



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA**

**DIPARTIMENTO DI FISICA**

C.da Papardo, Salita Sperone 31, 98166 Messina



**RAPPORTO DI ATTIVITA'**

**Anno 2005**

Tel.: +39 – 0906765031 Fax: +39 090395004

WEB page: <http://ww2.unime.it/dipfisica/>

## INDICE

<b>INTRODUZIONE</b> .....	3
<b>1 Struttura del Dipartimento</b> .....	4
<b>2 Organi</b> .....	5
<b>3 Personale</b> .....	6
3.1 Professori di ruolo .....	6
3.2 Ricercatori ed Assistenti di ruolo .....	6
3.3 Personale Tecnico-Amministrativo dell'Università .....	6
3.4 Personale Tecnico-Amministrativo dell'INFN .....	6
3.5 Personale non strutturato .....	7
<b>4 Dottorato in Fisica</b> .....	8
<b>5 Tesi di Laurea e di Dottorato di Ricerca in Fisica</b> .....	9
<b>6 Attività di Ricerca</b> .....	10
6.1 Fisica dei Plasmi generati da Laser .....	11
6.2 Correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie e Studio delle applicazioni del radiation processing .....	15
6.3 Produzione dei Nuclei Pesanti e Superpesanti .....	18
6.4 Materiali Amorfi .....	20
6.5 Proprietà Strutturali e Dinamiche di Sistemi Disordinati .....	23
6.6 Proprietà Strutturali e Dinamiche di Sistemi Complessi Puri e Confinati. Fisica Applicata ai Beni Culturali e alla Biofisica .....	26
6.7 Studio teorico e simulativo della struttura e degli equilibri di fase in fluidi complessi .....	31
6.8 Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia .....	33
6.9 Fisica dei Sistemi Complessi .....	35
6.10 Proprietà termodinamiche e strutturali di leghe metalliche .....	37
6.11 Informatica: M <sup>2</sup> AG: Milan-Messina Action Group .....	38
<b>A. Contatti: telefono, posta elettronica e fax</b> .....	39

## INTRODUZIONE

**L'anno 2005** è stato il diciassettesimo anno di vita del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina, che è stato costituito l'01/01/1989 per proseguire le attività del preesistente Istituto di Fisica Generale. Il Dipartimento è costituito da 29 professori di ruolo, 3 ricercatori, 1 assistente di ruolo, 10 unità di personale tecnico e amministrativo e da 3 dipendenti dell'INFN. Il Dipartimento è sede autonoma del Dottorato di Ricerca in Fisica dall'anno della sua costituzione ed è la sede elettiva in cui i dottorandi seguono i corsi di dottorato e svolgono la loro attività di ricerca. I docenti ed i ricercatori del Dipartimento svolgono la propria attività di ricerca principalmente nei campi della Fisica della Materia, della Fisica Nucleare e della Fisica applicata ai Beni culturali ed ambientali. Alcuni docenti del Dipartimento ricoprono ruoli di responsabilità gestionale e scientifica negli enti di ricerca e presso laboratori nazionali e internazionali. La produzione scientifica dei docenti del Dipartimento nell'anno 2005 è documentata da oltre 90 lavori su riviste internazionali con referee e dalla partecipazione a congressi internazionali (79 comunicazioni). Il costante potenziamento delle attività di ricerca, realizzato negli ultimi anni, è legato anche alla disponibilità di borse di studio di dottorato e post-dottorato e di assegni di ricerca, utilizzate presso il Dipartimento da giovani ricercatori. I professori di ruolo del Dipartimento di Fisica svolgono la loro attività didattica nei numerosi corsi di Laurea Triennale e Magistrale attivati presso le Facoltà di Scienze MM.FF.NN., di Ingegneria, di Medicina e di Farmacia dell'Università di Messina e inoltre anche tutti i ricercatori hanno svolto nell'anno accademico 2004/05 almeno un corso ufficiale. Il Dipartimento è impegnato in modo particolare nella preparazione dei futuri fisici. Parte integrante della formazione del fisico, oltre ai corsi istituzionali, è lo svolgimento della tesi di laurea di secondo livello che porta, di norma, ad inserire almeno per un anno gli studenti nella attività di ricerca dei gruppi, con l'opportunità di raggiungere risultati originali. Nell'anno 2005 sono state portate a termine, presso il Dipartimento di Fisica, 26 tesi di Laurea e di Laurea specialistica e 7 tesi di Dottorato di Ricerca (XVIII Ciclo).

Il 2005 è stato anche l'anno mondiale dedicato alla Fisica e il Dipartimento ha voluto inserirsi tra le manifestazioni svolte in tutto il mondo con due iniziative:

- un Convegno dedicato ad Ettore Majorana nel corso del quale è stata intitolata allo scienziato un'aula del Dipartimento ed è stato emesso uno speciale annullo filatelico;

- l'apertura, all'interno del Museo della Scienza della Facoltà, di una sezione dedicata alla Fisica con strumentazione antica ed esperienze divulgative fornite dal nostro Dipartimento.

## **1 – STRUTTURA DEL DIPARTIMENTO**

Il Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina è articolato in tre *Sezioni*, un *centro* di criogenia e due *Gruppi Operativi*:

Sezione di Struttura della Materia

Sezione di Fisica Teorica e computazionale, informatica

Sezione di Fisica Nucleare

Centro di Criogenia

Gruppo Operativo di Fisica Applicata \*

Gruppo Operativo di didattica della Fisica

\*Il Gruppo Operativo di Fisica Applicata può svolgere anche attività di consulenza conto terzi nei seguenti ambiti:

Fisica Ambientale

Conservazione dei Beni culturali

Criminalistica

Informatica

Presso il Dipartimento operano:

13 Professori Ordinari

16 Professori Associati

4 Ricercatori

11 Borsisti

10 Dottorandi

13 Unità di personale Tecnico e Amministrativo (Università)

3 Unità di personale Tecnico e Amministrativo (I.N.F.N.)

Inoltre nel Dipartimento sono inseriti tecnici appartenenti all' Istituto Nazionale di Fisica Nucleare (INFN).

Presso il Dipartimento è attivato il Dottorato di Ricerca in Fisica

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

Corso di laurea	in Fisica
	in Chimica

in Chimica industriale  
in Biologia ed Ecologia Marina  
in Matematica  
in Scienze Biologiche  
in Scienze Naturali  
in Ingegneria Civile  
in Ingegneria Elettronica  
in Ingegneria dei Materiali  
in Informatica  
in Analisi e Gestione dei Rischi Naturali ed Antopici

## **2 - ORGANI**

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

### *Consiglio di Dipartimento*

13 Professori Ordinari, 16 Professori Associati, 3 Ricercatori, 1 Assistente ordinario, il Segretario Amministrativo, 1 Rappresentante dei dottorandi di ricerca, 1 Rappresentante del personale tecnico-amministrativo.

### *Direttore*

Prof. G. MAISANO

### *Segr. Amm.vo:*

S. CAMPOBELLO

### *Giunta*

F. BROCCIO  
G. CARINI  
G. D'ANGELO  
D. DE PASQUALE  
G. GIARDINA  
S. MAGAZU'  
G. MALESCIO  
G. PIZZIMENTI  
U. WANDERLINGH

### 3 – PERSONALE

#### 3.1 Professori di ruolo

M.C. ABRAMO	Associato di Fisica della Materia
E. BRUNO	Associato di Fisica della Materia
C. BARNA'	Associato di Fisica Nucleare
C. CACCAMO	Ordinario di Fisica della Materia
G. CARINI	Ordinario di Fisica Sperimentale
M. CUTRONI	Ordinario di Fisica Sperimentale
V. D'AMICO	Associato di Fisica Sperimentale
G. D'ANGELO	Associato di Fisica Sperimentale
D. DE PASQUALE	Associato di Fisica Nucleare
G. FAZIO	Associato di Complementi di Fisica
G. GALLI	Associato di Fisica Sperimentale
P. GIAQUINTA	Ordinario di Fisica della Materia
G. GIARDINA	Ordinario di Fisica Sperimentale
B. GINATEMPO	Ordinario di Fisica Sperimentale
R. GIORDANO	Associato di Fisica Sperimentale
E. S. GIULIANO	Ordinario di Fisica della Materia
S. MAGAZU'	Straordinario di Fisica Sperimentale
G. MAISANO	Ordinario di Fisica Sperimentale
D. MAJOLINO	Straordinario di Fisica Sperimentale
G. MALESCIO	Associato di Fisica della Materia
F. MALLAMACE	Ordinario di Fisica Sperimentale
P. MIGLIARDO	Ordinario di Fisica Sperimentale
G. PIZZIMENTI	Associato di Fisica Teorica
A. PROVETTI	Associato di Informatica
R. RUGGERI	Associato di Fisica Sperimentale
L. TORRISI	Straordinario di Fisica Sperimentale
G. TRIPODO	Associato di Fisica Sperimentale
F. WANDERLINGH	Ordinario di Fisica Sperimentale
U. WANDERLINGH	Associato di Fisica Sperimentale

#### 3.2 Ricercatori ed Assistenti di ruolo

F. BROCCIO	Ass. di ruolo - Settore FIS/06
V. CRUPI	Ricercatore – Settore FIS/01
M. FEDERICO	Ricercatore – Settore FIS/01
A. ITALIANO	Ricercatore "INFN"
S. PRESTIPINO GIARRITTA	Ricercatore – Settore FIS/03

#### 3.3 Personale Tecnico-Amministrativo

M. CALVO	Assistente Tecnico
S. CAMPOBELLO	Coordinatore Amministrativo
D. COSIO	Agente Tecnico
P. DONATO	Assistente Amministrativo

M. FARO	Funzionario Amministrativo
V. FURCI	Collaboratore Contabile
C. GENTILE	Coordinatore Tecnico
S. INTERDONATO	Coordinatore Tecnico
F. PAGANO	Operatore Amministrativo
G. PANTO'	Assistente Amministrativo (UNILAV)
S. RANDO	Assistente Amministrativo

### **3.4 Personale Tecnico-Amministrativo dell'I. N. F. N.**

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

### **3.5 Personale non strutturato**

#### **Personale Tecnico a contratto**

E. COSIO	Assistente Tecnico
D. BONANNO	Assistente Tecnico

#### **Assegnisti di Ricerca:**

Caterina Branca, Dino Costa, Andrea Mandanici, Federica Migliardo, Antonio Faraone, Giuseppe Pellicane, Giovanna Romeo, Antonio Trifirò, Marina Trimarchi.

#### **Borsisti Post-Doc:**

Valentina Venuti.

#### **Dottorandi:**

##### ***Ciclo XVIII***

Allitto Francesco, Barilaro Donatella, Carini Giovanni, Esposito Pino Rubens, Mangione Alfonso, Picciotto Antonino.

##### ***Ciclo XIX***

Caridi Francesco, Corsaro Carmelo, Crupi Cristina, La Rocca Sergio, Longo Francesca, Mandaglio Giuseppe.

##### ***Ciclo XX***

Beltrano Joseph John, Borzumati Melania, Emanuele Umberto, Mammano Francesco, Margarone Daniele, Palmisano Vincenzo, Raimondo Anna.

#### 4. DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA

Il primo Dottorato di Ricerca in Fisica è stato istituito nell'anno ac.1982/83 ed è continuato ininterrottamente fino all'anno solare 2005. In questo anno si sono tenuti i cicli XVIII, XIX e XX.

*Coordinatore Prof. Carlo Caccamo.*

I seguenti cicli di lezioni (moduli) sono stati tenuti da docenti afferenti al Dipartimento di Fisica durante l'anno solare 2005:

Anno 2005

Lezioni Dottorato di Ricerca I anno XX ciclo

Fisica dello Stato Solido I Modulo	Prof. E. Bruno, Prof. B. Ginatempo
Fisica dello Stato Solido II Modulo	Prof. E. Bruno, Prof. B. Ginatempo
Fisica dei Sistemi Disordinati	Prof. S. Magazù, Prof.ssa G. D'Angelo
Fisica dei Sistemi a Molti Corpi (a-b)	Proff. C. Caccamo, G. Malescio, Dott. S. Prestipino
Teoria della Funzione di Risposta	Prof. F. Wanderlingh
Tecniche di Calcolo della Fisica	Prof. E. Bruno,
Teoria delle Interazioni Fondamentali	Prof. D. De Pasquale
Introduzione alle Tecniche Spettroscopiche	Prof. F. Wanderlingh
Spettroscopia Neutronica	Prof. U. Wanderlingh
Spettroscopia Ottica	Prof. D. Majolino, Dott.ssa V. Crupi,
Acquisizione ed Elaborazione dei Dati Sperimentali	Prof. D. Majolino
Teoria delle Reazioni Nucleari	Prof. G. Giardina
Spettroscopia Nucleare	Prof. R. Barnà
Astrofisica Nucleare e Subnucleare	Prof. D. De Pasquale
Spettroscopia Acustica e Dielettrica	Prof. G. Tripodo
Laboratorio di Analisi Numerica	Prof. B. Ginatempo
Elementi di Meteorologia	Prof. F. Broccio
Inquinamento acustico e normativa	Dott. M. Federico
Inquinamento da particolato	Prof. L. Torrisi

Anno 2005

Lezioni Dottorato di Ricerca II anno XIX ciclo

Fisica dei Sistemi Polimerici e Transizioni di Fase	Prof. F. Mallamace
Teoria dei Sistemi	Prof. S. Magazù
Spettroscopia Acustica e Dielettrica	Prof. G. Tripodo
Spettroscopia Elettronica	Prof. G. Mondio
Spettroscopia Nucleare	Prof. R. Barnà
Spettroscopia Ottica	Prof. D. Majolino, Dott. V. Crupi
Laboratorio di Analisi Numerica	Prof. B. Ginatempo
Fisica dei Sistemi Disordinati	Prof. S. Magazù, Prof. G. D'Angelo
Astrofisica Nucleare e Subnucleare	Prof. D. De Pasquale



## 5- TESI DI LAUREA E DI DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA - ANNO 2005

### A. Tesi di Laurea

COGNOME E NOME	RELATORE	ARGOMENTO TESI di LAUREA
Jamila Kweder	M. Federico	Riconoscimento vocale ad inseguimento
Emanuele Morgana	M. Federico	Sviluppo e realizzazione di un sistema embedded standalone per la gestione e controllo remoto di un acceleratore lineare per elettroni
Giuseppe Maiorana	G. Carini	Superconduttori ad alta temperatura critica
Salvatore Barone	P. Migliardo	Tecniche dosimetriche in radioterapia intraoperatoria con acceleratore dedicato
Antonio Benedetto	S. Magazu'	Spettroscopia di luce di Sincrotrone
Giuseppe Ciano	C. Caccamo	Indagine teorica sul diagramma di fase di fluidi semplici
Gianmarco Munaò	C. Caccamo	Studio simulativi di equilibri di fase in sistemi macromolecolari
Aristotiles Markopoulos	U. Wanderlingh	Nuovi Biomateriali: Applicazioni e caratterizzazione
Marina Manganaro	G. Giardina	Effetti sui prodotti delle reazioni tra ioni pesanti, dovuti alla struttura dei nuclei e alla dinamica di reazione
Valeria Conti Nibali	G. D'Angelo	Processi di rilassamento nella fisica della materia
Lilla Schirò	D. Majolino	La spettroscopia in trasformata di Fourier
Valentina Lo Schiavo	G. Carini	La superfluidità
Rosa Ruggeri	D. Majolino	Acqua: generalità ed anomalie
Emanuela Giuffrè	P. Giaquinta	Modelli di potenziale e transizione liquido- solido in gas rari ad alta pressione. uno studio di simulazione
Simona Lanzafame	S. Magazu'	Lo scattering di neutroni nello studio delle proprietà strutturali e dinamiche dei sistemi materiali
Vittoria Morabito	L. Torrisi	Caratterizzazione dosimetria di un rivelatore diamante CVD adoperabile in adroterapia
Katia Lo Presti	A. Provetti	Un classificatore automatico per il riconoscimento di disturbi alle capacità inferenziali
Biagio Bonasera	A. Provetti	Un algoritmo per la ricerca efficiente su insiemi ordinati Laurea Specialistica in Informatica
L. Cascone A. Guerrieri C. Nastasi	A. Provetti	Sistema di visione artificiale per robot autonomo finalizzato al riconoscimento di tagged objects
Enza Livoti	U. Wanderlingh	Nuclear Magnetic Resonance ed applicazioni nell'imaging
Claudio Zanghì	U. Wanderlingh	Progettazione di un sistema di misura on-line della viscosità
Tiziana Denaro	U. Wanderlingh	Small angle neutron scattering in soluzioni di biomolecole
A. Ridolfo	E. Bruno	Teorie elettroniche ab inizio per sistemi metallici
Giulio Miceli	E. Bruno	Transizioni di fase ordine disordine in leghe metalliche: fenomenologia, teorie di Landau e di Ginzburg-Landau

