

Interconnessioni metalliche.

L'attività ha riguardato principalmente la caratterizzazione del siliciuro di cobalto, in collaborazione con STMicroelectronics, e lo studio di altre connessioni metalliche basate sul Ti.

Siliciuri di Cobalto.

Si è affrontato lo studio della formazione del siliciuro di cobalto mediante tecniche XRD, XRR, spettroscopia Raman e microscopia a forza atomica.

Titanio e nitrato di titanio.

Contatti metallici per applicazioni in memorie ferroelettriche sono stati caratterizzati mediante tecniche di riflettività X e ToF-SIMS.

Dielettrici di passivazione

Studio dei silicati e del BPSG mediante spettroscopia EPR e UV-Raman. Sono stati analizzati film di BPSG a diverse concentrazioni di P e B depositi mediante SACVD e PECVD. La comprensione della struttura di tali materiali, dei difetti in essi presenti e delle proprietà del P come intrappolatore di impurezze ha importanza fondamentale per la comprensione ed ottimizzazione delle proprietà elettriche. Si sono affrontate anche, in fase preliminare, le seguenti tematiche: 1) analisi degli effetti di contaminazione da Na, 2) Analisi dell'influenza del processo di annealing, 3) analisi di alcuni parametri di deposizione (velocità, temperatura, tecnica di deposizione).

Dielettrici Attivi

Tale attività è articolata su tre fronti: 1) ossidi, ossidi nitrurati, ed ONO (ST), 2) ossidi ad alta costante dielettrica cresciuti mediante ALCVD (MDM), 3) ossidi epitassiali (INVEST).

Ossidi, ossidi nitrurati, e ONO.

Sono state affrontate tematiche relative alla metrologia di ossidi, ossidi nitrurati e dielettrici interpoli costituiti da ossido/nitrato/ossido (ONO). In questo ambito è stata messa a punto una metodologia per la misura di spessori di ONO tramite riflettività a raggi-X. Inoltre il 2002 ha visto il completamento della messa a punto di un metodo per la determinazione quantitativa

dell'azoto in ossidi nitrurati tramite spettrometria di massa di ioni secondari a tempo di volo (ToF-SIMS), ed una sua estensiva applicazione al fine di mettere a punto nuovi processi di nitrurazione per ossidi nitrurati per tecnologie fino a 0.13 micron.

Ossidi ad alta costante dielettrica cresciuti mediante ALCVD.

L'attività si è concentrata sullo sviluppo dei processi di deposizione mediante atomic layer chemical vapor deposition (ALCVD) e sulla caratterizzazione morfologica, strutturale, composizionale ed elettrica di film di ossidi metallici candidati a sostituire lo  $\text{SiO}_2$  nei dispositivi CMOS ultrascalati. Sono stati cresciuti su silicio e caratterizzati i seguenti materiali:  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{ZrO}_2$  ed  $\text{HfO}_2$ . I materiali sono stati cresciuti utilizzando diversi precursori e su substrati la cui superficie è stata preparata con diversi processi. La caratterizzazione morfologica è stata ottenuta mediante AFM e XRR, quella strutturale mediante XRD/XRR e FT-IR, quella fisico-chimica mediante ToF-SIMS, RBS, XPS e quella elettrica e di difetti all'interfaccia mediante misure I-V, C-V, e risonanza di spin elettronico rivelata elettricamente.

Ossidi epitassiali (INVEST).

Nell'ambito del progetto INVEST si sono studiati film epitassiali di  $\text{La}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$  e  $\text{Y}_2\text{O}_3$  tramite diffrazione ad alta risoluzione e riflettività X. Si sono inoltre proposti ed eseguiti esperimenti EXAFS presso ESRF (Gilda) sulla caratterizzazione del  $\text{Y}_2\text{O}_3$ . Inoltre si è iniziata una attività esplorativa dei film di  $\text{Y}_2\text{O}_3$  mediante annichilazione positronica.

Cluster Metallici e Semiconduttori.

