

## **Sezione A OBIETTIVI DI RICERCA DEL DIPARTIMENTO-QUADRO A1**

### **Elenco dei settori di ricerca**

#### **SEZIONE DI FISICA**

**Fisica delle alte energie agli acceleratori (SSD: FIS/01)**

**Fisica delle particelle elementari e rivelatori (FPER) (SSD: FIS/01)**

**Fisica astroparticellare delle alte energie (SSD: FIS/01)**

**Didattica della Fisica (SSD: FIS/08)**

**Simulazione di sistemi nanostrutturati e biofisici SSD: FIS/03**

**Gravitazione classica e semiclassica SSD: Fisica Matematica, MAT/07**

**Metodi matematici per la descrizione delle simmetrie in fisica SSD: MAT/07**

**Analisi Numerica SSD: MAT/08**

#### **SEZIONE DI GEORISORSE E TERRITORIO**

**Idraulica fluviale, marittima e costiera (SSD: ICAR/01)**

**Costruzioni Idrauliche, reti idrauliche a pressione e a pelo libero (SSD: ICAR/02)**

**Meccanica delle rocce, Stabilità dei versanti, Geotecnica, Costruzioni di Strade, Ferrovie ed Aeroporti (SSD: GEO/05; ICAR/07; ICAR/04)**

**Geologia Strutturale, Petrologia e Petrografia (SSD: GEO/03; GEO/07)**

**Idrogeologia (SSD: GEO/05)**

**Sismologia Applicata, Sicurezza e Protezione Civile (SSD: GEO/11)**

#### **SEZIONE DI SCIENZE E TECNOLOGIE CHIMICHE**

**Scienza e Tecnologia dei Materiali SSD: ING-IND/22**

**Chimica Inorganica e Metallorganica SSD: CHIM/03**

**Chimica organica sintetica e analitica SSD: CHIM/06**

**INQUINAMENTO E DEPURAZIONE DELL'AMBIENTE – Ingegneria sanitaria ambientale SSD: ICAR/03**

**Catalizzatori e processi catalitici per applicazioni energetiche ed ambientali (SSD: ING-IND/27)**

**Struttura e termodinamica di composti di ioni metallici (SSD: CHIM/07)**

**Biomateriali (SSD: CHIM/07)**

**Fenomeni di trasporto nei processi e nell'ambiente (SSD: ING-IND/25)**

**Strategie Computazionali in Spettroscopia (SSD: CHIM/02)**

### **Obiettivi di ricerca pluriennali del dipartimento in linea con il piano strategico di Ateneo**

In assenza di un preciso piano strategico di Ateneo, nella definizione degli obiettivi strategici del Dipartimento di Chimica Fisica ed Ambiente si è voluto tenere in considerazione tutta l'attività di ricerca svolta presso le tre sezioni che costituiscono il Dipartimento stesso:

- Sezione di Scienze e Tecnologie Chimiche
- Sezione di Fisica e Matematica
- Sezione di Georisorse e Territorio

Segue una sintetica descrizione delle principali linee di ricerca che sono state sviluppate dal Dipartimento nel 2013 e che saranno oggetto di riorganizzazione e sviluppo nei prossimi anni. Una più completa descrizione delle attività viene poi sviluppata all'interno della sezione B del presente modello, laddove vengono elencati i diversi Gruppi di Ricerca operanti in Dipartimento, opportunamente riorganizzati anche alla luce dei risultati della VQR 2004-2010.

#### **LINEE DI RICERCA**

##### **SEZIONE DI FISICA**

###### **Fisica delle alte energie agli acceleratori**

1) Progetto INFN: ATLAS, Esperimento al CERN ([www.atlas.ch](http://www.atlas.ch))  
Studio delle particelle prodotte all'acceleratore LHC del laboratorio CERN di Ginevra, per la scoperta di Nuova Fisica. L'esperimento nel 2012 ha scoperto il bosone di Higgs.  
SSD: FIS/01

###### **Fisica delle particelle elementari e rivelatori (FPER)**

2) Progetto INFN: GMINUS2, Esperimento 989 al Fermilab, Chicago. Misura deviazioni dalla aspettazione teorica del momento magnetico del muone per evidenziare fenomeni di nuova fisica (muon-g-2.fnal.gov). SSD: FIS/01.

