



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA**

**DIPARTIMENTO DI FISICA**

C.da Papardo, Salita Sperone 31, 98166 Messina



**RAPPORTO DI ATTIVITA'**

**Anno 2006**

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	7
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 Attivita' di Ricerca</b>	10
6.1 Studio di plasmi in non equilibrio generati da impulsi laser di potenza	11
6.2 Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia e correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie	17
6.3 Produzione dei Nuclei Pesanti e Superpesanti	20
6.4 Materiali Amorfi	22
6.5 Indagini sperimentali delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di Bioprotezione	27
6.6 Proprietà Strutturali e Dinamiche di Sistemi Complessi Puri e Confinati. Fisica Applicata ai Beni Culturali e alla Biofisica	31
6.7 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi	35
6.8 Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia	36
6.9 Fisica dei Sistemi Complessi	38
6.10 Trasferimento di carica da principi primi in leghe metalliche	40
6.11 Informatica: M <sup>2</sup> AG: Milan-Messina Action Group	41
6.12 Transizioni di fase nella materia soffice	42
<b>A. Contatti: telefono, posta elettronica e fax</b>	43

## INTRODUZIONE

**L'anno 2006** è stato il diciottesimo 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, della Fisica applicata ai Beni culturali ed ambientali e dell'Informatica. 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 2006 è documentata da oltre 100 lavori su riviste internazionali con referee e dalla partecipazione a congressi internazionali (62 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, di Lettere e di Farmacia dell'Università di Messina e inoltre anche tutti i ricercatori hanno svolto nell'anno accademico 2005/06 almeno un corso ufficiale di insegnamento. 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 2006 sono state portate a termine, presso il Dipartimento

di Fisica, numerose tesi di Laurea e di Laurea specialistica e 7 tesi di Dottorato di Ricerca (XIX Ciclo).

Il Dipartimento con alcuni suoi docenti è coinvolto nell'allestimento della sezione di fisica all'interno del Museo della Scienza della Facoltà, mediante l'esposizione di 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

8 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, 7 Ricercatori, 1 Assistente ordinario, il Segretario Amministrativo, 1 Rappresentante dei dottorandi di ricerca, 1 Rappresentante degli Assegnisti, 1 Rappresentante del personale tecnico-amministrativo.

### *Direttore*

Prof. G. MAISANO

### *Segr. Amm.vo:*

Dott. S. CAMPOBELLO

### *Giunta*

Prof. F. BROCCIO

Prof. G. CARINI

Prof. G. D'ANGELO

Prof. D. DE PASQUALE

Prof. G. GIARDINA

Prof. S. MAGAZU'

Prof. G. MALESCIO

Prof. G. PIZZIMENTI

Prof. 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
V. CRUPI	Associato 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
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

C. BRANCA	Ricercatore – Settore FIS/01
F. BROCCIO	Ass. di ruolo - Settore FIS/06
M. FEDERICO	Ricercatore – Settore FIS/01
A. MANDANICI	Ricercatore – Settore FIS/01
G. GRASSO	Ricercatore- Settore INF/01
A. ITALIANO	Ricercatore "INFN"
A. NUCITA	Ricercatore- Settore INF/01
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.**

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:**

Carini Giovanni, Giuseppe Pellicane, Giovanna Romeo, Antonio Trifirò, Marina Trimarchi.

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

Valentina Venuti, Dino Costa, Federica Migliardo,

#### **Dottorandi:**

##### ***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.

##### ***Ciclo XXI***

Borrielli Antonio Lorenzo, Manganaro Marina, Munaò Giammarco

#### 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 2006. In questo anno si sono tenuti i cicli XIX, XX e XXI.

*Coordinatore Prof. Carlo Caccamo.*

I seguenti cicli di lezioni (moduli) sono stati tenuti da docenti afferenti al Dipartimento di Fisica durante l'anno solare 2006:

Anno 2006

Lezioni Dottorato di Ricerca I anno XXI 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. Giardino
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 XX 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 2006

### A. Tesi di Laurea

COGNOME E NOME	RELATORE	ARGOMENTO TESI di LAUREA
Lizio Domenico	D. De Pasquale	Sviluppo di un sistema non distruttivo di monitoraggio della corrente del fascio di elettroni prodotto dal Linac da 5 MeV di Messina
Loria Dario	R.C. Barnà	Un sistema radiografico basato sul Linac di elettroni da 5 MeV di Messina
Fabio Di Stefano	G. Tripodo	Dinamica di rilassamento in vetri borati
Alessandro Ridolfo	E. Bruno	Proprietà elettroniche di leghe metalliche
Irrera Placido	U. Wanderlingh	Interazioni elettrostatiche nelle Biomolecole ed applicazione diagnostiche
Giovanni Runci	G.Galli	Monitoraggio del campo magnetico rilasciato dalle linee di alimentazione negli impianti di trazione elettrica
Maurizio Bruno	G Galli	Dispositivo ad ultrasuoni per ciechi e sordo-ciechi con trasduttore sensoriale
Mario Anzà	G.Galli	Rilevamento ed analisi elettronica dei rumori cardiaci
Alessio Falcone	G. Galli	Dispositivo per la misura della spasticità in pazienti neurolesi

### B. Tesi di Dottorato

COGNOME E NOME	TUTOR	ARGOMENTO TESI DI DOTTORATO
Crupi Cristina	G. D'Angelo	Nature of low energy vibrational excitations in alkaline borate glasses
La Rocca Sergio	G. Carini	Dinamica segmentale e vibrazionale di polimeri eterociclici: effetto della densità di cross-linking
Longo Francesca	D. Majolino	Liquids in restricted geometry
Corsaro Carmelo	U. Wanderlingh	Experimental evidence of the fragile-to-strong Dynamic crossover in supercooled confined water: NMR results
Caridi Francesco	L. Torrisi	The use of mass Quadrupole spectrometer for the laser-generated plasmas
Giuseppe Mandaglio	G. Giardina	The effect of the dynamics of the entrance channel on the reaction products.
Allitto Francesco	D. De Pasquale	Lo studio di emissione di per-equilibrio di LCD light charge particles provenienti dalla reazione $O^{16}+Ca^{40}$ ad $E = 130$ Mev

## 6. Attività di Ricerca

Le attività di ricerca del Dipartimento si articolano essenzialmente nelle seguenti 12 linee:

- 1) Studio di plasmi in non equilibrio generati da impulsi laser di potenza
- 2) Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia e correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie
- 3) Produzione dei Nuclei Pesanti e Superpesanti
- 4) Materiali Amorfi
- 5) Indagini sperimentali delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione
- 6) Proprietà Strutturali e Dinamiche di Sistemi Complessi Puri e Confinati. Fisica Applicata ai Beni Culturali e alla Biofisica
- 7) Studio teorico e simulativo di sistemi 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
- 12) Transizioni di fase nella materia soffice

## 6.1 Studio di plasmi in non equilibrio generati da impulsi laser di potenza

**Componenti (Prof. Lorenzo Torrisi, Prof.ssa A.M. Mezzasalma (P.A.), Dr. A. Picciotto (D. R.), Dr. A. Mangione (D.R.), Dr. F. Caridi (D.R.), Dr. A. Borrielli (Dottorando), Dr. J. Beltrano (Dottorando), Dr. D. Margarone (Dottorando), Dr. N. Campo (D.R.), Dr. S. Gammino (Ric. INFN-LNS), Dr. A.M. Visco (Ric.), Dr. L. Andò (Ass. INFN-LNS))**

L'attività di ricerca è stata sviluppata nell'ambito dello studio della fisica dei plasmi in non-equilibrio, generati da impulsi laser di potenza in camere da vuoto, privilegiando l'aspetto della misure degli elevati campi elettrici intrinseci.

Le misure di particelle neutre e cariche emesse dal plasma, nonché degli spettri fotonici a larga banda (IR, VIS, UV e X), permettono di evidenziare che i plasmi generati da laser pulsati presentano un alto contenuto energetico. Le loro temperature e densità possono raggiungere decine di keV e densità vicino a quelle tipiche della fase solida. La loro frazione di ionizzazione può avvicinarsi al 100% e lo stato di carica medio, in elementi pesanti, può essere dell'ordine di alcune decine di unità di carica.

Particolare interesse riveste l'energia degli ioni emessi dal plasma, che può raggiungere valori dell'ordine di decine di MeV adoperando intensità laser di circa  $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>, l'elevato stato di carica, che in elementi pesanti può raggiungere 50+ e l'elevato "end-point" degli spettri X rivelati, dovuto principalmente a frenamento di elettroni energetici nel plasma, come è stato dimostrato da misure sperimentali eseguite dal nostro gruppo presso i Laboratori PALS di Praga. Presso il Laboratorio di Fisica dei plasmi generati da laser dell'Università di Messina, adoperando intensità dell'ordine di  $10^9$  W/cm<sup>2</sup>, lo stato di carica massimo è di circa 5+, la temperatura generalmente non supera 100 eV e gli ioni rivelati, lungo la normale alla targhetta ablata, hanno una energia cinetica che può raggiungere alcune unità di keV.

Tali risultati evidenziano che i campi elettrici all'interno del plasma in non-equilibrio di carica possono raggiungere valori molto elevati specie lungo direzioni privilegiate.

Processi di interazione termica, di espansione adiabatica ed interazioni Colombiane, sono alla base della cinetica di sviluppo di tali plasmi. Le distribuzioni di energia delle particelle, di tipo Boltzmann, presentano uno shift energetico che può essere spiegato sulla base della distribuzione "Coulomb-Boltzmann-Shiftata" avanzata dal Prof. Torrisi 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, ottenute dalla valutazione dello shift energetico, 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 dell'ordine del ns, come quelli adoperati presso l'INFN-LNS di Catania e del Dipartimento di Fisica di Messina. I valori del campo salgono attorno a qualche GV/cm adoperando intensità di circa  $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>, secondo i risultati da noi ottenuti presso i laboratori PALS di Praga. 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 ECR per realizzare una sorgente di nuova generazione, come il progetto di un nuovo tipo di acceleratore di particelle con fascio multienergetico e di elevata corrente, come l'utilizzo di processi di impiantazione ionica multienergetica per modificare le proprietà chimico-fisiche delle superfici di molti materiali e come una nuova tecnica di accelerazione ionica che, in un futuro non troppo lontano, potrà portare alla realizzazione di nuovi tipi di acceleratori di piccole dimensioni.

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.

## Publicazioni 2006 su rivista internazionale con Referee

- 1) 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 161(1), 3-13, 2006
- 1) L. Torrisci and S. Gammino  
“Non-equilibrium Ta plasma produced by fast pulsed lasers”  
Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 243, 143-148, 2006.
- 2) L. Torrisci, A.M. Mezzasalma, S. Gammino, J. Badziak, P. Parys, J. Wolowski, L. Laska and G. Franco  
“Ion implantation induced by Cu ablation at high laser fluence”  
Appl. Surf. Sci. 252 (24) (2006) 8533-8538
- 3) L. Torrisci, F. Caridi, D. Margarone, A. Picciotto, A. Mangione and J.J. Beltrano  
“Carbon-plasma produced in vacuum by 532 nm–3 ns laser pulses ablation”  
App. Surf. Sci. 252 (18) (2006) 6883-6889.
- 4) L. Torrisci, S. Gammino, L. Andò, L. Laska, J. Krasa, K. Rohlena, J. Ullschmied, J. Wolowski, J. Badziak, P. Parys  
“Equivalent ion temperature in Ta plasma produced by high energy laser ablation”  
J. Appl. Phys. 99 (2006) 083301
- 5) G. Ciavola, S. Gammino, L. Torrisci, S. Passarello, L. Andò, M. Cavenago, A. Galatà, P. Spaedtke, K. Tinschert, R. Lang, R. Iannucci, R. Leroy, C. Barue, D. Hitz, P. Seyfert, H. Koivisto, P. Suominen, O. Tarvainen, H. Beijers, S. Brandenburg, D. Vanrooyen, C. Hill, D. Kuchler, H. Homeyer, J. Rohrich, L. Schachter and S. Dobrescu  
“Multipurpose superconducting electron cyclotron resonance ion source, the European roadmap to third-generation electron cyclotron resonance ion sources”  
Rev. Sci. Instr. 77, 03A303, 2006
- 6) L. Torrisci, S. Gammino, L. Celona, J. Krasa, L. Laska and J. Wolowski  
“Laser-generated plasma at INFN-LNS”  
Plasma Physics Report 6(32), 514-519, 2006
- 7) L. Torrisci, S. Gammino, L. Celona, J. Krasa, L. Laska and J. Wolowski  
В НАЦИОНАЛЬНОМ ИНСТИТУТЕ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ      Versione Russa di “Laser-generated plasma at INFN-LNS”,  
Plasma Physics Report 6(32), 1-7, 2006
- 8) J M Rosinski, J Wołowski, J Badziak, F P Boody, S Gammino, J Krása, L Láska, A Mezzasalma, P Parys, M Pfeifer, K Rohlena, L Torrisci and J Ullschmied  
“Direct implantation of Ge ions produced by high-energy low-intensity laser pulses into SiO<sub>2</sub> films prepared on Si substrates”  
Phys. Scr. T123 (2006) 148–151
- 9) S. Gammino, G. Ciavola, L. Celona, L. Torrisci, D. Mascali, S. Passatello and A. Galatà  
“Enhancement of ion current from the TRIPS source by means of different electron donors”  
Rev. Sci. Instr. 77, 03B511, 2006
- 10) L. Torrisci and S. Gammino  
“Method for the calculation of electrical field in laser-generated plasma for ion stream production”  
Rev. Sci. Instr. 77, 03B707, 2006  
Selected for Publication on “Virtual Journal of Ultrafast Science”, April 2006 Issue  
at <http://www.vjultrafast.org>
- 11) L. Torrisci, S. Gammino, A. Picciotto, D. Margarone, L. Laska, J. Krasa, K. Rohlena and J. Wolowski  
“Temperature measurements in plasmas produced by high-power lasers interacting with solid targets”