L'attività di ricerca e' stata rivolta alla formazione e caratterizzazione di cluster metallici (Sn, Sb) e semiconduttori (Si) in ossido di silicio mediante impiantazione ionica e successivi trattamenti termici per applicazioni in memorie non volatili. In particolare si è studiata la formazione di cluster di Sn e Sb in ossidi di spessore variabile 20 nm – 100 nm mediante impianti a media energia (10-80 keV) e la formazione di cluster di silicio in

ossidi sottili (10 nm) e impianti a 1-2 keV (quest'ultima attività in collaborazione con STMicroelectrocis).

L'attività di ricerca svolta nel 2002 si è focalizzata sulle seguenti tematiche:

(a) Studio dell'influenza di diversi trattamenti termici sulla formazione e sulla proprietà strutturali dei clusters mediante tecniche sensibili all'intorno locale (atomico ed elettronico) dell'atomo impiantato. In particolare, si sono studiate la formazione di cluster di Sn e la formazione di cluster di Sb in ossidi sottili (20 nm) .

(b) Sviluppo di nuove metodologie (alternative alle tradizionali quali TEM) non distruttive per la caratterizzazione dei cluster in ossidi sottili (10 -20 nm).

✓ Si e' investigata la possibilità di usare insieme tecniche di riflettività a raggi x e diffrazione per studiare la formazione, distribuzione in profondità, cristallinità e dimensione dei cluster. Questa metodologia si è applicata ai cluster di Sb e risultati preliminari sono stati ottenuti sui cluster di Si.

✓ E' stata sviluppata una nuova metodologia per l'analisi di nanocristalli di silicio in ossido di silicio mediante il TOF-SIMS.] . Dal confronto con misure TEM si è poi osservato come tramite il SIMS sia possibile determinare alcuni importanti parametri relativi alla posizione (distanza di tunneling e projected range) e alla larghezza della banda di nanocristalli. Questa attività in particolare e' stata svolta anche nell'ambito del progetto europeo NEON.

Il TOF-SIMS e' stato inoltre impiegato anche per la caratterizzazione di cluster metallici di Sb.

✓ Misure di contrasto di forza capacitiva SCFM hanno permesso di localizzare nanocristalli di stagno all'interno dell'ossido, con risoluzione comparabile a quella ottenuta con misure TEM.

Materiali a cambiamento di fase per memorie non volatili.

L'attività è stata svolta in forma di consulenza scientifica e di caratterizzazione di materiali nell'ambito di una collaborazione con STMicroelectronics per lo sviluppo di memorie non volatili a cambiamento di fase, come possibile soluzione alle diverse

problematiche relative allo scaling dei dispositivi microelettronici e con elevate prestazioni.

In collaborazione con Moscow Engineering Physics Institute, sono state effettuate analisi RBS, XPS e AES su film di materiali calcogenuri depositati su differenti buffer dielettrici e metallici per valutarne la compatibilità chimica.

I risultati ottenuti nel 2002 hanno permesso di:

- individuare le problematiche di analisi e di ottimizzarne le metodologie;
- caratterizzare la composizione stechiometrica del materiale calcogenuro in relazione a differenti configurazioni di deposizione;
- evidenziare la stabilità termica del calcogenuro all'ossidazione;
- caratterizzare l'interfaccia calcogenuro-buffer per evidenziare interdiffusioni e formazione di composti, anche a seguito di trattamenti termici.

Nell'ambito del progetto EDERA si è proseguita la ricerca relativa allo sviluppo di nuove tecniche di basate sulla risonanza di spin elettronico rivelata elettricamente. Tali tecniche sono state utilizzate per la caratterizzazione di interfacce Si/Ossidi. Nell'ambito del progetto europeo ESRQC sono stati determinati mediante tecniche ESR impulsive i tempi di decoerenza ( $T_2$ ,  $T_M$ ,  $T_2^*$ ) e di rilassamento spin-reticolo ( $T_1$ ) dei donori (P) in Si e SiGe. Tali parametri hanno importanza fondamentale nella valutazione del possibile impiego degli spin elettronici come qubits in dispositivi a stato solido per il trattamento quantistico dell'informazione.

È stata messa a punto una procedura per la calibrazione del circuito di retroazione del Kelvin Probe Force Microscopy che permette di misurare la distribuzione del potenziale elettrico sulla superficie. In seguito a questo procedimento, il modulo KPFM risulta avere una sensibilità di 10-15 mV e un tempo di risposta che permette di eseguire scansioni di 200 punti per linea alla velocità di 0.5 righe al secondo. Purtroppo il potenziale alla superficie è fortemente influenzato dalle condizioni di questa

durante la misura, difficili da controllare in ambiente di laboratorio.

