

INDICE

INTRODUZIONE -----	3
1 Struttura del Dipartimento -----	4
2 Organi -----	6
3 Personale -----	7
3.1 Professori di ruolo-----	7
3.2 Ricercatori ed Assistenti di ruolo-----	8
3.3 Lettori di lingue-----	8
3.4 Personale Tecnico-Amministrativo dell'Università-----	8
3.5 Personale Tecnico-Amministrativo dell'INFN-----	9
3.6 Borsisti Post-Doc e Post-Laurea, Dottorandi, Visitatori-----	9
4 Discipline afferenti al Dipartimento di Fisica -----	10
4.1 Facoltà di Scienze-----	10
4.2 Facoltà di Ingegneria-----	11
4.3 Laboratori Didattici-----	11
5 Dottorato in Fisica -----	12
6 Seminario Fisico -----	13
7 Tesi di Laurea e di Dottorato in Fisica -----	14
8 Linee di Ricerca -----	15
8.1 Produzione di Plasma da Interazione di Fasci Laser con la Materia-----	16
8.2 Scintillatori Plastici in Adroterapia-----	18
8.3 Caratterizzazione e Trattamento di Materiali Biocompatibili-----	20
8.4 Sistemi Modello in Fisica della Materia Condensata-----	22
8.5 Reazioni Nucleari tra Ioni di Massa Media alle Energie Basse ed Intermedie-----	24
8.6 Fisica Subnucleare senza acceleratori e Fisica dei neutrini-----	25
8.7 Produzione di ioni da interazione laser metalli-----	25
8.8 Materiali Amorfi-----	28
8.9 Proprietà elettroniche e stabilità di fase di leghe metalliche-----	31
8.10 Proprietà strutturali e dinamiche in liquidi associati e sistemi dispersi-----	33
8.11 Dinamica della fusione-fissione e produzione dei nuclei superpesanti-----	39
8.12 Simulazione e teoria di fluidi multicomponenti e sistemi dinamici non lineari-----	41
8.13 Fisica dei Sistemi Complessi-----	42
8.14 Teoria dell'effetto Auger, proprietà elettroniche di metalli e semiconduttori-----	45
8.15 Studio di modelli e strumenti per il controllo ambientale degli spazi confinati-----	46
8.16 Studio teorico-sperimentale di tecnologie innovative di raffreddamento (refrigerazione termoacustica)-----	46
8.17 Sviluppo di applicazioni su cluster di PC a basso costo-----	48
8.18 Studio computazionale di materiali avanzati-----	49
8.19 Polimorfismo di liquidi semplici-----	50
8.20 Letteratura canadese-----	51
A. Contatti: telefono e posta elettronica e fax -----	52

INTRODUZIONE

L'anno 2000 è il dodicesimo anno di vita del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina, costituito l'01/01/1989 per proseguire le attività del preesistente Istituto di Fisica. Il Dipartimento è costituito da 25 professori di ruolo, 13 ricercatori, 1 assistente di ruolo, 4 lettori, 16 unità di personale tecnico e amministrativo più 4 dipendenti dell'INFN. Il Dipartimento è sede autonoma del Dottorato di Ricerca in Fisica dall'anno della sua costituzione. La maggioranza dei docenti e dei ricercatori del Dipartimento svolge la propria attività di ricerca nella locale Unità dell'Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN). Una parte della ricerca è finanziata poi dall'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN) e dal Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR). Alcuni docenti del Dipartimento ricoprono ruoli di responsabilità gestionale e scientifica negli enti di ricerca e presso laboratori nazionali e internazionali. La produzione scientifica è documentata da un congruo numero di lavori su riviste internazionali (100 in totale nell'anno solare 2000) e dalla partecipazione a congressi internazionali. Il potenziamento dell'attività realizzato negli ultimi anni è legato anche alla crescita della disponibilità di borse di studio di dottorato (15) e post-laurea (1) e post-dottorato (6), utilizzate presso il Dipartimento da giovani ricercatori italiani e stranieri. Il Dipartimento di Fisica offre le competenze per l'insegnamento delle discipline fisiche per l'Università di Messina: in particolare nei corsi di Laurea e di Diploma delle Facoltà di Scienze MM.FF.NN., Ingegneria e Farmacia. Tutti i ricercatori hanno svolto nell'anno accademico 1999/00 un corso ufficiale. Il Dipartimento è poi impegnato in modo particolare nella preparazione dei futuri fisici. Parte integrante della formazione del fisico, oltre ai corsi istituzionali, è la tesi di laurea che porta, di norma, ad inserire per un anno lo studente nella ricerca, spesso con l'opportunità di raggiungere risultati originali. Nell'anno 2000 sono state portate a termine, presso il Dipartimento di Fisica, 7 tesi di Laurea e 5 tesi di Dottorato di Ricerca (XIII Ciclo).

1 - Struttura del Dipartimento

Il Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina è articolato in quattro *Sezioni* e un *Gruppo Operativo*:

Sezione di Struttura della Materia
Sezione di Fisica Teorica
Sezione di Fisica Nucleare
Sezione di Lingue
Gruppo Operativo di Fisica Applicata *

*Il Gruppo Operativo di Fisica Applicata può svolgere anche attività di consulenza conto terzi nelle seguenti discipline:

Fisica Ambientale
Conservazione dei Beni culturali
Criminalistica

Presso il Dipartimento operano:

11 Professori Ordinari
14 Professori Associati
13 Ricercatori
4 Lettori
5 Borsisti
9 Dottorandi
19 Unità di personale Tecnico e Amministrativo (Università)
4 Unità di personale Tecnico e Amministrativo (I.N.F.N.)

Inoltre presso il Dipartimento operano numerosi docenti, tecnici ed amministrativi associati ad Unità di Ricerca dei seguenti organismi nazionali:

Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFN)
Gruppo Nazionale di Struttura della Materia (GNSM - CNR)
Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN)

Presso il Dipartimento sono attivati:

Un corso di Dottorato di ricerca in Fisica
Un Seminario Fisico.

I corsi di laurea che si avvalgono dei laboratori didattici del Dipartimento sono:

Corso di laurea	in Fisica in Chimica in Matematica in Scienze Biologiche in Scienze Naturali in Ingegneria Civile in Ingegneria Elettronica in Ingegneria dei Materiali
-----------------	--

Corso di diploma in Informatica

Si sono svolte, nell'anno 2000, le seguenti attività di ricerca:

Fisica delle Basse Temperature
Struttura della Materia
Fisica del Nucleo
Varie attività di Fisica Generale

2 Organi

Sono organi del Dipartimento il *Consiglio*, il *Direttore* e la *Giunta*.

Consiglio di Dipartimento

11 Professori Ordinari, 14 Professori Associati, 13 Ricercatori Universitari, 1 Assistente ordinario, il Segretario Amministrativo, 1 Rappresentante dei dottorandi di ricerca, 1 Rappresentante del personale tecnico-amministrativo.

Direttore

G. CARINI

Segr. Amm.vo:

M. BARONE

Giunta

M.C. ABRAMO

D. DE PASQUALE

W. FENTON

G. GIARDINA

B. GINATEMPO

E. S. GIULIANO

G. MALESCIO

P. MIGLIARDO

G. TRIPODO

F. WANDERLINGH

3) PERSONALE

3.1 Professori di ruolo

M.C. ABRAMO	Associato di Meccanica Statistica
P. BALLONE	Associato di Struttura della Materia
C. BARNA'	Associato di Fisica Nucleare
C. CACCAMO	Straordinario di Struttura della Materia
G. CANNISTRARO	Associato di Fisica Tecnica
G. CARINI	Ordinario di Fisica Generale
G. CUBIOTTI	Ordinario di Fisica dello Stato Solido
M. CUTRONI	Straordinario di Fisica Generale
P. D'AGOSTINO	Associato di Fisica Generale
V. D'AMICO	Associato di Fisica
D. DE PASQUALE	Associato di Istituzioni di Fisica Nucleare
G. FAZIO	Associato di Complementi di Fisica
G. GALLI	Associato di Fisica Generale
P. GIAQUINTA	Ordinario di Fisica dei Liquidi
G. GIARDINA	Straordinario di Fisica Generale
B. GINATEMPO	Associato di Fisica Generale
E. S. GIULIANO	Ordinario di Struttura della Materia
G. MAISANO	Ordinario di Fisica Generale
F. MALLAMACE	Straordinario di Fisica Generale
P. MIGLIARDO	Ordinario di Fisica Generale
G. PIZZIMENTI	Ass. di Metodi Matematici della Fisica
R. RUGGERI	Associato di Ottica Elettronica
M. RUSSO	Ass. di Sistemi di Elab. delle Informazioni
L. TORRISI	Associato di Fisica
F. WANDERLINGH	Ordinario di Fisica Generale

3.2 Ricercatori ed Assistenti di ruolo

F. BROCCIO	Ass. di ruolo Settore "Geofisica"
E. BRUNO	Settore "Struttura della Materia"
G. D'ANGELO	Ricercatore "INFM"
M. FEDERICO	Settore "Fisica Generale"
W. FENTON	Settore "Lingue"
R. GIORDANO	Settore "Fisica"
A. ITALIANO	Ricercatore "INFN"
S. MAGAZU'	Settore "Fisica Generale"
D. MAJOLINO	Settore "Fisica Generale"
G. MALESCIO	Settore "Struttura della materia "
A. PICCOLO	Settore "Fisica tecnica"
G. TRIPODO	Settore "Fisica Generale"
S. TROZZI	Settore "Lingue"
U. WANDERLINGH	Settore "Fisica Generale"

3.3 Lettori di lingue

H. PEEBLEES
F. PRESTILEO
R. RACIDI
M. VALENTINI

3.4) Personale Tecnico-Amministrativo

Segreteria Amministrativa

M. BARONE	Funzionario Amministrativo
M. CALVO	Assistente Tecnico
S. CELONA	Assistente Tecnico
D. COSIO	Agente Tecnico
A. DENARO	Assistente Amministrativo
P. DONATO	Operatore Tecnico

M. FARO	Collaboratore Amministrativo
V. FURCI	Collaboratore Contabile
C. GENTILE	Coordinatore Tecnico
S. INTERDONATO	Coordinatore Tecnico
F. PAGANO	Operatore Tecnico
L. PARISI	Operatore Amministrativo
S. RANDO	Operatore di Biblioteca
G. SALVATI	Funzionario di Biblioteca
M. SCIMONE	Collaboratore Tecnico
C. SILIPIGNI	Collaboratore di Biblioteca

3.5) Personale Tecnico-Amministrativo dell'I. N. F. N.

D. COSIO	Specialista Tecnico Ente Ricerca
F. FIORENTINO	Collaboratore Tecnico Ente Ricerca
A. RUGGERI	Tecnologo

Personale Tecnico-Amministrativo INFM

E. COSIO	Contrattista
----------	--------------

3.6) Borsisti Post-doc e Post-Laurea, Assegnisti, Dottorandi

D. COSTA, V. CRUPI, A. MANDANICI, S. PRESTIPINO GIARRITTA, A. TACCONE

Dottorandi

C. BRANCA, L. DE FRANCESCO, R. PONTERIO, A. TRIFIRO', G. FAGGIO, A. FARAONE, G. PELLICANE, M. TRIMARCHI, V. VENUTI, A. FIORINO, P. GAMBADAURO, F. MICALI, F. MIGLIARDO.

4 - Discipline afferenti al Dipartimento di Fisica

4.1 Facoltà di Scienze

Corso di Laurea in Fisica

Complementi di Fisica
Esperimentazioni di Fisica Gen. I
Fisica dello Stato Solido
Fisica Generale I
Fisica Generale II
Fisica dei Liquidi
Fisica Nucleare
Fisica Numerica
Fisica Superiore
Fisica Teorica
Istituzioni di Fisica Nucleare
Istituzioni di Fisica Teorica
Laboratorio di Fisica I
Meccanica Statistica
Optica Elettronica
Preparazione di Esperienze Didattiche I
Struttura della Materia
Laboratorio di Fisica Nucleare
Reazioni Nucleari
Spettroscopia Nucleare
Fisica degli Acceleratori
Fisica dei Dispositivi Elettronici
Metodi Computazionali della Fisica
Radioattività
Reazioni Nucleari
Laboratorio di Fisica della Materia
Acustica
Fisica dei Materiali
Fisica dei Metalli
Fisica dei Polimeri
Fisica delle Basse Temperature
Fisica Molecolare
Spettroscopia
Lingua Inglese
Laboratorio di Tecnologie Fisiche
Metodologie Fisiche per i Beni Culturali
Spettroscopia
Preparazione di Esperienze Didattiche
Geofisica
Laboratorio di Geofisica
Fisica della Terra Solida
Sismologia
Sismologia Teorica

Corso di Laurea in Chimica

Esercitazioni di Fisica Sperimentale
Fisica Sperimentale I
Fisica Sperimentale II
Lingua Inglese

Corso di Laurea in Matematica

Fisica Generale I
Fisica Generale II
Preparazioni di Esperienze Didattiche
Lingua Inglese

Corso di Laurea in Scienze Biologiche

Laboratorio di Fisica
Fisica
Lingua Inglese

Corso di Laurea in Scienze Naturali

Fisica

Corso di Diploma in Informatica

Architettura degli Elaboratori
Linguaggi di Programmazione
Calcolo delle Probabilità e Statistica Matematica
Laboratorio di Informatica II
Fisica
Elementi di Progettazione di Sistemi Digitali

4.2 Facoltà di Ingegneria

Fisica I (2 Corsi)
Sperimentazione Fisica
Fisica II
Lingua Inglese

4.3 Laboratori didattici

1. Esperimentazioni di Fisica I	(per Fisici)
2. Esperimentazioni di Fisica II	"
3. Esperimentazioni di Fisica III	"
4. Laboratorio I	"
5. Laboratorio II	(per Fisici)
5. Preparazioni di Esperienze Didattiche I	"
6. Preparazioni di Esperienze Didattiche II	"
7. Laboratorio di Fisica	(per Biologi)
8. Preparazioni di Esperienze Didattiche	(per Matematici)
9. Esercitazioni di Fisica Sperimentale	(per Chimici)
10. Laboratorio Informatizzato CALL	(Computer Assisted Language Learning)

5 Dottorato di Ricerca in Fisica

Il primo Dottorato di Ricerca in Fisica è stato istituito nell'anno 1985 ed è continuato ininterrottamente fino all'anno solare 2000. In questo anno si sono tenuti i cicli XIII, XIV, XV.

Coordinatore Prof. Placido Migliardo.

