

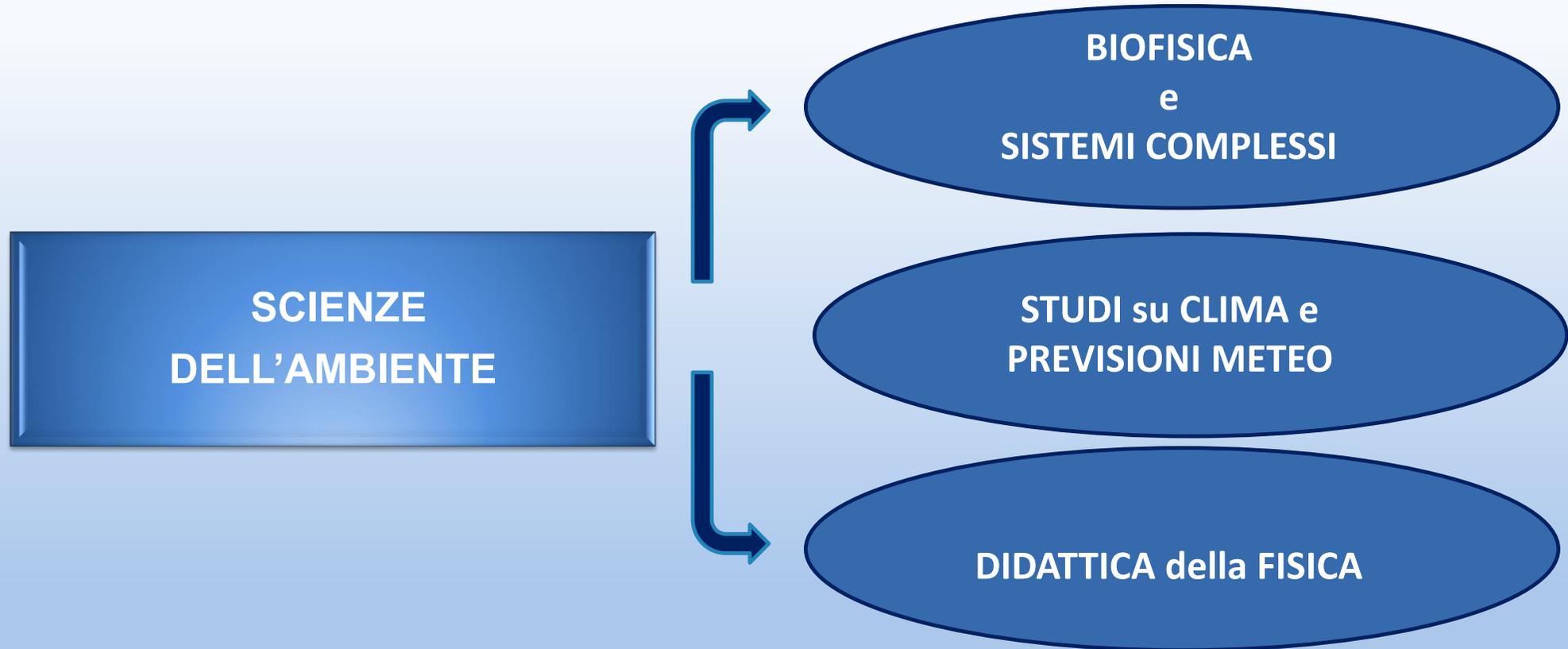


Università degli Studi di Messina

Dipartimento di Scienze Matematiche e Informatiche,
Scienze Fisiche e Scienze della Terra (MIFT)

**Gruppo di ricerca in Biofisica, Fisica
Sperimentale dei Sistemi Complessi e
Fisica Applicata ai Beni Ambientali**

**Gruppo di Ricerca
Prof. Salvatore Magazù**



Gruppo di Ricerca Prof. Salvatore Magazù

Dipartimento di Scienze Matematiche e Informatiche, Scienze Fisiche e Scienze della Terra (MIFT)

BIOFISICA e SISTEMI COMPLESSI

Sinopsi

**TECNICHE SPETTROSCOPICHE E LEVITAZIONE ACUSTICA
PER LA CARATTERIZZAZIONE DI CAMPIONI DI INTERESSE
BIOFISICO e AMBIENTALE**