La tecnica di microscopia di contrasto di forza capacitiva (SCFM) è stata applicata per localizzare la presenza di nanocristalli metallici all'interno di un film di ossido di silicio. L'interazione sonda-campione in presenza di forze elettrostatiche è stata studiata con l'ausilio di un codice ad elementi finiti, per la soluzione dell'equazione di Laplace in 2D. Questo ha permesso di individuare la dipendenza del contrasto dalla dimensione dell'estremità della sonda, dal diametro delle nanostrutture presenti e dalla loro posizione all'interno del film dielettrico.

Il Laboratorio ha ospitato nel 2002 studenti in periodo di stage per il conseguimento del diploma di laurea e per attività di tesi di laurea. Inoltre presso il laboratorio hanno operato 3 studenti di dottorato.

Presso il Laboratorio LENS (Laboratorio Europeo di Spettroscopie Non Lineari) dell'Università degli Studi di Firenze convenzionato con l'INFM, sono proseguite le attività di ricerca a carattere nazionale e internazionale, cui concorrono anche Università italiane e straniere ed altri enti ed istituzioni di ricerca pubblici e privati. Il LENS dispone di attrezzature di avanguardia nel campo delle varie spettroscopie non lineari e da tempo collabora con gruppi di ricerca afferenti all'Istituto fornendo assistenza tecnica e scientifica per l'esecuzione di progetti di ricerca nei campi di specifico interesse.

Nel 2002 sono stati realizzati da ricercatori INFM nove esperimenti presso il LENS, in parte finanziati tramite un apposito fondo istituito dall'Istituto: tra le ricerche effettuate ~~citiamo qui l'esperimento~~ che ha portato alla realizzazione di un Temperature-tunable Random Laser e pubblicato sulla prestigiosa rivista scientifica Nature.

L'estremo interesse di questo nuovo sistema risiede nel fatto che piccole variazioni (dell'ordine del decimo di grado) della temperatura possono accendere o spegnere la sorgente laser e cambiarne le caratteristiche spettrali d'emissione, ovvero i colori

contenuti nella luce emessa. Potenziali applicazioni coinvolgono il campo degli schermi sensibili alla temperatura e il controllo remoto della temperatura in intervalli di valori d'interesse biologico.

E' previsto un maggiore coinvolgimento dell'INFM con l'attivazione di un Gruppo Operativo insediato permanentemente nel LENS sulla base di una rinegoziazione dell'accordo tra i due enti che aumenti il ruolo di INFM nella formulazione delle linee strategiche di tale laboratorio europeo.

#### Centri di Ricerca e Sviluppo

Nel biennio 2001-2002 INFM ha avviato i seguenti otto Centri di Ricerca e Sviluppo:

CRS BEC (Bose Einstein Condensation) a Trento

CRS COHERENTIA (Superconduttività ed ottica) a Napoli

CRS DEMOCRITOS (Democritos Modeling Center for Research In aTOMistic Simulations) a Trieste

CRS NEST (National Enterprise for Nanoscience and Nanotechnology) a Pisa

CRS>NNL (National Nanotechnology Laboratory) a Lecce

CRS SMC (Statistical Mechanics and Complexity) a Roma

CRS S<sup>3</sup> (NanoStrutture e bioSistemi sulle Superfici) a Modena

CRS ULTRAS (National Laboratory for Ultrafast and Ultraintense Optical Science) a Milano.

I tre Centri di Ricerca e Sviluppo>NNL, NEST e S<sup>3</sup> rappresentano la risposta immediata di INFM alla poderosa competizione internazionale nel campo delle nanotecnologie interdisciplinari.

Per quanto riguarda>NNL e NEST, entrambi i centri dispongono di sistemi per litografie a fascio elettronico e tecnologie di patterning con risoluzioni dell'ordine di 20 nm, supportate da adeguate strutture per la nanofabbricazione in clean room, le caratterizzazioni ottiche ed elettriche con risoluzione nanometrica (scanning tunneling spectroscopy, SNOM, etc), e moderni laboratori di biologia e chimica per la sintesi di sistemi molecolari ingegnerizzati. Allo stato attuale>NNL e NEST raggruppano in

complesso circa duecento ricercatori e tecnici di diversa estrazione (fisica, chimica, ingegneria e biologia) che cooperano su tematiche altamente innovative quali: bioelettronica molecolare, computazione quantistica, nanotecnologia dei dispositivi fotonici ed elettronici, sviluppo di processi sub 10 nm, dispositivi fotonici organici, spettroscopie scanning probe a risoluzione nanometrica, etc.