I seguenti cicli di lezioni (moduli) sono stati tenuti da docenti afferenti al Dipartimento di Fisica durante l'anno solare 2000:

- 1) Metodi Matematici per la Fisica:
Dott. S. Savasta (1 modulo)
Prof. F. Borghese (1 modulo)
- 2) Fisica Teorica:
Dott. E. Bruno (1 modulo)
Prof. F. Wanderlingh (1 modulo)
Prof. C. Caccamo (1 modulo)
- 3) Fisica Nucleare e Subnucleare:
Prof. G. Giardina (1 modulo)
- 4) Fisica degli Stati Condensati:
Prof. B. Ginatempo (1 modulo)
Dott. E. Bruno (1 modulo)
- 5) Spettroscopia:
Prof. F. Wanderlingh (1 modulo)
Dott. U. Wanderlingh (1 modulo)
Dott. V. Crupi (1 modulo)
Prof. C. Caccamo (1 modulo)

P.S.: Un modulo è composto da circa 10 lezioni.

6 Seminario Fisico

Direttore: Prof. F. Wanderlingh

Il Seminario Fisico è un Istituto della Facoltà di Scienze che promuove ed organizza Seminari, sia a carattere fondamentale che divulgativo, incontri e discussioni su argomenti scientifici e supporta attività simili, liberamente organizzate da Docenti e Ricercatori dell'area Fisica.

E' continuata l'attività del Gruppo di Lavoro denominato "Fisica 2000", costituito allo scopo di rivedere criticamente l'organizzazione dell'insegnamento della Fisica, specie in relazione alla futura ristrutturazione del Corso di Laurea. Scopo finale del Gruppo è pervenire alla realizzazione di un iper-testo, sia in formato cartaceo che su CD. Il Gruppo, di cui fanno parte una ventina di persone, fra colleghi e studenti, si è riunito varie volte sviluppando proficue discussioni e, si è intensificata la redazione e raccolta di materiale, sia cartaceo che su floppy disk.

In questo contesto è stato anche masterizzato un CD in un centinaio di copie distribuite a docenti e studenti (della SISSIS), contenente le linee guida di un iper-testo per l'insegnamento della Fisica.

Infine, nel quadro della sua normale attività, ha supportato l'organizzazione di alcuni Seminari, da parte di Ricercatori stranieri e nazionali che in tal modo hanno potuto visitare la nostra Sede e stabilire rapporti di collaborazione scientifica con alcuni ricercatori del Dipartimento.

Citiamo, fra l'altro, i seguenti:

Benyaich, dell'Università del Marocco, "XRF Analysis Geological and Enviromental Applications";

Orselli, dell'Università La Sapienza di Roma, "Metodi di variazione di contrasto in SANS e RI per verificare lo stato d'aggregazione del complesso ribosomale 70S da organismi estremofili"

7 Tesi di Laurea e di dottorati di ricerca in Fisica

Tesi di dottorato

1. Di Stefano Omar: " Light-matter interaction in quantum structures: Local optical spectroscopy, light quantization, strong coupling regime".
2. Faraone Antonio: " Spettroscopia a correlazione di fotoni e scattering di neutroni in soluzioni polimeriche".
3. Pellicane Giuseppe: " Structure and phase equilibria in simple models of complex fluids".
4. Trimarchi Marina: " Study of proton sequential emission in heavy-ion deep inelastic reactions by residue-particle angular correlations: $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ reaction at $E(^{16}\text{O})=132\text{MeV}$ ".
5. Venuti Valentina: " Proprietà diffusionali e vibrazionali di liquidi a legame idrogeno in bulk e confinati".

Tesi di Laurea

Siragusa Carmelo: "Sviluppo di scintillatori plastici per la caratterizzazione in dose ed energia di fasci adronici". Rel. Prof. C. Barnà.

Travaglia Giovanna: "Studio di prototipi di camere ad elettrodi piani resistivi per il trigger muonico di A.L.I.C.E. Rel. Prof. De Pasquale.

Auditore Lucrezia: "Studio delle correlazioni di coppia tramite reazioni di trasferimento fra ioni pesanti". Prof. De Pasquale.

Zingales Leon: "Correlazioni elettroniche e proprietà macroscopiche in sistemi metallici: analisi di un modello unidimensionali". Rel. Dott. E. Bruno.

Amato Ernesto: "Studio delle possibilità di rivelazioni di neutrini di neutrini di supernovae in apparati Cerenkov sottomarini". Rel. Prof. De Pasquale.

Broccio Matteo: "Instabilità dinamiche nelle correnti dello Stretto di Messina". Rel. Prof. F. Wanderlingh.

Midiri Federica: "Tecniche nucleari nel campo sanitario a irraggiamento interno ed esterno". Rel. Prof. L. Torrisi.

8) ATTIVITA' DI RICERCA

Le attività di Ricerca del Dipartimento si articolano in 20 linee di ricerca:

5 in Fisica Teorica della Materia Condensata

6 in Fisica Sperimentale della Materia Condensata

5 in Fisica Nucleare

2 in Fisica Applicata in settori diversi

1 in Calcolo parallelo

1 in Letteratura Canadese

Le pubblicazioni su riviste scientifiche internazionali nel 2000 sono 100.

Le linee di ricerca vengono sinteticamente descritte qui di seguito a cura degli stessi responsabili.

- 1 Produzione di Plasma da Interazione di Fasci Laser con la Materia
- 2 Scintillatori Plastici in Adroterapia
- 3 Caratterizzazione e Trattamento di Materiali Biocompatibili
- 4 Sistemi Modello in Fisica della Materia Condensata
- 5 Reazioni Nucleari tra Ioni di Massa Media alle Energie Basse ed Intermedie
- 6 Fisica Subnucleare senza acceleratori e Fisica dei neutrini
- 7 Produzione di ioni da interazione laser metalli
- 8 Materiali Amorfi
- 9 Proprietà elettroniche e stabilità di fase di leghe metalliche
- 10 Proprietà strutturali e dinamiche in liquidi associati e sistemi dispersi
- 11 Dinamica della fusione-fissione e produzione dei nuclei superpesanti
- 12 Simulazione e teoria di fluidi multicomponenti e sistemi dinamici non lineari
- 13 Fisica dei Sistemi Complessi
- 14 Teoria dell'effetto Auger, proprietà elettroniche di metalli e semiconduttori
- 15 Studio di modelli e strumenti per il controllo ambientale degli spazi confinati
- 16 Studio teorico-sperimentale di tecnologie innovative di raffreddamento (refrigerazione termoacustica)
- 17 Sviluppo di applicazioni su cluster di PC a basso costo
- 18 Studio computazionale di materiali avanzati
- 19 Polimorfismo di liquidi semplici
- 20 Letteratura Canadese

Una breve descrizione delle ricerche svolte è riportata nelle pagine seguenti a cura degli stessi responsabili.

8.1 PRODUZIONE DI PLASMA DA INTERAZIONE DI FASCI LASER CON LA MATERIA

L. Torrisci¹, S. Gammino², G. Ciavola², L. Andò², L. Laska³, J. Krasa³

1 Dipartimento di Fisica, Università di Messina

2 INFN-Laboratori Nazionali del Sud, Catania

3 Institute of Physics, ASCR, Prague, Czech Republic

Viene utilizzato un Q-switched Nd:Yag pulsed laser, 1064 nm lunghezza d'onda, 9 ns durata dell'impulso, di alta potenza ($\sim 10^{10}$ W/cm²) per irradiare sottovuoto targhette di tipo metallico (Al, Ti, Ni, Cu, Nb, Sn, Ta, W, Au e Pb). Nonostante l'alta riflettività del metallo, la frazione di energia assorbita dà luogo a fenomeni di non equilibrio conducenti alla emissione di atomi e particelle dalla targhetta. In particolare vengono stimati i tassi di etching metallico, dell'ordine di qualche micron/pulse, le distribuzioni angolari del materiale emesso, fortemente piccate in avanti lungo la normale alla superficie della targhetta e l'emissione di ioni. Il materiale emesso mostra una componente neutra ($\sim 50\%$ - 90%) ed una ionizzata ($\sim 10\%$ - 50%) che danno luogo alla formazione di un plasma che si espande liberamente ed adiabaticamente in vuoto. Misure di tempo di volo hanno permesso di valutare le velocità e le energie medie degli ioni emessi. Ad alte fluente laser le distribuzioni di velocità mostrano valori medi attorno a 10^4 m/s ed energie ioniche che possono spingersi anche fino a 8 keV. Lo stato di carica dello ione cresce linearmente con l'energia dell'impulso laser. Stati di carica fino a 10+ sono stati ottenuti per ioni oro.

Finanziamento:

Fondi INFN-Gr.V, Progetto ECLISSE

Pubblicazioni:

- 1) S. Gammino, G. Ciavola, L. Torrisci, L. Celona, J. Wolowski, E. Woryna, P. Parys, L. Laska, J. Krasa and G.D. Shirkov
"Preliminary tests for the ECLISSE experiment"
Rev. Sci. Instr. 71(2), 1119, 2000
- 2) J. Wolowski, P. Parys, E. Woryna, J. Krasa, L. Laska, K. Rohlena, S. Gammino, L. Torrisci, F.P. Body, R. Hopfl, H. Hora and H. Haseroth
"Laser ion source for various applications"
Optica Appl. V. XXX(1), 69-82, 2000
- 3) L. Torrisci, L. Andò, G. Ciavola and A. Barnà
"Angular distribution of Ejected atoms from Nd:Yag laser irradiating metals"
Rev. Sci. Instr., 72(1), 68-72, 2000
- 4) L. Torrisci, S. Gammino, G. Ciavola and L. Andò
"Ion production by pulsed laser beam"
Rep. INFN-LNS Activity 96-99, 233-236, INFN Publ. 2000
- 5) L. Torrisci, L. Andò, S. Gammino, G. Ciavola, L. Celona, S. Genovese, L. Laska and J. Krasa
"Intense flow of neutral and ions from laser ablation of metals"
Proc. PIBHI 2000, in press
- 6) L. Andò, L. Torrisci, S. Gammino, G. Ciavola, L. Celona, L. Laska, J. Krasa, J. Wolowski, E. Woryna and S.D. Shirkov
"Slow ion beams from a laser ion source for the eclisse experiment"
Proc. PIBHI 2000, in press

- 7) J. Wolowski, L. Andò, S. Gammino, J. Krasa, L. Laska, P. Parys, K. Rohlena, L. Torrisci and E. Woryna
 “Application of ion diagnostic method to optimization of the laser ion sources”
 Proc. PIBHI 2000, in press
- 8) S. Gammino, G. Ciavola, L. Torrisci, L. Andò, L. Celona, L. Laska, J. Krasa, J. Wolowski, E. Worina, P. Parys and G.D. Shirkov
 “Production of slow ion beams from a laser ion source”
 Proc. ECRIS 2000, in press

Partecipazione a Congressi:

- S. Gammino, G. Ciavola, L. Torrisci, L. Andò, L. Celona, L. Laska, J. Krasa, J. Wolowski, E. Woryna, P. Parys and G.D. Shirkov
 “Production of ion beams from laser ion source”
 EPAC 7th European Particle Accelerator Conference, A Europhysic conference, Vienna, 26-30 June, 2000
- L. Torrisci, L. Andò, S. Gammino e G. Ciavola
 “Sorgenti laser per fasci di ioni metallici”
 LXXXVI Congr. Naz. SIF, Palermo, 6-11 Ottobre
- L. Andò, S. Gammino, G. Ciavola, L. Torrisci, L. Celona, L. Laska, J. Krasa, J. Wolowski, E. Woryna, P. Paris and G.D. Shirkov
 “Production of slow ion beams from a laser ion source”
 Workshop P.I.B.H.I., INFN-LNS, Catania, 24-27 Ottobre, 2000
- L. Torrisci, S. Gammino, G. Ciavola, L. Andò, L. Laska and J. Krasa
 “Ions production for ECR source by means of infrared pulsed laser”
 Workshop P.I.B.H.I., INFN-LNS, Catania, 24-27 Ottobre, 2000

8.2 SCINTILLATORI PLASTICI IN ADROTERAPIA

L. Torrisi¹, R. Barnà¹, C. Gentile¹, A. Mezzasalma², A. Piermattei³, G. Cuttone⁴

1 Dipartimento di Fisica, Università di Messina

2 Dipartimento di Fisica della Materia e Tecnologie fisiche avanzate, Università di Messina

3 Dipartimento di Fisica, Università Cattolica, Roma

4 INFN-Laboratori Nazionali del Sud, Catania

Polimeri organici, come poliviniltoluene (PVT), mostrano notevole luminescenza quando vengono irradiati con particelle cariche. La luminescenza è emessa prevalentemente nel visibile con un massimo a 423 nm. L'efficienza di conversione è elevata e la risposta veloce (tempo di decadimento 2 ns). Tali materiali, inoltre, sono perfettamente tessuto-equivalente e possono essere utilizzati sottoforma di strutture micrometriche. Per tali proprietà si prestano bene per la realizzazione di possibili dosimetri relativi "on line", ad alta risoluzione spaziale, nel campo della radioterapia tradizionale con fasci di elettroni e della adroterapia, prevalentemente eseguita con fasci di protoni. La luminescenza prodotta dipende linearmente dalla fluenza delle particelle del fascio e dal tempo di irraggiamento. Tuttavia, effetti di quenching si presentano ad elevati valori di stopping powers. Per questo motivo gli scintillatori dimostrano una sottostima di dose attorno al picco di Bragg delle curve dose-profondità. La sottostima è dell'ordine del 10%. L'effetto di radiation damage è trascurabile per le dosi adoperate in radioterapia. A dosi attorno ad 1 K Gy la resa di luminescenza subisce una riduzione di circa il 15% a causa di effetti di scission e cross-links prodotti da particelle cariche ad alto LET. Scintillatori micrometrici in cima ad una fibra ottica non scintillante possono permettere la misura all'interno del fantoccio e direttamente "in vivo" nel paziente.

