, Astrofisica e Fisica della Terra e Pianeti”	51
3.1. Sotto-settore 02/C1 “Astronomia, Astrofisica e Fisica della terra e Pianeti”	52
3.1.1. Studio teorico e osservativo di Binarie X, stelle di neutroni, buchi neri, e collasso gravitazionale	53
4. PREVENTIVO RICERCHE nel	
Settore 02/D “Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica”	56
4.1. Sotto-settore 02/D1 “Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica”	57
4.1.1. Fisica applicata alla medicina, biologia e farmacologia: simulazioni di proprietà di trasporto molecolari	58
4.1.2. Fisica Medica e divulgazione scientifica innovativa	60
4.1.3. Metodi teorico-computazionali applicati a problemi d’interesse biologico e farmacologico	63

Parte I.

PRESENTAZIONE GENERALE



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

L'organigramma del Dipartimento di Fisica (**DSF**) dell'Università degli Studi di Cagliari (**UniCa**) a dicembre del 2018¹ risulta essere così articolato:

- 5 professori ordinari sigla: PO
- 18 professori associati sigla: PA
- 9 ricercatori (tempo indeterminato) sigla: Rc TI
- 5 ricercatori (tempo determinato) sigla: Rc TD

per un totale di 37 docenti. Afferiscono inoltre alla struttura un cospicuo numero di Assegnisti di Ricerca **UniCa**, ed una trentina tra Dottorandi e Specializzandi, rispettivamente immatricolati al Dottorato di Ricerca in Fisica e alla Scuola di Specializzazione in Fisica Medica.

DSF svolge 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. **DSF** collabora strettamente con l'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (**INFN**), l'Istituto Nazionale di Astrofisica (**INAF**) ed in particolare, con il **Sardina Radio Telescope**, 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.

Il **DSF** coordina la didattica di tutte le discipline fisiche presso le Facoltà di Scienze, Ingegneria-Architettura, Medicina e Chirurgia, Biologia-Farmacologia e Studi Umanistici di **UniCa**, offrendo copertura ad insegnamenti distribuiti su una quarantina di corsi di studio diversi. Inoltre, **DSF** è sede legale della **Scuola di Dottorato di Ricerca in Fisica** e della **Scuola di Specializzazione in Fisica Medica**.

Il **DSF** promuove la divulgazione delle scienze fisiche attraverso la propria partecipazione a progetti ministeriali, a molteplici manifestazioni culturali sul territorio e tramite visite e dimostrazioni presso il proprio Museo di Fisica della Sardegna.

¹Fonte: verbale Consiglio di Dipartimento del 11/12/2018.

Parte II.

**SETTORI DI RICERCA DELLO
“*EUROPEAN RESEARCH COUNCIL*”
(ERC) in Dipartimento**



LS1 Molecular and Structural Biology and Biochemistry: Molecular synthesis, modification and interaction, biochemistry, biophysics, structural biology, metabolism, signal transduction]

LS1_8 Biophysics (e.g. transport mechanisms, bioenergetics, fluorescence)

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_7 Atomic, molecular physics

PE2_13 Relativity

PE2_14 Thermodynamics

PE2_16 General physics

PE3 Condensed Matter Physics: Structure, electronic properties, fluids, nanosciences, biophysics

PE3_1 Structure of solids and liquids

PE3_3 Transport properties of condensed matter

PE3_4 Electronic properties of materials, surfaces, interfaces, nanostructures...

PE3_5 Semiconductors and insulators: material growth, physical properties

PE3_6 Macroscopic quantum phenomena: superconductivity, superfluidity...

PE3_8 Magnetism and strongly correlated systems

PE3_9 Condensed matter – beam interactions (photons, electrons...)

PE3_10 Nanophysics: nanoelectronics, nanophotonics, nanomagnetism, nanoelectromechanics...

PE3_16 Physics of biological systems

PE4 Physical and Analytical Chemical Sciences: Analytical chemistry, chemical theory, physical chemistry/chemical physics

PE4_1 Physical chemistry

PE4_2 Spectroscopic and spectrometric techniques

PE4_4 Surface science and nanostructures

PE4_6 Chemical physics

PE4_11 Physical chemistry of biological systems

PE4_17 Characterization methods of materials



PE5 Synthetic Chemistry and Materials: 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_6 New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles

PE6 Computer Science and Informatics: Informatics and information systems, computer science, scientific computing, intelligent systems

PE6_12 Scientific computing, simulation and modelling tools

PE6_13 Bioinformatics, biocomputing, and DNA and molecular computation

PE8 Products and Processes Engineering: Product design, process design and control, construction methods, civil engineering, energy systems, material engineering

PE8_9 Materials engineering (biomaterials, metals, ceramics, polymers, composites...)

PE9 Universe Sciences: Astro-physics/chemistry/biology; solar system; stellar, galactic and extragalactic astronomy, planetary systems, cosmology, space science, instrumentation

PE9_6 Stars and stellar systems

PE9_10 High energy and particles astronomy – X-rays, cosmic rays, gamma rays, neutrinos

PE9_11 Relativistic astrophysics

PE9_15 Space Sciences

PE9_17 Instrumentation - telescopes, detectors and techniques

Parte III.

PREVENTIVO RICERCHE

Capitolo 1.

PREVENTIVO RICERCHE nel Settore 02/A “Fisica delle Interazioni Fondamentali”

**Sotto-settore 02/A1 “Fisica sperimentale delle Interazioni
Fondamentali”**



Titolo della linea di ricerca:

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

Responsabile/i: Alessandro De Falco, Gianluca Usai

Partecipanti

Professori ordinari	Gianluca Usai
Professori associati	Alessandro De Falco
Ricercatori	
Assegnisti	Ester Casula, Biswarup Paul, Purba Bhattacharya
Dottorandi	Alex Chauvin, Alice Mulliri
Collaboratori esterni	Alberto Masoni (Direttore di Ricerca), Corrado Cicalò (Primo Ricercatore) Sabyasachi Siddhanta (Tecnologo) Carlo Puggioni (borsista) Daniele Mura (tecnologo)

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1	Fundamental interactions and fields
PE2_2	Particle physics
PE2_3	Nuclear physics

Parole chiave

Heavy Ion Collisions, Quark Gluon Plasma, ALICE LHC

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

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

Riassunto

La ricerca del gruppo è inserita nel programma di misure dell'esperimento ALICE al LHC del CERN. L'attività è incentrata nell'upgrade dello spettrometro per muoni e nell'analisi dei dati della produzione di coppie di muoni. E' inoltre stato finanziato un progetto per realizzare un rivelatore di vertice a pixel di silicio. Il gruppo è infine impegnato nello studio di un nuovo spettrometro per misure della produzione di muoni a bassa energia al CERN-SPS e nel triennio 2019-2021 si prevede una continuazione ed uno sviluppo di queste attività.

Inquadramento generale

Nelle collisioni tra 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 fm³). 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 3 s dopo il big bang. Le proprietà del plasma di quark e gluoni sono da tempo oggetto di studio. Diversi esperimenti sono stati condotti tra gli anni '90 e la scorsa decade mediante l'uso del fascio del CERN SPS su bersagli fissi. Negli Stati Uniti, al Brookhaven National Laboratory, il collider RHIC è stato appositamente costruito per lo studio di questa fase della materia ed è entrato in funzione nell'anno 2000. Attualmente il collider LHC accelera ioni alle energie più alte mai raggiunte (5.02 TeV/nucleone) e diversi esperimenti (ALICE, CMS e ATLAS e più recentemente LHCb) stanno effettuando numerose nuove misure. Attualmente gli esperimenti di LHC sono in fase di upgrade. Si prevede di aumentare il rate di acquisizione e migliorare la risoluzione nella misura della posizione dei vertici secondari e nella massa delle coppie di muoni.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Il gruppo di Cagliari ha lunga esperienza negli esperimenti focalizzati sulla produzione di coppie di muoni. Queste possono essere prodotte dal decadimento di mesoni leggeri come $\rho(770)$, $\omega(780)$ e $\phi(1020)$ o più pesanti come la $J/\psi(3100)$, le cui proprietà possono essere modificate in modo anche notevole dal plasma in cui si trovano. La produzione di mesoni dotati di charm e beauty riveste anch'essa un notevole interesse, poiché permette di studiare i meccanismi di produzione, propagazione e adronizzazione dei quark pesanti nel mezzo denso creato nelle collisioni tra ioni pesanti. Per quanto riguarda l'attività nell'esperimento ALICE, il gruppo di Cagliari è impegnato in:

- Partecipazione ai turni di presa dati
- Sviluppo di infrastrutture informatiche basate sulla tecnologia GRID per l'analisi e ricostruzione dei dati.
- Studio della produzione di dimuoni prodotti in collisioni p-Pb e Pb-Pb nella regione delle basse masse ($M < 1.2 \text{ GeV}/c^2$) e produzione di quarkonia
- Analisi di eventi protone-protone ad alta molteplicità
- Upgrade dello spettrometro per muoni

E' inoltre in fase di elaborazione la proposta per un nuovo esperimento al CERN SPS per lo studio della fase del plasma di quark e gluoni e la ricerca del punto critico nel diagramma di fase della materia adronica.

Il Prof. Usai è PI del PRIN 2017 dal titolo STITCHED MAPS: a novel large area, fast, radiation-tolerant monolithic active pixel sensor for tracking devices of unprecedented precision.

Il Prof. Usai è PI del Progetto Ricerca di base della Regione Sardegna per l'annualità 2017 dal titolo PIXEL-CHAMBER: A UNIVERSAL SILICON HEAVY-FLAVOR IMAGER WITH MONOLITHIC ACTIVE PIXEL SENSORS FOR MEASUREMENTS OF CHARM AND BEAUTY WITH UNPRECEDENTED PRECISION



Titolo della linea di ricerca:

Ricerca diretta di Materia Oscura con rivelatore ad argon liquido

Responsabile/i: Alessandro De Falco, Gianluca Usai

Partecipanti

Professori ordinari	Gianluca Usai, Mariano Cadoni
Professori associati	Alessandro De Falco, Alberto Devoto (in quiescenza)
Ricercatori	
Assegnisti	
Dottorandi	Michela Lai, Emmanuele Picciau
Collaboratori esterni	Alberto Masoni (Direttore di Ricerca), Corrado Cicalò (Primo Ricercatore) Sabyasachi Siddhanta (Tecnologo) Walter Bonivento (Primo Ricercatore) Francesca Dordei (Ricercatore) , Matteo Cadeddu (Ricercatore), Marco Razeti (Tecnologo), Marcello Lissia (Primo ricercatore), Mauro Caravati (Borsista INFN), Shawn Westerdale (Borsista), Valentina Cocco (Borsista), Arianna Steri (Borsista) e colleghi dei Dipartimenti di Ingegneria Elettrica ed Elettronica (Paolo Castello, Paolo Attilio Pegoraro, Sara Sulis, Annalisa Vacca), Ingegneria Chimica (Michele Mascia, Simonetta Palmas) di UNICA

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1	Fundamental interactions and fields
PE2_2	Particle physics

Parole chiave

Dark Matter, Astro-particle physics

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Il gruppo fa parte della collaborazione internazionale DarkSide a LNGS e della collaborazione Aria, l'impianto di distillazione criogenica dell'argon presso Carbosulcis S.p.A., Nuraxi-Figus (SU). DarkSide e' una collaborazione internazionale tra INFN, USA (NSF e DOE), Canada, Francia, Spagna, Polonia, Russia, UK. La collaborazione Aria include INFN, RAS, UNICA, Princeton University, FNAL (USA)

Riassunto

La collaborazione DarkSide si propone la rivelazione della Materia Oscura dell'Unievrso sotto forma di WIMP mediante l'interazione con l'argon liquido ai LNGS, l'Aquila. L'esperimento DarkSide-50 a cui il gruppo ha partecipato ha ottenuto i migliori risultati mondiali sulla misura a basse masse. Ora e' in costruzione l'esperimento da 20 tonnellate DarkSide20k. L'argon da utilizzare in questo esperimento sarà purificato dall'impianto Aria.



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

Inquadramento generale

La ricerca della Materia Oscura dell'Universo e' una delle domande fondamentali della fisica di oggi. La tecnica utilizzata da DarkSide e' quella della rivelazioni delle WIMP mediante scattering nell'argon. L'esperimento DarkSide20k sara' l'esperimento piu sensibile nella regione delle grandi masse, oltre 10GeV/c², per la rivelazione diretta. Aria e' un impianto di distillazione criogenica di 350m in corso di installazione presso la miniera di Monte Sinni di Carbosulcis S.p.A. che deve purificare l'argon da utilizzare in DarkSide20k. Inoltre permettera' di distillare anche isotopi stabili di grande interesse per la medicina nucleare come PET e NMR.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Per l'esperimento DarkSide il gruppo e' concentrato su: • Analisi dati di DarkSide50 • studi sulle potenzialità di fisica di DarkSide20k • sviluppo della catena di trasmissione ottica del segnale nell'argon liquido • studi sul rivelatore ReD per possibile rivelazione direzionale della Materia Oscura L'esperimento DarkSide20k dovrebbe prendere dati a partire dal 2024. Per l'esperimento Aria il gruppo ha responsabilità rilevanti. Il Dott. Walter Bonivento e' il Project Leader del progetto Aria e tutto il gruppo e' impegnato nella realizzazione dell'impianto e nelle misure correlate. Nel 2019 e' stato messo in funzione un impianto pilota che ha dimostrato il funzionamento della distillazione criogenica con azoto secondo specifiche. La colonna di Aria dovrebbe essere ultimata in pozzo entro il 2021.