Un aspetto di grande rilievo di questi CRS sta nella capacità di attrarre ricercatori da paesi esteri, invertendo il flusso migratorio di cervelli dall'Italia verso l'estero. La ragione essenziale di questo risultato, che verrà potenziato con una specifica azione di ricerca di giovani ricercatori sul mercato straniero, sta nella disponibilità di strumentazione stato dell'arte e programmi altamente competitivi a livello internazionale in settori che per la loro interdisciplinarietà sono inaccessibili alle università e ai centri ricerca industriali anche stranieri.

Un secondo aspetto di grande rilievo nell'azione dei CRS, sta nella crescita del partenariato industriale e della ricerca in outsourcing, finanziata da industrie. In particolare sono già quattro le multinazionali tecnologiche (Agilent Technologies, Alenia Marconi System, TechInt e STMicroelectronics, che hanno stabilito sedi operative con personale proprio distaccato presso NNL per lo sviluppo di prototipi di dispositivi fotonici ed elettronici di tipo innovativo. Questo tipo di ricerca industriale, che prelude a forme di sviluppo precompetitivo, e' fortemente sostenuto anche da azioni governative, quali la legge 297, e permette un sostanziale incremento del capitale umano e della strumentazione presso i CRS.

Le azioni del Centro NNL riguardano principalmente:

- Il potenziamento della ricerca esplorativa e di seeding in aree ad alto rischio, come l'elettronica biomolecolare, le spettroscopie locali, i nuovi materiali, risoluzioni limite in litografia, nuovi fenomeni di auto aggregazione;
- Il miglioramento delle capacità di produzione ad alta tecnologica, come i dispositivi di nuova concezione basati su eterostrutture organico-inorganico, dispositivi per la

telecomunicazione, (laser a nanostrutture), sistemi complessi come dispositivi FET-Laser organici integrati, ottiche di diffrazione e processamento avanzato di materia soffice;

- La valorizzazione del trasferimento tecnologico, coinvolgendo compagnie internazionali ad alto contenuto tecnologico nelle attività del centro, come utilizzatori finali primari della ricerca e per ampi programmi R&D in outsourcing .

Ciascuna delle 6 Divisioni in cui è organizzato il Centro porta avanti propri programmi di ricerca. In particolare:

- Nell'ambito della Divisione Materiali vengono sviluppate e prodotte nanostrutture a semiconduttore, cresciute per epitassia MOCVD su nanostrutture autoaggregate III-V a base di InGaAs/GaAs o di GaN, con tecniche PECVD (o di evaporazione) di eterostrutture di ossidi e deposizione laser pulsata di nanostrutture in alto vuoto.
- La Divisione Processing e Nanotecnologia, utilizzando un approccio "top down", sviluppa litografie ad alta risoluzione, principalmente da fasci elettronici, litografie a raggi X e olografiche.
- La Divisione Organici lavora sui dispositivi plastici, come LED e laser sintonizzabili e transistor ad effetto di campo, emettitori bianchi ed infrarossi, molecular gain blocks e litografia soft.
- La Divisione Caratterizzazione, trasversale a tutte le attività del centro, si occupa della caratterizzazione elettrica, ottica e strutturale avanzata sulla scala del nanometro.
- La Divisione Nanodispositivi e Strumentazione porta avanti ricerca sviluppo di nuovi materiali, processi e strumentazione, con particolare attenzione al trasferimento tecnologico verso le imprese ad alta tecnologia ed è responsabile della politica dei brevetti e delle commesse industriali del centro.
- La Divisione Elettronica Biomolecolare è dedicata all'esplorazione di nuovi concetti e sistemi basati sulla manipolazione di molecole singole e/o auto organizzate, tramite un approccio bottom up, transistor ad effetto di campo con DNA e proteine, bionanosensori enzimatici ottici e elettrici, DNA-chip e protein-chip.