**Spettroscopia di
neutroni e Luce di
Sincrotrone**

**Spettroscopia
Raman**

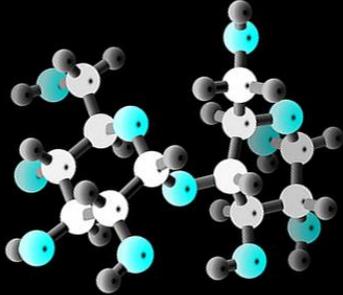
**Spettroscopia
Infrarossa (IR)**

**Levitazione
acustica
(Laboratori MIFT)**

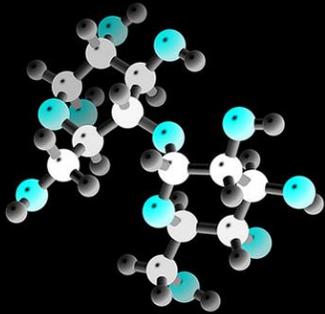
Sistemi investigati

Sistemi Bioprotettori

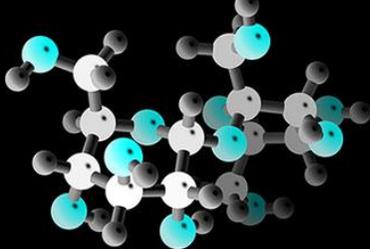
Trealosio



Maltosio

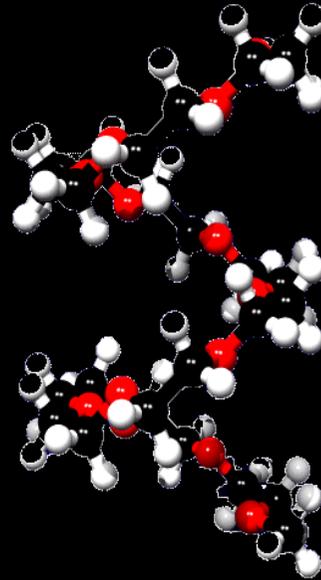


Sucrosio



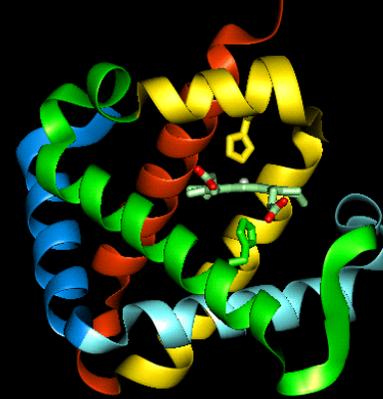
Polimeri

PEO

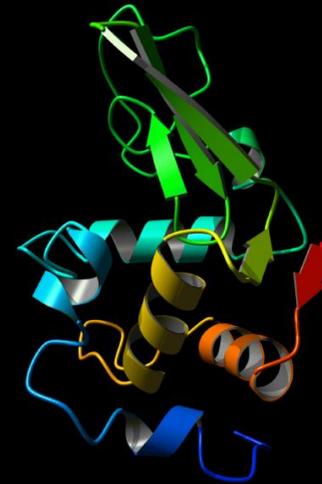


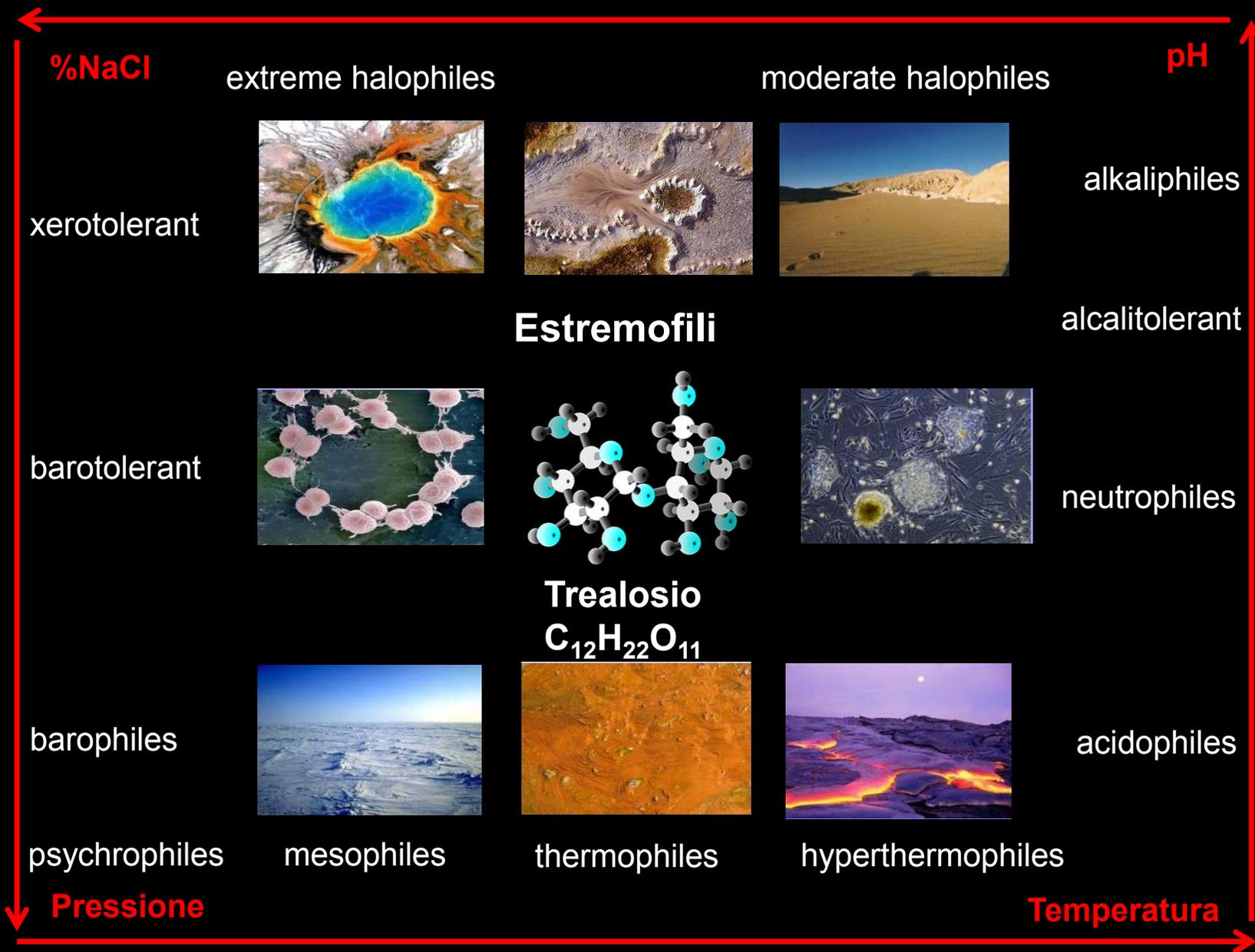
Proteine

Mioglobina

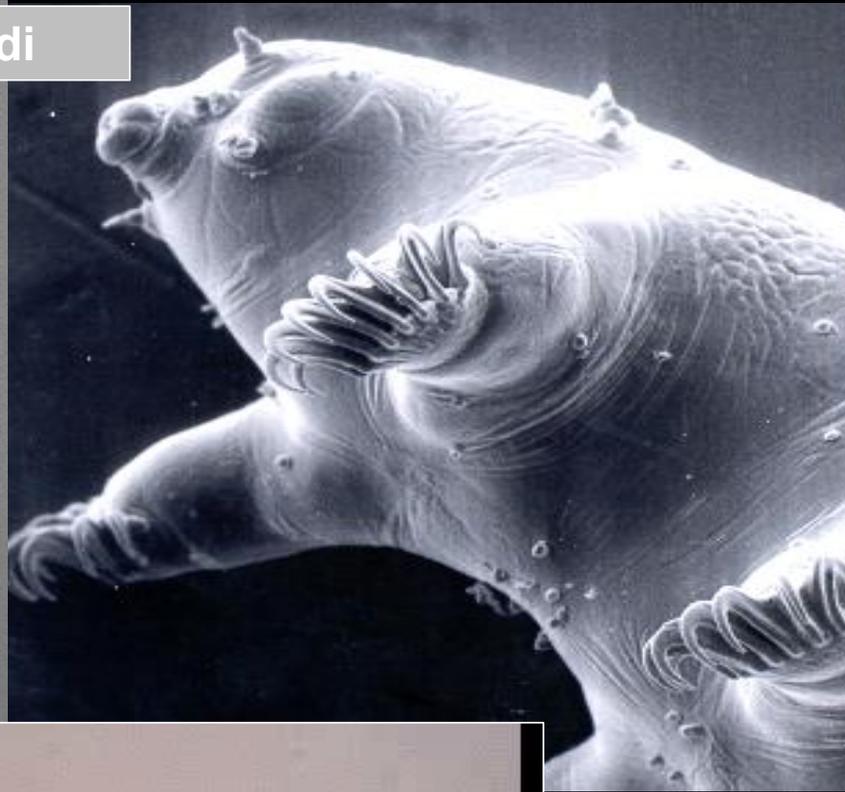
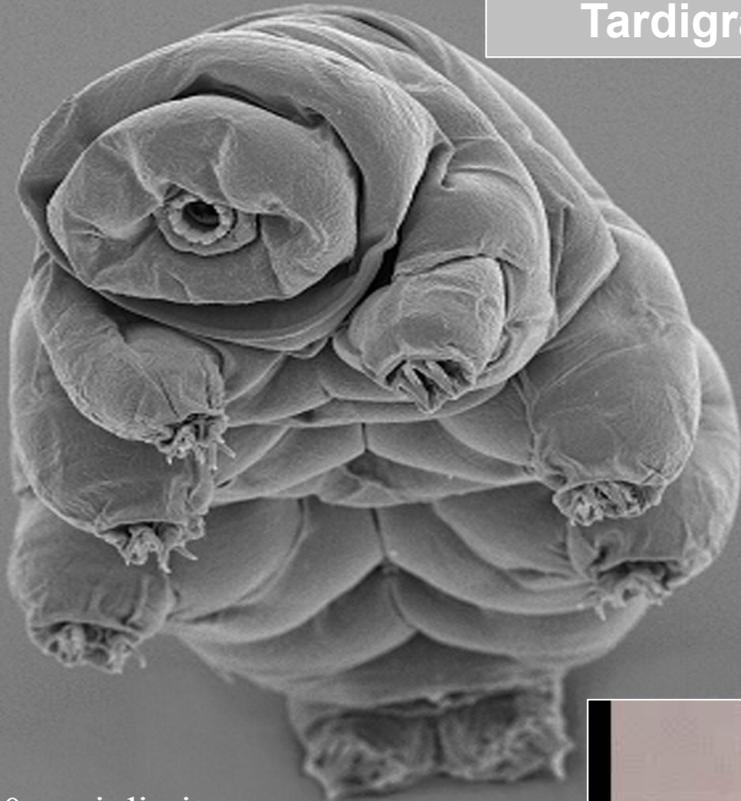


Lisozima





Tardigradi



Arthemia salina



Stato embrionale

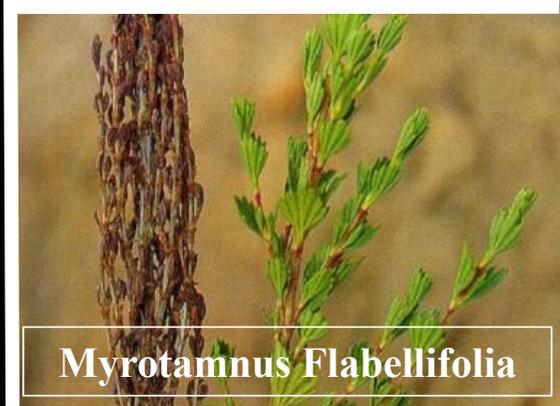


Gamberetti



120 anni di vita sospesa

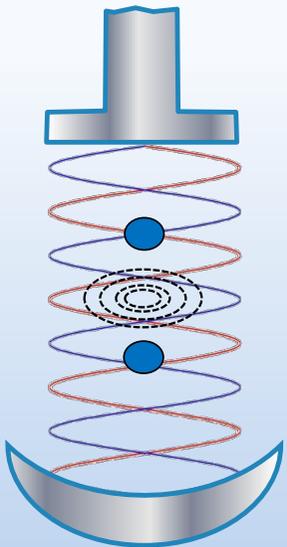
N.B.: Sintetizzano Trealosio per sopravvivere



Myrotamnus Flabellifolia

Levitazione acustica

Trasduttore
(Sorgente vibrazionale)



Riflettore
curvo
metallico

Vantaggi

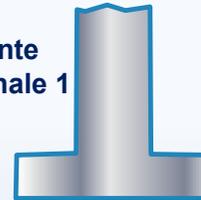
capacità di effettuare misurazioni senza contatto, che è una prerogative per sistemi sottoraffreddati

evitare la contaminazione fornendo un metodo per la preparazione di materiali di alta purezza

evitare la nucleazione eterogenea

tecnica compatta che consente di rimuovere il contributo del porta campione

Sorgente
vibrazionale 1



Sorgente
vibrazionale 2



Single-axis Acoustic Levitator (SAL™)	Frame and levitator system dimensions	30 x 45 x 60 cm
	Controller dimensions	60 x 45 x 20 cm
	Total weight	30 Kg
	Electrical specifications	100/120V 60 Hz, 15A 230 V 50/60 Hz, 15A
	Nominal resonant frequency	22 kHz
	Sound pressure levels	160 dB
	Transducers distance	150 mm

Levitatore acustico
SAL™

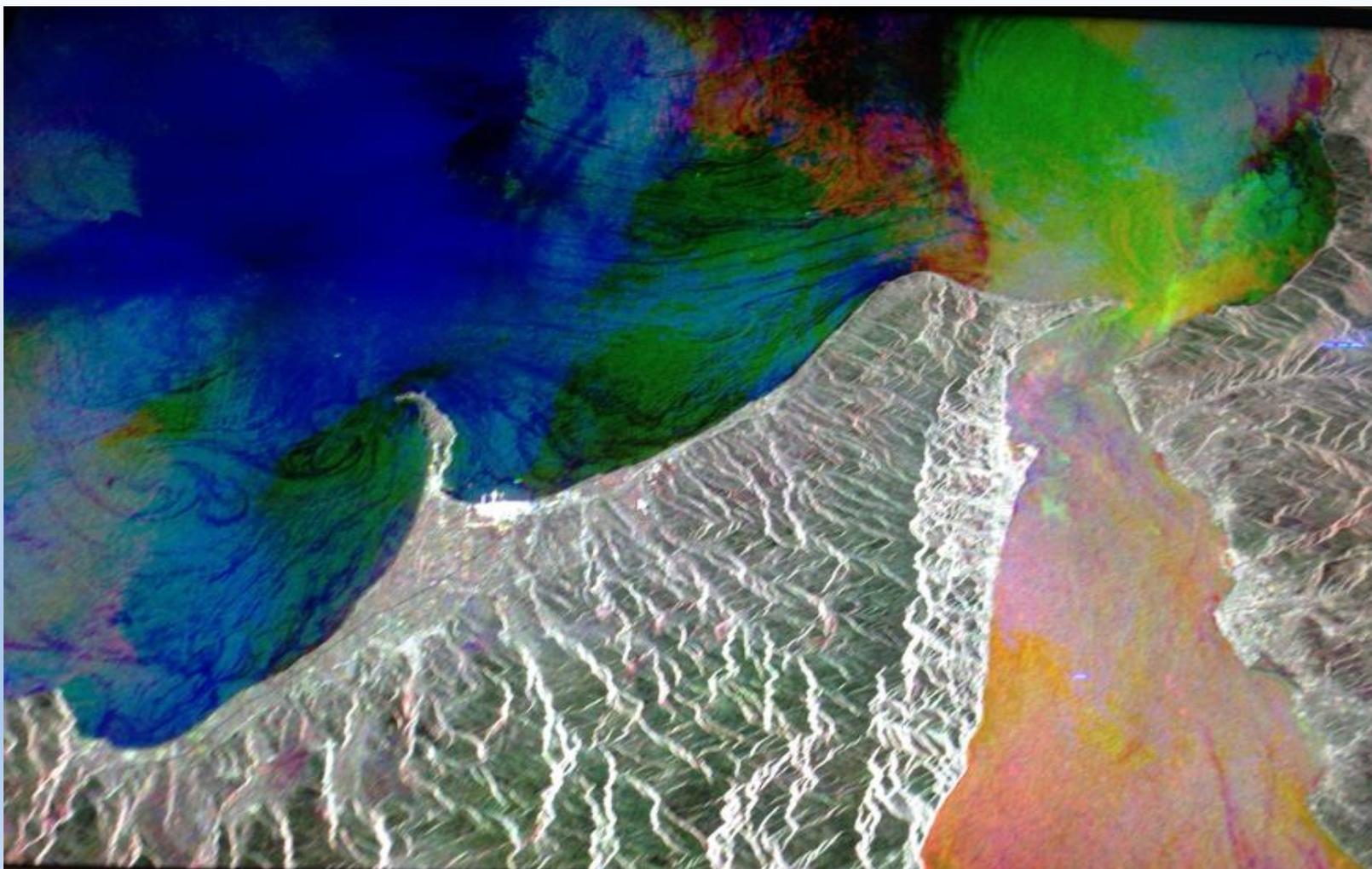


Spettrometro IR
BRUKER
VERTEX 70v

Si utilizza un'onda acustica con una frequenza di alcune decine di KHz per contrastare la forza di gravità



