



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA**

**DIPARTIMENTO DI FISICA**

C.da Papardo, Salita Sperone 31, 98166 Messina



**RAPPORTO DI ATTIVITA'**

**Anno 2007**

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 disordinati .....	22
6.5 Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biotecnologico Metodologie fisiche applicate ai beni ambientali.....	26
6.6 Struttura e Dinamica di sistemi complessi puri e confinati. Fisica Applicazioni di metodologie fisiche nel campo dei Beni Culturali e Biofisico.....	30
6.7 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi .....	34
6.8 Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia .....	35
6.9 Fisica dei Sistemi Complessi .....	37
6.10 Trasferimento di carica da principi primi in leghe metalliche.....	39
6.11 Transizioni di fase ed anomalie termodinamiche .....	40
6.12 Informatica: M <sup>2</sup> AG: Milan-Messina Action Group.....	41
6.13 Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico .....	42
<b>A. Contatti: telefono, posta elettronica e fax</b> .....	43

## INTRODUZIONE

**L'anno 2007** è stato il diciannovesimo 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 28 professori di ruolo, 7 ricercatori, 10 unità di personale tecnico e amministrativo e da 1 dipendente 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 2007 è documentata da oltre 70 lavori su riviste internazionali con referee e dalla partecipazione a congressi internazionali (oltre 80 comunicazioni). Il costante potenziamento delle attività di ricerca, realizzato negli ultimi anni, è legato anche alla disponibilità di borse di studio di dottorato, 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 2006/07 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 2007 sono state portate a termine, presso il Dipartimento di Fisica, numerose tesi di Laurea e di Laurea specialistica e 6 tesi di Dottorato di Ricerca (XX 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

15 Professori Associati

7 Ricercatori

11 Assegnisti

4 Borsisti

17 Dottorandi

10 Unità di personale Tecnico e Amministrativo (Università)

1 Unità di personale Tecnico (I.N.F.N.)

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, 15 Professori Associati, 7 Ricercatori, 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. R. BARNA'

Prof. G. CARINI

Prof. M. CUTRONI

Prof. G. D'ANGELO

Prof. G. GIARDINA

Prof. G. MALESCIO

Prof. A. MANDANICI

Prof. A. NUCITA

Prof. G. PIZZIMENTI

### 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'	Ordinario 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
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

C. BRANCA	Ricercatore – Settore FIS/01
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
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

### **3.5 Personale non strutturato**

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

E. COSIO                                     Assistente Tecnico  
D. BONANNO                                 Assistente Tecnico

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

Broccio Matteo, Caridi Francesco, Carini Giovanni, Corsaro Carmelo, Mandaglio Giuseppe, Giuseppe Pellicane, Giovanna Romeo, Sergi Alessandro, Antonio Trifirò, Marina Trimarchi, Marchi Massimo.

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

Auditore Lucrezia, Dino Costa, Federica Migliardo, Valentina Venuti.

#### **Dottorandi:**

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

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

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

Bonaccorso Francesco, Borrielli Antonio Lorenzo, Manganaro Marina, Munaò Giammarco

##### ***Ciclo XXII***

Di Stefano Fabio, Giacoppo Francesca, Giuffrè Emanuela, Lizio Domenico, Loria Dario, Scivoli Salvatore

#### 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 2007. In questo anno si sono tenuti i cicli XX, XXI e XXII.

*Coordinatore Prof. Carlo Caccamo.*

I seguenti cicli di lezioni (moduli) sono stati tenuti da docenti afferenti al Dipartimento di Fisica durante l'anno solare 2007:

Anno 2007

Lezioni Dottorato di Ricerca I anno XXII 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 Liquidi I Modulo	Prof. C. Caccamo
Fisica dei Sistemi a Molti Corpi	Proff. G. Malescio, Dott. S. Prestipino
Introd. Tecniche Spettroscopiche e Spettr. Neutronica	Prof. U. Wanderlingh
Tecniche di Calcolo della Fisica	Prof. E. Bruno, Dott. S. Savasta
Teoria delle Interazioni Fondamentali	Prof. D. De Pasquale
Spettroscopia Ottica	Prof. D. Majolino, Prof.ssa V. Crupi,
Acquisizione ed Elaborazione dei Dati Sperimentali	Prof. D. Majolino
Teoria delle Reazioni Nucleari	Prof. G. Giardina
Teoria dei Gruppi	Prof. P. Denti
Spettroscopia Nucleare	Prof. R. Barnà
Fisica dei Sistemi Colloidali	Prof. C. Caccamo
Fondamenti di Fisica Statistica	Prof. M.C. Abramo
Metodi Sperimentali in Fisica dei Sistemi Complessi	Prof. F. Mallamace
Fondamenti di Informatica e Fisica Computazionale	Prof. B. Ginatempo
Inquinamento acustico e normativa	Dott. M. Federico
Inquinamento radioattivo e normativa	Dott. E. Amato

Anno 2007

Lezioni Dottorato di Ricerca II anno XXI ciclo

Fisica dei Sistemi Polimerici e Transizioni di Fase	Prof. F. Mallamace
Fenomenologia dei Sistemi Complessi	Prof. S. Magazù
Fisica Relativistica	Prof. P. Denti
Teoria Scattering Elettromagnetico	Prof. F. Borghese
Spettroscopia Acustica	Prof. G. Tripodo
Spettroscopia Elettronica	Prof. G. Mondio
Fondamenti di Informatica e Fisica Computazionale	Prof. B. Ginatempo
Fisica dei Sistemi Disordinati	Prof. S. Magazù, Prof.ssa G. D'Angelo
Spettroscopia Ottica	Prof. D. Majolino, Prof.ssa V. Crupi

## 5- TESI DI LAUREA E DI DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA - ANNO 2007

### A. Tesi di Laurea

COGNOME E NOME	RELATORE	ARGOMENTO TESI di LAUREA
Francesca M. Mortelliti	G. Giardina	Effetti della dinamica di reazione tra ioni pesanti sull'anisotropia angolare dei frammenti di fissione
Raffaele Morgante	R. Barnà	Rilevazioni dei raggi cosmici nell'esperimento Auger
Nancy Leone	F. Mallamace	Ruolo dell'acqua sulle proprietà delle proteine
Antonio Benedetto	S. Magazù	Scattering Elastico e Quasi-Elastico Incoerente di Neutroni: un approccio integrato sperimentale teorico e simulativo su sistemi di interesse biofisico di crescente complessità
Antonio Trimarchi	S. Magazù	Scattering quasi-elastico di neutroni su sistemi di interesse biofisico
Giuseppe Risitano	S. Magazù	Spettroscopia homodyne di correlazione fotonica per lo studio di cinetiche frattali
Giovanni Munaò	S. Magazù	Monitoraggio dell'inquinamento elettromagnetico e trasposizione multimediale di parametri georeferenziati nel centro urbano di Messina
Valeria Conti Nibali	G. D'angelo	Interazioni tra membrane lipidiche ed oligopeptidi antibiotici: Uno studio di spettroscopia neutronica e di dinamica molecolare
Arrigo Giuseppe	M. Federico	La coibentazione acustica attiva fra propositi e realtà
Costanzo Francesco	M. Federico	La previsione della corrente di marea nello Stretto di Messina
Ielo Augusto	M. Federico	Gestione di una rete di mobilità urbana: servizi utente
Imbalzano Andrea	M. Federico	Coibentazione attiva di una sala di registrazione
Marella Nicolò	M. Federico	Controllo automatizzato e gestione della navigazione nello Stretto di Messina
Musolino Letterio	M. Federico	Acquisizione ed elaborazione d'immagini in spettroscopia di neutroni
Politanò Domenico	M. Federico	Compressione audio e video
Raffaele Fabrizio	M. Federico	Gestione di una rete di mobilità urbana: monitoraggio vettori
Daniela Valenti	D. Majolino	Spettroscopia FTIR-ATR per lo studio di complessi di inclusione
Alessandro Ridolfo	E. Bruno	Proprietà elettroniche di leghe metalliche
Giuseppe Bonocore	A. Nucita	Java Server Faces: librerie e strumenti nello sviluppo di una web
Antonio Monserrato Cortese	A. Nucita	Web application e web service per il booking alberghiero
Giuseppe Panarello	A. Nucita	SBGM: un nuovo modello per la definizione dei protocolli clinici.