### B. Tesi di Dottorato

COGNOME E NOME	TUTOR	ARGOMENTO TESI DI DOTTORATO
Barilaro Donatella	D. Majolino	Spectroscopic investigation of Cultural Heritage artworks
Carini Giovanni	G. Tripodo	Eccitazioni di bassa energia ed anarmonicità in vetri borati

Esposito Pino Rubens	P.V. Giaquinta	Ordine strutturale nell'acqua. Un'indagine sul modello TIP4P basta sull'entropia
Mangione Alfonso	S. Magazù, L. Torrisi	Structural and dynamic properties of carbon nanotubes and nanostructures
Picciotto Antonino	L. Torrisi	Temperature characterization of plasmas generated by high power pulsed lasers
Massimo Marchi	A. Provetti	Back and forth between Grid/Web Services and declarative specification Dottorato di ricerca in Informatica, XVIII ciclo Consorzio Milano, Messina e Insubria
Alessandra Mileo	A. Provetti	Preference Specification and Enforcement in Declarative Policies Dottorato di ricerca in Informatica, XVIII ciclo Consorzio Milano, Messina e Insubria

## 6. Attività di Ricerca

Le attività di ricerca del Dipartimento si articolano essenzialmente nelle seguenti 11 linee:

- 1 Fisica dei Plasmi generati da Laser
- 2 Correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie e Studio delle applicazioni del radiation processing
- 3 Produzione dei Nuclei Pesanti e Superpesanti
- 4 Materiali Amorfi
- 5 Proprietà Strutturali e Dinamiche di Sistemi Disordinati
- 6 Proprietà Strutturali e Dinamiche di Sistemi Complessi Puri e Confinati. Fisica Applicata ai Beni Culturali e alla Biofisica
- 7 Studio teorico e simulativo della struttura e degli equilibri di fase in fluidi complessi
- 8 Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia
- 9 Fisica dei Sistemi Complessi
- 10 Proprietà termodinamiche e strutturali di leghe metalliche
- 11 Informatica: M<sup>2</sup>AG: Milan-Messina Action Group

## 6.1 Fisica dei Plasmi generati da Laser

Componenti del Gruppo: Prof. L. Torrissi (Responsabile); Dr.ssa A.M. Mezzasalma; Dr. A. Picciotto; Dr. A. Mangione; Dr. D. Margarone; Dr. F. Caridi; Dr. J.J. Beltrano; Dr. C. Gentile; Dr. E. Amato; Dr. S. Gammino.

Nel 2005 è stato inaugurato il “Laboratorio di Fisica dei Plasmi generati da laser”, presso il Dipartimento di Fisica della Ns. Università, diretto dal Prof. L. Torrissi. In tale laboratorio, grazie a fondi INFN-Gr. V (progetto PLAIA) è stato installato un laser Nd:Yag di potenza operante in regime di  $10^{10}$  W/cm<sup>2</sup>, con lunghezza d’onda di 532 nm, un impulso di 3 ns, una energia di impulso di 300 mJ ed una ripetibilità di impulso di 10 Hz. In tale laboratorio sono stati installati anche una serie di strumentazioni adatte ad investigare le proprietà di plasmi in non-equilibrio generati da impulsi laser in una camera da alto vuoto. Tra questi un quadrupolo di massa che, di seguito a ionizzazione controllata, permette di rivelare le specie neutre e cariche emesse dal plasma nonché gli aggregati molecolari sviluppati fino a 300 amu. Grazie a deflessione elettrostatica controllata, lo strumento permette di misurare le distribuzioni in energia delle particelle neutre e cariche nel range 1 eV-1000 eV con risoluzione di 1 eV. Altra strumentazione di supporto, come un microscopio ottico, un elettrometro di alta sensibilità, elettronica di rivelazione, targhette e materiale di consumo sono stati acquistati con fondi di Ateneo.

L’attività di ricerca svolta nel 2005 ha permesso di studiare l’ablazione laser di targhette metalliche, di misurare le soglie ablative, i crateri prodotti ed i tassi di ablazione. Un modello teorico proposto ha permesso di giustificare i risultati sperimentali inerenti le soglie di ablazione e di spiegare i processi fisici che interessano tale fenomeno.

Le misure di particelle neutre e cariche emesse dal plasma hanno permesso di risalire alla frazione di ionizzazione del plasma, alla distribuzione degli stati di carica degli ioni prodotti, alle distribuzioni in energia di tali particelle, alla temperatura ed alla densità del plasma, alla distribuzione angolare delle particelle emesse ed ai meccanismi di base che controllano tale fenomeno. Processi termici, di espansione adiabatica e di accelerazione elettrica caratterizzano i plasmi in non equilibrio generati da impulsi laser. Le distribuzioni di energia delle particelle, di tipo Boltzmann, presentano uno shift energetico che può essere spiegato sulla base della distribuzione Coulomb-Boltzmann-Shiftata e che indica la presenza di un elevato campo elettrico sviluppato nel plasma, immediatamente sopra la superficie della targhetta, e diretto prevalentemente lungo la direzione normale alla superficie della targhetta irradiata. Preliminari misure di questo campo danno dei valori attorno a qualche MV/cm agente su distanze comparabili con quelle di Debye e per tempi confrontabili con la durata dell’impulso laser.

Sulla base delle misure eseguite una serie di possibili applicazioni sono state avanzate, come quella che riguarda l’iniezione di ioni emessi dal plasma in una tradizionale sorgente ionica per realizzare una sorgente di nuova generazione, come il progetto di un nuovo tipo di acceleratore di particelle con fascio multienergetico, di elevata corrente e di piccole dimensioni, e come l’utilizzo di processi di impiantazione ionica multienergetica per modificare le proprietà chimico-fisiche delle superfici di molti materiali esposti al plasma-laser.

Il gruppo di ricerca, costituito da molti dottorandi di ricerca e da collaboratori INFN, lavora su progetti finanziati dall’Università di Messina, dall’INFN e da progetti Europei. Si trova introdotto in una collaborazione di tipo internazionale e si avvale di strumentazione non della sola Università di Messina ma anche dei laboratori LNS di Catania e di Laboratori di ricerca esteri.

La tematica di ricerca in questione rappresenta una punta avanzata delle conoscenze fisiche nel campo dei plasmi. L’impegno notevole che i ricercatori che vi partecipano hanno mostrato ha prodotto molti risultati di rilevanza internazionale, come testimonia una ampia produttività

scientifica sia a livello di pubblicazioni su riviste internazionali che di partecipazione a conferenze internazionali con referee e con invito.

Nel Giugno 2005 il gruppo ha organizzato un Congresso Internazionale “PIBHI & PPLA2005” che ha visto la partecipazione di molti ricercatori italiani e stranieri, ed i cui Proceedings sono stati accettati per la pubblicazione sulla rivista internazionale “Radiation Effects and Defects in Solids” e sono attualmente in Press.

Nel mese di Dicembre il gruppo ha organizzato un Meeting Nazionale denominato “Risultati del progetto PLAIA” presso il Dipartimento di Fisica di Messina che ha visto la partecipazione di diversi gruppi di ricerca italiani.

I risultati ottenuti del gruppo di ricerca nel 2005 hanno permesso di fare accettare da parte dell’INFN un nuovo progetto di Ricerca di durata triennale denominato PLATONE che parte con il 2006 e che vedrà Messina in un contesto di ricerca nazionale assieme a colleghi dell’Università di Catania e di Lecce.

#### PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI CON REFEREE

1. L. Laska, K. Jungwirth, J. Krasa, M. Pfeifer, K. Rohlena, J. Ullschmied, J. Badziak, P. Parys, J. Wolowski, S. Gammino., L. Torrisci and F.P. Boody “Charge–state and energy enhancement of laser produced ions due to non-linear processes in preformed plasma” *Appl. Phys. Lett.* 86, 081502, 2005
2. M. Rosinski, J. Badziak, F.P. Boody, S. Gammino, H. Hora, J. Krasa, L. Laska, A.M. Mezzasalma, P. Parys, K. Rohlena, L. Torrisci, J. Ullschmied, J. Wolowski and E. Woryna “Application of laser ion source for ion implantation technology” *Vacuum* 78 (2005) 435–438.
3. Lorusso, F. Belloni, D. Doria, V. Nassisi, J. Wolowski, J. Badziak, P. Parys, J. Krasa, L. Laska, F.P. Boody, L. Torrisci, A. Mezzasalma, A. Picciotto, S. Gammino, L. Calcagnile, G. Quarta and D. Bleiner *Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B* 240, 229-233, 2005.
4. S. Gammino, G. Ciavola, L. Torrisci, L. Celona, L. Andò, S. Manciangli, F. Consoli, A. Galatà, A. Picciotto, A.M. Mezzasalma, J. Krasa, L. Laska, M. Pfeifer, K. Rohlena, J. Wolowski, E. Woryna, P. Parys, G.D. Shirkov and D. Hitz “Production of highly charged heavy ions by means of an hybrid source in DC mode and in afterglow mode” *Plasma Proc. and Polym.* 2, 458-463, 2005
5. L. Laska, K. Jungwirth, J. Krasa, M. Pfeifer, K. Rohlena, J. Ullschmied, J. Badziak, P. Parys, L. Ryc, J. Wolowski, S. Gammino, L. Torrisci and F.P. Boody “The effect of pre-plasma and self-focusing on characteristics of laser produced ions” *Czech. J. of Physics* 55 (6), 691-699, 2005.
6. F. Belloni, D. Doria, A. Lorusso, V. Nassisi, L. Torrisci, L. Calcagnile, G. Quarta, D. Bleiner and D. Manno “Characterization of ablation plasma ion implantation” *Nucl. Instr. And Meth. B* 240, 36-39, 2005.
7. L. Laska, J. Badziak, F.P. Boody, S. Gammino, L. Juha, K. Jungwirth, J. Krasa, E. Krousky, A. Mezzasalma, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Ryc, L. Torrisci, J. Ullschmied and J. Wolowski “Several promising application possibilities of high-power lasers” *Appl. Plasma Science* V. 5, 289-294, 2005
8. L. Torrisci, A. Ilacqua, F. Caridi, N. Campo, A. Picciotto, R. Barnà, D. De Pasquale, M. Trimarchi, A. Trifirò and L. Auditore “Measurements of gas diffusion in polyethylene irradiated by 5 MeV electron beams” *Rad. Eff. and Def. in Solids*, 2005 in press.
9. K. Rohlena, L. Laska, K. Jungwirth, J. Krasa, E. Krousky, M. Masek, M. Pfeifer, J. Ullschmied, J. Badziak, P. Parys, J. Wolowski, S. Gammino, L. Torrisci and F.P. Boody “Characteristics and applications of ion streams produced by long-pulse lasers” *Plasma Phys. and Contr. Fusion* 47, B503-B512, 2005
10. L. Torrisci, S. Gammino, A. Picciotto, J. Wolowski, J. Krasa, L. Laska, L. Calcagnile and G. Quarta “RBS analysis of ions implanted in light substrates exposed to hot plasmas laser-generated at PALS” *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 685–695.

11. E. Amato and L. Torrisci "Study of the X-ray emission from Ta plasma obtained by ns laser ablation" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 697–704.
12. J.J. Beltrano, L. Torrisci and D. Margarine "Biocompatible film decomposition by using Nd:YAG pulsed laser" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 545–552.
13. F. P. Boody, J. Badziak, H. A. Eckel, S. Gammino, J. Krasa, L. Laska, A. Mezzasalma, A.J. Pakhomov, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, W. Schall, L. Torrisci and J. Wolowski "The ALP-PALS project: optimal coupling for laser propulsion" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 525–533.
14. F. Caridi, L. Torrisci, A. Picciotto, A. M. Mezzasalma, S. Gammino, D. Margarone and J. Krasa "Neutrals' temperature in laser-generated plasma at LNS" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 639–645.
15. J. Krasa, L. Torrisci, A. Picciotto, D. Margarone, S. Gammino, L. Laska and K. Rohlena "Retrieval of currents of multiply charged ions emitted from laser-produced carbon plasma" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 609–619.
16. L. Laska, L. Ryc, J. Badziak, F.P. Boody, S. Gammino, K. Jungwirth, J. Krasa, E. Krousky, A. Mezzasalma, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Torrisci, J. Ullschmied and J. Wolowski "Correlation of highly charged ion and X-ray emissions from the laser-produced plasma in the presence of non-linear phenomena" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 557–566.
17. Mangione, L. Torrisci, A. Picciotto, F. Caridi, D. Margarone, E. Fazio, A. La Mantia and G. Di Marco "Carbon nanocrystals produced by pulsed laser ablation of carbon" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 655–662.
18. D. Margarone, L. Torrisci, A. Picciotto, F. Caridi and S. Gammino "Production of ion and electron streams by pulsed-laser ablation of Ta and Cu" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 515–524.
19. Picciotto, L. Torrisci, S. Gammino, A. M. Mezzasalma, F. Caridi, D. Margarone, L. Andò, J. Krasa, L. Laska and J. Wolowski "Temperature measurements in plasmas generated by using lasers at different intensities" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 515–524.
20. J. Wolowski, J. Badziak, A. Czarnecka, F.P. Boody, S. Gammino, J. Krasa, L. Laska, A. Mezzasalma, P. Parys, M. Rosiński, K. Rohlena, L. Torrisci and J. Ullschmied "Characteristics of laser-produced Ge ion fluxes used for modification of semiconductor materials" *Rad. Eff. & Def. in Solids* 160 (10–12) (2005) 477–482.

#### PROCEEDINGS DI CONFERENZE INTERNAZIONALI CON REFEREE

1. G. Ciavola, S. Gammino, L. Celona, S. Passerello, L. Andò, L. Torrisci, M. Cavenago, A. Galatà, P. Speadtke, K. Tinschert, R. Lang, R. Iannucci, R. Leroy, C. Barue, D. Hitz, H. Koivisto, P. Suominen, O. Tarvaineno, H. Beijers, S. Branderburg, D. Vanrooyen, C.E. Hill, D. Kuchler, H. Homeyer, J. Rohrich, L. Schachter and S. Dobrescu; "MS-ECRIS, The European Roadmap to 3rd Generation ECR Ion Sources"; *Proc. ICIS 2005*, 2, CAEN-France 12-16 Sept. 2005.
2. S. Gammino, G. Ciavola, L. Celona, L. Torrisci, S. Passerello, M. Presti, D. Mascali, L. Andò, S. Manciangli and A. Galatà; "Enhancement of ion current from the TRIPS source by means of different electron donors"; *Proc. ICIS 2005*, 42, CAEN-France 12-16 Sept. 2005.
3. L. Torrisci, S. Gammino, A. Picciotto, D. Margarone, L. Laska, J. Krasa, K. Rohlena and J. Wolowski; "Temperature measurements in plasma produced by high power lasers interacting solid targets"; *Proc. ICIS 2005*, 134, CAEN-France 12-16 Sept. 2005.
4. L. Torrisci and S. Gammino "A method of the electrical field calculation in laser-generated plasma for ion stream production" *Proc. ICIS 2005*, 211, CAEN-France 12-16 Sept. 2005.
5. J. Wołowski, J. Badziak, A. Czarneka, S. Gammino, J. Krása, L. Láska, A. Mezzasalma, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, M. Rosinski, L. Torrisci and J. Ullschmied "Interaction of high-energy laser pulses with plasmas of different density gradients" 32nd EPS Conference on Plasma Phys. Tarragona, 27 June-1 July 2005, ECA Vol. 29C, P-1.147 (2005).