Titolo della linea di ricerca:

**Fisica dei quark e dei leptoni: studio di flavours pesanti in LHCb.
Rivelatori innovativi con informazione temporale per la fisica delle alte energie.**

Responsabile/i: Biagio Saitta

Partecipanti

Professori ordinari	Biagio Saitta
Professori associati	Giulia Manca
Ricercatori	Francesco Dettori, Rudolf Oldeman
Assegnisti	Benjamin Audurier, Albert Bursche, Shanzhen Chen
Dottorandi	Davide Brundu, Samuel Belin, Angelo Loi, Piera Muzzetto
Collaboratori esterni	I ricercatori della locale Sezione dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, A. Cardini, S. Cadeddu, A. Contu, F. Dordei e A. Lai e l'assegnista di ricerca L. Casu, sono parte integrante del gruppo operando nell'ambito della Convenzione fra l'Università di Cagliari e l'INFN.

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1	Fundamental interactions and fields
PE2_2	Particle physics

Parole chiave

Fisica del flavour, LHC, Ioni pesanti, Rivelatori, Timing

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Per l'esperimento LHCb: collaborazione internazionale con l'European Organization for Nuclear Research (CERN) di Ginevra e circa 50 fra Università e centri di ricerca da 14 nazioni (Europa, Brasile, Cina, USA). Per lo sviluppo di rivelatori (responsabile A. Lai) sono partners Università e Sezioni INFN di Bologna, Ferrara, Firenze, Genova, Milano, Padova, Perugia, Torino e TIFPA (Trento).

Riassunto

LHCb è un esperimento al LHC al CERN di Ginevra. Dopo la presa dati 2009-18 si sta concludendo la fase di upgrade del rivelatore per la presa dati dal 2021 in poi a luminosità e energia aumentate. Nei prossimi tre anni, utilizzando i dati già raccolti e quelli futuri, il gruppo di Cagliari proseguirà lo studio degli adroni con quark *charm*, nei cui decadimenti è recentemente stata scoperta per la prima volta una violazione della simmetria Carica-Parità (CP), e degli adroni con quark *beauty*. Si studieranno decadimenti rari sensibili a fisica oltre il Modello Standard, e si effettueranno misure della violazione CP. Si studierà la produzione di stati legati quark-antiquark a due quark pesanti e mesoni con un quark *c* in collisioni protone-protone e con nuclei pesanti. Il gruppo è inoltre parte attiva nella fase di upgrade dell'esperimento LHCb.



Si parteciperà infine allo sviluppo di rivelatori innovativi con informazione temporale nell'ambito del progetto INFN Timespot.

Inquadramento generale

La fisica del flavour è fondamentale per capire alcune questioni nel campo della fisica delle particelle e della cosmologia: qual è l'origine della asimmetria fra materia e antimateria nell'Universo? Qual è la soluzione del problema delle correzioni quantistiche alla massa del bosone di Higgs? Qual è l'origine della cosiddetta materia oscura? Con l'osservazione del Bosone di Higgs, è stato completato il quadro delle particelle previste nell'ambito del Modello Standard (MS) ma, ad oggi, alcuni fenomeni, uno dei quali è il fenomeno delle oscillazioni di neutrino, non sono spiegabili nell'ambito di questo modello. Questi quindi richiederebbero l'esistenza di sue estensioni che porterebbero a nuovi effetti di dinamica delle particelle (nuova fisica).

Oltre alla osservazione di nuove particelle prodotte direttamente al LHC, segnali di nuova fisica possono essere ottenuti indirettamente attraverso lo studio di decadimenti di mesoni o barioni contenenti quark pesanti che siano rari nel Modello Standard. Questi decadimenti, se mediati da nuove particelle, avverrebbero ad un tasso diverso da quello atteso nel MS. Similmente i tassi di violazione della simmetria CP misurati in adroni pesanti sono influenzati significativamente dalla presenza di interazioni oltre a quelle standard. Il numero di particelle contenenti quark pesanti (b e c) prodotte e rivelate nell'esperimento LHCb è ordini di grandezza maggiore di quanto non sia stato accumulato in passato in qualunque esperimento. Questo campione renderà possibile effettuare misure di precisione senza precedenti e rivelare la presenza di anomalie in decadimenti estremamente rari.

Con il medesimo apparato sperimentale, ma studiando collisioni di nuclei pesanti accelerati ad energie ultra-relativistiche è possibile studiare la formazione dello stato di materia ad alta densità denominato quark-gluon-plasma (QGP) e gli effetti ad esso correlati. Grazie alla precisione del rivelatore, sarà quindi possibile studiare la produzione e la soppressione di adroni pesanti in regioni cinematiche ancora inesplorate e determinare la presenza o meno del QGP e quindi dei suoi effetti.

In vista di prese dati future a luminosità istantanee ancora maggiori, previste dal cosiddetto High-Lumi LHC, sarà necessario adattare i rivelatori di LHCb, ma anche di altri possibili esperimenti, a flussi di particelle senza precedenti. Ci si propone quindi di sviluppare, all'interno del progetto Timespot, rivelatori di particelle in grado di separare non solo le coordinate spaziali, ma anche quella temporale delle particelle prodotte in interazioni multiple prodotte nello scontro di bunch di protoni. Si prevede di sviluppare sia rivelatori innovativi a semiconduttori con tecnologia 3D, sia prototipi con altre geometrie, e contemporaneamente ottenere una risoluzione nella coordinata temporale dell'ordine dei 100 ps. Tutto ciò in rivelatori resistenti ad alte dosi di radiazione.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Fisica dei quark e dei leptoni: studio di flavours pesanti in LHCb. Analisi nell'ambito dell'esperimento LHCb. Il nuovo campione di dati registrato nel 2015-2018 sarà utilizzato, insieme al campione 2011-2013, per aggiornare e migliorare misure già effettuate e per intraprendere nuove analisi.



Decadimenti rari :

- Ricerca di nuova fisica nel decadimento $D^0 \rightarrow \mu^+\mu^-$: misura della sua frazione di decadimento.
- Ricerca di nuova fisica nel decadimento $B_{(s)}^0 \rightarrow \tau^+\tau^-$: misura di un limite sul suo rapporto di decadimento.
- Ricerca di nuova fisica nel decadimento $B_s^0 \rightarrow \mu^+\mu^-$: misura precisa della sua frazione di decadimento, della sua vita media efficace e del rapporto rispetto al decadimento omologo del B_d^0
- Studio di decadimenti rari di adroni contenenti il quark s , Es. $\Sigma^+ \rightarrow p\mu^+\mu^-$
- Ricerca di nuova fisica in decadimenti del tipo $D^0 \rightarrow h^+h^-\mu^+\mu^-$ e studio delle loro distribuzioni angolari.

Misure della violazione CP

- Misura precisa della fase di violazione CP, ϕ_s , nei decadimenti $B_s^0 \rightarrow J/\psi K^+K^-$
- Misura precisa della violazione CP in decadimenti del tipo $B^+ \rightarrow D^+D^0$ e $B_c^+ \rightarrow D^+D^0$

Studio delle collisioni a ioni pesanti

- Misura della produzione di stati legati $q\bar{q}$ e mesoni D in collisioni periferiche piombo-piombo.
- Aggiornamento delle misure di produzione di stati legati $q\bar{q}$ e mesoni D in collisioni protone-piombo
- Adattamento degli algoritmi di tracciamento per gli eventi ad alta molteplicità.

Upgrade di LHCb Parziali modifiche e sostituzioni dei rivelatori dell'esperimento LHCb sono attualmente in opera in vista della fase di presa dati del 2021 a 40 MHz invece che 1MHz. Il gruppo è coinvolto nelle modifiche all'elettronica del sistema di rivelazione dei muoni. Il gruppo parteciperà alla fase di test, installazione e messa in opera della nuova elettronica.

Rivelatori innovativi con informazione temporale per la fisica delle alte energie. Una frazione del gruppo parteciperà allo sviluppo, test e caratterizzazione di rivelatori con informazione temporale per esperimenti di fisica delle alte energie ad altissime luminosità.

La produzione del primo prototipo del rivelatore a semiconduttore (con geometria 3D) partirà a breve. In parallelo verrà studiata l'elettronica di amplificazione e digitizzazione on-detector (introduzione per la prima volta di tecnologia a 28 nm nella fisica delle alte energie).

I rivelatori verranno quindi testati sia con laser ad infrarosso, sia presso fasci di test in laboratori quali ad esempio il CERN. Si procederà quindi alla caratterizzazione dei rivelatori e dell'elettronica associata.



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

Sotto-settore 02/A2 “Fisica teorica delle Interazioni Fondamentali”



Titolo della linea di ricerca:

Gravità emergente, Buchi neri e cosmologia

Responsabile/i: Mariano Cadoni

Partecipanti

Professori ordinari

Professori associati Mariano Cadoni

Ricercatori

Assegnisti

Dottorandi

Collaboratori esterni

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1 Fundamental interactions and fields

PE2_13 Relativity

Parole chiave

Buchi neri, Cosmologia, Principio olografico, gravità quantistica

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

G. Gaeta, Università' di Milano; R. Casadio, Università' di Bologna; W. Mueck, Università' di Napoli; S. Mignemi, Dip. Matematica , Università' di Cagliari O. Bertolami, Università' di Porto, Portogallo, Collaborazione DARK SIDE

Riassunto

Il progetto si propone di studiare l'origine microscopica e l'emergenza della struttura geometrica spazio-temporale e della gravità. Questo scopo verrà perseguito avendo come guida problemi di frontiera nella fisica dei buchi neri e nella cosmologia.

Inquadramento generale

La nostra conoscenza delle teorie fisiche fondamentali si basa da un lato sulla teoria quantistica dei campi (QFT) che descrive l'interazione forte ed elettrodebole e dall'altro sulla relatività generale (GR) che descrive l'interazione gravitazionale. Le predizioni di entrambe le teorie sono state confermate da numerosi esperimenti e negli ultimi anni dai risultati da tre eclatanti esperimenti: la scoperta del bosone di Higgs, la rilevazione delle onde gravitazionali e la prima fotografia di un buco nero. Nonostante questo la meccanica quantistica e la relatività generale non sembrano tra loro compatibili ed un profondo ripensamento sia su QFT e GR ma anche sulla stessa natura dello spazio-tempo sembra essere necessario. Ci si aspetta inoltre che tale riflessione critica sui fondamenti di QFT e GR possa essere da un lato guidata e dall'altro possa gettare luce su una serie di problemi aperti della fisica gravitazionale in particolare il problema dell'informazione



per i buchi neri, dell'entropia microscopica dei buchi neri e dell'origine della materia ed energia oscura in cosmologia. Scopo del progetto è quello di affrontare questi problemi in un contesto di gravità emergente, assumendo cioè che la struttura di spazio-tempo classico della GR emerga da una teoria microscopica la cui natura è intrinsecamente quantistica ed usando in particolare una descrizione olografica dei sistemi gravitazionali.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

L'attività di ricerca nei prossimi tre anni sarà focalizzata su diverse tematiche, problemi ed applicazioni di metodi di indagine tipici della gravità emergente e della descrizione olografica alla fisica dei buchi neri ed alla cosmologia. Segue una breve descrizione delle attività di ricerca previste.

Modi quasi normali di un buco nero e geometria quantistica dell'orizzonte

La recente scoperta delle onde gravitazionali da parte della collaborazione LIGO/VIRGO ha aperta un'opportunità unica per testare l'interazione gravitazionale nel regime di forte accoppiamento. Ci si propone di investigare possibili signature di gravità quantistica nella geometria vicino all'orizzonte di un buco nero. Ci si aspetta infatti che questa informazione sia contenuta nello spettro dei modi quasi normali del buco nero che a sua volta è legato all'onda gravitazionale emessa dal buco nero nella fase di "ringdown" dopo la coalescenza di due buchi neri.

–Gravità quantistica a larga scala, dinamica galattica, materia oscura e cosmologia

E' stato proposto recentemente che le deviazioni dal comportamento Newtoniano della dinamica galattica possano essere spiegate da effetti di gravità quantistica a larga scala senza postulare la presenza di materia oscura. Si intende analizzare in dettaglio questa possibilità. Inoltre ci si propone di investigare le implicazioni cosmologiche di questa ipotesi, in particolare per quanto riguarda la formazione delle strutture .

