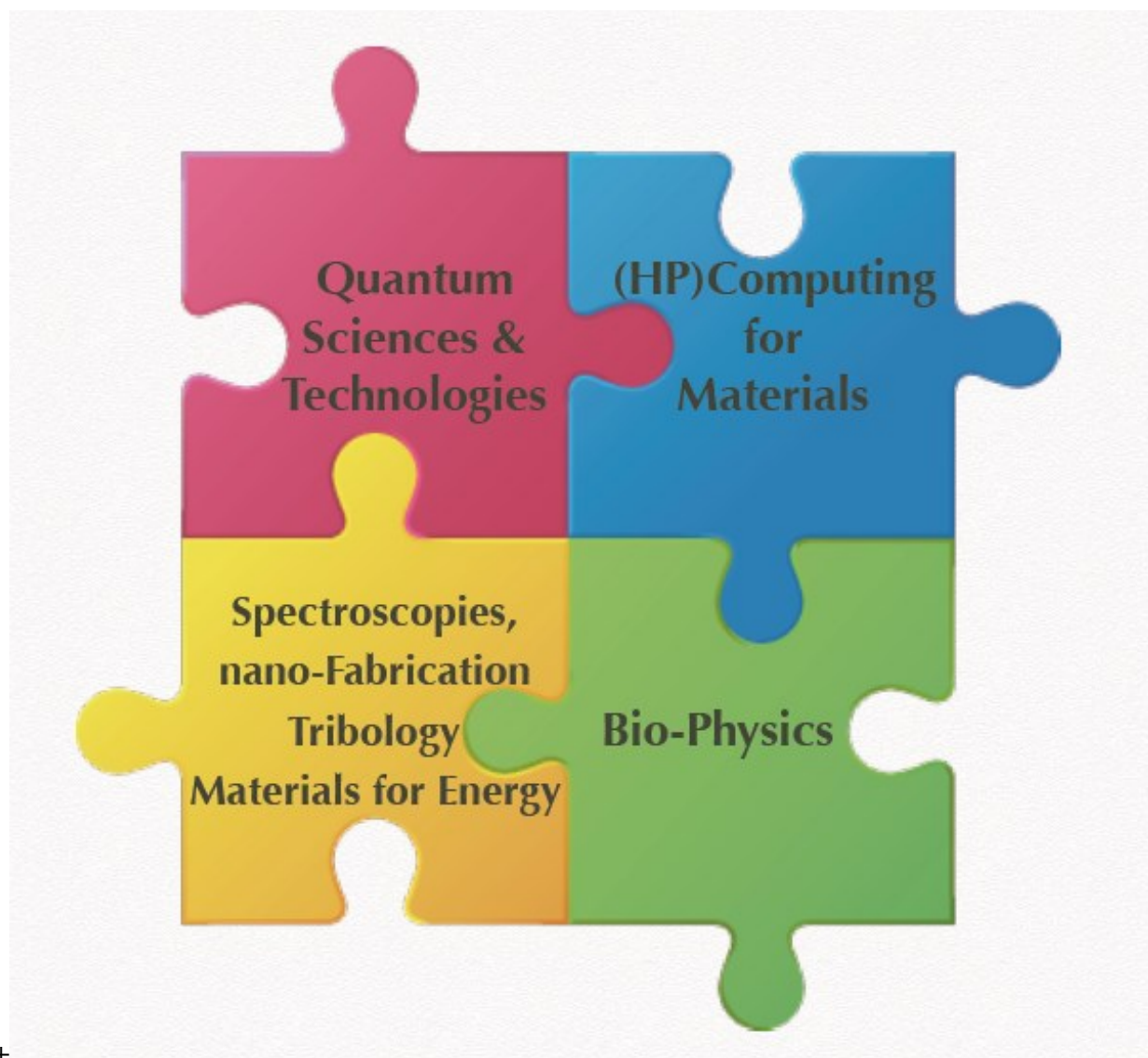


*Piano di sviluppo del Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche.*

**Attività Scientifica dell'area Fisica di UNIMORE.**

*(ambiti, risultati e prospettive di sviluppo)*



## Background.

Modena è un polo di ricerca affermato nella Fisica, caratterizzato in particolare per la **Fisica della Materia**. Il Dipartimento di Fisica dell'Università di Modena e Reggio Emilia si è infatti distinto fin dagli anni '70 per lo studio dei fenomeni fondamentali nella materia e delle proprietà dei **Materiali** di interesse per applicazioni (soprattutto in elettronica), in questo identificando con lungimiranza spazi e opportunità specifiche nel panorama degli atenei della regione e del paese. Lo studio teorico computazionale, e poi l'introduzione di tecniche spettroscopiche di punta negli anni '90, ha rafforzato l'interesse verso **la Fisica delle Superfici e delle Interfacce**, facendo del Dipartimento uno dei centri di riferimento nazionali ed internazionali nel settore. L'evoluzione naturale è stata verso sistemi nanostrutturati, fin dai primi anni 2000: un'esperienza pilota all'interno di UNIMORE e in Regione Emilia Romagna, di rilievo a livello internazionale nel campo delle **Nanoscienze**. Sistemi e fenomeni di scala nanometrica coinvolgono oggetti di natura diversa, da nanostrutture e dispositivi inorganici a molecole organiche o aggregati biologici complessi. Questo ha conferito alle nanoscienze e nanotecnologie un ruolo abilitante per campi che vanno dalle tecnologie per informazione, per l'energia e per l'ambiente, alla medicina oltre che a tutti i campi del manifatturiero che coinvolgono i materiali avanzati e superfici funzionali. Ma negli ultimi anni questi sistemi hanno anche costituito dei laboratori ideali a bassa dimensionalità per rivelare nuovi stati e proprietà della materia, che sono centrali nella fisica e nelle tecnologie emergenti di questo secolo.

Il Dipartimento di Fisica di UNIMORE giocato un ruolo in questo campo sulla scena internazionale, sviluppando **metodi teorici e di (super-) calcolo avanzato; microscopie e tecniche di frontiera per la nano-fabbricazione; la nano-meccanica, la nano-tribologia e la bio-fisica; la fisica delle basse temperature**. Questo sviluppo è stato possibile anche grazie al sostegno della Fondazione CRMo, a progetti Europei e Nazionali, e alla sinergia con l'Istituto di Fisica della Materia poi integrato nel CNR (2006). La forte interazione tra teoria ed esperimenti, la interdisciplinarietà, la collaborazione con enti e grandi infrastrutture, e la forte apertura internazionale sono stati alla base di questo successo.

## Produzione scientifica.

La produzione scientifica negli ultimi 10 anni (2008-2018) è decisamente sopra la media nazionale come testimoniato da diversi indicatori bibliometrici aggregati (v. report FIM 2018). La ricerca scientifica si colloca prevalentemente nell'ambito della fisica della materia teorica (settore FIS03) e sperimentale (settore FIS01) ma copre anche la biofisica (FIS07), la fisica teorica delle interazioni fondamentali (FIS02) e la fisica (sub)nucleare (FIS04).

Il gruppo dei Fisici al FIM è oggi costituito da 4 Professori I fascia, 15 Professori di II fascia, 3 Ricercatori (totale 22).

Numero totale di pubblicazioni: 1036 con una media di 49.3 per docente e un totale di 23965 citazioni. 34 articoli sono al 1% top dell'area (3.3%) con un picco al 5.4% per il settore FIS03.

L'impatto normalizzato (FWCI) è 1.98, da considerarsi ottimo rispetto alla media internazionale. valore VQR (2011-14): media R=0.92

Rispetto ai dati relativi alla Abilitazione Nazionale della Ricerca 2018, risultano:

Ricercatori con abilitazione 2a Fascia ASN 2018: 3 su 3

Associati con abilitazione 1a Fascia ASN 2018: 7 su 15

N. Abilitabili Commissari ASN: 7 (33.3% sul totale)

Per quanto riguarda attrattività di fondi e gestione di progetti regionali, nazionali e internazionali sono registrati per la ricerca di base negli ultimi cinque anni:

PRIN: come coordinatori locali (2) e Nazionali (1)

Horizon 2020 (FET, MSC, Infrastructures): come coordinatori locali (3) + 1 progetto FP7

PON-FESR: partecipazione a 3 progetti (2014-20)

Una decina di progetti di ricerca da enti o fondazioni private.  
Una decina di progetti di Ateneo (FAR).  
Xxx progetti di ricerca in collaborazione con industrie (cfr report della Commissione Terza Missione).

