Stefano de Gironcoli, fisico della Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di Trieste, è stato nominato membro della prestigiosa Società americana di fisica (American Physical Society – APS) che gli riconosce il merito di aver contribuito, con la sua attività di ricerca, allo sviluppo e alla condivisione delle conoscenze nel campo della fisica.

In particolare l'impegno nella formazione di giovani ricercatori provenienti da paesi in via di sviluppo e il contributo dato allo sviluppo del software di simulazione per la scienza dei materiali, Quantum ESPRESSO. «Si tratta di un codice numerico per il calcolo delle proprietà dei materiali utilizzato nella simulazione dei processi di fisica della materia, nel campo della Density-functional Theory» precisa de Gironcoli, classe 1964, triestino, dal 2001 professore alla Sissa.

Quantum ESPRESSO è un potentissimo strumento per la simulazione della materia alla scala atomica. Il progetto, che si è sviluppato nel corso di oltre venti anni e con il contributo di diverse istituzioni nazionali e mondiali (tra cui la Sissa e l'Ictp di Trieste e il centro Democritos dell'Istituto Officina dei Materiali del Cnr), si basa su un principio di condivisione gratuita delle conoscenze, subordinata alla regola che ogni passo successivo fatto da chi ne fruisce venga anch'esso condiviso.

«Oggi la modellazione numerica di problemi complessi e la simulazione al computer sono strumenti sempre più importanti e utili in diversi ambiti di ricerca: dalla biomedicina al settore energetico» spiega il fisico triestino. La descrizione alla scala atomica dei processi chimico-fisici elementari è infatti il punto di partenza per lo sviluppo di nuovi materiali e per l'ingegnerizzazione delle loro proprietà.

Per esempio, alla Sissa, de Gironcoli e colleghi con questo metodo di calcolo studiano l'allumina, l'ossido di alluminio usato come supporto catalitico nell'industria petrolchimica, al fine di capire le reazioni chimiche che avvengono su questo substrato e studiarne le proprietà di assorbimento delle molecole. Quantum Espresso può essere inoltre utile per studiare la configurazione più stabile di un solido. «Noi abbiamo usato questo codice per studiare i cristalli di colesterolo e le sue diverse fasi cristalline. A seconda infatti della patologia cui sono collegati, i calcoli biliari hanno uno spettro NMR diverso: è diversa cioè la struttura cristallina. E ancora abbiamo indagato i meccanismi di certe reazioni chimiche, come per esempio l'epossidazione dell'etilene: tutte le materie plastiche sono realizzate a partire da un composto di epossido di etilene».

De Gironcoli , nato a Trieste, si è laureato in fisica all'ateneo triestino, ha conseguito il dottorato di ricerca al Politecnico di Losanna, per un anno ha proseguito la sua attività alla Scuola Normale di Pisa. Ricercatore alla Sissa dal 1994, nel settore di Teoria della materia condensata, dal 2001 è professore associato. Da anni è impegnato nell'elaborazione di un codice numerico per il calcolo delle proprietà dei materiali. Utilizza la simulazione numerica, come un microscopio virtuale, per osservare i dettagli atomici dei fenomeni e condurre esperimenti concettuali per comprenderne i meccanismi. Come per esempio il controllo della morfologia di nano-particelle metalliche su substrati di ossidi per migliorarne le proprietà catalitiche.

La American Physical Society (APS) è un'organizzazione no profit che riunisce 48000 membri,

tra professori, ricercatori universitari e fisici impegnati in laboratori e industrie negli Stati Uniti e in tutto il resto del mondo. È stata fondata nel 1899, con l’intento di contribuire allo sviluppo e alla diffusione delle conoscenze nel campo della fisica