

MINISTERO DELL'ISTRUZIONE, DELL'UNIVERSITÀ E DELLA RICERCA

Direzione per il Coordinamento e lo Sviluppo delle Attività di Ricerca
Relazione Finale dei progetti FIRB AUTONOMI LIBERI

Protocollo: RBAU01CJMB

Coordinatore scientifico della ricerca (Principal Investigator)

FIorentini		VINCENZO
Cognome		Nome
Professore Associato	FIS/03	05/04/1960
Qualifica	Settore	data di nascita
Università degli Studi di CAGLIARI	FISICA	
Istituzione	Dip./Ist./Div./Sett.	Posizione
070/6754912	070/510171	vincenzo.fiorentini@dsf.unica.it
prefisso e telefono	numero fax	indirizzo di posta elettronica

Lista delle Unità di Ricerca (UR)

n°	Responsabile Scientifico	Qualifica	Settore scientifico di riferimento	Istituzione	Dip/Ist/Div/Sez
1.	FIORENTINI VINCENZO	Professore Associato	FIS/03	Università degli Studi di CAGLIARI	FISICA

Stato di avanzamento del lavoro scientifico in percentuale del lavoro previsto

n°	Responsabile scientifico dell'UR	Att. n.1	Att. n.2	Att. n.3	Att. n.4	Att. n.5
----	----------------------------------	----------	----------	----------	----------	----------

1.	FIorentini Vincenzo	100	100	100	0	0
----	---------------------	-----	-----	-----	---	---

Problemi

Lo stato di avanzamento dei punti 4 e 5 e' uguale a zero in quanto questi punti sono stati eliminati dal progetto in fase di rimodulazione.

Risultati conseguiti

Tipologia del risultato	SI/NO	Descrizione
2.1 nuove idee, nuove conoscenze, nuovi modelli interpretativi di fenomeni complessi;	SI	<p>La morfologia in presenza di adsorbati e' stata studiata per Cu/In con simulazioni kinetic Montecarlo. I dati dell'energetica e delle barriere cinetiche sono stati ottenuti in precedenza nel progetto tramite calcoli ab initio (che peraltro sono continuati anche nel periodo di proroga). In base a tali dati, abbiamo investigato due scenari che possono portare all'azione di surfattanza. Trascuriamo in quanto transienti i processi di decorazione di step e modifica delle barriere di discesa da parte di In; dato il regime di deposizione (supersaturazione di adatom) i processi legati alle vacanze sono stati trascurati.</p> <p>Nel primo scenario, la densita' di isole aumenta per la ridotta mobilita' degli adatom di Cu prodotta dalla repulsione degli stessi da parte di In substitutional, scenario analogo a quello per Sb su Ag. In un vasto range di condizioni (flusso, temperatura, copertura di In) non abbiamo rilevato effetti degni di nota: il motivo e' che la repulsione di Cu da parte di In e' modesta (0.11 eV) e non ne influenza apprezzabilmente la diffusivita' (barriera cinetica 0.55 eV). Questa conclusione e' consistente con il caso Sb-Ag dove l'energetica era inversa (alta repulsione adatomo-contaminante e alta diffusivita' pre-contaminazione).</p> <p>Il secondo scenario, mai proposto in precedenza, e' suggerito dal risultato ab initio secondo cui il processo in cui Cu "scalza" In surface-substitutional trasformandolo in adatomo e' circa equiprobabile (barriera 0.45 eV) al salto diffusivo di Cu (barriera 0.55 eV). L'In on-surface cosi' prodotto e' altamente mobile (barriera ~0.1 eV), e dato che gli aggregati In-Cu sono stabili, e per cio' stesso produce nucleazione piu' efficiente di quella tra adatom di Cu (piu' lenti). Questo causa un aumento della densita' di isole che, come noto, conduce alla crescita bidimensionale. La simulazione infatti mostra che coperture di In modeste aumentano la densita' di almeno un ordine di grandezza e causano crescita bidimensionale.</p>
2.2 realizzazione di nuova strumentazione	NO	

scientifica e/o di dispositivi avanzati;		
2.3 messa in opera di metodologie scientifiche avanzate;	SI	Come in precedenza si e' fatto uso di tecniche di calcolo state-of-the-art a livello informatico e fisico, Abbiamo usato codici di ultima generazione con paradigma MPI su supercalcolatori paralleli appositamente acquisiti (http://www.caspur.it), attualmente 96 processori con rete ad alta velocita'. Abbiamo utilizzato risorse fornite da grant competitivi presso CINECA e CASPUR. Come di consueto, il carico di calcolo ci pone tra i consumatori "pesanti" di risorse computazionali.
2.4 realizzazione di prototipi;	NO	
2.5 sintesi di nuove molecole e/o di materiali artificiali;	NO	
2.6 proposta di nuove tecnologie;	NO	
2.7 contributo all'innovazione della produzione di beni e servizi;	NO	
2.8 sviluppo di software	SI	E' stato sviluppato un codice kinetic-Montecarlo per la simulazione della morfologia, a partire da codici preesistenti forniti dal Sandia National Laboratory, USA.