Finanziamento:

Fondi Cofinanziamento Murst 40% : Resp.le Nazionale A. Piermattei, Resp.le Locale L. Torrisi

Pubblicazioni:

- 9) L. Torrisi, A. Desiderio and G. Foti
"High energy proton induced luminescence in F-doped polyvinyltoluene"
Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B, 166-167, 664-668, 2000
- 10) L. Torrisi
"Plastic scintillator investigation for relative dosimetry in proton-therapy"
Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B 170, 523-530, 2000
- 11) L. Torrisi
"Radiation damage in PVT (PolyVinylToluene) induced by energetic ions"
Proc. MODEST 2000, in press
- 12) L. Torrisi, G. Cottone, L. Raffaele and A. Rovelli
"Plastic scintillators as relative dosimeters in proton-therapy"
Rep. INFN-LNS Activity 96-99, 324-327, INFN Publ. 2000
- 13) U. Abbondanno, S. Carturan, G. Della Mea, F. Gramigna, G. Maggioni, P.M. Milazzo, U. Pieri, A. Quaranta, D. Rifuggiato, V. Rigato, F. Sonetto and L. Torrisi
"Spectral and efficiency analysis of polyimide based thin scintillating films"
LNL-INFN Annual report 1999 160/00,81-82, INFN Publ. 2000

Partecipazione a Congressi:

- L. Torrasi
“Radiation damage in Polyvinyltoluene (PVT)”
1st Int. Conf. Mo.De.St, Palermo, Sept. 3-7, 2000
- L. Torrasi
“Dosimetria relativa con scintillatori plastici in protonterapia”
LXXXVI Congr. Naz. SIF, Palermo, 6-11 Ottobre 2000
- F. Midili e L. Torrasi
“Monitoraggio di 40K riasciato in liquidi biologici”
LXXXVI Congr. Naz. SIF, Palermo, 6-11 Ottobre 2000
- U. Abbondanno, P.M. Milazzo, F. Tonetto, D. Boscarino, S. Carturan, G. Della Mea,
F. Gramegna, G. Maggioni, P.F. Mastinu, A. Quaranta, U. Pieri, V. Rigato, A. Vomiero,
D. Rifuggiato e L. Torrasi
“Sviluppo di film scintillanti per la realizzazione di rivelatori phoswich”
LXXXVI Congr. Naz. SIF, Palermo, 6-11 Ottobre 2000

8.3 CARATTERIZZAZIONE E TRATTAMENTO DI MATERIALI BIOCOMPATIBILI

L. Torrisi¹, G. Mondio², A. Mezzasalma², P. Parisi¹, C. Gentile¹, E. Rapisarda³, A. Patti⁴,
S. Trusso⁵, G. Di Marco⁵, A. Valenza⁶

1 Dipartimento di Fisica, Università di Messina

2 Dipartimento di Fisica della Materia e Tecnologie fisiche avanzate, Università di Messina

3 Clinica Odontoiatrica I, Università di Catania

4 Istituto di Igiene, Università la Sapienza, Roma

5 Istituto di Tecniche Spettroscopiche del CNR, Messina

6 Dipartimento di Chimica industriale ed Ingegneria dei Materiali, Università di Messina

La Fisica dei materiali e delle superfici occupa un ruolo significativo nella preparazione di protesi ed impianti biocompatibili. In particolare il rivestimento con film sottili svolge un ruolo essenziale nella preparazione del campione da immettere all'interno del corpo umano. Film di idrossiapatite, una bioceramica altamente osseointegrabile, sono stati depositati con tecniche di laser pulsato (PLD) su superfici di titanio. I film ottenuti sono di tipo granulare (grani dell'ordine di qualche micron), stechiometrici e, se preparati a temperature attorno a 400 °C, sono policristallini e ben aderenti al substrato. Analisi di assorbimento IR, Raman, XRD e di microscopia elettronica, hanno permesso di caratterizzare fisicamente i film fotodepositati. Tali film sono molto promettenti nel rivestimento di protesi da ancorare al tessuto osseo (impianti dentali, protesi d'anca e di ginocchio). I materiali superelastici e a memoria di forma a base di NiTi permettono di realizzare strumenti Bio-medici e protesi con peculiari proprietà. Particolari applicazioni della lega NiTi riguardano i dispositivi endodontici (lime del canale dentinale), dispositivi ortodontici (fili di allineamento dentale) e protesi ortopediche (griffe e ganci ossei). Durante il loro utilizzo tali dispositivi possono rilasciare Ni. Tale elemento ha un significativo grado di tossicità specie in soggetti allergici. Il rilascio di Ni può essere ridotto con opportuni trattamenti ai quali può essere sottoposto preventivamente il materiale. Tra i possibili trattamenti, il processo di nitrurazione permette di realizzare uno strato di nitruro di titanio che passiva chimicamente la lega impedendone il rilascio ionico, indurendone la superficie e riducendone il tasso di usura. La tecnica principe adoperabile per il trattamento è quella della impiantazione di ioni azoto, di energia attorno a 300 keV e dosi dell'ordine di $10^{17}/\text{cm}^2$, che permette di modificare la superficie fino a profondità di alcune decine di nm.

Finanziamento:

Fondi MURST 60%, Dipartimento di Fisica, Messina

Pubblicazioni:

14) P. Parisi and L. Torrisi

“Physical spectroscopies of Hydroxyapatite coating for medical prosthesis”

Proc. Ceramic, Cell and Tissues 2000, IRTEC-CNR, in press

15) L. Torrisi and G. Di Marco

“Physical characterisation of endodontic instruments in NiTi alloy”

Mat. Sci. Forum, V. 327-328, 75-78, 2000

16) L. Torrisi, L. Majolino, A.M. Visco e A. Valenza

“Caratterizzazione di fili in lega NiTi utilizzati in campo ortodontico”

Proc. 5° Congr. AIMAT 2000, J.M. Kenny Ed., V.1, 53-56, 2000

17) L. Torrisi, E. Rapisarda, G. Di Marco e A. Valenza

“Caratterizzazione di dispositivi in NiTi per uso endodontico”

Proc. 5° Congr. AIMAT 2000, J.M. Kenny Ed., V.1, 49-52, 2000

- 18) E. Rapisarda, A. Bonaccorso, T.R. Tripi, G.G. Condorelli and L. Torrisi
“Wear of nickel-titanium endodontic instruments evaluated by scanning electron microscopy: effect of ion implantation.
J. of Endodontics, in press, 2000

Partecipazione a Congressi:

- P. Parisi and L. Torrisi
“Physical spectroscopies of Hydroxyapatite coating for medical prosthesis”
presented to “Ceramic, Cell and Tissues – Drug delivered system”,
Faenza, March, 2000
- S. Trusso, L. Torrisi, P. Parisi, G. di Marco and C. Gentile
“Pulsed Laser Deposition (PLD) of Hydroxyapatite by KrF excimer”
INFM Meeting, Genova, Giugno 2000
- L. Torrisi, E. Rapisarda, G. Di Marco e A. Valenza
“Caratterizzazione di dispositivi in NiTi per uso endodontico”
Proc. 5° Congr. Naz. AIMAT, Spoleto, Luglio, 2000
L. Torrisi, L. Majolino, A.M. Visco e A. Valenza
“Caratterizzazione di fili in lega NiTi utilizzati in campo ortodontico”
Proc. 5° Congr. Naz. AIMAT, Spoleto, Luglio, 2000
- G. Di Marco, C. Gentile, P. Parisi, L. Torrisi e S. Trusso
“Ablazione di idrossiapatite con laser pulsati a differenti lunghezze d’onda”
LXXXVI Congr. Naz. SIF, Palermo, 6-11 Ottobre 2000

8.4 Sistemi modello in fisica della materia condensata

Responsabile Scientifico: **Paolo V. Giaquinta**

Partecipanti: **M. G. Donato**
S. Prestipino Giarritta
F. Saija

Collaboratori: **P. Ballone**
G. Malescio
Y. Rosenfeld

CONSUNTIVO 2000

L'attività di ricerca ha riguardato i seguenti argomenti:

- Studio delle proprietà di equilibrio di liquidi classici, con particolare riferimento all'individuazione di un criterio di stabilità strutturale della fase disordinata rispetto alla fase solida basato sulle proprietà di convergenza iterativa di soluzioni numeriche approssimate dell'equazione di Ornstein-Zernike [1, 2].
- Caratterizzazione dell'ordine locale di liquidi semplici in due dimensioni attraverso l'analisi dell'entropia residua a molte particelle [3].
- Modellizzazione di leghe metalliche e studio del relativo diagramma di fase con tecniche di simulazione Monte Carlo [4, 5].

PUBBLICAZIONI

1. *Structural stability of simple classical fluids: Universal properties of the Lyapunov-exponent measure*

G. Malescio, P. V. Giaquinta, and Y. Rosenfeld
Physical Review E (The American Physical Society, New York)
61, 4090-4094 (2000)

2. *Structural stability of simple fluids and accuracy of integral-equation theories*

G. Malescio and P. V. Giaquinta
Physical Review E (The American Physical Society, New York)
62, 4439-4441 (2000)

3. *Entropy, correlations, and ordering in two dimensions*

F. Saija, S. Prestipino, and P. V. Giaquinta
Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics, New York)
113, 2806-2813 (2000)

4. Bain transformation in $Cu_x Pd_{1-x}$ ($x \sim 0.5$) alloys: An embedded atom study

M. G. Donato, P. Ballone and P. V. Giaquinta
Physical Review B (The American Physical Society, New York)
61, 24-27 (2000)

5. Modelling the phase diagram of transition metal alloys by the embedded atom method

M. G. Donato, P. Ballone, and P. V. Giaquinta
in "Nuclear and Condensed Matter Physics" (edited by A. Messina)
American Institute of Physics Conference Proceedings
CP513, 114-117 (2000)

6. Errata: Statistical entropy of a lattice-gas model: Multi-particle correlation expansion

S. Prestipino and P. V. Giaquinta
Journal of Statistical Physics (Plenum Press, New York)
98, 507-509 (2000)

E. Amato, L. Auditore, R.C. Barna', V. D'Amico, D. De Pasquale, M. De Pasquale, L. Torrisi, A. Trifirò, M. Trimarchi
A. Italiano (*Istituto Nazionale di Fisica Nucleare*)

8.5 Reazioni nucleari tra ioni di massa media alle energie basse ed intermedie.

1.1 Processi diretti

E' stato completato lo studio del sistema $^{11}\text{B} + ^{12}\text{C}$, del quale recentemente sono stati accuratamente analizzati i processi di transfer del deutone nel canale $^{11}\text{B} + ^{12}\text{C} \rightarrow ^9\text{Be} + ^{14}\text{N}^*$. In particolare, dagli spettri osservati è emersa chiaramente l'evidenza del livello $E=2.31$ MeV dell' ^{14}N , previsto dal modello a shell ma prima d'ora mai individuato.

Allo scopo di estendere la sistematica di analisi sviluppata in questo ambito, è stato iniziato lo studio del sistema $^{16}\text{O} + ^{11}\text{B}$, relativamente al quale è in corso l'analisi del canale di reazione corrispondente al transfer di cinque nucleoni, valutando altresì il contributo dei vari canali di reazione, passando dallo scattering elastico puro alla fusione completa, attraverso tutti i possibili processi di transfer elastico ed anelastico.

E' stato altresì studiato il canale $^{11}\text{B} + ^{12}\text{C} \rightarrow ^{10}\text{B}^* + ^{13}\text{C}^*$, per il quale sono state eseguite le prime stime del contributo di d-transfer dovuto all'effetto Josephson nucleare nell'ambito della teoria BCS generalizzata.

1.2 Processi di Deep Inelastic Collisions

Avendo completato l'analisi degli spettri di coincidenza \square -projectile-like particle (C, N, O) prodotti nelle collisioni profondamente anelastiche $^{16}\text{O} + ^{48}\text{Ti}$ (101 e 133.4 MeV) e $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ a 96 e 132 MeV, è stato possibile, confrontando i risultati relativi ai quattro processi studiati, confermare il carattere sequenziale delle reazioni considerate, come previsto dal modello semiclassico adottato. Questo approccio consente la separazione della yield complessiva della reazione in una componente equilibrata ed in una non equilibrata. Quest'ultima è l'oggetto del nostro interesse, in quanto, conservando l'informazione fisica sul modo di decadimento del nucleo residuo formato durante il primo step della reazione, fornisce un'informazione abbastanza precisa sul suo stato di polarizzazione. Allo scopo di studiare la variazione della direzione dell'asse di polarizzazione nello spazio, e di ottenere informazioni quantitative sul momento angolare dissipato durante la reazione, è stata completata l'analisi della correlazione angolare fra i protoni e le particelle projectile-like per la reazione $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ (132 MeV).

1.3 Processi di frammentazione: Esperimento REVERSE

Uno dei principali obiettivi della fisica degli ioni pesanti alle energie intermedie è lo studio delle proprietà dei nuclei in condizioni estreme di densità e di temperatura. Per la comprensione degli aspetti fondamentali dell'equazione di stato della materia nucleare è indispensabile uno studio sperimentale di tutti quei processi nell'ambito dei quali durante il primo stadio della collisione si formano dei sistemi che possono diseccitarsi dando luogo a frammentazione. REVERSE utilizza gli anelli agli angoli in avanti dell'apparato di rivelazione CHIMERA per identificare i prodotti delle reazioni di frammentazione in cinematica inversa utilizzando proiettili di Sn, Ni, Nb, S e F su bersagli medio-leggeri. Sono stati effettuati diversi cicli di misure sui sistemi descritti, ed è in corso il procedimento di calibrazione dei rivelatori dell'apparato, allo scopo di analizzare i dati raccolti. Contemporaneamente, sono state applicate nuove tecniche, frutto del passato lavoro di test dei rivelatori, atte alla riduzione ed allo smaltimento del calore prodotto dall'elettronica dell'apparato sperimentale, che consentiranno a breve tempo un migliore funzionamento delle corone di CHIMERA.

8.6 Fisica Subnucleare senza acceleratori e Fisica dei neutrini

1) Identificazione di sorgenti astrofisiche extragalattiche: Esperimento NEMO.

Un settore di notevole interesse riguarda la ricerca di sorgenti cosmiche di neutrini $E > 1 \text{ PeV}$ di energia elevata, per i quali è possibile eseguire un *tracking-back* per la localizzazione delle sorgenti. Una delle tecniche di rivelazione di tali particelle consiste nella misura della luce Cherenkov emessa in acqua dai muoni generati dall'interazione dei neutrini con la materia. Un telescopio sottomarino, che utilizzi questa tecnica, consentirebbe di disporre di un rivelatore di 1 km^3 di volume, come richiesto dalla rarità degli eventi. Il gruppo, impegnato nell'attività di simulazione delle interazioni del neutrino, ha sviluppato uno studio sistematico dei diversi approcci, ed è stata individuata la più idonea parametrizzazione della luce Cherenkov prodotta dagli sciame elettromagnetici emessi durante il passaggio di un muone relativistico associato al neutrino da rivelare. Inoltre, è stato sviluppato un algoritmo di ricostruzione delle tracce dei muoni, il quale, basandosi sul metodo della massima verosimiglianza, è in grado di ricostruire l'80% delle tracce dei muoni simulati.

Uno studio più recente riguarda la simulazione del rumore di fondo che inficia le misure di interesse, e consiste nel valutare i contributi separatamente dovuti al ^{40}K , alla *bioluminescenza* ed alla corrente oscura dei fototubi. Inoltre è in corso la valutazione dell'efficienza di nuovi PMT di prossimo impiego nelle misure, presso il Laboratorio di Elettronica della Sezione di Catania dell'Istituto Nazionale di Fisica Nucleare. Infine, si stanno sviluppando metodi Monte Carlo per la stima dei flussi di neutrini emessi da sorgenti cosmiche, in particolare SN.

8.7 Produzione di ioni da interazione laser-metalli

Una sorgente LIS (laser ion source) è in fase di realizzazione, presso i Laboratori Nazionali del Sud di Catania, per implementare le potenzialità della sorgente ECR (electron cyclotron resonance). Il progetto INFN- Gr.V è denominato ECLISSE.

La sorgente utilizza un laser Nd:Yag, 1064 nm di lunghezza d'onda, 900 mJ di energia massima, 9 ns di durata di singolo impulso, 30 Hz di frequenza di ripetizione, per inviare in targhetta densità di potenza dell'ordine di 10^{10} W/cm^2 . Nei metalli, l'elevata densità di potenza depositata produce fenomeni di non-equilibrio con emissione di materiale dalla targhetta. L'emissione non è isotropa ed avviene prevalentemente lungo la normale allo spot laser; essa contiene elettroni, atomi neutri ed ioni, clusters e fotoni nel range IR-raggi X.