Entropia microscopica di buchi neri ed altri oggetti estesi

Questa linea di ricerca prevede di usare di metodi di indagine tipici della gravità emergente e della descrizione olografica 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 i nostri scopi sono i seguenti a) Descrizione di informazione ed entanglement nello spazio-tempo curvo b) Comprensione più dettagliata della relazione che esiste tra i tre tipi di entropia di un buco nero: termodinamica, statistica(Boltzmann), entanglement (Von Neumann). c) Comprensione della relazione tra il problema dell'informazione per i buchi neri l'entanglement quantistico



Titolo della linea di ricerca:

Struttura 3D del nucleone e asimmetrie azimutali e di spin singolo trasverso

Responsabile/i: D'Alesio Umberto

Partecipanti

Professori ordinari	
Professori associati	D'Alesio Umberto
Ricercatori	Pisano Cristian
Assegnisti	Sangem Rajesh, Taels Pieter
Dottorandi	Flore Carlo, Zaccheddu Marco
Collaboratori esterni	Murgia Francesco (primo ricercatore INFN)

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1	Fundamental interactions and fields
PE2_2	Particle physics

Parole chiave

Effetti di polarizzazione, struttura 3D del nucleone, distribuzioni dipendenti da spin e impulso trasverso

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

M. Boglione, J.O. Gonzalez (Torino), A. Bacchetta, G. Bozzi, M. Echevarria, M. Radici (Pavia), D. Boer (Groeningen), A. Prokudin (Penn State, USA), A. Signori (Argonne National Lab., USA), J.P. Lansberg, M. Ozcelik (IPN Orsay, Francia), M. Schlegel (New Mexico State Univ., USA), F. Delcarro (JLab, Usa)

Riassunto

- Studio della polarizzazione trasversa di iperoni Λ prodotti in collisioni e^+e^- nel formalismo con distribuzioni dipendenti da impulso trasverso (TMD) e relative predizioni per processi di diffusione profondamente anelastica semi-inclusivi (SIDIS) e protone-protone (pp) - Studio delle TMD dei gluoni nella produzione di J/ψ e Υ in vari processi inclusivi e semi-inclusivi in QCD Non Relativistica (NRQCD), con effetti di interazione di stato iniziale e finale - Fit globale delle asimmetrie azimutali e di spin singolo trasverso nel formalismo TMD in collisioni pp, nel SIDIS e in processi di annichilazione e^+e^- - Studio di asimmetrie azimutali in processi SIDIS e di Drell-Yan nel formalismo TMD e in quello collineare - Studio della funzione di Sivers dei quark all'ordine dominante con evoluzione al Next-to-Leading Log (NLL) - Studio della distribuzione in p_T della η_c all'LHC nel formalismo collineare e in quello TMD

Inquadramento generale

La comprensione della struttura tridimensionale del nucleone rappresenta l'obiettivo ultimo di molti programmi sperimentali in corso e futuri, così come di diverse attività teoriche in fisica



adronica. Lo schema teorico in cui sono studiati è la QCD. Le sezioni d'urto sono date, secondo i teoremi di fattorizzazione, come convoluzioni delle interazioni partoniche elementari (calcolabili perturbativamente nel Modello Standard), con distribuzioni partoniche (PDF) e funzioni di frammentazione (FF). Per molto tempo, le PDF e le FF sono state considerate come processi collineari inclusivi (non perturbativi), corrispondenti a una rappresentazione unidimensionale del nucleone. Da oltre un decennio è divenuto chiaro che per comprendere molti dati sperimentali, in particolar modo quelli che coinvolgono gradi di libertà di spin, è necessario tener conto anche dei gradi di libertà trasversi, e cioè del moto intrinseco di quark e gluoni all'interno del nucleone. Questo ha aperto lo studio della struttura tridimensionale del nucleone, codificata in termini delle distribuzioni partoniche dipendenti dal momento trasverso (TMD). Includendo anche le dipendenze dallo spin dei partoni/adroni si hanno 8 TMD-PDF per i nucleoni, 2 TMD-FF per le frammentazioni in mesoni, e 8 TMD-FF per la frammentazione in adroni di spin $1/2$ (come gli iperoni Λ). I dati sperimentali disponibili hanno ormai convalidato questa descrizione e nuovi dati sono attesi per i processi di Drell-Yan in corso di studio a COMPASS e RHIC. La realizzazione del futuro Electron Ion Collider (EIC) negli USA e dell'esperimento con bersaglio fisso polarizzato al CERN, in fase di proposta, apriranno certamente nuovi scenari in questo ambito. Le proprietà delle TMD in QCD, ed in particolare la loro evoluzione con Q^2 , sono state formulate in modo sistematico da alcuni anni, anche se le attuali analisi fenomenologiche sono controverse e richiedono ulteriori sviluppi. Un ulteriore elemento fondamentale è lo studio del ruolo dei gluoni, attualmente poco esplorato e conosciuto, che sta ricevendo una forte attenzione sia dal punto di vista sperimentale che da quello fenomenologico. Siamo quindi entrati in una fase di precisione dell'esplorazione della struttura tridimensionale del nucleone.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

L'attività di ricerca sarà rivolta ad approfondimenti e sviluppi nell'ambito dello studio della struttura tridimensionale del nucleone e di rilevanti asimmetrie azimutali e di spin trasverso in vari processi di interesse. Qui di seguito i temi affrontati e la loro tempistica: - Analisi dei dati della Collaborazione Belle della polarizzazione trasversa di iperoni Λ prodotti in collisioni e^+e^- , con l'obiettivo di estrarre per la prima volta la funzione TMD polarizzante della Lambda, che fornisce la probabilità che un partone non polarizzato frammenti in un adrone di spin $1/2$ trasversalmente polarizzato (primo anno) - Studio della polarizzazione trasversa degli iperoni Λ , e stime teoriche, prodotti in processi di SIDIS e pp (primo e secondo anno) - Studio delle asimmetrie azimutali e di spin trasverso nella produzione di mesoni J/ψ (o Υ) più un getto in processi SIDIS a EIC, in NRQCD. Attraverso la modulazione in specifiche dipendenze azimutali sarà possibile stimare separatamente i diversi contributi dovuti alle TMD di gluoni polarizzati linearmente (primo anno) - Studio delle asimmetrie di spin trasverso nella produzione inclusiva di J/ψ in collisioni pp in NRQCD, con particolare attenzione alla funzione di Sivers dei gluoni (asimmetria azimutale nella distribuzione di gluoni non polarizzati in un nucleone polarizzato trasversalmente (primo anno). L'inclusione del contributo di ottetto di colore rappresenta un'estensione di uno studio recentemente completato, limitato al contributo di singoletto di colore - Estensione del caso precedente con inclusione delle interazioni di stato iniziale e finale con l'obiettivo di studiare le proprietà di universalità della funzione di Sivers dei gluoni (secondo anno) - Fit globale delle asimmetrie di spin singolo trasverso nella produzione inclusiva di pioni in collisioni pp, nel SIDIS



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

e nella produzione di coppie di mesoni in processi di annichilazione e^+e^- . Questo rappresenterà il primo test per verificare la consistenza dell'approccio con le distribuzioni TMD (secondo anno) - Studio di asimmetrie azimutali in processi SIDIS e Drell-Yan nel formalismo TMD e in quello collineare, con particolare attenzione alla modulazione $\cos\phi$ delle sezioni d'urto non polarizzate e l'obiettivo di arrivare ad una formulazione dei teoremi di fattorizzazione in termini di TMD al twist 3 (primo anno) - Estrazione della funzione di Sivers dei quark al LO con evoluzione al NLL dai dati di asimmetrie di spin singolo nei processi SIDIS e Drell-Yan (secondo anno) - Studio della distribuzione in p_T della η_c all'LHC nel formalismo collineare e in quello TMD e loro "matching" nella regione cinematica di validità di entrambi gli approcci (terzo anno) - Studio delle asimmetrie azimutali nella produzione di getti adronici e di quark pesanti in collisioni ultra periferiche all'LHC, come possibile mezzo per la determinazione delle TMD dei gluoni (terzo anno)



Titolo della linea di ricerca:

Gravità quantistica, stringhe e teorie di campo conformi

Responsabile/i: Giuseppe D'Appollonio

Partecipanti

Professori ordinari
Professori associati
Ricercatori Giuseppe D'Appollonio
Assegnisti
Dottorandi
Collaboratori esterni

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1 Fundamental interactions and fields
PE2_2 Particle physics
PE2_13 Relativity

Parole chiave

Teoria delle stringhe. Teorie di campo conformi. D-brane.

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Paolo Di Vecchia (Nordita, Stoccolma e Niels Bohr Institute, Copenhagen); Rodolfo Russo (Queen Mary University London, London); Gabriele Veneziano (Cern, Geneva e College de France, Parigi).

Riassunto

Scopo del mio progetto di ricerca è studiare processi fisici nei quali l'interazione dominante è quella gravitazionale utilizzando la teoria delle stringhe e la corrispondenza olografica tra gravità e teorie di campo conformi.

Inquadramento generale

La formulazione di una teoria quantistica della gravità, una teoria che combini in modo consistente i principi della relatività generale e della meccanica quantistica, è uno dei più importanti problemi aperti in fisica teorica. Una parziale soluzione a questi problemi è data dalla teoria delle stringhe, una generalizzazione della teoria quantistica dei campi che sostituisce alle particelle elementari degli enti fondamentali unidimensionali. Questo permette di delocalizzare le interazioni sia spazialmente che temporalmente, eliminando il problema delle divergenze ultraviolette in modo consistente con la causalità e l'unitarietà.

La soluzione offerta dalla teoria delle stringhe al problema della gravità quantistica è solo parziale perché non esiste ancora una formulazione non perturbativa della teoria in uno spaziotempo



generico. Un'importante eccezione è rappresentata da spazitempo che tendono asintoticamente allo spazio di anti de Sitter: in questo caso la teoria delle stringhe è equivalente ad una teoria di campo conforme in uno spaziotempo piatto. Questa relazione sorprendente, detta corrispondenza olografica, è uno strumento estremamente utile perché permette di riformulare un problema di gravità quantistica nel linguaggio più familiare della teoria quantistica dei campi senza gravità dinamica. Le teorie di campo conformi possono inoltre essere studiate senza far ricorso alla teoria delle perturbazioni ma utilizzando un metodo esatto che si basa sull'associatività del prodotto degli operatori locali, noto come bootstrap conforme.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Scopo del mio progetto di ricerca è studiare processi fisici nei quali l'interazione dominante è quella gravitazionale utilizzando sia metodi di teoria delle stringhe, come il calcolo di ampiezze nel limite di alta energia e la descrizione di spaziotempo curvi in termini di modelli sigma bidimensionali, sia metodi di teoria dei campi conformi, come il bootstrap analitico.

Negli ultimi anni mi sono dedicato allo studio della teoria delle stringhe in spaziotempo curvi e nel limite di alta energia analizzando in grande dettaglio due processi: la collisione tra due stringhe chiuse e tra una stringa chiusa ed un insieme di N D-brane parallele. Intendo sviluppare questa linea di ricerca in diverse direzioni [18 mesi]. Le configurazioni di brane studiate finora sono massimamente supersimmetriche ed un primo progetto consiste nell'estendere i nostri metodi a situazioni meno ideali considerando ad esempio brane intersecantesi, brane magnetizzate o brane localizzate su una singolarità di orbifold. Un altro progetto consiste nello studiare la risommazione iconale partendo da uno spaziotempo curvo che rappresenta una soluzione esatta della teoria delle stringhe, come un orbifold lorentziano o un modello di Wess-Zumino-Witten basato su un gruppo non compatto.

Il calcolo di ampiezze nel limite di Regge e la risommazione iconale possono essere estesi anche al caso di corpi massivi e permette di derivare l'interazione relativistica tra di essi. Questa tecnica è stata recentemente oggetto di grande attenzione in quanto consente di determinare la fusione di buchi neri binari, utilizzando l'approssimazione post-Minkowskiana della dinamica gravitazionale. Il calcolo è stato fatto all'ordine 2PM e ci sono dei risultati parziali a 3PM che sarebbe interessante chiarire e completare. Un'altra importante generalizzazione dei nostri risultati è l'analisi dell'emissione di onde gravitazionali durante il processo di collisione stringa-brana.

Nello studio dei fenomeni gravitazionali intendo avvalermi anche dei metodi non perturbativi delle teorie di campo conformi [18 mesi]. Per chiarire quali caratteristiche rendano una teoria conforme olografica e come emerga la descrizione geometrica dello spaziotempo dall'algebra degli operatori della teoria di campo si studiano o le proprietà analitiche delle funzioni di correlazione o l'entanglement della teoria conforme. La teoria conforme permette in particolare di dedurre dei vincoli rigorosi che devono essere soddisfatti dai coefficienti dei termini con più derivate che possono comparire nell'azione gravitazionale. Questi risultati sono stati derivati analizzando il limite di Regge dei correlatori conformi e le proprietà di un'importante classe di operatori non locali. Intendo esplorare il legame che intercorre tra questi metodi di teoria di campo e il limite di Regge in teoria delle stringhe e il modo in cui gli stati di stringa compaiono nello spettro della teoria conforme duale.

Capitolo 2.