Com'è evidente anche dalla correlazione tra i dati bibliometrici (v. report FIM 2018), i **punti di forza** della ricerca in fisica sono oggi costituiti da collaborazioni scientifiche internazionali e fortemente interdisciplinari (soprattutto con settori di chimica, ingegneria e biologia), con enti di ricerca (CNR, INFN) e con laboratori industriali (Ferrari, Total *cfr anche report Terza Missione*). L'attività scientifica di buona parte dei fisici del FIM è infatti in stretta sinergia con il centro S3 dell'Istituto di Nanoscienze del CNR che ha sede e laboratori nello stesso edificio e la recente incorporazione di fisici teorici delle interazioni fondamentali permetterà di consolidare la collaborazione all'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN). La sinergia col CNR è sviluppata in accordo con standard internazionali consolidati e crescenti (ad es. Francia, Germania, Spagna, UK), secondo i quali Enti di Ricerca e Università si coordinano per raggiungere la massa critica necessaria a competere sulla scena internazionale, sfruttando al meglio le risorse e condividendo infrastrutture per progetti comuni. Da questo punto di vista, l'ottima produzione scientifica è favorita da collaborazioni all'interno di gruppi misti di docenti FIM e ricercatori CNR, dall'utilizzo di strumentazioni gestite anche da CNR-NANO-S3, spesso attraverso progetti scientifici coordinati talvolta da UNIMORE e talvolta dal CNR. In una visione amministrativa e gestionale rigida, questo può dar luogo ad una sottostima dell'attrattività delle risorse effettivamente disponibili per la ricerca. Il finanziamento della ricerca in fisica, mediamente più costosa rispetto ad altre discipline, resta comunque uno dei punti critici: gli investimenti, soprattutto nel campo della ricerca sperimentale, non sono (stati) adeguati alle sfide nel settore.

### **Contesto e obiettivi.**

Gli obiettivi strategici che oggi si prospettano in questo campo a livello internazionale coinvolgono diversi fronti. Sistemi di dimensioni nanoscopiche si comportano intrinsecamente seguendo le leggi della **Meccanica Quantistica**. La possibilità di manipolare uno o pochi oggetti su scala atomica/molecolare è realizzabile in laboratorio e oggi queste conoscenze e tecnologie sono pronte per essere trasferite verso la società, partendo da applicazioni specialistiche ma con impatto crescente e dirompente nel medio e lungo termine (ad es. computazione, sensing e crittografia quantistica). Più in generale, lo studio dei sistemi a bassa dimensionalità e dei nano(bio)sistemi sta rivelando proprietà fondamentali inaspettate, al cuore della ricerca fondamentale e di molte tecnologie future ed emergenti.

Di ampio impatto sono poi le **Nanotecnologie per la Salute e l'Energia, l'Elettronica, la Tribologia e Nanomeccanica** (interfacce e superfici funzionali / per efficienza energetica) su cui i Fisici del Dipartimento FIM sono impegnati con tecniche di punta. Infine, i **Metodi teorico-computazionali**, anche basati sul **calcolo ad alte prestazioni** per lo studio di materiali, si sono rivelati una palestra ideale per fornire soluzioni a problemi complessi (ad es. analisi di *big-data*) di vasto interesse. Il Piano di sviluppo per i fisici del FIM è quindi in gran parte rivolto alle *Key Enabling Technologies* come declinate nei documenti di programmazione scientifica Europea (*H2020* e nel nuovo *Horizon Europe*) e Nazionale (*Piano Nazionale della Ricerca 2015-20* e il nuovo *PNR 2020-25*) e fa riferimento a *Smart Specializations* delle Regione Emilia Romagna. Più specificatamente le Tecnologie abilitanti di maggiore riferimento sono:

#### **Production Technologies:**

- ✓ *Advanced Materials and NanoTechnologies;*
- ✓ *Life Science Technologies.*

#### **Digital Technologies:**

- ✓ *Micro-NanoElectronics;*
- ✓ *Quantum Technologies;*

✓ *High Performance & Bio-inspired Computing*

Su queste basi, il piano di sviluppo dei Fisici del FIM per i prossimi anni può essere rappresentato dalle seguenti linee di ricerca:

- **Scienze e Tecnologie Quantistiche**
- **Nanofabbricazione, spettroscopia e tribologia di materiali funzionali**
- **Metodi di calcolo avanzato per design di materiali**
- **BioFisica**

Su questi temi si concentrerà il contributo dei fisici del FIM per il prossimo Piano di Sviluppo di Ateneo. Accanto alla ricerca di punta nei nostri settori specifici, intendiamo contribuire alle attività di altri settori anticipando e introducendo metodi e tecnologie di frontiera, oggi disponibili solo nei centri di ricerca internazionali più avanzati, progettando congiuntamente nuovi sviluppi e rendendoli possibilmente disponibili ad altri gruppi di ricerca di UNIMORE e al territorio. Questo implica anche un impegno preciso a contribuire alla internazionalizzazione di UNIMORE.

## SCIENZE E TECNOLOGIE QUANTISTICHE.

**Concetti base.** La Meccanica Quantistica è una delle più importanti scoperte scientifiche del secolo scorso descrivendo i meccanismi dei sistemi su scala nanometrica fino a dimensioni subatomiche e l'accoppiamento tra la materia e la radiazione elettromagnetica e le altre interazioni fondamentali. Le Scienze Quantistiche coinvolgono diversi ambiti della ricerca, dalla Fisica, Chimica, Elettronica, Informatica alla Biologia, e hanno introdotto concetti completamente nuovi nel modo di concepire il nostro conoscere del mondo esterno. Impatto sulla società è già stato enorme a partire seconda metà del XX secolo, basti pensare che transistor a semiconduttori (quindi i computer e tutti i dispositivi elettronici attuali) e i laser, ma anche tutte le tecniche di fisica degli acceleratori, microscopie e risonanza magnetica oggi largamente utilizzate anche in medicina e scienza dei materiali, sono il frutto diretto di queste scoperte scientifiche.

Ricerche in campi diversi delle Scienze Quantistiche hanno visto, negli ultimi decenni, un larghissimo e rapidissimo sviluppo su scala mondiale sia per la portata concettuale dei loro metodi, dovuta ad una comprensione sempre più profonda delle leggi fondamentali sia per il controllo che oggi riusciamo ad ottenere in laboratorio di sistemi quantistici alla scala (sub)nanometrica. Queste conoscenze sono oggi pronte ad essere trasferite alla società con un processo, già iniziato, con applicazioni avanzate in settori nicchia che stanno evolvendo rapidamente verso applicazioni a impatto più ampio.

Il sogno di arrivare ad operare con vere e proprie “macchine quantistiche” in grado di sfruttare appieno le proprietà degli stati quantistici sia microscopici che macroscopici è alla base di quella che si definisce “*seconda rivoluzione quantistica*” che promette di superare l'impatto che la prima ha già avuto sulla società.

Concettualmente gli elementi chiave che caratterizzano le Tecnologie Quantistiche sono:

1. Il controllo della *coerenza* della *correlazione quantistica*;
2. la capacità di realizzare *misure quantistiche* su sistemi “piccoli” e/o intrinsecamente fragili.

Schematicamente, è possibile dividere le attività di ricerca e sviluppo nel campo della ricerca nelle Tecnologie Quantistiche in cinque grandi domini:

La *Computazione Quantistica* è in grado di sviluppare un'enorme potenza di calcolo al di là delle capacità di qualsivoglia computer classico attualmente esistente o concettualmente realizzabile. Un computer quantistico sarebbe in grado, per esempio, di fattorizzare efficientemente grandi numeri, rendendo insicure la maggior parte delle comunicazioni criptate odierne. Oggi grandi aziende come Microsoft, Google, IBM, Intel stanno investendo in tutto il mondo su queste tecnologie rivoluzionarie.

La *Comunicazione Quantistica*, che comprende metodi di “teletrasporto” del singolo stato quantistico, è in grado di fornire soluzione al problema della crittografia digitale. Nella comunicazione quantistica, l'informazione non può essere intercettata, e a tutti gli effetti “scompare” dalla stazione trasmittente per “riapparire” nella stazione ricevente. Agenzie spaziali di tutto il mondo, inclusa ESA, stanno già utilizzando queste tecnologie e interesse in questo settore per applicazioni militari o per le banche è enorme.