Rev. Sci. Instr. 77, 03B707, 2006

Selected for Publication on "Virtual Journal of Ultrafast Science", April 2006 Issue  
at <http://www.vjultrafast.org>

12) A. Picciotto, J. Krasa, L. Laska, K. Rohlena, L. Torrissi, S. Gammino, A.M. Mezzasalma and F. Caridi

"Plasma temperature and ion current analysis of gold ablation at different laser power rates"

Nucl. Instr. And Methods B 247, 261-267, 2006

13) L. Torrissi, S. Gammino, L. Laska, J. Krasa, K. Rohlena and J. Wolowski

"Evaluations of electric field in laser-generated pulsed plasma"

Czech J. of Physics 56, B580-586, 2006

**14) F. Caridi, L. Torrissi, A. Picciotto, D. Margarone, A.M. Mezzasalma and S. Gammino**  
**"Energy distributions of particles ejected from laser-generated pulsed plasmas"**

Czech J. of Physics 56, B449-456, 2006

**15) D. Margarone, S. Gammino, J. Krása, E. Krouský, L. Láška, P. Parys, M. Pfeifer,**  
**M. Rosinski, K. Rohlena, J. Skála, L. Torrissi, J. Ullschmied, A. Velyhan, J. Wołowski**

*"Studies of Craters Produced by Laser on Solid Surfaces at Various Experimental Conditions"*

*Czech J. of Physics, 56, B542-549, 2006*

**16) L. Torrissi, L. Ryć, D. Margarone and A. Borrielli**

"Soft x-ray radiation from metal targets at interaction of 9-ns laser pulses"

Czech J. of Physics, 56, B571-579, 2006

17) A. Mangione, L. Torrissi, A. Picciotto and F. Caridi

"Physical characterization of pulsed laser deposition of diamond-like nanostructures"

Czech J. of Physics, 56, B534-541, 2006

18) S. Gammino, G. Ciavola, L. Torrissi, L. Celona, F. Consoli, S. Barbarino, D. Mascali and  
F. Maimone

"High density ECR plasmas for the production of intense highly charged ion beams"

Czech J. of Physics, 56 suppl. D, D1-D8, 2006

19) L. Torrissi

"Application possibilities of plasmas generated by high power laser ablation"

Atti Acc. Peloritana dei Pericolanti, V. LXXXIV, C1A0601004 (2006), 1-28 Nov.-LXXXII,  
A011001, pp.1-10, 2006

20) L. Laska, K. Jungwirth, J. Krasa, E. Krousky, M. Pfeifer, K. Rohlena, J. Ullschmied,  
J. Badziak, P. Parys, J. Wolowski, S. Gammino, L. Torrissi and F.P. Boody

"Self-focusing in processes of laser generation of highly-charged and high-energy heavy  
ions" Laser and Particle Beams 24(1), 175-179, 2006

21) A.M.Visco , L.Calabrese, N. Campo, L. Torrissi, G. Oteri, Lo Giudice, D. Cicciù

"Mechanical behaviour of quartz fiber reinforced epoxy resins for dental restorative"

Journal of Bio-Medical Materials and Engineering , vol.16, N°6 , 2006

L. Torrissi and D. Margarone

"Investigations on pulsed laser ablation of Sn at 1064nm wavelength"

Plasma Sources Sci. Technol. **15** (2006) 635–641

22) L. Torrissi, F. Caridi, A. Picciotto, D. Margarone and A. Borrielli

"Particle emission from tantalum plasma produced by 532 nm laser pulse ablation"

Journal of Applied Physics 100, 1 in press 2006

23) L. Torrissi, F. Caridi, A. Picciotto and A. Borrielli

"Energy distribution of particles ejected by laser-generated aluminium plasma"

Nucl. Instr. and Methods in Physics Research B 252 (2006) 183–189

24) J. Beltrano, L.Torrissi, A.M. Visco, N. Campo and E. Rapisarda

"Pulsed laser deposition (pld) technique to prepare biocompatible thin films"

Adv. In Science and Technology 49 (2006) 56-61

25) A.M. Visco , L. Calabrese, N. Campo, A. Bonavita, L.Torrissi

"Pull-out strength analysis of quartz fibre posts in dental implants"

Adv. In Science and Technology 49 (2006) 130-135

26) A. Mangione, L. Torrisci, A. Picciotto, A.M. Visco and N. Campo

“Nanostructured Carbon Films Produced by Pulsed Laser Deposition for Bio-Medical Applications”

Adv. In Science and Technology 49 (2006) 79-84

27) J. Wolowski, J. Badziak, F. P. Boody, A. Czarnecka, S. Gammino, S. Jablònski, J. Krása, L. Láska, P. Parys, K. Rohlena, M. Rosinski, L. Ryc, L. Torrisci and J. Ullschmied

“Generation of fast highly charged ions in laser–plasma interaction”

Plasma Phys. Control. Fusion 48 (2006) 1–8

### Proceedings di Conferenze Internazionali 2006 con Referee

1) L. Torrisci, S. Gammino, L. Celona and D. Margarone

“Electrical field measurements in non-equilibrium laser-generated plasmas”

Proc. ICOPS- Inter. Conf. on Plasma Science, 1P46, 162, in Traverse City, Michigan, June 4-8, 2006

2) J.J. Beltrano, L. Torrisci, A.M. Visco, N. Campo and E. Rapisarda, G. Casella

**“Pulsed laser deposition (PLD) technique to prepare biocompatible thin films”**

**Proc. 11th Int. Ceramic Congress, 4th Forum on New Materials (CIMTEC), Acireale (CT),**

**Italy, June 4-9, pg. 177, 2006**

3) A. Mangione, L. Torrisci, A. Picciotto, A.M. Visco and N. Campo

“Nanostructured carbon films produced by pulsed laser deposition for Bio-Medical applications”

**Proc. 11th Int. Ceramic Congress, 4th Forum on New Materials (CIMTEC), Acireale (CT),**

**Italy, June 4-9, pg. 169, 2006**

4) A.M. Visco, L. Calabrese, N. Campo, A. Bonavita and L. Torrisci

“Pull-out strength analysis of quartz fibre posts dental implants”

**Proc. 11th Int. Ceramic Congress, 4th Forum on New Materials (CIMTEC), Acireale (CT),**

**Italy, June 4-9, pg. 178, 2006**

5) L. Torrisci, S. Gammino, L. Laska, J. Krása, K. Rohlena and J. Wolowski

“Evaluations of electric field in laser-generated pulsed plasma”

Proc. SPPT Conf., 22nd Symp. on Plasma Phys. and Techn., 26-29 June 2006, Prague, Czech Republic.

6) **F. Caridi, L. Torrisci, A. Picciotto, D. Margarone, A.M. Mezzasalma and S. Gammino**

**“Energy distributions of particles ejected from laser-generated pulsed plasmas”**

Proc. SPPT Conf., 22nd Symp. on Plasma Phys. and Techn., 26-29 June 2006, Prague, Czech Republic.

7) D. Margarone, S. Gammino, J. Krása, E. Krouský, L. Láska, P. Parys, M. Pfeifer,

M. Rosinski, K. Rohlena, J. Skála, L. Torrisci, J. Ullschmied, A. Velyhan, J. Wołowski

**“Studies of Craters Produced by Laser on Solid Surfaces at Various Experimental Conditions”**

Proc. SPPT Conf., 22nd Symp. on Plasma Phys. and Techn., 26-29 June 2006, Prague, Czech Republic.

8) **L. Torrisci, L. Ryc, D. Margarone and A. Borrielli**

“Soft x-ray radiation from metal targets at interaction of 9-ns laser pulses”

Proc. SPPT Conf., 22nd Symp. on Plasma Phys. and Techn., 26-29 June 2006, Prague, Czech Republic.

9) A. Mangione, L. Torrisci, A. Picciotto and F. Caridi

- “Physical characterization of pulsed laser deposition of diamond-like nanostructures”  
Proc. SPPT Conf., 22nd Symp. on Plasma Phys. Amnd Techn., 26-29 June 2006,  
Prague, Czech Republic.
- 10) S. Gammino, G. Ciavola, L. Torrisci, L. Celona, F. Consoli, S. Barbarino, D. Mascali and  
F. Maimone  
“High density ECR plasmas for the production of intense highly charged ion beams”  
Czech J. of Physics, 56 suppl. D, D1-D8, 2006
- 11) J. Krasa, A. Picciotto, S. Gammino, L. Laska, K. Rohlena and L. Torrisci  
“Time-of-flight spectroscopy of ion currents emitted by laser produced plasmas”  
Proc. EPS, Conf. on Plasma Physics, Roma 19-23 June-06 ECA Vol. 30I, P-1.030 (2006)
- 12) L. Torrisci, F. Caridi, A. Borrielli, S. Gammino and D. Margarone  
“Neutral and ion energy distributions from plasmas generated by pulsed lasers”  
Proc. EPS, Conf. on Plasma Physics, Roma 19-23 June-06 ECA Vol. 30I, D-5.005 (2006)
- 13) L. Torrisci, A. Borrielli, D. Margarone and L. Ryc  
“X-ray and optical spectroscopy from laser generating pulsed plasma”  
Proc. EPS, Conf. on Plasma Physics, Roma 19-23 June-06 ECA Vol. 30I, D-5.006 (2006)
- 14) L. Torrisci, A. Picciotto, F. Caridi, A. Borrielli, A. Mangione, V. Nassisi  
“Analisi e trattamento di superfici con tecniche laser e spettrometria di massa”  
Proc. VII Sett. Cult. “La ricerca Interdisciplinare a supporto della Storia dell’Archeologia”  
Univ. di Messina, Facoltà di Scienze, 2-9 Aprile 2009, S. Agata, Messina
- 15) F. Belloni, V. Nassisi, L. Torrisci, J. Wolowski, D. Doria, A. Lo Russo and L. Velardi  
“Laser ion source for Ge implantation of silicon surfaces”  
XVI International Symp. on Gas Flow and Chemical Laser & High Power Laser  
Conference Gmunden 4-8 sett 06
- 16) V. Nassisi, L. Torrisci, A. Visco, A. Lorusso, L. Velardi, G. Caretto, F. Belloni, J. Beltrano,  
and N. Campo  
“Modification studies of polyethylene by multi-ion implantation by laser ion source”  
XVI International Symp. on Gas Flow and Chemical Laser & High Power Laser  
Conference Gmunden 4-8 sett 06
- 17) D. Aiello, A. Buccolieri, G. Buccolieri, A. Castellano, M. Di Giulio, L. Sandra Leo, A.  
Lorusso, G. Nassisi, V. Nassisi and L. Torrisci  
“Selective laser cleaning of chlorine on ancient coins”  
XVI International Symp. on Gas Flow and Chemical Laser & High Power Laser  
Conference Gmunden 4-8 sett 06
- 18) L. Torrisci, A. Mangione and J. J. Beltrano  
“Pulsed laser deposition of hydroxyapatite and diamond-like carbon thin films”  
Proc. Bionutron Conference – Neutron scattering highlight on biological system, Taormina,  
7-10 October 2006

### **Publicazioni 2006 su Reports, Riviste Nazionali e Proceedings di Conferenze Nazionali**

- 1) L. Torrisci, S. Gammino, D. Margarone, D. Mascali, A. Picciotto, F. Caridi, A. Borrielli, A.M.  
Mezzasalma, J. Beltrano, A. Mangione, L. Laska, J. Krasa, K. Rohlena, J. Wolowski, L.  
Ryc, J. Badziak and J.M. Rosinski  
“Pulsed Laser Ablation for Transient Obtainable Electric-field (PLATONE) LNS  
Activity”  
Report INFN-LNS 2005, printed 2006.
- 2) Caridi F., Torrisci L., Picciotto A., Margarone D., Borrielli A., Mangione A., Beltrano J.J.,  
Mezzasalma A.M., Gammino S.; “Distribuzioni energetiche di particelle emesse da plasmi  
generati da laser pulsati”; Proc. SIF XCII C. Naz., Torino 18-23 Sett. 2006, Sez.II, p. 10-11.
- 3) Lorusso A., Belloni F., Doria D., Nassisi V., Velardi L., Congedo G., Nicolardi V., Torrisci  
L.; “Confronto delle lunghezze di ricombinazione di plasmi non in equilibrio generati da vari

- target metallici”; Proc. SIF XCII C. Naz., Torino 18-23 Sett. 2006, Sez.II, p.11.
- 4) Aiello D., Buccolieri A., Buccolieri G., Castellano A., Leo L.S., Lorusso A., Nassisi G., Nassisi V., Torrisci L.; “Rimozione dei cloruri mediante laser cleaning su manufatti in rame e sue leghe”; Proc. SIF XCII C. Naz., Torino 18-23 Sett. 2006, Sez.V, p. 25-26.
- 5) Auditore L., Barnà R.C., Branca C., Campo N., Caridi F., De Pasquale D., Di Marco G., Emanuele U., Italiano A., Loria D., Morgana E., Torrisci L., Trifirò A., Trimarchi M., Visco A.M.; “Attività del linac di elettroni da 5 MeV: radiation processing e tomografie” Proc. SIF XCII C. Naz., Torino 18-23 Sett. 2006, Sez.V, p.60-61.

#### **Collaborazioni Nazionali 2006:**

INFN-LNS di Catania; Dip.to di Fisica, Università di Catania; Dip. Di Fisica, Università di Lecce; INFN di Lecce; Dip.to di Ingegneria, Università Tor-Vergata, Roma; Dip.to di Chimica Ind. e Ing. dei Materiali, Messina; CNR di Messina.