Importanza Meteo area Messina



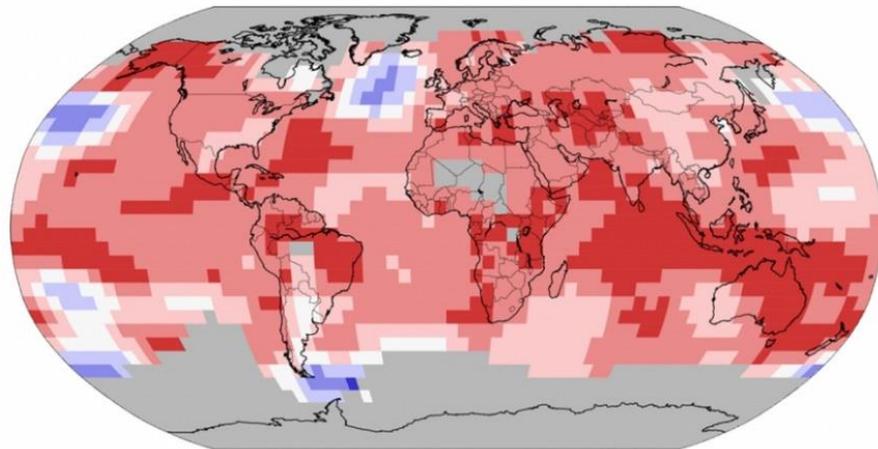


Modello di bilancio Energetico Globale



2016: Hottest Year So Far

Land and ocean temperature percentiles Jan-Jun 2016



Source: NOAA NCEI

CLIMATE CENTRAL

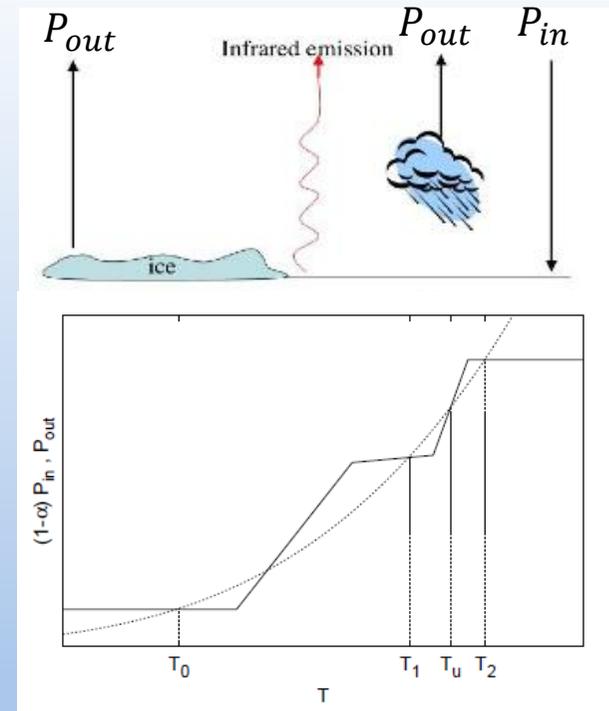
$$C \frac{dT}{dt} = (1 - \alpha(T))P_{in} - P_{out}(T)$$

C: Capacità termica della Terra

$$P_{in} = \pi R^2 S \text{ dove } S = 1370 W m^{-2}$$

$$P_{out} = 4\pi R^2 \sigma T^4$$

α : Radiazione incidente riflessa dalla superficie terrestre



$(1 - \alpha(T))P_{in}$: radiazione in ingresso (linea continua)

$P_{out}(T)$: Radiazione in uscita (linea tratteggiata)

Stochastic resonance in climatic change

G. Parisi, R. Benzi, A. Sutera, A. Vulpiani

Equazioni Differenziali Stocastiche e analisi wavelet per lo studio del clima

ESA - Edas 2015 M.T. Caccamo S. Magazu



Precipitazioni in Sicilia: 2002 – 2014



L'aumento significativo della temperatura planetaria, ha portato ad un incremento delle risorse di energia termica disponibile per i fenomeni convettivi, il potenziale evaporativo dei nostri mari e, conseguentemente, ad un aumento della frequenza di eventi estremi.

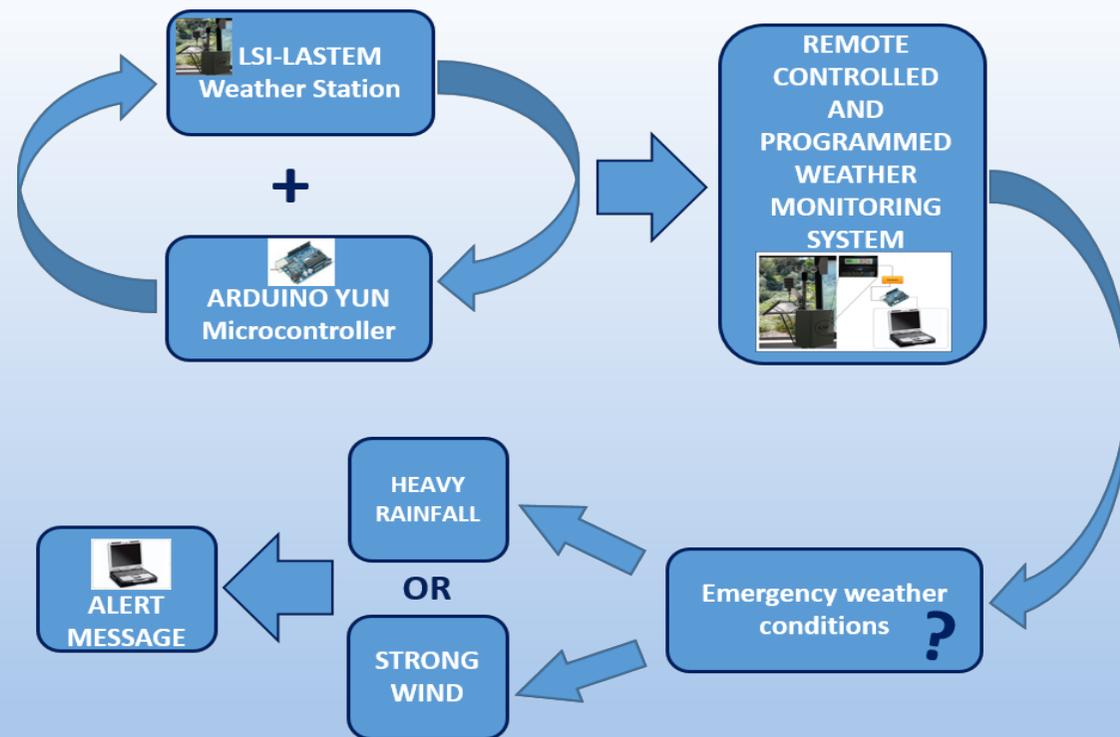
Province	2002	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	Climate
AG	360,09	639,87	703,07	650,80	533,22	549,91	424,80	739,11	659,04	602,76	596,53	734,11	558,78	556
CL	335,51	626,94	477,48	648,97	516,97	457,23	445,20	694,66	614,71	583,03	503,57	605,00	483,54	468
CT	534,25	1002,29	710,00	770,62	846,18	825,65	652,20	867,85	799,30	935,25	688,32	640,88	667,85	650
EN	426,57	895,20	706,87	808,80	503,00	611,53	664,23	744,37	644,93	662,57	593,87	674,47	564,73	566
ME	836,15	1028,47	918,37	901,06	799,35	1051,66	864,81	1305,16	1028,98	959,97	729,01	885,86	901,59	843
PA	597,55	785,18	719,69	761,63	553,68	717,92	530,73	1002,72	741,65	628,21	623,80	810,60	699,71	679
RG	303,03	707,43	683,46	571,69	648,40	618,91	430,80	598,60	717,60	836,03	576,23	611,91	432,94	476
SR	272,51	813,40	677,66	711,26	742,06	727,91	475,20	625,86	661,46	927,31	633,83	542,89	503,31	575
TP	499,15	774,80	888,73	752,33	571,91	765,87	447,64	951,11	702,60	610,51	561,10	776,38	611,14	535
Sicilian Average	462,76	808,18	720,59	730,79	634,98	702,95	548,40	836,60	730,03	749,51	611,81	698,01	602,62	594,22



Sistema di Monitoraggio LSI – Arduino



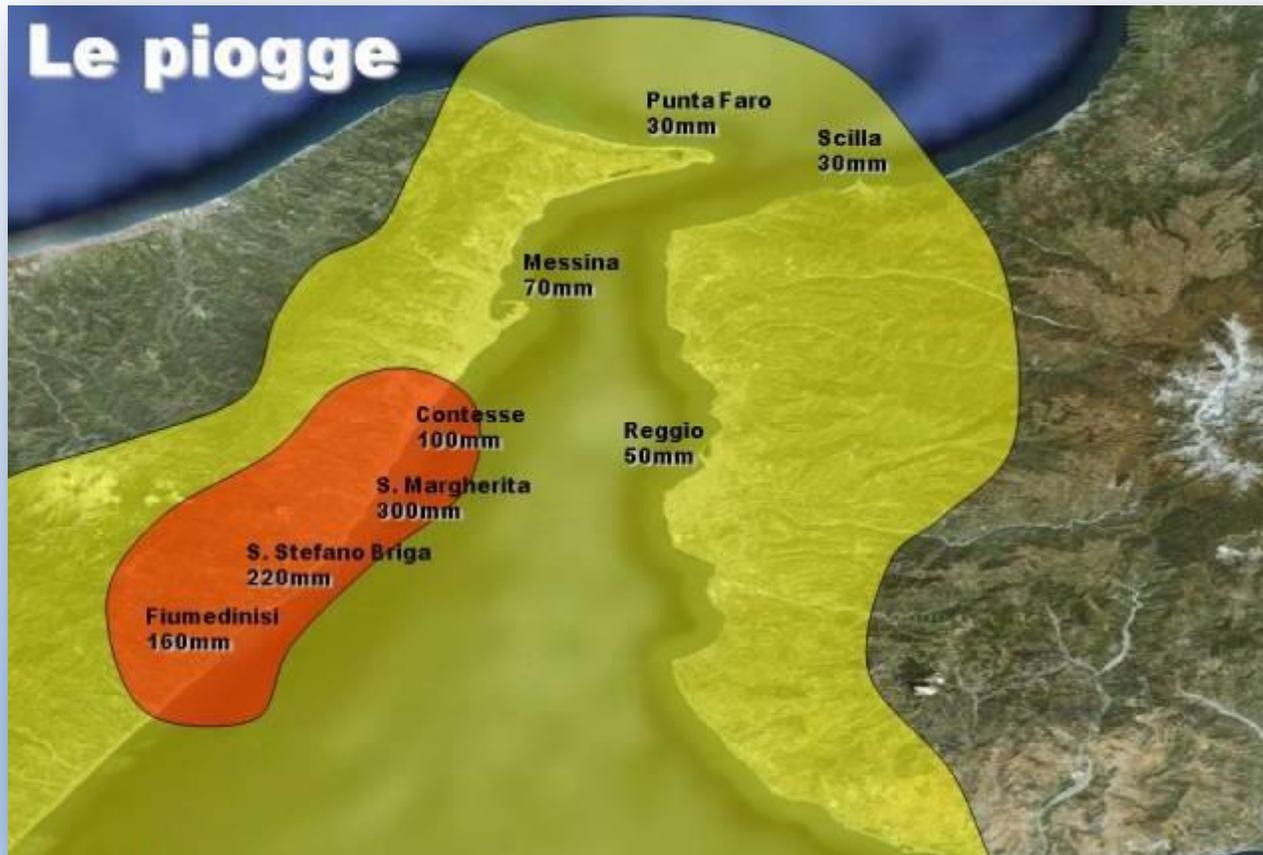
```
root@linino:/opt# node serial.js  
Wind Direction: 11279.2  
Power Supply: 11.7 V  
Internal Temperature: 24.76 °C  
Wind Speed: 0.00 m/s  
Air Temperature: 21.73 °C  
Relative humidity: 61.2 %  
Rainfall Accumulation: 0.00 mm
```