PREVENTIVO RICERCHE nel Settore 02/B “Fisica della Materia”

Sotto-settore 02/B1 “Fisica sperimentale della Materia”



Titolo della linea di ricerca:

Nanomateriali per la fotonica e l'energia sostenibile

Responsabile/i: G.Bongiovanni, D.Marongiu, A.Mura, F.Quochi, M.Saba

Partecipanti

Professori ordinari	G. Bongiovanni
Professori associati	A. Mura; F. Quochi; M. Saba
Ricercatori	D. Marongiu
Assegnisti	C. Figus; S. La; R. Pau
Dottorandi	Fang Liu; Qingqian Wang
Collaboratori esterni	

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_5	Semiconductors and insulators: material growth, physical properties
PE4_4	Surface science and nanostructures
PE5_6	New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles

Parole chiave

Nanomateriali; Fotonica; Optoelettronica; Energia Sostenibile

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen, Olanda; Laboratoire MOLTECH-Anjou UMR 6200, UFR Sciences, CNRS, Université d'Angers, Francia; Tyndall National Institute University College, Cork, Irlanda; Nara Institute of Science and Technology (NAIST), Giappone; Mads Clausen Institute, South Danish University (SDU), Sonderborg, Danimarca; Dipartimento di Matematica e Fisica "E. De Giorgi", Università del Salento; Istituto di Nanotecnologia Nanotec-CNR, Lecce; Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Pavia; Dipartimento di Chimica e INSTM, Università degli Studi di Pavia; Istituto Officina dei Materiali, IOM-CNR, Cagliari; Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università degli Studi di Cagliari

Riassunto

Sviluppiamo materiali innovativi per l'energia sostenibile e la fotonica. La ricerca consisterà nella progettazione, nella sintesi, nella caratterizzazione strutturale, e nello studio fotofisico dei seguenti materiali: (i) perovskiti ibride metal-organiche per celle solari, LED e laser; (ii) Polimeri di coordinazione ad alta porosità, nanocompositi e nanostrutture planari con fluorofori organici e nanoparticelle metalliche per lo sviluppo di chemosensori ottico/fluorescenti ad effetto plasmonico

Inquadramento generale

I nanomateriali ed i semiconduttori molecolari sono materiali a basso costo e facili da realizzare, le cui proprietà elettroniche ed ottiche dipendono dalla dimensione. Tra le applicazioni di



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

maggior spicco per i nanomateriali sono l'energia, l'illuminazione, l'informazione quantistica, la nanofotonica, la sensoristica e la biologia.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Le perovskiti ibride di alogeni sono semiconduttori innovativi che combinano i pregi dei materiali organici, quali la preparazione semplice e di basso costo, con quelli posseduti dai composti inorganici, come la robustezza ed il trasporto ambipolare ad alta mobilità. L'attività di questo triennio sarà focalizzata i) nella sintesi, sviluppo e studio di nuove perovskiti in cui il piombo è sostituito con metalli non tossici, ii) nella sintesi, sviluppo e studio di nuove perovskiti in cui il metallo bivalente (Pb) è sostituito da due elementi con valenza I e III, iii) nella sintesi, sviluppo e studio di perovskiti bidimensionali (Ruddlesden-Popper). Utilizzeremo tecniche di spettroscopia ultraveloce per studiare la fotofisica di questi materiali. Il risultato scientifico sarà la conoscenza dei parametri del materiale che controllano le proprietà degli stati eccitati allo scopo di migliorare l'efficienza di emissione della luce e quella di fotoconversione. Progetteremo inoltre strutture metal-organiche altamente porose, nanocompositi e nanostrutture planari con fluorofori organici e studieremo la loro fotofisica attraverso misure di luminescenza transiente e assorbimento da stato eccitato, allo scopo di sviluppare nuove piattaforme per chemosensori. Attraverso l'utilizzo di nanoparticelle di metalli nobili (Au, Ag) ad alto albedo studieremo il fenomeno della "Metal-Enhanced Fluorescence" (MEF) resa possibile dai plasmoni locali di superficie (LSP) con lo scopo di aumentare la resa quantica della fluorescenza dei chemosensori.



Titolo della linea di ricerca:

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

Responsabile/i: Prof. G. Cappellini, Dr. A. Bosin

Partecipanti

Professori ordinari	
Professori associati	Prof. G. Cappellini
Ricercatori	Dr. A. Bosin
Assegnisti	Dr. R. Cardia
Dottorandi	Dr. P. Mocci
Collaboratori esterni	

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_7	Atomic, molecular physics
PE3_4	Electronic properties of materials, surfaces, interfaces, nanostructures...
PE3_9	Condensed matter – beam interactions (photons, electrons...)

Parole chiave

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

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Gruppo ETSF-Dipartimento di Fisica, II Università di Roma "Tor Vergata" Gruppo ETSF-Dipartimento di Fisica, Università di Milano Gruppo ETSF-IFTO-FSU Jena ,Germany Gruppo ETSF-NAPS, Université Catholique de Louvain, Belgium Gruppo Spettroscopia Raman, Dipartimento di Fisica, UniCa Gruppo GMSN, ITA-San Paolo, Brasile

Riassunto

Il progetto di ricerca proposto ha a che fare principalmente con il calcolo delle proprietà ottiche ed elettroniche dei seguenti sistemi: A) Sistemi cristallini a largo gap: il caso delle fluoriti B) Molecole organiche e biologiche. Tali tematiche vengono affrontate mediante tecniche di simulazione numerica.

Inquadramento generale

Le tecniche spettroscopiche giocano un ruolo fondamentale nello studio delle proprietà ottiche ed elettroniche di solidi, molecole ed atomi. L'introduzione di codici di calcolo detti ab-initio per il calcolo delle proprietà elettroniche di sistemi localizzati ed estesi ha aumentato la capacità di comprensione degli spettri ottici ed elettronici di sistemi differenti. Infatti tali codici di calcolo che non hanno bisogno di parametri esterni permettono il calcolo accurato delle transizioni elettroniche di differente natura e simmetria nei solidi e nelle molecole. L'utilizzo di tali tecniche di spettroscopia teorica è uno dei fini principali del presente piano di ricerca.



Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

I codici di calcolo a primi principi dedicati al calcolo delle proprietà spettroscopiche dei materiali possono essere di differente natura: schemi DFT-LDA e DFT-GW per gli stati fondamentali ed eccitati, TD-DFT o BSE per il calcolo degli spettri ottici. Maggiori informazioni sulle tecniche, la loro origine, le comparazioni con i dati sperimentali puo' essere trovato sul sito della collaborazione ETSF (European Theoretical Spectroscopy Facility (ETSF)) <http://www.etsf.eu>.

Il programma di ricerca che vorremmo affrontare in collaborazione con colleghi di ETSF consiste delle seguenti parti: A) Proprietà elettroniche ed ottiche di sistemi a larga gap: le fluoriti cubiche. Cristalli ionici con la struttura della fluorite hanno tipicamente grandi valori del band-gap e presentano una vasta regione in frequenza di trasparenza. Dopo aver studiato le caratteristiche del CdF₂ e del BaF₂, intendiamo estendere i nostri interessi a sistemi differenti (e.g. MgF₂ o SrF₂). Inoltre pensiamo di effettuare confronti tra differenti codici computazionali sulle proprietà di stato fondamentale, di stato eccitato ed ottiche di sistemi cristallini di bulk per testare quale e' quello che presenta le migliori prestazioni per quanto riguarda il risparmio delle risorse computazionali. Inoltre per i composti di cui sopra prevediamo anche di effettuare delle valutazioni sulle proprietà elettroniche ed ottiche di clusters di fluoriti con numero ridotto di atomi . In questo caso pensiamo di adottare schemi di calcolo fondati su codici all-electrons a basi localizzate.

B) Proprietà elettroniche ed ottiche di molecole organiche e biologiche L'uso delle suddette tecniche computazionali e' stato importante negli ultimi anni per il calcolo delle proprietà elettroniche ed ottiche di molecole interessanti in differenti settori di ricerca: dalla astrochimica e astrobiologia alla scienza dei materiali ed ai beni culturali. Tra le specie molecolari di interesse per i suddetti campi quelle a base carbonacea sono di importanza fondamentale: in particolare gli idrocarburi aromatici policiclici (PAHs). Tali molecole sono di interesse anche per applicazioni in optoelettronica se considerate in fase solida. Inoltre vorremmo considerare anche biomolecole come le nucleobasi che risultano importanti sia per studi di astrobiologia e astrochimica che per potenziali importanti applicazioni nella scienza dei materiali. In questa linea di ricerca vorremmo portare avanti anche studi su sistemi molecolari di interesse (come la cellulosa) per i beni culturali. In questo ambito vorremmo sfruttare anche la collaborazione in atto con un gruppo di spettroscopia Raman del nostro Dipartimento con il quale abbiamo una convenzione con la Biblioteca Universitaria di Cagliari del MIBAC.



Titolo della linea di ricerca:

Proprieta' magnetiche di nanomagnet

Responsabile/i: Giorgio Concas

Partecipanti

Professori ordinari

Professori associati Giorgio Concas

Ricercatori Francesco Congiu

Assegnisti

Dottorandi

Collaboratori esterni Davide Peddis (professore associato dell'Universita' di Genova),
 Giuseppe Muscas (post-doc dell'Universita' di Uppsala, Svezia)

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_1 Structure of solids and liquids

PE3_8 Magnetism and strongly correlated systems

PE3_10 Nanophysics: nanoelectronics, nanophotonics, nanomagnetism, nanoelectromechanics...

Parole chiave

Magnetismo; Nanomateriali; Materiali molecolari

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

ISM-CNR, Unita' di Montelibretti (RM); Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, Università di Cagliari; Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, di Uppsala, Svezia, Università' di Genova.

Riassunto

Sintesi e caratterizzazione di nanoparticelle magnetiche per uso come componenti di materiali termoelettrici.

Inquadramento generale

A livello mondiale si assiste a un continuo aumento della richiesta di energia, con l'uso di combustibili fossili ancora largamente predominante rispetto alle energie rinnovabili. E' importante recuperare anche in minima parte l'energia termica dispersa per convertirla in qualche altra forma utilizzabile (tipicamente energia elettrica). I materiali termoelettrici (TE) sono una possibile soluzione al problema del recupero del calore prodotto come "scarto" dai processi industriali, dai motori a combustione, dagli apparecchi elettrici ed elettronici per uso domestico. I primi dispositivi TE che sono stati realizzati sono dispositivi a semiconduttore, e restano al momento i più diffusi. Essi hanno come vantaggi elevata robustezza, durata e semplicità di utilizzo, ma



hanno come serio limite una ridotta efficienza, che ne limita l'applicazione a sistemi di bassa potenza.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

B 1) Sintesi e caratterizzazione di nanoparticelle magnetiche Verranno prodotte grandi quantità di NPM (con diametro $D \approx 10$ nm) con una poli-dispersività ragionevole usando metodi diversi: cioè, metodi chimici colloidali in mezzo organico (decomposizione ad alta temperatura e / o processo di poliolo e co-precipitazione acquosa). Saranno sintetizzati: ferrite con struttura spinello ($\text{Ni}_x\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_4$), magnetite e maghemite ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$). Nelle precedenti soluzioni solide, la natura chimica del materiale magnetico può essere regolata continuamente per ottenere anisotropia magnetica variabile, da materiali magnetici soft (NiFe_2O_4) a materiali hard con elevata anisotropia magnetocristallina (CoFe_2O_4). Alla fine di questa prima fase, le NPM saranno ottenute come polveri o dispersioni acquose o organiche. B2) Caratterizzazione delle nanoparticelle magnetiche Le nanoparticelle sintetizzate verranno caratterizzate dal punto di vista strutturale e magnetico. Le proprietà strutturali verranno determinate mediante diffrazione di raggi X (XRD) e spettroscopia infrarossa a trasformata di Fourier (FT-IR), mentre le proprietà morfologiche verranno studiate mediante microscopia elettronica in trasmissione (TEM). Le proprietà magnetiche saranno studiate utilizzando misure di suscettività AC e magnetizzazione DC. La magnetizzazione dipendente dalla temperatura e dal campo magnetico (tecniche VSM e SQUID) sono essenziali per estrarre sia proprietà intrinseche che estrinseche delle NPM che possono influenzare la termodiffusione e la natura termoelettrica del LI-FF, una volta che le NPM sono disperse in un mezzo liquido ionico.



Titolo della linea di ricerca:

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

Responsabile/i: Geddo Lehmann Alessandra, Congiu Francesco

Partecipanti

Professori ordinari	0
Professori associati	0
Ricercatori	2
Assegnisti	0
Dottorandi	0
Collaboratori esterni	0

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_8	Magnetism and strongly correlated systems
PE3_10	Nanophysics: nanoelectronics, nanophotonics, nanomagnetism, nanoelectromechanics...
PE5_6	New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles

Parole chiave

Perovskiti,ferroicità,transizioni di fase

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

PRIN 2017: Two-dimensional oxides Platform for SPIN-orbitronics nanotechnology (Acronym: TOPSPIN)

CNR-SPIN-Napoli Università degli Studi di Napoli Federico II Università della CALABRIA Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università di Salerno Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Genova

Riassunto

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

Inquadramento generale

Sebbene le perovskiti siano note in gran numero da molti anni, periodicamente se ne scoprono proprietà inaspettate, cosicché il loro studio rimane un campo altamente competitivo a livello internazionale. Argomenti caldi sono le transizioni di fase strutturali, le risposte colossali a



stimoli esterni in relazione alla microstruttura, la ferroelasticità, la ferroelettricità, le proprietà magnetoelettriche o più in generale multiferroiche, la ricerca di piezoelettrici/ferroelettrici non contenenti piombo, i nuovi fenomeni emergenti all'interfaccia in eterostrutture epitassiali, le potenzialità dei materiali fotovoltaici ferroelettrici, le proprietà emergenti di pareti tra domini ferroici. La nostra ricerca si inserisce in tale stimolante panorama generale. A livello nazionale, in particolare, il nostro gruppo è inserito, nel triennio in considerazione, in un PRIN su studi di interfacce tra ossidi perovskiti volto alla ideazione di dispositivi per spintronica e "orbitronica" basati su fenomeni complessi quali o'ordinamento di orbitali (effetto Jahn-Teller cooperativo).

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

1) Proprietà di interfaccia tra ossidi perovskitici (2019). Saranno studiate le proprietà magnetiche e di trasporto di manganiti magnetoresistive epitassiali contenenti interfacce naturali sotto forma di pareti tra domini ferroelastici o artificiali in caso di superreticoli. Le proprietà non-bulk delle pareti tra domini ferroici sono un tema emergente della ricerca sui materiali perovskitici funzionali.