Misure di tempo di volo, di energia e stato di carica degli ioni emessi, hanno permesso di conoscere alcune caratteristiche del plasma prodotto. La frazione di ionizzazione del plasma (componente ionizzata/neutra) varia tra 10% e 50%, in funzione dell'energia dell'impulso laser e del tipo di metallo irradiato. Le velocità e le energie medie degli ioni prodotti sono dell'ordine di 10^4 m/s e di 1-2 keV, rispettivamente. Lo stato di carica degli ioni cresce all'aumentare dell'energia dell'impulso laser. Ad alta energia sono stati raggiunti stati di carica compresi tra 1^+ e 10^+ per molti metalli.

Al lavoro collabora personale dell'INFN-LNS di Catania, personale dell'INFN e del Dipartimento di Fisica di Messina, e personale del Dipartimento di Fisica di Praga.

Collaborazioni Internazionali

Jagellonian University, Cracovia (Polonia)

COSY Laboratory, Juelich (Germania)

Institut des Recherches Subatomiques, Strasburgo (Francia)

INR of Academy of Sciences, Moscow (Russia)

Institute of Physics, Academy of Sciences of Czech Republic, Na-Slovance, Prague, Czech Republic

Pubblicazioni

R.C.Barnà, V. D'Amico, D. De Pasquale, A. Italiano, F. Migliardo, A. Trifirò, M. Trimarchi, V. Rauch, C. Beck, C. Bhattacharya, M. Rousseau, R. M. Freeman, O. Stezowski and R. Nouicer: "The (96 MeV) $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ and (133 MeV) $^{16}\text{O} + ^{48}\text{Ti}$ Sequential Collision by Residue - Particle Angular Correlations studied by means of a Semi - Classical Approach" - XVth Particles And Nuclei International Conference - June 10- 16 1999, Uppsala, Sweden

R.C.Barnà, V. D'Amico, D. De Pasquale, A. Italiano, F. Migliardo, A. Trifirò, M. Trimarchi, V. Rauch, C. Beck, C. Bhattacharya, M. Rousseau, R. M. Freeman, O. Stezowski and R. Nouicer: "Studying the (96 MeV) $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ and (133 MeV) $^{16}\text{O} + ^{48}\text{Ti}$ Sequential Collision by Residue - Particle Angular Correlations: a Semi - Classical Approach" - EPS 11 Trends in Physics Conference - September 6 - 10 1999, London, UK

R.C.Barnà, V. D'Amico, D. De Pasquale, A. Italiano, F. Migliardo, A. Trifirò, M. Trimarchi: "Study of Kinematics of A(a, b)B(c)C Sequential Reaction in the First and Second Stage" - Report INFN - BE / 99-01

R.C.Barnà, D. De Pasquale, A. Italiano, A. Trifirò, M. Trimarchi, C. Beck, T. Bellot, F. Haas, V. Rauch, M. Rousseau, O. Stezowski and A. Strazzeri: "*A Semi-Classical Approach to the Study of Sequential Collisions by Residue-Particle Angular Correlations: the (101 and 133 MeV) $^{16}\text{O} + ^{48}\text{Ti}$ and (96 MeV) $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ Reactions*", **9th International Conference on Nuclear Reaction Mechanisms**, Varenna , June, 4-9 2000.

R.C.Barnà, D. De Pasquale, A. Italiano, A. Trifirò, M. Trimarchi, V. Rauch, C. Beck, F. Haas, M. Rousseau, O. Stezowski and A. Strazzeri: "*Study of Peripheral Heavy Ion Reactions at Tandem Energies by Residue-Particle Angular Correlations: the (132 MeV) $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ Reaction*", **VII International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions**, - Strasbourg , France, July, 3-7 2000.

R.C.Barnà, C. Beck, T. Bellot, D. De Pasquale, F. Haas, A. Italiano, V. Rauch, M. Rousseau, O. Stezowsky, A. Strazzeri, A. Trifirò e M. Trimarchi: "*Un Approccio Semi-Classico allo Studio delle Reazioni Sequenziali Tramite Correlazioni Angolari Particella-Residuo: le Reazioni (101 e 133 MeV) $^{16}\text{O} + ^{48}\text{Ti}$ e (96 e 132 MeV) $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$* ", LXXXVI Congresso Nazionale Società Italiana di Fisica - Palermo, 6 - 11 Ottobre 2000.

R.C.Barnà, A. V. Butkevich, V. D'Amico, D. De Pasquale, A. Italiano, A. Trifirò and M. Trimarchi: "*An Underwater Detector and Software Filters for Background*" **Report** INFN/AE-00/12.

L. Auditore, R. C. Barnà, V. D'Amico, D. De Pasquale, A. Italiano, A. Trifirò and M. Trimarchi: "Evidence for Pair Correlation Effects in Heavy Ion Reactions" **Report** INFN/BE-00/04.

R. C. Barnà, A. Butkevich, V. D'Amico, D. De Pasquale, A. Italiano, A. Trifirò and M. Trimarchi: "*Cerenkov Light from Cosmic Rays: a Comparison of Different Parametrizations*", **Proceedings of the 20th Texas Symposium on Relativistic Astrophysics** - Austin, Texas, 10 - 15 Dicembre 2000.

R.C.Barnà, D. De Pasquale, A. Italiano, A. Trifirò, M. Trimarchi, A. Strazzeri, V. Rauch, A. Strazzeri, V. Rauch, D. Disdier, C. Bhattacharya, C. Beck, T. Bellot,, R. M. Freeman, R. Nouicer, M. Rousseau, O. Stezowski: "*A semiclassical Approach to the Sequential Alpha Emission in the (96 MeV) $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ and (133 MeV) $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ and (133 MeV) $^{16}\text{O} + ^{48}\text{Ti}$ Deep Inelastic Collisions*", submitted to Phys. Rev. **C**.

L. Torrisi, G. Ciavola, S. Gammino, L. Andò, A. Barnà, L. Laska and J. Krasa
"Metallic etching by high power Nd:Yag pulsed laser irradiation"
Rev Sci. Instr. 71(11), 4330-4334, 2000

8.8 Materiali Amorfi

Partecipanti:

G. Carini, M. Cutroni, G. D'Angelo, M. Federico, G. Galli, A. Mandanici, G. Tripodo.

Misure di calore specifico a basse temperature (1.5-25 K) in vetri ternari AgI-Ag₂O-B₂O₃ hanno rivelato la presenza di un calore specifico di eccesso che aumenta al crescere del contenuto di AgI. Questa osservazione è stata spiegata assumendo che tali vetri sono costituiti da una matrice borata di Ag₂O-B₂O₃ e da poliedri di AgI, che preservano la loro struttura microscopica a livello locale. La dinamica vibrazionale di tale struttura dovrebbe essere caratterizzata da un eccesso di modi vibrazionali soffici la cui densità cresce al decrescere della connettività o coerenza del network. Il collasso della coerenza è dovuta all'inclusione dei poliedri di AgI che causano la formazione di cluster di atomi debolmente legati alla matrice ospite. Inoltre è stato stabilito che, nell'intervallo esplorato, la dipendenza dalla temperatura del calore specifico è in accordo qualitativo con le predizioni del Modello a Potenziale Soffice. Tale modello assume la presenza di modi vibrazionali di bassa energia nei vetri, che si originano da potenziali anarmonici soffici, e provvede una descrizione unificata degli stati vibrazionali d'eccesso e di tunneling.

Uno studio comparativo a basse temperature (1.5-25 K) di calore specifico e scattering Raman a bassa frequenza in vetri metafosfati e pentafosfati di lantanidi (La, Pr, Gd) ha rivelato la presenza di eccitazioni magnetiche di bassa energia. E' stato verificato che, in analogia a quanto trovato per i modi vibrazionali, il disordine topologico rende "soffici" le eccitazioni magnetiche del campo cristallino, causando una ampia distribuzione di stati di bassa energia. L'andamento del calore specifico magnetico al variare della temperatura nel vetro di Pr, che esibisce rilevanti effetti magnetici nell'intervallo esplorato, è stato interpretato in modo consistente tramite una distribuzione Gaussiana di eccitazioni singoletto-singoletto. Dall'analisi effettuata è risultato che un quinto degli ioni magnetici, presenti nella matrice vetrosa, esibiscono stati singoletto-singoletto con energie molto basse e contribuiscono all'entropia magnetica.

E' stato misurato il modulo dinamico meccanico complesso al variare della frequenza (0.3-30 Hz) e della temperatura (150-500 K) in network polimerici amorfi semi-interpenetranti, basati su poliuretano lineare (PU) e su due differenti network polimerici eterociclici [HPN-1: trimerized dicyanic ether of Bisphenol A (DCE); HPN-2: a 60/40 (by weight) copolymer of DCE and of the epoxy oligomer (DCE/EO)]. E' stato rilevato che l'introduzione del PU rende soffici i network eterociclici, diminuisce la loro resistenza alla degradazione strutturale indotta dalla temperatura e ed aumenta la complessità della dinamica segmentale a lungo range. In particolare nei sistemi PU/HPN-1 sono state osservate singole transizioni vetrose, che indicano una affinità tra i due componenti ed una omogeneità strutturale su grande scala. Le due transizioni vetrose, rilevate invece nei sistemi PU/HPN-2, sottolineano l'esistenza di un network amorfo a doppia fase, ciascuna delle quali preserva le caratteristiche morfologiche principali dei componenti puri. Tale studio ha permesso di determinare anche la fragilità e la non-esponenzialità della dinamica del moto segmentale alla transizione vetrosa. Estendendo l'analisi anche ai polimeri lineari amorfi, è stata provata l'esistenza di una interessante correlazione: una crescente anarmonicità della struttura polimerica è predittiva di un crescente grado di fragilità.

E' stato effettuato uno studio di calore specifico a basse temperature (0.5-25 K) in campioni porosi di silice amorfa (xerogels), ottenuti tramite il metodo sol-gel e con densità variabili in un ampio intervallo (da 670 a 1730 kg/m³). A temperature maggiori di 4 K il calore specifico, quando riportato in un plot di C_p/T^3 in funzione di T, evidenzia un picco che risulta essere indipendente dalla densità del campione ed è molto simile a quello osservato nella silice vetrosa (v-SiO₂, densità: 2200 kg/m³). Nella regione di temperature inferiori a 4 K, è stato rivelato un contributo addizionale

rispetto a quello previsto dalla teoria di Debye, che esibisce un dipendenza dalla temperatura approssimativamente lineare e aumenta marcatamente al diminuire della densità. Utilizzando come riferimento le osservazioni sperimentali nella $v\text{-SiO}_2$, è stato concluso che la presenza dei pori non influenza apprezzabilmente la densità di eccesso dei modi vibrazionali di bassa energia, ma provoca rilevanti aumenti della densità dei sistemi a due livelli o di tunneling.

Lo studio della risposta dielettrica nell'intervallo di frequenze 1 Hz -20 Ghz ed a temperature variabili tra 273 K e la transizione vetrosa T_g ha costituito un efficace metodo di indagine dei processi dinamici responsabili dei rilassamenti osservati sperimentalmente nei liquidi sotto-raffreddati. Le potenzialità della spettroscopia dielettrica a larga banda confrontati con i risultati ottenuti con la spettroscopia meccanica in liquidi fragili come la m-toluidina ha evidenziato l'esistenza di processi di rilassamento non-Debye. La deviazione dalla risposta ideale alla Debye diventa più evidente al diminuire della temperatura, suggerendo che la dinamica rilassamentale risulta sempre più influenzata da effetti cooperativi fra le varie unità microscopiche responsabili del processo di rilassamento. Il carattere non esponenziale della funzione di risposta nel dominio del tempo e la dipendenza dei tempi di rilassamento dielettrici e meccanici dalla temperatura ha evidenziato l'esistenza di una transizione tra un regime dinamico presente ad alta temperatura ed un regime di più alta viscosità in cui diventano rilevanti le interazioni e gli effetti della complessità del sistema. E' stato inoltre possibile rilevare dal confronto dei dati ultrasonici, dielettrici e di viscosità come al decrescere della temperatura, si verifici nella m-toluidina un disaccoppiamento tra il moto diffusivo e quello rotazionale.

Publicazioni

“ Effect of glassy topological disorder on low energy magnetic excitations”, G. Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo, A. Fontana, F. Rossi, G. A. Saunders, *Europhys. Lett.* **49**, 99 (2000).

“ Anharmonicity and fragility in semi-interpenetrating polymer networks”, A. Bartolotta, G. Di Marco, G. Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo, V. P. Privalko, *J. of Physics: Condensed Matter* **12**, 3559 (2000).

“ Anharmonicity and fragility in linear and reticulated polymers”, G. D'Angelo, G. Tripodo, G. Carini, A. Bartolotta, V.P. Privalko, in “Nuclear and Condensed Matter Physics”, ed. by A. Messina, *AIP C513*, 75 (2000).

“Low energy vibrational excitations in silver borate glasses”, A. Bartolotta, G. Carini, G. D'Angelo, G. Salvato, G. Tripodo, in “Nuclear and Condensed Matter Physics”, ed. by A. Messina, *AIP C513*, 27 (2000).

“ Low temperature specific heats of porous silica xerogels of low densities ”, G. D'Angelo, G. Tripodo, A. Bartolotta, G. Carini, A. Fontana, M. Montagna, F. Rossi, M. Ferrari, F. Terki, *J. Non-Cryst. Solids* **280**, 222 (2001).

“A study of Raman spectroscopy and low temperature specific heat in gel synthesized amorphous silica”, A. Bartolotta, G. Carini, G. D'Angelo, M. Ferrari, A. Fontana, M. Montagna, F. Rossi, G. Tripodo, *J. Non-Cryst. Solids* **280**, 249 (2001).

Collaborazioni

Prof. G. A. Saunders, School of Physics, University of Bath, England.

Prof. V. P. Privalko, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine.

Prof. A. Fainleb, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine.

Prof. K. Funke, Institut für Physikalische Chemie, University of Münster, Germany.

Prof. A. Fontana, Dipartimento di Fisica, Università di Trento.

Prof. M. Montagna, Dipartimento di Fisica, Università di Trento.

8.9 Proprietà elettroniche e stabilità di fase di leghe metalliche.

Partecipanti:

Ezio Bruno, Beniamino Ginatempo, E. Sandro Giuliano, Roberto Ruggeri.