In collaborazione con il progetto #SmartME, iniziativa dell'Ateneo, patrocinata dal Comune di Messina con il supporto operativo della spinoff accademica DHLab e coordinata dal gruppo di ricerca MDSLAB, diretto dal Prof. Antonino Puliafito, e dall'Industrial Liason Office dell'Università

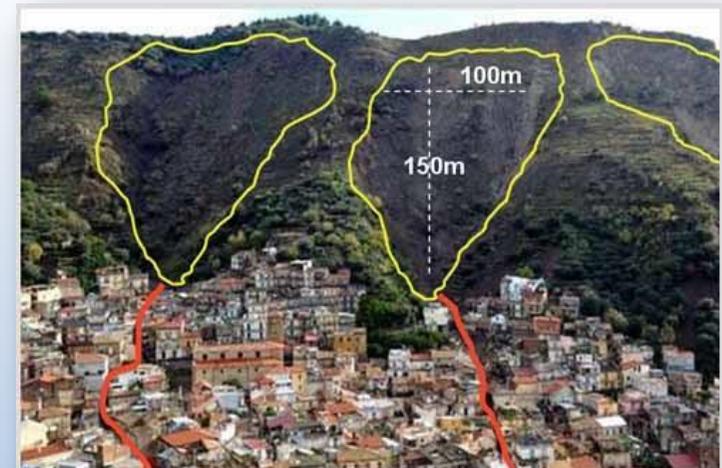


Eventi Meteorologici Estremi



Messinese jonico 1° Ottobre 2009

Accumuli pluviometrici registrati in circa 3 – 4 ore



— Versanti interessati dall'innesco ed evoluzione delle colate di fango
— Alvei-strada percorsi e devastati dalle colate rapide di fango e detriti fino alla fiumara





Eventi Meteorologici Estremi



Messinese Tirrenico 22 Novembre 2011

Accumuli pluviometrici registrati in circa 3 – 4 ore





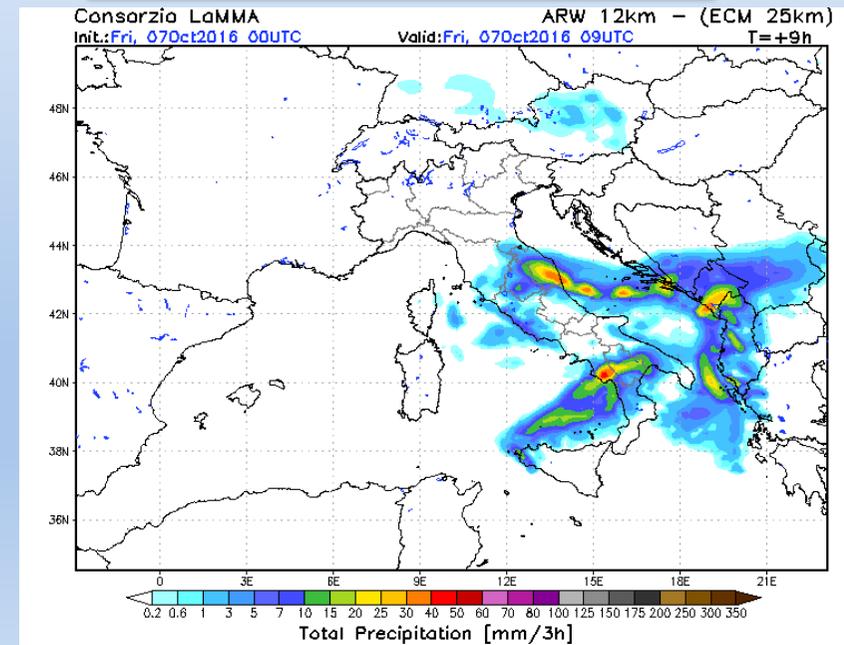
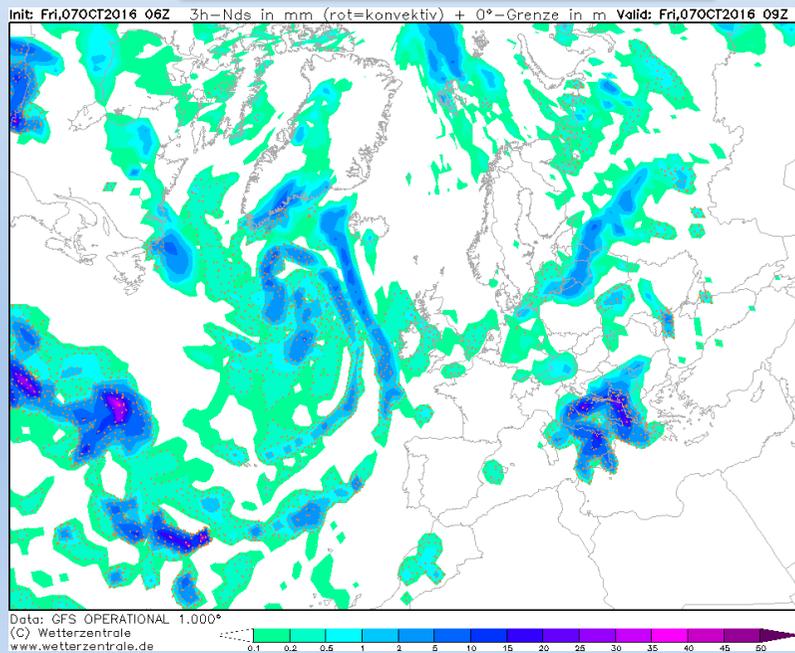
Modelli Meteorologici



Modelli

GM
(Global Model)

LAM
(Limited Area Model)





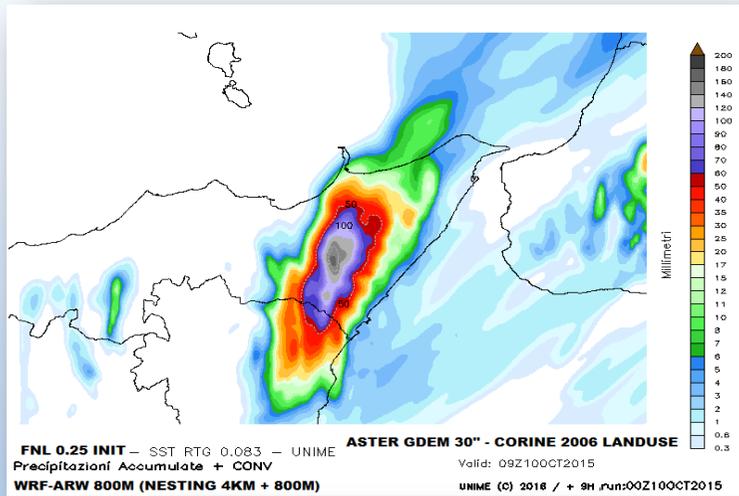
Caso studio del 10 ottobre 2015

MIFT DIPARTIMENTO DI
SCIENZE MATEMATICHE E INFORMATICHE
SCIENZE FISICHE E SCIENZE DELLA TERRA

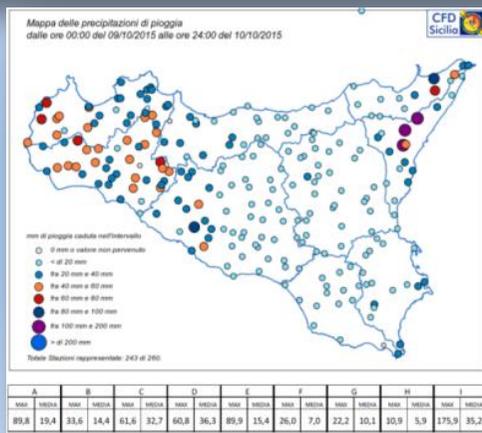




Caso studio del 10 ottobre 2015



Il caso studio ha analizzato l'evento alluvionale del 10 ottobre 2015, non visto dalla quasi totalità di modelli operativi. Si è eseguita una previsione con il modello WRF - UniMe il quale ha ottenuto ottime performance, sia nella localizzare che nella stima totale delle precipitazioni.





Integrazione del Modello



Modello Hydro: modello progettato per facilitare l'accoppiamento tra la Meteorologia ed i modelli idrologici terrestri.

Modello Chem: modello di previsione accoppiato con la chimica. Esso simula l'emissione, il trasporto, la miscelazione e la trasformazione chimica di tracce di gas e aerosol in base alle condizioni meteorologiche.