#### **Collaborazioni internazionali 2006:**

Physics Institute ASCR, Prague, Czech Republic; PALS Laboratory, Prague, Czech Republic; Institute of Plasma Physics and Laser Microfusion (IPPLM), Warsaw, Poland.



## **6.2 Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia e correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie**

Componenti (F. Allitto, L. Auditore, R. C. Barnà, D. De Pasquale, V. D'Amico, U. Emanuele, A. Italiano, A. Trifirò, M. Trimarchi)

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

La presenza, presso il Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina, di un acceleratore lineare di elettroni da 5 MeV, interamente progettato e realizzato in sede, ha consentito al gruppo di avviare, già da qualche anno, una linea di ricerca interamente incentrata sull'acceleratore e volta allo studio delle applicazioni del trattamento con le radiazioni ionizzanti. In particolare, l'acceleratore in questione rappresenta una facility interdisciplinare grazie alla quale, in collaborazione con altri gruppi di ricerca e con ditte private, vengono sviluppate svariate applicazioni, quali lo studio delle modifiche delle proprietà chimico-fisiche dei mezzi irradiati, la sintesi di nuovi materiali biocompatibili, la sterilizzazione di materiali di interesse biologico, la fattibilità di processi industriali innovativi.

Nel corso dell'anno 2006, lo studio delle modifiche delle proprietà del UHMWPE in seguito ad irraggiamento con fascio di elettroni, già iniziato negli anni precedenti, è stato portato avanti dal punto di vista analitico, mediante l'uso di uno spettrometro di massa.

L'impiego dello spettrometro ha permesso di valutare i diversi gruppi chimici liberati dall'UHMWPE durante l'irraggiamento. La natura e la quantità delle specie liberate, e la dipendenza di queste quantità dalla dose e dal doserate forniscono indicazioni sulle modifiche strutturali indotte sul mezzo mediante l'irraggiamento.

Lo spettrometro di massa è stato ancora utilizzato per valutare la variazione di permeabilità del polietilene nero in funzione dei parametri di irraggiamento. La diffusione di un gas noto attraverso una sottile membrana di polietilene precedentemente irraggiata è stata misurata mediante lo spettrometro, ed i risultati sperimentali hanno indicato una sensibile diminuzione della permeabilità (e quindi un consistente aumento del grado di crosslinking del polimero) in funzione dell'aumento del doserate.

Nell'ambito della sintesi di nuovi materiali biocompatibili, è investigata la sintesi, mediante crosslinking radiativi dell'hydrogel PEO 35000. Gli studi di swelling in acqua dell'hydrogel creato hanno mostrato una diminuzione della mesh-size rispetto ai valori trovati in letteratura, ed una forte dipendenza di essa dal doserate d'irraggiamento.

Sempre nell'ambito della sintesi per irraggiamento di hydrogels, in collaborazione col Dipartimento di Ingegneria Chimica dei Processi e dei Materiali di Palermo, sono stati sintetizzati hydrogels di PVP e PVA al fine di studiare l'incorporazione in essi di fragranze. In questo ambito, misure preliminari sulla struttura degli hydrogel ottenuti hanno messo in evidenza come la natura impulsata del fascio di elettroni prodotto dall'acceleratore favorisca la creazione di crosslinking intramolecolari piuttosto che intermolecolari, con la conseguente creazione di nanogel.

Sempre in collaborazione col DiCPM di Palermo è stata indagata la cura radiativa di giunti adesivi per applicazioni di tipo strutturale nel campo aerospaziale e automobilistico. Il processo, che consiste nella creazione di legami chimici fra un collante epossidico e dei giunti in alluminio, ha consentito di ottenere delle giunzioni la cui resistenza alla trazione è, a parità di dose di irradiazione, assai migliore di quella precedentemente ottenuta sugli stessi campioni con un irradiatore gamma.

Nell'ambito delle sterilizzazioni mediante radiazioni sono stati studiati l'abbattimento di micobatteri da farine alimentari e l'abbattimento di batteri all'interno di terreni agricoli per coltivazioni. La sistematica di misura in entrambi i casi ha consentito di valutare una dose

dell'ordine del kGy sufficiente ad ottenere l'abbattimento desiderato.

Parallelamente alle ricerche sopraesposte, si è continuato lo studio, già iniziato negli anni precedenti, per la realizzazione, a partire dall'acceleratore esistente, di un sistema per radiografie industriali e tomografie ad alta energia.

In particolare, dopo aver identificato i singoli componenti del sistema radiografico, che consiste, oltre che della sorgente rappresentata dall'acceleratore, di uno scintillatore accoppiato ad una fotocamera CCD, si è proceduto a valutare, mediante calcoli di simulazione, l'efficienza di tale sistema. Considerato che, in un sistema così fatto, l'informazione trasportata dall'immagine radiografica è fortemente influenzata dall'efficienza di ogni singolo componente, è stata studiata accuratamente la MTF del sistema (Modulation Transfer Function), la cui conoscenza consente di valutare la bontà del sistema ed il calcolo degli errori nel trasporto dell'informazione. Ai fini del calcolo dell'MTF è stato sviluppato un algoritmo apposito di calcolo del Noise Power Spectrum del sistema, che fa uso del software IDL. Questo algoritmo consente in particolare di identificare le sorgenti di rumore in un sistema come quello in oggetto, e di quantificarne la dipendenza dall'energia e dal livello di esposizione delle immagini.

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

Per quanto riguarda l'attività di questo gruppo in fisica nucleare, essa si svolge presso i Laboratori Nazionali del Sud dell'INFN, nell'ambito dell'esperimento ISOSPIN, che fa uso del multirivelatore CHIMERA, e che viene svolto in collaborazione con le sezioni INFN di Catania, LNS, Milano e Napoli. Nell'ambito di questo esperimento il gruppo di ricerca, sulla base dell'esperienza acquisita nello studio della reazione  $^{124}\text{Sn} + ^{124}\text{Sn}$  (35 AMeV), analizzata negli anni precedenti, ha iniziato, durante il 2006, l'analisi dei dati per le reazioni  $^{124}\text{Sn} + ^{58}\text{Ni}$  (35 AMeV),  $^{112}\text{Sn} + ^{112}\text{Sn}$  (35 AMeV),  $^{124}\text{Sn} + ^{27}\text{Al}$  (25 AMeV) e  $^{124}\text{Sn} + ^{64}\text{Ni}$  (25 AMeV). Questo tipo di analisi, già completata per la maggior parte delle reazioni in esame, è consistita nel corso del 2006 nell'identificazione in carica ed in massa delle particelle prodotte durante la reazione, nonché nella valutazione del loro tempo di volo.

#### Elenco lavori pubblicati su riviste internazionali con referee:

- 1) Planeta R, Amorini F, Anzalone A, Auditore L, Baran V, Berceanu I, Blicharska J, Brzychczyk J, Borderie B, Bougault R, Bruno M, Cardella G, Cavallaro S, Chatterjee MB, Chbihi A, Colonna M, D'Agostino M, DeFilippo E, Dayras R, DiToro M, Frankland J, Galichet E, Gawlikowicz W, Geraci E, Giustolisi F, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Guinet D, Iacono-Manno M, Kowalski S, LaGuidara E, Lanzano G, Lanzalone G, Lukasik J, Maiolino C, Majka Z, LeNeindre N, Nicolis NG, Pagano A, Papa M, Petrovici M, Piasecki E, Pirrone S, Politi G, Pop A, Porto F, Rivet MF, Rosato E, Rizzo F, Russo S, Russotto P, Sassiv M, Schmidt K, Siwek-Wilczynska K, Skwira-Chalot I, Sochocka A, Sperduto ML, Swiderski L, Trifiro A, Trimarchi M, Vannini G, Verde G, Vigilante M, Wieleczko JP, Wilczynski J, Zetta L, Zipper W "Isospin effects studied with the chimera detector at 35 MeV/nucleon" **Acta Physica Polonica B 37 (1):** 183-191 JAN 2006
- 2) De Filippo E, Amorini F, Anzalone A, Auditore L, Baran V, Berceanu L, Blicharska J, Brzychczyk J, Borderie B, Bougault R, Bruno M, Cardella G, Cavallaro S, Chatterjee MB, Chbihi A, Colonna M, D'Agostino M, Dayras R, Di Toro M, Frankland J, Galichet E, Gawlikowicz W, Geraci E, Giustolisi F, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Guinet D, Iacono-Manno M, Kowalski S, La Guidara E, Lanzalone G, Lanzano G, Maiolino C, Majka Z, Le Neindre N, Pagano A, Papa M, Petrovici M, Piasecki E, Pirrone S, Planeta R, Politi G, Pop A, Porto F, Rivet MF, Rosato E, Rizzo F, Russo S, Russotto P, Sassi M, Schmidt K, Siwek-Wilczynska K, Skwira I, Sperduto ML, Sochocka A, Swiderski L, Trifiro A, Trimarchi M,

Vannini G, Verde G, Vigilante M, Wieleczko JP, Wilczynski J, Zetta L, Zipper W: "Isoscaling in neck fragmentation" **Acta Physica Polonica B 37 (1)**: 199-205 JAN 2006

- 3) Russotto P, Piasecki E, Amorini F, Anzalone A, Auditore L, Baran V, Berceanu I, Blicharska J, Brzychczyk J, Borderie B, Bougault R, Bruno M, Cardella G, Cavallaro S, Coniglione R, Chatterjee MB, Chbihi A, Colonna M, D'Agostino M, Dayras R, De Filippo E, Di Tora M, Frankland J, Galichet E, Gawlikowicz W, Geraci E, Giustolisi F, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Guinet D, Iacono-Manno M, Kowalski S, La Guidara E, Lanzalone G, Lanzano G, Maiolino C, Majka Z, Le Neindre N, Pagano A, Papa M, Petrovici M, Pirrone S, Planeta R, Politi G, Pop A, Porto F, Rivet MF, Rosato E, Rizzo F, Russo S, Sassi M, Schmidt K, Siwek-Wilczynska K, Skwira I, Sperduto ML, Sochocka A, Swiderski L, Trifiro A, Trimarchi M, Vannini G, Vigilante M, Wieleczko JP, Wilczynski J, Zetta L, Zipper W 'Dynamical fission in the Sn plus Ni interaction at 35A MeV' **Intl. J. of Mod. Phys. E 15 (2)** (2006) 410-416
- 4) Skwira-Chalot I, Siwek-Wilczynska K, Wilczynski J, Amorini F, Anzalone A, Auditore L, Baran V, Brzychczyk J, Cardella G, Cavallaro S, Chatterjee MB, Colonna M, De Filippo E, Di Toro M, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Kowalski S, La Guidara E, Lanzano G, Lanzalone G, Maiolino C, Majka Z, Nicolis NG, Pagano A, Papa M, Piasecki E, Pirrone S, Planeta R, Politi G, Porto F, Rizzo F, Russotto P, Schmidt K, Sochocka A, Swiderski L, Trifiro A, Trimarchi M, Zetta L, Zipper W 'Dynamical evolution of the Au-197+Au-197 system at 15 MeV/nucleon' **Intl. J. of Mod. Phys. E 15 (2)** (2006) 495-499
- 5) L.Torrisi, A.Ilacqua, F.Caridi, N.Campo, A.Picciotto, R.Barnà, D.De Pasquale, M.Trimarchi, A.Trifirò, L.Auditore 'Measurements of gas diffusion in polyethylene irradiated by 5 MeV electron beams' **Rad. Eff. Defect. S. 161/01** (2006) 3-13
- 6) C.Branca, S.Magazu, G.Maisano, L.Auditore, R.C.Barna, D.De Pasquale, U.Emanuele, A.Trifiro, M.Trimarchi 'Synthesis of Polyethylene Oxide Hydrogels by Electron Radiation' **J. Appl. Polym. Sci. 102** (2006) 820-824

Elenco comunicazioni a Congressi Nazionali ed Internazionali:

1. L. Auditore, R.C. Barnà, D. De Pasquale, U Emanuele, A Italiano, D. Loria, A Trifirò, M. Trimarchi, 'A compact 5 MeV, S-band, Electron Linac Based X-Ray Tomography System', **EPAC'06, Edinburgh, UK 26-30 June 2006.**
2. Auditore L., Barnà R.C., Branca C., Campo N., Caridi F., De Pasquale D., Di Marco G., Emanuele U., Italiano A., Loria D., Morgana E., Torrisi L., Trifirò A., Trimarchi M., Visco A.M., 'Attività del linac di elettroni da 5 MeV: radiation processing e tomografie', **XCII Congresso S.I.F., Torino, 18 - 23 Settembre 2006.**
3. Barnà R. C., De Pasquale D., Emanuele U., Italiano A., Loria D., Morgana E., Trifirò A., Trimarchi M., 'Testing di un sistema tomografico per NDT ad alta energia', **XCII Congresso S.I.F., Torino, 18 - 23 Settembre 2006.**
4. Lucrezia Auditore, Renato C. Barnà, Domenico De Pasquale, Umberto Emanuele, Antonio Italiano, Dario Loria, Antonio Trifirò, Marina Trimarchi, 'Attività del Linac di elettroni da 5 MeV: Radiation Processing e Tomografie', **SIRR 2006, XIII Convegno Nazionale della Società Italiana per le Ricerche sulle Radiazioni, Bologna, 21-24 Novembre 2006.**

### 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)

La sintesi di nuovi elementi superpesanti ottenuti al GSI (Darmstadt, Germania), Jont Institute for Nuclear Research (Dubna, Russia) e RIKEN (Tokyo, Giappone) durante gli ultimi decenni, e le difficoltà di osservare detti rari eventi, stimolarono ampi studi sperimentali e teorici sul meccanismo di reazione nucleare. La collisione di due ioni pesanti porta ad una varietà di meccanismi di reazione. Il principale stadio di tutti i canali è la formazione di un rotante sistema dinucleare eccitato (DNS). Quest'ultimo si evolve fino a giungere ad un eccitato nucleo composto (CN) oppure si rompe in due parti dopo un intenso scambio di nucleoni tra i nuclei costituenti il sistema dinucleare. Nelle reazioni con grossi nuclei, il sistema dinucleare eccitato o il nucleo composto si rompono principalmente in due parti (frammenti delle reazioni binarie). Pertanto, lo studio della dinamica di reazione è oggi stimolato dalla ricerca di trovare le opportune combinazioni di nuclei proiettile-bersaglio ed energie dei nuclei incidenti al fine di sintetizzare nuovi elementi superpesanti e rivelare i prodotti di reazione.