In accordo allo schema di preventivo di ricerca per il 2000 si riferisce sui risultati raggiunti.

i) Teorie di campo medio

i.1) Si sono studiati gli equilibri di fase B2-L1₂ della lega CuPd. Ciò ha condotto alla elaborazione di un nuovo metodo in cui l'energia di ordinamento viene separata in tre contributi: energia di ordinamento bcc-B2, energia di ordinamento fcc-L1₂ ed energia di trasformazione fcc-bcc. Lo studio separato di queste quantità ha consentito di formulare una ipotesi di coesistenza di fase basata sul concetto di superfici di Fermi egualmente frustrate alla coesistenza. L'ordinamento bcc-B2 e fcc-L1₂ è regolato dal nesting delle superfici di Fermi. Ciò ha condotto a due lavori, uno già accettato su Physical Review B, l'altro in corso di recensione su Europhysics Letters. Tale argomento è anche oggetto di una collaborazione con l'università di Bristol (GB) dove si eseguono misura di 2DACAR per la determinazione sperimentale delle Superfici di fermi di queste leghe, che ha condotto ad un lavoro sottomesso nel 2001 al Physical Review Letters.

i.2) Si è approfondito lo studio delle onde di spin del Cr e delle sue leghe, come pure dei paramagnoni del Palladio, con la teoria basata sul time-dependent density functional presentata nel 1999, sempre in collaborazione con l'università di Warwick (GB). Entrambi questi fenomeni hanno così trovato una spiegazione unitaria nella struttura elettronica. Anche in questi sistemi il nesting della superficie di Fermi gioca un ruolo di primo piano.

ii) Oltre il campo medio

Si è lavorato sulla elaborazione di una teoria finalizzata alla comprensione della legge lineare di dipendenza del potenziale dall'eccesso di carica sul sito.

iii) Si sono eseguiti i calcoli per l'accoppiamento di scambio oscillatorio in multilayers con spacer di leghe Cu-Ni, in collaborazione con l'università di Bristol (GB). Tale studio ha condotto ad una pubblicazione sul Physical Review B.

Pubblicazioni apparse o in corso di stampa:

to appear in Phys Rev. B (2001),

E. Bruno, B.Ginatempo, and E.S. Giuliano, *Fermi surface incommensurate nestings and phase equilibria in Cu-Pd alloys.*

Phys Rev. B **62**, 9005 (2000)

N.N. Lathiotakis, B.L Györffy, E. Bruno, B.Ginatempo, *Oscillatory Exchange Coupling across Cu_(1-x)Ni_x spacers: A first principles calculation of the amplitudes and phases using asymptotic analysis.*

Phys. Rev. B **62**, 1075 (2000)

J.B. Staunton, J. Poulter, B.Ginatempo, E. Bruno, and D.D. Johnson, *Spin Fluctuations in nearly magnetic metals from ab initio spin dynamical susceptibility calculations: Application to Pd and Cr₉₅V₅.*

Pubblicazioni sottomesse:

Submitted to Europhys. Lett. 20/11/2000

E. Bruno, B. Ginatempo and E.S.Giuliano, *Fermi Surface origin of non-stoichiometric ordering in CuPd alloys*

Submitted to Phys. Rev. Lett.,

I. Wilkinson, R.J. Hugues, Zs. Major, S.B. Dugdale, M.A. Alam, E. Bruno, B. Ginatempo and E. S. Giuliano, *Compositional order and Fermi Surface nesting in CuPd Alloys.*

8.10 Proprietà strutturali e dinamiche in liquidi associati e sistemi dispersi.

Partecipanti:

Caterina Branca, Antonio Faraone, Salvatore Magazù, Giacomo Malsano, Domenico Majolino, Placiso Migliardo, Rosina Ponterio, Valentina Venuti, Valentina Villari.

Le tematiche scientifiche realizzate dal gruppo di ricerca nell'anno 2000 si sono articolate essenzialmente, sulle seguenti linee:

1) Proprietà strutturali e dinamiche in sistemi polimerici. E' stato realizzato lo studio delle proprietà strutturali (lunghezza di persistenza, lunghezza di Kuhn, raggio idrodinamico, raggio di girazione, etc...) di polimeri e soluzioni, in funzione della struttura polimerica, della temperatura e della natura del solvente. In particolare l'attenzione è stata rivolta al confronto del coefficiente di diffusione collettivo con quello a particella singola, valutati ricorrendo a tecniche quali la spettroscopia a correlazione di fotoni (PCS), la spettroscopia NMR e lo scattering quasi-elastico di neutroni (QENS) con il proposito di chiarire la natura dei meccanismi di interazione e delle dinamiche coinvolte.

Informazioni di tipo strutturale hanno permesso di chiarire il ruolo giocato dagli effetti idrodinamici, l'esistenza di fenomeni aggregativi e di caratterizzare il potere del solvente, onde valutare l'andamento delle lunghezze di correlazione conformazionali delle catene polimeriche. Lo studio è stato esteso ai sistemi convenzionalmente riferiti "star-polymers" per i quali è stata chiarita la presenza di differenti dinamiche, connesse alla peculiare conformazione del sistema. In questo ambito rientra lo studio delle proprietà statiche, mediante spettroscopie ottica e neutronica, e dinamiche (mediante esperimenti QENS, PCS, Raman e IR) di sistemi polimerici in soluzione di CO₂ in condizioni di supercriticità. Tali sistemi rivestono notevole importanza in vista delle numerose e importanti ricadute applicative (ad es. nei problemi connessi con lo smaltimento di materie plastiche non biodegradabili).

2) Studio sperimentale di polisaccaridi in soluzioni macromolecolari. Lo studio delle proprietà fisiche molecolari di disaccaridi e polisaccaridi proseguirà ha consentito di approfondire la conoscenza dei meccanismi che rendono tali sistemi peculiari nell'interazione con i sistemi biologici. In particolare, nel caso di alcuni disaccaridi del glucosio, quali il trealosio, il maltosio e il lattosio, il confronto delle rispettive risposte dinamiche ha permesso di ottenere informazioni sull'origine della maggiore efficacia del trealosio come bioprotettore. Misure preliminari, realizzate con l'impiego congiunto di tecniche reologiche e di spettroscopia NMR in soluzioni altamente diluite, individuano nella fragilità, ovvero nella sensibilità strutturale a cambiamenti di temperatura e concentrazione, la peculiarità di tale sistema. L'attenzione è stata inoltre rivolta allo studio delle modificazioni indotte dalla presenza dello zucchero sul network, imposto dal legame idrogeno, dell'acqua di bulk. Esperimenti di scattering quasi-elastico di neutroni, di spettroscopia NMR e scattering Raman, hanno permesso di evidenziare se la presenza di trealosio comporti la diminuzione dell'ammontare di acqua di "freezing". Lo studio è stato inoltre esteso a soluzioni di macromolecole e vari sistemi di interesse biologico al fine di individuare, su scala molecolare, l'effetto dei disaccaridi e dei polisaccaridi su strutture e membrane biologiche.

3) Dinamica riorientazionale e vibrazionale in liquidi confinati. E' stato intrapreso lo studio dei processi diffusivi di liquidi in matrici vetrose (ad es. Gelsil) caratterizzati da porosità di differenti forme e dimensioni. Le superfici interne delle matrici porose, opportunamente trattate onde separare gli effetti di "trappola chimica" e "fisica", hanno permesso lo studio dei meccanismi di confinamento di sistemi liquidi, quali in particolare l'acqua. E' stato altresì approfondito il ruolo giocato dalla temperatura sugli effetti di confinamento. Lo studio è stato esteso alle proprietà imposte dal peculiare legame idrogeno su sistemi quali polimeri, alcoli e loro miscele. Tale indagine è stata condotta in condizioni di sottoraffreddamento e in particolari condizioni termodinamiche. Lo studio delle dinamiche lente in tali sistemi ha consentito di approfondire i processi dinamici legati

alle proprietà di trasporto in sistemi fortemente interagenti, in condizione di elevata densità. Si cercherà di evidenziare anche come recenti modelli teorici possono spiegare i multirilassamenti che caratterizzano questi sistemi.

4) Studio della materia granulata con tecniche "imaging". L'indagine della materia granulata e dei fenomeni di segregazione che la caratterizzano è stata approfondita a mezzo di tecniche "imaging". Con questa tecnica sono stati studiati nuovi sistemi assimilabili a sistemi a temperatura nulla, per evidenziare similarità e differenze nelle loro strutture e nelle loro cinetiche rispetto ai processi di separazione di fase che occorrono in sistemi complessi. Le indagini sperimentali su tali sistemi sono state condotte sia in sede con tecniche spettroscopiche di tipo ottico (Photon Correlation Spectroscopy, Brillouin, Raman, Fourier Transform IR, SALS) e misure di proprietà termodinamiche e di trasporto, sia fuori sede mediante scattering elastico ed anelastico di neutroni e spettroscopia di luce di sincrotrone presso le grandi Facilities Internazionali.

5) Impiego della spettroscopia Raman per l'analisi di sistemi cancerosi. L'applicazione della spettroscopia Raman per lo sviluppo di tecniche diagnostiche utilizzabili in ambito oncologico si è rivelato efficace nell'analisi di tessuti biologici affetti da patologie pre-cancerose e cancerose. L'attenzione è stata rivolta al miglioramento del rapporto segnale/rumore e al trattamento della fluorescenza di fondo.

6) Utilizzazione di metodologie fisiche per lo studio di reperti archeologici. La preziosità e l'unicità dei reperti analizzati, hanno imposto come priorità assoluta la non distruttività del metodo d'indagine, in tal senso le indagini utili alla caratterizzazione della natura e della struttura dei reperti esaminati è stata effettuata utilizzando tecniche spettroscopiche assolutamente non distruttive accoppiate con apparati microscopici che hanno favorito il riconoscimento 'in situ' di componenti presenti anche a livello di tracce. In particolare è stata possibile la caratterizzazione di reperti ceramici provenienti da recenti scavi effettuati nella zona archeologica di Messina. L'indagine è stata condotta su una campionatura di reperti, provenienti da scavi ubicati in vari punti del tessuto urbano. I reperti abbracciano un ampio arco cronologico, che va dall'età greca arcaica a quella medievale.

Publicazioni anno 2000

A. Faraone, C. Branca, S. Magazù, G. Maisano, H.D. Middendorf, P. Migliardo, V. Villari
"QENS and PCS Study of Aqueous BSA-PEG 'Crowded' Solutions"
Physica B, **276-278**, 1-4, 524 (2000).

S. Magazù, C. Branca, A. Faraone, F. Migliardo, P. Migliardo, V. Villari
"Vibrational Dynamics of Water Molecules Confined within Trehalose Networks: A Raman Response"
Journal de Physique IV, **10**, (2000).

V. Crupi, S. Magazù, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti, M.C. Bellissent
"Confinement Influence in Liquid Water Studied by Raman and Neutron Scattering"
Journal of Physics Condensed Matter, **12**, 3625, (2000).

C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, A. Triolo, R. Triolo, V. Villari
"Anomalous Conformational Properties of PEO in H₂O and D₂O by SANS, PCS and Raman Scattering"
Journal of Applied Crystallography, **33**, n. 1, 709 (2000).

C. Branca, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, E. Tettamanti
"Anomalous Translational Diffusive Processes in Hydrogen-bonded Systems Investigated by Ultrasonic Technique, Raman Scattering and NMR"
Physica B, **291**, issue 1-2, 180 (2000).

- A. Faraone, C. Branca, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, A. Triolo, R. Triolo, V. Villari
 “Effects of Isotopic Substitution on the Conformational Properties of Polymeric Aqueous Solutions”
 Physica B, **276-278**, 1-4, 332 (2000).
- T. V. Lokotosh, S. Magazù, G. Maisano, N. P. Malomutz
 “Nature of Self-Diffusion and Viscosity in Supercooled Liquid Water”
 Physical Review E, **61**, n. 6, (2000).
- V. Crupi, S. Magazù, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti, M.C. Bellissent-Funel
 “Diffusional and Vibrational Properties of Water Confined in very thin Nanoporous Glasses Probed
 by Light and Neutron Scattering”
 Journal de Physique IV, 10, (2000).
- P. Ballone, M. Marchi, C. Branca, S. Magazù
 “Structural and Vibrational Properties of Trehalose: a Density Functional Study”
 Journal of Physical Chemistry B, **104**, 6313 (2000).
- S. Magazù, C. Branca, A. Faraone, G. Maisano, H.D. Middendorf, P. Migliardo, V. Villari
 “Molecular Dynamics of Disaccharides by Inelastic Neutron Scattering”
 Physica B, **276-278**, 1-4, 526 (2000).
- S. Magazù, A. Faraone, G. Maisano, R. Ponterio, V. Villari
 “Dynamical Properties of Highly Entangled Polyalkylmethacrylate Solutions: a Comparative Study”
 Journal de Physique IV, **10**, (2000).
- C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, P. Migliardo, V. Villari
 “On the Cryoprotective Nature of Disaccharides: an Inelastic Light and Neutron Scattering Response”
 New Developments & Appl. of Neutrons and Synchrotron Radiation
 Proceedings of *Hercules X Euroconference*, 24 (2000).
- Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, P. Migliardo, M. Telling, V. Villari
 “Diffusive Dynamics in Disaccharides Aqueous Solutions by QENS”
 New Developments & Appl. of Neutrons and Synchrotron Radiation,
 Proceedings of *Hercules X Euroconference*, 16 (2000).
- C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, P. Migliardo, V. Villari
 “Is PEO Able to Self-Aggregate in water? A Spectroscopic Definitive Response”
 New Developments & Appl. of Neutrons and Synchrotron Radiation,
 Proceedings of *Hercules X Euroconference*, 7 (2000).
- S. Magazù
 “NMR, Static and Dynamic Light and Neutron Scattering Investigations on Polymeric Aqueous Solutions”
 Journal of Molecular Structure, **523**, 47 (2000).
- S. Magazù, R. E. Lechner, S. Longeville, G. Maisano, D. Majolino, P. Migliardo, U. Wanderlingh
 “Diffusive Dynamics in Trehalose Aqueous Solutions by QENS”
 Physica B, **276-278**, 1-4, 475 (2000).