Nuove tecnologie vengono sviluppate nell'ambito della *Sensoristica e Metrologia Quantistica*: si spazia dagli orologi atomici di altissima precisione (utilizzabili per esempio nella prossima generazione di satelliti GPS) a sensori in grado di misurare determinate proprietà fisiche (per esempio campi magnetici e gravitazionali) con sensibilità e precisione irraggiungibili con metodi classici. Applicazioni avanzate nel campo della *medicina* e *internet of things* sono in fase avanzata di sviluppo con interesse da parte delle aziende più importanti nel settore (Bosch, Siemens, Thales). Ciascuna di queste aree è fondata sulla *Scienza di Base*. Le scoperte di particelle elementari o i grandi temi sulle interazioni fondamentali della Natura sono tra settori più avanzati della scienza e costituiscono una palestra formativa unica per studenti e giovani ricercatori e per lo sviluppo di idee e tecnologie rivoluzionarie (basti pensare, ad esempio, che il *World Wide Web* è nato al CERN). Forse nessun'altra tecnologia futura è così fortemente condizionata dallo sviluppo della conoscenza

dei fenomeni fisici di base. Ad esempio, negli ultimi decenni lo studio delle teorie quantistiche di campo e di stringa—che sono gli strumenti di base per la descrizione delle interazioni fondamentali—ha avuto uno sviluppo considerevole. Ciò ha permesso di ottenere risultati sorprendenti per svariati modelli fisici fortemente accoppiati, utilizzabili in diversi ambiti della fisica, dalla fisica nucleare fino ad aspetti di materia condensata quali la superconduttività. D'altra, la struttura elettronica di materiali di recente sviluppo, quali il grafene, hanno mostrato interessanti proprietà topologiche, descrivibili tramite particolari teorie quantistiche di campo.

È anche interessante notare che il mercato futuro per *tecnologie abilitanti* nel settore (ad esempio sistemi criogenici e superconduttori, sistemi laser, rivelatori singole sorgenti di fotoni, elettronica ad alta frequenza, tecnologie di nanofabbricazione e algoritmi, protocolli e software quantistico) è di vasta portata ed ha un impatto immediato per lo sviluppo delle carriere dei giovani poiché esiste già una richiesta di queste professioni. Le proiezioni per l'occupazione prevedono infatti già per il 2020 un impatto considerevole delle QT nei paesi più avanzati, con una crescita costante nel tempo.

### **Ambito progettuale di riferimento.**

L'Europa è attualmente in prima linea per quello che riguarda la ricerca in questo settore in rapido sviluppo. Infatti, le Tecnologie Quantistiche hanno rappresentato il cuore di Iniziative Proattive della Commissione Europea negli ultimi programmi quadro per la ricerca, e sono ulteriormente rafforzate in Horizon2020 e Horizon Europe.

L'Italia ha una tradizione consolidata e una presenza costante in questi programmi europei, ciò ha permesso la crescita di una delle più grandi comunità attive sulle Tecnologie Quantistiche in Europa, comprendente più di 60 gruppi, con più di 20 Università attive e diversi centri CNR. L'Italia, inoltre, è stata la prima Nazione Europea ad implementare una rete nazionale per la comunicazione sicura, l'infrastruttura "Quantum Backbone", che collega Torino con la Sicilia passando per la Regione Emilia Romagna. Intel e INRIM stanno già collaborando al progetto.

Nel 2018 la Commissione Europea ha lanciato la **FET Flagship in Quantum Technologies**<sup>1</sup> (nell'ambito del Programma Quadro di ricerca Horizon 2020), un programma di ricerca decennale, con un investimento complessivo di un miliardo di euro da reperire attraverso uno sforzo comune fra EU, Stati Membri e, possibilmente, partner industriali o altri soggetti economici. Altre iniziative e investimenti paralleli sono stati avviati su programmi che riguardano *Space*, *Quantum Cryptography* ed *esperimenti per rivelazione di particelle elementari*.

Per quanto riguarda la ricerca su aspetti di fisica teorica delle interazioni fondamentali, il quadro nazionale di riferimento è quello dei Progetti di Fisica Teorica della Commissione Scientifica Nazionale 4 dell'INFN, ed in particolare, l'iniziativa scientifica denominata GAST (Gauge Theories and Strings). Altri programmi che riguardano la formazione dei giovani e la diffusione delle conoscenze delle scienze e tecnologie quantistiche di base verso discipline affini di elettronica e informatica sono in atto a livello europeo e nazionale assieme ad un piano di diffusione e sensibilizzazione verso le aziende e la società più in generale.

### **Presenza al FIM.**

Ricercatori a UNIMORE sono presenti nel campo delle Scienze e Tecnologie Quantistiche con risultati scientifici, progetti e collaborazioni internazionali ottenuti negli ultimi 15 anni che costituiscono un punto di riferimento in Regione e a livello InterNazionale.

Le attività sperimentali di spicco del FIM fanno riferimento da una parte al Laboratorio di Basse Temperature, dove sono effettuate misure che consentono una risoluzione necessaria a risolvere livelli quantistici di nanomagnetismi e di dispositivi elettronici a singolo elettrone e al gruppo di microscopia elettronica che sviluppa metodi per il controllo di fasci elettronici con stati quantici ben definiti. Per entrambi le sfide attuali sono relative alla implementazione di esperimenti con risoluzione temporale elevata (ad es. stimoli impulsati e letture rapide).

---

<sup>1</sup><http://ec.europa.eu/research/participants/portal/desktop/en/opportunities/h2020/topics/fetflag-03-2018.html>

Dal punto di vista teorico-computazionale, una delle sfide per la implementazione di tecnologie quantistiche integrabili consiste nella identificazione e nella descrizione di eccitazioni a lunga vita media o topologicamente protette per la implementazione di qu-bit nei solidi, e della loro dinamica quantistica. Coerentemente con la tradizione metodologica della fisica teorica modenese, l'obiettivo della ricerca riguarda lo sviluppo sia di modelli concettuali che di metodi computazionali in grado di simulare specifici nano-dispositivi e predirne le prestazioni, permettendo un diretto confronto con le caratteristiche che emergono dagli esperimenti. Questo approccio favorisce lo sviluppo di collaborazioni teorico-sperimentali a livello nazionale e internazionale.

La didattica è di livello elevato con corsi di base nelle lauree di Fisica e Chimica e caratterizzante per la Laurea Magistrale in Inglese in Physics e nel corso di dottorato di Physics and Nanosciences attraverso anche un tutoraggio a carattere internazionale il cui livello è testimoniato, ad esempio, dalle pubblicazioni dei nostri dottorandi.

Le ricerche di punta presenti al FIM-UNIMORE sono su questi settori:

- **Spintronica Quantistica** (Prof. M. Affronte):
  - Temi: magnetismo molecolare, superconduttività, quantum dot a semiconduttore
  - Tecnologie di punta: sensori a singola molecola/ singola particella.
  - Tecnologie avanzate disponibili: criogenia (due sistemi criomagnetici e un liquefattore di elio);
  - risonanza magnetica alle microonde con strumentazione avanzata (generatori di microonde a forma arbitrarie, analizzatore vettoriale 26Ghz).
  - elettrometri per nanoelettronica
- **Microscopia elettronica quantistica** (Prof. S. Frabboni):
  - Generazione di fasci elettronici controllati "sintonizzati" sulla misura mediante olografia sintetica: fasci con momento angolare orbitale, fasci di Bessel;
- **o Progettazione e realizzazione di sistemi di rivelazione innovativi basati sulla realizzazione di piatti di fase**  
**Modellizzazione e simulazione di sistemi e dispositivi a stato solido per tecnologie quantistiche** (Guido Goldoni, Paolo Bordone)
  - trasporto quantistico e correlazioni quantistiche di carica in nanodispositivi a semiconduttore
  - Fenomeni di decoerenza in sistemi di qubit soggetti a rumore ambientale.
  - Dinamica di interferometri elettronici basati su stati di edge
  - Quantum walk su grafi 2D di particelle interagenti in presenza di rumore ambientale
  - Studio di dispositivi basati sul trasporto di eccitoni
  - Dinamica eccitonica in sistemi aperti, potenziali disordinati e tempo-dipendenti
- **Teoria Quantistica dei Campi e delle Stringhe** (Prof. O. Corradini, D. Trancanelli)
  - Aspetti teorici ed applicativi delle teorie di campo di gauge, delle teorie di stringa e della relatività generale
- **Fisica Sperimentale delle Interazioni Fondamentali** (Prof. A. Bizzi)
  - Asimmetria materia-antimateria e misure di precisione in fisica delle particelle

## METODI DI CALCOLO AVANZATO PER IL DESIGN DI MATERIALI

### Concetti base e definizione del contesto.

I materiali sono fondamentali nella scienza e nella tecnologia: consentono di migliorare la competitività industriale e, soprattutto, di affrontare le sfide cruciali per la nostra società, che riguardano energia e ambiente, medicina e salute, informatica e comunicazioni, sicurezza e trasporti. La fisica computazionale dei materiali sta sempre più emergendo come lo strumento maggiormente efficace ed utilizzato nella ricerca di materiali innovativi con proprietà e performance ottimali e/o desiderate. Al tempo stesso essa è sempre più centrale per la comprensione dei fenomeni fondamentali della materia, da quelli dovuti alle interazioni a molti corpi a quelli topologici, che sono al cuore di alcune tra le principali scoperte di questo secolo.