Vi sono diversi modelli teorici che possono essere usati per realizzare questo tipo di calcoli, ma la reale complessità delle forze di collisione nucleo-nucleo porta alla necessità di dover fare delle assunzioni sul meccanismo di reazione o sul tempo di rilassamento dei principali gradi di libertà che sono utilizzati nei calcoli.

Il modello da noi elaborato si basa sul Dinuclear System concept (DNS-concept), e considera la formazione dei residui di evaporazione come l'ultimo dei tre stadi del processo di reazione. Questi sono: 1) la formazione di un sistema dinucleare come il risultato della cattura del nucleo proiettile dal nucleo bersaglio; 2) 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; 3) 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 produttiva di due frammenti.

L'uso di detto modello dinamico ed i calcoli ottenuti dalla Langevin-equation ci hanno consentito di determinare la dipendenza delle funzioni di eccitazione di cattura e fusione dalla struttura nucleare a shell e dagli angoli di orientazione iniziale degli assi di simmetria dei nuclei deformati proiettile e bersaglio. Per le reazioni  $^{16}\text{O}+^{238}\text{U}$  e  $^{60}\text{Ni}+^{164}\text{Sm}$ , le sezioni d'urto di fusione sono state ottenute mediando tutti i contributi provenienti dalle varie orientazioni degli assi di simmetria dei nuclei interagenti. I risultati ottenuti sono in buon accordo con i dati sperimentali. Nel caso della reazione  $^{16}\text{O}+^{238}\text{U}$ , le sezioni d'urto di fusione e cattura sono quasi le stesse, mentre quelle per la reazione  $^{60}\text{Ni}+^{164}\text{Sm}$  sono abbastanza differenti. Questo diverso comportamento è dovuto alla competizione della quasi-fissione che ostacola la formazione della fusione. Inoltre, le differenze ottenute tra le funzioni di eccitazione dei residui di evaporazione per le reazioni  $^{86}\text{Kr}+^{230}\text{Xe}$  e  $^{124}\text{Sn}+^{92}\text{Zr}$  sono determinate dai differenti valori della barriera intrinseca di fusione delle due reazioni. Si è osservato che detti valori dipendono dalle correzioni nucleari a shell dei nuclei reagenti.

#### *Pubblicazioni*

- 1) 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." *Int. Jour. of Mod. Phys. E.*, Vol. 15, No. 2 (2006) 311.

#### Comunicazioni a congressi

- 1) A. K. Nasirov , G. Giardina , G. Mandaglio , M. Manganaro , A. I. Muminov , R. K. Utamuratov, “*Role of the entrance channel dynamics on the evaporation residue formation*” , Int. Conf. Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy, May 29- June 03, 2006 Kiev Ukraine.
- 2) Fazio G., Giardina, Mandaglio G., Manganaro M., Nasirov A.K., Palamara R., Sacca. C., “*Ruolo della struttura nucleare a shell e degli angoli di orientazione dei nuclei collidenti nelle reazioni di fusione completa*” XCII Congresso SIF, Torino, abstract p. 167, 2006.
- 3) Giardina G., Fazio G., Mandaglio G., Manganaro M., Nasirov A.K., Muminov A.I., Utamuratov R.K., “*Role of the entrance channel dynamics on the products of massive nuclei reactions*” NS06 Conference on nuclei at the limits, Oak Ridge Tennessee (USA), abstract book pag. 56, (2006).
- 4) A.K. Nasirov, G. Giardina, G. Mandaglio, A.I. Muminov, R.K. Utamuratov “*Peculiarities of nuclear fusion at synthesis of superheavy elements*” The 6th International Symposium on Advanced Science Research, *Frontiers of Nuclear and Radiochemistry*, October 26-27, 2006, Tokai, Ibaraki, Japan.

## 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.

### **Tematiche scientifiche:**

#### ***A. Processi di rilassamento in sistemi disordinati: liquidi glass-forming e vetri a conduzione ionica.***

**Ricercatori: Maria Cutroni, Mauro Federico, Andrea Mandanici, Anna Raimondo**

Nel corso del 2006 è stato approfondito lo studio delle proprietà dinamiche e strutturali di vetri a conduzione ionica come parte 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. Il principale obiettivo a lungo termine di questo tipo di indagine è quello di fornire le basi per la formulazione di un opportuno modello che potrebbe consentire di ottimizzare, al variare della struttura microscopica, le caratteristiche elettriche e meccaniche di alcuni materiali in funzione di specifiche applicazioni. In particolare nell'ambito del programma di ricerca preventivato sono stati studiati i processi di rilassamento sub-T<sub>g</sub> in vetri borati d'argento binari Ag<sub>2</sub>O·n B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e ternari (AgI)<sub>x</sub>(Ag<sub>2</sub>O·n B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>1-x</sub> utilizzando come tecniche di indagine la spettroscopia dielettrica a larga banda (0.001 Hz - 3 GHz; 8 GHz- 40 GHz) e la spettroscopia meccanica a frequenze ultrasoniche. E' stata studiata la forma delle funzioni di risposta sia al variare della temperatura che al variare sistematico della composizione [1,2]. L'indagine delle proprietà dielettriche è stata estesa verso più alte temperature, fino a 420 K, ed è stata approfondita anche nella zona di più basse temperature, da 100 K a 3 K, utilizzando sistemi di misura home-made. L'aspetto peculiare di questa ricerca è stato il confronto fra la risposta dielettrica e la risposta meccanica, esteso non soltanto ai vetri borati d'argento, ma anche ad alcuni vetri a più bassa temperatura di transizione vetrosa e più alta conducibilità dc, quali i vetri molibdati d'argento. L'influenza degli aspetti strutturali a livello microscopico è stata studiata considerando le informazioni complementari 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. In considerazione di alcune anomalie nella risposta dinamica dei vetri molidati d'argento sono anche state effettuate misure di dilatazione termica fino a basse temperature (300 K – 10 K) in collaborazione con i ricercatori del Laboratorio de Bajas Temperaturas, Departamento de Fisica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid. Per meglio chiarire le relazioni fra la composizione, la struttura a livello microscopico e la risposta dinamica macroscopica è stato avviato lo studio di sistemi analoghi, al variare del tipo di cationi mobili (Li, Cs) nello stesso tipo di matrice vetrosa.

Per quanto riguarda lo studio dei liquidi glass-forming, sono stati innanzitutto analizzati due aspetti: (i) la forma del rilassamento dielettrico in funzione della temperatura; (ii) il confronto fra la risposta dielettrica e la risposta meccanica. Come materiale di riferimento è stato scelto un liquido molecolare semplice, già studiato in precedenza dal nostro gruppo, la m-toluidina. L'andamento del

modulo di shear in funzione della frequenza per questo materiale in prossimità della transizione vetrosa può essere descritto mediante l'equazione fenomenologica di Cole-Davidson, in cui il parametro di stretching,  $\beta$ , si mantiene costante al variare della temperatura nel range considerato [3]. Il liquido in esame costituisce quindi un interessante sistema-modello data la semplicità del suo tipo di risposta. E' stata anche analizzata la risposta dielettrica della m-toluidina in funzione della frequenza e della temperatura, dimostrando che anche la forma del rilassamento dielettrico è indipendente dalla temperatura nella regione vicina alla transizione vetrosa [4]. I risultati ottenuti sono stati utilizzati per verificare le previsioni del modello di Gemant-DiMarzio-Bishop, ripreso in dettaglio in alcune recenti pubblicazioni. Nell'ambito di questo modello si trovano delle relazioni fra la risposta meccanica e la risposta dielettrica di un liquido, ma esistono tuttora solo pochi studi in letteratura che consentono di verificarne la validità.

L'utilizzo del formalismo complesso nello studio della risposta meccanica si è mostrato di grande utilità per l'analisi dei dati di modulo meccanico. Infatti, in collaborazione con il gruppo del prof. G. B. McKenna (Department of Chemical Engineering, Texas Tech University, USA) e con il prof. K. Schröter (Fachbereich Physik, Universität Halle, Germany), è stato proposto un semplice modello che, in un sistema reale per la misura del modulo di shear di un fluido altamente viscoso, tiene conto della rigidità finita degli elementi metallici che applicano la sollecitazione di shear al materiale e rilevano le torsioni. Questo ha portato ad un semplice algoritmo di correzione dei dati che si acquisiscono con la strumentazione convenzionale per spettroscopia meccanica a basse frequenze [5].

Sono inoltre stati studiati gli aspetti termodinamici di alcuni liquidi semplici, derivati dal cicloesano, al variare sistematico della lunghezza della catena alchilica laterale. E' stato utilizzato il metodo della calorimetria adiabatica e l'analisi dei dati [6] ha portato ad evidenziare: a) una transizione cristallo-cristallo pochi gradi al di sotto della temperatura di fusione; b) correlazioni fra le proprietà termodinamiche e la struttura microscopica molecolare. Analogamente sono stati analizzati gli aspetti termodinamici e dinamici di alcuni liquidi ionici di grande interesse applicativo ('green chemistry') [7] con l'ausilio di varie tecniche di indagine complementare, grazie ad una collaborazione internazionale in area europea. I risultati costituiscono un valido riferimento per lo studio delle proprietà del diagramma di fase dei 'room temperature ionic liquids' e per lo studio di altri sali con più lunghe catene alchiliche laterali.

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

**Ricercatori: Giovanni Carini, Giuseppe Carini, Cristina Crupi, Giovanna D'Angelo, Sergio La Rocca, Gaspare Tripodo.**

### **(i) Anarmonicità e fragilità in vetri borati**

La fragilità e l'anarmonicità di vetri borati (Ag<sub>2</sub>O)-(B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) sono state quantificate misurando la variazione della capacità termica alla temperatura di transizione vetrosa  $T_g$  e il parametro termodinamico di Gruneisen a temperatura ambiente. Crescenti contenuti di ossido d'argento (per frazioni molari  $X > 0.10$  di ossido d'argento) causano un aumento di entrambi i parametri, mostrando che una crescente fragilità di un liquido glass-forming è predittiva di una crescente anarmonicità globale del suo stato vetroso. L'osservato aumento della fragilità è stato interpretato in termini delle reazioni di isomerizzazione che, per  $T > T_g$ , trasformano i gruppi tetraedrici BO<sub>4</sub> in gruppi triangolari BO<sub>3</sub> contenenti uno o due ossigeni non pontanti (NBO). Il parallelo incremento dell'anarmonicità del vetro è stato interpretato in termini dei moti di "rattling" anarmonico dei cationi all'interno delle loro gabbie microscopiche locali: i cationi metallici sarebbero caratterizzati da ampiezze vibrazionali che hanno una più marcata dipendenza dalla temperatura rispetto a quelle degli atomi costituenti il network borato ospitante. All'interno di tale modello il ruolo dei cationi sarebbe quello di pilotare le discusse reazioni di isomerizzazione e, conseguentemente, guidare il sistema verso una configurazione strutturale che è meno resistente alla degradazione termica, quando la temperatura è aumentata nell'intervallo fra  $T_g$  e  $T > T_g$ .

### **(ii) Stati di tunnelling e rilassamenti in vetri borati.**

Al variare della temperatura nell'intervallo 1.5-300 K, l'attenuazione acustica e la velocità del suono mostrano andamenti che sono governati dai moti localizzati di difetti strutturali e dall'anarmonicità. Le particelle localmente mobili sono soggette a moti di tunnelling per temperature inferiori a 10 K e ad attivazione classica sopra barriere di potenziale per  $T > 20$  K. L'intensità di tunnelling  $C$  varia fra  $10^{-4}$  e  $10^{-3}$  per tutti i vetri borati alcalini e d'argento analizzati e risulta essere indipendente dai cambi strutturali del network borato. Differentemente da quanto rivelato per  $C$ , l'intensità di rilassamento  $C^*$  è dell'ordine di  $10^{-2}$  ed esibisce un ben definito decremento all'aumentare della "field strength" del catione (dal Cs verso il Li) e del contenuto di ossido metallico, la cui variazione causa una significativa riduzione dei gruppi  $BO_3$  all'interno del network borato. In mancanza di un adeguato modello microscopico che descriva la natura delle eccitazioni di bassa energia nei vetri borati, queste osservazioni evidenziano che (i) gli stati di difetto sono associati a qualche tipo di moto locale dei gruppi  $BO_3$  e (ii) solo una piccola frazione delle particelle rilassanti sono coinvolte in moti di tunnelling. E' concluso che, differentemente dai centri rilassanti termicamente attivati, la densità spettrale dei "two-level systems (TLS)" è largamente indipendente dalla morfologia di un solido amorfo, confermando la sua natura universale come intrinseca allo stato vetroso.