- V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti, S. Magazù
 “Can a Nanoporous Matrix Dramatically Change the Conformational and Dynamical Properties of Imbibed Water? An Elastic Light Scattering Response”
Steam, Water, and Hydrothermal Systems: Physics and Chemistry Meeting the Needs of Industry
 edito da P. R. Tremaine, P. G. Hill, D. E. Irish, P. V. Balakrishnan, NRC Press, Ottawa, 615,
 (2000).
- V. Crupi, S. Magazù, D. Majolino, P. Migliardo, M.C. Bellissent-Funel
 “Dynamical Study of Confined Ethylene Glycol by IQENS”
 Physica B, **276-278**, 1-4, 417 (2000).
- C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, P. Mineo, V. Villari
 “Solute-Solvent Interaction Strength of Disaccharide Aqueous Solutions: Trehalose Primate”
 Nuclear and Condensed Matter Physics, edito da A. Messina.
 AIP Conference Proceedings, **513**, 47, (2000).
- C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, V. Villari
 “On The Aggregation of Poly(Ethylene Oxide) in Water”
 Nuclear and Condensed Matter Physics, edito da A. Messina.
 AIP Conference Proceedings, **513**, 146, (2000).
- R. Triolo, V. Arrighi, A. Triolo, P. Migliardo, S. Magazù, J. B. McClain, D. Betts, J. M. DeSimone,
 H.D. Middendorf
 “QENS from Polymeric Micelles in Supercritical CO₂”
 Nuclear and Condensed Matter Physics, edito da A. Messina.
 AIP Conference Proceedings, **513**, (2000).
- C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, V. Villari
 “Slow Dynamics Features in Aqueous Solutions of High Molecular Weight Poly(Ethylene Oxide)”
 Nuclear and Condensed Matter Physics, edito da A. Messina.
 AIP Conference Proceedings, **513**, 118, (2000).
- C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, V. Villari
 “Influence of Trehalose on Conformational and Dynamical Properties of Poly(Ethylene Oxide) in Water”
 Nuclear and Condensed Matter Physics edito da A. Messina.
 AIP Conference Proceedings, **513**, 250, (2000).
- S. Magazù, C. Branca, A. Faraone, G. Maisano, F. Migliardo, P. Migliardo, V. Villari, H.D.
 Middendorf
 “Neutron Spectroscopy of Hydrated Disaccharides: Trehalose vs. Sucrose”
 Journal de Physique IV, **10**, (2000).
- R. Triolo, V. Arrighi, A. Triolo, P. Migliardo, S. Magazù, J. B. McClain, D. Betts, J. M. DeSimone,
 H.D. Middendorf
 “QENS from Polymer Aggregates in Supercritical CO₂”
 Physica B, **276-278**, 1-4, 386 (2000)
- C. Branca, A. Faraone, S. Magazù, G. Maisano, P. Migliardo, V. Villari
 “PolyEthylene Oxide: a Review of Experimental Findings by Spectroscopic Techniques”
 Journal of Molecular Liquids, **87**, (2000).

- G. Cannistraro, G. Galli, C. Giaconia, S. Magazù, A. Piccolo
 “Design of a Testing Chamber for the Study of Material Emission Rates”
Nuclear and Condensed Matter Physics, edito da A. Messina.
 AIP Conference Proceedings, **513**, 361, (2000).
- G. Cannistraro, G. Galli, C. Giaconia, S. Magazù, A. Piccolo
 “Air Quality Control in Confined Spaces by Means of Natural Ventilation”
Nuclear and Condensed Matter Physics, edito da A. Messina.
 AIP Conference Proceedings, **513**, 357, (2000).
- V. Crupi, A. Faraone, G. Maisano, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti and V. Villari
 “Effect of H-Bond active sites on transport properties of PEO dissolved in its monomers: shear
 viscosità and diffusion coefficient studies”.
 J. Chem. Phys. **112**, 5205 (2000).
- V. Crupi, G. Maisano, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti
 “Anharmonic effects and vibrational dynamics in H-bonded liquids by ATR FT-IR spectroscopy”.
 J. Phys. Chem. **104**, 3933 (2000).
- V. Crupi, G. Maisano, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti, M. C. Bellissent-Funel
 “Dynamical properties and confinement effects in complex liquids”; *Nuclear and
 Condensed Matter Physics (AIP)* **513**, 94 (2000)
- V. Crupi, A. Faraone, G. Maisano, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti and V. Villari
 “Structural and dynamic effects H-bond induced in monomer- polymer solutions”.
Nuclear and Condensed Matter Physics (AIP) **513**, 246 (2000).
- D. Majolino, V. Crupi, P. Migliardo, V. Venuti
 “Surface Interactions and Topological Restrictions in Liquids Confined in Nanopores. I. Light and
 Neutron Response in Homologous Systems”.
Journal de Physique IV **10**, 107 (2000)
- V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti
 “Surface Interactions and Topological Restrictions in Liquids Confined in Nanopores. II. Light
 Response in Polymeric Systems”.
Journal de Physique IV **10**, 111 (2000).
- V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti
 “Inter- and intramolecular hydrogen bond in liquid polymers: a Fourier transform infrared
 response”.
Molecular Physics **98**, 1589 (2000).
- V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti, M. C. Bellissent-Funel
 “Dynamical response of water in confined geometry “
 Proceedings of Hercules X Euroconference SCM01 (2000)
- V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti
 “H-bond influence in the vibrational dynamics of liquid polymers”
 Proceedings of Hercules X Euroconference SCM02 (2000)

V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti

"Diffusive Relaxations and Vibrational Properties of Water and H-bonded Systems in Confined State by Neutron and Light Scattering: State of the Art".

J. Phys. Chem. **104**, (2000).

R. Ponterio, A. Faraone, E. Lipari, G. Maisano, V. Villari

"Mechanical Properties Characterization of Sicilian Lithoid Materials by Computer-aided speckle interferometry"

Nuclear and Condensed Matter Physics (AIP) **513**, (2000).

R. Ponterio, A. Buemi, G. Maisano, D. Majolino, F. Migliardo

"Beta-Ray technique applied to the study and reproduction of ancient watermarks"; Nuclear and Condensed Matter Physics (AIP) **513**, 389 (2000)

G. Barone, S. Ioppolo, D. Majolino, P. Migliardo, R. Ponterio

"Micro-spectroscopic techniques applied to characterization of varnished archaeological findings"; Nuclear and Condensed Matter Physics (AIP) **513**, 341 (2000)

8.11 DINAMICA DELLA FUSIONE-FISSIONE E PRODUZIONE DEI NUCLEI SUPERPESANTI.

Partecipanti:

Prof. G. Fazio, Prof. G. Giardina, Dr. A. Lamberto e Dr. A. Taccone

La investigazione e la sintesi degli elementi superpesanti è stata condotta nell'intervallo $Z=104-118$ ed ha riguardato le reazioni nucleari indotte da ^{48}Ca , ^{50}Ti , ^{58}Fe , ^{64}Ni , ^{70}Zn , ^{76}Ge e ^{86}Kr su bersagli di ^{208}Pb , ^{209}Bi , ^{248}Cm e ^{238}U ad energie di fascio comprese tra 220 e 450 MeV.

Gli esperimenti sono stati condotti presso il ciclotrone U-400 del Joint Institute for Nuclear Research di Dubna (Russia), con l'ausilio del separatore cinematico VASSILISSA per l'identificazione dei nuclei di rinculo, mentre per i risultati degli esperimenti condotti al GSI di Darmstadt è stata sviluppata una sistematica secondo il nuovo modello da noi sviluppato sulla dinamica del canale d'ingresso. L'identificazione dei residui è stata invece ottenuta attraverso la correlazione α - α o la osservazione dei frammenti di fissione spontanea. Per la corretta determinazione della fusione, necessaria per lo studio delle sezioni d'urto dei residui di evaporazione, è stata posta particolare attenzione alla descrizione della competizione quasi-fissione e fusione nel canale d'ingresso. Sono stati anche considerati gli effetti stabilizzanti delle correzioni di shell e le proprietà di decadimento dei nuclei composti superpesanti. Inoltre nell'analisi della competizione fra evaporazione e fissione è stato considerato il damping delle correzioni di shell in funzione del momento angolare. Le funzioni di eccitazione della fusione calcolate con detto modello furono usate per stimare la probabilità di sopravvivenza del nucleo composto rispetto al processo di fissione. La osservata decrescita dell'ampiezza delle funzioni di eccitazione sembra essere connessa con il rapporto decrescente tra la barriera di quasi-fissione B_{qf} e la barriera intrinseca di fusione B_{fus}^* . Ciò significa che la buca di potenziale diventa più piccola per i sistemi formati da nuclei interagenti sempre più pesanti. Inoltre, l'intervallo di energia di fascio che contribuisce alla cattura (e quindi alla fusione) è relativo alla estensione dell'intervallo di energia di eccitazione del sistema dinucleare che si forma nel canale incidente.

È stato organizzato il Workshop Internazionale :''Fusion-Fission process in the Superheavy Nuclei Region'' che si è tenuto a Messina dal 30 Marzo al 3 Aprile 2000.

Publicazioni:

- 1) O.A. Yuminov, S.U. Platonov, D.O. Eremenko, O.V. Fotina, E. Fuschini, F. Malaguti, G. Giardina, R. Ruggieri, R. Sturiale, A. Moroni, E. Fioretto, R.A. Ricci, L. Vannucci

- and G. Vannini, “Investigation of shell effects for heavy fissionable nuclei by the blocking technique”, Nucl. Instr. Meth. B **164-165**, 960 – 964, (2000)
- 2) G. Giardina, S. Hofmann, A.I. Muminov, A.K. Nasirov, “Effect on the Entrance Channel on the Synthesis of Superheavy Elements”, Eur. Phys.J A**8**, 205-216, (2000)
 - 3) M. Marqués, M. Labiche, N. A. Orr, J. C. Angélique, L. Axelsson, B. Benoit, U. Bergmann, M. J. G. Borge, W. N. Catford, S. P. G. Chappell, N. M. Clarke, G. Costa, N. Curtis, A. D’Arrigo, F. de Oliveira Santos, E. de Goes Brennard, O. Dorvaux, M. Freer, B. R. Fulton, G. Giardina, C. Gregori, S. Grévy, D. Guillemaud-Mueller, F. Hanappe, B. Heusch, B. Jonson, C. Le Brun, S. Leenhardt, M. Lewitowicz, M. J. Lopez, K. Markenroth, M. Motta, A. C. Mueller, T. Nilsson, A. Ninane, G. Nyman, I. Piqueras, K. Riisager, M. G. Saint Laurent, F. Sarazin, S. M. Singer, O. Sorlin, L. Stuttgé, “Two-Neutron Interferometry as a Probe of the Nuclear Halo”, Phys. Lett. B **476**, 219 –225, (2000)
 - 4) G. Giardina, F. Hanappe, A. I. Muminov, A. K. Nasirov, and L. Stuttgé, “Capture and fusion dynamics in heavy-ion collisions”, Nucl. Phys. A **671**, 165 –188, (2000)
 - 5) V. Eremin, G. Fazio, and G. Giardina, “Comment on bremsstrahlung in alpha decay of ^{210}Po : do alpha particles emit photons in tunnelling ?”, Phys. Rev. Lett. **85**, 3061 (2000)
 - 6) G. Giardina, P. D’Agostino, A. I. Muminov, A. K. Nasirov, G. Oliva, R. Palamara, R. Ruggeri, A. Taccone, G. Fazio and M. Hermann, “Formation of the evaporation residues for the synthesis of superheavy elements”, *Izvestia Academy Nauk* **64**, 862 (2000); translated in the *Bulletin of the Russian Academy of Sciences* **64** (2000)

E) Elenco Comunicazioni a Congressi.

- 1) “Effect of the entrance channel asymmetry in reactions for the synthesis of superheavy elements”, G. Giardina, B. Benoit, G. Fazio, F. Hanappe, S. Hofmann, A. Lamberto, T. Materna, A.K. Nasirov, R. Palamara, L. Stuttgé, A. Taccone, , “VII International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions”, (Strasbourg), 2000, abstract p.30.
- 2) “Effect of the entrance channel on the synthesis of superheavy elements”, G. Giardina, S. Hofmann, A. I. Muminov, A.K. Nasirov “VII International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions”, (Strasbourg), 2000, abstract p. 31.
- 3) “Investigation of the structure of strongly deformed excited states in heavy fissionable nuclei by the cristal blocking technique”, S. Yu. Platonov, D. O. Eremenko, O. V. Fotina, O. A. Yuminov, A. D’Arrigo, G. Giardina, R. Sturiale, E. Fioretto, R. A. Ricci, L. Vannucci, E. Fuschini, F. Malaguti, A. Moroni, G. Vannini, “VII International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions”, (Strasbourg), 2000, abstract p.56.
- 4) “The Two-Neutron Halo Nucleus ^{14}Be ”, M. Labiche, K. L. Jones, F. M. Marqués, N. A. Orr, W. N. Catford, J. C. Angélique, L. Axelsson, B. Benoit, U. Bergmann, M. J. G. Borge, S.P.G. Chappell, N.M. Clarke, G. Costa, N. Curtis, A. D’Arrigo, E. de Goes Brennard, O. Dorvaux, M. Freer, B. R. Fulton, G. Giardina, C. Gregori, S. Grévy, D. Guillemaud-Mueller, F. Hanappe, B. Heush, B. Jonson, C. Le Brun, S. Leenhardt, M. Lewitowicz, M. J. Lopez, K. Markenroth, M. Motta, A. C. Mueller, T. Nilsson, A. Ninane, G. Nyman, F. de Oliveira, I. Piqueras, K. Riisager, M.G. Saint Laurent, F. Sarazin, S. M. Singer, O. Sorlin, L. Stuttgé, VII International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions”, (Strasbourg), 2000, abstract p. 125.

8.12 SIMULAZIONE E TEORIA DI FLUIDI MULTICOMPONENTI E SISTEMI DINAMICI NON LINEARI

Partecipanti: Maria C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, G. Faggio, G. Pizzimenti, G. Pellicane

L'attività di ricerca si è sviluppata secondo il programma a suo tempo definito conseguendo risultati significativi sia nella descrizione teorica del comportamento in fase delle soluzioni proteiche, sia a riguardo della formulazione di teorie soddisfacenti per la descrizione di miscele fluide modello caratterizzate da forti asimmetrie di dimensione e di concentrazione delle specie componenti. Per le soluzioni proteiche, in particolare, è stato possibile documentare il buon livello predittivo di alcune teorie dello stato liquido termodinamicamente consistenti, nel descrivere la curva di equilibrio binodale (liquido-vapore), e la curva di congelamento di un modello di soluzione proteica con proteine globulari (quale ad esempio il lisozima). La definizione della posizione reciproca di tali due curve di equilibrio di fase è ritenuta correntemente di importanza cruciale ai fini della comprensione dell'insorgenza e del controllo della cristallizzazione delle proteine a partire dalle soluzioni madri.

PUBBLICAZIONI DELL'ANNO 2000

- 1) C.Caccamo, G.Pellicane, R.Ricciari e G.Faggio , "Generalized Mean Spherical Approximation description of highly asymmetric hard-sphere mixtures", *J.Phys.: Condens.Matter*, v. 12 , 2613 (2000)
- 2) C.Caccamo, G.Pellicane e D.Costa, "Phase transitions in hard-core Yukawa fluids: toward a theory of phase stability in protein solutions", *J.Phys.: Condens.Matter*, v. 12, A437 (2000)
- 3) C.Caccamo, G.Pellicane e R.Ricciari, "Generalized Mean Spherical Approximation with internal thermodynamic consistency constraints: an application to hard sphere mixtures", in "Nuclear and Condensed Matter Physics CP513, ed. A. Messina, American Institute of Physics, p. 55 (2000)

8.13 Fisica dei Sistemi Complessi

Partecipanti:

Patrizia Gambadauro, Rita Giordano, Domenico Lombardo, Francesco Mallamace, Franco Wanderlingh, Ulderico Wanderlingh.