Modello Meteo – Marino: stima di correnti, altezza e frequenza delle onde marine

Gruppo di Ricerca in Biofisica – Biopolimeri- Solidi Amorfi e Spettroscopia Dielettrica

Are di Ricerca

- **Sintesi e ottimizzazione di nano drug delivery**
- **Studio dei meccanismi di funzionamento di sistemi biofisici complessi (proteine-strutture lipidiche-membrane)**
- **Sistemi disordinati (polimeri e vetri)**
- **Materiali 2D per tecnologie energetiche**
- **Spettroscopia dielettrica broadband**

Sintesi e ottimizzazione di nano drug delivery

La complessità della biofisica e la semplicità della Fisica



Somministrazione di farmaci tramite l'impianto o l'iniezione di sistemi a rilascio controllato (Nanosistemi) tramite i quali si possono ottenere vantaggi rispetto alle terapie farmacologiche convenzionali

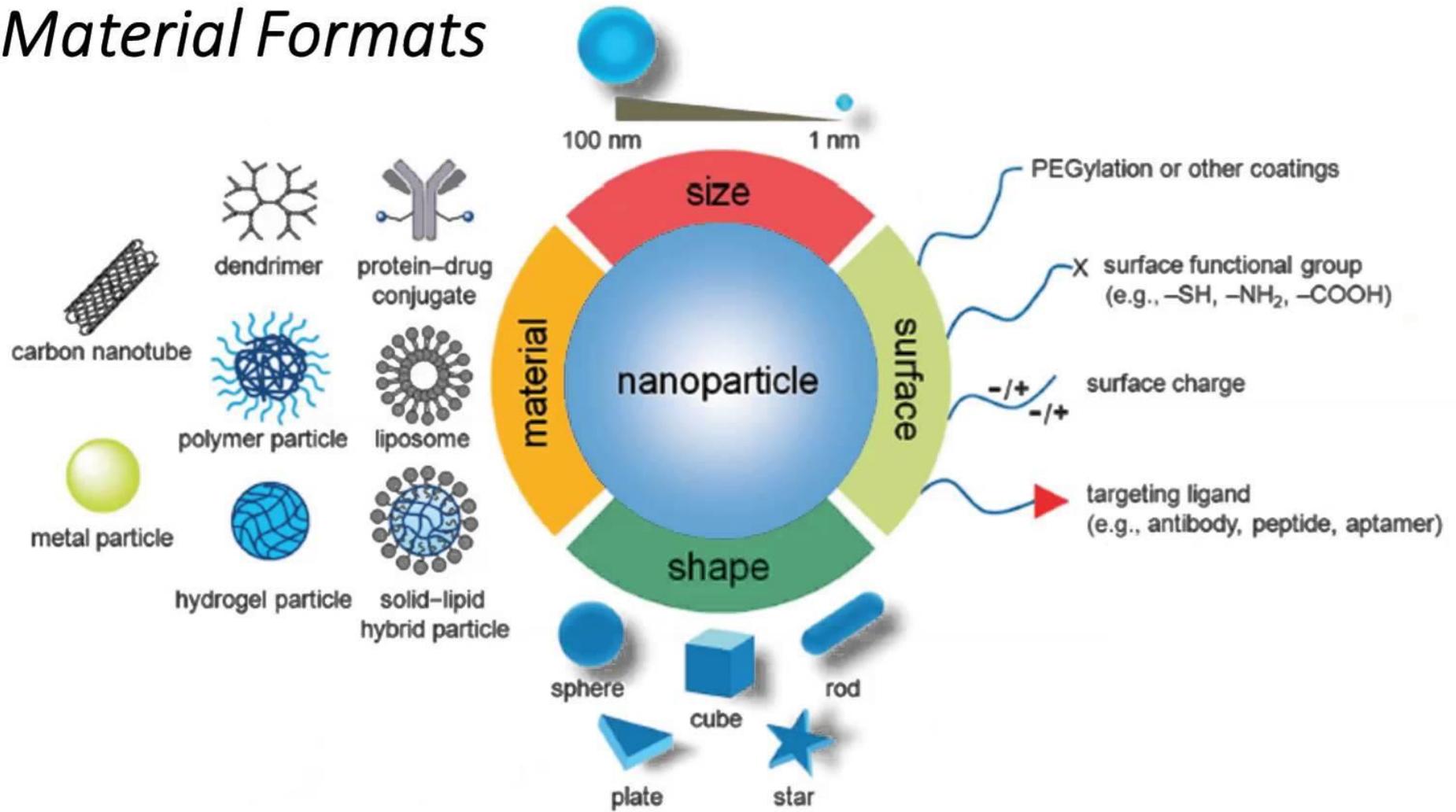
Branca Caterina



D'Angelo Giovanna Wanderlingh Ulderico



Material Formats



Studio dei meccanismi di funzionamento di sistemi biofisici complessi (proteine-strutture lipidiche-membrane)

Wanderlingh Ulderico -D'Angelo Giovanna – Branca Caterina



Diffrazione Raggi X

Photon correlation spectroscopy

Tecniche calorimetriche

Light Scattering (FTIR RAMAN)

Scattering elastico e inelastico di neutroni

Dinamica molecolare



Institut Laue Langevin, Grenoble, France

Diffrazione Raggi X

Photon correlation spectroscopy

Tecniche calorimetriche

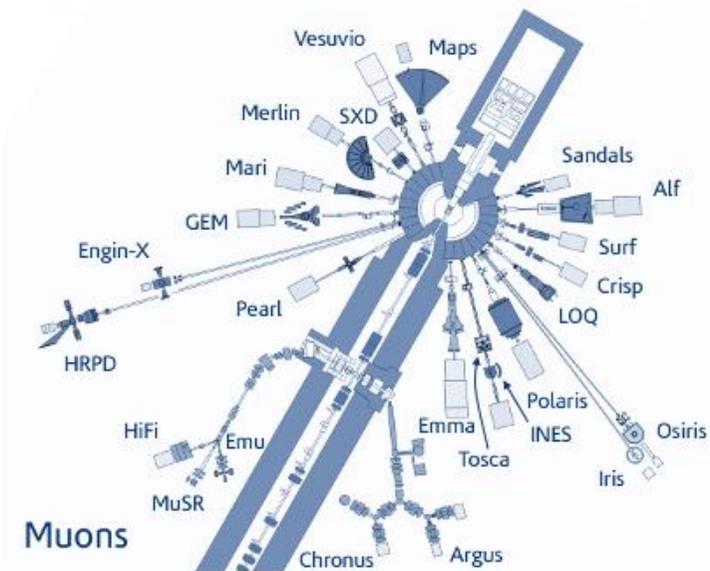
Light Scattering (FTIR- Microscopia RAMAN e Imaging)

Scattering elastico e inelastico di neutroni

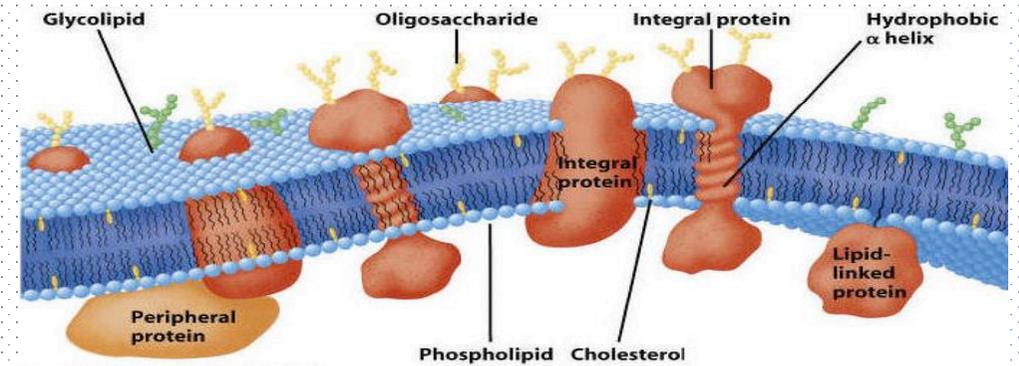
Dinamica molecolare

ISIS Pulsed Neutron and Muon Facility,
Rutherford-Appleton Laboratory, Oxfordshire,
UK

Target Station 1



**"Struttura, dinamica <-->
Funzione"**



Valeria Conti Nibali



**RUHR
UNIVERSITÄT
BOCHUM**

RUB

BANDO PRIN 2017

- Titolo del Progetto di Ricerca: **Novel nano-and micro-technologies for cellular therapy in experimental Parkinson models**



BANDO PRIN 2017

- Titolo del Progetto di Ricerca: **AMyloidogenesis In CONfinement (AM.I.CO): role of membrane/protein/water structure, dynamics and interactions**

Fisica e Chimica

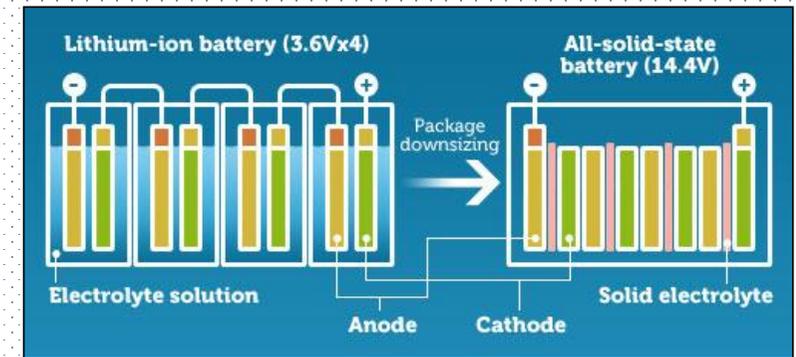


Sistemi disordinati (polimeri e vetri)

Carini Giuseppe –D’Angelo Giovanna-Federico Mauro

Studio di proprietà fisiche di sistemi disordinati:

- Proprietà meccaniche (per applicazioni nelle industrie dei trasporti terrestri e aerospaziali)
- Proprietà ottiche (per lo sviluppo di laser a stato solido)
- Proprietà elettriche (per la produzione di batterie a stato solido)



Prof Steve Martin



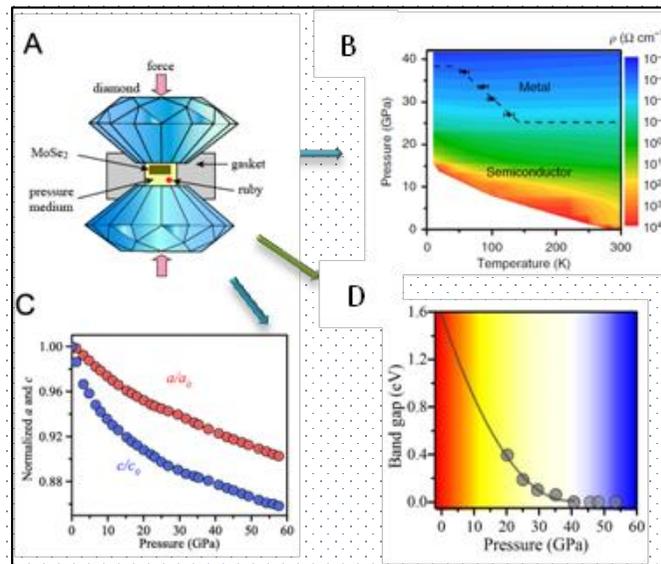
IOWA STATE UNIVERSITY
OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Sistemi disordinati (polimeri e vetri)

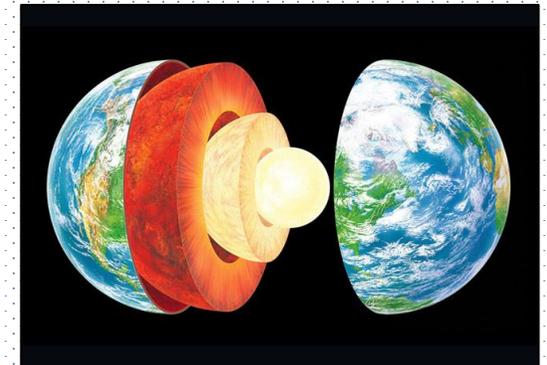
Carini Giuseppe –D'Angelo Giovanna-Federico Mauro

Studio di proprietà fisiche in sistemi sottoposti a condizioni estreme di temperatura e pressione:

- Pressa multi-incudine 40GPa-3500 K (sintesi di campioni macroscopici)
- Diamond Anvil Cell (misure in situ)



Zhao, et al., Nature communications 6 (2015): 7312.