Per quanto riguarda programmi di formazione, il Centro beneficia dei corsi avanzati per laureati e dei dottorati organizzati dall'Università di Lecce e di accordi di collaborazione relativi alla formazione con istituzioni straniere come la Drexel University, l'Università di Pennsylvania, i Laboratori ATR di Osaka.

Le azioni del Centro NEST si sviluppano secondo le quattro linee di ricerca del centro:

- **Nanoelettronica coerente:** progettazione, implementazione e studio sperimentale di diverse architetture nanocircuitali basate su nanostrutture a semiconduttori per la computazione quantistica e la crittografia quantistica. Per quanto riguarda le attività in ambito fotonico, gli obiettivi saranno legati alla realizzazione di laser a cascata quantica nella regione dei TeraHertz (in un ampio intervallo di frequenze e temperatura) utilizzabili in applicazioni industriali, per cui sono state avviate collaborazioni con industrie high-tech statunitensi grazie a finanziamenti della National Science Foundation (USA).

Nel corso del 2002: e' stato dimostrato il primo laser a semiconduttori ad eterostruttura in grado di emettere nella regione dei TeraHertz, con importanti applicazioni nel campo della diagnostica medica e delle comunicazioni senza filo; e' stata realizzato un innovativo dispositivo elettroluminescente basato su giunzioni p-n planari in eterostrutture GaAs-AlGaAs, che rende possibile l'implementazione di architetture per la produzione e rivelazione di singoli fotoni per applicazioni di crittografia quantistica; e' stato osservato per la prima volta il tunneling nonlineare di quasiparticelle con carica frazionaria nel regime Hall quantistico frazionario.

- **Nanobioteχνologie:** prosecuzione dell'attività di sviluppo ed implementazione di memorie ottiche ultradense basate sulla bistabilità ottica scoperta al centro NEST in alcune varianti delle proteine verdi fluorescenti, tramite realizzazione di "array" bidimensionali di proteine fluorescenti otticamente controllabili immobilizzate su opportuni substrati metallici o a semiconduttore. L'obiettivo è quello di realizzare un prototipo

di memoria ottica ultradensa basato su singole biomolecole, su cui sono in via di definizione dei programmi di collaborazione con STmicroelectronics di Catania e Siena Biotech per la utilizzazione di tali molecole in ambito optoelettronico e per la diagnostica medica.

Tra i principali risultati scientifici ottenuti nel corso del 2002 sono stati chiariti i meccanismi e le dinamiche di funzionamento di dispositivi ottici di memoria basati su mutanti opportunamente ingegnerizzati della proteina verde fluorescente ed e' stato scoperto un nuovo meccanismo di regolazione della trascrizione del DNA virale del virus HIV basato sulla interazione di proteine virali e proteine cellulari visualizzata tramite la tecnica del trasferimento risonante di fluorescenza (FRET).

- Spintronica: sviluppo di diverse linee teoriche e sperimentali; in particolare studio delle peculiarità del trasporto spin polarizzato in sistemi ibridi superconduttore-metallo e/o ferromagnete e in sistemi ibridi superconduttore-nanostruttura a semiconduttore-superconduttore, mirando ad evidenziare i principali meccanismi di trasporto in questi dispositivi. Sulla base di questi studi verranno definiti ed implementati dispositivi spintronici a carattere applicativo.

L'attività realizzata nel 2002 ha permesso di proporre un nuovo meccanismo di pumping adiabatico di corrente spin polarizzata ottenuto mediante modulazione dell'accoppiamento spin-orbita e di chiarire i meccanismi dell'entanglement in sistemi di spin interagenti.

- Teoria di liquidi elettronici in nanostrutture: studio delle proprietà del gas elettronico a bassa dimensionalità in campo magnetico. Ulteriori attività di ricerca riguardano lo studio teorico di (i) superfluidità in sistemi aventi dimensionalità ridotta, (ii) correlazioni di spin in fluidi di elettroni, (iii) stati collettivi di elettroni accoppiati in sistemi semiconduttori a punto quantico.

Tra le principali attività del 2002 e' stato studiato il ruolo delle eccitazioni termiche nelle proprietà di una nuvola mesoscopica di fermioni non interagenti ed e' stato

evidenziato uno stato cristallino composto da coppie elettroniche di singoletto di spin nel gas elettronico due-dimensionale nel regime di alti campi magnetici.