### **(iii) Struttura, mobilità molecolare locale e cooperativa in polimeri termoplastici.**

Gli spettri di assorbimento infrarosso (range spettrale 600-4000  $cm^{-1}$ ) in network di polimeri termoplastici interpenetranti basati su poliuretano semicristallino (PU) e copolimeri a blocchi di stirene ed acrilato di potassio (S-b-AK) hanno evidenziato la mutua influenza dei componenti sulla formazione di un network di legami fisici intra- ed inter-molecolari tra i gruppi funzionali. In stretto accordo con queste osservazioni, gli andamenti con la composizione dei risultati sperimentali di densità, calorimetria a scanning differenziale e spettroscopia meccanica rivelano deviazioni da una semplice legge additiva delle proprietà fisiche delle blends polimeriche, che è stata associata ad una debole affinità dei componenti individuali. L'analisi quantitativa dei termogrammi di fusione e del rilassamento-gamma a basse temperature indica che l'interpenetrazione produce un consistente incremento della frazione amorfa del poliuretano. L'insieme delle osservazioni ha condotto a postulare 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. "Dynamical response of borate glasses down to low temperatures", M. Cutroni, A. Mandanici, A. Raimondo, A. Sanson, *Physics and Chemistry of Glasses - European Journal of Glass Science and Technology, Part B*, Volume 47, Number 4, August 2006, pp. 388-392(5)
2. "Broadband dielectric response of binary borate glasses", A. Mandanici, M. Cutroni, A. Raimondo, M. Federico, F. Rocca, C. Armellini, *Physics and Chemistry of Glasses - European Journal of Glass Science and Technology Part B*, Volume 47, Number 4, August 2006, pp. 367-370(4)
3. "Mechanical response of a simple molecular glass former in the glass transition region", A. Mandanici, X. Shi, S. A. Hutcheson, G. B. McKenna, M. Cutroni, S. Giambò, *Materials Science and Engineering A*, **432**, 299 (2006)
4. "Relaxational features of supercooled and glassy *m*-toluidine", A. Mandanici, R. Richert, M. Cutroni, X. Shi, S. A. Hutcheson, G. B. McKenna, *J. Non-Crystalline Solids*, **352**, 4729 (2006)



5. "Dynamic shear modulus of glycerol: Corrections due to instrument compliance", K. Schröter, S. A. Hutcheson, X. Shi, A. Mandanici, G. B. McKenna, *J. Chem. Phys.*, **125** (2006) 214507
6. "Thermodynamic study of alkyl-cyclohexanes in liquid, glassy and crystalline states", A. Mandanici, M. Cutroni, A. Triolo, V. Rodriguez-Mora, Miguel Angel Ramos, *J. Chem. Phys.*, **125**, 54514 (2006).
7. "Thermodynamics, structure and dynamics in room temperature ionic liquids: the case of 1-butyl-3-methyl imidazolium hexafluorophosphate ([bmim][PF6]).", Alessandro Triolo, Andrea Mandanici, Olga Russina, Virginia Rodriguez-Mora, Maria Cutroni, Christopher Hardacre, Mark Nieuwenhuyzen, Hans-Jurgen Bleif, Lukas Keller and Miguel Angel Ramos, *J. Phys. Chem. B*, **110**, 21357 (2006)
8. "Effect of cation sizes on tunnelling states, relaxations and anharmonicity of alkali borate glasses", Giovanni Carini, Giuseppe Carini, Gaspare Tripodo, Antonio Bartolotta, Gaetano Di Marco, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 3251-3262 (2006).
9. "Fragility, anharmonicity and anelasticity of silver borate glasses", Giovanni Carini, Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Gaspare Tripodo, Antonio Bartolotta, Gaetano Di Marco, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 10915-10929 (2006).
10. "Effect of blending on the structure of thermoplastic interpenetrating polymer networks", O. P. Grigoryeva, O. Slisenko, E. Lebedev, A. Bartolotta, Giovanni Carini, Giuseppe Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo, *J. Molecular Science-Part B: Physics* **46**, 55-69 (2007).
11. "Phase behaviour of thermoplastic interpenetrating polymer networks by thermal and mechanical measurements", A. Bartolotta, G. Carini, G. D'Angelo, G. Di Marco, S. La Rocca, O. P. Grigoryeva, L. Sergeeva, O. Slisenko, O. Starostenko, G. Tripodo, *Phil. Mag.* **87**, 723-730 (2007).
12. "Low-temperature specific heat in caesium borate glasses", C. Crupi, G. D'Angelo, G. Tripodo, G. Carini, A. Bartolotta, *Phil Mag.* **87**, 741-747 (2007).
13. "Ultrasonic and hypersonic behaviour of borate glasses", Giovanni Carini, Gaspare Tripodo, Lars Borjesson, Ezio Zanghellini, Antonio Bartolotta, *Phil. Mag.* **87**, 697-703 (2007).

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

1. M. Cutroni, A. Mandanici, A. Raimondo, "Ionic conduction and mechanical relaxation in silver borate glasses", X International Workshop on Disordered Systems, Molveno (Italy), 18-21 March 2006, Marpresentation
2. A. Mandanici, M. Cutroni, A. Raimondo, F. Rocca, "Structure-dependent dielectric response of binary borate glasses", X International Workshop on Disordered Systems, Molveno (Italy), 18-21 March 2006, Poster
3. A. Mandanici, M. Cutroni, R. Richert, X. Shi, S. A. Hutcheson, G. B. McKenna, "Dielectric and mechanical response of supercooled and glassy m-toluidine: Primary and secondary relaxations", VISCOUS LIQUIDS AND THE GLASS TRANSITION (V). Søminestationen (Holbæk, Denmark) May 26-28, 2006, *invited speaker*

4. M. Cutroni, A. Mandanici, A. Raimondo, F. Rocca, C. Armellini, A. Sanson, G. Dalba, F. Belotti, P. Mustarelli, "Local structure, mechanical and dielectric response of silver borate glasses", NCM 10, Prague, September 2006, Oral presentation
5. A. Mandanici, M. Cutroni, R. Richert, "Peculiarities of the alpha and beta relaxation in a fragile glass-former", "IV Workshop on Non Equilibrium Phenomena in Supercooled Fluids, Glasses and Amorphous Materials", Pisa, September 17-22, 2006, poster
6. "Ultrasonic and hypersonic attenuation in borate glasses", Giovanni Carini, Giuseppe Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo, L. Borjesson, E. Zanghellini, 10th Int. Workshop on Disordered Systems, March 2006, Molveno (Trento), Italy; page 22.
7. "Phase behaviour of thermoplastic interpenetrating polymer networks", A. Bartolotta, G. Carini, G. D'Angelo, G. Di Marco, S. La Rocca, O. P. Grigoryeva, L. Sergeeva, O. Slisenko, O. Starostenko, G. Tripodo, 10th Int. Workshop on Disordered Systems, 18-21 March 2006, Molveno (Trento), Italy; page 22.
8. "The first sharp diffraction peak and relaxations in glasses: the role of structural voids", G. D'Angelo, C. Costa, G. Tripodo, Giuseppe Carini, 10th Int. Workshop on Disordered Systems, March 2006, Molveno (Trento), Italy; page 3. Oral presentation
9. "Low temperature specific heat of heterocyclic polymer networks: Effect of network density", Giuseppe Carini, Giovanni Carini, G. D'Angelo, S. La Rocca, G. Tripodo, A. Bartolotta, F. Aliotta, G. Salvato, E. Privalko, 4th Workshop on "Non equilibrium phenomena in supercooled fluids, glasses and amorphous materials", Settembre 2006, Pisa, Italy.
10. "Internal friction and sound velocity at hypersonic frequencies in borate glasses", Giovanni Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo, L. Borjesson, 4th Workshop on "Non equilibrium phenomena in supercooled fluids, glasses and amorphous materials", Settembre 2006, Pisa, Italy.

#### **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
- Dr. Olga Grigorieva, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 02160 Kyiv, Ukraine

## 6.5 Indagini sperimentali delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione

**Componenti:** Prof. Giacomo Maisano, Prof. Salvatore Magazù, Dr.<sup>ssa</sup> Federica Migliardo, Dr.<sup>ssa</sup> Giovanna Romeo

Le tematiche di ricerca affrontate nell'anno 2006 sono molteplici, e sotto alcuni aspetti anche diverse, per quanto emerge un comune motivo conduttore: l'uso integrato di tecniche di indagine sperimentale, quali la diffusione di luce laser 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 Materiaux Moleculaires di Lille (F), lo scattering di neutroni, con esperimenti realizzati presso l'Institute Laue Langevin (ILL) di Grenoble, 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 contemplano liquidi puri in peculiari condizioni termodinamiche, liquidi molecolari ed associati, soluzioni, proteine, bioprotettori e polimeri.

Risultati di rilevanza scientifica sono stati conseguiti sul tema *Indagini sperimentali delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione*.

Più specificamente nel 2006 il trealosio è stato oggetto di attenzione, sia sotto il profilo scientificamente che per le rilevanti ricadute applicative. L'interesse è principalmente connesso all'efficacia come bioprotettore, 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.

Superfluo ribadire che lo *spin-off* della ricerca ha interessato molteplici 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 con l'Aventis e la Labplants.

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

- Progetto FP-6 LIFESCIHEALTH “scrIN-SILICO: Finding promising drug candidates against tuberculosis with multidisciplinary protocol based non-conventional search” (Finanziamento 2004-2006).
- Progetto MIUR – Internazionalizzazione del Sistema Universitario art. 23 - D.M. 5 agosto 2004, n. 262 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 Università di Messina (PRA interdisc. 2003 PRME031439 “Studio dei meccanismi fisico-chimici responsabili dell'efficacia dei bioprotettori finalizzato ad applicazioni biomediche”).

Nell'ambito del gruppo operativo di Fisica applicata, ambientale, sanitaria e dei beni culturali, sono state impiegate alcune metodologie fisiche nel campo dei beni ambientali. Più specificatamente alcune tecniche di monitoraggio sono state impiegate per il monitoraggio elettromagnetico ed acustico. Sono stati inoltre impiegati i Sistemi Informativi Territoriali (Geographic Informative Systems, GIS) per il monitoraggio, l'analisi e la trasposizione multimediale di informazioni ambientali georeferenziate. L'impiego dei GIS ha fornito un prezioso supporto per il monitoraggio dell'inquinamento ambientale, con particolare riferimento all'inquinamento acustico ed elettromagnetico, con la generazione di mappe zonali che ha consentito di svolgere funzioni di integrazione per la modellizzazione dell'impatto ambientale

L'attività di ricerca in ambito 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".

### **Elenco dei lavori pubblicati durante l'anno 2006**

- 1-S. Magazù, F. Migliardo, M. T. F. Telling,  
"α,α-Trehalose/Water Solutions. VIII. Study of Diffusive Dynamics of Water by High-Resolution Quasi Elastic Neutron Scattering",  
*Journal of Physical Chemistry B*, 110, 1020 (2006).
- 2- S. Magazù, F. Migliardo, A. J. Ramirez-Cuesta,  
"INS Study on Physical Mechanisms of Bioprotection",  
*International Journal of Physical Sciences*, 1, 75 (2006).
- 3-I. V. Blazhnov, S. Magazù, G. Maisano, N. P. Malomuzh, F. Migliardo,  
"Macro- and Micro-Definitions of Fragility of Hydrogen-Bonded Glass-Forming Liquids",  
*Physical Review E*, 73, 031201 (2006).
- 4- S. Magazù, F. Migliardo, E. Bellocco, G. Laganà, C. Mondelli,  
"Fragility of Biophysical Systems by Neutron Scattering",  
*Physica B*, 385-386, 856 (2006).
- 5- S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, N. P. Malomuzh, E. V. Orlov,  
"Transport and Diffusion Processes in Trehalose-Water Solutions: Theory and Experiments",  
*Chemical Physics*, 330, 90 (2006).
- 6- S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, N. P. Malomuzh, I. Blazhnov,  
"Theoretical and Experimental Studies in Hydrogen-Bonded Glass-Forming Systems",  
*International Journal of Physical Sciences*, 1, 126 (2006).
- 7- S. Magazù, F. Migliardo, D. Barreca, E. Bellocco, G. Laganà,  
"Molecular Mechanisms of Protein-Bioprotectant Interaction"  
*ICMNT Proceedings*, 1, 39 (2006).
- 8 F. Affouard, A. Lerbret, P. Bordat, M. Descamps, S. Magazù, F. Migliardo,  
"Comparative Study of Disaccharides in Water Solutions by Molecular Modelling and Neutron Scattering Experiments"  
"Neutron Scattering Highlights on Biological Systems", EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 47 (2006).
- 9-S. E. Pagnotta, F. Bruni, M. A. Ricci, S. Magazù,  
"Water Structure around Trehalose"  
"Neutron Scattering Highlights on Biological Systems", EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 54 (2006).
- 10-E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, S. Ficarra, F. Migliardo, A. Galtieri,  
"OCT Folding/Unfolding Characterisation"  
"Neutron Scattering Highlights on Biological Systems", EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 65 (2006).
- 11- E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, E. Tellone, S. Magazù,

- “Spectroscopic Analysis of OCT”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 67 (2006).
- 12- S. Magazù, F. Migliardo, M. T. F. Telling, A. Trimarchi, I. Venza,  
 “Dynamical and Hydration Properties of Disaccharide/Water Mixtures”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 69 (2006).
- 13-F. Polito, L. Minutoli, T. Fiumara, D. Altavilla, V. Di Stefano, E. Bellocco, G. Laganà, S. Magazù, F. Squadrito,  
 “Trehalose: A Unic Sugar that Protects Against Endotoxic Shock”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 71 (2006).
- 14- E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, U. Leuzzi, F. Migliardo, A. Galtieri,  
 “Ascorbic Acid Stabilization by Sugars”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 79 (2006).
- 15- F. Migliardo, A. J. Ramirez-Cuesta,  
 “Vibrational Properties of Disaccharide/Water Mixtures”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 81 (2006).
- 16- N. P. Malomuzh, S. Magazù, F. Migliardo,  
 “Fragility of the H-bond Network in Water and Its Manifestations in Alive Nature”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 85 (2006).
- 17-F. Polito, A. Bitto, T. Fiumara, D. Altavilla, E. Bellocco, G. Laganà, S. Magazù, F. Squadrito,  
 “Trehalose: A Biophysics approach to the Treatment of Inflammation”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 88 (2006).
- 18- C. Mondelli, S. Magazù, F. Migliardo,  
 “Study of Dynamical Transition in Disaccharide/water Mixtures”  
 “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, EDAS Messina, ISBN 88-7820-252-5, 90 (2006).