Abbiamo studiato differenti sistemi quali soluzioni di three-block copolimeri, dendrimeri, porfirine e proteine. Comune tematica su questi differenti sistemi è stata una caratterizzazione delle specifiche interazioni considerando i loro effetti sulle risultanti strutture e dinamiche. Inoltre per molti di questi sistemi è stato evidenziato un comportamento self-similare nelle grandezze strutturali (fattore di struttura) e le relative grandezze dinamiche; mostrando che per effetto delle prime le seconde obbediscono a precise leggi di scala. Per effetto di un contributo attrattivo al potenziale di interazione interparticellare alcuni di questi sistemi presentano un ricco diagramma di fase caratterizzato dalla presenza di una curva di smescolamento (con uno specifico punto critico), una linea di percolazione (dipendente dalla temperatura quanto dalla concentrazione). Nasce da questa specifica proprietà di adesione fra le macromolecole il meccanismo di base che determina gli effetti percolativi e collettivi del sistema; tale meccanismo, da noi determinato, è un fenomeno di clustering. Su questa base uno dei sistemi da noi studiato e caratterizzato, soluzioni acquose di Pluronic L64), viene oggi considerato da molti gruppi sperimentali e teorici, come un sistema modello al fine di studiare i comportamenti collettivi di liquidi complessi ad alta concentrazione.

Le tecniche di studio che abbiamo usato sono: viscoelasticità, scattering elastico e quasi elastico di luce e neutroni, assorbimento uv-visibile, scattering di luce stimolato e la MSA (Equazione di Ornstein-Zernike risolta nella approssimazione di Percus-Yevic).

Abbiamo inoltre considerato, negli appropriati schemi teorici (Teoria di mode-coupling o MCT, teoria della percolazione), il comportamento di questi liquidi fatti di "sfere attrattive" fuori dall'equilibrio e in particolare lungo le transizioni da stati ergodici a stati di non-ergodicità (percolazione e transizione vetrosa). In questo contesto abbiamo raggiunto un risultato, considerato dalla comunità scientifica internazionale, di rilevante interesse. Abbiamo scoperto che nei sistemi colloidali la transizione di percolazione e quella vetrosa sebbene siano entrambe dominante dagli effetti di clustering, che come abbiamo detto caratterizzano questi sistemi, avvengono su punti differenti regioni del diagramma di fase.

Questo, contraddice precedenti schemi interpretativi che proponevano questi processi come un unico fenomeno. Recentissimi risultati teorici danno definitivamente ragione ai nostri risultati. Altro risultato di grande interesse della nostra ricerca su questi sistemi è che in colloidali attrattivi esistono due linee di transizione vetrosa; i.e. una associata al contributo attrattivo ed una a quello repulsivo del potenziale. In carattere termodinamico di queste linee è di tipo rientrante, Risultano quindi nel diagramma di fase più regioni vetrose caratterizzate da differenti parametri di non ergodicità. In queste condizioni abbiamo osservato un nuovo fenomeno: esiste una regione temporale in cui il correlatore del cosiddetto "rilassamento beta" è caratterizzato da un rilassamento logaritmico delle fluttuazioni di densità piuttosto che da una legge di potenza. Questo nuovo fenomeno è stato interpretato nei termini di una transizione vetrosa di tipo A3, cioè una singolarità a cuspidale. Questo risultato è stato considerato come una conferma della validità della MCT nello studio delle transizioni vetrose e presuppone nuovi sviluppi nello studio del processo di "aging" associato alle transizioni a stati di non ergodicità, soprattutto per quanto riguarda gli effetti di memoria e di ringiovanimento che lo caratterizzano. Abbiamo, in conseguenza ad appropriati suggerimenti teorici, considerato la ipotesi di verificare possibili interferenze fra il fenomeno critico e quello percolativo quanto la linea di percolazione incontra quella binodale proprio in vicinanza del punto critico. I risultati ottenuti (di prossima pubblicazione) mostrano, che in una tale situazione, i clusters percolativi si comportano alla stessa maniera dei droplets critici (proposti da Fisher in termini teoria dei gruppi di rinormalizzazione). Nella condizione considerata i cluster percolativi,

in presenza del fenomeno critico, divengono "polidispersi e swelling" assumendo cioè le proprietà dei clusters di Ising.

Sono state inoltre studiate le proprietà dinamiche e strutturali di alcune proteine in soluzioni acquose relativamente diluite. Questo con l'obiettivo di usarle come sistemi modello nello studio dei processi di folding ed unfolding. In questo contesto sono state studiate la proprietà del solvente (acqua). Con le stesse tecniche, scattering di neutroni, sono stati studiati i processi di self-aggregazione di alcuni alcoli.

Infine, abbiamo realizzato alcuni strumenti, basati su tecniche di analisi di "imaging" onde studiare la materia granulata nelle separazioni di fase e le sue interrelazioni con le transizioni nonergodiche che la caratterizzano.

I primi risultati, di prossima pubblicazione, mostrano nei processi di compattamento specifiche analogie con i fenomeni di aging. Un tale fenomeno è stato proposto considerando stati inerenti ed effetti di frustrazione sia in modellizzazioni basate sulla MCT quanto sulle teorie di percolazione.

Pubblicazioni

- 1) N. Micali, F. Mallamace, A. Romeo, R. Purrello, L. Monsu' Scolaro, "Mesoscopic Structure of meso-tetrakis(4-sulfonatophenyl)porphine J-Aggregates The Journal of Physical Chemistry B, 104, 5897, (2000).
- 2) C. Liao, S. Choi, F. Mallamace, S. H. Chen, "SANS study of the structure and Interaction of L64 triblock copolymer micellar solution in the critical region", J. Appl. Cryst. (2000). 33, 677-681.
- 3) F. Mallamace, P. Gambadauro, P. Liseur, D. Lombardo, N. Micali, A. Romeo, L. Monsu' Scolaro "Scaling properties in the structure of new complex materials (porphyrins and dendritic polymer systems)". J. Appl. Cryst. (2000). 33, 632-636.
- 4) F. Mallamace, P. Gambadauro, C. Liao, N. Micali, P. Tartaglia, S.H. Chen "Effects of the short range attraction in the kinetic glass transition studied by means of a micellar systems", Prog. in Colloid Polym. Science 115, 361, (2000).
- 5) F. Mallamace, P. Gambadauro, N. Micali, P. Tartaglia, C. Liao, S.H. Chen, "Kinetic glass transition in a micellar system with short-range attractive interaction", Phys. Rev. Lett. 84, 5431 (2000).
- 6) S. H. Chen, C. Liao, F. Mallamace, "Structure, Interaction, Critical and Percolation Transition in Pluronic Micellar Solutions" World Conf. Surfactants.
- 7) F. Mallamace, N. Micali, L. Monsu' Scolaro, A. Romeo, "Fractal aggregation of dyes such porphyrins and related compounds under stacking" Current Opinion in Colloid & Interface Science 5, 49, (2000) [Review paper].
- 8) N. Micali, F. Mallamace, A. Romeo, R. Purrello, L. Monsu' Scolaro, "Fractal structures in homo and heteroaggregated water soluble porphyrins". The Journal of Physical Chemistry B 104, 9416 (2000).
- 9) S. Magazu, R. Lechner, S. Longeville S., G. Maisano, D. Majolino, P. Migliardo Placido, U. Wanderlingh, "Diffusive dynamics in trehalose aqueous solutions by QENS ". PHYSICA B 276 (2000) 475-476.
- 10) U. Wanderlingh, R. Giordano, M.T. Sciortino, A.J. Dianoux, "Protein and solvent dynamics in hydrated Crambin". JOURNAL DE PHYSIQUE IV 10 (2000) 325-328.
- 11) G. Briganti, R. Giordano, P. Londei, F. Valle, "Functional role of Chaperonin protein complexes", PHYSICA B 276 (2000) 516-517.
- 12) U. Wanderlingh, R. Giordano, M. Sciortino, A.J. Dianoux, "Dynamics of proteins, IQENS study on D2O hydrate Crambin". PHYSICA B 276 (2000) 522-523.
- 13) G. D'arrigo, R. Giordano, J. Teixeira,

"Small-angle neutron scattering studies of aqueous solutions of linear alkanediols and triols".
LANGMUIR 16 (2000) 1553-1556.

14) G. Briganti, R. Giordano, P. Londei, F. Valle, "Contrast analysis of the composition of ribosomes extracted with different purification procedures", JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY 33 (2000) 1113-1118."

8.14 Teoria dell'effetto Auger, proprietà elettroniche di metalli e semiconduttori

Partecipanti: G.Cubiotti, G.Mondio e A.M.Mezzasalma, R. Ruggeri

Sono state studiate le proprietà elettroniche di alcuni tipi di leghe a base di Carbonio sia dal punto di vista sperimentale che da quello teorico. In particolare, misure di spettroscopia ottica (nir-uv-vis), di fotoemissione (XPS) e di perdita d'energia elettronica (REELS) sono state effettuate su campioni di carburo di silicio (SiC). Se le misure di fotoemissione hanno permesso di ottenere informazioni sulla densità di stati in banda di valenza, quelle di spettroscopia ottica e REELS hanno fornito gli spettri della costante dielettrica complessa di questi materiali. Nel solo caso del carburo di silicio, tali spettri sono stati confrontati con quelli dedotti dal calcolo teorico sulla base del metodo LMTO (ASA+CC). Su questa stessa base teorica è stato trattato anche il caso di sistemi debolmente disordinati e caratterizzati da difetti "antisito" in cui un atomo di silicio occupa il posto di un atomo di carbonio e viceversa.

I risultati sul carburo di silicio, per la sola fase β (SiC cubico), sono in ottimo accordo con quelli della teoria e sono molto promettenti anche in vista della estensione dello studio al caso di campioni cristallini in cui sia presente un certo numero di difetti antisito.

I campioni di nitruro di carbonio, preparati con la tecnica dell'ablazione laser, sono stati studiati in funzione della loro stechiometria, in un range compreso tra il 10% ed il 25% di azoto. Sulla base degli spettri di fotoemissione e REELS è stata dedotta la costante dielettrica complessa nonché le densità e le percentuali di legame di tipo sp^2 ed sp^3 che caratterizzano la struttura dei film stessi.

Pubblicazioni:

F.Barreca, A.M.Mezzasalma, G.Mondio, F.Neri, S.Trusso, e C.Vasi

Optical constants of CN_x films from reflection electron energy loss spectroscopy

Thin Solid Films 377&378, 631 (2000)

F.Barreca, A.M.Mezzasalma, G.Mondio, F.Neri, S.Trusso e C.Vasi

Measurements of the dielectric constant of amorphous CN_x films in the 0-45 eV energy range.

Phys. Rev. B 62, 16893 (2000)

G. Cubiotti, Yu. Kucherenko, Y. Yaresco, A. Perlov, A. Antonov

Local electronic structure around vacancies and vacancy antisites complexes in β -SiC

J. Phys. – Condensed matter 12, 3369 (2000)

8.15 Studio di modelli e strumenti per il controllo ambientale degli spazi confinati

Partecipanti: Prof. Giuseppe Cannistraro, Dr. Antonio Piccolo

L'attività di ricerca del gruppo verte principalmente sulle seguenti linee tematiche:

Viene verificata la possibilità di utilizzare semplici metodologie per la costruzione di set di dati meteorologici ridotti da usare nei modelli di simulazione del comportamento termico degli edifici al fine di prevederne il fabbisogno energetico.

In questo contesto viene valutata la possibilità di ottenere un consistente risparmio di energia affidando il ricambio dell'aria degli spazi confinati alla ventilazione naturale. Tale studio ha condotto alla definizione della "carta di ventilabilità" di un ambiente come metodo semplificato per la valutazione delle portate d'aria per ventilazione naturale; Tale parametro può ben figurare tra gli elementi progettuali utili a definire il benessere dell'ambiente stesso.

Viene inoltre intrapreso uno studio dei problemi della qualità dell'aria degli spazi confinati (Indoor-Air-Quality, IAQ) associati al rilascio di inquinanti da parte di materiali e sostanze presenti negli ambienti chiusi. Viene progettata ed è attualmente in fase di realizzazione una camera di prova che consente di tracciare (in condizioni termogravimetriche controllabili) le curve di rilascio dei materiali d'arredamento più comuni presenti all'interno delle abitazioni.

8.16 Studio teorico-sperimentale di tecnologie innovative di raffreddamento (refrigerazione termoacustica)

L'interesse sempre crescente che negli ultimi anni si sta registrando nei confronti della tecnologia termoacustica risiede nel fatto che si tratta di una "tecnologia pulita" ad impatto ambientale praticamente nullo. A ragione, dunque, la refrigerazione termoacustica (in cui l'effetto di pompaggio termico è ottenuto a spese di potenza acustica) può porsi come valida alternativa alle attuali tecnologie di raffreddamento, soprattutto in risposta alle problematiche di tipo ambientale correlate all'uso dei clorofluorocarburi nei frigoriferi convenzionali a compressione di vapore saturo.

Nel contesto di questa ricerca è stato messo a punto un semplice prototipo di dispositivo termoacustico funzionante ad aria ed a bassa pressione. Tale apparato ha consentito di realizzare un esteso studio del fenomeno termoacustico incentrato soprattutto alla individuazione di quali fattori ottimizzano le prestazioni di questi dispositivi. E' stata messa a punto, inoltre, una semplice procedura di calcolo che consente di evidenziare l'effetto che il comportamento non-lineare di queste macchine ha sulle prestazioni stesse.

PUBBLICAZIONI anno 2000

- G.Cannistraro, C.Giaconia, A.Piccolo

"Influence of Thermal Irreversibilities on Thermoacoustic Engines". AIP Conference Proceedings of the 6th Scientific Conference on NCMP of CRRNSM. Ed. A.Messina, vol. 516, pp. 67 (2000).

- G.Cannistraro, G. Galli, C.Giaconia, S. Magazù, A.Piccolo

"Air Quality Control in Confined Spaces by Means of Natural Ventilation". AIP Conference Proceedings of the 6th Scientific Conference on NCMP of CRRNSM. Ed. A.Messina, vol. 516, pp. 357 (2000).

- G.Cannistraro, G. Galli, C.Giaconia, S. Magazù, A.Piccolo

"Design of a Testing Chamber for the Study of Material Emission Rates". AIP Conference Proceedings of the 6th Scientific Conference on NCMP of CRRNSM. Ed. A.Messina, vol. 516, pp. 361 (2000).

– G.Cannistraro, C.Giaconia, A. Piccolo

“La Refrigerazione Termoacustica: Analisi Teorico-Sperimentale delle Prestazioni di una ThermoAcousticCouple”. Il Freddo. novembre/dicembre 2000, pp. 618-625.