Le **simulazioni basate sulla fisica quantistica**, in particolare, costituiscono uno strumento essenziale per favorire il progresso scientifico e tecnologico. Possono essere condotte su scala atomistica senza la necessità di alcun parametro empirico di input, quindi con capacità predittiva. Per questo sono in grado di snellire, accelerare, supportare o addirittura sostituire gli esperimenti, aprendo la strada a contributi assai rilevanti alla ricerca e l'innovazione anche in ambito industriale. La combinazione con **tecniche di simulazione multiscala** consente di affrontare problemi e proprietà di complessità ancora maggiore fino alla simulazione di interi (nano)dispositivi e sistemi. Questi schemi sono oggi sempre più utilizzati in sinergia, e associati con approcci automatizzati di **high-throughput screening** e **data analytics**.

L'enorme sviluppo delle tecnologie del supercalcolo e dei dati sta consentendo a questo settore uno sviluppo impetuoso, sia nelle applicazioni e nell'interazione con gli esperimenti, sia nello sviluppo di metodologie innovative in termini di **metodi, algoritmi e codici**, che sono sempre più valorizzati in quanto tali e costituiscono un ambito di ricerca fortemente interdisciplinare.

### Ambito progettuale di riferimento.

- In EUROPA, l'ambito tradizionale in H2020 è quello dei Work Program sulle tecnologie industriali, LEIT (Leadership in Enabling and Industrial Technologies) e in particolare quello relativo alle nanotecnologie e materiali, NMBP (Nanotechnologies, Advanced Materials, Biotechnology, and Advanced Manufacturing and Processing). Qui da alcuni anni il modeling è richiesto come componente importante della maggioranza dei bandi, viene supportato il modeling di interesse industriale insieme con forme di coordinamento quali lo European Materials Modeling Council. La trasversalità del campo dei materiali apre spazi anche in altri ambiti LEIT e societal challenges. Un contesto simile è previsto, in altre forme, anche nel prossimo programma quadro Horizon Europe.

Per progetti con prospettive tecnologiche più a lungo termine, l'ambito più appropriato rimane quello dei FET (Future and Enabling Technologies) che resterà importante anche all'interno del nuovo European Innovation Council.

Uno sviluppo importante per gli studi computazionali è legato alla nuova strategia EuroHPC, che punta a portare l'Europa al vertice dell'high-performance computing (HPC) con un investimento di oltre 1.4 miliardi di Euro entro il 2027 e un progetto ambizioso per infrastrutture e applicazioni: supercalcolatori, ricerca, codici. Oltre a garantire risorse di calcolo di punta, accessibili su base competitiva, questo programma valorizza i codici, e le attività di ricerca coinvolte nel loro sviluppo e utilizzo di frontiera. In questo contesto le applicazioni nel dominio dei materiali sono centrali, essendo affermata la loro eccellenza su scala globale in



termini di performance e bacino di utilizzo, e riconosciuto il loro impatto nel co-design di future tecnologie europee. EuroHPC può quindi offrire opportunità per supportare lo sviluppo di casi d'uso e applicazioni nel campo.

L' ITALIA partecipa in modo convinto alla strategia EuroHPC, con investimenti già assicurati per 150milioni di Euro nel 2018-19 (120MEuro MIUR+30MEuro MISE), che saranno raddoppiati dal cofinanziamento europeo nella EuroHPC Joint Undertaking, e un impegno a lungo termine sia per l'hosting di un supercalcolatore pre-exascale presso il CINECA, sia per il cofinanziamento di azioni di ricerca e innovazione. Uno dei capitoli del nuovo PNR (piano nazionale della ricerca), in corso di definizione, è dedicato allo sviluppo di questo campo nel paese.

In REGIONE Emilia Romagna, la centralità del supercalcolo e della tematica relativa a *Big data* è attestata dalla costituzione di una Associazione Big Data che coinvolge tutte le Uni e Enti di Ricerca presenti sul territorio, e dai rilevanti investimenti già deliberati: di tipo infrastrutturale (nell'ambito dei fondi strutturali FESR: 4+3 Milioni di Euro) e anche in capitale umano (su fondi FSE fondo sociale europeo). In entrambi i casi è ben rappresentata la tematica Materiali. Ulteriori opportunità in ambito regionale sono attese anche nell'ambito più generale della S3 (Smart Specialization Strategy), specialmente per modeling di sistemi e processi di diretto interesse industriale.

### **Presenza al FIM.**

Modena ha acquisito una considerevole leadership nel campo delle simulazioni dei materiali, grazie ad una politica di investimenti a lungo termine intrapresa da parte della comunità locale dei fisici teorici della materia condensata, il cui inizio risale ad alcune decine di anni fa.

Tra i punti di forza e unicità vale la pena ricordare la stretta connessione con gli sperimentali, sia locali che presso altri laboratori internazionali, e le forti collaborazioni interdisciplinari. A queste si aggiungono alcune rilevanti collaborazioni industriali specialmente per lo studio computazionale di materiali per applicazioni tribologiche. Va notato che questa linea è già ben coordinata con le altre tre aree di sviluppo in ambito fisico, e si propone una forte interazione anche con le ricerche in ambito matematico e informatico.

Un punto su cui fare leva è inoltre la stretta connessione delle attività di sviluppo e applicazione di codici quantistici del FIM con le iniziative del CNR, in particolare il Centro di Eccellenza Europeo MaX – Materials design at the exascale, e del CINECA. In questo contesto, Modena è riconosciuta come polo principale in Regione dove si fa ricerca computazionale applicata ai materiali.

L'attività in questo campo ha potuto contare sull'accesso al calcolo scientifico locale, disponibile anche grazie alla collaborazione con il CNR, che si auspica sia potenziato in futuro. Ha inoltre beneficiato dell'accesso al supercalcolo presso il Cineca tramite progetti competitivi nazionali ed europei.

L'attività a Modena è attestata da risultati scientifici, progetti e collaborazioni nazionali/internazionali. Questo contesto collaborativo e progettuale ci consente di essere ben posizionati per i nuovi bandi in ambito Horizon Europe e EuroHPC.

Ricerche di punta in questo contesto sono presenti a FIM-UNIMORE nei seguenti settori specifici:

- **Proprietà di trasporto di carica** (Prof. R. Brunetti):
  - Conduzione elettrica in materiali a cambiamento di fase per memorie innovative e memresistori.
- **Simulazioni multiscala classiche e quantistiche** (Prof. R. Magri, A. Franchini):
  - Sviluppo modelli e codici per la descrizione teorica e l'interpretazione dei risultati sperimentali di caratterizzazione e spettroscopia dei materiali per applicazioni ICT ed energia pulita.
  - Studio *ab-initio* degli effetti sulle proprietà strutturali, elettroniche e risposta lineare di difetti e disordine nei materiali.
  - Sviluppo codici per simulazioni multiscala di reazioni di ossido-riduzione in ossidi riducibili e simulazione crescita dei materiali.
  - Reazioni catalitiche (applicazioni a fuel-cells)
- **Sviluppo e applicazione di metodi per lo studio *ab initio* e multiscala di materiali** (Prof. M. C. Righi, M. Ferrario):
  - Sviluppo di protocolli computazionali per descrivere materiali e processi su diverse scale. I metodi utilizzati includono calcoli *ab initio*, dinamica molecolare (classica e *ab initio*), simulazioni di eventi rari, e simulazione della risposta dei materiali a sollecitazioni meccaniche.
  - Screening high throughput di materiali per applicazioni tecnologiche e per il risparmio energetico, ad esempio lubrificanti per ridurre l'attrito.
- **Concettualizzazione e design di nanostrutture per applicazioni opto-elettroniche e spintroniche** (Prof. G. Goldoni):
  - Eccitazioni in nanostrutture radiali a drogaggio remoto
  - Proprietà di spin in nanowire eterostrutturati a forte accoppiamento spin-orbita per l'implementazione di stati di Majorana.
- **Studio *ab initio* di stati eccitati in (nano-)materiali** (Prof. A. Ruini, E. Molinari):
  - Studio di proprietà elettroniche, ottiche, strutturali, plasmoniche e vibrazionali con metodi teorico-computazionali avanzati; teoria e simulazione delle relative spettroscopie nella prospettiva del materials design.
  - Principali materiali di interesse: sistemi a bassa dimensionalità (es. grafene e derivati), ibridi e/o nanostrutturati; principali applicazioni: energy conversion e ICT, in particolare dispositivi nano e quantistici.
- **Metodi e applicazioni per lo studio quantistico dei materiali** (Prof. E. Molinari):
  - Sviluppo di metodi e protocolli computazionali da principi primi per descrivere materiali e processi, tenendo conto di interazioni a molti corpi a vari livelli di approssimazione. L'obiettivo principale è rendere possibile lo studio dei fenomeni fondamentali e delle interazioni a molti corpi in nanosistemi e la dinamica dei loro stati eccitati.
  - Approcci convergenti High Performance e High Throughput Computing (HPC, HTC) e di High-Performance Data Analytics (HPDA) per lo screening di materiali.