Sviluppo e applicazione di materiali bidimensionali (2D) per tecnologie energetiche

D'Angelo Giovanna-Bonaccorso Francesco

PhD student: Valentino Romano

Thesis

2D materials for energy conversion applications

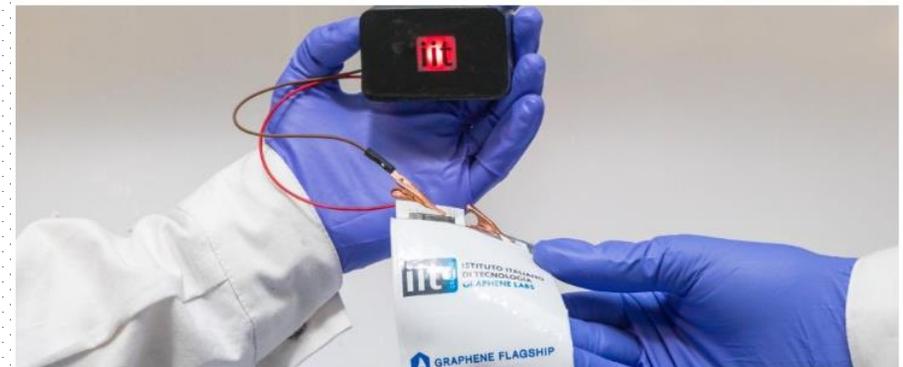


ISTITUTO ITALIANO DI TECNOLOGIA
GRAPHENE LABS



Tecnologia

MWC 2018: col grafene prima tecnologia flessibile per caricare velocemente i dispositivi portatili



Spettroscopia dielettrica broadband

Cutroni Maria -Mandanici Andrea

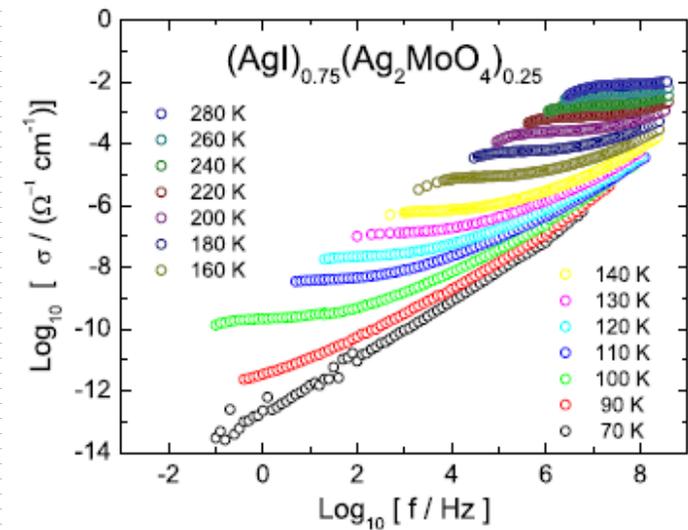


Studio del comportamento dei materiali sottoposti a campi elettromagnetici variabili, in funzione della frequenza in un vasto intervallo compreso fra 10^{-3} Hz e 40 GHz (microonde) e in funzione della temperatura.

Conducibilità elettrica e costante dielettrica in vetri ionici e liquidi ionici

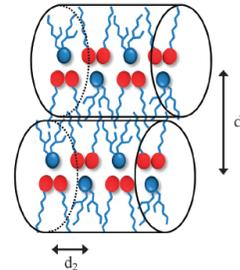
Rilassamenti dielettrici in liquidi glass-forming

Enhancement della conducibilità in miscele di sostanze anfifiliche



Ricadute applicative:

- Materiali a conduzione ionica, di interesse per la realizzazione di batterie e sensori
- Energy storage and conversion
- Individuazione di miscele la cui conducibilità aumenta di vari ordini di grandezza rispetto ai liquidi puri da cui è composta-Fuel Cell



Collaborazioni:

- Aleksandar Matic, Condensed Matter Physics Division, Chalmers University of Technology, Goteborg, Sweden
- Pietro Calandra, CNR, Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati, Roma
- Max Fraenkl, Tomas Wagner, Fakulta chemicko-technologická, University of Pardubice, Czech Republic
- Piercarlo Mustarelli, Dipartimento di Chimica, Università di Pavia
- Radha D. Banhatti, Ana Santic, Laboratory for functional materials, Rudjer Boskovic Institute, Zagreb, Croatia

**Gruppo di ricerca in:
Teoria e Simulazione di Sistemi Atomici e Molecolari**

Presentazione dell'attività di ricerca

**Dino Costa, Paolo Giaquinta, Gianpiero Malescio,
Santi Prestipino, Alessandro Sergi**

Dip. di Scienze Matematiche ed Informatiche, Scienze Fisiche e Scienze della Terra,
Università degli Studi di Messina

Giornata degli studenti – Messina, 22/05/2018

Componenti del gruppo e collaborazioni

- **Dino Costa**: J.-M. Bomont e J.-L. Bretonnet (Université de Lorraine); A. Baumketner (Lviv, Ukraine)
- **Paolo Giaquinta**: M. Saitta (Université Pierre et Marie Curie - Sorbonne); F. Saija e F. Aliotta (CNR-IPCF Messina)
- **Gianpiero Malescio**: A. Parola (Como)
- **Santi Prestipino**: E. Tosatti (ora all'ICTP, Trieste) e A. Laio (SISSA, Trieste); A. Parola (Como)
- **Alessandro Sergi**: K. Zloschastiev (Sudafrica), A. Messina (Palermo), G. Hanna (U. of Alberta, Canada)
- **Tina Abramo** e **Carlo Caccamo** (da poco in pensione, ma ancora attivi)

Collaboratori regolari del gruppo: F. Saija, G. Munaò (ora a Salerno), G. Pellicane (UKZN, Sudafrica), F. Sciortino (U. La Sapienza, Roma) e A. Giacometti (U. Ca' Foscari, Venezia)

- Dei sistemi macroscopici ha senso studiare solo il *comportamento collettivo*
- All'equilibrio questo comportamento è retto da leggi generali (quelle della termodinamica): se il sistema è *isolato*, l'energia si conserva (I legge) e l'entropia è massima (II legge)
- Se il sistema è a contatto con un serbatoio, all'equilibrio è minimo un opportuno potenziale termodinamico generalizzato (PTG),
p. es. $\tilde{G}(E, V; T, P, N) = E - TS(E, V, N) + PV$
- Sono possibili transizioni di fase

- Cos'è l'entropia di un macrostato? È il logaritmo della molteplicità dello stato
- Ergodicità “de facto” dei sistemi grandi isolati: la stragrande maggioranza dei microstati accessibili è caratterizzata dalle stesse proprietà macroscopiche, cioè appartiene ad un unico macrostato (quello di massima entropia)
- Ne deriva che medie temporali e medie di ensemble hanno lo stesso valore (di qui due approcci possibili alla simulazione, dinamica molecolare e Monte Carlo)

1. Vicino alla soglia di stabilità

La meccanica statistica può entrare in crisi per *eccesso di attrazione* fra le particelle

$$\text{Es. } u(r) = \epsilon \left(e^{-r^2/\sigma^2} - \eta e^{-(r-3\sigma)^2/\sigma^2} \right)$$

(descrive l'interazione effettiva fra polimeri in soluzione)

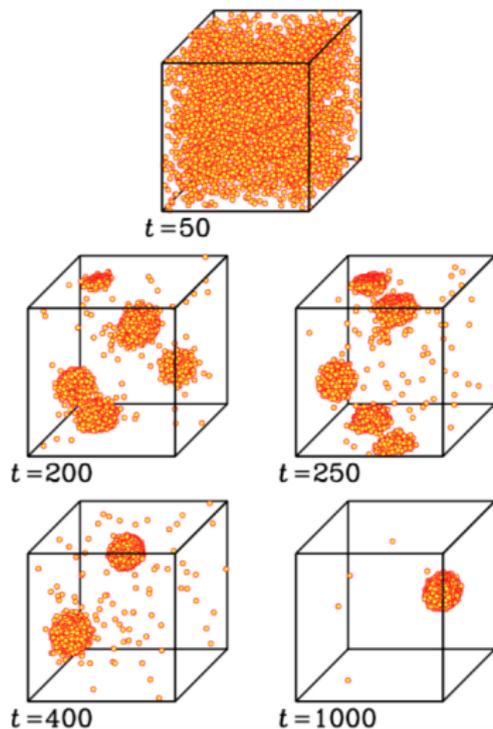
Se l'attrazione è troppo forte, un sistema inizialmente omogeneo *collassa* (e la termodinamica non vale più)

Criteri di Ruelle e Fisher:

- $u(r)$ è stabile se e solo se $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \geq -cN$
- Se $\tilde{u}(0) < 0$ il potenziale è instabile;
se $\tilde{u}(k) > 0$ per ogni k , allora il potenziale è stabile
- Sono stabili i potenziali (repulsivi) strettamente positivi

Il potenziale DG è stabile per $\eta < \eta_c \equiv 0.0263157908 \dots$, mentre è instabile per $\eta > \eta_c$

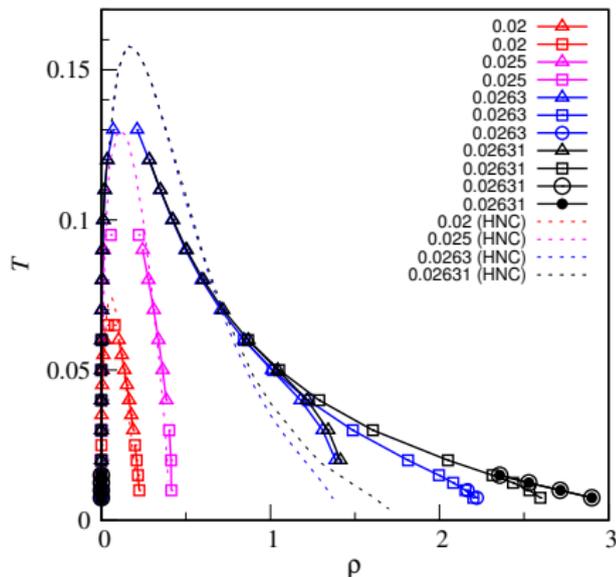
1. Vicino alla soglia di stabilità



Qui vedete uno stralcio dell'evoluzione temporale della configurazione di un sistema instabile. Ricorda il processo di decomposizione spinodale, seguito da *coarsening*