3) Progetto INFN CDFII, "Collider Detector at Fermilab", Fermilab, Chicago. L'esperimento ha indagato sulle interazioni fondamentali studiando collisioni tra protoni ed antiprotoni al Tevatron del Fermilab a Chicago. Fino alla partenza dell' LHC al CERN nel 2011 è stato il più potente acceleratore, ed ha contribuito a diverse scoperte fondamentali come la scoperta del quark Top. SSD: FIS/01

4) Progetto INFN CALOCUBE, Sviluppo di calorimetria omogenea ad alta accettazione per esperimenti di Raggi Cosmici nello spazio. L'esperimento vuole realizzare un calorimetro omogeneo ed isotropo con sensibilità 3-D da spedire in orbita terrestre per studiare i raggi cosmici di altissima energia nelle sue componenti di nuclei (Gev-PeV), ed elettroni e positroni (100 GeV-1TeV).

5) Sviluppo rivelatori di radiazioni di interesse ai progetti g-2, CDF, CALOCUBE, CTA e per l'esperimento T105 a Fermilab che ha come obiettivo lo sviluppo di nuove tecniche di calorimetria

### **Fisica astroparticellare delle alte energie**

6) Progetto INFN: MAGIC. Esperimento all'Osservatorio Astrofisico Roque de los Muchachos, La Palma, Canarie, Spagna, (<https://www.magic.mpp.mpg.de/>)

### **Didattica della Fisica**

7) URDF - Unità di Ricerca in Didattica della Fisica

Studio e sperimentazione di percorsi didattici innovativi nel campo dell'educazione scientifica di base e della fisica moderna dalla scuola primaria all'università con particolare riguardo allo sviluppo del pensiero formale in fisica con metodologie di Design Based Research e studio di Learning Progress. Messa a punto di prototipi sperimentali e dispositivi per attività laboratoriali. Studio di modelli di formazione degli insegnanti e sperimentazioni didattiche sulla meccanica quantistica, la superconduttività, l'elettromagnetismo e l'ottica fisica, nonché sull'impiego delle TIC per il superamento dei nodi concettuali nella fisica classica.

### **Simulazione di sistemi nanostrutturati e biofisici**

8) Metodologie e software per la simulazione da principi primi e con modelli meccanico-statistici, con applicazioni a nanostrutture, eterostrutture, modelli di proteine, wetting e adsorbimento. SSD: FIS/03

### **Gravitazione classica e semiclassica**

9) Fondamenti delle moderne teorie della gravitazione (relatività generale e teorie alternative) e di teoria quantistica dei campi in spaziotempi curvi. SSD: Fisica Matematica, MAT-07 (01/A4)

### **Metodi matematici per la descrizione delle simmetrie in fisica**

10) Studio delle equazioni e disequazioni definenti gli spazi delle orbite di gruppi

compatti ed in particolare di gruppi di riflessione utilizzando basi di invarianti polinomiali. SSD: MAT-07

### **Analisi Numerica**

11) Modellistica matematica, algebra lineare numerica, metodi matematici per l'analisi di reti complesse. SSD: MAT/08 ANALISI NUMERICA

## SEZIONE DI GEORISORSE e TERRITORIO

### **Idraulica fluviale, marittima e costiera**

12) Modellazione numerica delle equazioni bidimensionali alle acque basse (De Saint Venant) con tecniche ai volumi finiti. Modelli di trasporto solido fluviale. Modellazione numerica delle equazioni di Boussinesq con tecniche miste volumi finiti – differenze finite e loro applicazione in ambito di difesa costiera. Studio dell'interazione fluvio – marittima attraverso la valutazione dell'idrodinamica di foce e delle dinamiche di trasporto solido. Effetti indotti dal moto ondoso sull'idrodinamica e sul trasporto di sedimenti in ambito lagunare e marittimo. SSD: ICAR/01

### **Costruzioni Idrauliche, reti idrauliche a pressione e a pelo libero**

13) Ottimizzazione dei sistemi acquedottistici. Modellazione numerica e gestione ottimale delle reti di drenaggio urbano. SSD: ICAR/02

### **Meccanica delle rocce e stabilità dei versanti, Geotecnica, Costruzioni di Strade, Ferrovie ed Aeroporti**

14) Caratterizzazione geomeccanica dei materiali rocciosi in rapporto ai fenomeni franosi e alle principali opere di ingegneria civile. Studio a posteriori di grandi frane in roccia dell'arco alpino. SSD : GEO/05

15) Meccanica dei terreni. Modellazione analitica e numerica dei terreni in condizioni statiche, dinamiche, di filtrazione e loro interazione con le opere civili. SSD : ICAR/07

16) Caratterizzazione fisico-meccanica e modellazione costitutiva di materiali per infrastrutture viarie. Meccanica delle pavimentazioni flessibili per sovrastrutture stradali ed aeroportuali. SSD : ICAR/04