## NANOFABBRICAZIONE, SPETTROSCOPIA E TRIBOLOGIA DI MATERIALI FUNZIONALI

### Concetti base e definizione del contesto.

La possibilità di affrontare le sfide cruciali per nostra società (sviluppo sostenibile, salute, ICT etc.) richiede la capacità di immaginare e realizzare materiali avanzati con proprietà innovative, controllandone composizione, struttura e morfologia alla micro e nanoscala. Da questo punto di vista, nanoscienze e nanotecnologie rappresentano nel loro complesso una delle più importanti *key enabling technologies* per l'avanzamento dello sviluppo scientifico e tecnologico del prossimo futuro. Parallelamente allo sviluppo di tecniche di nanofabbricazione sempre più sofisticate, la progettazione e realizzazione di materiali funzionali necessitano di tecniche sperimentali di indagini avanzate, in grado di determinare con precisione le proprietà della materia alla nanoscala. La sinergia fra sviluppi sperimentali e metodi di simulazione sempre più potenti e avanzati rappresenta inoltre un altro aspetto essenziale per l'avanzamento di questo ambito di ricerca. Negli ultimi decenni, questa sinergia ha permesso sia di studiare e comprendere nuovi stati della materia, con proprietà fisiche inaspettate, sia di sviluppare dispositivi e applicazioni originali. Classi di materiali a bassa dimensionalità con proprietà innovative sono, per esempio, i materiali a singolo strato atomico (grafene MoS<sub>2</sub>, etc) e i sistemi ibridi organico-inorganico. La combinazione di nano-sistemi diversi apre infatti un mondo nuovo da esplorare, con proprietà e fenomeni che non sono la semplice somma di quelle dei singoli oggetti, con possibilità per applicazioni completamente nuove. Gli **ambiti applicativi di questi sistemi** spaziano infatti dalle **tematiche energetiche** come **catalisi, fotovoltaico e tribologia** a quelli inerente gli sviluppi **ICT**, come la **nanoelettronica**, la **spin- e opto-elettronica**, la **nanomeccanica** e le **nuove tecnologie quantistiche**.

Le tecniche per la **nanofabbricazione** e crescita di nano-sistemi si basano essenzialmente su due approcci complementari: (i) metodi *top-down* quali le tecniche di litografia ottica e elettronica o mediante fasci ionici focalizzati, che utilizzano l'erosione e la crescita controllata di materiali per ottenere sistemi nanostrutturati a partire da materiali omogenei macroscopicamente; (ii) i metodi *bottom-up*, quali le sintesi fisica e chimica, che sfruttano la naturale tendenza della materia ad auto-organizzarsi per ottenere strutture complesse a partire dai costituenti fondamentali come atomi e molecole. Ciascun approccio presenta punti di forza e limiti, che possono essere superati efficacemente solo sviluppando metodi ibridi, che combinino entrambi. Un'altra sfida fondamentale del prossimo futuro è quella della scalabilità delle metodologie attualmente sviluppate nei laboratori di ricerca, in modo da permetterne un effettivo utilizzo in ambito industriale.

L'impiego di **spettroscopie** e **microscopie** per la progettazione e lo studio di materiali funzionali è strategico nell'ambito del **fotovoltaico** e della **fotocatalisi**, poichè la funzionalizzazione dei dispositivi con materiali nanostrutturati consente di aumentarne l'efficienza e ridurre l'utilizzo di componenti costosi. L'impiego di nanoparticelle plasmoniche (NPP) consente ad esempio di aumentare l'assorbimento della radiazione solare con conseguente aumento dell'intensità di corrente generata nel processo fotovoltaico e si è dimostrata efficace sia nelle celle tradizionali basate sul Si, sia in quelle più recenti basate su film sottili, sulle celle di Grätzel e quelle basate sulle perovskiti. L'accoppiamento di NPP e ossidi riducibili risulta poi molto promettente per quanto riguarda processi fotocatalitici e nello sviluppo di celle a combustibile, grazie anche alla possibilità di estendere il range in energia dei fotocatalizzatori a semiconduttore. Infine, l'introduzione di nanostrutture plasmoniche in ossidi trasparenti conduttivi (TCO) presenta interessanti implicazioni nella generazione di portatori di carica e nella modifica delle proprietà dielettriche dei TCO stessi.

Anche in ambito **ICT**, la corsa verso la miniaturizzazione dei dispositivi ha spinto la ricerca verso lo studio di sistemi intrinsecamente nanoscopici, quali le molecole funzionali. Di particolare interesse in questo campo sono i cosiddetti sistemi ibridi, costituiti dalle combinazioni di nanosistemi organici con peculiari proprietà elettroniche, ottiche o magnetiche, e substrati

inorganici, adatti all'elettronica convenzionale e/o sistemi a bassa dimensionalità, come il grafene. La combinazione di metodi di fabbricazione bottom-up e top-down permette di ottenere sistemi ibridi strutturati alla nanoscala, con proprietà e caratteristiche innovative estremamente promettenti.

La **tribologia** si occupa dello studio delle interfacce solide in presenza di stress meccanici (*load, shear*) e include fenomeni di adesione, attrito, lubrificazione ed usura. La tribologia è una scienza multidisciplinare che coinvolge conoscenze di fisica, chimica, meccanica e scienza dei materiali. L'impatto della tribologia sull'economia e sostenibilità globali è molto significativo. La riduzione dell'attrito ed usura è infatti associata ad un notevole risparmio di energia, materie prime e riduzione delle emissioni di CO<sub>2</sub> grazie al diminuito utilizzo di carburanti. Allo stato attuale, una completa ed esaustiva comprensione dei processi e fenomeni tribologica è ancora mancante. Alla luce di questo, l'attività di ricerca tribologica teorica e sperimentale si sviluppa su due filoni strettamente interconnessi: (i) comprensione a livello fondamentale dei fenomeni e processi tribologici; (ii) ricerca applicata e trasferimento tecnologico, volti al miglioramento delle prestazioni tribologiche di materiali e dispositivi. Le tecnologie attualmente disponibili in questo campo si basano sullo sviluppo di materiali lubrificanti, sia liquidi che solidi (grafite e materiali 2D, importanti anche per applicazioni su scale nanometriche), e di ricoprimenti duri (*diamond-like-carbon -DLC*).

### **Ambito progettuale di riferimento**

L'attività di ricerca di nanofabbricazione si posiziona nell'area dei progetti *ICT* di H2020 per l'elettronica non convenzionale, realizzazione di sistemi nano-strutturati e dispositivi quantici, *dispositivi a bassa potenza* e per *acquisizione di energia, nano-meccanica* e controllo di qualità di materiali e processi sulla nano-scala; *sensoristica avanzata*. Riferimenti a livello nazionale sono Enti (CNR, INFN) e Industrie multinazionali (ST-group; Ferrari) mentre a livello regionale aziende nel settore dell'elettronica avanzata e *tecnologie per la salute* sono potenziali utenti per processi di nano-fabbricazione.