## B. Tesi di Dottorato

COGNOME E NOME	TUTOR	ARGOMENTO TESI DI DOTTORATO
Anna Raimondo	M. Cutroni	Confronto tra risposta meccanica e dielettrica in vetri superionici.
Borzumati Melania	G. Malescio	A new method for seismogenic fault detection
Beltrano Joseph John	L. Torrisi	Pulsed lasers application in the biomedical field
Emanuele Umberto	R. Barnà	Going towards a Dual Energy technique with a 5 MeV electron linac driven radiographic system
Mammano Francesco	E. Bruno	Order-disorder phase transitions in metallic alloys
Margarone Daniele	L. Torrisi	Ion Acceleration and Diagnostics in Laser-Generated Plasmas

## 6. Attività di Ricerca

Le attività di ricerca del Dipartimento si articolano essenzialmente nelle seguenti 13 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 disordinati*
- 5) Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biotecnologico – Metodologie fisiche applicate ai beni ambientali.*
- 6) Struttura e Dinamica di sistemi complessi puri e confinati. Fisica Applicazioni di metodologie fisiche nel campo dei Beni Culturali e Biofisico*
- 7) Studio teorico e simulativo di sistemi complessi*
- 8) Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia*
- 9) Fisica dei Sistemi Complessi*
- 10) Trasferimento di carica da principi primi in leghe metalliche*
- 11) Transizioni di fase ed anomalie termodinamiche*
- 12) Informatica: M<sup>2</sup>AG: Milan-Messina Action Group*
- 13) Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico*

## 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))**

La ricerca in questione si propone di studiare la fisica dei plasmi in non-equilibrio generati da impulsi laser di potenza in camere di alto vuoto. La caratterizzazione di tali plasmi avviene con tecniche on-line (collettori di particelle cariche, analizzatori di energia ionica, spettroscopia ottica e X, Langmuir probe,...) e off-line (SEM, profilometria superficiale, track detectors, deposizione film sottili,...).

Le misure di particelle neutre e cariche (ioni ed elettroni) emesse dal plasma, nonché degli spettri fotonici a larga banda (IR, VIS, UV e X), permettono di caratterizzare i plasmi in termini di temperatura, densità ed evoluzione spazio-temporale.

Adoperando un laser Nd:Yag impulsato a 3 ns, di 300 mJ di massima energia e di 10 Hz repetition rate è possibile irradiare targhette solide con intensità di circa  $10^9$  W/cm<sup>2</sup>. A tali intensità i plasmi ottenibili hanno temperature dell'ordine di alcune decine di eV e densità atomiche fino a circa  $10^{16}$ /cm<sup>3</sup>. Lo stato di carica medio dei plasmi ottenibili con targhette metalliche è di  $2^+-3^+$  con un massimo di ionizzazione di circa  $7^+$ . Di conseguenza la densità elettronica media ottenibile è di circa  $3 \times 10^{16}$ /cm<sup>3</sup>.

La frazione di ionizzazione del plasma è alta e può raggiungere anche l'80% in targhette basso fondenti (Al, Pb,...). Misure di distribuzione angolare hanno evidenziato che l'emissione del plasma è anisotropa e presenta un plume che risente della forte espansione adiabatica lungo la normale alla superficie del target irradiato.

Processi termici, fluidodinamici ed interazioni Coulombiane 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.

Particolare interesse riveste l'energia degli ioni emessi dal plasma, che può raggiungere valori dell'ordine di alcuni keV e l'elevato "end-point" degli spettri UV-X-soft rivelati, dovuto principalmente a frenamento di elettroni energetici nel plasma.

Tali risultati evidenziano che i campi elettrici all'interno di plasmi in non-equilibrio di carica sono anisotropi e possono raggiungere valori molto elevati lungo direzioni privilegiate.

Preliminari misure di questo campo danno dei valori attorno a qualche MV/cm agente su distanze comparabili con quelle di Debye e per tempi confrontabili con la durata dell'impulso laser. I valori del campo salgono attorno a qualche GV/cm adoperando intensità di circa  $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>, secondo i risultati ottenuti dal Prof. Torrisi presso i laboratori PALS dell' ASCR di Praga.

Sulla base delle misure eseguite una serie di possibili applicazioni sono state avanzate, come quelle che riguardano:

- l'iniezione di ioni emessi dal plasma in una tradizionale sorgente ionica ECR, per realizzare una sorgente ionica di nuova generazione (LIS);
- il progetto di un nuovo tipo di acceleratore di particelle (LII) con fascio multienergetico e di elevata corrente, utilizzabile per processi di impiantazione ionica tesi a modificare le proprietà chimico-fisiche delle superfici dei materiali;
- una nuova tecnica di accelerazione ionica che, in un futuro non troppo lontano, potrà portare a 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

## Pubblicazioni su Riviste internazionali con Referee - Anno 2007

- 1) L. Laska, J. Badziak, S. Gammino, K. Jungwirth, A. Kasperczuk, J. Kasa, E. Krousky, P. Kubes, P. Parys, M. Pfeifer, T. Pisarczyk, K. Rohlena, M. Rosinski, L. Ryc, J. Skala, L. Torrisi, J. Ullschmied, A. Velyhan and J. Wolowski  
“The influence of an intense laser beam interaction with preformed plasma on the characteristics of emitted ion streams”; *Laser and Particle Beams* (2007), 25, 1–8.
- 2) L. Torrisi, A. Borrielli and D. Margarone  
“Study on the ablation threshold induced by pulsed lasers at different wavelengths”  
*Nucl. Instr. And Meth. In Phys. Res. B* 255, 373-379, 2007
- 3) L. Torrisi, A.M.Visco and N. Campo  
**“Dose and dose-rate dependence of polyethylene irradiation with electron beams in air”**  
*Journal of Materials Engineering and Performance* 16, 97-101, 2007
- 4) L. Torrisi, L. Auditore, R.C. Barnà, D. De Pasquale, U. Emanuele, D. Loria, A. Trifirò, M. Trimarchi, N. Campo, A. Visco and F. Caridi  
“Measurements of gas desorption from polyethylene-UHMWPE irradiated by 5 MeV electrons”  
*Rad. Eff. and Def. in Solids* 162(12), 809-819, 2007
- 5) J. Badziak, A. Kasperczuk, P. Parys, T. Pisarczyk, M. Rosinski, L. Ryc, J. Wolowski, S. Jablonski, R. Suchanska, E. Krousky, L. Laska, K. Masek, M. Pfeifer, J. Ullschmied, L.J. Dareshwar, I. Foldes, L. Torrisi and P. Pisarczyk  
“Production of high-current heavy ions jets at the short-wavelength subnanosecond laser- solid interaction”  
*Appl. Phys. Lett.* 91, 081502 (2007)
- 6) L. Torrisi, D. Margarone, S. Gammino and L. Andò  
“Ion energy increase in laser-generated plasma expanding through axial magnetic field trap”  
*Laser and part. Beams* 25(3),435-451, 2007
- 7) L. Laska, J. Badziak, F.P. Boody, S. Gammino, K. Jungwirth, J. krasa, E. Krousky, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Ryc, J. Skala, L. Torrisi, J. Ullschmied and J. Wolowski  
“Factors influencing parameters of laser ion sources”  
*Laser and Part. Beams* 25, 199-205, 2007
- 8) L. Torrisi, A. Lorusso, V. Nassisi and A. Picciotto  
“Characterization of laser ablation of polymethylmethacrylate at different laser wavelengths”  
*Radiation Effects & Defects in Solids* Vol. 162, No. 12, December 2007, 1–9
- 9) L. Torrisi, D. Margarone, A. Borrielli, F. Caridi  
“Ion and photon emission from laser-generated titanium-plasma”  
*Applied Surface Science* xxx (2008) xxx–xxx
- 10) A. Visco, N. Campo, L. Torrisi  
“Electron Beam irradiated UHMWPE: degrading action of air and hyaluronic acid”  
*Bio-Materials and Engineering* to be published V.18, No. 3