### **Geologia Strutturale, Petrologia e Petrografia**

17) Geometria e cinematica delle deformazioni superficiali e profonde della Litosfera. Rapporti tra tettonica, sedimentazione, metamorfismo e magmatismo e ricostruzione degli eventi geodinamici nel tempo e nello spazio. SSD: GEO/03

18) Struttura, composizione, origine e sistematica delle rocce terrestri ed extraterrestri ignee, metamorfiche e sedimentarie. Studio del loro significato petrogenetico e geodinamico, interpretando in chiave termodinamica i processi petrogenetici. SSD: GEO/07

### **Idrogeologia**

19) Studi Idrogeologici e idrochimici degli acquiferi porosi, finalizzati alla definizione di modelli idrogeologici quantitativi per lo sfruttamento sostenibile delle risorse idriche sotterranee e per la ricarica artificiale delle falde. SSD: GEO/05

### **Sismologia Applicata, Sicurezza e Protezione Civile**

20) Sicurezza, protezione e gestione delle emergenze connesse ai rischi naturali e/o tecnologici. SSD: GEO/11

## **SEZIONE DI SCIENZE E TECNOLOGIE CHIMICHE**

### **Scienza e Tecnologia dei Materiali**

21) Sviluppo di materiali ceramici e leganti idraulici, Innovazione in campo metallurgico, Studio e sviluppo di rivestimenti funzionali. SSD: ING-IND/22 - SCIENZA E TECNOLOGIA DEI MATERIALI

### **Chimica Inorganica e Metallorganica**

22) Idrogenazione mediate da complessi di rutenio, Reazioni di coupling C-C promosse da palladio, Studi e applicazione di complessi di oro in catalisi. SSD: CHIM/03 Chimica generale e Inorganica

### **Chimica organica sintetica e analitica**

23) Sintesi innovative e sintesi di nuovi prodotti, Studio di meccanismi di reazione e ottimizzazione delle condizioni sperimentali, Messa a punto di metodologie analitiche basate sulla GC-MS ed HPLC-MS. SSD: CHIM/06- Chimica Organica

## **INQUINAMENTO E DEPURAZIONE DELL'AMBIENTE – Ingegneria sanitaria ambientale**

24) L'attività principale riguarda lo studio di tematiche relative all'inquinamento e la depurazione delle acque e delle matrici collegate. SSD: ICAR/03 - INGEGNERIA SANITARIA – AMBIENTALE

### **Catalizzatori e processi catalitici per applicazioni energetiche ed ambientali**

25) Studio della preparazione, caratterizzazione chimico-fisica e test di catalizzatori per applicazioni nel settore della rimozione di componenti nocivi da gas esausti di impianti fissi e mobili (NO<sub>x</sub>, VOC, particolato) e per la valorizzazione energetica di miscele gassose (combustione catalitica, celle a combustibile, reazione di scambio del gas d'acqua).

### **Struttura e termodinamica di composti di ioni metallici**

26) Si utilizza una combinazione di metodi sperimentali (calorimetria, spettroscopia, potenziometria) e teorici per quantificare: i) le entità delle interazioni tra leganti e

ioni metallici (lantanidi e metalli di transizione di interesse biomedico/ambientale); ii) l'adsorbimento di specie su substrati solidi (attualmente  $TiCl_4$  su superfici di  $MgCl_2$  attivato, basilari nella preparazione di catalizzatori Ziegler Natta, o fluoruro su nanoparticelle di allumina, di importanza ambientale); iii) l'interazione tra farmaci e nanovettori. SSD: CHIM/07

### **Biomateriali**

27) L'attività principale riguarda lo studio di tematiche relative alla sintesi di molecole organiche fotoattivabili.

### **Fenomeni di trasporto nei processi e nell'ambiente**

28) Ingegneria dei prodotti e dei processi: design dei prodotti, design e controllo dei processi. Analisi dei sistemi biologici, modellazione e simulazione. Modellazione del trasporto di specie chimiche nell'ambiente. Analisi numerica e sperimentale di processi di trasferimento di massa, quantità di moto ed energia all'interno di processi ed apparecchiature industriali e nell'ambiente. Le attività di ricerca includono: simulazione/test di processi/apparecchiature industriali (reattori agitati, sistemi per la separazione di particolato e per l'assorbimento di composti inquinati, design di bioreattori, analisi di dispositivi biomedicali) e simulazioni della dispersione di inquinanti nell'ambiente