6. L. Torrisci, S. Gammino, A. Picciotto, L. Andò, L. Laska, J. Krasa, K. Rohlena and J. Wolowski "Measurements of "equivalent ion temperature" in plasma pulse laser-generated at INFN-LNS and PALS" 32nd EPS Conference on Plasma Phys. Tarragona, 27 June-1 July 2005, ECA Vol. 29C, P-1.144 (2005).
7. J. Wołowski, J. Badziak, S. Gammino, J. Krasa, L. Láska, A. Mezzasalma, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, M. Rosinski, L. Torrisci and J. Ullschmied "Implantation of Ge ions into Si and SiO<sub>2</sub> substrates with the use of Ge ions produced by high-energy low-intensity laser pulses" Proc. 1<sup>st</sup> Int. Work on Semiconductor Nanocrystals, SEMINANO2005, Sep. 10-12, 2005, Budapest, Hungary.

**PUBBLICAZIONI SU REPORTS, RIVISTE NAZIONALI CON REFEREE,  
PROCEEDINGS DI CONFERENZE NAZIONALI**

1. Picciotto, L. Torrisci, F. Caridi, S. Gammino, D. Margarone, J.J. Feltrano e A.M. Mezzasalma "Misure di temperatura di plasmi in non equilibrio generati da laser a differenti intensità" SIF, XCI Congr. Naz. SIF, Catania, Sett. 05, 116, 2005.
2. D. Margarone, L. Torrisci, A. Picciotto, F. Caridi e S. Gammino "Produzione di ioni ed elettroni da ablazione laser di Ta e Cu" SIF, XCI Congr. Naz. SIF, Catania, Sett. 05, 117, 2005.
3. F. Caridi, L. Torrisci, A. Picciotto, A.M. Mezzasalma, S. Gammino e D. Margarone "Temperatura dei neutri in un plasma generato da laser ai LNS" SIF, XCI Congr. Naz. SIF, Catania, Sett. 05, 117, 2005.
4. J.J. Beltrano, L. Torrisci e D. Margarone "Deposizione di film biocompatibile utilizzando un laser pulsato Nd:YAG" SIF, XCI Congr. Naz. SIF, Catania, Sett. 05, 117, 2005.
5. A. Mangione, L. Torrisci, A. Picciotto, F. Caridi, D. Margarone, E. Fazio e A. La Mantia "Nanocristalli di diamante prodotti tramite ablazione di carbonio da laser pulsato" SIF, XCI Congr. Naz. SIF, Catania, Sett. 05, 117-118, 2005.
6. A. Picciotto, J. Krása, L. Láska, K. Rohlena, L. Torrisci, S. Gammino, L. Andò, A.M. Mezzasalma, F. Caridi, A. Ilacqua, D. Margarone, J.J. Beltrano and E. Amato "Plasma temperature and ion current measurements for gold ablation at different laser power rates" Report INFN-LNS, 4 Jan. 2005 .
7. V. Nassisi, G. Buccolieri, A. Lorusso, A. Buccolieri, L. Torrisci, L.S. Leo, A. Castellano and F. Vona "Preliminary study of selective laser cleaning of bronze patina" Proc. 2<sup>nd</sup> Int. Workshop on "Science, Technology and Culturale Heritage", AIV, Catania 9-11 November 2005
8. A.M. Patti, A. Vulcano, C. Della Rocca, A.L. Serafino, A.M. Visco ed L. Torrisci "Usura dei biomateriali impiegati nella protesi d'anca" Proc. VII Giornata di Studio su "Materiali innovativi in Biomeccanica", Ed. Università di Messina, 1 Luglio 2005, 220-226.
9. N. Campo, A.M. Visco, L. Torrisci, R. Barnà, D. De Pasquale, M. Trimarchi ed A. Trifirò "Modificazioni meccaniche nel polietilene indotte da fasci di elettroni" Proc. VII Giornata di Studio su "Materiali innovativi in Biomeccanica", Università di Messina, 1 Luglio 2005, 242-249.
10. A.M. Visco, N. Campo, L. Torrisci, G. Casella ed E. Rapisarda "Caratterizzazione di resine composite trattate con luce alogena e LED" Proc. VII Giornata di Studio su "Materiali innovativi in Biomeccanica", Università di Messina, 1 Luglio 2005, 250-259.
11. J.J. Beltrano, L. Torrisci e D. Margarone "Fotodeposizione di materiali biocompatibili" Proc. VII Giornata di Studio su "Materiali innovativi in Biomeccanica", Università di Messina, 1 Luglio 2005, 266-273.

## **6.2 Correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie e Studio delle applicazioni del radiation processing**

Componenti Gruppo di Ricerca: **F. Allitto, L. Auditore, R. C. Barnà, D. De Pasquale, V. D'Amico, U. Emanuele, A. Italiano, A. Trifirò, M. Trimarchi**

### **Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia**

Da qualche anno ormai l'attività di ricerca del gruppo è incentrata sul linac di elettroni da 5 MeV realizzato dal gruppo stesso negli anni recenti, ed attualmente residente presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina.

Nel corso del 2005 una parte dell'attività è stata rivolta al miglioramento delle performances dell'acceleratore: è stato realizzato un sistema embedded stand alone di controllo di tutte le sicurezze della macchina, in modo che sia possibile pilotarne l'accensione e lo spegnimento da remoto. Inoltre una serie di segnali sui valori assunti dai parametri operazionali della macchina vengono gestiti da un software appositamente sviluppato, in modo che, nel caso di anomalia dei suddetti parametri, essi possano essere ripristinati in automatico.

Inoltre è stato sviluppato un sistema di tunaggio automatico della radiofrequenza in cavità, in modo da garantire un controllo automatico della stabilità del fascio durante le misure.

Per quanto riguarda lo studio delle applicazioni, è proseguita l'analisi iniziata nell'anno precedente sulle proprietà dosimetriche di vetri commerciali e materiali plastici. E' stata studiata la risposta del perspex alle dosi erogate dalla macchina, ed i risultati ottenuti confermano la possibilità di utilizzare questo materiale come dosimetro per dosi fino a 800 kGy. Inoltre è stato sviluppato un sistema di lettura delle materie plastiche irraggiate, basato sull'uso di LED e fotodiodi accoppiati sulla stessa lunghezza d'onda, in modo da poter utilizzare queste plastiche come dosimetri on-line.

Anche un altro studio iniziato precedentemente, riguardante la polimerizzazione di resine epossidiche su fibre di vetro è stato continuato nel 2005, allo scopo di determinare la dipendenza dal dosimetro della velocità di polimerizzazione delle resine stesse. I risultati ottenuti mostrano come all'aumentare della frequenza di irraggiamento la velocità e la qualità di polimerizzazione aumentino in modo considerevole, suggerendo la possibilità di effettuare il trattamento a livello industriale per applicazioni come il filament winding.

Ancora, è stato perfezionato lo studio delle modifiche delle proprietà del UHMWPE in seguito ad irraggiamento con fascio di elettroni. Le misure di incremento della temperatura di fusione e di resistenza allo stress di numerosi campioni irraggiati sotto vuoto nel corso del 2005 hanno mostrato il notevole miglioramento delle proprietà fisiche del polimero in seguito all'irraggiamento. In particolare, si è dimostrato come le proprietà acquisite con questo trattamento rendano ideale il polimero per la realizzazione di protesi in campo biomedico.

Sempre partendo dall'acceleratore esistente è stato portato avanti lo studio per la realizzazione di una sorgente di raggi X per radiografie industriali e tomografie ad alta energia. In particolare, nel corso del 2005 è stato portato a termine uno studio accurato sulle proprietà di efficienza di alcuni scintillatori commerciali, al fine di scegliere il miglior rivelatore per la conversione X-luce. E' stato scelto un rivelatore BGO pixelato, che dovrebbe consentire una risoluzione dell'immagine assai elevata, consentendo quindi la rivelazione di discontinuità molto piccole su oggetti di grandi dimensioni o di materiali pesanti. Ancora, sono stati acquisiti software di ricostruzione dell'immagine radiografata, che dovrebbero consentire in futuro lo sviluppo di una tecnica tomografica ad alta precisione per oggetti costituiti da materiali pesanti.

### **Correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie**

Per quanto riguarda l'attività di questo gruppo in fisica nucleare, nell'anno 2005 è continuata

l'analisi dei dati sperimentali raccolti presso l'IREs di Strasburgo alla fine del 2003 nell'ambito dell'esperimento PARECO. Questi dati, relativi alla reazione  $^{16}\text{O} + ^{40}\text{Ca}$  (132 MeV), completeranno la statistica delle reazioni studiate precedentemente mediante il metodo delle correlazioni angolari particella – residuo. I dati preliminari, che costituiscono l'oggetto di una tesi di Dottorato, sembrano confermare la possibilità di ottenere, anche nel caso di questa reazione, una significativa informazione sullo stato di polarizzazione indotto nel nucleo target dal primo step della reazione, semplicemente dai dati di correlazione angolare, senza far uso di costosi polarimetri.

Per quanto riguarda l'esperimento ISOSPIN, che viene svolto in collaborazione con le sezioni INFN di Catania, LNS, Milano e Napoli, questo gruppo di ricerca ha partecipato durante il 2005 a diverse campagne di raccolta dati mediante il multirivelatore CHIMERA, installato presso il Laboratorio Nazionale del Sud, ed ha continuato l'analisi dei dati sperimentali raccolti negli anni precedenti. In particolare, nel corso del 2005 si è proceduto con l'identificazione in massa ed in carica delle particelle prodotte durante la reazione  $^{124}\text{Sn} + ^{124}\text{Sn}$  (35 AMeV) ed il gruppo ha dato un notevole contributo al miglioramento delle performances dei programmi di analisi  $\Delta E-E$ .

Elenco lavori pubblicati su riviste internazionali con referee:

- 1) L.Auditore, R.C.Barnà, D.De Pasquale, A.Italiano, A.Trifirò, M.Trimarchi: '*Study of a 5 MeV electron linac based neutron source*' **NIM B229** (2005) 137-143
- 2) E.De Filippo, A.Pagano, J.Wilczyński, F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, V.Baran, I.Berceanu, J.Blicharska, J.Brzychczyk, A.Bonasera, B.Borderie, R.Bougault, M.Bruno, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, A.Chbihi, J.Cibor, M.Colonna, M.D'Agostino, R.Dayras, M.Di Toro, J.Frankland, E.Galichet, W.Gawlikowicz, E.Geraci, F.Giustolisi, A.Greszczuk, P.Guazzoni, D.Guinet, M.Iacono-Manno, S.Kowalski, E.La Guidara, G.Lanzanò, G.Lanzalone, N.Le Neindre, S.Li, C.Maiolino, Z.Majka, M.Papa, M.Petrovici, E.Piasecki, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, A.Pop, F.Porto, M.F.Rivet, E.Rosato, F.Rizzo, S.Russo, P.Russotto, M.Sassi, K.Schmidt, K.Siwiek-Wilczyńska, I.Skwira, M.L.Sperduto, Ł.Świdorski, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Vannini, M.Vigilante, J.P.Wieleczko, H.Wu, Z.Xiao, L.Zetta and W.Zipper: '*Time sequence and time scale of intermediate mass fragment emission*' **Physical Review C 71**, 044602 (2005)
- 3) L.Auditore, R.Barnà, D.De Pasquale, A.Italiano, A.Trifirò, M.Trimarchi, V.Rauch, C.Beck, T.Bellot, C.Bhattacharya, D.Disdier, R.M.Freeman, F.Haas, R.Nouicer, P.Papka, M.Rousseau, A.Sánchez y Zafra, O.Stezowski, A.Strazzeri: '*A semiclassical analysis of the proton sequential emission in the  $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$  deep inelastic collision*' **Intl J Mod Phys E 14, No. 2** (2005) 239-254
- 4) E.De Filippo, A.Pagano, J.Wilczyński, F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, V.Baran, I.Berceanu, J.Blicharska, J.Brzychczyk, A.Bonasera, B.Borderie, R.Bougault, M.Bruno, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, A.Chbihi, J.Cibor, M.Colonna, M.D'Agostino, R.Dayras, M.Di Toro, J.Frankland, E.Galichet, W.Gawlikowicz, E.Geraci, F.Giustolisi, A.Greszczuk, P.Guazzoni, D.Guinet, M.Iacono-Manno, S.Kowalski, E.La Guidara, G.Lanzanò, G.Lanzalone, N.Le Neindre, S.Li, C.Maiolino, Z.Majka, M.Papa, M.Petrovici, E.Piasecki, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, A.Pop, F.Porto, M.F.Rivet, E.Rosato, F.Rizzo, S.Russo, P.Russotto, M.Sassi, K.Schmidt, K.Siwiek-Wilczyńska, I.Skwira, M.L.Sperduto, Ł.Świdorski, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Vannini, M.Vigilante, J.P.Wieleczko, H.Wu, Z.Xiao, L.Zetta and W.Zipper: '*How to calibrate the time scale of emission of intermediate mass fragments*' **Intl. J. of Mod. Phys. E 14, No.3** (2005) 353



- 5) E. De Filippo, A. Pagano, E. Piasecki, F. Amorini, A. Anzalone, L. Auditore, V. Baran, I. Berceanu, J. Blicharska, J. Brzychczyk, A. Bonasera, B. Borderie, R. Bougault, M. Bruno, G. Cardella, S. Cavallaro, M. B. Chatterjee, A. Chbihi, M. Colonna, M. D'Agostino, R. Dayras, M. Di Toro, J. Frankland, E. Galichet, W. Gawlikowicz, E. Geraci, F. Giustolisi, A. Grzeszczuk, P. Guazzoni, D. Guinet, M. Iacono-Manno, S. Kowalski, E. La Guidara, G. Lanzañó, G. Lanzalone, N. Le Neindre, S. Li, S. Lo Nigro, C. Maiolino, Z. Majka, M. Papa, M. Petrovici, S. Pirrone, R. Planeta, G. Politi, A. Pop, F. Porto, M. F. Rivet, E. Rosato, F. Rizzo, S. Russo, P. Russotto, M. Sassi, K. Schmidt, K. Siwek-Wilczynska, I. Skwira, M. L. Sperduto, J. C. Steckmeyer, L. Swiderski, A. Trifirò, M. Trimarchi, G. Vannini, M. Vigilante, J. P. Wielceczko, J. Wilczynski, H. Wu, Z. Xiao, L. Zetta, and W. Zipper: "Dynamical fission in  $^{124}\text{Sn} + ^{64}\text{Ni}$  collision at 35 AMeV" **Physical Review C** **71**, 064604 (2005)
- 6) L. Auditore, R.C. Barnà, D. De Pasquale, A. Italiano, D. Loria, A. Trifirò, M. Trimarchi: 'Design of a 5 MeV electron linac based X-ray source' **NIM B240** (2005) 913-922
- 7) M. Alderighi, F. Amorini, A. Anzalone, N. Arena, L. Auditore, R. Bassini, C. Boiano, G. Cardella, S. Cavallaro, M. B. Chatterjee, M. D'Andrea, E. De Filippo, F. Fichera, E. Geraci, F. Giustolisi, N. Guardone, A. Grimaldi, P. Guazzoni, E. La Guidara, G. Lanzañó, G. Lanzalone, C. Maiolino, D. Nicotra, A. Pagano, M. Papa, S. Pirrone, G. Politi, F. Porto, A. Pullia, F. Rizzo, S. Russo, P. Russotto, D. Santonocito, G. Saccà, M. Sassi, W. Udo Schröder, G. Sechi, A. Trifirò, J. Töke, M. Trimarchi, S. Urso and L. Zetta: "Particle identification via pulse shape analysis for large-area silicon detectors of the CHIMERA array" **IEEE Transactions on Nuclear Science**, vol. **52 n.5** (2005) 1624-1629
- 8) Auditore L, Barna RC, De Pasquale D, Interdonato S, Italiano A, Trifiro A, Trimarchi M: "Compact 300 keV electron gun for radiation processing" **Review of Scientific Instruments** **76 (12)**: Art. No. 123301 DEC 2005

Elenco comunicazioni a Congressi Nazionali ed Internazionali:

- 1) L. Auditore, R.C. Barnà, D. De Pasquale, U. Emanuele, A. Italiano, A. Trifirò, M. Trimarchi, 'A compact 5 MeV S-band electron linac based X-ray source for industrial radiography', to be published in **Proceedings PAC05, IEEE**, Knoxville, Tennessee.
- 2) L. Auditore, R.C. Barnà, V. D'Amico, D. De Pasquale, A. Italiano, D. Loria, A. Trifirò e M. Trimarchi, 'Realizzazione di una sorgente compatta di raggi X per radiografie ad alta energia', **XCI Congresso S.I.F., Catania, 26 Settembre – 01 Ottobre 2005.**
- 3) Auditore L., Barnà R.C., Barreca D., Bellocco E., De Pasquale D., Emanuele U., Italiano A., Laganà G., Marino C., Raffaele L., Trifirò A., Trimarchi M. 'Un dosimetro economico per radiation processing basato sull'uso di vetri commerciali', **XCI Congresso S.I.F., Catania, 26 Settembre – 01 Ottobre 2005.**
- 4) Auditore L., Barnà R.C., De Pasquale D., Emanuele U., Italiano A., Trifirò A., Trimarchi M., 'Un sistema accelerante mono-cavità da 700 keV per radiation processing', **XCI Congresso S.I.F., Catania, 26 Settembre – 01 Ottobre 2005.**
- 5) Alderighi M., Anzalone A., Auditore L., Arena N., Bassini R., Boiano C., Campagna V., Cardella G., Cavallaro S., D'Andrea M., DeFilippo E., Geraci E., Giustolisi F., Grzeszczuk A., Guazzoni P., La Guidara E., Lanzañó G., Lanzalone G., Nicotra D., Pagano A., Papa M., Pirrone S., Politi G., Porto F., Rosato E., Russo S., Saccà G., Sechi G., Trifirò A., Trimarchi M., Urso S., Vigilante M., Zetta L., 'Recenti risultati sulla analisi in forma in rivelatore al silicio di grande superficie', **XCI Congresso S.I.F., Catania, 26 Settembre – 01 Ottobre 2005.**

### 6.3 Reazioni Nucleari per la Sintesi degli Elementi Pesanti e Superpesanti

*Partecipanti* Proff. Giovanni Fazio, Giorgio Giardina e Roberto Ruggeri, e Dr. Giuseppe Mandaglio (Dottorando del XIX ciclo)

Lo studio della dinamica di reazione è continuamente stimolata dalla ricerca di opportune coppie di nuclei proiettile-bersaglio ed energie dei nuclei incidenti per sintetizzare gli elementi superpesanti e rivelare i residui di evaporazione.