## Pubblicazioni su Proceedings di Conferenze Internazionali con Referee – Anno 2007

- 1) L. Torrisi, L. Celona, G. Ciavola, F. Consoli, S. Gammino, D. Margarone;  
“Hybrid ion sources for the production of highly charged ion beams from metals”;  
Proc. Of 18° Int. Conf on Cyclotrons and their Applications, Giardini Naxos (ME), Oct. 2007.
- 2) L. Torrisi, S. Cavallaro, E. Milani, G. Verona-Rinati, C. Tuvè, R. Potenza, D. Margarone, L. Láska, J. Krása, M. Pfeifer, A. Velyhan, E. Krousky, J. Ullschmied, A. Mangione, A. Mezzasalma, L. Ryc;  
“Diamond detectors for characterization of laser-generated plasma”  
Proc. 34th EPS Conf. on Plasma Physics, 2-6 July 2007, Warsaw, Poland

- 3) L. Torrisci, D. Margarone, S. Gammino and L. Andò  
 “Influence of axial magnetic field trap on laser-generated plasma”  
 Proc. 34th EPS Conf. on Plasma Physics, 2-6 July 2007, Warsaw, Poland
- 4) F. Caridi, L. Torrisci, D. Margarone, A. Borrielli, S. Gammino, A. Mangione and A. Czarnecka  
 “Characterization of laser-generated plasma by electrostatic mass quadrupole analyzer”  
 Proc. 34th EPS Conf. on Plasma Physics, 2-6 July 2007, Warsaw, Poland
- 5) J. Badziak, L. J. Dareshwar, I. Földes, A. Kasperczuk, E. Krousky, L. Láska, K. Mašek, P. Parys, M. Pfeifer, P. Pisarczyk, T. Pisarczyk, M. Rosinski, L. Ryc, R. Suchanska, L. Torrisci, J. Ullschmied, J. Wolowski  
 “Highly collimated, high-current heavy ion beams from the subnanosecond laser –plasma interaction”  
 34th EPS Conf. on Plasma Phys. Warsaw, 2 - 6 July 2007 ECA Vol.31F, P-5.008 (2007)
- 6) A. Lorusso, F. Paladini, L. Velardi, D. Margarone, N. Campo, L. Torrisci and V. Nassisi;  
 “Modification of UHMWPE processed by laser ion implantation”  
 Proc. XXXVI Congr. Naz. Di Chimica Fisica, 111-112, Gallipoli (LE), 17-22 Giugno 2007
- 7) A. Mangione, L. Torrisci, A.M. Visco, N. Campo, F. Bonaccorso G. Di Marco and F. Belloni  
 “Pulsed UV laser irradiation effects induced on Carbon Nanotubes”  
 Proc. XX Congresso Nazionale GNSR, Catania, 27-29 Giugno 2007
- 8) F. Belloni, L. Leo, A. Lorusso, A. Nassisi, V. Nassisi, L. Torrisci, A. Mangione, A. Visco, N. Campo  
 “Comparing of 248 and 532 nm laser effect on bio-material ultra-high-molecular weight polyethylene”  
 8th International Symposium on Laser Precision Microfabrication (ISLPM) 24-28 April 2007, University of Vienna, Vienna, Austria
- 9) A. Mangione and L. Torrisci  
 “Influence of set up parameters variation on Pulsed Laser Deposition of Glassy Carbon”  
 XXVIII International Conference on Phenomena in Ionized Gases (ICPIG), Topic number: 13, 797-800, 2007 July 15-20 2007, Prague, Czech Republic
- 10) S. Chaurasia, L.J. Dhareshwar, M. Kumar, P.N. Bajaj, J. Badziak, J. Wolowski, A. Kasperczuk, T. Pisarczyk, L. Ryc, M. Rosinski, P. Parys, P. Pisarczyk, I. Földes, T. Suta, A. Borrielli, L. Torrisci, A. Mezzasalma, L. Laska, J. Ullschmied, E. Krousky, K. Masek, M. Pfeifer  
 “Stable and enhanced acceleration of laser ablated plastic target foils with high Z dopant”  
 6th Conference of Asia Plasma & Fusion (APFA2007) Association at Inst. of Plasma Research, Gandhinagar, India, Dec 3-5, 2007.
- 11) A. Lorusso, A. Nassisi, V. Nassisi, F. Paladini, L. Torrisci, A. Mangione, A. Visco, N. Campo  
 “Laser effect on ultra-high-molecular weight polyethylene by pulsed laser beams”  
 Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007
- 12) A. Lorusso, V. Nassisi, L. Velardi, L. Torrisci, D. Margarone and A. Mezzasalma  
 “Characteristic modification of UHMWPE by laser-assisted ion implantation”  
 Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007
- 13) F. Belloni, A. Lorusso, V. Nassisi, A. Buccolieri, G. Buccolieri, A. Castellano, L. S. Leo, M. Di Giulio, L. Torrisci, F. Caridi and A. Borrielli  
 “Measurement of laser ablation threshold of metals”;  
 Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007
- 14) A. Picciotto, G. Pucker, L. Torrisci, P. Bellutti and F. Caridi  
 “Evidence of Plasmon Resonances of Nickel Particles Deposited by Pulsed Laser Ablation”  
 Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

15) L. Laska, S. Cavallaro, K. Jungwirth, J. Krasa, D. Margarone, A. Mezzasalma, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Ryc, J. Skala, L. Torrisci, J. Ullschmied, A. Velyhan and G. Verona-Rinati  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

16) D. Margarone, L. Torrisci, S. Cavallaro, E. Milani, G. Verona-Rinati, M. Marinelli, C. Tuvè, L. Láska, J. Krása, M. Pfeifer, E. Krousky, J. Ullschmied, L. Ryc, A. Mangione, A.M. Mezzasalma “Diamond detectors for characterization of laser-generated plasma”;  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

17) L. Torrisci, D. Margarone, S. Gammino and L. Andò  
“Effects of magnetic field on laser-generated plasma”;  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

**18) F. Caridi, L. Torrisci, D. Margarone and A. Borrielli**  
**“Laser-generated plasma investigation by electrostatic quadrupole analyzer”**  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

**19) A. Borrielli, L. Torrisci, A.M. Mezzasalma, J. Badziak, J. Wolowski, L. Laska, J. Krasa, J. Ullschmied**  
“Ion energy enhancement in laser-generated plasma of metallic doped polymers”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

<sup>20)</sup> A.M. Visco, N. Campo, J.J. Beltrano and L. Torrisci  
“Laser irradiation effects on polyethylene sheets containing carbon nanotubes”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

21) A. Mangione, L. Torrisci, A.M. Visco, N. Campo, F. Bonaccorso, P.G. Gucciardi and F. Belloni  
“Carbon Nanotubes Irradiation Effects Induced by Pulsed Laser Beams”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

22) J.J. Beltrano, L. Torrisci, E. Campagna, E. Rapisarda, I. Finocchiaro and G. Olivi  
“Er,Cr,YSGG pulsed laser applied to medical dentistry”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

23) S. Gammino, L. Torrisci, L. Celona, G. Ciavola, F. Consoli, D. Margarone and F. Caridi  
“Perspectives for the ECLISSE method with 3<sup>rd</sup> generation ECRIS”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

24) D. Mascali, N. Gambino, R. Miracoli, S. Gammino and L. Torrisci  
“Plasma parameters measurements by means of langmuir probe”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

25) G. Privitera, L.Lanzanò, A. Scordino, S.Tudisco, F. Musumeci, D. Margarone and L. Torrisci  
“Time resolved analysis of the visible light emitted by a laser produced plasma”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

26) S. Cavallaro, D. Margarone, L. Torrisci, L. Laska, J. Krasa, J. Ullschmied  
“Detection of energetic ions emitted from laser produced plasma by means of CR39 solid state nuclear track detectors”  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

27) L. Giuffrida, L. Torrisci, A. Czarnecka, J. Wolowsky, G. Quarta, L. Calcagnile, A. Lorusso, V. Nassisi  
**“Ge Laser-generated plasma for ion implantation”**  
Proc. Int. Work. PPLA2007, Scilla (RC), Italy, 14-16 June 2007

28) F. Belloni, A. Lorusso, V. Nassisi, A. Buccolieri, G. Buccolieri, A. Castellano, L. S. Leo, M. Di Giulio, L. Torrisi, F. Caridi, A. Borrielli  
“Laser ablation threshold of cultural heritage metals”  
Cleo Europe conference IQEC 2007, Munich, Germany ,17-22 June 2007

29) F. Belloni, A. Lorusso, A. Nassisi, V. Nassisi, L. Torrisi, D. Margarone, A. Mezzasalma  
“Studies on polyethylene substrates modified by laser-assisted ion implantation”  
Cleo Europe conference IQEC 2007, Munich, Germany ,17-22 June 2007

30) A. Lorusso, L. Velardi, V. Nassisi, F. Paladini, N. Campo, L. Torrisi, D. Margarone, L. Giuffrida, A. Rainò  
“Polymer processing by a low energy ion accelerator”  
9<sup>th</sup> European conf. on accelerators in applied research and technology, Florence, 3-7 Sept. 2007.