L'attività di ricerca di spettroscopia si posiziona nell'area "*Low Carbon Technologies*" della societal challenge "*Secure, Clean and Efficient Energy*" di Horizon 2020, in particolare, nell'ambito della call "*LC-SC3-RES-1-2019-2020: Developing the next generation of renewable energy technologies*". Con riferimento alle Smart Specialization Strategy dell'Emilia Romagna, la linea è rivolta alla Priorità C "green economy: nuove tecnologie energetiche". Alcuni dei componenti sono già inseriti in tecnopoli regionali, quali EN&TECH, dove svolgono attività mirate allo sviluppo di materiali innovativi per tecnologie energetiche, e hanno fatto parte del progetto PON-FESR "HEGOS" su questa tematica.

Grazie alla rilevanza della linea di ricerca Tribologia per applicazioni industriali, sono diverse le calls di interesse nel Work Program H2020, in particolare nell'ambito LEIT-NMBP *Leadership in enabling and industrial technologies – Nanotechnologies, Advanced Materials, Biotechnology and Advanced Manufacturing and Processing*'. Con riferimento alle Smart Specialization Strategy dell'Emilia Romagna, la linea di ricerca in Tribologia si colloca nell' Ambito B) "Risorse umane per la specializzazione Intelligente". L'utilizzo di simulazioni multi-scala per la determinazione delle proprietà strutturali e funzionali di materiali e ricoprimenti su scala nano-micro-macro, rende questa linea di ricerca del dipartimento rilevante per le value-chains MAMM-ER (Materiali Avanzati per Motoristica e Meccatronica), MoVES (incremento dell'efficienza e riduzioni delle emissioni dei motori, riduzione del peso), FLY.ER (matrici polimeriche nanostrutturate) e FP (riduzione delle azioni dissipative di attrito e dell'usura) del Clust-ER MECH, con possibili ricadute anche su altre value-chains, ad esempio su BioMedTech (materiali in-silico per la protesica) del Clust-Er Health. Il dipartimento FIM partecipa, nella veste del Centro Intermech-MO.RE., al progetto "RIMMEL", finanziato dalla regione Emilia Romagna nell'ambito dell'iniziativa POR-FESR 2018-2020.

## **Presenza al FIM.**

I laboratori del FIM hanno una lunga tradizione e un punto di forza nel campo delle tecniche di indagine microscopiche e spettroscopiche di superfici, film sottili e nanostrutture supportate, che si basa sull'utilizzo e sviluppo di strumentazione avanzata per la spettroscopia ottica ed elettronica e la microscopia a scansione di sonda. Il FIM (in collaborazione con l'Istituto Nano-CNR) è inoltre dotato di diverse *facilities* di nanofabbricazione (FIB, EBL, Litografia ottica) che rappresenta uno dei centri di riferimento in Regione ER e a livello nazionale. I laboratori FIM sono inoltre dotati di numerose apparecchiature per lo studio sperimentale dei processi tribologici, come tribometri e microscopi a forza atomica, che combinati ad analisi spettroscopiche possibili negli stessi laboratori forniscono informazioni dettagliate sui meccanismi fondamentali dell'attrito (lab. SUP&RMAN, Centro Intermech-MO.RE.). L'attività di ricerca computazionale nel settore della lubrificazione e tribochimica è considerata tra le più competitive a livello internazionale grazie all'utilizzo pionieristico di tecniche *ab initio*, basate sulla meccanica quantistica, in grado di descrivere in modo accurato i processi atomistici che governano le performances dei materiali lubrificanti

Agli esperimenti on-campus di spettroscopia si affianca una intensa attività di ricerca presso le *facilities* internazionali di luce di sincrotrone, che si è estesa di recente al free-electron laser FERMI presso Elettra e che ha le sue radici nel contributo dato dai ricercatori e docenti FIM allo sviluppo e alla realizzazione di linee di luce attualmente operative. Tra i punti di forza e unicità di questa attività va segnalata inoltre la stretta connessione con i gruppi teorici, sia locali che presso altri laboratori internazionali, le forti collaborazioni interdisciplinari, e la collaborazione con Istituto Nano S3 del CNR. In particolare, la sinergia con alcuni dei gruppi teorici FIM - testimoniato da numerose pubblicazioni congiunte e progetti comuni - rappresenta un rilevante aspetto dell'attività di spettroscopia. Le attività di simulazione teorica e interpretazione dei dati sperimentali riguardano in particolare le proprietà catalitiche di ossidi riducibili e nanostrutture plasmoniche (Prof. Rita Magri – progetto FAR 2016), gli isolanti eccitonici e gli spettri di eccitazione di sistemi di materiali 2D (Prof. Elisa Molinari, PRIN 2018), le proprietà elettroniche, ottiche e vibrazionali di nanostrutture di grafene e sistemi ibridi (prof. Alice Ruini, prof. Elisa Molinari),

Ricerche di punta in questo contesto sono presenti a FIM-UNIMORE nei seguenti settori specifici:

### **Nanofabbricazione.**

Metodi top-down: Prof. S. Frabboni, M. Affronte

- Litografie ottiche e elettronica (EBL), focused ion beam, e focused electron beam deposition
- Fabbricazione e caratterizzazione di nano-dispositivi ibridi per la (spin/opto)elettronica
- Fabbricazione e caratterizzazione di lenti per olografia elettronica.

Metodi bottom-up: Prof. D'Addato, DeRenzi, Biagi

- Sintesi fisica di nanoparticelle metalliche, di ossidi e coreshell
- Fabbricazione mediante sintesi bottom-up on-surface di nanostrutture ibride e di grafene

**Tribologia.** Prof. M. Ferrario, M.C. Righi, A. Rota, S. Valeri

- Studio teorico-sperimentale di grafene e materiali 2D per applicazioni tribologiche;
- studio teorico-sperimentale di effetti estrinseci (umidità, ambienti aggressivi...) sui fenomeni di attrito;
- realizzazione di singoli strati e multistrati di materiali esfoliabili e di materiali autolubrificanti cresciuti tramite tecniche fit-for-Industry (PVD);
- studio dell'attrito, adesione e bagnabilità nella transizione macro-micro-nano in termini dimensionali (aree di contatto) e morfologici degli oggetti, e dell'intensità delle forze in gioco (dal kN al nN);
- simulazioni di tribochimica basate sulla meccanica quantistica per la messa a punto di additivi lubrificanti e altri materiali per ridurre l'attrito;

- simulazioni multiscala e screening high throughput di interfacce solide;
- scalabilità di strumentazione e metodologie di fabbricazione e caratterizzazione;

### **Spettroscopie e microscopie per la progettazione e lo studio di materiali funzionali**

(Prof. D'Addato, V. De Renzi, R. Biagi S. Valeri, S. Frabboni)

Il campo dei sistemi indagati è molto vasto e riguarda principalmente materiali innovativi di rilevanza per la sostenibilità energetica e l'ICT. Più in dettaglio:

- Film sottili e Nanostrutture plasmoniche di interesse per la fotocatalisi, il fotovoltaico
- Accoppiamento nanostrutture plasmoniche-film sottili di CeO<sub>2</sub> e AZO per studi fondamentali sul trasferimento di energia plasmonica sugli stati elettronici (collaborazione teo FIM: Prof. R. Magri)
- nanostrutture di grafene e ibride per la nanoelettronica (collaborazione teo FIM: Prof. A. Ruini, Prof. E. Molinari)
- materiali per la spintronica molecolare
- Isolanti eccitonici in materiali 2D (collaborazione teo FIM: Prof. E. Molinari)

I principali ambiti di indagine e le relative tecniche spettroscopiche e microscopiche utilizzate e sviluppate presso il FIM riguardano lo studio di:

- Composizione e proprietà elettroniche dei materiali (spettroscopie di fotoemissione UPS, XPS)
- Modi di eccitazione elementari (vibrazionali, plasmonici, eccitonici) dei materiali a bassa dimensionalità (spettroscopia di perdita di energia ad alta risoluzione e risolta in momento HREELS)
- Morfologia e struttura di superfici, film sottili e interfacce ibride (microscopie a stilo STM, AFM)
- Struttura e composizione di nanostrutture, interfacce e film ultrasottili mediante TEM e STEM, con possibilità di accoppiamento di micro-spettroscopia EELS sulla singola nanostruttura.
- Tecniche spettroscopiche e microscopiche presso facilities di luce di sincrotrone e presso FERMI
- Dinamica delle eccitazioni (spettroscopie ottiche risolte in tempo - pump and probe),

## BIOFISICA

**Concetti di base.** La Biofisica è la disciplina che si occupa di utilizzare concetti e strumenti propri della Fisica e della Chimica-Fisica per studiare in modo quantitativo sistemi biologici o di rilevanza biologica. La Biofisica è un settore di ricerca fortemente interdisciplinare dove competenze dalla fisica, matematica, biologia e chimica si intrecciano. Attualmente, i macrosettori in cui si può riassumere la ricerca internazionale in biofisica sono:

- 1) Genomica e biofisica degli acidi nucleici
- 2) Biofisica delle proteine e delle macromolecole
- 3) Biofisica delle membrane biologiche
- 4) Biofisica cellulare e dei sistemi

In tutti i casi la tendenza a livello internazionale è verso un approccio sempre più quantitativo nello studio di tali sistemi utilizzando modellizzazioni matematiche in grado di fornire previsioni sui fenomeni osservabili.