L'analisi delle caratteristiche dei prodotti di reazione, come la distribuzione di massa-energia e la distribuzione angolare, non può fornire senza ambiguità la stima della sezione d'urto di fusione che è importante per valutare la funzione di eccitazione dei residui di evaporazione specialmente nei casi di reazioni per la sintesi di elementi superpesanti. Il problema è dovuto all'ampia sovrapposizione delle menzionate caratteristiche dei frammenti formati a seguito delle deep-inelastic collisions tra ioni pesanti, o a seguito della loro completa fusione e successiva fissione del nucleo composto, o a seguito della incompleta fusione e successiva quasifissione. Quest'ultimo processo porta alla formazione di frammenti binari senza che sia prima avvenuta la formazione di un nucleo composto. Solo una corretta stima delle sezioni d'urto dei menzionati processi ci consente di ricostruire il meccanismo di reazione.

Il modello da noi utilizzato e rielaborato è basato sul DiNuclear System concept (DNS-concept), e considera la formazione dei residui di evaporazione come l'ultimo dei tre stadi del processo di reazione: la formazione di un sistema dinucleare; la transizione del sistema dinucleare verso il nucleo composto come uno dei possibili canali in cui il sistema dinucleare può evolversi, in competizione con la quasifissione che è il decadimento del DNS dopo un intenso trasferimento di molti nucleoni tra i nuclei reagenti; la formazione dei residui di evaporazione come stadio finale lungo i vari steps della catena di diseccitazione del nucleo composto, in competizione ad ogni step con il processo di fissione (produzione di due frammenti).

La competizione tra fusione completa e quasifissione viene calcolata come il rapporto di canalizzazione tra le transizioni (decadimenti) del sistema dinucleare dalla sua valle di potenziale, caratterizzata dalle variabili  $R$  e  $Z$ , al *lago* della fusione che viene raggiunto dopo il superamento di una barriera intrinseca di fusione  $B_{fus}^*$  determinabile sull'asse del numero di carica, o al *mare* della quasifissione dopo il superamento della barriera di quasifissione  $B_{qf}$  determinabile sull'asse della distanza radiale. Detto rapporto di canalizzazione viene calcolato come il rapporto tra la densità dei livelli del sistema dinucleare sulla barriera intrinseca di fusione e la somma delle densità dei livelli calcolate sulla barriera intrinseca di fusione intrinseca e sulla barriera di quasifissione, per una data energia di eccitazione  $E_{DNS}^*$  del sistema dinucleare. L'altezza della  $B_{fus}^*$  è determinata dalla superficie di potenziale del sistema dinucleare che dipende dalla asimmetria di carica (o di massa), dalle peculiarità della struttura a shell dei due nuclei formanti il sistema dinucleare e dal suo momento angolare orbitale.

La nostra indagine sul meccanismo di reazione mostra una forte dipendenza della funzione di eccitazione dei residui di evaporazione dal canale d'ingresso caratterizzato dal parametro di asimmetria di massa dei nuclei collidenti e dalle loro strutture a shell, e dagli angoli di orientazione iniziale dei nuclei. L'analisi della produzione dei residui di evaporazione ottenuti in differenti reazioni che portano allo stesso nucleo composto mostra che detto nucleo viene formato con differenti distribuzioni di momenti angolari, anche quando viene raggiunta la stessa energia di eccitazione del nucleo composto.

Sono state studiate le reazioni nucleari  $^{40}\text{Ar} + ^{176}\text{Hf}$ ,  $^{86}\text{Kr} + ^{130}\text{Xe}$ ,  $^{124}\text{Sn} + ^{92}\text{Zr}$ , che portano alla formazione del nucleo  $^{216}\text{Th}$ , e le reazioni  $^{48}\text{Ca} + ^{174}\text{Yb}$  e  $^{86}\text{Kr} + ^{136}\text{Xe}$  che formano il nucleo composto  $^{222}\text{Th}$ , allo scopo di investigare gli effetti che si inducono sui prodotti finali della reazione dovuti alle strutture dei nuclei ed alla dinamica dei processi di reazione. E' stata inoltre studiata la reazione  $^{48}\text{Ca} + ^{208}\text{Pb}$  che forma il nucleo composto  $^{256}\text{No}$ , per investigare gli effetti che si inducono sui prodotti di reazione dovuti alla doppia chiusura di shell dei nuclei reagenti.

Detto studio è importante anche per progettare nuovi esperimenti e scegliere opportunamente le reazioni nucleari che conducono nelle condizioni di migliore efficacia alla formazione di ulteriori nuclei superpesanti.

#### *Papers*

- 1) G. Fazio, G. Giardina, G. Mandaglio, R. Ruggeri, A.I. Muminov, A.K. Nasirov, Yu. Ts. Oganessian, A.G. Popeko, R.N. Sagaidak, A.V. Yeremin, S. Hofmann, F. Hanappe, C. Stodel. “*Strong influence of the entrance channel on the formation of compound nuclei  $^{216,222}\text{Th}^*$  and their evaporation residues*”, Phys. Rev. C. **72**, 064614 (2005).
- 2) G. Giardina, G. Fazio, F. Hanappe, G. Mandaglio, A.I. Muminov, A.K. Nasirov and C. Saccà ., Recent Research Development in Physics, ed. Transworld Research Network, Vol. 6, pag. 195-233 (2005), ISBN: 81-7895-171-1.
- 3) Drozdov V.A., Eremenko D.O., Fotina O.V., Giardina G., Malaguti F., Platonov S.Y., Tulinov A.F., Uguzzoni A., Yuminov O.A.. “*Comparative analysis of the energy dependences of the induced fission times for the Pb-like and U-like nuclei obtained by the crystal blocking technique*” Nuclear Instruments & Methods In Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 230, 589-595 (2005).
- 4) G. Fazio, G. Giardina, G. Mandaglio, F. Hanappe, A.I. Muminov, A.K. Nasirov, W. Scheid, L. Stuttgé. “*Appearance of fast-fission and quasi-fission in reactions with massive nuclei*” Modern Physics Letters A, Vol.20, No. 6 (2005) 391.
- 5) G. Fazio, G. Giardina, A. Lamberto, C. Saccà, R. Palamara, A.I. Muminov, A.K. Nasirov, K.V. Pavliy, F. Hanappe, T. Materna and L. Stuttgé. “*Effect of the Entrance Channel on the Fission of the Compound Nucleus*”, J. Phys. Soc. Jpn. **74**, 307 (2005).

#### Comunicazioni a congressi

- 1) Fazio G., Giardina , Mandaglio G., Manganaro M., Palamara R., Ruggeri R., Saccà C., Nasirov A. K., “*il ruolo della quasifissione nelle reazioni nucleari per la sintesi degli elementi superpesanti*” XCI Congresso SIF, Catania, abstract p. 166, 2005.
- 2) G. Giardina, G. Fazio, F. Hanappe, M. Manganaro, G. Mandaglio, A.I. Muminov, A.K. Nasirov, “*The effect of the reaction entrance channel on formation of the evaporation residues*”, Third Sandanski Coordination Meeting on Nuclear Science, September 26-30, 2005, Albena, Bulgaria.
- 3) A. K. Nasirov, Y. Aritomo, A. Fukushima, M. Ohta, T.Wada, G. Giardina, G. Mandaglio, A. I. Muminov, R.K. Utamuratov. “*Role of the nuclear shell structure and angles of deformed reactants in complete fusion*”, XII Nuclear Physics Workshop, September 21-25, 2005, Kazimierz, Poland.

#### **Ospiti Stranieri del Dipartimento di Fisica durante l'anno 2005**

- K. Nasirov del Flerov Laboratory of Nuclear Reactions del JINR, Dubna, Russia.
- Ravshanbeck Utamuratov del Department of Heavy Ion Physics, Institute of Nuclear Physics, Tashkent, Uzbekistan.

## 6.4 Materiali disordinati

Componenti: Giuseppe Carini, Maria Cutroni, Giovanna D'Angelo, Mauro Federico, Andrea Mandanici, Gaspare Tripodo, Giovanni Carini, Cristina Crupi, Dr. Sergio La Rocca, Anna Raimondo,

### Progetti di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale:

(i) **Prof. M. Cutroni (coordinatore nazionale)**, *Correlazione tra struttura a corto e medio raggio e dinamica ionica in sistemi disordinati*, PRIN 2004-2006.

(ii) **Prof. G. Carini (responsabile scientifico; coordinatore nazionale: prof. G. Viliani)**, *Dinamica vibrazionale e fenomeni di rilassamento in vetri borati e polimeri amorfi*, PRIN 2005-2007.

### *A. Correlazione tra struttura a corto e medio raggio e dinamica ionica in sistemi disordinati.*

Nel corso di quest'anno di attività sono state studiate le proprietà dinamiche di sistemi disordinati quali liquidi glass-forming e vetri a conduzione ionica utilizzando principalmente la spettroscopia dielettrica a larga banda e la spettroscopia meccanica a frequenze ultrasoniche. Nell'ambito del progetto PRIN 2004-2006 'Correlazione tra struttura a corto e medio raggio e dinamica ionica in sistemi disordinati' di cui la prof. M. Cutroni è coordinatore nazionale sono state potenziate, grazie al finanziamento MIUR, le caratteristiche dei sistemi di misura sviluppati in precedenza. La risposta dielettrica di solidi e liquidi glass-forming viene infatti studiata in un vasto intervallo di frequenza da 0.001 Hz a 3 GHz utilizzando un sistema a larga banda home-made che consente di determinare sia la parte reale che la parte immaginaria della permittività dielettrica complessa dei materiali. Con l'impiego di un criostato a flusso d'elio è stato realizzato un nuovo setup sperimentale per la misura broadband delle proprietà dielettriche dei materiali fino a basse temperature (3 K). La risposta dielettrica a frequenze più alte, fino a 40 GHz viene studiata utilizzando linee di trasmissione in guida d'onda. L'apparato sperimentale progettato e realizzato in sede sfrutta un sistema di refrigerazione a ciclo chiuso mediante il quale si effettuano misure in guida d'onda da 300 K a 30 K. Le potenzialità della spettroscopia dielettrica a larga banda sono state sfruttate per approfondire in particolare il tema del confronto fra la risposta dielettrica e la risposta dinamica dei materiali, sia nel caso dei vetri a conduzione ionica sia nel caso dei liquidi glass-forming.

### 1. Vetri a conduzione ionica.

Sono state studiate le proprietà dielettriche di vetri a conduzione ionica cercando di mettere in luce le eventuali relazioni fra la risposta dinamica macroscopica e le variazioni della struttura microscopica a corto e medio range indotte da variazioni sistematiche della composizione. Nel caso dei vetri borati d'argento  $(AgI)_x(Ag_2O \cdot n B_2O_3)_{1-x}$  è stata analizzata la risposta dei campioni sia in funzione del rapporto fra  $B_2O_3$  ed  $Ag_2O$ , sia in funzione del contenuto di sale drogante AgI.

Le misure dielettriche a larga banda fino alla regione delle microonde hanno consentito di mettere in evidenza un comportamento di nearly constant loss già a temperatura ambiente. L'analisi dei risultati ha dimostrato che i vari aspetti della risposta dielettrica, quali la conducibilità dc, la forma della funzione di rilassamento, la parte reale della permittività ed il contributo di nearly constant loss, sono influenzati sistematicamente dalla composizione e dunque dalle caratteristiche strutturali a livello microscopico. Informazioni complementari sono stati ottenute mediante altre tecniche di indagine, NMR, X-rays diffraction, EXAFS, in collaborazione con il Dipartimento di Fisica dell'Università di Trento, con il CNR- Istituto per i materiali fotonici e le nanotecnologie Trento, e con il Dipartimento di Chimica-Fisica dell'Università di Pavia. Particolarmente interessante si è rivelato il confronto con i dati di risposta meccanica a frequenze ultrasoniche. Si è infatti osservato che, a differenza di quanto accade per vetri di differente composizione e varia matrice vetrosa, nei vetri borati ad alto contenuto di AgI si rivela una perfetta sovrapposizione fra il rilassamento meccanico ed il rilassamento elettrico alle frequenze dei MHz. I risultati di queste ricerche sono stati in parte esposti in pubblicazioni scientifiche e presentati in occasione di congressi

internazionali. E' in corso l'approfondimento delle suddette ricerche, con lo scopo di trovare ulteriori riscontri tramite lo studio di vetri di composizioni diverse, e di comprendere le motivazioni fisiche alla base della sorprendente e non banale analogia fra la risposta dielettrica e la risposta meccanica.

## **2. Liquidi glass-forming**

Sono state studiate le caratteristiche del rilassamento principale in liquidi glass-forming utilizzando sia la spettroscopia dielettrica a larga banda che la spettroscopia meccanica. In collaborazione con il prof Gregory B. McKenna (Texas Tech University) è stata studiata in particolare la risposta di shear nella m-toluidina in prossimità della transizione vetrosa in funzione della frequenza da 0.001 Hz a 100 Hz, giungendo all'importante risultato che i tempi di rilassamento meccanico in questo materiale coincidono con i tempi di rilassamento dielettrico. Ciò costituisce un'eccezione al comportamento generale dei sistemi glass-forming, descritto dal modello di Di Marzio e Bishop. Sono stati effettuati esperimenti sui processi di rilassamento secondario ed in collaborazione con il prof Ranko Richert (Arizona State University) è stata dimostrata l'esistenza di un processo secondario anche in liquidi semplici in cui tale processo non era stato osservato in precedenza. L'analisi dei risultati ha indicato che nel caso della m-toluidina dovrebbe esistere un ulteriore processo di rilassamento beta, oltre al rilassamento secondario di Johari-Goldstein. Ulteriori approfondimenti di questo tema di ricerca sono in corso, con l'obiettivo di evidenziare le correlazioni fra le proprietà dinamiche macroscopiche e la struttura molecolare in liquidi semplici.