1. Vicino alla soglia di stabilità

- La simulazione mostra che, per $\eta \rightarrow \eta_c$, la linea binodale liquido-vapore si allarga sensibilmente a bassa temperatura
- Lo stesso effetto si osserva nella teoria HNC: la linea pseudospinodale si allarga anch'essa in modo anomalo (lo abbiamo verificato per un gran numero di potenziali catastrofici)
- Alla radice di questo comportamento stanno il fatto che $\tilde{u}(0) = 0$ a η_c ed il carattere "ideale" del fluido di alta densità



1. Vicino alla soglia di stabilità

Quando $\eta > \eta_c$:

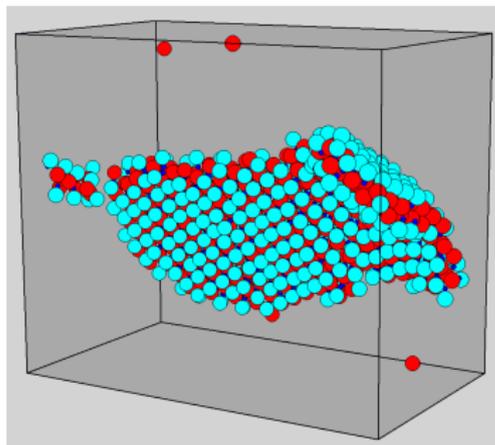
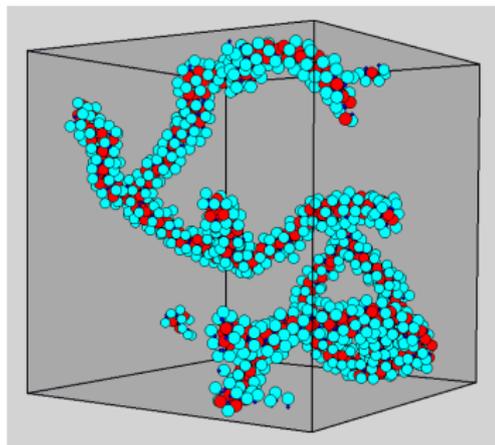
- Il fluido è instabile ma la teoria HNC continua a funzionare
- La linea pseudospinodale segna il confine tra due distinte regioni del piano ρ - T : in una il fluido omogeneo collassa in breve tempo; nell'altra, per quanto si prosegue la simulazione il fluido non dà segni di voler decadere

2. Una miscela fluida che si autoorganizza

- Il self-assembly è tra le caratteristiche salienti della *materia soffice*: cluster, micelle, lamelle, networks e vescicole sono strutture frequenti in fase fluida
- Controllare il self-assembly significa poter fabbricare materiali smart per scopi specifici
- Il nostro modello: due specie, una sfera rigida ed un dimero anfifilico (il raggio della buca attrattiva e i diametri delle particelle sono gli unici parametri)
- Originariamente, l'idea era quella di simulare l'*incapsulamento*; poi si è visto che a bassa temperatura compaiono altre strutture organizzate

2. Una miscela fluida che si autoorganizza

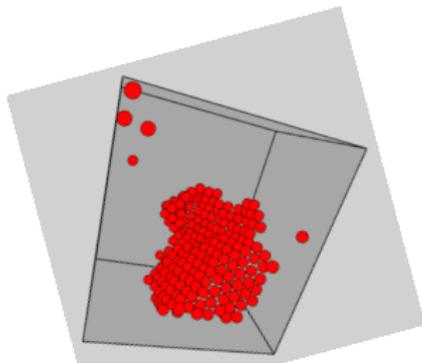
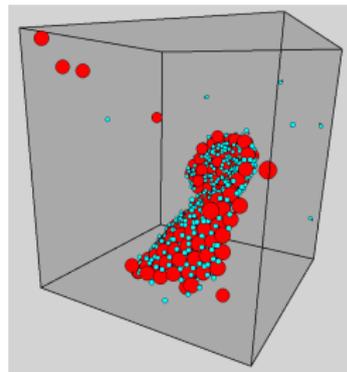
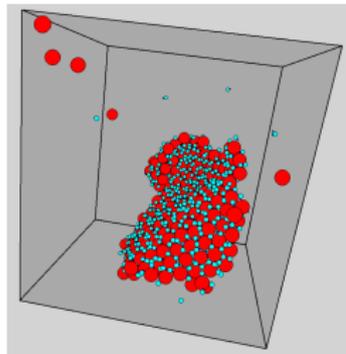
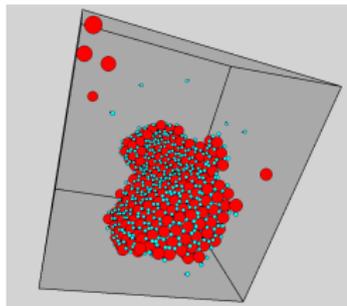
La simulazione: si parte da uno stato omogeneo e si aspetta (da qualche decina a qualche centinaio di milioni di cicli Monte Carlo) finché le strutture autoorganizzate non si manifestano



Qui $\sigma_3 = \sigma_2 = 3\sigma_1$ e $T = 0.10$. A sinistra: $\chi = 33\%$. A destra: $\chi = 50\%$

2. Una miscela fluida che si autoorganizza

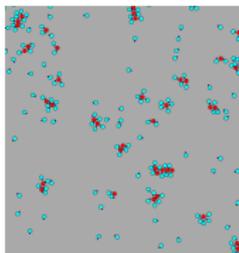
Per sfere tre volte più grandi, per $\chi = 20\%$ si nota la tendenza a formare lamelle curve (stavolta, con ordine in-plane triangolare) o, addirittura, vescicole



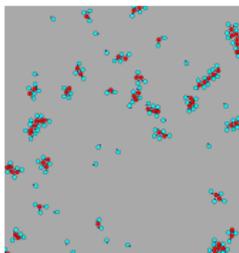
2. Una miscela fluida che si autoorganizza

Sul *piano*, al variare della temperatura T e della concentrazione χ di sfere:

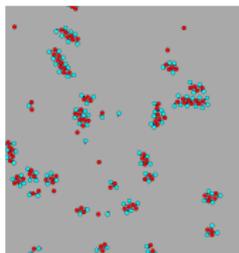
$T = 0.15$



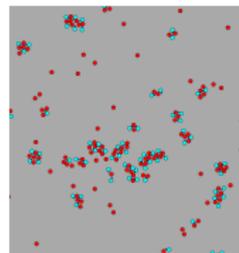
$\chi = 20\%$



$\chi = 33\%$

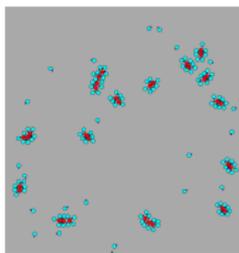


$\chi = 50\%$

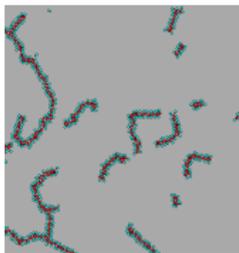


$\chi = 67\%$

$T = 0.10$



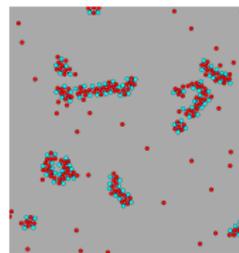
$\chi = 20\%$



$\chi = 33\%$

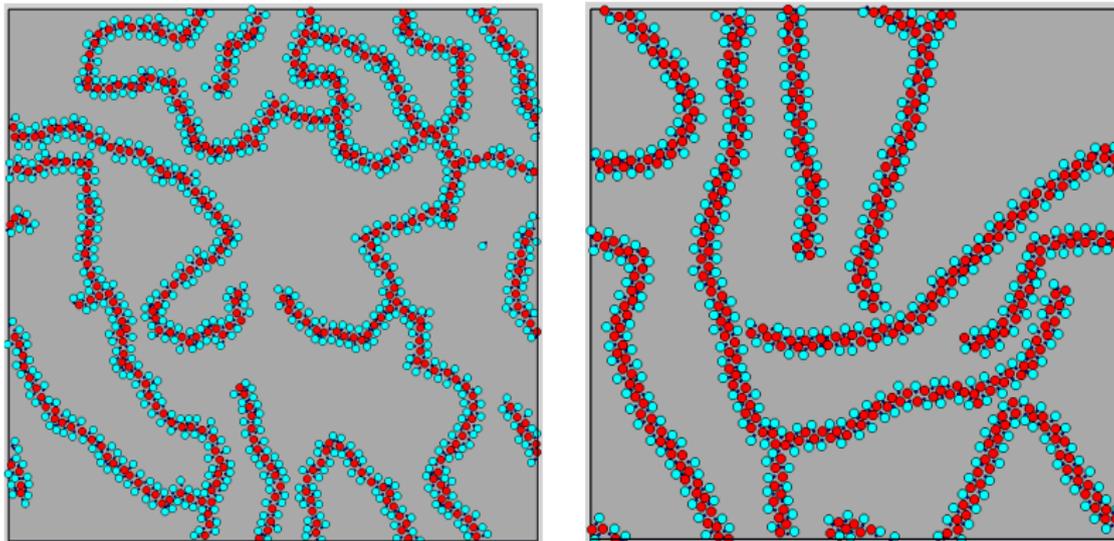


$\chi = 50\%$



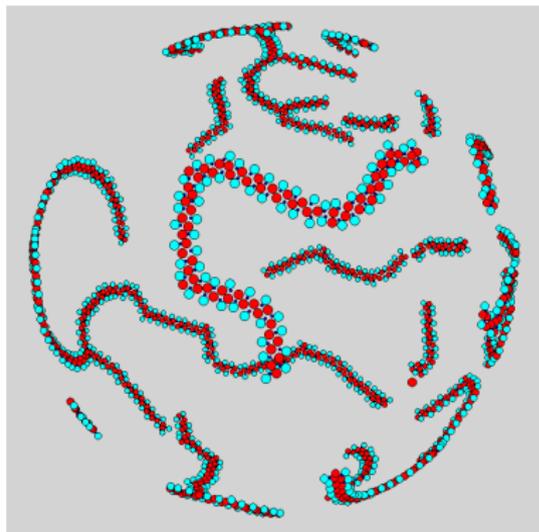
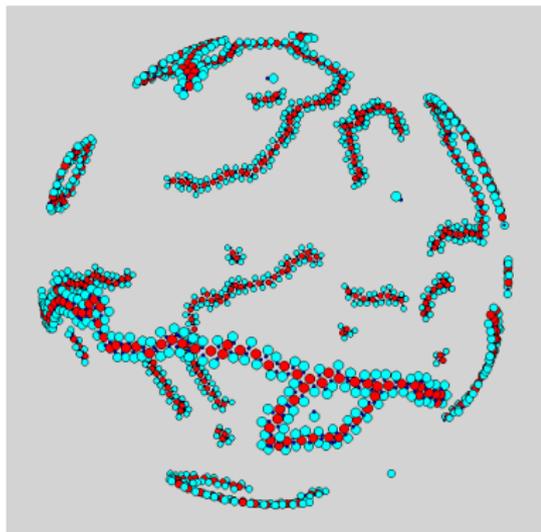
$\chi = 67\%$

2. Una miscela fluida che si autoorganizza



Sul *piano*, a densità 5 volte più alta di prima e per $T = 0.10$.
A sinistra, $\chi = 33\%$. A destra: $\chi = 50\%$

2. Una miscela fluida che si autoorganizza



Sulla *sfera*, a bassa densità e per $T = 0.10$.