Il rapporto tra Fisica e Biologia alla base della Biofisica è da intendersi in modo simmetrico. Mentre lo studio dei sistemi biologici può beneficiare di un approccio tipico della Fisica, e i sistemi biologici, da parte loro, forniscono continuamente nuovi problemi su cui concentrare l'attenzione anche con nuovi strumenti fisici e matematici.

Negli anni '70 del secolo scorso è stata introdotta la stretta analogia tra la fisica dei cristalli liquidi e la fisica delle membrane biologiche. Ciò ha determinato un notevole stimolo verso lo studio chimico-fisico delle membrane biologiche e dei modelli di membrana correlati utilizzando concetti della meccanica e della termodinamica. L'utilizzo della meccanica statistica per l'analisi dei sistemi biologici ha inoltre subito un notevole impulso da questa analogia. Una ulteriore stretta connessione tra la fisica e la biologia si sviluppò quando ci si accorse che il mondo biologico presenta molti tipi di macro-molecole (ad esempio filamenti citoscheletrici, singole proteine e DNA) il cui studio ha molti aspetti in comune con la fisica dei polimeri. Questa analogia ha stimolato molti studi collegati al comportamento di tali molecole coinvolgendo anche il ripiegamento della cromatina e delle catene amminoacidiche nelle strutture proteiche. Le proteine sono molecole biologiche che svolgono una vasta gamma di funzioni all'interno degli organismi viventi e sono costituite da catene di aminoacidi (catene amminoacidiche) che per dare origine ad una molecola funzionale devono generalmente ripiegarsi (folding) in una struttura tridimensionale specifica. Se il processo di ripiegamento avviene in maniera non corretta (misfolding) la proteina assume una struttura aberrante, non funzionale e spesso tossica. Milioni di persone in tutto il mondo soffrono di malattie causate dal misfolding proteico, come la malattia di Gaucher, il morbo di Alzheimer e il morbo di Parkinson.

### **Ambito progettuale di riferimento.**

La ricerca in Biofisica è supportata a livello internazionale nell'ambito dei progetti che vanno sotto la denominazione "Health", ad esempio *3rd Health Programme in H2020*<sup>2</sup>. Esistono altri canali di finanziamento che si concentrano su approcci fortemente interdisciplinari quali i progetti *Human Frontiers Science Program* (HFSP)<sup>3</sup>. Quest'ultimo Programma, di cui l'Italia è uno dei Partecipanti, copre sia attività di ricerca di frontiera sia la formazione di giovani scienziati all'inizio della loro carriera. A livello nazionale e regionale le attività progettuali in biofisica si intrecciano fortemente con progetti di settore medico che includono ad esempio la ricerca su malattie neuro-degenerative, sul cancro e sulla sclerosi multipla.

---

<sup>2</sup> <https://ec.europa.eu/info/funding-tenders/opportunities/portal/screen/programmes/3hp>

<sup>3</sup> <http://www.hfsp.org/>

## **Presenza al FIM.**

All'interno di FIM UNIMORE sono presenti ricercatori che svolgono un ruolo di riferimento nel contesto nazionale e internazionale supportato da progetti e collaborazioni internazionali. All'interno del corso di Laurea Magistrale in Physics del Dipartimento FIM la Biofisica è presente con un piano di studi che prevede insegnamenti avanzati sulla Chimica-Fisica delle biomolecole, sulla "Biological Physics", in cui viene proposto un approccio quantitativo ai sistemi biologici, e un insegnamento sui metodi sperimentali avanzati della biofisica.

A partire dagli ultimi anni è emerso anche il ruolo determinante che il microambiente meccanico in cui le cellule si trovano può avere sul comportamento cellulare. L'influenza della meccanica della matrice extracellulare sull'evoluzione cellulare comporta notevoli prospettive per la medicina rigenerativa e, allo stesso tempo, alterazioni della meccanica intrinseca di una singola cellula ne alterano le funzioni e possono essere utilizzate come marker di situazioni patologiche: all'interno del FIM una linea di ricerca si occupa dello studio della meccanica cellulare con diverse tecniche sperimentali quali la microscopia a forza atomica e l'aspirazione con micropipette.

Lo studio delle proprietà meccaniche delle membrane biologiche è un'altra attività di ricerca del Dipartimento FIM nell'ambito biofisico. Tali studi consentono di evidenziare l'effetto di molecole esogene sulla termodinamica e meccanica di doppi strati lipidici. Gli effetti indotti sui doppi strati lipidici possono poi ripercuotersi sulla funzionalità delle proteine di membrana rappresentando così un meccanismo indiretto per l'alterazione della loro funzionalità.

Un'ulteriore linea di ricerca portata avanti nel FIM riguarda lo studio del ripiegamento corretto e non delle proteine. Nel laboratorio del professor **Ciro Cecconi** si utilizzano le pinze ottiche per studiare in maniera quantitativa e a livello di singola molecola i processi molecolari che regolano il folding e il misfolding di varie proteine, alcune delle quali legate a gravi malattie umane. Particolare attenzione è rivolta all'individuazione di fattori ambientali quali forza ionica, pH, presenza di farmaci o di altre biomolecole (ad esempio chaperon molecolari), che possono inibire il ripiegamento non corretto di una proteina allo scopo anche di individuare possibili strategie terapeutiche. Questi studi prevedono un'attività sperimentale di manipolazione ottica delle molecole in esame e un'attività teorica di analisi dei dati sperimentali. Quest'attività scientifica è svolta in collaborazione con scienziati italiani e internazionali di grande fama e prestigio.

Dal punto di vista applicativo, la compatibilità biologica di superfici utilizzate per dispositivi medici riveste una notevole importanza. La compatibilità e, in alcuni casi, anche la possibilità di evitare contaminazioni batteriche, possono essere ottenute sia con una nanostrutturazione delle superfici o con una loro modifica chimica. Attività di ricerca in questo senso, in collaborazione con medici e aziende, sono presenti all'interno del Dipartimento FIM.

Le ricerche di punta riguardano i seguenti settori:

- **Meccanica e termodinamica di sistemi biologici** (Prof. A. Alessandrini).
  - o La rilevanza della meccanica della cellula sul suo comportamento e in stati patologici.
  - o Termodinamica e meccanica dei modelli di membrana biologica in interazione con molecole esogene.
- **Pinze ottiche (Optical tweezers)** (Prof. C. Cecconi)
  - o Studio a livello di singola molecola del processo di ripiegamento corretto (folding) e non (misfolding) di proteine e dei fattori ambientali (quali ad esempio farmaci) che possono influire su questi processi.
  - o Studio a livello di singola molecola del meccanismo di azione di chaperone molecolari
- **Biocompatibilità di Superfici (Sergio D'Addato, Alberto Rota, Sergio Valeri)**
  - o Modifica di superfici con materiali nanostrutturati per attività battericida e biocompatibilità.



## PIANO DI SVILUPPO PER LA RICERCA NEL TRIENNIO 2019-2021.

**Obiettivo:** il piano di sviluppo per la ricerca mira al potenziamento delle quattro linee di ricerca individuate come maggiormente promettenti tenuto conto del quadro (inter)nazionale e regionale di riferimento e dei punti di forza del FIM.

### Azioni.

Nella programmazione di azioni future è altresì importante considerare anche i **punti critici** che hanno limitato lo sviluppo delle linee di ricerca dei fisici del FIM negli ultimi anni e che possono essere riassunti come segue:

- turn over negativo al netto dei pensionamenti e assunzioni di giovani ricercatori.
- mancanza di investimenti per strumentazione e infrastrutture con conseguente invecchiamento della strumentazione esistente che influisce in maniera negativa sulle attività sperimentali.
- appesantimento e rigidità delle procedure amministrative burocratiche.