### **Publicazioni su Proceedings e Riviste Nazionali e Reports – Anno 2007**

1) L. Torrisi, D. Margarone, L. Andò, S. Gammino, F. Caridi, A. Borrielli, L. Laska, J. Krasa, J. Wolowski;  
“Investigation on laser-driven particle accelerator at LNS”;  
Activity Report 2006, INFN-LNS, 164-167, printed 2007.

2) S. Gammino, L. Andò, S. Barbarino, R.S. catalano, L. Celona, G. Ciavola, F. Consoli, F. Maimone, S. Manciangli, D. Mascali, G. Corbello, L. Torrisi, L. Tumino, F. Chines, G. Gallo, G. Manno, S. Passarello, E. Zappalà;  
“ECR and Microwave discharge ion sources”;  
Activity Report 2006, INFN-LNS, 160-163, printed 2007.

3) F. Caridi, L. Torrisi, D. Margarone, A. Borrielli, A.M. Mezzasalma, J. J. Feltrano, L. Giuffrida;  
“Caratterizzazione di plasmi generati da laser”;  
Atti Congr. XCIII SIF, Pisa, Ott. 2007.

4) Lorusso A., Nassisi V., Paladini F., Velardi L., Torrisi L., Visco A., Campo N., Rainò A.  
**“Laser and ion beam effects on bio-material polyethylene”;**  
**Atti Congr. XCIII SIF, Pisa, Ott. 2007.**

5) **E. Rapisarda, G. Casella, A.M. Visco, N. Campo e L. Torrisi**  
**“Compositi fotopolimerizzati con luce alogena e LED”**  
**Dental Cadmos 4, 57-66, 2007**

6) Lorusso, F. Paladini, V. Nassisi, L. Torrisi, A. Visco, N. Campo  
“Laser effects induced on ultra-high molecular weight polyethylene”  
XVIII Congresso nazionale AIV sulla scienza e tecnologia del vuoto, Firenze, 2 – 4 Aprile, 2007

7) L. Torrisi  
“Analisi composizionali di reperti metallici mediante ablazione laser”  
IX Settimana della Cultura, Museo Regionale di Messina, 12-20 Maggio 2007, Messina.

8) F. Caridi, L. Torrisi, A. Mangione, A.M. Visco, N. Campo  
“Trattamento di superfici di carbonio strutturato tramite laser impulsati per materiali di interesse biologico”  
VIII Giornata di Studio “Biomateriali e Biomeccanica” (BIOMAT) 13 luglio 2007 Catania

9) N. Campo, A.M. Visco, L. Torrisi, C. Milone  
“Effetto della presenza di strutture di carbonio nelle proprietà fisico meccaniche nel polietilene (UHMWPE)”  
VIII Giornata di Studio “Biomateriali e Biomeccanica” (BIOMAT) 13 luglio 2007 Catania

10) A. Lorusso, F. Paladini, L. Velardi, A. Visco, N. Campo, L. Torrissi, V. Nassisi  
“Characteristic modification of UHMWPE processed by laser ion implantation”  
VIII Giornata di Studio “Biomateriali e Biomeccanica” (BIOMAT) 13 luglio 2007 Catania

11) A. Lorusso, F. Paladini, V. Nassisi, L. Torrissi, A. Mangione, A. Visco, N. Campo  
“Wettability modification of UHMWPE by laser beam irradiation”  
VIII Giornata di studio su “Biomateriali e biomeccanica”, Univ. di Catania, 13 Luglio 2007.  
L. Torrissi, J.J. Beltrano, E. Campagna, E. Rapisarda, I. Finocchiaro, G. Olivi  
“Applicazione del laser pulsato Er,Cr:YSGG in odontoiatria medica”;  
VIII Giornata di studio su biomateriali e biomeccanica, Univ. di Catania, 13 Luglio 2007.

### **Descrizione di ulteriori attività scientifiche svolte nell’anno 2007**

Realizzazione e Organizzazione di un Congresso Internazionale: PPLA2007 (Pulsed Plasma Laser Ablation), organizzato da Università di Messina, Università di Lecce ed INFN presso Scilla (RC) il 14-16 Giugno 2007. Gli atti del congresso saranno pubblicati sulla Rivista Internazionale “Rad. Eff. and Def. in Solids”.

Realizzazione e organizzazione di un Congresso Nazionale: VIII Giornata di Studio “Biomateriali e Biomeccanica” (BIOMAT), presso la Facoltà di Ingegneria dell’Università di Catania, Catania, il 13 luglio 2007. Gli atti del congresso sono disponibili sul sito del Prof. Torrissi:

<http://ww2.unime.it/dipfisica/docenti/torrissi/BIOMAT07/index.html>

Curatore e Responsabile del “Laboratorio di Fisica dei Plasmi Laser” presso il Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina. Coordinatore dell’attività di n. 2 Dottorandi di ricerca in Fisica, n.1 Assegnista di Ricerca, n. 1 Tesista.

Responsabile Nazionale del Progetto INFN-Gr. V denominato PLATONE (Plasma Laser Ablation for Ion Acceleration). Alcuni fondi di finanziamento del Progetto sono andati spesi per attrezzature presenti presso il sopracitato laboratorio del Dipartimento di Fisica.

Tutor di Dottorato di Ricerca in Fisica del Dr. Joseph John. Beltrano con la tesi dal titolo: “Pulsed Lasers Application in Biomedical Field”, Relatore Prof. L. Torrissi.

Tutor di Dottorato di Ricerca in Fisica del Dr. Daniele Margarone con la tesi dal titolo: “Ion diagnostics and high electric field in laser-generated plasmas”, Relatore Prof. L. Torrissi.

Presentatore di diversi Seminari specialisti in ambito INFN, Dipartimento di Fisica e Dottorato di Ricerca presso le Università di Messina, Catania e Lecce e presso sedi straniere (ASCR di Praga e IPPLM di Varsavia).

Referee di diverse riviste internazionali (NIMB, Appl. Surf. Sci, Plasma Phys. Rep., Rad. Eff. and Def. in Solids).

Editore per il Sud Europa della Rivista Internazionale Rad. Eff. and Def. in Solids, Francis & Taylor Publ., con sede presso il Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina.

Associato alle attività di Ricerca INFN dei Laboratori Nazionali del Sud di Catania e Responsabile del Laboratorio Laser di alta potenza.

Collaboratore Italiano di alcune attività di Ricerca Europee svolte presso l’Istituto di Fisica dei Plasmi e Laser Microfusion (IPPLM) di Varsavia e presso l’Accademia delle Scienze della Repubblica Ceca (ASCR).

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

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

### **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 2007, in collaborazione col Dipartimento di Ingegneria Chimica dei Processi e dei Materiali di Palermo, sono stati sintetizzati mediante la radiazione prodotta dal linac 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.

Una vasta sistematica di misure è stata condotta nel corso di tutto l'anno, al fine di correlare le caratteristiche dei gel ottenuti con quelle di alcuni gel precedentemente sintetizzati mediante l'irradiatore gamma di Palermo.