Nel corso del 2002 e' stato avviato un Research Training Network della Comunità Europea coordinato da NEST dal titolo "Collective electronic states in nanostructures" (Settembre 2002-Settembre 2006).

Inoltre sono state organizzate (anche con finanziamenti parziali esterni) le seguenti tre scuole/conferenze:

- 1) "Quantum Phases at the Nanoscale" Erice 15-20 July 2002
- 2) "Mesoscopic physics" Erice 20-31 July 2002
- 3) "Entanglement at the nanoscale" Trieste 28 october 8 november 2002.

E' stato inoltre organizzato uno stage in fisica biomolecolare che si è svolto al centro NEST in settembre 2002.

Il Centro S<sup>3</sup>, di più recente istituzione, pur avendo come obiettivo principale l'avanzamento delle frontiere della conoscenza nel campo delle nanoscienze e nanotecnologie interdisciplinari, rivolge particolare enfasi alla comprensione e al controllo delle proprietà di nanostrutture organiche e inorganiche e di biosistemi mediante la loro interazione con i substrati. S<sup>3</sup> si dedica inoltre a ricerca applicata a tecnologie abilitanti particolarmente nell'ambito delle 'Micro e nano tecnologie' e delle 'Tecnologie dei materiali strutturali e funzionali'.

S<sup>3</sup> affronta questi filoni con un approccio fortemente interdisciplinare, contando su una massa critica importante di ricercatori, tecnici e giovani scienziati e integrando il contributo dei fisici, chimici, biologi e ingegneri che lo compongono. Il Centro può inoltre contare sul contributo congiunto di forti gruppi teorici e sperimentali per lo sviluppo e l'utilizzo dei metodi più innovativi. Ha fortissime interazioni con i principali Centri di ricerca nel campo, soprattutto negli Stati Uniti, in Giappone e in Europa: per le sue ricerche può quindi contare su collaborazioni internazionali tra Centri di Eccellenza, e riesce già oggi ad

attrarre su posizioni post-doc giovani scienziati provenienti da quei Centri.

Le linee di ricerca principali riguardano:

- sistemi (bio)molecolari e cellulari sulle superfici, con particolare enfasi sulla nanoelettronica biomolecolare basata su proteine a trasferimento elettronico, e su nanobiosensori. Nel 2002 i principali risultati hanno riguardato: la funzionalizzazione chimica di superfici e ancoraggio covalente di monostrati molecolari per l'elettronica (bio)molecolare; l'analisi dei primi stadi di interazione tra molecole e substrato con spettroscopie elettroniche ad altissima risoluzione in UHV; l'analisi delle proprietà elettroniche e dei fenomeni di trasferimento di carica in metalloproteine adsorbite su superfici di elettrodi con tecniche scanning probe ed elettrochimiche; l'applicazione di queste tecniche alla realizzazione di nanodispositivi elettronici ibridi, la simulazione teorica delle proprietà elettroniche e di trasporto di nanobiosistemi, studio degli effetti delle interazioni intermolecolari sulle proprietà ottiche e di trasporto di sistemi organici.
- nanostrutture magnetiche e magneti molecolari, con particolare enfasi per la comprensione e il controllo delle proprietà magnetiche di array di nanoparticelle in funzione della loro dimensionalità e taglia. I risultati principali raggiunti nel 2002 riguardano: lo studio del comportamento classico e quantistico di magneti molecolari; la fabbricazione e analisi dettagliata della struttura e delle proprietà di nuovi film magnetici ultrasottili e lo studio teorico degli effetti di correlazione sulle eccitazioni.
- sistemi nanostrutturati a semiconduttore: fabbricazione e analisi di nanostrutture mediante fasci ionici ed elettronici, con particolare enfasi alla realizzazione di nuove classi di nanostrutture sepolte e la microscopia ad altissima risoluzione applicata alle interfacce. Nel 2002 si sono sviluppate: nanostrutturazione per impiantazione ionica; microscopia elettronica a alta risoluzione per lo studio di interfacce; studio teorico degli stati elettronici e dei fenomeni di correlazione su scala nanometrica; studio di fenomeni

coerenti e computazione quantistica in nanostrutture a semiconduttore.