*Questo piano dello sviluppo pone le basi per la presentazione di un progetto articolato da presentare al MIUR o altre agenzie per lo sviluppo delle eccellenze dei Dipartimenti.*

In attesa di bandi specifici, le azioni previste sono:

- Razionalizzazione delle risorse esistenti:
  - Ottimizzazione dell'utilizzo di personale tecnico amministrativo e strutture a supporto della ricerca scientifica. In particolare si ritengono necessari:
  - Sviluppo dell'officina con acquisizione di nuovo personale a tempo pieno e la razionalizzazione degli spazi.
  - Utilizzo di nuovi spazi per attività di interesse diffuso, come ad esempio litografie
  - Almeno una figura all'interno del FIM dedicata alla presentazione e gestione dei progetti di ricerca.
  - Creazione di un Laboratorio Computazionale di Material Design in cui fare convergere le competenze presenti tra i fisici dell'ateneo, coordinandosi per un maggiore impatto in ambito locale e internazionale. Interazioni strutturate con altri gruppi di ricerca potenzialmente interessati a una prospettiva interdipartimentale.
  - Azioni volte a sostenere la collaborazione tra gruppi all'interno di UNIMORE in modo da favorire sinergie (ad es. teorico-sperimentale; interdisciplinari etc.) utili ad aumentare la produttività scientifica e alla presentazione di progetti).
  - Maggiore integrazione tra le attività teoriche e sperimentali.
  - Acquisizione di nuova strumentazione di punta, la manutenzione della strumentazione esistente e l'utilizzo di strumentazione condivisa, anche in sintonia con CIGS e altri ricercatori di Ateneo.
  - Sostegno alla mobilità e alle collaborazioni internazionali.
- Attrazione di fondi per la ricerca.
  - Presentazione di progetti *fund rising*: a livello Europeo, in ambito *Horizon Europe*, progetti di tipo *FET*, partecipazione a *Flagship* e progetti collaborativi o individuali (*ERC*). In ambito nazionale progetti *Prin etc.* ma anche progetti supportati da *MISE* o *MAE*. Partecipazione a bandi regionali.
  - Utilizzo di fondi di Ateneo, da Fondazioni o dalla Regione per cofinanziamento di progetti già valutati positivamente e approvati su bandi competitivi.
- Acquisizione di nuove risorse umane e valorizzazione delle esistenti
  - Assunzione di giovani ricercatori con dimostrata esperienza e potenzialità di sviluppo di tecniche sperimentali e teorico-computazionali innovative, attrattività verso aziende o con collaborazioni internazionali utili per la progettualità nelle

quattro macro-aeree sopra descritte. Attrazione di ricercatori di rinomata fama e con *funding ID* di rilievo, anche utilizzando iniziative ministeriali/europee per il rientro dei cervelli.

### **Indicatori per la verifica degli obiettivi.**

- aumento della produttività scientifica: N. di prodotti della ricerca (pubblicazioni) e qualità delle pubblicazioni secondo indicatori nazionali (VQR, ASN).
- aumento dei fondi esterni per la ricerca di base e applicata.
- assunzione di personale docente e ricercatore. Considerato che il volume delle attività di ricerca svolte dai fisici del FIM è aumentato negli ultimi dieci anni anche con l'apertura di nuove linee di ricerca, un indicatore di riferimento è quello del numero di ricercatori e docenti almeno pari al numero (28) di unità di personale accademico dedicato alla ricerca nel 2009. Obiettivo realistico per il prossimo triennio (2019-21) è integrazione di nuovi ricercatori e docenti tale che N. di nuovi docenti  $\geq$  pensionamenti (entrambi dal 2009).
- riqualificazione di ambienti per la ricerca: officina; laboratorio nano-fabbricazione; uno o più nuovi laboratori attrezzati.

Le attività di ricerca scientifica contribuiranno e caratterizzeranno anche la didattica e la terza missione come segue.

### **Didattica.**

La **Laurea Magistrale in Physics** prevede già corsi avanzati su *Scienze Quantistiche* in lingua inglese rivolti particolarmente alla modellizzazione di materiali, sistemi e fenomeni quantici nonché di interazioni fondamentali e all'utilizzo di tecniche sperimentali avanzate (microscopie, spettroscopie, nano-fabbricazione, misure elettriche e basse temperature) per lo studio di meccanismi quantistici. Questi corsi di insegnamento costituiscono il punto di riferimento per un'offerta formativa di qualità rivolta a studenti della regione ma anche con un forte potenziale attrattivo per studenti da altre sedi nazionali e –considerato che questo è uno dei corsi in lingua inglese offerti dal nostro Ateneo- anche internazionali.

Il piano di sviluppo quindi prevede:

1) azioni di valorizzazione e diffusione delle informazioni sui contenuti delle *Scienze e Tecnologie Quantistiche, ICT, Energia, Salute e Meccanica avanzata* in vista delle nuove sfide del settore e rivolte a incrementare attrattività di studenti in linea con altre iniziative Europee<sup>4</sup>. Ad esempio, la roadmap europea su *quantum technologies* pone come obiettivo esplicito il trasferimento di conoscenze su settori limitrofi con diffusione di conoscenze di base in corsi di laurea diversi e introduzione di tecnologie quantistiche nel mondo produttivo.

2) accordi con altre Università Europee mirati a: i) offrire ai nostri studenti la possibilità di completare la formazione in sedi selezionate, utilizzando anche strumenti già esistenti (Erasmus) e implementandone di nuovi (*double degree, exchange agreements*); ii) attrarre studenti da altre università Europee (azioni mirate verso Paesi Baltici) e selezione da paesi in via di sviluppo.

3) offerta di corsi di alfabetizzazione su scienze e tecnologie quantistiche offerti ad altri corsi di studio di UNIMORE.

### **Dottorato di Ricerca.**

Corso di Dottorato in Physics and Nanosciences offre da tempo percorsi formativi, sia in termini di corsi e seminari, ma anche per quanto riguarda i temi delle tesi, in *Scienze e Tecnologie Quantistiche, ICT, Energia, Salute e Meccanica avanzata*. Tenendo presenti anche le linee guida per il dottorato innovativo, il piano di sviluppo della ricerca contribuisce:

- **Carattere internazionale:** incentivazione e supporto alla mobilità dei dottorandi verso centri di ricerca e facilities internazionali qualificati mediante una consolidata rete di collaborazioni sui temi di ricerca avanzata. Accordi con altre università a partire da tesi in co-tutela su progetti specifici e partecipazione a progetti Europei (H2020-MSCA, COST, Flagship *Graphene* e *QT*) e internazionali.
- **Carattere intersettoriale:** collaborazione con altri Enti di Ricerca su un piano nazionale coinvolgimento di aziende interessate a sviluppo di tecnologie quantistiche avanzate.
- **Carattere interdisciplinare:** il Corso di dottorato in Physics and Nanosciences prevede già la partecipazione di fisici e chimici. Naturale sviluppo è, inizialmente, l'offerta di corsi e seminari per studenti di altri dottorati, in particolare ICT. Coinvolgimento di docenti di materie affini (Elettronica, Telecomunicazioni, Informatica, Matematica) contribuirà a ampliare l'offerta formativa verso le prossime sfide del settore e consentirà di caratterizzare UNIMORE come un polo di riferimento in Regione e a livello nazionale.

In parallelo, le attività di ricerca nel settore della biofisica contribuiranno ad iniziative congiunte con settori legati alle biotecnologie, medicina e salute. In particolare si prevede di proporre e contribuire a azioni congiunte su *Tecnologie per la Salute*.

---

<sup>4</sup> <https://qt.eu/engage/community/workgroups-feedback/>

### **Terza Missione.**

Le iniziative europee a larga scala, *Flagship Graphene* e *Flagship Quantum Technologies*, prevedono azioni di coordinamento per la diffusione delle conoscenze verso la società e le aziende a livello Europeo. Inoltre, aziende nazionali ed internazionali sono sempre più interessate ad avvalersi di metodi computazionali per ottimizzare i processi di produzione di materiali per applicazioni tecnologiche. Il piano di sviluppo prevede quindi:

- azioni di diffusione della cultura Quantum e Material Design verso la società con seminari mirati ad audience specifici (scuole) o generici (incontri con pubblico) di concerto con iniziative parallele a livello Europeo o nazionale.
- Supporto a collaborazioni con aziende interessate ai settori.
- Promozione verso la Regione Emilia Romagna per i) inserimento delle nuove *Key Enabling Technologies (KET)* nel prossimo piano di sviluppo delle *Smart Specializations* ii) divulgazione delle tecniche multiscala per lo studio di materiali e processi strategici per il territorio