## ***B. Dinamica vibrazionale e di rilassamento in vetri e polimeri amorfi***

### **1. Anarmonicità e fragilità in vetri borati**

L'attenuazione e la velocità del suono, misurate nell'intervallo di temperature fra 1.5 e 400 K a frequenze ultrasoniche ed ipersoniche in vetri borati alcalini e d'argento, hanno rivelato andamenti governati da meccanismi di tunneling quanto-meccanico ( $T < 20$  K), da processi di rilassamento termicamente attivati ( $20 \text{ K} < T < 150 \text{ K}$ ) e, per temperature più elevate, dall'anarmonicità vibrazionale. E' stato evidenziato che l'intensità di rilassamento  $C^*$  è almeno un ordine di grandezza maggiore dell'intensità di tunneling  $C$  ed inoltre diminuisce marcatamente sia in relazione a cambi strutturali controllati della struttura che all'aumentare del potere polarizzante del catione modificatore del network vetroso. Differentemente dall'andamento di  $C^*$ , l'intensità di tunneling  $C$  risulta essere indipendente dalla struttura e dall'intensità di legame esistente all'interno del network vetroso, confermando l'inerente universalità dei sistemi di tunneling. Dall'insieme delle osservazioni è stato dedotto che solo le particelle rilassanti caratterizzate dalle più basse energie di attivazione sono soggette a moti locali di tunneling. La determinazione dei coefficienti termici di Gruneisen ha permesso inoltre di stabilire una distinta correlazione fra fragilità ed anarmonicità vibrazionale dei vetri borati: una crescente fragilità di un liquido glass-forming alla transizione vetrosa è predittiva di una crescente anarmonicità del vetro.

### **2. Mobilità molecolare locale e cooperativa in network termoplastici di polimeri interpenetranti.**

Esperimenti di calorimetria a scanning differenziale e spettroscopia meccanica dinamica in network di polimeri termoplastici interpenetranti basati su PU e (S-b-AK) hanno evidenziato distinte transizioni calorimetriche e meccaniche, che sono state associate ad una inerente eterogeneità della struttura caratterizzante questi network termoplastici, dovuta ad una debole affinità termodinamica dei due componenti. In netto contrasto con queste osservazioni, sono state rivelate deviazioni da una semplice legge di additività negli andamenti al variare della composizione delle endoterme di fusione e delle intensità dei rilassamenti primari e secondari. E' stato suggerita l'esistenza di deboli interazioni specifiche (legami idrogeno) tra i gruppi funzionali dei due componenti che permettono la formazione di una microfase mista.

Pubblicazioni.

1. "Ultrasonic relaxation, anharmonicity and fragility in lithium borate glasses", Giovanni Carini, Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Gaspare Tripodo, Antonio Bartolotta, G. Salvato, *Phys. Rev. B* **72**, 14201-14210 (2005).
2. "Dynamics of glassy and liquid m-toluidine investigated by high resolution dielectric spectroscopy", A. Mandanici, M. Cutroni, R. Richert, *J. Chem. Phys.*, **122**, 84508 (2005).
3. "Slow dynamics of supercooled m-toluidine investigated by mechanical spectroscopy" A. Mandanici, X. Shi, G. B. McKenna, M. Cutroni, *J. Chem. Phys.*, **122**, 114501 (2005).
4. "Shear stress relaxation and physical aging study on simple glass-forming materials", X. Shi, A. Mandanici, G B. McKenna, *J. Chem. Phys.*, **123**, 174507 (2005)

### **Partecipazioni e Comunicazioni a congressi**

- 1) M. Cutroni, *Chairperson* at the 14th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy – Kyoto, Japan, 2005 .
- 2) A. Mandanici, M. Cutroni, R. Richert, 5<sup>th</sup> International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems - New results, Directions and Opportunities - Lille, France, 2005 - *Invited speaker*. M. Cutroni, International conference on Borate Glasses, Trento 2005 – *Invited speaker*
- 3) A. Mandanici, M. Cutroni, A. Raimondo, M. Federico, F. Rocca, C. Armellini, International Conference on Borate Glasses, Trento 2005 – Poster presentation
- 4) Mandanici, X. Shi, G.B. McKenna, M. Cutroni, "Mechanical response of a simple molecular glass former close to its Tg", 14th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy – Kyoto, Japan, 2005 – Oral contribution and participation grant
- 5) Mandanici, M. Cutroni, R. Richert, X. Shi, G. B. McKenna, "Beta relaxation process in glass forming m-toluidine", XCI Congresso della Società Italiana di Fisica, Catania, 2005
- 6) Mandanici, M. Cutroni, A. Raimondo, F. Rocca, A. Sanson, "Electrical and mechanical response of Silver molybdate glasses", XCI Congresso della Società Italiana di Fisica, Catania, 2005

### **Collaborazioni nazionali ed internazionali**

Prof. Lars Borjesson, Chalmers University, Department of Applied Physics, Goteborg, Sweden

Prof. Steve Martin, Iowa State University, Department of Materials Science and Engineering, Ames, IOWA, USA

Prof. R. Richert, Department of Chemistry and Biochemistry, Arizona State University

Prof. G. B. McKenna, Department of Chemical Engineering, Texas Tech University

Prof. Miguel A. Ramos, Departamento de Fisica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid

Prof. A. Magistris and Prof. P. Mustarelli, Dipartimento di Chimica-Fisica, Università di Pavia

Prof. R. Pelster, Universität des Saarlandes, Saarbrücken, Germany

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

Prof. G. Dalba and Prof. P. Fornasini, Dipartimento di Fisica, Università di Trento

Prof. Alexander Fainleb, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 02160 Kyiv, Ukraine

## 6.5 Proprietà strutturali e dinamiche in liquidi associati e sistemi dispersi

**Componenti:** Prof. Giacomo Maisano, Prof. Salvatore Magazù, Prof. Giovanni Galli, Dr.<sup>ssa</sup> Caterina Branca, Dr.<sup>ssa</sup> Maria Catena Bucca, Dr.<sup>ssa</sup> Federica Migliardo, Dr.<sup>ssa</sup> Giovanna Romeo

Le tematiche di ricerca affrontate nell'anno 2005 sono molteplici, e sotto alcuni aspetti assai diverse, per quanto emerge un comune motivo conduttore: l'uso integrato di tecniche di indagine sperimentali, quali la diffusione di luce laser (spettroscopia di correlazione fotonica, Raman) e l'assorbimento infrarosso in trasformata di Fourier, con esperimenti realizzati nei laboratori del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina e presso il Laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moléculaires di Lille (F), lo scattering di neutroni (diffrazione neutronica, scattering quasi-elastico di neutroni, scattering inelastico di neutroni, scattering di neutroni a piccolo angolo), con esperimenti realizzati presso l'ISIS Facility (Rutherford Appleton Laboratory, Chilton-Didcot, Oxford), il Berlin Neutron Scattering Center (BENSC, Hahn-Meitner-Institut di Berlino), il Laboratoire Léon Brillouin (LLB) di Saclay-Parigi, l'Institute Laue Langevin (ILL) di Grenoble, misure di tipo termodinamico, etc..., per la caratterizzazione delle correlazioni spazio-temporali di sistemi fisici disordinati. Tali sistemi sono caratterizzati da una *struttura dinamica* parametrizzabile per mezzo di opportune scale spazio-temporali.

In questo riferimento i temi di ricerca possono così sintetizzarsi:

- a) studio delle distanze e dei tempi caratteristici, per cui il concetto di *ordine* risulta dominante;
- b) studio delle influenze che tali proprietà di ordine esercitano sui meccanismi microscopici e macroscopici (processi di rilassamento, idratazione, coordinazione, etc...).

I sistemi sottoposti ad indagine comprendono liquidi puri in peculiari condizioni termodinamiche, liquidi molecolari ed associati, sistemi idrogenoidi, soluzioni, proteine e bioprotettori.

Risultati di rilevanza scientifica sono stati conseguiti sul tema *Indagini sperimentali delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione*. Più specificamente nel 2005 il trealosio è stato oggetto di attenzione sia sotto il profilo specificamente scientifico che per le ricadute applicative. L'interesse è principalmente connesso all'efficacia bioprotettiva, e nasce dall'osservazione che taluni organismi mostrano capacità di sopravvivenza a disidratazione e congelamento grazie alla sintesi del disaccaride. Ciò permette loro di transire in uno stato vetroso di animazione sospesa e, in caso di reidratazione, di ripristinare le funzioni vitali. L'analisi dei meccanismi molecolari coinvolti nei processi di bioprotezione, ha fornito dati di fondamentale importanza sul processo di stabilizzazione evidenziando per il trealosio un comportamento simile a quello di un inibitore competitivo. Lo *spin-off* della ricerca ha interessato svariati ambiti applicativi: dal mantenimento dell'integrità funzionale e metabolica di organismi biologici, alla conservazione di alimenti, etc.... L'aspetto applicativo della ricerca è stato curato in collaborazione la Labplants e la Dompè.

L'attività di ricerca è stata sussidiata dai seguenti finanziamenti:

- Progetto di ricerca europeo del VI Programma Quadro 2005-2006 intitolato "Finding promising drug candidates against tuberculosis with multidisciplinary protocol based non-conventional search".
- Progetto MIUR di Internazionalizzazione del Sistema Universitario 2004-2006 intitolato "Studio dell'efficacia stabilizzante e conservante del trealosio su prodotti ad elevato valore aggiunto".
- Progetto PRIN 2005 intitolato "Proprietà Dinamiche, Strutturali e Funzionali di Proteine in Sistemi Non-Liquidi Contenenti Acqua Residua: Accoppiamento con la Matrice Esterna"; programma di ricerca intitolato "Caratterizzazione mediante tecniche spettroscopiche delle proprietà strutturali e dinamiche di proteine in presenza di bioprotettori: ruolo dell'affollamento molecolare e del confinamento".
- Progetto di Ricerca dell'Università di Messina PRA interdisciplinare intitolato "Studio dei meccanismi fisico-chimici responsabili dell'efficacia dei bioprotettori finalizzato ad applicazioni biomediche".

- Progetto di Cooperazione scientifica Italia-Francia GALILEO intitolato “Meccanismi fisici della efficacia di bioprotezione del trealosio - Mécanismes physiques des capacités de bioprotection du tréhalose”, stipulato tra l’Università di Messina e l’Università di Lille.
- Progetto ATER con il Laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moléculaires dell’Université de Lille 1, Lille, Francia.

Nell’ambito del gruppo operativo di Fisica applicata, ambientale, sanitaria e dei beni culturali, costituito presso il Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina, sono state impiegate alcune metodologie fisiche nel campo dei beni ambientali, con particolare riferimento all’inquinamento elettromagnetico.

Più specificatamente l’utilizzo di rilevatori di ultima generazione, insieme alla possibilità di assemblaggio di strumenti con sonde mobili ha consentito di individuare i siti più idonei per il rilevamento puntuale delle sorgenti (quali linee di alimentazione elettrica, antenne dei servizi radiotelevisivi, impianti di telefonia cellulare, linea elettrica di tram, ecc.), all’interno di aree più vaste predefinite, allo scopo di ottenere un mappatura sufficientemente omogenea del territorio. L’attività ha previsto il monitoraggio dei livelli di elettrosmog in diverse aree urbane al fine di valutare se sussistono condizioni di superamento dei livelli di guardia previsti dalla legge. Le campagne di rilevamenti dell’intensità dei campi elettrico e magnetico sono state realizzate seguendo diversificate procedure di monitoraggio e di analisi articolate nei seguenti punti:

- Determinazione dei siti di rilevamento mediante analisi planimetrica della città, altimetrica degli edifici e delle sorgenti emittenti; procedure GIS di overlay a maglia su mappa tipografica e misure esplorative “in situ”; successivo assemblamento dei tematismi topografico-informativi e delle glosse complete ad essa connessi.
- Campionamento dei valori di campo su banda larga e banda stretta, bassa e alta frequenza, a tempo di integrazione costante e a numero di conteggi costante, nei siti in precedenza individuati.
- Analisi, trasposizione multimediale dei parametri georeferenziati e impiego di modelli previsionali per la creazione di mappe applicando metodi geostatistici di kriging per l’interpolazione (ArcGIS Geostatistical Analyst).

L’attività di ricerca ambientale è stata sostenuta da un finanziamento connesso al:

- Progetto ARPA 2004-2006 intitolato “Monitoraggio dell’inquinamento acustico ed elettromagnetico di Messina ed analisi dei dati mediante impiego di Sistemi Informativi Territoriali”.

#### **A. Articoli su Riviste con Referee:**

1 - S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo.

“Inelastic Neutron Scattering Study on EG and PEGS as a function of the Degree of Polymerisation”,

*Journal of Physical Studies*, **9**, 45 (2005).

2 - S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo.

“Neutron Scattering Investigation on Trehalose, Maltose and Sucrose/H<sub>2</sub>O Mixtures”,

*Journal of Physical Studies*, **9**, 124 (2005).

3 - C. Branca, S. Maccarrone, S. Magazù, G. Maisano, S. M. Bennington, J. Taylor.

“Tetrahedral Order in Homologous Disaccharide-Water Mixtures”,

*Journal of Chemical Physics*, **122**, 174513 (2005).

4 - C. Branca, S. Magazù, G. Maisano, M. T. F. Telling.

“Fragility characterization by neutron scattering for pure homologous disaccharides”,

*Journal of Molecular Structure*, **748**, 5 (2005).

5 - S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, C. Mondelli.

“Fragility and Bioprotectant Effectiveness by Elastic Neutron Scattering”,

*Notiziario Neutroni e Luce di Sincrotrone*, **10**, 3 (2005) (articolo su invito).

6 - S. Magazù, F. Migliardo, A. J. Ramirez-Cuesta.

“Inelastic Neutron Scattering Study on Bioprotectant Systems”,



- Journal of Royal Society Interface*, **2**, 527 (2005).
- 7 - S. Magazù, F. Migliardo, L. Coletta, G. Ruggeri.  
 “Trealosio: Integratore del Futuro”,  
*Integratori Nutrizionali*, **8**, 9 (2005) (articolo su invito).
- 8 - E. Bellocco, G. Laganà, D. Barreca, S. Ficarra, E. Tellone, S. Magazù, C. Branca, A. Kotyk, A. Galtieri, U. Leuzzi.  
 “Role of Polyols in Thermal Inactivation of Shark Ornithine Transcarbamoylase”,  
*Physiological Research*, **54**, 395 (2005).
- 9 - F. Migliardo, F. Affouard, P. Bordat, M. Descamps, A. Lerbret, S. Magazù, A. J. Ramirez-Cuesta, M. F. T. Telling.  
 “A Combined Neutron Scattering and Simulation Study on Bioprotectant Systems”,  
*Chemical Physics*, **317**, 258 (2005).
- 10 - S. Magazù, F. Migliardo, L. Coletta, G. Ruggeri.  
 “Trealosio: Stabilizzante e Idratante Cosmetico”,  
*Cosmetic Technology*, **8**, 27 (2005) (articolo su invito).
- 11 - S. Magazù, F. Migliardo, M. Vadalà, C. Mondelli.  
 “Correlation between Bioprotective Effectiveness and Dynamic Properties of Trehalose–Water, Maltose–Water and Sucrose–Water Mixtures”,  
*Carbohydrate Research*, **340**, 2796 (2005).
- 12 - A. Lerbret, P. Bordat, F. Affouard, M. Descamps, F. Migliardo.  
 “How Homogeneous are the Trehalose, Maltose and Sucrose Water Solutions? An Insight from Molecular Dynamics Simulations”  
*Journal of Physical Chemistry*, **109**, 11046 (2005).

#### **B. Proceedings con Referee e Articoli su Volume:**

- 1 - S. Magazù, A. Parmaliana.  
 “Monitoraggio dell’Inquinamento Elettromagnetico nell’Abitato di Augusta”,  
 Proceedings della 9<sup>a</sup> Conferenza Nazionale Asita, Catania 2005.
- 2 - S. Magazù, F. Migliardo, E. Bellocco, G. Laganà.  
 “Fragility and Complexity: Experiments and Simulation”,  
 CITSA Proceedings, **2**, 116 (2005).
- 3 - S. Magazù, F. Migliardo, C. Mondelli.  
 “Fragility and Complexity of Biological Systems by Neutron Scattering”,  
 Proceeding Inter. Conference on Neutron Scattering ICNS2005, Sidney Australia, 2005.

