

MINISTERO DELL'ISTRUZIONE, DELL'UNIVERSITÀ E DELLA RICERCA
Direzione per il Coordinamento e lo Sviluppo delle Attività di Ricerca
Relazione Annuale 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	Posizione	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	90	90	25	0	0

Problemi

Risultati conseguiti nell'annualità

Tipologia del risultato	SI/NO	Descrizione
2.1 nuove idee, nuove conoscenze, nuovi modelli interpretativi di fenomeni complessi;	SI	<p>Abbiamo adatomati e vacanze superficiali di Cu su Cu (100) con adsorbati di In, e l'energetica di step su Cu (100) e la generazione locale di vacanze presso gli step. Tutti questi calcoli, che richiedono uno sforzo computazionale massiccio con sistemi fino a 150 atomi, sono rilevanti per la omodiffusione mediata da difetti nativi. Per osservare quella per vacanze, si utilizzano elementi traccianti (per Cu, In) visibili in STM. Tracciante e difetto si influenzano a vicenda: di qui la necessità di capirne le interazioni. Abbiamo studiato energetica e cinetica di formazione e migrazione di vacanze di superficie, e l'interazione di In e vacanze, inclusa una stima del bacino di attrazione In-V (secondi vicini). Le energie di formazione di 0.5 eV e di attivazione 1.5 eV discordano dallo 0.8 eV sperimentale, forse a causa della formazione presso step. In presenza di In, la vacanza migra più velocemente per scambio con In che con Cu, benché a distanza di secondi vicini migri di nuovo normalmente. Tale interazione mediata potrebbe spiegare moti correlati di coppie di In a distanze sotto il nm.</p> <p>L'adsorbimento di In, e le sue interazioni con difetti nativi, è stato studiato on-surface e sostituzionale (sub): quest'ultimo è il sito stabile, che si realizza dal primo per formazione di vacanza, o per nucleazione di omoatomi (favorito). In sub respinge Cu con energia di 0.15 eV. Questo è rilevante per spiegare come In favorisce la crescita layer-by-layer di Cu (001), in analogia a Sb sub su Ag, che aumenta la densità di isole sul substrato respingendo gli adatomati di Ag e rallentandone la diffusione. In quel caso però la copertura è 0.08 e la repulsione 0.5 eV, mentre per In/Cu la repulsione è 0.15 eV e la copertura 0.03. Dunque l'incremento di densità di isole è un fattore 2-3 al più, e la sua rilevanza andrà rivalutata insieme alla barriera di Schwoebel. Per valutarla in presenza di In stiamo ora studiando la formazione di step, kink, e difetti locali.</p>
2.2 realizzazione di nuova strumentazione scientifica e/o di dispositivi avanzati;	NO	
2.3 messa in opera di metodologie scientifiche avanzate;	SI	Abbiamo fatto ampio uso di tecniche di calcolo allo stato dell'arte sia in termini fisico-teorici che informatici. Specificamente, abbiamo usato codici all-electron o a pseudopotenziali di ultima generazione, eseguendoli con paradigma MPI su supercalcolatori paralleli appositamente acquisiti, o macchine parallele a grana grossa disponibili localmente.
2.4 realizzazione di prototipi;	NO	
2.5 sintesi di nuove molecole e/o di	NO	

materiali artificiali;		
2.6 proposta di nuove tecnologie;	NO	
2.7 contributo all'innovazione della produzione di beni e servizi;	NO	
2.8 sviluppo di software innovativo;	NO	
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	G. E. Biddau, G. Colizzi, and V. Fiorentini: Adsorption and diffusion of indium on Cu (001) in the presence of Cu adatoms and vacancies, Phys. Rev. B, submitted G. Colizzi, G. E. Biddau, and V. Fiorentini: Indium and vacancies at steps on Cu (001), Phys. Rev. B, submitted.
3.2 pubblicazioni su supporto informatico (CD, web, etc);	NO	
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 a congressi nazionali;	NO	
3.7 comunicazioni a congressi internazionali;	SI	Comunicazione orale a Computational Materials Science 2004
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;	NO	

Tabella riassuntiva delle diverse spese sostenute nell'annualità per Unità Operativa

n°	Responsabile Scientifico	Spesa A	Spesa B	Spesa C	Spesa D	Spesa E	Spesa F	TOTALE
1.	FIorentini Vincenzo	28.132	23.430	42.440	2.541		415	96.958
		28.132	23.430	42.440	2.541	0	415	96.958

Nel campo descrizione indicare:

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	5	23
		5	23

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	2	01/03/2004 - 01/12/2004 -
Dottorato	0	
Post-doc e specializzazione	0	
Assegno di ricerca	0	
Borsa di studio	0	

Firma

Data 17/01/2005 16:19