innovativo;		
2.9 altri risultati e/o precisazioni;	NO	

Modalità con le quali si documentano i risultati

Modalità	SI/NO	Descrizione
3.1 pubblicazioni scientifiche;	SI	I precedenti lavori sono in fase di revisione da parte delle riviste. Un lavoro sulla simulazione kinetic Montecarlo e' in preparazione. Dettagli saranno forniti sul sito dedicato del progetto (vedi punto 3.2)
3.2 pubblicazioni su supporto informatico (CD, web, etc);	SI	I lavori sottomessi e altra documentazione sono disponibili sul sito web "Microscopic basis of film morphology" all'indirizzo http://microbasis.blogspot.com , attualmente in fase di aggiornamento.
3.3 edizioni critiche, lessici, liste di frequenza, etc.;	NO	
3.4 rapporti tecnici e/o progetti;	NO	
3.5 brevetti;	NO	
3.6 comunicazioni;	SI	L'ultima parte del lavoro non e' stata ancora presentata a

3.6 comunicazioni a congressi nazionali;	SI	conferenze.
3.7 comunicazioni a congressi internazionali;	SI	L'ultima parte del lavoro non e' stata ancora presentata a conferenze.
3.8 diffusione dei risultati sul piano informativo;	NO	
3.9 diffusione dei risultati sul piano formativo;	NO	
3.10 diffusione dei risultati sul piano divulgativo;	SI	L'attivita' e i suoi risultati sono stati oggetto di diverse presentazioni e dimostrazioni pubbliche nel quadro delle celebrazioni del World Year of Physics presso il Dipartimento di Fisica dell'Universita' di Cagliari.

Tabella riassuntiva delle spese sostenute per Unità Operativa

n°	Responsabile Scientifico	Spesa A	Spesa B	Spesa C	Spesa D	Spesa E	Spesa F	TOTALE
1.	FIorentini Vincenzo	14.268	8.561	7.870	7.004	0	0	37.703
	TOTALE	14.268	8.561	7.870	7.004	0	0	37.703

Nel campo "descrizione" relativo a tutte le voci di spesa - fatta eccezione per quelle relative al

personale ed alle spese generali- indicare i seguenti elementi:

1. numero e data della fattura
2. persona fisica o giuridica che ha emesso la fattura
3. breve descrizione del bene o del servizio acquistato
4. importo della fattura (lordo IVA per tutti gli Enti pubblici o per i soggetti privati che non possono procedere al recupero dell'IVA stessa) posto a carico del progetto FIRB

Legenda Voce di spesa (DM. 199 Ric. del 08/03/01; art.6, c.6):

- **Spesa A:** Spese di personale
- **Spesa B:** Spese generali direttamente imputabili all'attività di ricerca nella misura forfettizzata del 60% del costo del personale (compreso quello relativo ai ricercatori)
- **Spesa C:** Spese per l'acquisizione di strumentazioni, attrezzature e prodotti software, limitatamente alle quote impiegate per lo svolgimento dell'attività oggetto del progetto
- **Spesa D:** Spese per stages e missioni all'estero di ricercatori coinvolti nel progetto
- **Spesa E:** Costo dei servizi di consulenza e simili utilizzati per l'attività di ricerca
- **Spesa F:** Altri costi di esercizio (ad es. costo dei materiali, delle forniture e dei prodotti analoghi) direttamente imputabili all'attività di ricerca

Tabella del personale partecipante

n°	Responsabile Scientifico	n° Partecipanti	Mesi/uomo
1.	FIorentini Vincenzo	3	7
	TOTALE	3	7

Instaurazione di rapporti di lavoro con giovani ricercatori

Tipologia del rapporto	n° contratti	Data di inizio del rapporto
Lavoro subordinato a tempo determinato (tempo pieno)	0	
Lavoro subordinato a tempo determinato (tempo parziale)	0	
Collaborazione coordinata e continuativa	1	25/01/2006 -
Dottorato	0	
Post-doc e specializzazione	0	
Assegno di ricerca	0	
Borsa di studio	0	

Firma

Data 13/09/2006 20:02