L'attività svolta da S<sup>3</sup> nel 2002 presso Large facilities (sia sincrotroniche che neutroniche) ha compreso tra l'altro i seguenti esperimenti:

(1) "circular and linear magnetic dichroism (XMCD and XLCD) experiment on Fe layers epitaxially grown on NiO(001) film pre-deposited on Ag(001) substrate: part I. Beamline CIPO – ELETTRA", Trieste, Febbraio 2002 (2) "circular and linear magnetic dichroism (XMCD and XLCD) experiment on Fe layers epitaxially grown on NiO(001) film pre-deposited on Ag(001) substrate: part II. Beamline CIPO – ELETTRA", Trieste, Aprile 2002 (3a) "experiment on structure and magnetism of FeMn Intermetallics; (3b) experiment on magnetic structure of Er-Pr alloys; (3c) experiment on Spin glass behaviour in YCoSn intermetallics. ISIS Pulsed Neutron Source, UK", Agosto 2002; (4) "circular and linear magnetic dichroism (XMCD and XLCD) experiment on Fe layers epitaxially grown on NiO(001) film pre-deposited on Ag(001) substrate: part III. Beamline CIPO – ELETTRA", Trieste, Settembre-Ottobre 2002; (5) "XAFS experiment on the Mg K edge on capped MgO films prepared on Ag(001), part II. Beamline: SA32 – Super ACO" Lure, Paris, Settembre-Ottobre 2002; (6) "XAFS experiment on in situ prepared MgO/Ag(001) interface", Daresbury, Ottobre 2002; (7) "dichroism experiment on Fe layers epitaxially grown on MgO(001) film pre-deposited on Ag(001) substrate. Beamline: SB7 -Super ACO, Lure" Paris, Novembre-Dicembre 2002; (8) "experiment on magnetic excitations in GdSiGe compounds. IPNS Pulsed Neutron Source", Chicago, USA, Dicembre 2002.

Nel campo delle attività industriali di S<sup>3</sup> vanno citati:

- Dispositivo intensificatore di immagini a raggi X per applicazioni biomedicali (contratto di ricerca industriale con Thales Electron Devices s.a., annuale, 76.700euro). Progettazione e costruzione di un sistema di crescita di materiali fotoemissivi multialcalini con possibilità di misurare

- in situ parametri opto-elettronici del materiale, quali l'efficienza quantica e il coefficiente di assorbimento.
- Progetto di ricerca applicata AJAX: "Multistrati attivi per intensificatori di immagini a raggi X" (finanziato dal network applicativo dell'INFM, 35.800 euro): studio di materiali fotoemissivi basati sul tellurio, con particolare attenzione alla possibilità di passivare tali materiali allo scopo di prolungarne la vita operativa. Attività 2002: allestimento dell'apparecchiatura per la deposizione dei fotocatodi al tellurio, preparazione dei primi campioni.

Nel campo delle nanotecnologie e dei materiali avanzati rientra anche il Centro DEMOCRITOS di Trieste, seppure a carattere più teorico, il quale si propone non solo di espandere le attuali attività legate alla biofisica molecolare computazionale e alle nuove aree della scienza dei materiali, ma anche di realizzare un laboratorio virtuale distribuito, per ottimizzare l'uso delle risorse computazionali già disponibili così come delle sinergie che il Centro stesso sta creando. Ciò sarà reso possibile dalla forte collaborazione e dal supporto della SISSA e del CINECA.

Le attività del Centro, iniziate ufficialmente nella seconda metà del 2002, sono state svolte secondo quanto previsto dal programma scientifico del centro.

E' stato realizzato il pacchetto software PWSCF - Plane-Wave Self-Consistent Field, la distribuzione del quale è disponibile in rete sulla pagina Web [www.pwscf.org](http://www.pwscf.org). E' in corso di pubblicazione l'ultima distribuzione, fortemente re-ingegnerizzata, che prevede l'integrazione con altri pacchetti software, nell'ambito di una collaborazione internazionale che coinvolge, fra le altre, l'Università di Princeton.

PWscf è un insieme di programmi per il calcolo della struttura elettronica nell'ambito della teoria funzionale-densità e della teoria di perturbazione del funzionale-densità.