A sinistra, $\chi = 33\%$. A destra: $\chi = 50\%$

3. Così nasce un cristallo

- Il congelamento di un liquido avviene a T_c (la temperatura nominale di transizione a quella certa pressione) solo se lo si raffredda in maniera infinitamente lenta. Se no, occorre portare il liquido ben al di sotto di T_c
- Il primo stadio della cristallizzazione è la *nucleazione*: piccoli germi del cristallo nascono e muoiono di continuo dentro il liquido, per fluttuazione termica; solo un germe sufficientemente grande è in grado di innescare la crescita del cristallo
- Nella CNT il costo di formazione di un cluster di volume $V = (4/3)\pi R^3$ è:

$$\Delta G = -\frac{4}{3}\pi R^3 \rho_s |\Delta\mu| + 4\pi R^2 \gamma$$

- Raggio critico e altezza della barriera sono dati da:

$$R^* = \frac{2\gamma}{\rho_s |\Delta\mu|} \quad \text{e} \quad \Delta G^* = \frac{16\pi}{3} \frac{\gamma^3}{\rho_s^2 |\Delta\mu|^2}$$

- Vicino a T_c il tasso di nucleazione è $\propto \exp\{-\Delta G^*/(k_B T)\}$

3. Così nasce un cristallo

Una nuova teoria della nucleazione (S. Prestipino, A. Laio e E. Tosatti):

Si rimuovono, una dopo l'altra, tutte le semplificazioni introdotte dalla CNT (interfaccia sharp, interfaccia sferica, tensione d'interfaccia isotropa, un solo parametro d'ordine)

Risultati:

- Una formula chiusa per $\Delta G(V)$, che comprende le correzioni di campo medio ed un termine logaritmico universale
- Una formula chiusa per il costo di formazione del cluster in funzione di *due* parametri d'ordine (volume V e area A)
- per interfacce anisotrope, $\Delta G(V)$ è la stessa espressione del corrispettivo del cluster quasi-sferico, tranne che per il fattore numerico davanti al termine logaritmico

3. Così nasce un cristallo

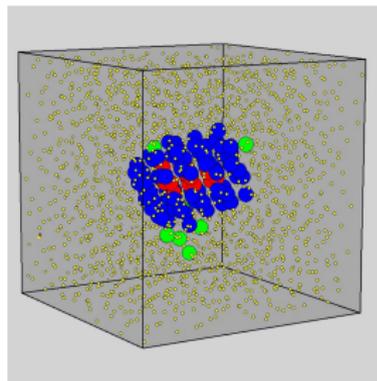
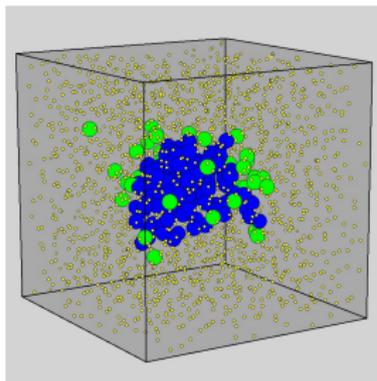
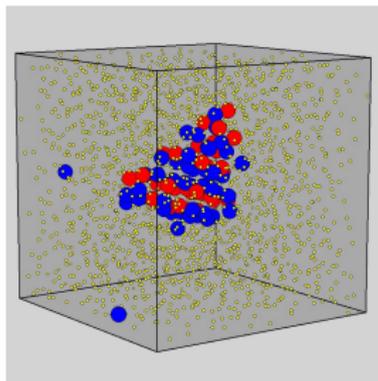
Nella simulazione, la barriera di nucleazione viene ricostruita a partire dalla distribuzione statistica delle dimensioni del cluster solido

La nucleazione del ghiaccio è un problema difficile per l'esistenza di più strutture pressoché degeneri (ghiaccio esagonale, ghiaccio cubico e ghiaccio "zero")

Ho adottato il modello detto *monatomic water* (V. Molinero e E. B. Moore, 2009)

- Vari protocolli, tutti ragionevoli, per identificare le particelle solidlike
- L'impatto è più forte sul raggio critico che sull'altezza della barriera
- I diversi protocolli non concordano sulla struttura del cluster critico
- Conclusione: i metodi di classificazione delle particelle solidlike che funzionano per il liquido Lennard-Jones sono insufficienti per l'acqua

3. Così nasce un cristallo



Struttura tipica del cluster critico secondo tre diversi schemi di classificazione delle particelle, nel liquido profondamente sottoraffreddato. Colori diversi si riferiscono a fasi diverse: liquido (simboli gialli, ridotti per vedere meglio il cluster); ghiaccio esagonale (blu); ghiaccio cubico (rosso); ghiaccio “zero” (verde)

4. Il cristallo si fa quantistico

Svolgo questa ricerca in collaborazione con Alessandro Sergi ed Ezio Bruno (prof. di Fisica ad Ingegneria)

La cristallizzazione di bosoni identici a $T = 0$ (Pomeau e Rica, Josserand *et al.*, Cinti *et al.*, Kunimi e Kato) è un caso, dei più semplici, di *transizione quantistica*

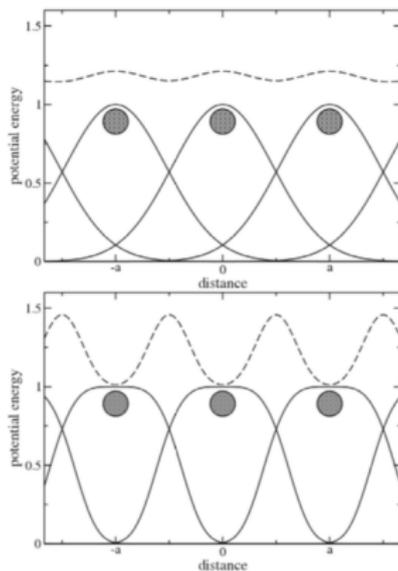
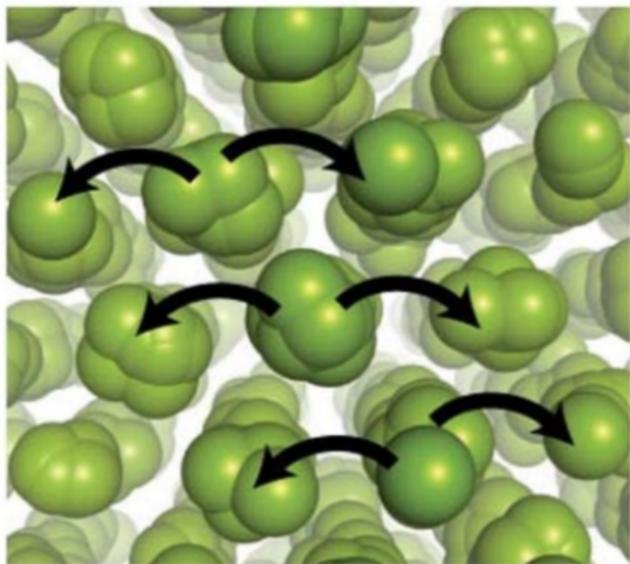
Se l'interazione tra le particelle è *debole*, può bastare una teoria di campo medio (teoria di Hartree):

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \psi_0(\mathbf{x}_1) \cdots \psi_0(\mathbf{x}_N)$$

Lo stato fondamentale del sistema è un condensato perfetto

Il meccanismo della cristallizzazione è puramente *energetico*

4. Il cristallo si fa quantistico



Tratteggiato a destra è il landscape di energia potenziale per due potenziali stabili (sopra: $\tilde{u}(k) > 0$ sempre; sotto: $\tilde{u}(k)$ prende anche valori negativi)

4. Il cristallo si fa quantistico

Rappresentiamo il cristallo mediante la funzione d'onda (*teoria 1*):

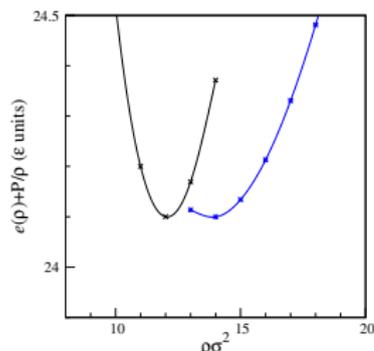
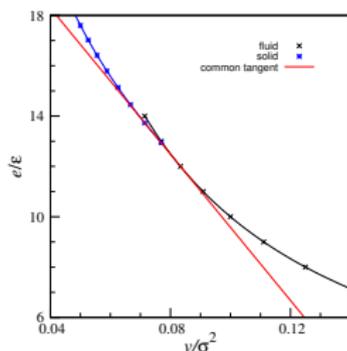
$$\psi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{R}} \exp \left\{ -\alpha \left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{R}}{a} \right)^2 \right\}$$

α ed a (il passo reticolare) sono parametri da ottimizzare richiedendo che sia minima l'energia per particella ($\bar{\alpha} = 0$ nel fluido)

Nella *teoria 2*, è il modulo quadrato della funzione d'onda ad essere scritto come somma di gaussiane

- Per $d = 1$, la transizione da fluido a solido esiste ed è continua. La pressione P_c di transizione è calcolata esattamente ed è la stessa nelle teorie 1 e 2
- Gli andamenti di $\bar{\alpha}$ e \bar{a} vicino a P_c sono calcolati analiticamente
- Anche il limite delle alte densità è stato analizzato in dettaglio
- Nel solido la frazione superfluida è 1 alla transizione e poi diminuisce progressivamente al crescere della pressione

4. Il cristallo si fa quantistico



Dati per il reticolo triangolare (il cristallo più stabile per $d = 2$).

A sinistra: energia di fluido e solido in funzione di $v = \rho^{-1}$ (nero: fluido; blu: solido). A destra: entalpia generalizzata in funzione della densità per $P = P_c$

Abbiamo anche formulato una teoria dell'interfaccia solido-liquido alla coesistenza e una teoria (di campo medio) della nucleazione quantistica

Grazie per l'attenzione!