



Numero 21
marzo 2004

SLACS, il laboratorio del futuro

Fisica computazionale: agli scienziati cagliaritari il coordinamento della ricerca

di Giancarlo Cappellini*

Importante riconoscimento per i Fisici dell'Università di Cagliari che lavorano nell'ambito della Fisica Computazionale applicata alle proprietà della materia condensata. Il Commissario Straordinario per il Consiglio Nazionale delle Ricerche e l'Istituto Nazionale per la Fisica della Materia Prof. Adriano De Maio, con decreto del gennaio 2004, ha sancito ufficialmente la costituzione a Cagliari, presso il Dipartimento di Fisica, del Laboratorio Regionale INFN per la Fi-

estenderà le attività di ricerca di un cospicuo gruppo di Fisici dell'Università di Cagliari che, lavorando nel campo della caratterizzazione delle proprietà della materia mediante simulazioni e metodi computazionali, hanno ottenuto e stanno ottenendo importanti riscontri ed apprezzamento a livello nazionale ed internazionale. Il laboratorio è composto da cinque divisioni che riflettono le attuali linee di ricerca:

Sistemi biofisici, Materiali magnetici e superconduttori, Materiali per l'elettronica e optoelettronica, Materiali strutturali, Nuovi metodi e algoritmi. Tra gli oggetti specifici delle ricerche citiamo *en passant* nuovi materiali superconduttori, la

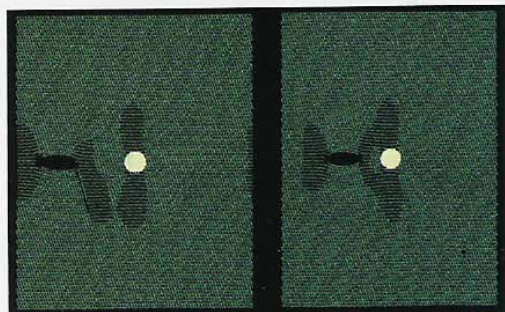
frattura microscopica dei materiali, le proprietà ottiche dei semiconduttori, le molecole coinvolte nella fotosintesi e nell'azione dei farmaci anticancerogeni, aspetti tecnologici dell'elettronica a base di silicio quali la diffusione di droganti e i film sottili di ossidi, strutture nanometriche a base di carbonio, sistemi non lineari, tecniche fisico-statistiche applicate a problemi di natura eco-

nomica e sociale. I ricercatori operanti nel gruppo hanno avuto per lungo tempo e continuano a mantenere collaborazioni con prestigio-

si centri di ricerca nazionali ed internazionali, anche tramite l'organizzazione di una conferenza internazionale (Workshop on Computational Materials Science 2004) la cui quattordicesima edizione si terrà il prossimo settembre al Cala Serena Village di Geremeas alla quale parteciperanno da tutta Europa e dagli Stati Uniti i massimi esperti del settore. A

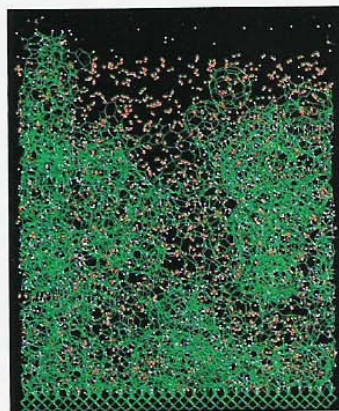
ciò si aggiungono le fruttuose ed essenziali collaborazioni con gli altri gruppi operanti nel dipartimento di Fisica. Il laboratorio intende costituire inoltre un polo di aggregazione per collaborazioni con altri gruppi di ricerca della nostra Università e della Regione: **SLACS** cercherà perciò attivamente il contatto con altre realtà della ricerca e della tecnologia operanti a livello regionale.

* Dipartimento di Fisica



Simulazione degli effetti di una noninclusion rigida (pallina gialla) sulla propagazione di una frattura in carburo di silicio soggetto a carico tensile. La simulazione dimostra che al di sotto di una certa distanza critica tra l'apice di frattura e la inclusione, il fenomeno di frattura è arrestato. Simulazione di A. Mattoni e L. Colombo (Physical Review B, 2004)

sica Computazionale sotto la direzione del Prof. V. Fiorentini. Il Laboratorio, che ha preso il nome di **Sardinian LA**boratory for **Co**mputational materials **Science** (SLACS, <http://www.slacs.it>), coordinerà ed



Simulazione della esposizione di film di carbonio nanostrutturato ottenuto per deposizione di un fascio molecolare (struttura in verde) ad una atmosfera di idrogeno molecolare (palline verdi) e atomico (palline bianche). La simulazione atomistica mette in evidenza l'accumulo di idrogeno molecolare nelle regioni ad alta porosità e la saturazione di orbitali liberi da parte dell'idrogeno atomico. Simulazione di L. Zoppi e L. Colombo (Journal of Physical Chemistry, 2004)