#### **C. Comunicazioni a Congresso**

- 1 - S. Magazù, F. Migliardo, E. Bellocco, G. Laganà.  
 “Complexity and Fragility in Bioprotectant Sytems”  
 International Conference on Information Systems Analysis and Synthesis: ISAS’05 and International Conference on Cybernetics and Information Technologies, Systems and Applications: CITSA’05, 14-17 Luglio 2005, Orlando, Florida, USA.
- 2 - S. Magazù, A. Parmaliana.  
 “Monitoraggio dell’Inquinamento Elettromagnetico nell’Abitato di Augusta”  
 9a Conferenza Nazionale Asita, 15-18 Novembre 2005, Catania, Italia.
- 3 - F. Migliardo. “Meccanismi Molecolari dell’Efficacia bioprotettiva del Trealosio”  
 premio “L’Oreal Italia per le Donne e La Scienza” UNESCO-L’Oreal - Fisica per la ricerca nelle Scienze della Vita. Commissione presieduta dal Prof. U. Veronesi;  
 Milano, 16 Maggio 2005.
- 4 - F. Migliardo. “Donne nella scienza” (Tavola rotonda, invito)  
 Festival della Scienza di Genova (30 Ottobre).
- 5 - F. Migliardo. “Il Ruolo delle Donne nella Scienza a Dieci Anni da Pechino” (invito).  
 Forum Internazionale delle Donne del Mediterraneo, Centro Unesco (25 Novembre 2005).

## **6.6 Struttura e dinamica di sistemi complessi puri e confinati e applicazioni di metodologie fisiche in campo storico-artistico e biofisico.**

**Componenti: prof. Domenico Majolino, prof. Placido Migliardo, dott. Vincenza Crupi, dott. Valentina Venuti, dott. Donatella Barilaro, dott. Francesca Longo**

L'attività di ricerca svolta nell'anno 2005, anche nell'ambito del Programma di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale (PRIN) COFIN 2003: "Studi spettroscopici delle proprietà dinamiche di acqua confinata in geometrie ristrette", è stata finalizzata alla conoscenza delle proprietà strutturali e dinamiche di liquidi a legame idrogeno puri e confinati in nanopori, mediante un'approfondita indagine spettroscopica. Lo stesso programma ha previsto inoltre l'applicazione di metodologie fisiche in campo storico-artistico e biofisico. L'uso simultaneo di differenti e complementari tecniche spettroscopiche quali scattering di luce Rayleigh wing, Raman, FT-Raman, assorbimento FTIR presso i laboratori di spettroscopia del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina, spettroscopia ENS, QENS ed INS, EXAFS e diffrazione di neutroni presso le grandi facilities europee quali ISIS (Oxford, UK), ILL (Grenoble, F), e ESRF (Grenoble, F), ha fornito le informazioni necessarie per una trattazione quantitativa dettagliata dei complessi fenomeni inerenti tali problematiche.

### **I) STRUTTURA E DINAMICA DI SISTEMI COMPLESSI PURI E CONFINATI**

L'attività di ricerca si è sviluppata secondo le due seguenti linee principali, sulla base dei sistemi modello investigati:

#### ***A) H<sub>2</sub>O CONFINATA IN ZEOLITI***

La ricerca effettuata ha, in questo caso, inteso mettere in luce come le differenze nella composizione chimica e/o nella topologia del framework zeolitico possano portare a sostanziali diversità nelle proprietà dinamiche diffusionali e vibrazionali dell'acqua adsorbita, influenzando in particolare l'osservato ruolo "structure-maker" che tali matrici giocano sull'acqua interfacciale. A tale scopo sono state effettuate:

***1) Misure QENS, in condizioni di idratazione totale ed in funzione di T, mediante lo spettrometro t.o.f. IRIS (ISIS) su zeoliti NaA e Mg50A.*** I risultati ottenuti hanno permesso di evidenziare due aspetti delle proprietà dinamiche dell'acqua confinata: l'esistenza di una dinamica impedita all'interno di una regione spaziale limitata, le cui dimensioni sono state determinate, ed una gerarchia di arrangiamenti strutturali che origina una distribuzione di tempi di rilassamento il cui valor medio presenta una dipendenza da Q alla Mode Coupling Theory. Tale studio è stato poi approfondito effettuando, presso la stessa facility, misure su zeoliti NaA ed Mg50A a differenti risoluzioni, onde separare il contributo traslazionale da quello rotazionale. Si è osservato che il parziale scambio  $\text{Na}^+$  -  $\text{Mg}^{2+}$  causa un aumento nel volume disponibile per la diffusione, una diminuzione della frazione di molecole d'acqua che prendono parte al processo diffusionale jump osservato ed una riduzione dei tempi di residenza. Per entrambi i campioni, i valori calcolati dei coefficienti di diffusione risultano minori rispetto a quelli dell'acqua di bulk alla stessa temperatura.

***2) Misure ENS, a diverse percentuali di idratazione ed in funzione di T, su zeoliti NaA ed Mg50A mediante lo spettrometro a backscattering IN13 (ILL).*** L'acqua adsorbita appare comportarsi come un solido armonico fino ad una temperatura  $T^*$  che è indipendente dalla sostituzione del catione, ma dipende dalla percentuale di idratazione. A temperature più elevate, una dinamica anarmonica pilotata dal legame idrogeno è gradualmente attivata, mediante un processo descritto tramite un modello jump a due siti. Poiché la distanza di salto risulta pari alla distanza H-H nella molecola d'acqua, la dinamica osservata è stata interpretata in termini di un moto riorientazionale delle molecole d'acqua in un network a legame idrogeno che si riarrangia continuamente. Le energie di attivazione ottenute sono indicative della rottura di alcuni legami idrogeno. In entrambe le

condizioni di parziale e totale idratazione, l'analisi dei dati ha messo in evidenza, in accordo con i dati QENS, una migliore mobilità dell'acqua all'interno della zeolite NaA rispetto alla zeolite Mg50A, in cui l'acqua è capace di sviluppare un network più esteso e più rigido.

**3) Misure FTIR e FTIR/ATR nella regione dell'O-H stretching su zeoliti NaA, Mg41A, Mg50A, Mg75A ed Mg86A, in condizioni di idratazione totale ed al variare di T.** Le bande O-H dell'acqua zeolitica risultano spostate verso più bassa frequenza rispetto all'acqua di bulk, suggerendo che, in condizioni di confinamento, le molecole d'acqua esibiscono un legame idrogeno relativamente forte. La decomposizione della banda di O-H stretching in quattro componenti per l'investigazione dei cambiamenti strutturali negli "arrangements" a legame idrogeno ha permesso di evidenziare: (i) un environment peculiare di molecole di H<sub>2</sub>O. Tali molecole esibiscono una dinamica vibrazionale impedita pilotata dai cationi extraframework della matrice zeolitica. (ii) L'esistenza di un legame idrogeno biforcuto (BHB) quale caratteristica principale dell'acqua liquida in bulk e confinata. (iii) La presenza del contributo a più bassa frequenza, che fornisce evidenza sperimentale di networks a legami idrogeno estesi transienti con elevato grado di connettività. iv) Un interscambio che coinvolge i fattori di popolazione relativi ai networks tetraedrici con legami idrogeno lineari e gli environments non pienamente sviluppati che esibiscono legami idrogeno distorti, biforcuti. I risultati sperimentali così ottenuti hanno inequivocabilmente evidenziato il ruolo "structure-maker" della superficie zeolitica sull'acqua adsorbita, il quale aumenta progressivamente all'aumentare del contenuto di ioni Mg.

**4) Misure INS, in condizioni di idratazione totale ed in funzione di T, su zeoliti NaA, Mg50A e Mg86A mediante lo spettrometro TOSCA (ISIS).** È stato osservato uno spostamento a più bassa energia, rispetto al ghiaccio I<sub>h</sub>, del cutoff della banda librazionale, a motivo dell'esistenza di un network a legame idrogeno distorto a seguito del confinamento. Inoltre, all'aumentare del contenuto di Mg si è osservato, nella regione traslazionale ad alta energia, il ripristino dei picchi cristallini tipici dello stretching a legame idrogeno nel ghiaccio I<sub>h</sub>, insieme alla riduzione del sopracitato spostamento a bassa frequenza dell'"edge" librazionale. Tali risultati hanno rivelato che lo scambio ionico indotto favorisce le conformazioni tetraedriche "ice-like" delle molecole d'acqua. L'evoluzione in temperatura della densità degli stati vibrazionali mostra che l'impedimento dei modi librazionali aumenta al diminuire di T, come indicato dallo spostamento ad alta frequenza del massimo della banda librazionale. La deconvoluzione in Gaussiane della banda librazionale, inoltre, ha mostrato, all'aumentare del contenuto di ioni Mg, un'attenuazione dei modi librazionali connessi alle rotazioni impedito delle molecole d'acqua attaccate alla superficie zeolitica.

**5) Misure FTIR/ATR nella regione dell'O-H stretching e del bending HOH in K-chabazite e scolecite, in condizioni di idratazione totale ed al variare di T.** L'indagine ha evidenziato come la possibilità per le molecole d'acqua di dare luogo ad interazioni "guest-guest" e/o "host-guest" conduce a sostanziali differenze nella dinamica vibrazionale. Nel caso dell'acqua in K-chabazite, il cui comportamento è governato da un bilancio tra interazioni acqua-acqua, acqua-framework ed acqua-cationi extraframework, l'analisi della banda di O-H stretching ha fornito un quadro dettagliato del "pattern" di connettività dell'acqua in accordo alle proprietà topologiche della struttura ospitante. I cambiamenti osservati nella banda di bending HOH confermano pienamente i risultati ottenuti dall'analisi del modo di O-H stretching. Nel caso della scolecite, per la quale i pori di dimensione estremamente ridotta impediscono le interazioni acqua-acqua, si sono rilevate bande estremamente strutturate sia nella regione di O-H stretching che in quella del bending HOH. Tale complessità nei profili spettrali è stata connessa all'esistenza, all'interno dei canali, di tre distinte molecole d'acqua in corrispondenza di un catione Ca<sup>2+</sup>. I dati hanno permesso il calcolo delle molteplici distanze O-O coinvolte. Infine, è stata rivelata un'anomala dipendenza da T per la sottobanda del modo di bending HOH connessa alla coordinazione Ca-H<sub>2</sub>O.

#### **B) LIQUIDI (ACQUA, PROPYLENE GLYCOL) CONFINATI IN VETRI SOL-GEL NANOPOROSI**

L'attività di ricerca in questo ambito è stata finalizzata alla caratterizzazione delle proprietà vibrazionali ad alta frequenza dell'acqua confinata, al fine di confermare sperimentalmente il ruolo

“structure-breaker” di queste matrici sol-gel sulle molecole di H<sub>2</sub>O adsorbita, già ipotizzato mediante precedenti misure INS. A tal fine sono state effettuate:

**1) Misure Raman nella regione di O-H stretching a  $T_{amb}$  su acqua nello stato di bulk e confinata all'interno di vetri GelSil 25 Å con superficie interna idrofilica (contenente gruppi Si-OH).**

L'analisi è stata effettuata a diverse percentuali di idratazione, a partire dal 100% (idratazione totale), fino al 5.9% (idratazione parziale per la quale solo l'acqua del primo layer è legata alla superficie interna del vetro). L'analisi ha mostrato che il contributo collettivo alla banda polarizzata dello stretching O-H diminuisce al diminuire della percentuale di idratazione, indicando che il legame idrogeno tra le molecole d'acqua interfacciali e i gruppi silanoli Si-OH attivi sulla superficie interna dei pori causa una forte distorsione del network bulk-like tetraedrico. Tale effetto distruttivo costituisce chiara evidenza sperimentale del già ipotizzato ruolo “structure-breaker” del vetro sull'acqua interfacciale.

**2) Misure QENS, mediante lo spettrometro t.o.f. IN6 (ILL) su PG in bulk e confinato in GelSil 25 Å con superficie interna idrofilica e idrofobica (contenente gruppi Si-OCH<sub>3</sub>), al variare di T.** Nel caso del PG in bulk sono stati osservati un moto interno, probabilmente la rotazione dei gruppi metilici CH<sub>3</sub>, ed un moto locale degli atomi di idrogeno in corrispondenza, rispettivamente, di bassi ed elevati valori di Q. Per il PG confinato in GelSil non trattati i dati hanno rivelato una dinamica diffusionale confinata ben interpretata secondo il modello Volino-Dianoux che ha permesso di ottenere anche una stima dell'estensione della regione di confinamento. Infine, gli spettri relativi al PG confinato in GelSil trattato hanno evidenziato che la rotazione dei gruppi metilici, accelerata dal confinamento, rappresenta il contributo rilevante all'allargamento quasielastico e maschera, sovrapponendosi ad essa, la più lenta diffusione jump.

**3) Misure Raman su PG liquido, in bulk e confinato all'interno di vetri GelSil 25 Å con superficie interna idrofilica.** L'analisi della banda di stretching O-H ha permesso la caratterizzazione degli arrangiamenti strutturali, imposti dal legame idrogeno, presenti all'interno del sistema in esame. Si è osservata, tanto nella fase di bulk quanto in condizioni di confinamento, la presenza di strutture monomeriche a legame idrogeno intramolecolare, unitamente a dimeri e trimeri intermolecolari. Passando dallo stato di bulk a quello confinato, è stata rilevata una diminuzione degli aggregati strutturali più estesi a seguito delle interazioni superficiali. Infine, le intensità relative delle singole sottobande, associate ai diversi environments strutturali presenti, hanno evidenziato una marcata dipendenza dalla temperatura. Tale risultato è connesso all'esistenza di una gerarchia di strutture la cui popolazione varia con T per mezzo di processi microscopici veloci.

**4) Misure INS, mediante lo spettrometro t.o.f. IN6 (ILL) su PG in bulk e confinato in GelSil 25 Å con superficie interna idrofilica e idrofobica, al variare di T.** Gli spettri hanno rivelato la presenza, a bassissima frequenza, di modi acustici "Debye-like". La comparsa, a  $\approx 8$  meV, del picco bosonico ha suggerito una transizione, indotta dal confinamento, da vibrazioni propagantisi tipiche di un mezzo continuo a vibrazioni quasi-localizzate. In questo contesto, si è provato che sono le interazioni superficiali a giocare il ruolo più rilevante. Gli spettri della densità degli stati vibrazionali (VDOS) hanno evidenziato, nel caso del PG di bulk nell'intervallo da 10 a 40 meV modi reticolari caratteristici del PG cristallino. Essi suggeriscono l'esistenza, in accordo con le già citate misure Raman, di un network complesso per il PG liquido. Dall'evoluzione della VDOS, passando dal bulk al confinamento in GelSil in presenza ed in assenza di trappole chimiche, è stato ipotizzato che la formazione di arrangiamenti strutturali con il massimo grado di connettività è estremamente sfavorita dalla presenza delle trappole chimiche. Infine, entrambe interazioni superficiali e restrizioni geometriche inducono un effetto destrutturante sulla vibrazione d-LAM a  $\sim 45$  meV, insieme ad un significativo allargamento della vibrazione torsionale a  $\sim 85$  meV. Al contrario, la stabilizzazione termica osservata per la vibrazione di CCO bending a  $\sim 65$  meV è attribuita unicamente alle trappole fisiche.

## **II) APPLICAZIONI DI METODOLOGIE FISICHE IN CAMPO STORICO-ARTISTICO E BIOFISICO**

In campo storico-artistico, è stato effettuato uno studio spettroscopico di ceramiche di Gela e Caltagirone. L'uso congiunto di diverse tecniche (FTIR,  $\mu$ -raman, EXAFS, diffrazione di neutroni) ha permesso l'identificazione quantitativa della composizione mineralogica dei campioni evitando il danneggiamento della preziosa decorazione superficiale. In campo biofisico, si è effettuato uno studio FTIR su tessuti di rene e cuore di ratto esposti ad una radiazione non ionizzante. Il confronto con gli spettri di tessuti sani ha mostrato differenti caratteristiche spettrali in accordo con le analisi morfologiche effettuate mediante microscopia ottica. Si è provato che la lunga esposizione alle onde elettromagnetiche causa evidenti cambiamenti cellulari unitamente ad un aumento del tessuto connettivo.