2) Transizioni di fase in perovskiti del manganese bulk e nanostrutturate (2019-2021). 2a) Saranno concluse le ricerche e gli esperimenti sullo studio dell'effetto magnetocalorico quale mezzo di indagine per il riconoscimento delle transizioni di fase puramente magnetiche o magnetostutturali/magnetoelastiche in perovskiti di Mn magnetoresistive. Verranno pubblicati i risultati riguardanti il sistema Pr-Ca-Mn-O per la composizione $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{MnO}_3$, studiato in forma di particelle di dimensione al di sopra del limite superparamagnetico. 2b) Verranno concluse e pubblicate le ricerche sul sistema multiferroico Ho-Ca-Mn-O, sempre per la composizione half-doped, con un confronto tra transizioni magnetiche in stato bulk e in nanoparticelle.

3) Perovskiti ferroelettriche per fotovoltaico e fotocatalisi: sintesi e caratterizzazione strutturale e dielettrica (2019-2021). Nel campo delle perovskiti ferroiche ferroelettriche, durante il triennio realizzeremo la sintesi e la caratterizzazione di materiali con potenzialità nel campo della conversione di energia solare. Si tratta di un tema non nuovissimo, ma che ha avuto un nuovo slancio e ha sollevato un rinnovato interesse dopo la recente scoperta delle interessantissime proprietà di fotoconversione degli alogenuri organici/inorganici con incipiente ferroelettricità. I materiali saranno scelti in base al valore della loro soglia di assorbimento. Nel caso di ossidi, verranno preparati campioni ceramici per sintesi allo stato solido e successiva sinterizzazione di pastiche dense. La caratterizzazione strutturale verrà effettuata per diffrazione di raggi X su polveri. La caratterizzazione dielettrica verrà effettuata tramite un tester Radiant per la misura di loop $P(E)$ e tramite la misura di costante dielettrica in funzione di frequenza e temperatura



Titolo della linea di ricerca:
Studio e applicazioni del Si poroso

Responsabile/i: Guido Mula

Partecipanti

Professori ordinari	
Professori associati	
Ricercatori	Guido Mula
Assegnisti	Alessandro Pira
Dottorandi	Elisa Pinna
Collaboratori esterni	

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_5	Semiconductors and insulators: material growth, physical properties
PE4_1	Physical chemistry
PE5_6	New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles

Parole chiave

porous silicon, hybrids, pores filling

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

CEA-LETI (Grenoble, France), Univ. Autonoma Barcelona (Barcellona, Spain), INRiM (Torino), Univ. Piemonte Orientale, Univ. Federico II di Napoli

Riassunto

Le attività di ricerca sul Si poroso nel triennio 2019-2021 vedranno studi approfonditi dei meccanismi di infiltrazione dei sistemi meso- e macro-porosi in Si poroso. Sono in programma studi sia con materiali organici che inorganici. Verrà dedicata particolare attenzione allo studio dei meccanismi di formazione delle interfacce e alle proprietà dei materiali inseriti all'interno dei pori, nel quadro di collaborazioni nazionali e internazionali. Grazie alle collaborazioni sono previsti studi incrociati con metodologie differenti sia per quanto riguarda la fabbricazione dei campioni che per quanto riguarda le metodologie di infiltrazione (metodi chimici, elettrochimici e di deposizione di strati atomici di composti inorganici (p.es. ZnO).

Inquadramento generale

Le attività di ricerca per il triennio 2019-21 sono inserite nel filone di attività del gruppo da più di dieci anni. In particolare, si inseriscono nel quadro dello studio dei processi di infiltrazione dei pori con sostanze sia organiche che inorganiche. Queste problematiche hanno importanti aspetti anche applicativi, dato che si possono fare infiltrazioni con materiali luminescenti, con materiali magnetici, con materiali organici con specifiche applicazioni per esempio per la sensoristica. I



materiali porosi hanno sempre maggiore rilevanza anche nel campo industriale, e un crescente sforzo di standardizzazione dei metodi di caratterizzazione di queste strutture è presente nella letteratura scientifica. Sempre più spesso si trovano studi su sistemi porosi ibridi, nei quali la combinazione delle proprietà della matrice porosa con appositi composti inseriti all'interno dei pori (siano essi organici o inorganici) permette di costruire nuovi materiali con una notevole versatilità nella scelta delle proprietà fisico-chimiche e, di conseguenza, nelle potenziali applicazioni.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Sono diversi gli aspetti importanti nel controllo delle strutture ibride con sistemi porosi. Una delle caratteristiche importanti è il controllo della morfologia dei pori, dati i notevoli problemi di controllo su scala nanometrica di processi di fabbricazione con processi elettrochimici. La definizione di metodologie di formazione capaci di portare alla generazione di pori di morfologia, densità e dimensioni predeterminate ha una rilevanza notevole nelle prospettive di industrializzazione di dispositivi basati su strutture porose. Verranno quindi portati avanti studi sui processi di fabbricazione con metodologie elettrochimiche, in particolare per il Si poroso di tipo n+. Nell'ambito degli ibridi organico- inorganico, i recenti risultati ottenuti hanno mostrato come il diametro del poro abbia un effetto importante in quanto ci sono proprietà dei polimeri che dipendono fortemente dalle superfici e che possono essere rilevanti anche su distanze relativamente grandi rispetto all'interfaccia (alcuni nm). Il controllo delle proprietà dei composti inorganici all'interno di strutture porose ha importanti risvolti applicativi legati al crescente interesse verso i materiali porosi per esempio nell'ambito energetico (stoccaggio e produzione di energia). Di conseguenza, lo studio delle caratteristiche dei processi di impregnazione di sistemi porosi con polimeri riveste un particolare interesse per tutte quelle applicazioni tese a sfruttare una intima connessione tra un materiale organico e uno inorganico al fine di ottenere materiali ibridi con proprietà innovative. Le proprietà di conduzione elettrica dei polimeri dipendono fortemente dalle proprietà strutturali dei composti, che a loro volta dipendono fortemente per esempio dalle condizioni di polimerizzazione e dalla presenza di interfacce: il controllo di queste condizioni verrà implementato. La messa in evidenza poi dei vantaggi derivanti dal riempimento dei pori con composti di Er luminescenti, insieme allo sviluppo di una nuova tecnica per la fabbricazione di pori di porosità con distribuzione e forma controllata apre la possibilità di sviluppare ulteriormente questa strategia per ottimizzare i processi di riempimento e studiare l'ottimizzazione dei processi di fabbricazione per l'ottenimento di una luminescenza più efficiente.



Titolo della linea di ricerca:

Scienza dei Materiali e spettroscopia ottica

Responsabile/i: Pier Carlo Ricci, Carlo Maria Carbonaro, Riccardo Corpino, Marcello Salis

Partecipanti

Professori ordinari

Professori associati Pier Carlo Ricci, Carlo Maria Carbonaro

Ricercatori Riccardo Corpino, Marcello Salis

Assegnisti Daniele Chiriu

Dottorandi Jessica Satta, Stefania Porcu, Alberto Luridiana, Andrea Pinna,
Andrea Cocco

Collaboratori esterni

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE4_1 Physical chemistry

PE5_1 Structural properties of materials

PE5_6 New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles

Parole chiave

Scienza dei Materiali, fosfori, Raman, fotoluminescenza

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

CNRS Grenoble (Francia), Università di Notre Dame (USA), Università di ULM (Germania), BC Materials (Spagna), Università di Castilla y Leon (Spagna), Università di Sassari, Università di Tyndall, Opificio delle Pietre Dure, Università di Palermo

Riassunto

L'attività di ricerca sarà dedicata allo studio delle proprietà ottiche e strutturali dei materiali per applicazioni di interesse tecnologico e per applicazioni nel campo dei beni culturali. Lo studio dei nuovi materiali si inquadra anche nella ricerca di sistemi privi di materie prime critiche (CRM) anche attraverso il riciclo da scarti. Il progetto di ricerca propone lo studio di nuove nano-architetture fluorescenti (quali ad esempio perovskiti inorganiche) e nuovi ibridi organico/inorganico. Una particolare importanza sarà rivestita da Carbon-dots (CDs), nanoparticelle a base carbonio le cui proprietà di luminescenza possono essere accordate in lunghezza d'onda mediante confinamento quantico e funzionalizzazione superficiale. Il progetto di ricerca propone lo sviluppo di una strumentazione portatile integrata che unisca la tecnica della spettroscopia per le indagini *situ* anche per applicazioni nei beni culturali.

Inquadramento generale

Le materie prime sono fondamentali nella maggior parte delle applicazioni tecnologiche, ma alcune di loro sono state recentemente definite dalla Commissione europea come "critiche" per l'elevato



rischio di carenza di approvvigionamento previsto nei prossimi 10 anni, e contemporaneamente, per la loro importanza nel settore europeo. Le procedure di sintesi chimico fisica dei materiali che verranno proposti sono in generali facili, a basso costo e “green”. Tuttavia la struttura, la composizione chimica e quindi le proprietà ottiche dipendono in gran parte dai metodi di sintesi e dai precursori. Solo recentemente si è rivolta l’attenzione allo sviluppo di materiali in fase solida contenenti Carbon Dots, in vista di possibili applicazioni delle loro proprietà di emissione allo stato solido. Altri materiali che possono essere delle valide alternative agli attuali CRM rientrano le perovskiti totalmente inorganiche per applicazioni quali LED e nel fotovoltaico e materiali ibridi Inorganico/organico per applicazioni in fotocatalisi. Riguardo lo studio di materiali utilizzabili nel campo dei beni culturali, sia per la loro identificazione sia per il restauro, l’utilizzo di tecniche non invasive e non distruttive è un argomento di grande interesse. A questo proposito è associata l’importanza della spettroscopia Raman nell’identificazione di pigmenti usati in epoca antica per le pitture parietali e per le decorazioni delle terrecotte. A ciò si aggiunge la spettroscopia XRF.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Le attività di ricerca si svilupperanno su tre temi principali: Sistemi ibridi (organico/ossidi metallici) e stabilizzazione di perovskite inorganiche Carbon Dot’s Il primo progetto, sviluppato in collaborazione con l’università di Notre Dame (USA), l’Università di ULM (Germania), il CNRS di Grenoble (Francia) e il BC materials di Bilbao (Spagna), riguarderà lo studio di diversi sistemi ibridi rappresentati da una struttura organica e una struttura di ossido metallico. A questi si affiancherà uno studio parallelo sulla possibilità di stabilizzare le fasi di perovskite inorganica nelle La realizzazione di tali sistemi cercherà di migliorare le proprietà ottiche e strutturali. I sistemi organici verranno accoppiati con semiconduttori di ossidi cristallini, in maniera da avere un efficiente trasporto di carica dalla parte organica al semiconduttore per applicazioni nella fotocatalisi e quindi sulla rimozione di inquinanti da aria e fluidi in generale. Le perovskiti, che hanno già dimostrato un grande potenziale teorico ma con poca stabilità strutturale, verranno studiate mediante tecniche di caratterizzazione ottica (assorbimento e luminescenza statica e risolta in tempo) e strutturale (Raman, assorbimento IR, XRD) e realizzati con morfologie e dimensioni diverse (da micrometri a nanometri) con tecniche di crescita e drogaggio innovative Riguardo nano-composti a base carbonio (C-dots, CDs) per applicazioni allo stato solido nell’ambito dell’illuminotecnica e dei mezzi laser. Seguendo le indicazioni della chimica verde e le priorità individuate da H2020, l’uso di CDs potrebbe contribuire a ridurre l’uso di metalli pesanti (Cd, Sb, Pb, etc.) noti per la elevata tossicità, o di elementi delle terre rare (La, Er, Ga, etc.), individuati come materiali critici da H2020 e ampiamente utilizzati in fotonica. Ad oggi l’efficienza quantica dei CDs nel range blue/verde è quasi competitiva con quella dei quantum dots come CdSe/ZnS, tuttavia l’emissione nel rosso o vicino IR risulta ancora deficitaria. Il primo obiettivo del progetto è quindi superare questo deficit per progettare matrici contenenti CDs con efficiente emissione di luce bianca. Mediante sintesi chimica e trattamenti fisici saranno prodotti CDs la cui emissione sia accordabile in lunghezza d’onda su selezionati colori al fine di ottenere la composizione di luce bianca. Si cercherà di aumentare l’efficienza di emissione sia attraverso opportuna funzionalizzazione della superficie sia attraverso l’accoppiamento plasmonico con nanoparticelle metalliche. Diversi approcci sintetici basati sul metodo sol-gel saranno utilizzati



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

al fine di inglobare elevate concentrazioni di CDs in ibridi organico/inorganico o in matrici polimeriche. La ricerca sarà anche dedicata alla realizzazione di un setup sperimentale integrato per le caratterizzazioni di reperti archeologici basato sul microSORS per lo studio non distruttivo di stratigrafie di interesse archeologico.



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

Sotto-settore 02/B2 “Fisica teorica della Materia”



Titolo della linea di ricerca:

Indagine da principi primi di superconduttori a base di ferro.

Responsabile/i: Fabio Bernardini

Partecipanti

Professori ordinari

Professori associati Fabio Bernardini

Ricercatori

Assegnisti

Dottorandi

Collaboratori esterni Andrés Cano, Institut Neel, CNRS (Grenoble), S. Tence ICMBC, CNRS (Bordeaux), P. Boullay CRISMAT, CNRS (Caen), Eric Bousquet University of Liege (Belgium).

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_4 Electronic properties of materials, surfaces, interfaces, nanostructures...

PE3_6 Macroscopic quantum phenomena: superconductivity, superfluidity...