### **Elenco delle comunicazioni e/o partecipazioni a congresso**

- 1- S. Magazù, F. Migliardo  
 “Structural and Dynamical Properties of Water in Food”  
 International Workshop on Water in Food: Eurofood’s Water, 27-28 Marzo 2006, Bruxelles, Belgio.
- 2- S. Magazù, F. Migliardo  
 “Study of Mobility of Water in Sugar Mixtures”  
 International Workshop on Water in Food: Eurofood’s Water, 27-28 Marzo 2006, Bruxelles, Belgio.
- 3- S. Magazù, F. Migliardo  
 “Spectroscopic Investigation of Kosmotropes and Chaotropes on Water in Food”  
 International Workshop on Water in Food: Eurofood’s Water, 27-28 Marzo 2006, Bruxelles, Belgio.
- 4-E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, S. Ficarra, U. Leuzzi, S. Magazù, F. Migliardo, A. Galtieri  
 “Chromatographic Study on OCT Molten Globule/Unfolding States in Presence of Denaturants”  
 International Symposium on Biochromatography, 26-28 Aprile 2006, Lille, Francia.
- 5-E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, U. Leuzzi, E. Tellone, S. Magazù, F. Migliardo, A. Galtieri  
 “Temperature Dependence of Conformational Properties of Enzymes”

International Symposium on Biochromatography, 26-28 Aprile 2006, Lille, Francia.  
6- P. Ruggeri, G. Laganà, E. Bellocco, S. Magazù, F. Migliardo  
“Study of the Role of Polyamines in Stress Conditions”  
International Symposium on Biochromatography, 26-28 Aprile 2006, Lille, Francia.

### **Altri prodotti di ricerca**

- Premio Sapiro per la Ricerca Italiana ricevuto dalla Dr. Federica Migliardo indetto dal Gruppo Sapiro con il patrocinio del Senato della Repubblica, del Consiglio dei Ministri e del Parlamento Europeo per i risultati di alto valore scientifico conseguiti (Venezia, 6 Dicembre 2006).

- Stand istituzionale designato *Sistema Italia* dell'Istituto Nazionale per il Commercio Estero (ICE) in rappresentanza della ricerca italiana, interamente dedicato agli esiti della ricerca sul trealosio e al relativo spin-off applicativo in ambito biotecnologico, nell'ambito dell'Annual International Convention della Biotechnology Industry Organization BIO 2006 [...mostra-convegno che, a partire dal 1992, attira annualmente più di 1000 espositori e decine di migliaia di accademici, ricercatori, esperti e imprenditori provenienti da ogni continente, e si rivolge agli operatori dei vari comparti delle biotecnologie (biomedicina, bioinformatica, agro-alimentare, ambiente e bioenergia)], Chicago, 9 - 12 aprile 2006.

Il primo numero del 2006 della Newsletter dell'Area Studi, Ricerche e Statistiche dell'ICE, pubblicazione nata con l'obiettivo di fornire aggiornamenti e approfondimenti relativi alle principali tematiche sugli scambi internazionali di merci, servizi e capitali, è stato dedicato alla ricerca sul trealosio condotta dalla Dr. F. Migliardo.

- Organizzazione del Workshop Internazionale “Neutron Scattering Highlights on Biological Systems”, Taormina, 7-10 Ottobre 2006.

- Organizzazione dell'exhibit “Il trealosio: un efficace bioprotettore“ all'interno della mostra “Science for Food” nell'ambito del Festival della Scienza di Genova, edizione 2006, 28 Ottobre – 7 Novembre 2006.

## 6.6 Proprietà Strutturali e Dinamiche di sistemi complessi puri e confinati. Fisica Applicata ai Beni Culturali e alla Biofisica.

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

Oggetto dell'attività di ricerca dell'anno 2006 è stato lo studio, attraverso l'impiego di differenti tecniche spettroscopiche, delle proprietà strutturali, dinamiche e dei processi di rilassamento ultraveloci in liquidi a legame idrogeno, nello stato di "bulk" e confinati all'interno di matrici nano-porose naturali e artificiali. La stessa attività 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 Raman e assorbimento FT-IR presso i laboratori di spettroscopia del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina, spettroscopia ENS, QENS, INS e diffrazione di neutroni presso le grandi facilities europee quali ISIS (Oxford, UK) e ILL (Grenoble, F) ha fornito le informazioni necessarie per una trattazione quantitativa dettagliata dei complessi fenomeni inerenti tali problematiche.

### **D) 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**

Misure IQENS, ENS, IINS e di assorbimento FTIR-ATR sono state impiegate per investigare la dinamica diffusionale e vibrazionale dell'acqua confinata in zeoliti Na-A e Mg-scambiate A, al variare della temperatura, del contenuto d'acqua e della percentuale di scambio ionico indotto. Gli spettri IQENS hanno rivelato che lo scambio parziale di ioni Na<sup>+</sup> con ioni Mg<sup>2+</sup> induce un aumento del volume disponibile per la diffusione, una riduzione della frazione di molecole d'acqua che prendono parte al processo diffusionale jump osservato, ed una diminuzione dei tempi di residenza. Dall'analisi dei dati ENS, la dipendenza dalla temperatura dello spostamento quadratico medio atomico  $\langle u^2 \rangle$  rivela una transizione da un comportamento armonico ad una dinamica enarmonica anch'essa ben descritta in termini di un modello jump tramite un potenziale a doppio minimo asimmetrico, ed una maggiore mobilità, a tutte le temperature in esame, all'aumentare della percentuale di scambio ionico indotto. Gli spettri IINS collezionati sui suddetti campioni hanno rivelato uno spostamento a più bassa energia del cutoff della banda librazionale rispetto al ghiaccio Ih, a conseguenza di una deformazione del network a legame idrogeno. All'aumentare del contenuto di Mg<sup>2+</sup> la comparsa, negli spettri IINS, di picchi tipici dello stato cristallino ha rivelato che un aumento della percentuale dello scambio ionico indotto può favorire conformazioni tetraedriche "ice-like" delle molecole di H<sub>2</sub>O. La deconvoluzione in Gaussiane della banda librazionale ha mostrato, aumentando il contenuto di Mg<sup>2+</sup>, un'attenuazione dei modi librazionali connessi alle rotazioni impedito delle molecole d'acqua attaccate alla superficie zeolitica. Dai dati di spettroscopia FT-IR, la deconvoluzione della banda di O-H stretching in quattro componenti ha permesso l'investigazione dei cambiamenti strutturali indotti dal confinamento sugli arrangiamenti a legame idrogeno. Si è osservato un nuovo environment di molecole H<sub>2</sub>O, non presente nell'acqua liquida nello stato di bulk, che esibisce una dinamica vibrazionale impedita pilotata dai cationi extraframework della matrice zeolitica. La presenza, a tutte le temperature, del contributo a più bassa energia negli spettri dei campioni analizzati ha fornito evidenza sperimentale della possibilità, per le molecole d'acqua, di essere coinvolte in networks a legame idrogeno transienti estesi aventi un elevato grado di connettività. Nell'intero intervallo di temperatura esplorato è stata inoltre provata l'esistenza di un legame idrogeno biforcuto (BHB) quale caratteristica principale dell'acqua di bulk e confinata. Infine l'evoluzione in temperatura dell'intensità relativa delle diverse sottobande ha rivelato un interscambio tra i

fattori di popolazione di networks tetraedrici con legame idrogeno lineare (che decrescono con T) ed environments non pienamente sviluppati che esibiscono legami idrogeno distorti, biforcati (che crescono con T). In aggiunta, per le stesse zeoliti Na-A ed Mg-scambiate, è stato effettuato uno studio dell'evoluzione in temperatura (da -10 a +80°C) del modo di bending intramolecolare HOH. Un'analisi comparativa degli spettri ha mostrato cambiamenti nell'intensità e nella posizione di questa banda, dipendenti da T e dal contenuto di  $Mg^{2+}$ . Si è in particolare osservato un andamento in temperatura simile all'acqua di bulk, con un'evidenza di sottoraffreddamento a  $T=-10^{\circ}C$ . Alla stessa temperatura, si è evidenziata una riduzione dell'intensità della banda pari a circa il 15% passando dalla zeolite Na-A alla Mg41-A, Mg50-A e Mg75-A, indicativa di una frazione crescente di molecole d'acqua coinvolte in strutture tetraedriche ad elevata connettività. Tale risultato è stato interpretato sulla base del diverso raggio ionico, della diversa elettronegatività e dei diversi siti preferenziali dei cationi extra-framework mono- e bivalenti. L'intera mole di risultati sperimentali ottenuti dalle diverse tecniche spettroscopiche ha permesso di dimostrare il ruolo "structure-maker" della zeolite A sulla dinamica vibrazionale dell'acqua adsorbita. Esso è da intendersi come opposto al ruolo "structure-breaker" giocato dalla matrice vetrosa GelSil sull'acqua interfacciale, rivelato dalle già citate misure Raman ed INS. Tale ruolo "structure-maker" è inoltre provato essere favorito dallo scambio ionico indotto.

In seguito, allo scopo di provare come le differenze nella composizione chimica e/o nella topologia del framework zeolitico ed, in particolare, come la possibilità per le molecole d'acqua di sviluppare interazioni guest-guest ed host-guest possa condurre a sostanziali differenze nella dinamica vibrazionale, sono state altresì effettuate misure FTIR-ATR, nell'intervallo di temperatura da -10°C a +80°C, su K-chabazite (topologia del framework CHA) e scolecite (topologia del framework NAT) da confrontare con i dati FTIR-ATR relativi alle zeoliti A (topologia del framework LTA). I frameworks LTA e CHA esibiscono simile topologia e composizione chimica. Per essi, la banda di stretching O-H intramolecolare ha rivelato una varietà di strutture transienti a legame idrogeno con differenti gradi di connettività. In particolare, è stato osservato un nuovo environment di molecole di  $H_2O$ , non presente nell'acqua liquida, la cui dinamica vibrazionale è pilotata dai cationi extraframework. Dai risultati ottenuti, il ruolo "structure-maker" del framework CHA sull'acqua adsorbita è stato altresì messo in evidenza. Ancora, nel caso della K-chabazite, la perturbazione, dovuta al confinamento, sul network a lunga distanza pienamente sviluppato, è la più forte osservata, e rende il legame BHB la caratteristica strutturale principale dell'acqua confinata a temperature al di sopra di  $T=+3^{\circ}C$ . Ciò è chiaramente osservato dall'interscambio rivelato nella dipendenza dalla temperatura dei fattori di popolazione relativi. I cambiamenti in intensità e frequenza osservati, in condizioni di confinamento, nella banda di bending HOH, confermano i risultati ottenuti dall'analisi dello stretching O-H. Nel caso della scolecite, i dati collezionati nella regione dello stretching O-H e del bending HOH rivelano parecchi picchi, probabilmente connessi all'esistenza, all'interno dei canali, di tre distinte molecole d'acqua per catione  $Ca^{2+}$ . E' stata inoltre valutata la corrispondente molteplicità delle distanze  $O\cdots O$ , ritenuta alla base della complessità degli spettri FT-IR. Il network a legame idrogeno è apparso relativamente forte, nell'intervallo di temperatura esplorato. Infine, è stata osservata una inusuale dipendenza dalla temperatura per la sottobanda di bending HOH correlata alla coordinazione Ca- $H_2O$ .

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

L'attività di ricerca in questo ambito è stata innanzitutto 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  $H_2O$  adsorbita.

Sono state effettuate misure di scattering Raman, in funzione della temperatura, su acqua confinata in pori di 75 Å e di 200 Å di un vetro GelSil. Come risultato principale, è stato messo in evidenza un effetto simile prodotto dall'allargamento del diametro del poro e dalla temperatura. Ancora una



volta, il ruolo “structure-breaker” del vetro GelSil sull’acqua adsorbita è confermato, ed appare inoltre accentuato dalla diminuzione della grandezza del poro.

Inoltre, mediante spettroscopia Raman è stata investigata la vibrazione di stretching O-H del propylene glycol (PG), nell’intervallo di temperatura che si estende da -15°C a +60°C, nello stato di bulk e confinato all’interno di un vetro poroso GelSil (diametro dei pori 26 Å). Modificando la natura del substrato (da idrofilico ad idrofobico), è stato possibile separare i contributi superficiali da quelli di ridotta dimensionalità, entrambi responsabili della dinamica vibrazionale ad alta frequenza del sistema. Gli spettri sono stati interpretati in termini di molecole di PG che esibiscono differenti stati a legame idrogeno. La dipendenza da T dei numeri d’onda e delle aree relative delle componenti di deconvoluzione ha fornito una descrizione quantitativa del ruolo giocato dalle interazioni superficie-polimero e dagli effetti topologici sulla distribuzione di connettività delle molecole di PG confinato.

Si è infine intrapreso uno studio mediante spettroscopia FTIR-ATR su complessi solidi di beta-ciclodestrine di diverso tipo con farmaci, allo scopo di caratterizzare le interazioni “host-guest” fra tali macrocicli e i farmaci.

