

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	55	0	0
----	---------------------	-----	-----	----	---	---

Problemi

Noto che 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. Il responsabile.

Risultati conseguiti

Tipologia del risultato	SI/NO	Descrizione
2.1 nuove idee, nuove conoscenze, nuovi modelli interpretativi di fenomeni complessi;	SI	<p>Abbiamo esteso l'indagine relativa alla formazione di difetti presso gli step su Cu (100) al calcolo delle energie di migrazione o di attivazione, cioe' le barriere relative alle configurazioni transienti per il moto o la formazione dei difetti. Questi calcoli richiedono uno sforzo computazionale pesantissimo: i sistemi coinvolti di bassa simmetria e fino a 150 atomi, e le barriere energetiche richiedono l'uso di metodi nudged-elastic-band, in cui si studia simultaneamente una catena di alcune immagini del sistema, che mima l'evoluzione delle configurazioni durante la transizione.</p> <p>Si sono considerati l'attivazione della formazione di vacanze, l'incorporazione di In, e la downstep diffusion di Cu, presso i due tipi di step su Cu (100), precisamente presso siti kink dove il costo energetico e' atteso minimo (la migrazione di Cu e' in presenza di In) :</p> <ul style="list-style-type: none"> - l'energia di attivazione per la formazione di vacanze e' ~0.7 eV, che e' dunque la massima energia coinvolta nella migrazione di una vacanza, ed e' in ottimo accordo con l'energia di attivazione osservata sperimentalmente; - l'incorporazione di In allo step conduce alla formazione dello stato sostituzionale, e risulta senza barriera in presenza di una vacanza. La successiva migrazione all'interno della terrazza richiede il moto correlato con una vacanza come discusso in precedenza; - la migrazione di Cu in discesa da una terrazza per push-out di un atomo del bordo e' stata studiata in prossimita' di un kink per lo step compatto e in presenza di In al kink. Risulta che la barriera e' effettivamente ridotta rispetto a quella riportata per la diffusione normale in letteratura. <p>Siamo ora in possesso di tutti gli elementi per costruire un modello completo della diffusione su Cu (100) e dell'effetto di surfattanza dovuto a In. Tale modello verra' analizzato nei prossimi mesi con la tecnica del kinetic Montecarlo.</p>
2.2 realizzazione	NO	

di nuova strumentazione scientifica e/o di dispositivi avanzati;		
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 (http://www.caspur.it), e recentemente espansi a 96 processori, di cui meta' dotati di rete ad alta velocita' Infiniband, od altri disponibili via grant competitivi (http://www.cineca.it), come anche le (parzialmente obsolete) macchine parallele coarse-grained disponibili localmente. In tutti i casi, il carico di calcolo del progetto ci ha sempre posti 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 innovativo;	SI	E' iniziato lo sviluppo del codice kinetic-Montecarlo per la simulazione della morfologia (per il completamento di questa parte e' stata richiesta una proroga).
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 lavori in preparazione sono stati inviati; dettagli aggiornati sulla pubblicazione saranno aggiornati progressivamente sul sito dedicato del progetto (vedi punto 3.2)
3.2 pubblicazioni su supporto informatico (CD, web, etc);	SI	I risultati e i lavori sottomessi, oltre ad altra documentazione di supporto, sono disponibili e costantemente aggiornati sul sito web "Microscopic basis of film morphology" all'indirizzo http://microbasis.blogspot.com
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;	SI	Societa' Italiana di Fisica, Congresso nazionale, Catania, comunicazione orale; Espresso suite tutorial and workshop, Cagliari, comunicazione poster; SLACS Day, Cagliari, comunicazione orale; WAU 2005 Cagliari, comunicazione orale.
3.7 comunicazioni a congressi internazionali;	SI	European Conference on Surface Science, Berlin, comunicazione orale.
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 spese sostenute per Unità Operativa

n°	Responsabile Scientifico	Spesa A	Spesa B	Spesa C	Spesa D	Spesa E	Spesa F	TOTALE
1.	FIorentini Vincenzo	19.536	2.832	0	10.847		1.195	34.410

TOTALE	19.536	2.832	0	10.847	0	1.195	34.410
---------------	---------------	--------------	----------	---------------	----------	--------------	---------------

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	4	14
	TOTALE	4	14

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	15/01/2005 -
Dottorato	0	
Post-doc e specializzazione	0	

Assegno di ricerca	0	
Borsa di studio	0	

Firma

Data 20/01/2006 17:29