8.17 Sviluppo di applicazioni su cluster di PC a basso costo.

Partecipanti: Prof. Marco Russo, Dott. Giuseppe Patanè

Attività scientifica

Nel corso del 2000, in seguito al completamento del laboratorio di calcolo parallelo PACOLAB, Marco Russo si è occupato dello sviluppo di algoritmi per l'apprendimento (supervisionato e non supervisionato) sul cluster di personal computers, denominato MULTISOFT machine, che ha sede nel suddetto laboratorio. I risultati ottenuti sono stati presentati sia su conferenze internazionali che su riviste specializzate. Tra i titoli dei lavori sotto elencati, riportiamo: *“Parallel Clustering on a Commodity Supercomputer”* and *“Low Cost – High Performance Distributed Fuzzy Learning”*. Egli si è anche occupato di hardware digitale (vedi *“Hardware for Intelligent Systems”*) ed applicazioni delle tecniche di apprendimento ibride (neurale-fuzzy-genetico) in diversi campi; per un lavoro concernente la chimica, si veda *“Database Mining using Soft Computing Techniques. An Integrated Neural Network – Fuzzy Logic – Genetic Algorithm Approach”*.

Publicazioni

- M.Russo and L.C.Jain, editors, "Fuzzy Learning and Applications", International Series on Computational Intelligence, in press.
- T.R.Cundari and M.Russo, "Database Mining using Soft Computing Techniques. An Integrated Neural Network - Fuzzy Logic - Genetic Algorithm Approach", Journal of Chemical Information and Computational Science, in press.
- M.Russo, "Low Cost - High Performance Distributed Fuzzy Learning", IEEE Transactions on Neural Networks, in press.
- M.Russo, C.Petta, G.V.Russo, U.Becciani, and N.Randazzo, "Fuzzy Processing of Silicon Drift Detectors' Signals", International Journal of Knowledge based Intelligent Engineering Systems, in press.
- M.Russo, "Genetic Fuzzy Learning", IEEE Transactions on Evolutionary Computation}, 4(3):259--273, September 2000.
- G.V.Russo, U.Becciani, C.Caligiore, L.Lo Nigro, D.Lo Presti, S.Panebianco, L.Pappalardo, C.Petta, N.Randazzo, S.Reito, and M.Russo, "Smart Readout of Silicon Drift Detectors using ON-LINE Fuzzy Logic", Nuclear Instruments & Methods in Physics Research - Section A, 443:478--502, 2000.
- G.Patanè and M.Russo, "ELBG implementation", International Journal of Knowledge based Intelligent Engineering Systems, 4(2):94--109, April 2000.
- M.Russo, "Fuzzy Learning and Applications", chapter "Evolutionary Fuzzy Learning", pages 1-50, International Series on Computational Intelligence. CRC Press, USA, in press.
- S.Cavaliere and M.Russo, "Fuzzy Learning and Applications", chapter "A Novel Fuzzy Approach to Hopfield Coefficients Determination", pages 241-278, International Series on Computational Intelligence. CRC Press, USA, in press.
- M.Russo and L.Caponetto, "Hardware for Intelligent Systems", chapter "Hardware for Intelligent Systems", International Series on Computational Intelligence. CRC Press, USA, in press.
- A.Filippidis, M.Russo, and L.C.Jain, "Innovations in ART Neural Networks", chapter "Novel Extension of ART2 in Surface Landmine Detection", pages 1--16. Number 1. Physica-Verlag, Germany, 2000.
- G.Patanè and M.Russo, "Parallel Clustering on A Commodity Supercomputer, In IJCNN 2000, Proc. of the IEEE-INNS-ENNS Int. Joint Conf. on Neural Networks, volume 3, pages 575-580, 2000.

8.18 Studio computazionale di materiali avanzati

Partecipanti: P. Ballone, F. Sottile.

L'attività di ricerca della linea G3 durante l'anno 2000 si è sviluppata mediante svariate collaborazioni esterne all'INFN, lungo le linee previste dal progetto di ricerca. La parte principale della attività è stata dedicata allo studio delle proprietà di materiali organici e polimerici di interesse applicativo:

1) La reattività chimica di policarbonati è stata studiata mediante conti density functional [1], [2], ed i risultati sono stati usati per un modello idealizzato del processo di polimerizzazione di tali materiali [3], [4], [5]. Questa attività si è sviluppata grazie alla collaborazione con il Forschungszentrum Juelich (R. O. Jones e B. Montanari).

2) proprietà strutturali e vibrazionali sono state determinate mediante conti density functional per parecchi altri sistemi organici, tra i quali:

i) un carboidrato di interesse bio-chimico, il trealosio [6]. In collaborazione con un gruppo sperimentale messinese e con M. Marchi, Commissariat a l'Energie Atomique, Saclay, Francia).

ii) l'acido carbonico, un sistema di interesse astrofisico [7];(in collaborazione con R. O. Jones e B. Montanari)

iii) l'acido squarico [8], di interesse potenziale per applicazioni a dispositivi su scale molecolare (in collaborazione con C. Rovira e J. Novoa, Departament de Química Física, Barcelona).

Parallelamente a queste attività principali, sono state sviluppate alcune altre attività minori, strettamente collegate alla linea di ricerca principale di scienza dei materiali computazionale.

In particolare:

i) In collaborazione con gruppi sperimentali a Messina (S. Quartieri), Modena (G. Vezzalini) e Grenoble (A. Sani), sono state studiate transizioni di fase peculiari in zeoliti sotto pressione, dovute alla componente acquosa del sistema [9].

ii) In collaborazione con un gruppo sperimentale a Catania (F. Priolo) è stata studiata la struttura di complessi erbio-ossigeno in silicio cristallino. Questo progetto rientra nella attività prevista di indagine di legami misti ionici-colalenti. I relativi manoscritti sono in preparazione.

iii) In collaborazione con B. N. J. Persson sono state studiati alcuni meccanismi atomistici che danno origine all'attrito. [10], [11].

[1] Catalytic reactions of living polymers: density functional study of reactivity of phenol and phenoxides with the cyclic tetramer of polycarbonate, P. Ballone, B. Montanari and R.O.Jones, J. Phys. Chem. A104, 2793 (2000).

[2] Density functional study of reactions of phenoxides with polycarbonate - P. Ballone and R. O. Jones, J.Phys.Chem. A105, 3008 (2001).

[3] Equilibrium polymerization of cyclic carbonate oligomers, P. Ballone and R. O. Jones, inviato a J. Chem. Phys.

[4] Reactions and Polymerization in Polycarbonate, R. O. Jones and P. Ballone, Proceedings of the Spring Meeting of the Materials Research Society, San Francisco, April 2001.

[5] Ring opening polymerization of carbonate oligomers: a first order transition driven by polydispersity and excluded volume effects. P. Ballone and R. O. Jones, e' attualmente nelle fasi finali di redazione.

[6] Structural and vibrational properties of trehalose: a density functional study - P.~Ballone, M.~Marchi, C.~Branca and S.~Magazu', J. Phys. Chem. B104, 6313 (2000).

[7] Density functional study of carbonic acid clusters. P. Ballone, B. Montanari and R.O. Jones, J.Chem.Phys. 112, 6571 (2000).

[8] Hydrogen bonding and collective proton modes in condensed squaric acid systems: a density functional study. C. Rovira, P. Ballone, J. Novoa, inviato a J. Chem. Phys.

[9] Identification of the high-pressure deformation mechanism in the zeolite scolecite: a combined computational and experimental approach - P. Ballone, S. Quartieri, A. Sani and G. Vezzalini, inviato ad American Mineralogist.

[10] Squeezing lubrication films: layering transition for curved solid surfaces with long range elasticity - B.N.J.Persson, and P.Ballone, J.Chem.Phys. 112, 9524 (2000).

[11] Boundary lubrication: layering transition for curved solid surfaces with long-range elasticity - B.N.J.Persson, and P.Ballone, Solid State Commun. 115, 599 (2000).

8.19 Polimorfismo di liquidi semplici

Partecipanti: Prof. Gianpietro Malescio

Sono state studiate, utilizzando teorie integrali e simulazione numerica, le proprietà di sistemi modello di fluidi semplici interagenti con potenziali in grado di esibire, in funzione dei valori di pressione e temperatura, due differenti scale di lunghezza. In particolare è stato analizzato il comportamento di fase di tali sistemi in relazione all'esistenza di un polimorfismo nella fase fluida. Ciò ha permesso di comprendere quali caratteristiche dell'interazione intermolecolare sono essenziali nel dar vita a un equilibrio liquido-liquido, ritenuto sinora tipico di sostanze interagenti con un potenziale anisotropico (acqua, C, S, etc.) o di sistemi a più componenti.

- 1) G.Malescio, P.V.Giaquinta, and Y.Rosenfeld,
"Structural stability of simple classical fluids: universal properties of the Lyapunov-exponent measure",
Phys.Rev.E **61**, 4090 (2000).
- 2) G.Malescio and P.V.Giaquinta,
"Structural stability of simple fluids and accuracy of integral equation theories",
Phys.Rev.E **62**, 4439 (2000)

8.20 LETTERATURA CANADESE

Partecipanti: W. Fenton

Nel 2000 il Prof. W. Fenton ha svolto ricerca sulla letteratura canadese e sul lessico scientifico. Ha pubblicato un articolo dal titolo “Space and memory in Rohinton Mistry’s *Tales from Firozsha Baag*”, sugli atti del seminario internazionale multidisciplinare di Studi Canadesi, come autore singolo.

COGNOME E NOME	INDIRIZZI DI POSTA ELETTRONICA	numeri telefonici	numeri di fax
ABRAMO MARIA CONCETTA	abramo@vulcano.unime.it	090391745 - 6765050	090-6765042
BALLONE PIETRO	ballone@vulcano.unime.it	090-391745	090-6765042
BARNA' CALOGERO	barna@alpme2.me.infn.it	090-6765028	090-395004
BARONE MARILENA	mabarone@unime.it	090-6765033	090-395004
BRANCA CATERINA	branca@dsme01.unime.it	090-6765019	090-395004
BRUNO EZIO	eb@ginestra.unime.it	090- 393713 090-5233	090-6765042
CACCAMO CARLO	caccamo@dsme01.unime.it	090-391745 090-6765044	090-6765042
CALVO MASSIMO	massimo.calvo@unime.it	090-6765034	090-395004
CANNISTRARO G.		090-6765236	090-395004
CARINI GIUSEPPE	carini@www.unime.it	090-391478 090-6765014	090-395004
CELONA STEFANO		090-6765035	090-395004
COSIO DANIELE	rando@dsme01.messina.infm.it	090-6765037	090-6765042
COSIO DOMENICO		090-6765037	090-395004
COSTA DINO	costa@vulcano.unime.it	090-6765041	090-6765042
CRUPI VINCENZA	crupi@dsma01.messina.infm.it	090-391478 090-6765039	090-395004
CUBIOTTI GAETANO	cubiotti@vulcano.unime.it	090-393713 090-6765043	090-6765042
CUTRONI MARIA	cutroni@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765013	090-395004
D'AMICO V.	damico@alpme2.me.infn.it	090-6765027	090-395004
D'ANGELO GIOVANNA	dangelo@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765039	090-395004
DE PASQUALE DOMENICO	depasquale@alpme2.me.infn.it	090-6765028	090-395004
DENARO ANTONINO	denaro@unime.it	090-6765034	090-395004
DONATO PAOLA		090-6765031	090-395004
FARAONE ANTONIO	afaraone@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765019	090-395004
FARO MARIA		090-6765038	090-395004
FAZIO GIOVANNI	fazio@nucleo.unime.it	090-6765029	090-395004
FEDERICO MAURO	federico@www.unime.it	090-391478 090-6765015	090-395004
FENTON WILLIAM		090-6765652	090-391840
FURCI VITTORIO		090-6765037	090-395004
GALLI GIOVANNI	galli@www.unime.it	090-391478 090-6765012	090-395004
GENTILE CLAUDIO	gentile@unime.it	090-391478 090-6765022	090-395004
GIAQUINTA PAOLO VITTORIO	Paolo.Giaquinta@unime.it	+39.090.6765045	090-3973006
GIARDINA GIORGIO	giardina@nucleo.unime.it	090-6765025	090-395004
GINATEMPO BENIAMINO	bg@ginestra.unime.it	090-393713 090-6765046	090-6765042
GIORDANO RITA	giordano@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765020	090-395004
GIULIANO EURO SANDRO	esg@ginestra.unime.it	090-393713	090-6765042
INTERDONATO SALVATORE	interdon@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765036	090-395004
ITALIANO ANTONIO	italiano@alpme2.me.infn.it	090-6765021	090-395004
MAGAZU' SALVATORE	magazu@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-676	090-395004
MAISANO GIACOMO	maisano@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765017	090-395004
MAJOLINO DOMENICO	majolino@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765237	090-395004
MALESCIO GIANPIETRO	malescio@vulcano.unime.it	090-391745	090-6765042
MALLAMACE FRANCESCO	mallamac@www.unime.it	090-391478 090-6765016	090-395004
MANDANICI ANDREA	andrea@nucleo.unime.it	090-391478 090-6765013	090-395004
MIGLIARDO PLACIDO	migliard@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765018	090-395004
PAGANO FRANCESCA		090-6765031	090-395004
PARISI LUCIANO		090-6765035	090-395004

PEEBLEES HILARY		090-391840	090-391840
PELLICANE GIUSEPPE	pellicane@vulcano.unime.it	090-391745 090-6765044	090-395004
PICCOLO ANTONIO	piccolo@dsme01.messina.infm.it	090-6765013	090-395004
PIZZIMENTI GIOVANNI	pizzimen@dsme01.unime.it	090-391745	090-6765042
PONTERIO ROSINA CELESTE	ponterio@dsme01.messina.infm.it	090-391478 090-6765019	090-395004
PRESTILEO FLORA		090-391840	090-391840
PRESTIPINO GIARRITTA SANTI	prestip@sissa.it	090-391745 090-6765045	090-6765042
RACIDI ROSEMARY		090-391840	090-391840
RANDO SALVATORE	rando@dsme01.messina.infm.it	090-394286 090-6765042	090-6765042
RUGGERI ALDO		090-6765022	090-395004
RUGGERI ROBERTO	ruggeri@dsme01.unime.it	090-393713 090-6765046	090-6765042
RUSSO MARCO		090-67675505	090-395004
SALVATI GIUSEPPE		090-6765051	090-395004
SCIMONE MARISA		090-391840	090-391840
SILIPIGNI CLAUDIA		090-6765051	090-395004
TACCONI A.	giardina@nucleo.unime.it	090-6765025	090-395004
TORRISI LORENZO	torrisi@alpmez.infn.it	090-6765052	090-6765042
TRIFIRO' A.		090-6765036	090-395004
TRIPODO GASPARE	tripodo@dsme01.messina.infm.it	090-6765039	090-395004
TROZZI ADRIANA		090-391840	090-391840
VALENTINI MICHELE		090-391840	090-391840
VENUTI VALENTINA	vvenuti@dsme01.messina.infm.it	090-6765019	090-395004
VILLARI VALENTINA	villari@dsme01.messina.infm.it	090-6765019	090-395004
WANDERLINGH FRANCO	wanderf@dsme01.messina.infm.it	090-6765011	090-395004
WANDERLINGH ULDERICO	wanderu@dsme01.messina.infm.it	090-6765023	090-395004