### **Strategie Computazionali in Spettroscopia**

29) La spettroscopia computazionale è un campo in rapida evoluzione che sta producendo strumenti versatili e sempre più vasti per l'assegnazione degli spettri sperimentali e la loro interpretazione in termini delle proprietà chimico fisiche di base. Linee di ricerca: Analisi di spettri vibrorotazionali di molecole, ioni e radicali di interesse atmosferico e astrofisico mediante calcoli quantomeccanici ab initio di alta qualità. Con l'approssimazione di Born-Oppenheimer, la soluzione dell'equazione elettronica di Schroedinger per coordinate nucleari fisse, fornisce una superficie dell'energia potenziale molecolare da cui ottenere il campo di forza molecolare. Successivamente, mediante la teoria delle perturbazioni del secondo ordine (VPT2) è possibile ottenere tutti i parametri spettroscopici per analizzare gli spettri e tenere conto di eventuali interazioni di Coriolis, Fermi e Darling-Dennison. Applicazioni di metodi Car-Parrinello (ab initio molecular dynamics) per l'analisi di spettri infrarossi e Raman di molecole di interesse biologico in fase solida.

Tra gli obiettivi primari del Dipartimento è da considerare innanzitutto un aumento generale della produttività scientifica, anche se in alcuni settori il livello raggiunto appare già apprezzabile. Per meglio raggiungere questo risultato, si prevede la possibile adozione di meccanismi premiali basati su parametri che tengano conto sia della quantità che della qualità della produzione scientifica rapportata ai settori scientifici di appartenenza.

La collaborazione internazionale di alcuni gruppi di ricerca appare significativa. Obiettivo del Dipartimento sarà quello di omogeneizzare quanto più possibile il livello di

internazionalizzazione dei propri gruppi di ricerca anche attraverso la partecipazione congiunta a progetti di ricerca a tutti i livelli.

Il numero di ricercatori stranieri frequentanti il Dipartimento appare consistente sia grazie alle numerose collaborazioni internazionali in atto sia per la partecipazione di dottorandi stranieri alle Scuole di Dottorato cui il Dipartimento fa riferimento. Si prevede di accrescere la partecipazione sia in termini quantitativi che qualitativi dei nostri gruppi di ricerca alle Scuole di Dottorato di UNIUD anche se queste non sono gestite direttamente dal DCFA.

Un ulteriore aspetto che dovrà essere considerato è il consolidamento e per alcuni gruppi di ricerca l'incremento dei rapporti con il territorio friulano sia per quanto riguarda l'integrazione con le realtà di ricerca esistenti che per quanto riguarda la possibilità di acquisire fondi di ricerca attraverso collaborazioni con le imprese operanti in FVG.

### **I principali obiettivi misurabili di ricerca per l'anno successivo sono i seguenti:**

- Incremento del numero di pubblicazioni e citazioni nei settori bibliometrici. Incremento del numero di proposte progettuali presentate a bandi competitivi
- Incremento della collaborazione fra gruppi di ricerca complementari all'interno del dipartimento

### **Modalità di realizzazione degli obiettivi**

- Al fine di aumentare il numero di pubblicazioni si avvieranno nuove collaborazioni scientifiche, o si intensificheranno le esistenti, con gruppi di ricerca nazionali ed internazionali, in particolare con gli atenei e gli enti (pubblici e privati) in grado di offrire il necessario supporto scientifico e tecnologico (laboratori sperimentali, computazionali, etc.) alle attività di ricerca del DCFA. Per aumentare il numero delle citazioni, si provvederà a sviluppare una rete di contatti con gruppi di ricerca attivi sui temi di interesse del DCFA, al fine di stimolare la reciproca citazione dei lavori scientifici.
- Per l'incremento del numero delle proposte progettuali si porrà particolare attenzione alla individuazione di bandi – a livello regionale, nazionale o internazionale - che possano essere di interesse per le attività svolte all'interno del dipartimento. Ci si propone soprattutto di incentivare e sostenere la partecipazione ai bandi riservati ai giovani ricercatori, creando collaborazioni multidisciplinari all'interno del dipartimento al fine di ottimizzare la probabilità di avere accesso a dette risorse.
- Allo scopo di aumentare la collaborazione fra gruppi di ricerca all'interno del dipartimento, si inviteranno i membri del DCFA a considerare lo sviluppo delle proprie linee di ricerca o di nuove tematiche di interesse, in via prioritaria con quei gruppi del DCFA in grado di offrire contributi scientifici complementari, sia in termini strumentali, che computazionali. In tal modo sarà possibile avviare un circolo virtuoso e proficuo anche in termini di incremento del numero di pubblicazioni scientifiche e di citazioni.

### **Modalità di monitoraggio**

Si prevede la costituzione di una commissione ad hoc