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

La conoscenza della collocazione geografico-temporale e dell’autenticità di manufatti di interesse storico artistico rappresenta sicuramente uno dei temi di ricerca nel campo della fisica applicata di maggiore fascino. La non distruttività delle tecniche scientifiche da utilizzare in questo campo risulta di assoluta priorità data la preziosità e l’unicità dei reperti da analizzare. In tal senso l’analisi dei campioni esaminati può essere realizzata sviluppando tecniche spettroscopiche assolutamente non distruttive che nel contempo favoriscano il riconoscimento ‘in situ’ di componenti presenti anche a livello di tracce. In tale riferimento lo studio in questo campo è stato principalmente rivolto alla caratterizzazione di reperti ceramici provenienti da differenti siti archeologici siciliani. Mediante l’uso di differenti tecniche spettroscopiche quali la diffrazione a raggi X, la spettroscopia Raman e FT-IR e la diffrazione di neutroni, è stato possibile risalire ad una area di produzione certa. Inoltre, è stato realizzato una caratterizzazione geofisica e termografica della Chiesa di S. Maria del Rosario (Motta S. Anastasia, Sicilia) allo scopo di rilevare eventuali disomogeneità nella struttura portante.

Anche nel campo biofisico, la spettroscopia di assorbimento infrarosso FT-IR si è rivelata particolarmente efficace. Infatti è stato realizzato uno studio degli effetti indotti su tessuti biologici di rene e cuore di ratto da parte di radiazioni non-ionizzanti alla frequenza di 900MHz. Tale investigazione è stata effettuata mediante un’analisi comparativa dei risultati ottenuti tramite misure FT-IR e di microscopia ottica.

## **ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI CON REFEREE**

- 1) C. Corsaro, V. Crupi, D. Majolino, S. Parker, V. Venuti, U. Wanderlingh.  
“Inelastic neutron scattering study of water in hydrated LTA type zeolites”.  
*Journal of Physical Chemistry A*, 110, 1190-1195 (2006)
- 2) V. Crupi, S. Interdonato, D. Majolino, M. R. Mondello, V. Venuti.  
“Spectroscopic evidence of the effects induced by non-ionizing radiation on tissue samples”.  
*Vibrational Spectroscopy*, 42, 369-374 (2006).
- 3) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti.  
“The hydrogen-bond network in propylene glycol studied by Raman spectroscopy”.  
*Journal of Molecular Structure*, 790, 141-146 (2006).
- 4) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti.  
“Vibrational properties of water molecules adsorbed in different zeolitic frameworks”.  
*Journal of Physics: Condensed Matter*, 18, 3563-3580 (2006).
- 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”.

- Vibrational Spectroscopy*, 42, 375-380 (2006).
- 6) C.Corsaro, V.Crupi, D.Majolino, P.Migliardo, V.Venuti, U.Wanderlingh, T.Mizota, M.Telling.  
“Diffusive dynamics of water in ion-exchanged zeolites”.  
*Molecular Physics*, 104, 587-598 (2006).
- 7) V. Crupi, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti.  
“Vibrational dynamics of a glass forming liquid in nanoscopic confinement as probed by inelastic neutron scattering”.  
*Journal of Molecular Structure*, 790, 135-140 (2006).
- 8) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, P. Mazzoleni, M. Triscari, V. Venuti.  
“Characterization of ancient amphorae by spectroscopic techniques”.  
*Vibrational Spectroscopy*, 42, 381-386 (2006).
- 9) D.Barilaro, D. Majolino, S.Gresta, S.Imposa, A. Schillaci, A.Leone.  
“Geophysical and thermographic investigations addressed to the study of the church of "S. Maria del Rosario" in Sicily (italy)”.  
*Contributions to Geophysics & Geodesy*, 36/2, 239-253 (2006) .
- 10) D. Barilaro, V. Crupi, D. Majolino, W. Kockelmann.  
“Neutron diffraction applied to the characterization of archaeological pottery”.  
*Materials Structure*, 13, 63-65 (2006).

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

- 1) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti.  
“The hydrogen bonding in the Raman OH stretching band of propylene glycol in nanometer confined space. Surface interaction and finite-size effects”.  
X International Workshop on Disordered Systems  
18-21 Marzo 2006, Molveno (Italia)
- 2) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti.  
“Raman spectroscopy: probing dynamics of water molecules confined in nanoporous silica glasses”.  
3<sup>rd</sup> International Workshop on Dynamics in Confinement 23-26 Marzo 2006, Grenoble (Francia).
- 3) V. Crupi, R. Ficarra, M. Guardo, D. Majolino, R. Stancanelli V. Venuti  
“UV-Vis and FTIR-ATR spectroscopic techniques to study the inclusion complex of 4',5,7-trihydroxyisoflavone”.  
XX Simposio A.D.R.I.T.E.L.F. -La Tecnologia Farmaceutica nell'Università e nell'Industria-  
4-7 Ottobre 2006, Catania (Italia).

## 6.7 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi

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

Sono stati indagati arresti strutturali in fullereni tramite mode-coupling theory e simulazioni di dinamica molecolare. Sono state anche studiate le proprietà termodinamiche e strutturali di miscele di liquidi polari e apolari (metanolo e CCl<sub>4</sub>) tramite teorie integrali per fluidi molecolari ed in particolare la teoria RISM (reference interaction site model).

E' stato inoltre effettuato uno studio teorico e simulativo delle proprietà strutturali di fluidi interagenti tramite potenziali a corto raggio con uso di HNC, MSA e simulazioni Monte Carlo per potenziali 2-Yukawa.

E' stato fatto un test di una versione della MHNC con un bridge functional ricavato nell'ambito della Fundamental Measure Theory di Y. Rosenfeld.

E' stato poi effettuato uno studio esteso del diagramma di fasi 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.

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, 124, art. 084501 (2006)
2. G.Pellicane, F.Saija, C.Caccamo e P.V.Giaquinta  
"Thermodynamic stability of fluid-fluid phase separation in athermal mixtures: the role of nonadditivity"  
Journal of Physical Chemistry B 110, 4359 (2006)

### RELAZIONI E PARTECIPAZIONI A CONGRESSI

- Comunicazione orale (D.Costa), Poster(G.Pellicane)  
Spring Workshop 2006 on "Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids", Lugano, 6/8 Aprile 2006
- CECAM Workshop "Patchy Colloids, Proteins and Network Forming Liquids: Analogies and New Insights from Computer Simulations", Lyon, 26/28 Luglio 2006
- CECAM Workshop "Computational aspects of building blocks, nucleation, and synthesis of porous materials"  
Lyon 29 -31 Agosto 2006  
Comunicazione orale (Pellicane)
- International Workshop "Liquid systems under extreme conditions"  
Barcelona, Spain 3-7 Settembre 2006).  
POSTER (Pellicane)

## 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)**

Finanziamenti: **Programmi di Ricerca di Ateneo (PRA UniME)**

L'attività del gruppo che insiste su questa linea di ricerca ha riguardato nel 2006 i seguenti temi:

- **MISURA DELL'ORDINE STRUTTURALE BASATA SULL'ENTROPIA: IL CASO DELL'ACQUA.** Una caratterizzazione sintetica della qualità e del grado di ordine strutturale presente in un liquido molecolare è possibile tramite opportuni "parametri d'ordine" costruiti in modo da fornire una misura integrata dell'intensità delle correlazioni posizionali e angolari che si instaurano tra coppie o, più in generale, tra gruppi di molecole. A questo riguardo, è stata utilizzata una coppia di parametri d'ordine basati entrambi sul contributo all'entropia configurazionale che nasce dalle correlazioni spaziali tra fluttuazioni di densità registrate in corrispondenza a coppie di punti distinti del sistema. Tale contributo, percentualmente dominante rispetto a quelli di ordine più elevato, può essere a sua volta risolto nelle componenti traslazionale e orientazionale. I parametri individuati sono del tutto generali e prescindono dalla conoscenza a priori della natura dell'ordine locale che si sviluppa nel liquido. Come tali, possono essere utilizzati per disegnare una "mappa" - al variare delle condizioni termodinamiche (temperatura e pressione) - dell'ordine strutturale che si manifesta in un generico fluido molecolare. Tale rappresentazione è stata investigata in particolare per l'acqua, con tecniche di dinamica molecolare classica applicate ad uno specifico modello di forze interatomiche denominato TIP4P ("Transferable Interaction Potential, 4-Point").
- **CRITERI FENOMENOLOGICI DI CONGELAMENTO E FUSIONE.** È stata testata la validità di alcuni criteri empirici cosiddetti "ad una fase", tra quelli più frequentemente utilizzati in letteratura per localizzare il doppio confine della transizione liquido-solido, in sistemi di particelle interagenti attraverso il potenziale di Buckingham, ovvero attraverso un potenziale repulsivo soffice di forma Gaussiana o modulato in funzione della distanza secondo una legge di potenza inversa. Il confronto con il diagramma di fase di questi sistemi, tracciato con tecniche avanzate di simulazione numerica, evidenzia la buona affidabilità di questi criteri che si confermano come un'alternativa rapida ed efficace a calcoli molto più complessi di stabilità termodinamica che richiedono, ineludibilmente, la determinazione delle energie libere delle due fasi coesistenti.
- **RUOLO DELLA NON-ADDITIVITÀ DELL'INTERAZIONE REPULSIVA TRA SPECIE DISTINTE NELLO SMESCOLAMENTO DI UNA MISCELA BINARIA LIQUIDA.** È stata studiata la separazione di fase fluido-fluido in una miscela composta da sfere rigide con due diametri distinti ma non troppo dissimili, caratterizzata da una distanza massima di avvicinamento tra particelle di specie diversa maggiore della media algebrica degli stessi diametri. L'analisi è stata condotta con teorie semi-analitiche basate su approssimazioni diverse per valutare l'affidabilità dei risultati i quali mostrano, concordemente, che è sufficiente un modesto grado di non-additività per rendere termodinamicamente stabile la separazione di fase fluido-fluido rispetto all'eventuale congelamento della miscela.
- **MECCANICA STATISTICA DI SISTEMI QUANTO-CLASSICI CON VINCOLI OLONOMI.** È stata formulata una teoria algebrica che permette di utilizzare vincoli olonomi nella modellizzazione di sistemi in cui alcuni gradi di libertà si comportano classicamente laddove altri evolvono, invece, invece secondo le leggi della meccanica quantistica. Tali sistemi, cosiddetti "misti", sono

particolarmente interessanti nel caso in cui si vogliono studiare reazioni chimiche con trasferimento di cariche elettroniche o protoniche, o nella fotochimica. Le simulazioni atomistiche di molecole biologiche sono tra le possibili applicazioni del formalismo dei vincoli olonomi a sistemi quanto-classici.

#### **PUBBLICAZIONI**

1. R. Esposito, F. Saija, A. M. Saitta, and P. V. Giaquinta, *Entropy-based measure of structural order in water*, Phys. Rev. E **73**, 040502(R) (2006).
2. F. Saija, S. Prestipino, and P. V. Giaquinta, *Evaluation of phenomenological one-phase criteria for the melting and freezing of softly repulsive particles*, J. Chem. Phys. **124**, 244504 (2006).
3. G. Pellicane, F. Saija, C. Caccamo, and P.V. Giaquinta, *Thermodynamic stability of fluid-fluid phase separation in binary athermal mixtures: The role of nonadditivity*, J. Phys. Chem. B **110**, 4359 (2006).
4. A. Sergi, *Statistical mechanics of quantum-classical systems with holonomic constraints*, J. Chem. Phys. **124**, 024110 (2006).

#### **COMUNICAZIONI A CONGRESSI**

1. Pellicane, F. Saija, C. Caccamo, P. V. Giaquinta, *Liquid-liquid phase transition in nonadditive model of binary athermal mixtures*, “Liquid Systems under Extreme Conditions EMLG/JMLG Annual Meeting” (Barcelona, Spagna, 3 – 7 Settembre 2006).
2. Esposito, F. Saija, A. M. Saitta, P. V. Giaquinta, *Structural anomalies in water: An entropy-based approach*, “Liquid Systems under Extreme Conditions EMLG/JMLG Annual Meeting” (Barcelona, Spagna, 3 – 7 Settembre 2006).
3. Saitta, T. Strassle, S. Klotz, F. Saija, P. V. Giaquinta, *Structure, translational and orientational order of the amorphous ices*, “44th EHPRG International Conference” (Praga, Repubblica Ceca, 4 – 8 Settembre 2006).
4. Sergi, *Quantum-classical dynamics at constant temperature: An application of non-Hamiltonian brackets*, “Quantum Mechanics from Fundamental Problems to Applications” (Bertinoro, Italia, 4 - 7 dicembre 2006).

## 6-9 Fisica dei sistemi Complessi

Componenti : (F. MALLAMACE, R. GIORDANO, U. WANDERLINGH, C. BRANCA, M.BROCCIO, N. GONZALEZ S. C. CORSARO)

Sono state condotte misure estensive di NMR, scattering quasi elastico di neutroni (QENS) e luce (QELS), di viscoelasticità in acqua confinata e sistemi colloidali. Questi ultimi attorno alla transizione di percolazione. Nel primo caso l' acqua è stata confinata in nano-pori a matrice cilindrica (MCM-41-S) ed in zeoliti. Nel caso dei nano tubi le proprietà dinamiche dell' acqua sono state studiate nel range di temperatura 190-280 K, un range in cui l' acqua di bulk cristallizza. Nel nostro caso invece date le dimensioni dei pori (qualche nanometro) la cristallizzazione è impedita dalla assenza di centri di nucleazione.