PE3_8 Magnetism and strongly correlated systems

Parole chiave

Superconduttività, Magnetismo, DFT

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Progetto IRONMAN, AAPG ANR (Francia). Una collaborazione internazionale basata su un progetto a guida francese.

Riassunto

A partire dalla scoperta del nuovo superconduttore a base di ferro LaFeSiH, si desidera ampliare la ricerca in due direzioni. Primo: una migliore comprensione dell'origine della superconduttività in questo materiale. Secondo: trovare nuovi superconduttori a base di ferro con composizione chimica simile a quella del LaFeSiH.

Inquadramento generale

Fin dalla sua scoperta nel 1911 la superconduttività è rimasta un argomento affascinante e misterioso. Nel corso degli ultimi decenni sono state scoperte diverse nuove classi di superconduttori non convenzionali, come cuprati, e ferro-pnictidi / calcogenuri, fermioni pesanti e idruri. Ad oggi, anche dopo grandi sforzi di ricerca, non tutte le classi di materiali superconduttori sono pienamente comprese. La meta finale è la scoperta di un materiale superconduttore a temperatura ambiente. In questo quadro i superconduttori a base di ferro rappresentano una classe di materiali che hanno sia applicazioni pratiche (la loro T_c oggi raggiunge i 100 K) che



interesse per la ricerca di base. Infatti questi superconduttori hanno una struttura a bande che può essere studiata da principi primi usando l'approccio DFT. È quindi possibile comprendere alcuni aspetti interessanti della fenomenologia di questi materiali confrontandola con i risultati delle simulazioni teorico-computazionali.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

L'attività di ricerca del triennio sarà svolta in collaborazione con i partner del progetto IRONMAN a guida francese. Grazie ai laboratori del CNRS ed alle facilities computazionali francesi si svilupperà il progetto in due direzioni. Prima: analisi del superconduttore LaFeSiH per comprendere meglio l'origine della superconduttività. Il LaFeSiH fa parte dei superconduttori a base di ferro. È chiaro che in questa classe di materiali il magnetismo e la superconduttività interagiscono fortemente. La comprensione dell'ordine magnetico a bassa temperatura e delle sue eccitazioni è di grande aiuto nella comprensione dell'origine della superconduttività. Si è già pianificata l'indagine del magnetismo tramite Mossbauer e spettroscopia di muoni. Entrambe le indagini si avvarranno del confronto con i miei calcoli DFT. Seconda direzione: indagine sull'esistenza di superconduttori con composizione simile a quella del LaFeSiH. Questa indagine si avvale dell'ausilio dei calcoli DFT per escludere dalla lista di indagine materiali le cui proprietà siano sfavorevoli alla superconduttività. Individuati i migliori candidati i laboratori del CNRS provvederanno alla sintesi a caratterizzazione dei materiali. Ci si aspetta nel prossimo anno di concludere l'indagine sull'ordine magnetico nel LaFeSiH, si potrebbe avere una prosecuzione del 2021 con esperimenti sotto pressione. La sintesi di nuovi materiali è già iniziata e proseguirà nei prossimi due anni. Ci aspettiamo di individuare nuovi materiali superconduttori all'interno della classe dei materiali a base di ferro.



Titolo della linea di ricerca:

Fisica del trasporto di energia, carica e massa in nano-materiali

Responsabile/i: Luciano Colombo

Partecipanti

Professori ordinari	Luciano Colombo
Professori associati	
Ricercatori	Claudio Melis
Assegnisti	
Dottorandi	Antonio Cappai
Collaboratori esterni	

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_3	Transport properties of condensed matter
PE3_5	Semiconductors and insulators: material growth, physical properties
PE3_10	Nanophysics: nanoelectronics, nanophotonics, nanomagnetism, nanoelectromechanics...

Parole chiave

Simulazione atomistica, trasporto, nano-materiali

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Laboratoire de Thermique et Energie de Nantes (CNRS), France Institut de Ciència de Materials de Barcelona(ICMAB-CSIC), Spain Catalan Institute for Nanoscience and Nanotechnology (ICN2), Barcelona, Spain University of California at Davis (USA) Norwegian University of Science and Technology, Trondheim, Norway Università di Milano-Bicocca, Italy Università di Milano, Italy

Riassunto

L'obiettivo di questo programma di ricerca è generare nuova conoscenza di base sui fenomeni di trasporto (di energia, carica, e massa) che avvengono in nano-materiali con vocazione applicativa in tecnologie emergenti. Svilupperemo un approccio computazionale, principalmente basato su metodi di simulazione atomistica e di struttura elettronica da primi principi. Adotteremo i concetti e i metodi teorici della fisica dello stato solido e della termodinamica di non-equilibrio. Ci occuperemo di semiconduttori nano-strutturati e di composti a base polimerica per conversione termoelettrica (ingegneria energetica), di materiali nano-granulari metallici per computazione neuromorfica (ingegneria dell'informazione), di mezzi porosi impregnati (geo-ingegneria), di sistemi multi-interfaccia (ingegneria elettronica) e di sistemi a bassa dimensionalità con proprietà di trasporto anomale. Prevediamo, altresì, di lavorare allo sviluppo di nuovi metodi teorici e computazionali.



Inquadramento generale

Le simulazioni atomistiche moderne permettono di indagare in modo quantitativo tutte le proprietà fisiche dei sistemi a stato solido e, quindi, consentono la progettazione razionale di nuovi materiali con specifiche capacità. Questo è dovuto all'occorrenza di diversi fattori: (i) la ricerca teorica ha trasformato concetti astratti in algoritmi che, successivamente, la ricerca applicata ha convertito in codici numerici; (ii) i moderni sistemi di calcolo multi-processore hanno reso possibile l'applicazione di tali "teorie calcolabili" a sistemi di complessità strutturale e composizionale paragonabile a quella dei sistemi reali; (iii) il sistematico confronto tra i risultati di laboratorio e le predizioni basate sulle simulazioni ha consentito di sviluppare molta confidenza su queste ultime, trasformandole in uno strumento di conoscenza predittiva. In definitiva, le simulazioni di tipo "dinamica molecolare" e, ancor maggiormente, i calcoli di struttura elettronica primi principî risultano credibilmente applicabili allo studio quantitativo di sistemi e problemi di complessità altrimenti non gestibile dal tradizionale approccio teorico. Testimonia questo grande successo il fatto che essi vengono applicati regolarmente a problemi di fisica, chimica, biologia, geologia e ingegneria semplicemente inimmaginabili (per livello di complessità) fino a pochi anni fa. La nostra ricerca si inquadra in questo paradigma scientifico e sarà finalizzata alla generazione di nuova conoscenza di base, possibilmente utile per applicazioni tecnologiche avanzate. Il triennio 2019-2021 rappresenterà per questo gruppo un momento di grande potenziamento. Infatti, sono stati approvati due diversi progetti che prevedono l'assunzione di altrettanti ricercatori a tempo determinato di tipo A che lavoreranno, rispettivamente, (i) sulla fisica del trasporto di calore e carica in nano-strutture a base Si/Ge (bando PON-AIM, progetto "SiGeTE") e (ii) sulla fisica del trasporto di carica (anche in regime quantistico) in materiali metallici nano-granulari (bando "Brains to South", progetto GRANECO). In aggiunta, è in corso di valutazione a livello ministeriale la proposta di chiamata diretta di un terzo ricercatore a tempo determinato di tipo B che, se effettivamente assunto, porterebbe nuove e moderne competenze nel campo dei calcoli di struttura elettronica primi principî. Con l'arrivo di questa terza unità di personale si potrebbe estendere, approfondire e generalizzare lo studio dei fenomeni di trasporto in sistemi nano-strutturati e a bassa dimensionalità. In particolare, si potrebbe avviare lo studio sistematico dei regimi di trasporto di tipo non diffusivo, integrando la descrizione numerica con i più avanzati modelli idro-/termo-dinamici di non equilibrio. Infine, continuerà l'attività di ricerca sul trasporto termico in compositi a base di grafene funzionalizzato (bando FLAG-ERA della "EU Graphene Flagship", progetto "MECHANIC").

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

[1] Trasporto di calore e carica in nano-strutture SiGe Individueremo strategie di ottimizzazione della figura di merito termoelettrica di nano-strutture SiGe. Studieremo come modifiche chimiche e strutturali influenzino il flusso dei portatori microscopici di calore (fononi) e di carica (elettroni). In particolare: studieremo come la stechiometria composizionale riduca il libero cammino fononico; determineremo come il confinamento spaziale degli elettroni modifichi la conducibilità elettrica; valuteremo come rugosità superficiale, bordi di grano e pori modifichino le modalità trasporto. Infine, seguendo un paradigma di "proof of concept" elaboreremo linee-guida per la realizzazione di efficienti generatori termoelettrici a base SiGe. [2] Termoelettricità in polimeri termoelettrici Vogliamo analizzare le relazioni che intercorrono tra i parametri fisico-chimici del processo di



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

sintesi di polimeri coniugati e le loro proprietà termoelettriche. In particolare, studieremo come differenti processi di polimerizzazione possano influenzare la morfologia e proprietà di trasporto di calore e carica nei polimeri coniugati. A questo scopo ci occuperemo di sviluppare una serie di strumenti teorico/computazionali per generare campioni realistici di polimeri conduttori attraverso la simulazione del processo di polimerizzazione e stimare i relativi coefficienti di trasporto. [3] Trasporto di carica in materiali nano-granulari metallici Vogliamo studiare come le proprietà di trasporto elettrico di film granulari metallici dipendano dalla combinazione di proprietà strutturali alla nano-/meso-scala e di stimoli meccanici esterni. In particolare, studieremo l'insorgenza di fenomeni di "resistive switching" e di "effetti di memoria", eventualmente sfruttabili in una logica di computazione neuromorfa. Questa ricerca richiederà la combinazione di modelli meccanico-statistici per la descrizione delle proprietà di percolazione e di modelli di conduzione elettronica (inclusi eventuali effetti quantistici di trasporto inter-granulare tipo effetto tunnel e "Coulomb blockade") [4] Trasporto termico in sistemi di grafene funzionalizzato Studieremo, mediante simulazioni di dinamica molecolare, il trasporto termico in campioni di grafene ossidato al variare della natura chimico-fisica dello stato di ossidazione. In particolare, determineremo le modalità di trasporto attraverso interfacce grafene/ossido-di-grafene, calcolandone quantitativamente la corrispondente resistenza termica. [5] Fondamenti di fisica del trasporto termico Avvieremo uno studio sistematico del flusso di calore generato da gradienti termici variabili nel tempo, esplorando le corrispondenti modalità di trasporto non-diffusivo, cioè idrodinamico o collettivo o anomalo o caratterizzato da effetti di dispersione/memoria. Studieremo sistemi-modello di: interfacce solido/liquido, materiali porosi impregnati, liquidi in cui trasporto di calore e massa risultino accoppiati.



Titolo della linea di ricerca:

Materials design for future energy and nanoelectronic applications

Responsabile/i: Alessio Filippetti

Partecipanti

Professori ordinari

Professori associati Alessio Filippetti

Ricercatori

Assegnisti

Dottorandi

Collaboratori esterni Alessandro Mattoni, Claudia Caddeo

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_3 Transport properties of condensed matter

PE3_4 Electronic properties of materials, surfaces, interfaces, nanostructures...

PE3_8 Magnetism and strongly correlated systems

Parole chiave

Ab-initio calculations, electronic structure, electric and thermoelectric transport, oxide heterostructures, hybrid perovskites for solar cells

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Quantum and topological properties of materials: CNR-SPIN Genova - CNR-SPIN Napoli - Università of Genova - Delft University of Technology - Università di Napoli 'Federico II'.

Charge confinement, magnetism, and transport properties in oxide heterostructures: Paul Scherrer Institute (PSI), Switzerland - Luxembourg Institute of Science and Technology (LIST) - Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC) - CNR-IOM TASC, Trieste - University of Vienna - Trinity College Dublin.

Renewable Energy: Photovoltaic and thermoelectric properties of materials: Université de Genève, Switzerland - Università of Genova - University of Rome "Sapienza" - École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), Switzerland

Riassunto

In synergy with a worldwide network of experimental and theoretical collaborators, our future activity will point to: - develop innovative methods, based on multi-scale integration of First-Principles plus model theories, accurate for solids and molecules alike, capable to describe the widest range of properties: structural, electronic, magnetic, optical, transport, thermodynamic, disorder. - use them to design a new generation of materials and heterostructures with built-in functionalities, such as thermoelectric, photoconversion, charge confinement, magnetoelectric, transport and spin-transport capability.