Gli hydrogels sintetizzati per mezzo dell'e-beam sono stati analizzati mediante spettroscopia di fluorescenza, al fine di investigare la loro struttura interna, utilizzando sonde fluorescenti sia idrofobe che idrofile. Questo tipo di analisi ha rivelato che le sonde vengono interamente assorbite dal gel creato con l'irradiazione, ma soltanto parzialmente rilasciate in seguito. Inoltre, lo studio preliminare delle caratteristiche di rilascio della sonda idrofoba ha mostrato delle caratteristiche che farebbero supporre che il tipo di irraggiamento che si ottiene mediante il linac di Messina stimoli all'interno del network dell'hydrogel un ambiente di tipo idrofobo.

Ulteriori misure sono state effettuate per verificare quest'ipotesi, che sono tutt'ora ancora in fase di analisi.

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. In particolare, un nuovo sistema adesivo a base di una resina epossidica bifunzionale, è stato curato mediante fasci di elettroni per la realizzazione di giunti adesivi in lega di alluminio. Le proprietà di tali giunti sono state studiate mediante test meccanici di lap-shear (resistenza allo scorrimento) ed i risultati sono stati confrontati con quelli relativi ad un sistema commerciale curato termicamente.

L'adesivo curato con e-beam mostra un valore di lap shear strength inferiore rispetto a quello curato termicamente, perché sul substrato, mediante un trattamento di etching, erano stati creati dei micro pori superficiali che, aumentando la superficie utile di incollaggio, avrebbero dovuto favorire la resistenza meccanica del giunto adesivo, sia per interazione chimica che per interconnessione meccanica.

Poiché la cura con fasci di elettroni, nelle condizioni di processo utilizzate, produce nel giunto un profilo di temperatura costante e pari a circa 45°C, la miscela adesiva mantiene una viscosità alta durante l'irraggiamento e quindi non riesce a penetrare all'interno dei pori creati dal trattamento superficiale. Da questo ne segue una diminuzione dell'area di contatto e una conseguente riduzione della resistenza del giunto. Questi risultati suggeriscono pertanto di ripetere il trattamento stimolando diversi profili di temperatura, essenzialmente variando il dose rate dell'irraggiamento, al fine di determinare le condizioni ottimali per ottenere una buona resistenza del giunto.

Parallelamente alle ricerche sopraesposte, si è continuato lo studio sperimentale sulle performances dell'acceleratore, al fine di migliorarne le caratteristiche ai fini applicativi. In particolare, uno studio esteso è stato condotto sulla possibilità di variare l'energia del fascio di

elettroni al variare della potenza erogata dal generatore a radiofrequenza. Le caratteristiche del fascio ottenuto in corrispondenza dei valori di potenza possibili sono state simulate e valutate sperimentalmente. Il range di variabilità è attualmente compreso fra i 2 ed i 6 MeV, ma il risultato è ancora affinabile, come dimostrato dallo studio simulativo e valutato a livello preliminare per via sperimentale, mediante una variazione congiunta della corrente del filamento che viene iniettata in cavità.

### **Realizzazione di un impianto accelerante per scopi industriali e di ricerca**

Nel corso dell'anno 2007 è iniziata l'attività connessa al P.I.T. 22 'La via dell'argilla', che prevede la realizzazione presso il centro dedicato di Villafranca Tirrena di un impianto di irraggiamento da 10 MeV per scopi industriali e di ricerca.

Il docente di riferimento del gruppo, prof. Renato C. Barnà, è stato nominato ufficialmente Responsabile Scientifico del progetto, e l'attività di progettazione ed allestimento dell'impianto è iniziata nell'ultimo trimestre del 2007 con l'individuazione dei parametri fondamentali della macchina accelerante, attualmente già in fase di realizzazione.

### **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 ha completato, durante il 2007, l'analisi dei dati per le reazioni  $^{124}\text{Sn} + ^{58}\text{Ni}$  (35 AMeV),  $^{124}\text{Sn} + ^{64}\text{Ni}$  (25 AMeV),  $^{124}\text{Sn} + ^{27}\text{Al}$  (25 AMeV), e  $^{112}\text{Sn} + ^{112}\text{Sn}$  (35 AMeV). Questo tipo di analisi è consistita nel corso del 2007 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) I. Skwira-Chalot, K. Siwek-Wilczynska, J. Wilczynski, F. Amorini, A. Anzalone, L. Auditore, V. Baran, J. Blocki, J. Brzychczyk, G. Cardella, S. Cavallaro, M.B. Chatterjee, M. Colonna, E. De Filippo, M. Di Toro, W. Gawlikowicz, A. Grzeszczuk, P. Guazzoni, S. Kowalski, E. La Guidara, G. Lanzaonò, G. Lanzalone, C. Maiolino, Z. Majka, N.G. Nicolis, A. Pagano, M. Papa, E. Piasecki, S. Pirrone, R. Planeta, G. Politi, F. Porto, F. Rizzo, P. Russotto, K. Schmidt, A. Sochocka, L. Swiderski, A. Trifirò, M. Trimarchi, J.P. Wieleczko, L. Zetta, W. Zipper "Dynamics of 'binary'  $^{197}\text{Au} + ^{197}\text{Au}$  collisions as a test of energy dissipation mechanism" **Acta Physica Polonica B 38 No 4** (2007) 1509-1514
- 2) I. Skwira-Chalot, K. Siwek-Wilczynska, J. Wilczynski, F. Amorini, A. Anzalone, L. Auditore, V. Baran, J. Blocki, J. Brzychczyk, G. Cardella, S. Cavallaro, M.B. Chatterjee, M. Colonna, E. De Filippo, M. Di Toro, W. Gawlikowicz, A. Grzeszczuk, P. Guazzoni, S. Kowalski, E. La Guidara, G. Lanzaonò, G. Lanzalone, C. Maiolino, Z. Majka, N.G. Nicolis, A. Pagano, M. Papa, E. Piasecki, S. Pirrone, R. Planeta, G. Politi, F. Porto, F. Rizzo, P. Russotto, K. Schmidt, A. Sochocka, L. Swiderski, A. Trifirò, M. Trimarchi, J.P. Wieleczko, L. Zetta, W. Zipper "Ternary reactions in  $^{197}\text{Au} + ^{197}\text{Au}$  collisions revisited" **Intl. J. of Mod. Phys. E 16 (2)** (2007) 511-515
- 3) M. Papa, F. Amorini, A. Anzalone, L. Auditore, V. Baran, I. Berceanu, J. Blicharska, J. Brzychczyk, A. Bonasera, B. Borderie, R. Bougault, G. Cardella, S. Cavallaro, M.B. Chatterjee, A. Chbihi, M. Colonna, R. Dayras, E. De Filippo, M. Di Toro, J. Frankland, E. Galichet, W. Gawlikowicz, E. Geraci, G. Giuliani, F. Giustolisi, A. Grzeszczuk, P. Guazzoni, D. Guinet, M. Iacono-Manno, S. Kowalski, E. La Guidara, G. Lanzalone, G. Lanzaonò, C. Maiolino, Z. Majka, N. Le Neindre, A. Pagano, M. Petrovici, E. Piasecki, S. Pirrone, R. Planeta, G. Politi, A. Pop, F. Porto, F. Rizzo, E. Rosato, S. Russo, P. Russotto, M. Sassi, K. Schmidt, K. Siwek-Wilczynska, I. Skwira, A. Sochocka, L. Swiderski, A. Trifirò, M. Trimarchi, G. Vannini, G. Verde, M. Vigilante, J.P. Wieleczko, J. Wilczynski, L. Zetta and W. Zipper "Dynamical multi-break-up processes in the  $^{124}\text{Sn} + ^{64}\text{Ni}$  system at 35 MeV/nucleon" **Physical Review C 75**, 054616 (2007)

- 4) L.Torrise, L.Auditore, R.C.Barnà, D. De Pasquale, U.Emanuele, D. Loria, A. Trifirò, M. Trimarchi, N. Campo, A. Visco and F. Caridi “*Measurements of gas desorption from polyethylene-UHMWPE irradiated by 5 MeV electrons*” **Rad. Eff. Defect. S. 16/12** (2007) 809-819

Elenco comunicazioni a Congressi Nazionali ed Internazionali:

- 1) L. Auditore, R. C. Barna, D. De Pasquale, U. Emanuele, A. Italiano, D. Loria, A. Trifiro, M. Trimarchi “*Study of an Electron Linac Driven X-Ray Radio-Tomographic System Response as a Function of the Electron Beam Current*” **22nd Particle Accelerator Conference (PAC), JUNE 25-29, 2007 – Albuquerque**
- 2) L. Auditore, R. C. Barna, D. De Pasquale, U. Emanuele, A. Italiano, D. Loria, A. Trifiro, M. Trimarchi “*Going Towards the Dual Energy X-Ray Radiographic System for Material Recognition Purposes*” **22nd Particle Accelerator Conference (PAC), JUNE 25-29, 2007 - Albuquerque**
- 3) L. Auditore, R. C. Barna, D. De Pasquale, U. Emanuele, D. Lizio, D. Loria, E. Morgana, A. Trifiro, M. Trimarchi “*Radiation processing with the Messina electron linac*” **9th European Conference on accelerators in applied research and technology, SEP 3-7, 2007 - Florence**
- 4) L. Auditore, R. C. Barna, U. Emanuele, D. Lizio, D. Loria, A. Trifiro, M. Trimarchi “*X-ray tomography system for industrial applications*” ” **9th European Conference on accelerators in applied research and technology, SEP 3-7, 2007 – Florence**
- 5) M. Ricca, V. Vetri, M. Leone, A. Trifirò, M. Trimarchi, G. Spadaro, C. Dispenza “*Internal properties of ‘ultra-clean’ hydrogels synthesized via e-beam irradiation through absorption and luminescence spectroscopy*” **International Congress on BioHydrogels, NOV 14-18, 2007 - Viareggio**
- 6) S. Alessi, C. Dispenza, M. Trimarchi, A. Trifirò, U. Emanuele, D. Lizio, G. Spadaro “*Realizzazione di giunti strutturali mediante polimerizzazione di sistemi adesivi indotta da fasci di elettroni*” **IV Simposio sulle Tecnologie Avanzate, GIU 21-22, 2007, Roma**

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

### Partecipanti

Proff. Giovanni Fazio, Giorgio Giardina e Roberto Ruggeri, Dr. Giuseppe Mandaglio (Assegnista) e Dr. Marina Manganaro (Dottorando del XXI ciclo).

Nella presente ricerca sono stati studiati gli effetti del canale d'ingresso di reazione sulla probabilità di formazione dei prodotti di reazione (per esempio, residui di evaporazione o/e frammenti di fissione) e loro caratteristiche, al fine di stabilire le condizioni ottimali per la sintesi di nuovi elementi superpesanti (nella regione  $Z=114-120$ ). Attraverso lo studio delle reazioni  $^{92,96}\text{Zr}+^{124,132}\text{Sn}$  si è investigato la sensibilità dei principali parametri che caratterizzano i nuclei reagenti (per esempio, parametro di asimmetria di massa, struttura a shell dei nuclei ed effetto del rapporto  $A/Z$ , angoli di orientazione dei nuclei collidenti deformati), la evoluzione dell'iniziale sistema dinucleare (attraverso scambi di carica e massa, ed emissione di particelle leggere) al fine di determinare le principali caratteristiche che regolano il meccanismo di reazione (quasifissione, fusione, fissione veloce, fissione, evaporazione). Ciò, allo scopo di sviluppare modelli teorici avanzati che consentono di interpretare le osservate caratteristiche dei prodotti di reazione e la loro dipendenza dal canale entrante di reazione.

E' stato notato che i frammenti nucleari attribuiti come prodotti della fissione dopo fusione possono essere mescolati ed indistinti da quelli formati allo stage del decadimento del sistema dinucleare (processo di quasifissione, che è in competizione con la fusione completa). Detta condizione è stata trovata attraverso lo studio dell'anisotropia angolare dei frammenti di fissione nelle reazioni  $^{16}\text{O}+^{238}\text{U}$ ,  $^{19}\text{F}+^{208}\text{Pb}$  e  $^{32}\text{S}+^{208}\text{Pb}$ . Inoltre, il gruppo ha condotto attività di ricerca nel campo della fotoproduzione di mesoni nella interazione gamma-deuterio fino ad energia di 1.5 GeV.

### Pubblicazioni

- 1) A.K. Nasirov, A.I. Muminov, R.K. Utamuratov, G. Fazio, G. Giardina, F. Hanappe, G. Mandaglio, M. Manganaro, and W. Scheid "Angular anisotropy of the fusion-fission and quasifission fragments" *Eur. Phys. J. A* 34, 325 (2007).
- 2) Bartalini O, Bellini V, Bocquet JP, Calvat P, Capogni M, Casanolo L, Castoldi M, Didelez JP, D'Angelo A, Di Salvo R, Fantini A, Franco D, Gervino G, Ghio F, Giardina G, Girolami B, Giusa A, Guidal M, Hourani E, Kouznetsov V, Kunne R, Lapik A, Sandri PL, Lleres A, Mammoliti F, Mandaglio G, Moricciani D, Mushkarenkov AN, Nedorezov V, Nicoletti L, Randieri C, Rebreyend D, Renard F, Rudnev N, Russev T, Russo G, Schaerf C, Sperduto ML, Sutera MC, Turinge A, Vegna V "Measurement of  $\gamma$ -photoproduction on the proton from threshold to 1500MeV", *Eur. Phys. J. A* 33, 169 (2007)
- 3) 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", In Proc. of International Conf. "Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy", Kyiv, Ukraine, May 29-June 03, 2006, Editors I.M. Vishnevskiy, V.P. Verbytskyi, INP, Kyiv, 2007, p.123-131
- 4) A. K. Nasirov, G. Giardina, A. I. Muminov, G. Mandaglio, and R. K. Utamuratov, "Peculiarities of Nuclear Fusion in Synthesis of Superheavy Elements", *Jour.Nucl.Rad.Sci.* 8(2), 29 (2007).
- 5) D'Angelo A, Bartalini O, Bellini V, Bocquet JP, Calvat P, Capogni M, Casanolo L, Castoldi M, Didelez JP, Di Salvo R, Fantini A, Franco D, Gervino G, Ghio F, Giardina G, Girolami B, Giusa A, Guidal M, Hourani E, Kouznetsov V, Kunne R, Lapik A, Sandri PL, Lleres A, Mammoliti F, Mandaglio G, Moricciani D, Mushkarenkov AN, Nedorezov V, Nicoletti L, Randieri C, Rebreyend D, Renard F, Rudnev N, Russev T, Russo G, Schaerf C, Sperduto ML, Sutera MC, Turinge A, Vegna V "Meson photoproduction on the nucleon with polarized photons", *Eur. Phys. J. A* 31, 441 (2007)
- 6) G. Fazio, A. Roberto, "L'impossibile ipotesi radiativa nella formazione della Shroud body image" *Atti Acc. Pel. Per.* LXXXV, C1A0701011 (2007).

## Comunicazioni a congressi

- 1) Fazio G., Giardina G. , Mandaglio G., Manganaro M., Nasirov A.K., Saccà C., *“L’influenza della quasifissione nella determinazione dell’anisotropia angolare dei frammenti di fusione-fissione”*, XCIII Congresso SIF, Pisa, abstract pag.112, 2007.
- 2) D'Angelo A, Bartalini O, Bellini V, Bocquet JP, Calvat P, Capogni M, Casanolo L, Castoldi M, Didelez JP, Di Salvo R, Fantini A, Franco D, Gervino G, Ghio F, Giardina G, Girolami B, Giusa A, Guidal M, Hourani E, Kouznnetsov V, Kunne R, Lapik A, Sandri PL, Lleres A, Mammoliti F, Mandaglio G, Manganaro M, Moricciani D, Mushkarenkov AN, Nedorezov V, Nicoletti L, Randieri C, Rebreyend D, Renard F, Rudnev N, Russev T, Russo G, Schaerf C, Sperduto ML, Sutera MC, Turinge A, Vegna V, “Eta photoproduction on hydrogen and deuterium”, INPC2007, Tokyo Japan 6-8 June 2007.