#### **ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI CENSITE DALLO SCIENCE CITATION INDEX (ISI):**

- 1) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti.  
“T-dependence of vibrational dynamics of water in ion-exchanged zeolites A: A detailed Fourier transform infrared attenuated total reflection study”.  
*Journal of Chemical Physics*, 123, 154072 (2005).
- 2) C. Corsaro, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti, U. Wanderlingh.  
“Elastic neutron scattering study of water dynamics in ion-exchanged zeolites A”.  
*Physical Review E*, 72, 061504 (2005).  
Selezionato per la pubblicazione sul *Virtual Journal of Biological Physics Research*.
- 3) C. Corsaro, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti, U. Wanderlingh.  
“Mobility of water in Linde Type A synthetic zeolites: an inelastic neutron scattering study”.  
*Journal of Physics: Condensed Matter*, 17, 7925-7934 (2005).
- 4) V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti.  
“Dynamical properties of liquids in restricted geometries”.  
*Journal of Molecular Liquids*, 117 165-171 (2005).
- 5) V. Crupi, A. J. Dianoux, F. Longo, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti.  
“IQENS study of the influence of confinement on diffusional dynamics of propylene glycol”.  
*Journal of Molecular Structure*, 744-747C, 797-800 (2005).
- 6) D. Barilaro, V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, W. Kockelmann.  
“Characterization of pottery fragments by non-destructive neutron diffraction”.  
*Journal of Applied Physics*, 98, 103520 (2005).
- 7) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, M. G. Donato, D. Majolino, G. Messina, R. Ponterio.  
“Spectroscopic techniques applied to the characterization of decorated potteries from Caltagirone (Sicily, Italy)”.  
*Journal of Molecular Structure*, 744, 827-831 (2005).
- 8) D. Barilaro, V. Crupi, D. Majolino, G. Barone, R. Ponterio.  
“A detailed spectroscopic study of an Italian fresco”.  
*Journal of Applied Physics*, 97, 044907 (2005).
- 9) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino.  
“Characterization of archaeological findings by FT-IR spectroscopy”.  
*Spectroscopy*, 20, 16 (2005).

#### **ELENCO DELLE COMUNICAZIONI A CONFERENZE NAZIONALI E INTERNAZIONALI:**

- 1) V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti.  
“Raman study of the vibrational dynamics of nanoconfined propylene glycol”.  
6<sup>th</sup> Liquid Matter Conference of the European Physical Society  
2-6 Luglio 2005, Utrecht (Olanda).
- 2) C. Corsaro, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti, U. Wanderlingh.  
“Mobility of water in synthetic zeolites Lynde Type A: an elastic neutron scattering study”.

6<sup>th</sup> Liquid Matter Conference of the European Physical Society  
2-6 Luglio 2005, Utrecht (Olanda).

3) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti.

“FTIR-ATR studies of structure and dynamics of water molecules in zeolites”.

6<sup>th</sup> Liquid Matter Conference of the European Physical Society  
2-6 Luglio 2005, Utrecht (Olanda).

4) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, M. R. Mondello.

“Spectroscopic evidence of the effects induced by non-ionizing radiation on tissue samples”.

The Third International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, ICAVS-3  
14-19 Agosto 2005, Delavan – Wisconsin (USA).

5) V. Crupi, D. Majolino, F. Longo, P. Migliardo, V. Venuti.

“FTIR/ATR study of water encapsulated in Na-A and Mg-exchanged A zeolites”.

The Third International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, ICAVS-3  
14-19 Agosto 2005, Delavan – Wisconsin (USA).

6) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, P. Mazzoleni, M. Triscari, V. Venuti.

“Characterization of ancient amphorae by spectroscopic techniques”.

The Third International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, ICAVS-3  
14-19 Agosto 2005, Delavan – Wisconsin (USA).

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

“Low frequency vibrational dynamics in confined ethylene and propylene glycol by inelastic neutron scattering”.

XVIth International Conference Horizons in Hydrogen Bond Research

29 Agosto – 4 Settembre 2005, Roskilde (Danimarca).

8) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti.

“The hydrogen bond network in propylene glycol studied by Raman spectroscopy”.

XVIth International Conference Horizons in Hydrogen Bond Research

29 Agosto – 4 Settembre 2005, Roskilde (Danimarca).

9) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti.

“Proprietà vibrazionali dell’acqua confinata in matrici zeolitiche”.

XCI Congresso Nazionale della S. I. F.

26 Settembre – 1 Ottobre 2005, Catania (Italia).

10) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, P. Mazzoleni, M. Triscari, V. Venuti.

“Tecniche spettroscopiche applicate alla caratterizzazione di antiche anfore da trasporto”.

Workshop: “L’approccio multidisciplinare allo studio ed alla valorizzazione dei Beni Culturali”

28-29 Ottobre 2005, Siracusa (Italia).

11) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti.

“Pigment identification by spectroscopic techniques”.

2<sup>nd</sup> International Workshop on: “Science, Technology and Cultural Heritage”

9-11 Novembre 2005, Catania (Italia).

### **RAPPORTI INTERNI:**

1) V. Venuti. “Ruolo della matrice confinante sulle proprietà dinamiche dell’acqua”

Ciclo di Seminari di Fisica - Anno 2005, organizzato dal Dipartimento di Fisica e dal Dipartimento di Fisica della Materia e Tecnologie Fisiche Avanzate dell’Università di Messina, unitamente all’Istituto per i Processi Chimico-Fisici (IPCF) del CNR di Messina.

9 Giugno 2005, Messina (Italia).

## 6.7 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi e di sistemi con potenziali repulsivi operanti su due scale di lunghezza

Partecipanti alla ricerca: Maria C. Abramo, C.Caccamo, D.Costa, G.Malescio, G.Pellicane

Nel corso del 2005 sono state investigate tramite Dinamica Molecolare transizioni di fase e di vetrificazione in sistemi modello interagenti con potenziali a corto raggio, come nel caso del C60. Lo studio ha evidenziato l'insorgenza di una transizione vetrosa ad alta temperatura, e forti similarità fra tali risultati e le predizioni teoriche di altri autori per le linee di arresto strutturale di soluzioni modello di proteine globulari.

Sono state inoltre applicate le teorie RISM (Reference Interaction Site Model) e PRISM (polymer-RISM) per calcolare le proprietà strutturali e la pressione osmotica di una sospensione di colloidi lamellari. I risultati ottenuti sono in buon accordo con la simulazione e indicano che la RISM può essere applicata vantaggiosamente in altri contesti di soluzioni di molecole a molti siti.

È stato poi effettuato uno studio esteso del diagramma di fase di modelli non additivi di miscele binarie, con risultati rilevanti per la comprensione del comportamento di miscele di gas rari in condizioni estreme di temperatura e pressione.

È stato anche effettuato uno studio delle transizioni di fase liquido-liquido in sistemi ad una componente interagenti attraverso potenziali con due scale di lunghezza repulsive. L'indagine ha consentito di accertare come si spostano i punti critici liquido-gas e liquido-liquido al variare dei parametri del potenziale.

Sono state infine studiate tramite simulazione Monte Carlo le proprietà strutturali di un fluido a 2-Yukawa nel quale, per una scelta appropriata dei parametri del potenziale, il fattore di struttura presenta un picco secondario a bassi  $q$  indicante la formazione di macroaggregati, osservati anche sperimentalmente sia in soluzioni di proteine globulari che in sospensioni colloidali.

### ELENCO PUBBLICAZIONI

1. Broccio, M, Costa, D, Liu, Y, Chen, SH  
"The structural properties of a two-Yukawa fluid: Simulation and analytical results"  
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, v. 124, art. 084501 (2006)
2. Abramo, MC, Caccamo, C, Costa, D, Ruberto, R  
"Phase and glass transitions in short-range central potential model systems: The case of C-60"  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, v.109, 24077 (2005)
3. Costa, D, Hansen, JP, Harnau, L  
"Structure and equation of state of interaction site models for disc-shaped lamellar colloids"  
MOLECULAR PHYSICS, v.103, 1917 (2005)
4. G.Pellicane, F.Saija, C.Caccamo e P.V.Giaquinta  
"Thermodynamic stability of fluid-fluid phase separation in athermal mixtures: the role of nonadditivity"  
J. Phys. Chem. B 110, 4359-4364 (2006)
5. Malescio, G; Franzese, G; Skibinsky, A; Buldyrev, SV; Stanley, HE  
"Liquid-liquid phase transition for an attractive isotropic potential with wide repulsive range"  
PHYSICAL REVIEW E, 71 (6): Art. No. 061504 Part 1, 2005
6. Malescio, G  
"Predicting with unpredictability"  
NATURE, v. 434 (7037) 1073, 2005

### RELAZIONI ORALI A CONGRESSI

1. C.Caccamo(speaker),M.C.,Abramo, D.Costa and R.Ruberto  
 "Phase and glass transition in short-range central potential model system: the case of C60"  
 International Workshop on " Topics in Application of scattering methods for investigation of structure and dynamics of soft condensed matter"  
 Firenze, 11-13 Novembre 2005
2. D.Costa  
 "Simple models of globular protein solutions"  
 Winter Discussion Workshop on "Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids", Bad Gastein (AU) 22/26 Gennaio 2005.
3. G.Pellicane  
 "Stripe phases in systems with core-corona molecular architecture"  
 International Conference "Thermodynamics 2005", Sesimbra, Portugal (Aprile, 6-8 2005).
4. G.Pellicane  
 "Stripe domains in a model with competing interaction of core-corona, polymer solutions."  
 "Materials, Matter and Devices (MMD)" Meeting, Genova, Italy ( Giugno, 22-25 2005).
5. G.Pellicane  
 " Thermodynamic stability of fluid-fluid phase separation in athermal mixtures: the role of nonadditivity"  
 CRS-SOFT Meeting, L'Aquila, Italy (dicembre, 2-4 2005)

#### COMUNICAZIONI POSTER

- 1.D.Costa  
 "Microscopic determination of the phase diagram of globular protein solutions"  
 6th EPS Liquid Matter Conference, Utrecht (NL) 2/6 Luglio 2005.
2. D.Costa  
 "Interaction site models for disc-shaped lamellar colloids"  
 6th EPS Liquid Matter Conference, Utrecht (NL) 2/6 Luglio 2005.
- 3.D.Costa  
 "A molecular dynamics simulation study of binary fullerene mixtures"  
 6th EPS Liquid Matter Conference, Utrecht (NL) 2/6 Luglio 2005.
4. D.Costa  
 "Structure and equation of state of interaction site models for disc-shaped lamellar colloids"  
 International School of Solid State Physics 34th Course "Computer Simulations in Condensed Matter: from Materials to Chemical Biology",  
 Erice 20 Luglio - 1 Agosto 2005.
5. G.Pellicane  
 "Thermodynamic stability of the fluid-fluid phase separation in binary athermal mixtures"  
 "Materials, Matter and Devices (MMD)" Meeting, Genova, Italy  
 ( Giugno, 22-25 2005).
6. G.Pellicane  
 "Simple models of globular protein solutions"  
 International School of Solid State Physics 34th Course "Computer Simulations in Condensed Matter: from Materials to Chemical Biology",  
 Erice 20 Luglio - 1 Agosto 2005.



## 6.8 Fisica teorica e computazionale dello stato liquido della materia

Componenti: **Paolo V. Giaquinta, Santi Prestipino Giarritta, Alessandro Sergi, Rubens Esposito-Pino** (Dottore di Ricerca, XVIII Ciclo)

Collaboratori esterni: **Franz Saija (IPCF-CNR), A. Marco Saitta (Université Pierre et Marie Curie, Parigi)**

L'attività del gruppo che insiste su questa linea di ricerca ha riguardato nel 2005 i seguenti temi:

- studio del diagramma di fase di potenziali modello atti a caratterizzare le interazioni efficaci in materiali atomici e molecolari;
- sviluppo di teorie microscopiche per la caratterizzazione ed interpretazione delle proprietà termodinamiche e strutturali di liquidi semplici e complessi;
- sviluppo di metodi numerici e di nuovi algoritmi computazionali per la simulazione di sistemi dinamici e statistici.

Abbiamo rivisitato i diagrammi di fase di modelli di particelle interagenti con potenziali repulsivi soffici descritti da una forma Gaussiana o da leggi a potenza inversa. Questi modelli costituiscono un importante “riferimento” per lo studio di liquidi semplici e complessi. Lo studio è stato condotto con tecniche avanzate di simulazione numerica che, oltre a fornire un *benchmark* più preciso ed aggiornato per il calcolo delle energie libere della fase fluida e di quella solida, hanno permesso di identificare alcune peculiarità nel diagramma di fase di questi sistemi che non erano state evidenziate in analisi precedenti. Abbiamo studiato anche il diagramma di fase dello Xenon ad alta pressione e ad alta temperatura, utilizzando in questo caso il potenziale di Buckingham modificato. I risultati appaiono rilevanti per la comprensione del comportamento dei gas rari in condizioni termodinamiche “estreme”, che si riscontrano all'interno dei pianeti del sistema solare.

Sono state infine sviluppati metodi teorici ed algoritmi computazionali per trattare sistemi statistici la cui evoluzione dinamica non è governata da una Hamiltoniana, ovvero in presenza di vincoli meccanici non dipendenti dal tempo. Tali sistemi sono di particolare rilevanza per la simulazione al computer della dinamica molecolare. Questo studio ha permesso di estendere il linguaggio matematico delle parentesi non Hamiltoniane alla meccanica quantistica ed, in particolare, ai sistemi quanto-classici. Ciò permetterà di “trasportare”, in futuro, nell'ambito della simulazione dei sistemi quanto-classici (e, più in generale, dei sistemi quantistici aperti) tecniche computazionali di sperimentata efficacia, già sviluppate per la dinamica molecolare dei sistemi classici. Esempi in tal senso sono i termostati deterministici e la dinamica molecolare di non-equilibrio.

### Pubblicazioni

1. *Phase diagram of the Gaussian-core model*  
S. Prestipino, F. Saija, and P. V. Giaquinta  
Physical Review E **71**, 050102(R) (2005)
2. *Re-entrant melting in the Gaussian-core model: The entropy imprint*  
P. V. Giaquinta and F. Saija  
ChemPhysChem **6**, 1768-1771 (2005)
3. *Phase diagram of softly repulsive systems: The Gaussian and inverse-power-law potentials*  
S. Prestipino, F. Saija, and P. V. Giaquinta  
Journal of Chemical Physics **123**, 144110 (2005)
4. *Entropy revisited: The interplay between ordering and correlations*

P. V. Giaquinta

in “*Highlights in the quantum theory of condensed matter - A symposium to honour Mario Tosi on his 72nd birthday*”, edited by F. Beltram; p. 9-14 (Edizioni della Normale, Pisa, 2005)

5. *The ideal gas as an urn model: Derivation of the entropy formula*  
S. Prestipino  
European Journal of Physics **26**, 137 (2005)
6. *High-pressure phase diagram of the exp-6 model: The case of Xenon*  
F. Saija and S. Prestipino  
Physical Review B **72**, 024113 (2005)
7. *Phase space flows for non-Hamiltonian systems with constraints*  
A. Sergi  
Physical Review E **72**, 031104 (2005)
8. *Non-Hamiltonian commutators in quantum mechanics*  
A. Sergi  
Physical Review E **72**, 066125 (2005)
9. *Variational principle and phase space measure in non-canonical coordinates*  
A. Sergi  
Atti dell'Accademia Peloritana dei Pericolanti - Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali - **87**, C1A0501003 (2005)

#### **Comunicazioni a congressi**

- 1) *Entropy-based measure of structural order in water* Symposium in honour of Prof. Michele Parrinello on the occasion of his 60th birthday (Monte Verità - Ascona, Svizzera, 6-7/9/2005).
- 2) *Phase diagram of the Gaussian-core model*  
6<sup>th</sup> Liquid Matter Conference (Utrecht, Olanda, 2-6/7/2005); XCI Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica (Catania, 26/9-1/10/2005).
- 3) *High-pressure phase diagram of the exp-6 model: The case of Xenon*  
6<sup>th</sup> Liquid Matter Conference (Utrecht, Olanda, 2-6/7/2005);  
XCI Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica (Catania, 26/9-1/10/2005).
- 4) *Thermodynamic stability of the fluid-fluid phase separation in binary athermal mixtures*  
MMD Meeting - Matter, Materials and Devices (Genova, 22-25/6/2005).

## 6-9 Fisica dei sistemi Complessi

Nel 2005, l'attività scientifica del gruppo si è articolata su tematiche differenti quali:

- i) le proprietà dei sistemi colloidali intesi come sistemi modello per lo studio di fenomeni fuori dall'equilibrio termodinamico, in particolare nella regione di arresto strutturale.
- ii) lo studio delle dinamiche dell'acqua nella cosiddetta "no man's land region" (ossia in una regione di temperatura fra la temperatura di nucleazione omogenea e quella di transizione vetrosa  $243 < T < 180$  K).
- iii) implementazione dell'NMR ad alta risoluzione tramite nuovi softwares e un sistema di controllo delle temperature tale da adattare lo strumento alle specifiche caratteristiche (strutturali e dinamiche) della materia soffice. Abbiamo, in questo contesto, sviluppato un nuovo metodo di ricostruzione di immagini che da simultaneamente lo spostamento quadratico medio e il corrispondente coefficiente di self diffusione.