Inquadramento generale

Breakthroughs in the synthesis, epitaxial growth, and characterization of complex heterostructures have in recent years brought material science to an entirely new level, allowing complex artificial structures to be realized with atomic-level precision. High-quality ultrathin films of ferroelectrics, high-temperature superconductors and magnets can be interfaced or even grown directly on silicon, thus offering tremendous new possibilities for artificial multifunctional materials and devices. The suited combination of chemically different but epitaxially compatible materials configures multilayers and heterostructures with specifically designed properties. In this context, the role of theoretical prediction is destined to become more and more instrumental in heading the experimentalists towards the most promising among the endless number of combinations. Novel functionalities recently observed in surfaces, thin films, heterostructures, and superlattices promise to burst the implementation of radically new designs in microelectronics, spintronics, photovoltaic and thermoelectric energy production technology. In particular, heterostructures are strong candidate materials for spintronic technology. They can benefit of several advantages with respect to the constituent bulk materials: i) built-in planar strain can fine-tune film magnetization and resistivity; ii) spin-orbit coupling (e.g. Rashba effect) induced by inversion symmetry breaking, can be source of large magnetoresistance; iii) magnetization through proximity effects, induced by contact between magnetic and non-magnetic interfaces, enhances spin-injection and spin-diffusion mechanisms; iv) bi-dimensionality, allowing efficient size downscaling and integration in devices (e.g. perpendicular architecture in MRAM). The accurate theoretical description of magnetic oxide heterostructures and their transport and magnetotransport properties, with inclusion of field and strain effects, is of the outmost importance as complement and guidance for the experimental activity towards the magnetic oxide heterostructures with enhanced spintronic functionalities, such as tunneling (TMR) or giant (GMR) magnetoresistance. Paramount examples are the 2D electron gas confinement at the interface of SrTiO₃ and LaAlO₃ perovskites, which ignited the perspective of a novel oxide-based nanotechnology, and the methylammonium lead-iodide perovskite CH₃NH₃PbI₃, prototype of a new class of low-cost photoconversion devices with exceptional efficiency, which promise to burst a new age of solar cell technology with unprecedented perspectives.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

- OXIDE HETEROSTRUCTURES FOR SPIN-TRANSPORT APPLICATIONS At the functional level we are especially interested in the search for electric-field induced or current-induced switching of magnetization and magnetoresistance, mediated by strain effects, charge and orbital order effects, or spin-orbit coupling. This mechanism can revolutionize the TMR technology and enable a paramount innovation: the electric writing of magnetic bits, and in turn the memory bit size downscaling up to few tens of nm, and the decrease of power consumption from present mA switching currents up to currents $< 100 \mu\text{A}$. Specific materials to be investigated include spin-diffusive ferromagnetic metal/insulating interfaces (Cu₂O/LaSrMnO₃), spin-valve and tunneling magneto junctions (BaFeO₃/SrTiO₃/LaAlO₃/BaFeO₃), magnetostrictive (LaNiO₃/LaAlO₃, LaNiO₃/SrTiO₃), superconducting (CuO/SrTiO₃) and multiferroic (PbTiO₃/SrRuO₃)¹¹ superlattices



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

- NOVEL MATERIALS FOR PHOTOVOLTAIC SOLAR CELLS A fast-rising frontier in photovoltaic applications is the use of inorganic and hybrid organic/inorganic materials as carrier generators in solar cells. Innovative approaches now allow these systems to be grown by relatively inexpensive solution-based (e.g. printing) techniques at low-temperature, and be potentially suited for competitive mass-production solar cell technology. A number of characteristics must be satisfied for these materials to be suited for photoconversion applications: appropriate band gaps, large optical absorption in visible/near IR solar spectrum, transport capabilities, structural matching with the scaffold, appropriate band offsets if assembled in heterostructures. To the aim, a theoretical activity which can reliably predict structural, electronic, optical and transport properties of heterostructures can play an invaluable role in guiding experiment towards the most promising composite materials for solar cells applications. The advanced methodologies developed by AF and co-workers (specifically the VPSIC theory) has the potential to exert a great impact in the field, overcoming the typical shortcomings of standard ab-initio theories, and accurately describing the fundamental properties of generic heterostructures. The AF activity is currently focused on methylammonium lead-triiodide perovskites which are inflaming the community of solar cell applications due to the recently reported record-high 15



Titolo della linea di ricerca:

Ferroelettricità, magnetoelettricità, e termoelettricità in ossidi

Responsabile/i: Vincenzo Fiorentini

Partecipanti

Professori ordinari

Professori associati Vincenzo Fiorentini

Ricercatori

Assegnisti

Dottorandi Roberta Farris

Collaboratori esterni Jorge Iniguez (LIST); Francesco Ricci (postdoc UCL); Andrea Urru (PhD student, SISSA)

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_4 Electronic properties of materials, surfaces, interfaces, nanostructures...

PE3_5 Semiconductors and insulators: material growth, physical properties

PE3_8 Magnetism and strongly correlated systems

Parole chiave

Calcoli ab initio; ferroelettricità; termoelettricità; magnetoelettricità

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

LIST Lussemburgo; U Parma; CNR ISM

Riassunto

Per un futuro prevedibile continueremo lo sviluppo e applicazione di nuovi metodi ab initio a ossidi (principalmente) con ordine magnetico, dipolare, orbitale, di carica. In particolare le applicazioni di interesse attuale sono stati d'ordine coesistenti, ferroelettricità in sistemi metallici, termoelettricità, magnetoelettricità.

Inquadramento generale

La nostra attività si posiziona all'intersezione della teoria avanzata da principi primi e l'applicazione a sistemi per l'elettronica all-oxide del futuro. Utilizziamo sia metodi convenzionali (LDA, GGA, GGA+U) che altri più avanzati (ibridi, SIC), che ci permettono di descrivere materiali che resistono ai primi. Di questi sistemi calcoliamo le strutture e le proprietà elettroniche, ottiche, magnetiche, e di trasporto, usando anche una nostra versione della teoria Bloch-Boltzmann del trasporto, e altri modelli di magnetismo che utilizzano parametri calcolati ab initio. Usiamo occasionalmente modelli di free energy per la stabilità di fase. Una prima attività riguarda materiali 'visionari', che a parte il loro interesse di base, potrebbero aprire nuove strade di applicazione, ad esempio a memorie ad alta densità e multistato. Un secondo filone riguarda proprietà meno avventurose, come il potere termoelettrico e l'accoppiamento magnetoelettrico.



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Nel periodo 2016-18 abbiamo mostrato che i ferroelettrici, caratterizzati da instabilità che producono un momento di dipolo permanente, possono rimanere polari o addirittura essere polarizzati in casi speciali. Recentemente abbiamo iniziato a studiare ferroelettrici metallici magnetici e dotati di ordine toroidale, e prevediamo di approfondire la materia in dettaglio. In altra direzione stiamo studiando la termoelettricità in composti semiconduttori debolmente drogati, incluse le complesse problematiche di trasporto elettronico e di conduttività termica.

Capitolo 3.

PREVENTIVO RICERCHE nel Settore 02/C “Astronomia, Astrofisica e Fisica della Terra e Pianeti”



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

Sotto-settore 02/C1 “Astronomia, Astrofisica e Fisica della terra e Pianeti”



Titolo della linea di ricerca:

Studio teorico e osservativo di Binarie X, stelle di neutroni, buchi neri, e collasso gravitazionale

Responsabile/i: Luciano Burderi

Partecipanti

Professori ordinari	Nicolò D'Amico
Professori associati	Luciano Burderi, Alessandro Riggio
Ricercatori	Andrea Sanna
Assegnisti	Lorenzo Piga, Alessio Anitra
Dottorandi	
Collaboratori esterni	

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE9_10	High energy and particles astronomy – X-rays, cosmic rays, gamma rays, neutrinos
PE9_11	Relativistic astrophysics
PE9_13	Gravitational astronomy

Parole chiave

Astrofisica delle Alte Energie, Radioastronomia, Pulsar

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

Riassunto

I principali temi della nostra attività di ricerca riguardano l'Astrofisica delle Alte Energie e la Radioastronomia, e in particolare lo studio di sistemi binari contenenti un oggetto compatto (stella di neutroni debolmente magnetizzata o un buco nero) e le radio pulsar. La ricerca condotta in questo campo si basa principalmente su osservazioni ottenute con gli strumenti messi a bordo di satelliti per astronomia X e gamma e osservazioni nella banda radio da osservatori terrestri. Inoltre, il gruppo è attivamente coinvolto nello sviluppo di una nuova missione spaziale, HERMES (High Energy Rapid Modular Ensemble of Satellites), che andrà in orbita nel 2022.

Inquadramento generale

Le binarie X di piccola massa (Low Mass X-Ray Binaries, LMXB) contengono una Stella di Neutroni (NS) con debole campo magnetico ($< 10^{10}$ Gauss) che accresce materia da una stella



compagna di piccola massa ($< M_{\odot}$). Quasi tutte transienti (luminosità in quiescenza: 10^{31} - 10^{33} erg/s; in outburst: 10^{36} - 10^{38} erg/s). Se ne deduce che il tasso di accrescimento varia di 5 ordini di grandezza. Le LMXB sono strettamente connesse alle Pulsar Radio al Millisecondo (MSP), una classe, ad oggi, di 294 pulsar con periodi di rotazione inferiori a 10 millisecondi. In base allo “Scenario di Riciclaggio” le MSP sono NS vecchie, ri-accelerate a periodi di millisecondi da una precedente fase di accrescimento di materia e momento angolare. Questo scenario è stato recentemente confermato dalla scoperta di tre MSP di transizione che alternano fasi di MSP a fasi di pulsatori al millisecondo in accrescimento (AMP), che sono sistemi in cui l’emissione di raggi X è generata dall’accrescimento di materia sulla NS, modulata alla sua frequenza di rotazione.

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:

Analisi temporale di futuri outburst di AMP onde ricavare i parametri orbitali e di spin e studiare la loro evoluzione secolare.

Analisi spettrale nella banda X delle AMP per determinare le proprietà della regione di emissione.

Osservazioni ottiche durante la quiescenza X delle AMP, quando la luminosità di accrescimento è esaurita mentre l’elusiva emissione del dipolo magnetico ruotante è riprocessata dalla stella compagna (che agisce come un bolometro) nella banda ottica.

Osservazioni radio in quiescenza delle AMP per individuare pulsazioni coerenti.

Sviluppo di modelli teorici evolutivi di LMXB, AMP e MSP. In questo campo intendiamo esplorare il ruolo della pressione di radiazione dell’emissione di dipolo magnetico ruotante che è stato trascurato nella maggior parte degli scenari evolutivi proposti fino ad oggi.

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.

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.

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.

Nel contesto della collaborazione HTRU (High Time Resolution Universe) e SUPERB (SURvey for Pulsars & Extragalactic Radio Bursts), condurremo inoltre una ricerca ultra-profonda di MSP presso il radiotelescopio di Parkes. Alcune delle nuove scoperte saranno utili per i Pulsar Timing Array, altre potranno diventare ulteriori laboratori di relatività generale, altre saranno



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

utilizzate per studiare la formazione di MSP isolate o per indagare la connessione fra AMP e MSP.

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.

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.

Siamo attivamente coinvolti nello sviluppo della missione HERMES. In questo triennio ci occuperemo della definizione del ritorno scientifico della missione attraverso la modellizzazione e simulazione dell'osservazione di Gamma Ray Burst (GRB) da parte di HERMES al fine di determinarne la sensibilità e la l'accuratezza posizionale sulla volta celeste.

Capitolo 4.

PREVENTIVO RICERCHE nel Settore 02/D “Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica”



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

Sotto-settore 02/D1 “Fisica Applicata, Didattica e Storia della Fisica”



Titolo della linea di ricerca:

Fisica applicata alla medicina, biologia e farmacologia: simulazioni di proprietà di trasporto molecolari

Responsabile/i: Matteo Ceccarelli

Partecipanti

Professori ordinari

Professori associati

Ricercatori

Assegnisti

Igor Bodrenko; Stefan Milenkovic

Dottorandi

Collaboratori esterni

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_16 Physics of biological systems

LS1_8 Molecular biophysics (e.g. single-molecule approaches, bioenergetics, fluorescence)

PE6_12 Scientific computing, simulation and modelling tools

Parole chiave

Fenomeni di trasporto; Nanopori; Simulazioni molecolari

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Jacobs University Bremen (DE); University of Oxford (UK); CNRS Strasbourg (FR); University of Barcellona (ES); University Central London (UK); University of Lubiana (SL); University of Queensland (AU); ENS-Paris (FR); Università di Catania; Università di Padova; Università di Genova; Università di Milano

Riassunto

Nei prossimi anni centreremo le nostre ricerche sullo studio delle proprietà di trasporto di ioni e piccole molecole attraverso membrane di batteri e cellule eucariotiche e vari organelli cellulari all'interno di collaborazioni nazionali e internazionali, utilizzando tecniche di simulazione multiscala.