## 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. 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**

Le ricerche sui processi di rilassamento in liquidi glass-forming compiute nel corso del 2007 hanno portato a risultati interessanti che riguardano le proprietà dei rilassamenti secondari. Utilizzando la tecnica ultrasonica è stata studiata la risposta dinamica di un liquido glass-forming dalla temperatura ambiente fino alla regione di transizione vetrosa [1], osservando, oltre al rilassamento alfa (studiato per la prima volta in questo liquido tramite le misure ultrasoniche), anche un processo di rilassamento secondario non evidenziato da nessuna precedente indagine riportata in letteratura. Va sottolineato che il dibattito scientifico sull'origine dei rilassamenti secondari e sulle loro proprietà è molto intenso, come dimostrato dalle diverse conferenze internazionali in cui questo tema viene affrontato. I risultati ottenuti [1] mettono in evidenza la grande utilità della tecnica ultrasonica al fine di studiare la risposta dinamica di materiali che, a causa del loro debole carattere polare, non possono facilmente essere analizzati con una potente tecnica d'indagine come la spettroscopia dielettrica a larga banda. Inoltre, in generale i processi di rilassamento secondari in liquidi glass forming si manifestano a frequenze maggiori rispetto alla frequenza di picco associata al rilassamento  $\alpha$  principale. Ricorrendo al concetto di trasposizione tempo-temperatura, quando si utilizza un approccio a frequenza fissata, studiando l'andamento delle grandezze dinamiche (attenuazione acustica, costante dielettrica immaginaria) in funzione della temperatura, il rilassamento  $\alpha$  dovrebbe dunque presentarsi a temperature più basse rispetto al rilassamento  $\alpha$ . Nel liquido considerato nel nostro studio, contrariamente al comportamento generale, il processo secondario è stato osservato a temperature più alte rispetto al processo principale, suggerendo tempi di rilassamento più lunghi del tempo di riarrangiamento strutturale, corrispondente al processo di rilassamento primario  $\alpha$ . Le difficoltà legate al particolare tipo di tecnica rendono questo tipo di indagini particolarmente rare in letteratura.

Per quanto riguarda lo studio dei rilassamenti in vetri a conduzione ionica, durante il 2007 è stata proseguita l'attività di ricerca sulle correlazioni fra proprietà dinamiche e strutturali utilizzando sia la spettroscopia dielettrica a larga banda ( $10^{-5}$  Hz-  $4 \cdot 10^{10}$  GHz) in funzione della temperatura (da 450 K a 3 K), sia la spettroscopia meccanica a frequenze ultrasoniche. Gli aspetti dinamici della risposta di vetri ionici a base di ioduro d'argento sono stati confrontati con le proprietà di tipo locale dedotte mediante indagini EXAFS [2]. Sono state inoltre proseguite le ricerche per la realizzazione di nuovi materiali amorfi a conduzione ionica, in collaborazione con il Dipartimento di Fisica dell'Università di Trento, con l'Istituto per la Fotonica e le Nanotecnologie del CNR (Trento), e con il Dipartimento di Chimica-Fisica dell'Università di Pavia.

***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) Studio della struttura di vetri borati alcalini tramite dinamica molecolare**

La struttura di vetri borati alcalini  $(M_2O)_x(B_2O_3)_{1-x}$ , con  $M=Li, Na, K, Rb$  e  $Cs$ , è stata investigata tramite simulazioni di dinamica molecolare. I risultati indicano che gli atomi di  $Li$  entrano negli interstizi della matrice borata senza indurre grandi modifiche del network, anche ad elevate concentrazioni. Quando altri cationi alcalini sono aggiunti alla struttura ospite, il network si apre per accomodare i cationi di più grandi dimensioni. Queste modifiche inducono la comparsa di un pre-picco a piccoli valori del momento trasferito  $Q$ , la cui intensità aumenta all'aumentare della concentrazione alcalina e del raggio ionico del catione.

**(ii) 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.

**(i) Attenuazione e velocità del suono a frequenze ipersoniche in vetri borati.**

Misure di scattering Brillouin della luce in vetri borati  $(M_2O)_x(B_2O_3)_{1-x}$  (con  $M=Li, K, Cs$  and  $Ag$ ) al variare della temperatura tra 15 K e 300 K rivelano che meccanismi distinti regolano la dipendenza dalla temperatura degli andamenti acustici nell'intervallo di frequenze dei GHz. L'attenuazione e la velocità di onde ipersoniche longitudinali sono principalmente governate da processi aventi come origine microscopica i moti localizzati termicamente attivati di difetti strutturali e l'anarmonicità vibrazionale. La frizione interna ipersonica  $Q^{-1}$  rivela un picco di attenuazione associato al processo di rilassamento termicamente attivato, la cui temperatura  $T_{peak}$  varia al variare del catione (da  $T=110$  K per  $M=Li$  a  $T=150$  K per  $M=Cs$ ). Per  $T > T_{peak}$ ,  $Q^{-1}$  decresce solo leggermente all'aumentare della temperatura evidenziando un eccesso di attenuazione, derivante da un meccanismo di "viscosità fononica", proposto da Akhiezer, che si origina dalle interazioni anarmoniche delle onde ipersoniche longitudinali con i fononi termici.

**(iv) Calore specifico a basse temperature in vetri borati di cesio.**

Misure di calore specifico a basse temperature (1.5-25 K) effettuate in vetri borati di cesio, a differenti concentrazioni del catione alcalino, hanno evidenziato la presenza di un eccesso di calore specifico rispetto al contributo previsto dalla teoria classica di Debye. In un grafico che riporta  $C_p/T^3$  vs  $T$ , tale eccesso appare come un picco la cui intensità cresce all'aumentare della concentrazione di  $Cs$ . Un confronto con il calore specifico osservato nei vetri borati di sodio rivela l'esistenza di dinamiche vibrazionali di bassa energia molto diverse, nonostante le strutture della matrice borata di entrambe le classi di vetri siano simili. I differenti andamenti osservati sono stati attribuiti ai cambi strutturali peculiari, causati dall'inclusione dei cationi alcalini, sulla scala di lunghezze mesoscopiche. Si ritiene che la struttura particolarmente aperta dei vetri borati di  $Cs$  permetta oscillazioni di frequenza molto bassa

agli ioni  $\text{Cs}^+$  che, per effetto del loro carattere localizzato, guidano la dinamica vibrazionale del sistema verso la regione di frequenze del picco bosonico.

#### Publicazioni.

1. "Multiple mechanical relaxations in ethylcyclohexane above the glass transition temperature" A. Mandanici, M. Cutroni, *Journal of Physical Chemistry B*, **111**, 10999-11003 (2007)
2. "Thermal behaviour of the local environment around iodine in fast-ion-conducting AgI-doped glasses", A. Sanson, F. Rocca, P. Fornasini, G. Dalba, R. Grisenti, A. Mandanici, *Philosophical Magazine*, **87**, Iss. 3-5, 769-777 (2007)
3. "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.*, **126**, 069901 (2007)
4. "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).
5. "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).
6. "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).
7. "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. "Studio del rilassamento secondario di network di polimeri eterociclici tramite spettroscopia meccanica", Giovanni Carini, Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Sergio La Rocca, Gaspare Tripodo, Antonio Bartolotta, Gaetano Di Marco, 93° Congresso nazionale SIF, *Boll. SIF* **93**, 189 (2007).
2. "Attenuazione e velocità del suono a frequenze ipersoniche in vetri borati", Giovanni Carini, Gaspare Tripodo, Lars Borjesson, 93° Congresso nazionale SIF, *Boll. SIF* **93**, 14 (2007).
3. "Acoustic and thermal properties of glasses: defect modes and vibrational anharmonicity", Giuseppe Carini, National Physics Conference PERFIK 2007, Kuala Terengganu, Malaysia, December 2007; **Plenary Speaker**.
4. "Thermal conductivity and low energy vibrational dynamics in alkali borate glasses", Crupi Cristina, D'Angelo Giovanna, Tripodo Gaspare, Cosio Daniele, 93° Congresso nazionale SIF – Pisa 24-29 Settembre 2007.
5. "Studio degli effetti della gramicidina sulle dinamiche locali di bilayers di fosfolipidi", Conti Nibali Valeria, Wanderlingh Ulderico, D'Angelo Giovanna, 93° Congresso nazionale SIF – Pisa 24-29 Settembre 2007.
6. "Anomalous Temperature dependence of the first sharp diffraction peak in caesium borate glasses", D'Angelo Giovanna, Crupi Cristina, Gonzalez Miguel Angel, Mondelli Claudia, 4th European Conference on Neutron Scattering- Lund -25-29 June 2007.