Per quanto riguarda l' acqua confinata abbiamo dato evidenza di due fenomeni di assoluta rilevanza scientifica:

i) la esistenza di una transizione di crossover dinamico da “fragile to strong glass forming material” (FSC) , ad una temperatura di circa 223 K. Tale fenomeno è mostrato chiaramente dalla dipendenza temporale dell' inverso del coefficiente di self diffusione dell' acqua ( $1/D$ ) con un punto di crossover da un comportamento non-Arrhenius a uno Arrhenius.

ii) combinando dati di NMR e QENS di ben definite disaccoppiate proprietà di trasporto (coefficiente di self diffusione e il tempo di rilassamento medio traslazionale) abbiamo mostrato il breakdown della relazione di Stokes-Einstein. Abbiamo ulteriormente mostrato che un tale non-monotonico disaccoppiamento riflette le caratteristiche della FSC essendo una conseguenza di cambiamenti sostanziali nella struttura del legame idrogeno dell' acqua. Inoltre, un comportamento in termini di scaling-law fra i due parametri mostra la presenza di eterogeneità dinamiche dovute alla presenza di due fasi liquide dell' acqua: una a bassa densità ed una seconda a bassa densità.

Per quanto riguarda i sistemi colloidali abbiamo ottenuto i seguenti risultati:

i) L' incremento nella viscosità e la viscoelasticità osservato in colloidali attrattivi (variando la temperatura e la frazione di volume) può essere relata alla formazione di strutture dovute ad un processo di aggregazione. In particolare abbiamo studiato la dipendenza non triviale da questi parametri di un sistema micellare co-polimerico. Il paragone fra i dati sperimentali e i risultati di appropriate simulazioni numeriche in un semplice modello di fenomeni gelificazione suggeriscono che questo intrigante comportamento può essere spiegato in termini di un processo di clustering e che questa analisi possa essere generalizzata ad altri sistemi colloidali attrattivi.

ii) Sono state fatte simulazioni standard Monte Carlo al fine verificare la accuratezza delle previsioni di alcuni modelli teorici sulle proprietà strutturali di un fluido modello interagente tramite hard-core “two-Yukawa potential” composto di una “short-range attractive well” vicino a un hard repulsivo, seguito da uno smooth, long-range taglio repulsivo. I calcoli sono stati sviluppati nel framework della Ornstein-Zernike equation, risolta sia analiticamente tramite the mean spherical approximation (MSA) o iterativamente con la hypernetted-chain (HNC) closure. Tale studio mostra che entrambi I modelli sono generalmente accurati in una regione termodinamica corrispondente alla fase di vapore denso vicino al punto critico. Per una scelta opportuna dei parametri del potenziale, quando quando the attractive well è profonda e/o sufficientemente larga il fattore di struttura statico mostra un picco secondario a piccoli Q. Il manifestarsi di tale picco, osservato sperimentalmente in sospensioni colloidali e soluzioni di proteine è discusso in termini della formazione di “equilibrium clusters” nel liquido omogeneo.

Congressi:

1) Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids, Lugano, Switzerland, April 6 – 8, 2006

2) XX SITGES CONFERENCE on STATISTICAL MECHANICS: Physical Biology: from Molecular Interactions to Cellular Behavior, Sitges, Barcelona, SPAIN, 5-9 June 2006

## PUBBLICAZIONI

- 1- Mallamace F, Broccio M), Corsaro C, Faraone A, Liu L, Mou CY, Chen SH  
Dynamical properties of confined supercooled water: an NMR study  
JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER 18 (36): S2285-S2297 Sp. Iss. SI SEP 13  
2006
- 2- Chen SH, Mallamace F, Mou CY, Broccio M., Corsaro C, Faraone A), Liu L ,  
The violation of the Stokes-Einstein relation in supercooled water  
PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES  
OF AMERICA 103 (35): 12974-12978 AUG 29 2006
- 3- Mallamace F, Broccio M, Corsaro C, Faraone A, Wanderlingh U, Liu L, Mou CY, Chen SH,  
The fragile-to-strong dynamic crossover transition in confined water: nuclear magnetic resonance  
results JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (16): Art. No. 161102 APR 28 2006
- 4- Mallamace F, Chen SH, Coniglio A, de Arcangelis L, Del Gado E, Fierro A,  
Complex viscosity behavior and cluster formation in attractive colloidal systems  
PHYSICAL REVIEW E 73 (2): Art. No. 020402 Part 1 FEB 2006
- 5-Corsaro C, Crupi V, Majolino D, Migliardo P, Venuti V, Wanderlingh U, Mizota T, Telling M,  
Diffusive dynamics of water in ion-exchanged zeolites,  
MOLECULAR PHYSICS 104 (4): 587-598 FEB 20 2006
- 6-Corsaro C, Crupi V, Majolino D, Parker SF, Venuti V, Wanderlingh U.,  
Inelastic neutron scattering study of water in hydrated LTA-type zeolites,  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 110 (3): 1190-1195 JAN 26 2006
- 7-Broccio M, Costa D, Liu Y, Chen SH,  
The structural properties of a two-Yukawa fluid: Simulation and analytical results,  
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 124 (8): Art. No. 084501 FEB 28 2006

## 6.10 Trasferimento di carica da principi primi in leghe metalliche

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

Oggetto della ricerca sono stati i meccanismi che determinano il trasferimento di carica in sistemi metallici e l'influenza di questo sulle proprietà spettrali e sulle transizioni di fase nello stato solido. E' stato seguito un approccio teorico basato su due schemi per il calcolo delle proprietà elettroniche di sistemi metallici in presenza di disordine sostituzionale, la Polymorphous Coherent Potential Approximation (**PCPA**) e Non Local Coherent Potential Approximation (**NLCPA**), la seconda sviluppata in collaborazione con i gruppi di Bristol e di Warwick. Entrambi gli schemi riescono a includere la dipendenza dall'environment chimico della nota Coherent Potential Approximation, di cui costituiscono convenienti generalizzazioni, e, rispetto a questa forniscono energie totali in migliore accordo con l'esperimento e con calcoli effettuati su supercelle contenenti un migliaio di atomi.

I parametri ottenuti dai calcoli PCPA hanno prodotto l'input necessario alla effettuazione di calcoli basati sulla Charge Excess Functional theory (**CEF**), sviluppato precedentemente dallo stesso gruppo. L'integrazione di CEF e PCPA ha consentito di calcolare, senza ricorrere a parametri aggiustabili, le proprietà elettroniche e l'energetica di sistemi metallici estesi con accuratezza simile a quella ottenibile con le tecniche concorrenti ed una riduzione di alcuni ordini di grandezza del tempo di calcolo necessario. Su tali basi e' stato possibile mettere a punto un nuovo metodo statistico da principi primi per lo studio delle correlazioni elettroniche ed atomiche in sistemi metallici, basato sull'impiego congiunto del CEF e del Monte Carlo (**CEF-MC**). Tale metodo e' stato applicato allo studio di alcune transizioni di fase ordine-disordine e di segregazione in sistemi metallici. In particolare sono state studiate le leghe metalliche disordinate di CuPd, CuZn, NiAl e CuAu ed i corrispondenti composti intermetallici ordinati. Sono attualmente in corso di pubblicazione risultati per la transizione ordine-disordine in CuZn e la segregazione in leghe di NiAl. In tutti i casi e' stato possibile determinare le proprietà di ordinamento atomico e le energie libere in funzione della temperatura.

Una parte considerevole del lavoro svolto e' stato costituito dalla scrittura e dal controllo di un programma di calcolo che implementa il metodo CEF-MC, in particolare sono stati sviluppati algoritmi per l'inversione rapida di matrici.

Sono ancora state analizzate formalmente le proprietà della Hamiltoniana atomica definita dal CEF e si e' trovato che essa risomma interazioni di range infinito e a tutti gli ordini in uno sviluppo a molti corpi.

### **Pubblicazioni**

1. Tulip PR, Staunton JB, Rowlands DA, Gyorffy BL, Bruno E, Ginatempo B, “**Nonsite diagonal properties from the Korringa-Kohn-Rostocker nonlocal coherent-potential approximation**” PHYS. REV. B 73: Art. No. 205109 (2006).

### **Partecipazione a convegni:**

1) KKR-Workshop, October 20-22, 2006, Burwalls, **Bristol**, UK Relazione su invito: Ezio Bruno “ ‘Ab initio’ Theory and Simulation of Metallic Alloys. Ordering and Segregation from the Charge Excesses Functional Theory - MonteCarlo Method”

2) Ezio Bruno “ ‘Ab initio’ Theory and Simulation of Metallic Alloys. Ordering and Segregation from the Charge Excesses Functional Theory - MonteCarlo Method”

3)

Attività organizzative

1) B. Ginatempo Direzione del progetto IMFM (Ipertesto multimediale di Fisica della Materia), per conto dell'INFM, 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 (Cultore della materia, INF01), M. Marchi (Cultore della materia, INF01), N. Spada (Prof. a contratto, INF01, Facolta' di Lettere), Biagio Bonasera (esercitatore a contratto, SISSIS)

E' proseguito il lavoro di esplorazione e verifica dell'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:

- dati estratti da pagine Web tradizionali ed instradati con RSS [3,5,7]
- sistemi a regole alternativi ai fogli XSLT [4,6]
- riconoscimento di evidenza di attivita' inferenziale in esperimenti clinici [1,2].

-- Pubblicazioni --

- [1] Maria Amalfi, Katia Lo Presti, Alessandro Provetti, Franco Salvetti:  
Finding Instances of Deduction and Abduction in Clinical Experimental Transcripts.  
Poster at European Conference on Artificial Intelligence ECAI 2006 : pp. 737-738
- [2] Maria Amalfi, Katia Lo Presti, Alessandro Provetti, Franco Salvetti:  
Finding Instances of Deduction and Abduction in Clinical Experimental Transcripts  
Proc. of CILC 2006 "Convegno Italiano di Logica Computazionale"  
The conference version of [1].
- [3] F. de Cindio, G. Fiumara, M. Marchi, P. Provetti, L. A. Ripamonti, L. Sonnante:  
Aggregating Information and Enforcing Awareness Across Communities with the Dynamo  
RSS Feeds Creation Engine: Preliminary Report.  
OTM Workshops at Community Informatics (COMINF 2006) Conference, pp. 227-236.
- [4] Massimo Marchi, Giacomo Fiumara, Alessandro Provetti  
Applying ASP Inferential Engines to the Filtering, Decoration and Validation of Data from Web  
Sources  
Proc. of CILC 2006 "Convegno Italiano di Logica Computazionale"
- [5] Sergio Bossa, Giacomo Fiumara, Alessandro Provetti  
A Lightweight Architecture for RSS Polling of Arbitrary Web sources  
Prof. of WOA 2006: Dagli agenti agli oggetti
- [6] Carlo Bernardoni, Giacomo Fiumara, Massimo Marchi, Alessandro Provetti:  
Declarative Web data extraction and annotation.  
Proc. of Workshop on Logic Programming WLP 2006, pp. 137-144.
- [7] Sergio Bossa, Giacomo Fiumara Alessandro Provetti:  
Declarative Web Data Extraction and Annotation.  
20th Workshop on Logic Programming (WLP 2006), 2005 pp. 137-144  
<http://www.kr.tuwien.ac.at/wlp06/>

-- Eventuali altri prodotti di ricerca --

-Il sito Web <http://mag.dsi.unime.it/inference-finder/> sviluppato a partire dalla tesi di K. Lo Presti, permette di scaricare il programma Prolog di analisi automatica del testo descritto in [2].

-A. Provetti e' stato incaricato di organizzare il CILC07: XXII convegno italiano di Logica computazionale.

## 6.12 Transizioni di fase nella materia soffice

Componenti ( Prof. G. Malescio)

L'attività di ricerca si è incentrata sullo studio del comportamento di fase di macromolecole con struttura dipendente dai parametri termodinamici. Tali sistemi sono genericamente definiti come soft matter proprio per il fatto che la loro struttura può variare anche considerevolmente in funzione delle condizioni cui sono sottoposti. I diagrammi di fase che caratterizzano questi sistemi sono notevolmente complessi e diversificati. Di conseguenza risulta di notevole importanza cercare di ridurre la complessità di tale panorama di comportamenti di fase. La ricerca condotta ha utilizzato concetti di scaling per ricondurre il diagramma di fase di sostanze con dimensioni dipendenti dai parametri termodinamici a quello di sostanze caratterizzate dallo stesso potenziale di interazione intermolecolare ma con dimensioni molecolari costanti. In tal modo è stato possibile individuare delle ampie classi di universalità, il che permette di collegare tra loro anche sostanze in apparenza diverse. In particolare tale approccio è stato applicato allo studio del comportamento di colloidi "thermally responsive" e di sistemi polimerici.

Elenco dei lavori pubblicati nel 2006

1- G.Malescio

"Universality in the phase behavior of soft matter: A law of corresponding states"  
Phys.Rev.E **74**, 040501(R) (2006)

2- G.Malescio

"From Cosmos to Chaos. The science of unpredictability" (book review, articolo su invito)  
Nature **443** 918 (2006)

**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	cbranca@unime.it	090-6765019	090-395004
BROCCIO FRANCESCO	broccio@unime.it	090-6765236	090-395004
BRUNO EZIO	ebruno@unime.it	090-6765233	090-6765042
CACCAMO CARLO	carlo.caccamo@unime.it	090-6765044	090-6765042
CALVO MASSIMO	massimo.calvo@unime.it	090-6765034	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
GRASSO GIORGIO	ggrasso@informatica.unime.it	090-6765233	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
NUCITA ANDREA	andrea@informatica.unime.it	090-676	090-6765042
PAGANO FRANCESCA	pagano@unime.it	090-6765031	090-395004
PELLICANE GIUSEPPE	gpellicane@unime.it	090-6765044	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