Inquadramento generale

Le sfide future della medicina richiedono lo sviluppo di nuove strategie in cui sarà predominante gli studi a livello molecolare per meglio comprendere i processi a quella scala e progettare farmaci più efficaci e personalizzati. Nel campo degli antifettivi c'è una necessità urgente di scoprire nuove molecole per combattere quei patogeni che sono riusciti a sviluppare diverse forme di resistenza. Nel campo dei tumori c'è la necessità di esplorare nuove frontiere a livello cellulare. Entrambi



richiedono l'uso combinato di informazioni a livello biologico e strutturale per permettere una progettazione razionale di nuovi agenti terapeutici. Il nostro gruppo e' attivo su questi due argomenti grazie a collaborazioni nazionali e internazionali, in cui forniamo le nostre competenze sullo studio delle proprietà di trasporto utilizzando simulazioni molecolari. La modellizzazione molecolare, grazie a nuovo hardware e algoritmi sempre più sofisticati, riesce oggi ad arrivare alla scala del sub-millisecondo, che viene considerata rilevante per i processi biologici a livello cellulare.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Nel campo degli antifettivi, il nostro primo obiettivo e' capire come gli antibiotici con carattere polare permeano i batteri Gram-negativi. Con l'uso della modellizzazione molecolare andremo ad analizzare il meccanismo di filtraggio di una speciale famiglia di canali proteici, le porine, per ricavare i parametri molecolari che modulano la permeazione delle molecole. Una volta ottenuta una verifica sperimentale, potremo ricercare tra i composti conosciuti tutte quelle molecole che hanno una struttura ottimale per la permeazione attraverso le porine. Un'altra possibile strategia e' quella di utilizzare quei sistemi che i batteri predispongono per catturare nutrienti, come ad esempio gli ioni ferro, per introdurre molecole attraverso una strategia "Cavallo di Troia", coniugando gli antibiotici a quei vettori che legano il ferro. In questo caso si potranno usare antibiotici già conosciuti, ma che falliscono per problemi di permeazione. (1 progetto EU in corso, 1 progetto EU sottomesso, 1 progetto con Australia sottomesso, 1 progetto con Finlandia sottomesso, almeno 1 progetto EU da sottomettere). Nel campo delle ricerche sul cancro il nostro obiettivo primario e' di studiare i mitocondri e i lisosomi come possibili obiettivi di nuove terapie. Questi due organelli giocano un ruolo centrale in diversi processi cellulari scambiando ioni e piccole molecole con il citoplasma attraverso canali selettivi. Poiche questi canali sono coinvolti nello sviluppo di diverse patologie, tra le quali i tumori, sono da considerarsi dei potenziali obiettivi di terapie farmacologiche. Allo stesso tempo sono poco studiati. I nostri studi si incentreranno su un poro del mitocondrio, il canale VDAC, che si esprime con 3 diverse isoforme nelle cellule umane, e il canale TPC dei lisosomi, con 2 diverse isoforme. La modellizzazione molecolare combinata con l'elettrofisiologia (collaborazioni) ci permettera di identificare quelle regioni dei canali che controllano il loro funzionamento e quindi potenziale obiettivo delle terapie farmacologiche (1 progetto nazionale in corso). Sempre in questo campo stiamo progettando di studiare come altri elementi chimici possano essere usati in radioterapia in alternativa alla Boron Neutron Capture Therapy. Lo scopo e' studiare come elementi chimici, generalmente tossici, possano essere immessi in cellule tumorali con l'ausilio di nanoparticelle, prima di essere irradiati da neutroni per espletare la loro attività radioterapica (1 progetto in preparazione).



Titolo della linea di ricerca:

Fisica Medica e divulgazione scientifica innovativa

Responsabile/i: Viviana Fanti, Bruno Golosio

Partecipanti

Professori ordinari	
Professori associati	Bruno Golosio
Ricercatori	Viviana Fanti
Assegnisti	Alessia Zurru
Dottorandi	
Collaboratori esterni	

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE6_12 Scientific computing, simulation and modelling tools

Parole chiave

Fisica Medica, divulgazione scientifica innovativa, diagnostica per immagini, simulazione Monte Carlo

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezioni di Roma 1, Trieste, Pisa, Napoli, Ferrara Scientific Software Group dell'European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, Francia Università di Manchester, Regno Unito Manchester Metropolitan University, Regno Unito Linea medica SYRMEP del Sincrotrone Elettra, Trieste

Riassunto

La linea di ricerca si articola in diversi sotto-progetti: 1 Sviluppo di tecniche innovative di tomografia con luce di sincrotrone 2 Sviluppo di tecniche Monte Carlo per la simulazione dell'interazione dei raggi X con la materia e dosimetria 3 Sviluppo di tecniche di machine learning per il supporto alla diagnosi medica 4 Progettazione, realizzazione e sperimentazione di nuove forme di divulgazione scientifica ed exhibit scientifici interattivi rivolti in particolare a studenti e insegnanti 5 Sviluppo di modelli computazionali dei segnali trasmessi nelle reti di neuroni biologici

Inquadramento generale

1 La tomografia con luce di sincrotrone ha due vantaggi fondamentali rispetto a quella con sorgenti convenzionali: - la radiazione monocromatica permette una sostanziale riduzione di dose in quanto la parte di bassa energia dello spettro prodotto dalle sorgenti convenzionali viene quasi totalmente assorbita dai tessuti senza contribuire significativamente alla formazione dell'immagine; - l'elevata coerenza spaziale del fascio rende visibili gli effetti di contrasto di fase,



quando c'è un'adeguata distanza tra oggetto e detector. Tali effetti aumentano la visibilità dei dettagli piccoli e/o di basso contrasto.

2 Codici di simulazione basati su tecniche Monte Carlo e altri metodi di integrazione numerica sono ampiamente utilizzati nel campo della spettroscopia, della dosimetria e dell'imaging con raggi X per studi di fattibilità e ottimizzazione dei parametri sperimentali. Le tecniche di riduzione della varianza cercano di conciliare la versatilità del metodo Monte Carlo con riduzioni significative dei tempi di calcolo.

3 I recenti sviluppi delle applicazioni delle tecniche di intelligenza artificiale alla medicina fanno presagire una vera e propria rivoluzione nella pratica clinica. Lo scopo generale di queste tecnologie in medicina è di utilizzare algoritmi informatici per estrarre informazioni rilevanti dai dati e assistere i medici nel processo decisionale clinico.

4 L'obiettivo è quello di avvicinare le scuole e il grande pubblico ai grandi temi della ricerca sperimentale e teorica nel campo delle scienze fisiche e di progettare nuove forme di partecipazione del Dipartimento di Fisica agli eventi legati alle attività di Terza Missione.

5 Il campo di ricerca delle neuroscienze è un ambito interdisciplinare, a cui anche i fisici contribuiscono grazie alle loro competenze sulle reti neurali artificiali e sui modelli di segnale neurale da un lato, e sulle tecniche sperimentali dall'altro. Una delle grandi sfide della ricerca nei prossimi decenni sarà quella di cercare di capire come le funzioni cognitive di alto livello sono legate alla trasmissione dei segnali tra i neuroni.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

1 Questa attività è inquadrata nell'ambito del progetto SYRMA-3D (SYnchrotron Radiation MAMmography), supportato dall'INFN e da Elettra-Sincrotrone di Trieste S.C.p.A., ed è condotto all'interno della beamline SYRMEP (SYnchrotron Radiation for MEDical Physics). L'obiettivo di questo progetto è portare il sistema di tomografia mammaria in contrasto di fase con luce di sincrotrone, sviluppato nel precedente esperimento SYRMA-CT, a livello di studio clinico. Il gruppo di Cagliari si occupa della ricostruzione delle immagini tomografiche e dell'ottimizzazione della qualità delle immagini al variare dei parametri di acquisizione.

2 Il gruppo di Fisica Medica è coinvolto nello sviluppo del software XRMC, per la simulazione di esperimenti di imaging e spettroscopia con raggi X in campioni eterogenei. Di recente il gruppo ha iniziato a sviluppare un'estensione del codice per applicazioni al calcolo di distribuzioni di dose con metodo Monte Carlo e tecniche di riduzione della varianza.

3 Il gruppo è interessato in particolare modo allo sviluppo di tecniche di deep learning, e in particolare modelli basati su reti neurali convoluzionali, per l'elaborazione e per il supporto alla diagnosi di tumori e altre patologie da immagini mediche CT e MRI.

4 Questa attività è inserita sia nel progetto PLS del MIUR che in diversi progetti della Commissione Terza Missione dell'INFN, rivolti sia a docenti che a studenti delle scuole di ogni ordine e grado. La sperimentazione riguarda tecniche comunicative quali lo "storytelling" e il "discussion game" per stimolare il dibattito con gli studenti, oltre a percorsi di apprendimento ludico basati su tecniche di "coding unplugged".

5 Questa attività è inserita nell'ambito del progetto HBP (Human Brain Project). Il gruppo è coinvolto nel progetto HBP WAVESCALES (WAVE SCALing Experiments and Simulations), di



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

cui l'INFN è capofila. In particolare, il gruppo si occupa dello sviluppo di modelli di trasmissione dei segnali in reti di neuroni biologici, e modelli di apprendimento attraverso la plasticità sinaptica.



Titolo della linea di ricerca:

Metodi teorico-computazionali applicati a problemi d'interesse biologico e farmacologico

Responsabile/i: Paolo Ruggerone, Andrea Bosin

Partecipanti

Professori ordinari	Paolo Ruggerone
Professori associati	
Ricercatori	Andrea Bosin
Assegnisti	Francesca Cardamone, Giuliano Malloci, Giovanni Serra
Dottorandi	Andrea Basciu, Chiara Fais
Collaboratori esterni	Attilio V. Vargiu (University of Utrecht)

Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_16	Physics of biological systems
PE4_11	Physical chemistry of biological systems
PE4_13	Theoretical and computational chemistry

Parole chiave

Computer modeling, molecular dynamics simulations, proteins, efflux systems

Collaborazioni nazionali o internazionali su questa specifica ricerca

Università di Bologna, Università di Verona, Jacobs University (Germania), University of Oklahoma (USA), Los Alamos National Laboratory (USA), Utrecht University (Olanda), Goethe University (Germania), Forschungszentrum Juelich (Germania), St. Louis University (USA), University of Birmingham (UK), Weizmann Institute (Israele), Université Pierre et Marie Curie (Francia), Basilea Pharmaceutica Ltd (Svizzera), Angelini Farmaceutica (Italia)

Riassunto

Nei prossimi anni è nostra intenzione continuare lo studio dei sistemi di efflusso batterico, cioè, le proteine che contribuiscono a ridurre la concentrazione di composti antimicrobici nei batteri, applicando varie tecniche computazionali e ampliando la tipologia di queste macchine proteiche complesse. Inoltre, estenderemo il database di proprietà chimico-fisiche e dinamiche di composti antimicrobici. Questa linea di ricerca fa parte delle attività previste nell'ambito di un progetto finanziato dal National Institute of Health (USA). Anche lo studio delle proteine virali del virus Ebola sarà portato avanti in collaborazione con il gruppo del Prof. Tramontano dell'Università di Cagliari. Da un punto di vista metodologico applicheremo sistematicamente il protocollo sviluppato per migliorare il potere predittivo del docking molecolare. Infine, stiamo avviando un progetto legato allo studio con metodi computazionali delle problematiche legate all'autismo e alla schizofrenia.



Inquadramento generale

Le linee di ricerca preventivate sono per lo più inserite nell'ambito di progetti nazionali/internazionali finanziati e prevedono una forte interazione con gruppi sperimentali. Lo studio dei sistemi di efflusso batterici è motivato dal continuo aumento della resistenza batterica agli antibiotici. Sono proprio tali sistemi che, data la loro poli-specificità, contribuiscono alla sopravvivenza di ceppi batterici in una fase iniziale della terapia antibiotica, permettendo al batterio di sviluppare ulteriori strategie di resistenza più mirati. La comprensione a livello microscopico del loro funzionamento rappresenta un prezioso aiuto per la sintesi di composti capaci di limitare, evitare, o inibire l'azione di tali sistemi. Il secondo filone di ricerca riguarda proteine essenziali per il virus Ebola, virus caratterizzato dall'estrema mortalità per l'uomo. Lo scopo è di identificare possibili inibitori di tali proteine, partendo anche qui dalle conoscenze microscopiche, combinando i risultati computazionali della proteina wild type e con mutazioni. Per il filone più metodologico si è riusciti a stabilire un protocollo di simulazioni combinando varie metodologie, ottenendo così informazioni preziose per aumentare il potere predittivo del docking molecolare. In particolare, partendo da informazioni riguardo alla struttura di una proteina nel suo stato apo, cioè non in complesso con un ligando, il protocollo permette di determinare la struttura della stessa proteina in complesso con un ligando. Anche per questo ambito di ricerca si prevede la creazione di un database di strutture proteiche ottenute con il nostro protocollo nasce dall'esigenza di avere tecniche computazionali sempre più attendibili per affrontare i problemi sopradescritti. Infine, stiamo avviando un progetto legato all'identificazione delle interazioni proteina-proteina possibilmente legate all'autismo. Si tratta di una nuova attività di ricerca in collaborazione con l'Università di Edimburgo, il Forschungszentrum di Jülich, e le Università di Verona e Bologna, basata sulla mappatura del sinapsoma.

Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

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

Resistenza batterica a) Studio dei processi di cattura, selezione ed estrusione di composti antimicrobici da parte di sistemi di efflusso della famiglia RND dei batteri E. coli e P. aeruginosa. È prevista una forte interazione con partner industriali (2019-2020). b) Studio delle connessioni allosteriche in sistemi di efflusso delle famiglie MFS e SME, proteine la cui azione è stata proposta essere in sinergia con altri sistemi di efflusso (2019-2020). c) Estensione del database di proprietà chimico-fisiche e dinamiche di composti antimicrobici. Tale database contiene anche i file necessari per eseguire simulazioni di dinamica molecolare ed è pubblico (2019-2020). Proteine virali a) Caratterizzazione microscopica dell'interazione fra i residui rilevanti identificati nel punto precedente e molecole che possono svolgere una funzione inibitrice, impedendo la formazione del complesso VP35/RNA. Studio delle mutazioni di VP35 (2019). Protocollo di docking a) Applicazione estensiva del protocollo messo a punto per generare strutture di proteine simili a quelle in complesso con ligandi, ma utilizzando strutture sperimentali di apo-proteine (2020). b) Costruzione di un database relazionale di strutture di proteine che sarà messo a disposizione della



UNIVERSITÀ degli STUDI di CAGLIARI
Dipartimento di Fisica

comunità scientifica allo scopo di migliorare l'efficienza e la attendibilità del docking (2019-2020). Sinapsoma a) Identificazione delle proteine interagenti fra di loro e appartenenti al sinapsoma. Correlazione con i dati genetici associati all'autismo (2019-2020). b) Studio delle caratteristiche strutturali delle interazioni proteina-proteina identificate al punto a) (2019-2020).