Molto del lavoro fatto è stato condotto in collaborazione con gruppi di ricerca esterni (MIT, Napoli, Firenze and Naples). Le relative ricerche hanno utilizzato in maniera teorica correnti, simulazioni ed esperimenti (principalmente scattering di luce e neutroni, viscoelasticità ed NMR). Recenti risultati nello studio dell'arresto strutturale dell'acqua confinata e sottoraffreddata sono la osservazione, avvicinandosi a TG, la osservazione della violazione della ben nota relazione di Einstein-Stokes e di un crossover dinamico del liquido dal fragile a strong glass forming. Tale risultato da conferma, insieme con studi complementari di scattering di neutroni, della validità del modello a due liquidi (low- e high-density water) e della esistenza di un secondo punto critico dell'acqua.

L'effetto della parziale sostituzione del catione nelle zeoliti "Linde tipo A" sulla dinamica dell'acqua è stata studiata tramite misure di scattering incoerente elastico ed inelastico di neutroni. Dalle misure di scattering elastico si ricava il comportamento dello scarto quadratico medio in funzione della temperatura (20K-273K). Questo mostra una dinamica tipo oscillatore armonico (indipendente dalla sostituzione del catione) cui si sovrappone l'attivazione di dinamiche non armoniche intorno ai 200K. Queste dinamiche sono state interpretate in termini di riarrangiamenti orientazionali del legame idrogeno e indicano una ridotta mobilità dell'acqua in seguito alla sostituzione  $2Na^+$  con  $Mg^{++}$ . Nelle misure di scattering inelastico sono state studiate le bande vibrazionali e librazionali dei modi dell'acqua, alle temperature di 50, 180 e 220 K. L'analisi dei dati mostra un overall shift delle bande verso più alte frequenze, più marcato nella zeolite con sostituzione  $2Na^+$  con  $Mg^{++}$ . In entrambi i casi una riduzione della mobilità dell'acqua è osservata in seguito alla sostituzione come già evidenziato in precedenti misure di scattering quasi elastico di neutroni.

Usando dati di viscosità combinati con uno specifico studio MD su un colloide attrattivo abbiamo dato evidenza che la gelificazione colloidale, la aggregazione e la transizione vetrosa possono essere descritte tramite un approccio universale. La descrizione di tali caratteristiche è basata su specifici effetti di clustering originati dal contributo attrattivo al potenziale di interazione fra le particelle.

Uno studio dettagliato NMR sullo spostamento quadratico medio di sistemi colloidali attrattivi ha mostrato una forte differenza nelle corrispondenti fasi vetrose. Mentre nella fase di vetro repulsivo il comportamento di tale quantità è lineare nella fase di vetro attrattivo il comportamento è governato da una legge di potenza indicando una gerarchia di strutture fortemente influenzate dagli specifici processi di clustering. L'intero processo può essere descritto da modelli di percolazione frustrata.

In collaborazione con un gruppo teorico (della stessa sede) è stata realizzata una simulazione in un fluido modello interagente tramite un potenziale con due contributi di Yukawa. I calcoli relativi sono stati eseguiti nei frameworks teorici MSA and HNC. Le relative analisi mostrano che

entrambe le teorie sono accurate. Per una opportuna scelta dei parametri di potenziale il fattore di struttura statico mostra un picco secondario a basso vettore d' onda. Un tale picco è stato osservato in soluzioni colloidali e di proteine e può essere dovuto a processi di clustering.

Si è studiata la struttura alcune soluzioni micellari. In particolare, si è investigato la formazione e crescita di micelle fluorurate in funzione della temperatura e del controione. Lo studio è stato fatto usando lo scattering di neutroni a piccolo angolo.

-Lavori a stampa

1. "Mobility of water in Linde type A synthetic zeolites: an inelastic neutron scattering study "  
C Corsaro , V Crupi , F Longo , D Majolino , V Venuti and U Wanderlingh  
J. Phys.: Condens. Matter 17 (2005) 7925–7934
2. "Elastic neutron scattering study of water dynamics in ion-exchanged type-A zeolites"  
C. Corsaro, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino,\* V. Venuti, and U. Wanderlingh  
Phys. Rev.: E 72, (2005) 061504
3. "Small Angle neutron scattering of ionic perfluoropolyether micellar solution: Role of counterions and temperature"  
Gambi CMC, Giordano R, Chittorafi A, et al.  
J. Phys. Chem. B 109 (2005) 8592/8598

Comunicazioni a Congressi

- 1) International workshop: Unifying Concepts in Complex materials, Capri, Italy June 24-25 (2005).
- 2) Workshop on attractive interactions in colloidal systems, Bad Gastein Austria January 18 - 23 2005.
- 3) Workshop on Application of Scattering Methods to Investigation of Structure and Dynamics of Soft Condensed Matter, Florence Italy November 11-13, 2005,

## 6.10 Proprieta' termodinamiche e strutturali di leghe metalliche

Partecipanti: E. Bruno (PA), B. Ginatempo (PO), F. Mammano (dottorando), A. Fiorino (postdoc), E. Morabito (borsista)

Nel corso del 2005 si e' continuato ad analizzare le proprieta' elettroniche di leghe metalliche attraverso teorie ab inizio derivate dall'approssimazione di potenziale coerente (CPA) ed in grado di includere effetti di ordinamento locale. Segnatamente sono state impiegate le cosiddette approssimazioni PCPA, NLCPA (2) e CPA+LF (5).

Considerevoli progressi sono stati ottenuti nello sviluppo della teoria del funzionale dell'eccesso di carica o CEF (4, 6). In particolare si e' dimostrato come sia possibile, per mezzo di una semplice Hamiltoniana configurazionale, ottenere, in eccellente accordo con calcoli ab inizio basati sul funzionale della densita' elettronica di Hohenberg e Kohn, l'energia elettronica totale di una determinata configurazione per una lega metallica, in presenza o meno di ordinamento locale. I progressi ottenuti nella teoria del CEF hanno consentito di implementare un nuovo metodo MonteCarlo basato sulla stessa teoria (CEF-MC). Sono attualmente in corso di elaborazione i risultati ottenuti per la transizione di ordinamento in  $\text{Cu}_{0.50}\text{Zn}_{0.50}$  e per la segregazione in leghe di  $\text{Ni}_x\text{Al}_{1-x}$  nel range di concentrazione  $0.70 < x < 1$ .

I lavori (2) e (3) costituiscono applicazioni dello studio della superficie di Fermi a fenomeni magnetici in leghe di grande interesse tecnologico (2) o a alle onde di densita' di carica in composti intermetallici di terre rare (3).

### Pubblicazioni

1. Ostanin S, Staunton JB, Razei SSA, Ginatempo B, and Bruno E, "An ab-initio theoretical investigation of the soft-magnetic properties of permalloys", *J. Magn. Magn. Mat.* 295, 110 (2005)
2. Rowlands DA, Staunton JB, Gyorffy BL, Bruno E, and Ginatempo B, "Effects of short-range order on the electronic structure of disordered metallic systems", *Phys. Rev. B* 72 (4): Art. No. 045101 (2005)
3. Laverock J, Dugdale SB, Major Z, Alam MA, Ru N, Fisher IR, Santi G, and Bruno E, "Fermi surface nesting and charge-density wave formation in rare-earth tritellurides", *Phys. Rev. B* 71, Art. No. 085114 (2005)
4. Bruno E, "Charge distributions in metallic alloys: A charge excess functional theory approach", pages 353-365, in "Complex inorganic solids: structural, stability, and magnetic properties of alloys", Turchi PEA, Gonis A, Rajan K, and Meike A. editors, Springer, New York, USA.
5. Bruno E, Zingales L, and Milici A, "Local charge distributions in metallic alloys: A local field coherent potential approximation theory", pages 367-378, in "Complex inorganic solids: structural, stability, and magnetic properties of alloys", Turchi PEA, Gonis A, Rajan K, and Meike A. editors, Springer, New York, USA.

### Attività organizzative B.Ginatempo

- 1) Direzione del progetto IMFM (Ipertesto multimediale di Fisica della Materia), per conto dell'INFN, progetto PON a valere sulla misura II.2 – Azione b (protocollo MIUR n° 3039/41)

## 6.11 Informatica: M<sup>2</sup>AG: Milan-Messina Action Group

Componenti: A. Provetti (PA, INF01), G. Fiumara (Prof. a contratto, INF01), N. Spada (Prof. a contratto, INF01, Facolta' di Lettere), Biagio Bonasera (esercitatore a contratto, SISIS)

Ci siamo dedicati a sperimentare l'applicabilita' di sistemi guidati da politiche dichiarative nel contesto del trattamento di dati e di decisioni relative al Web. La sfida e' quella di superare gli ovvi problemi di scalabilita' e di strutturazione parziale dell'informazione.

Le sperimentazioni compiute sono state le seguenti:

- uno schema flessibile per dirigere il processo di connessione a Web Services [3];
  - uno studio sull'inclusione delle preferenze nel linguaggio PDL per la specifica eseguibile di politiche dichiarative [2];
  - la ri-proposizione della assunzione di mondo chiuso locale (LCWA) per semplificare ed arricchire la comunicazione fra agenti che condividono ontologie del Web semantico [4];
  - la prima applicazione delle regole con Default all'acquisizione e strutturazione di dati da sorgenti Web arbitrarie [6] in collaborazione con l'Universita' tecnica di Vienna e LiXto GmbH.
- Infine, e' giunto a conclusione con la pubblicazione su Journal lo studio delle forme normali dell' Answer Set Programming [5].

A. Provetti e' stato presidente del comitato di programma del terzo workshop internazionale ASP [1]. Inoltre, fino al 15 settembre 1005 e' stato coordinatore del gruppo di lavoro europeo WASP, finanziato nel Quinto Programma quadro della Commissione europea.

### Pubblicazioni

1. Marina De Vos, Alessandro Provetti:  
Answer Set Programming, Advances in Theory and Implementation,  
Proceedings of the 3rd Intl. ASP'05 Workshop, Bath, UK, September 27-29, 2005  
CEUR-WS.org 2005
2. Elisa Bertino, Alessandra Mileo, Alessandro Provetti:  
PDL with Preferences.  
Proc. of POLICY 2005: 213-222
3. Massimo Marchi, Alessandra Mileo, Alessandro Provetti:  
Declarative Policies for Web Service Selection.  
Proc. of POLICY 2005: 239-242
4. Elisa Bertino, Alessandro Provetti, Franco Salvetti:  
Reasoning about RDF statements with default rules.  
W3C Workshop on Rule Languages for Interoperability 2005
5. Stefania Costantini, Alessandro Provetti:  
Normal forms for answer sets programming.  
TPLP 5(6): 747-760 (2005)
6. Carlo Bernardoni, Massimo Marchi, Giacomo Fiumara Alessandro Provetti:  
Declarative Web Data Extraction and Annotation.  
20th Workshop on Logic Programming (WLP 2006), 2005 pp. 137-144

### Altri prodotti di ricerca

Il sito Web <http://dynamonews.dynalias.org/>  
sviluppato a partire dalla tesi di S. Bossa, attiva canali d'informazione RSS  
con notizie per il pubblico specialistico della programmazione Java.

**A. ELENCO TELEFONICO E INDIRIZZI DI POSTA ELETTRONICA**

<b>COGNOME E NOME</b>	<b>POSTA ELETTRONICA</b>	<b>telefono</b>	<b>fax</b>
ABRAMO MARIA CONCETTA	mcabramo@unime.it	090-6765050	090-765042
BARNA' CALOGERO	renato.barna@me.infn.it	090-6765028	090-395004
BRANCA CATERINA		090-6765019	090-395004
BROCCIO FRANCESCO	broccio@unime.it	090-6765236	090-395004
BRUNO EZIO	ebruno@unime.it	090-6765047	090-6765042
CACCAMO CARLO	carlo.caccamo@unime.it	090-6765044	090-6765042
CALVO MASSIMO	massimo.calvo@unime.it	090-6765034	090-395004
CANNISTRARO GIUSEPPE	gcannistraro@ingegneria.unime.it	090-6765236	090-395004
CARINI GIUSEPPE	carini@unime.it	090-6765014	090-395004
COSIO DANIELE	dcosio@unime.it	090-6765037	090-6765042
COSTA DINO	dino.costa@unime.it	090-6765041	090-6765042
CRUPI VINCENZA	vcrupi@unime.it	090-6765039	090-395004
CUTRONI MARIA	cutroni@unime.it	090-6765013	090-395004
D'AMICO VINCENZO	vincenzo.damico@unime.it	090-6765027	090-395004
D'ANGELO GIOVANNA	gdangelo@unime.it	090-6765039	090-395004
DE PASQUALE DOMENICO	domenico.depasquale@unime.it	090-6765028	090-395004
DONATO PAOLA	pdonato@unime.it	090-6765031	090-395004
FARAONE ANTONIO	antonio.faraone@unime.it	090-6765019	090-395004
FARO MARIA	maria.faro@unime.it	090-6765048	090-395004
FAZIO GIOVANNI	fazio@nucleo.unime.it	090-6765029	090-395004
FEDERICO MAURO	mauro.federico@unime.it	090-6765015	090-395004
FURCI VITTORIO	Vittorio.furci@unime.it	090-6765037	090-395004
GALLI GIOVANNI	giovanni.galli@unime.it	090-6765012	090-395004
GENTILE CLAUDIO	gentile@unime.it	090-6765022	090-395004
GIAQUINTA PAOLO VITTORIO	paolo.giaquinta@unime.it	090-6765.045	090-3973006
GIARDINA GIORGIO	giardina@nucleo.unime.it	090-6765025	090-395004
GINATEMPO BENIAMINO	beniamino.ginatempo@unime.it	090-6765046	090-6765042
GIORDANO RITA	giordano@unime.it	090-6765020	090-395004
GIULIANO EURO SANDRO	giulianos@unime.it	090-6765047	090-6765042
INTERDONATO SALVATORE	interdonatos@unime.it	090-6765036	090-395004
ITALIANO ANTONIO	antonio.italiano@me.infn.it	090-6765021	090-395004
MAGAZU' SALVATORE	salvatore.magazu@unime.it	090-6765025	090-395004
MAISANO GIACOMO	giacomo.maisano@unime.it	090-6765017	090-395004
MAJOLINO DOMENICO	majolino@unime.it	090-6765237	090-395004
MALESCIO GIANPIETRO	malescio@unime.it	090-6765230	090-6765042
MALLAMACE FRANCESCO	francesco.mallamace@unime.it	090-6765016	090-395004
MANDANICI ANDREA	andrea.mandanici@unime.it	090-6765013	090-395004
MIGLIARDO PLACIDO	placido.migliardo@unime.it	090-6765018	090-395004
PAGANO FRANCESCA	pagano@unime.it	090-6765031	090-395004
PELLICANE GIUSEPPE	gpellicane@unime.it	090-6765044	090-395004
PICCOLO ANTONIO	antonio.piccolo@unime.it	090-6765013	090-395004

<b>COGNOME E NOME</b>	<b>POSTA ELETTRONICA</b>	<b>telefono</b>	<b>fax</b>
PIZZIMENTI GIOVANNI	pizzimen@unime.it	090-6765048	090-6765042
PRESTIPINO GIARRITTA SANTI	prestipino@unime.it	090-6765045	090-6765042
RANDO SALVATORE	randos@unime.it	090-6765042	090-6765042
RUGGERI ALDO	aldo.ruggeri@me.infn.it	090-6765022	090-395004
RUGGERI ROBERTO	Ruggeri.r@tin.it	090-6765046	090-6765042
TORRISI LORENZO	lorenzo.torrisi@unime.it	090-6765052	090-6765042
TRIFIRO' ANTONIO	Antonio.trifiro@me.infn.it	090-6765036	090-395004
TRIPODO GASPARE	gaspare.tripodo@unime.it	090-6765039	090-395004
VENUTI VALENTINA	vvenuti@unime.it	090-6765019	090-395004
WANDERLINGH FRANCO	fwanderlingh@unime.it	090-6765011	090-395004
WANDERLINGH ULDERICO	uwanderlingh@unime.it	090-6765023	090-395004