E' stato realizzato il sito Web del Centro, con l'attivazione di alcune mailing-lists, tra le quali ha avuto il maggior successo quella dedicata alla chimica e alle attività fisico-chimiche.

E' stato avviato il progetto "Fare scienza con il computer", un programma di sperimentazione di un laboratorio numerico per gli studenti delle Scuole Medie Superiori che ha avuto un affluenza molto superiore alle aspettative. Nell'ambito del programma sono state avviati rapporti di collaborazione con 2 insegnanti in supporto all'attività.

In collaborazione con la SISSA, sono stati realizzati 2 cluster di PC Linux per il calcolo scientifico ad alte prestazioni e si è contribuito ad installare presso il CINECA il più grande super computer in Italia (IBM SP4 512 processori) di cui SISSA-Democritos è proprietario e cogestore.

Sono stati assunti 1 ricercatore Tenure Track, 1 Tecnico informatico ed è stato avviato il procedimento di assunzione per un Tecnologo.

DEMOCRITOS ambisce a divenire il punto di riferimento nazionale per i fisici, chimici e ricercatori in scienza dei materiali impegnati nella simulazione numerica della materia o interessati a vario titolo alle conoscenze che essa può produrre. La ricerca presso il Centro è improntata ai metodi della scienza fondamentale (basata sulla meccanica quantistica e sulle leggi fondamentali della natura), ma motivata da problemi di rilevante interesse tecnologico (come ad esempio la progettazione di nuovi farmaci o di dispositivi micro- ed opto-elettronici di nuova generazione, la fisica-chimica dei catalizzatori, o lo studio della struttura e della dinamica del mantello terrestre, per fare alcuni esempi). Il Centro è articolato in otto attività di ricerca: *Modellistica atomica per l'ingegneria dei materiali e la chimica applicata, Modellistica del mondo delle nano-scienze, Modellistica molecolare dei sistemi biologici, Fisica e chimica alle alte temperature e pressioni, Fisica e chimica di superfici e interfacce, Modellistica stocastica dei sistemi quantistici a molti-corpi, L'Information Technology per la modellizzazione molecolare e la computazione, Fisica dei materiali piezoelettrici e ferroelettrici.*

Azioni specifiche sono state avviate nel campo della formazione e della divulgazione scientifica di alto livello. Le iniziative di divulgazione già avviate nel corso del 2002 riguardano la

creazione di un bollettino disponibile in rete e la sperimentazione di un laboratorio di simulazione numerica ad uso degli allievi e degli insegnanti dell'ultimo biennio delle scuole medie superiori.

Il terzo Centro creato nel 2001, SMC di ROMA, e il Centro BEC di Trento, di più recente costituzione, si pongono come infrastrutture di ricerca a carattere prevalentemente teorico le cui attività sono principalmente riconducibili all'Asse strategico 1 delle Linee Guida del PNR, pur avendo alcune attività con valenza mission-oriented verso lo sviluppo di tecnologie abilitanti.

SMC si occupa in particolare di teoria dei sistemi complessi, sviluppando metodologie di interesse trasversale che vanno dalla superconduttività alla meccanica statistica.

Nell'anno 2002 le tematiche scientifiche più importanti affrontate dal centro di ricerca e sviluppo SMC sono state:

- 1) Vetri, vetri di spin e problemi connessi.
- 2) Superconduttività ad alta temperatura e altre proprietà elettroniche.
- 3) Caos e turbolenza.
- 4) Reti neurali.
- 5) Aspetti vari della complessità.
- 6) Problemi vari di meccanica statistica.
- 7) Seed activities.

La divisioni in aree è arbitraria: quasi tutti ricercatori lavorano in più di un'area. I risultati scientifici sono stati esposti in circa un centinaio di pubblicazioni stampate o in corso di stampa (tra cui una ventina di Physical Review Letters, due Science e due Nature). È estremamente difficile fare una scelta. Una selezione parzialmente arbitraria dei risultati più significativi ottenuti è la seguente:

- 1) Si è compreso in gran dettaglio il ruolo del paesaggio dell'energia nella dinamica di invecchiamento e nella formazione del Boson peak. Sono stati fatti progressi sostanziali nella comprensione del caos nei vetri di spin, problema studiato con