7. "Incoherent inelastic dynamics in oriented DMPC model membrane", Wanderlingh Ulderico, D'Angelo Giovanna, Conti Nibali Valeria, Mondelli Claudia, 4th European Conference on Neutron Scattering-Lund- 25-29 June 2007.
8. "Molecular motions in gramicidin/lipid bilayer system in excess of water", Wanderlingh Ulderico, D'Angelo Giovanna, Conti Nibali Valeria, Gonzalez Miguel Angel, Mondelli Claudia, PAW 2007: 1st International Workshop "Protein At Works" Perugia- May 28-30, 2007.
9. M. Cutroni, A. Mandanici, A. Raimondo, M. Federico, C. Armellini, F. Rocca "Comparison between the electric and the mechanical response in ion conducting oxide glasses", ACerS 2007 Glass & Optical Materials Division Meeting, Rochester, NY, May 20-23, 2007, **oral presentation**.
10. M. Cutroni, A. Mandanici, A. Raimondo, M. Federico, C. Armellini, F. Rocca "Dynamical response of ionic glasses: ionic conductivity and relaxational features in silver borate glasses", "ICG 2007, XXI International Congress on Glass, Strasbourg, July 1-6, 2007.
11. A. Mandanici, M. Cutroni, "Ultrasonic investigation of the dynamics of a small molecular glass former above the glass transition temperature", Workshop: Viscous liquids and the glass transition. VI. Søminestationen, Holbæk (Denmark), June 29 -July 1, 2007, **invited talk**.
12. M. Cutroni, A. Mandanici, A. Raimondo, M. Federico, F. Rocca, C. Armellini, "A comparison between mechanical relaxation and electric response below  $T_g$ ", Workshop: Viscous liquids and the glass transition. VI. Søminestationen, Holbæk (Denmark), June 29 - July 1, 2007
13. M. Cutroni, A. Mandanici, A. Raimondo, M. Federico, F. Rocca, C. Armellini "Electric and mechanical response of ionic materials below their glass transition temperature." The NATO Science for Peace and Security Programme. Advanced Research Workshop: Meeting the Challenges of the 21st Century – Novel Applications of Broadband Dielectric Spectroscopy Suzdal (Russia), 22-26 July 2007.
14. M. Cutroni, A. Raimondo, A. Mandanici, M. Federico, F. Rocca, C. Armellini, "Conduzione ionica e risposta dinamica in vetri borati d'argento" 93° Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica XCIII - sezione 2 - Fisica della materia (materia condensata, atomi, molecole e plasmi), Pisa, 24-29 settembre 2007, **oral presentation**.

#### **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 Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biotecnologico – Metodologie fisiche applicate ai beni ambientali.

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

Le tematiche di ricerca affrontate nell'anno 2007 sono molteplici e sotto alcuni aspetti anche diverse, per quanto emerga 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 di Grenoble, e presso la Facility ISIS del Rutherford Laboratory di Oxford, UK), per la caratterizzazione delle correlazioni spazio-temporali di sistemi materiali. 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, resilienza, flessibilità, etc...).

I sistemi sottoposti ad indagine contemplano liquidi puri in peculiari condizioni termodinamiche, liquidi molecolari ed associati, soluzioni, proteine, bioprotettori, polimeri e sistemi materiali di interesse biotecnologico e industriale.

Particolare attenzione è stata rivolta all'analisi delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione, sia sotto il profilo specificamente scientifico che per le rilevanti ricadute applicative.

L'analisi dei meccanismi molecolari coinvolti nei processi di bioprotezione ha fornito dati di fondamentale importanza sui processi di stabilizzazione. In questo riferimento si inserisce lo studio di sistemi ternari macromolecola/bioprotettore/solvente. Il fine è quello di caratterizzare il ruolo di un'ampia classe di bioprotettori in sistemi biologici ad alto valore aggiunto.

In particolare è stata investigata la proteina dUTP pyrophosphatase (dUTPase) che riveste un ruolo fondamentale nella replicazione del DNA riducendo il rapporto dTTP/dUTP nella mitosi attiva delle cellule. E' stata ipotizzata e dimostrata sperimentalmente, mediante Small Angle Neutron Scattering, l'esistenza di due diverse conformazioni, "open" e "closed", nonché un cambiamento di struttura della dUTPase stessa durante il ciclo catalitico. Il Quasi Elastic Neutron Scattering ha permesso di caratterizzare alcune proprietà diffusive della proteina in soluzione.

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 si è svolta, principalmente, in seno ai seguenti progetti:

- Progetto FP-6 LIFESCIHEALTH – I scrIN-SILICO: "Finding promising drug candidates against tuberculosis with multidisciplinary protocol based non-conventional search".

Progetto FP-6 LIFESCIHEALTH - II scrIN-SILICO: "Finding promising drug candidates against tuberculosis with multidisciplinary protocol based non-conventional search".

- 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 Dompè s.r.l, intitolato: "Impiego integrato di tecniche spettroscopiche complementari per lo studio di sistemi macromolecolari di crescente complessità strutturale";

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

metodologie fisiche sono state impiegate per il monitoraggio elettromagnetico ed acustico. Sono stati inoltre utilizzati 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 elettromagnetico, con la generazione di mappe zonali che ha consentito di svolgere funzioni di integrazione per la modellizzazione dell'impatto ambientale.

Nel corso dell'anno 2007 sono stati attivati nuovi protocolli di collaborazione con la Provincia Regionale di Messina, l'Agriscientifica e la B&T.

### **Elenco dei lavori pubblicati durante l'anno 2007**

- 1- S. V. Lishchuk, T. V. Lokotsh, N. P. Malomuzh, S. Magazù, F. Migliardo,  
"Role of the orientation disorder in the formation of fragility of glassy water and glycerol-like liquids",  
Physical Review E, 76, 061504 (2007).
- 2 - A. Benedetto, S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo  
"Elastic and quasi-elastic incoherent neutron scattering: an integrated experimental, theoretical and  
simulative approach on systems of biophysical interest of increasing complexity"  
Complexity, Metastability and Nonextensivity, AIP Volume, ISBN: 978-0-7354-0481-6, 965, 245 (2007).
- 3- S. Magazù, F. Migliardo, A. J. Ramirez-Cuesta,  
"Kosmotrope Character of Maltose in Water Mixtures",  
Journal of Molecular Structure, 830, 167 (2007).
- 4- S. Magazù, F. Migliardo, A. J. Ramirez-Cuesta,  
"Concentration Dependence of Vibrational Properties of Bioprotectant/Water Mixtures by Inelastic Neutron  
Scattering",  
Journal of Royal Society Interface, 4, 167 (2007).
- 5- S. Magazù, F. Migliardo, M. T. F. Telling,  
"Study of the Dynamical Properties of Water in Disaccharide Solutions",  
European Biophysics Journal, 36, 163 (2007).
- 6- S. Magazù, F. Migliardo, D. Barreca, E. Bellocco, G. Laganà,  
"Aggregation Processes of Biomolecules in Presence of Trehalose",  
Journal of Molecular Structure, 840, 114 (2007).
- 7- S. Magazù, F. Migliardo,  
"Elastic, Quasi Elastic and Inelastic Neutron Scattering Studies on Hydrogen-Bonded Systems of  
Biophysical Interest",  
Chemical Physics Research Journal, 1, 37 (2007).
- 8- S. Magazù, F. Migliardo, N. P. Malomuzh, I. V. Blazhnov,  
"Theoretical and Experimental Models on Viscosity: I. Glycerol",  
Journal of Physical Chemistry B, 111, 9563 (2007).
- 9- L. Minutoli, D. Altavilla, A. Bitto, F. Polito, E. Bellocco, G. Laganà, D. Giuliani, T. Fiumara, S. Magazù,  
P. Ruggeri, S. Guarini, F. Squadrito,  
"The Disaccharide Trehalose Inhibits Proinflammatory Phenotype Activation in Macrophages and Prevents  
Mortality in Experimental Septic Shock",  
Shock, 27, 91 (2007).
- 10- S. Magazù, G. Romeo, M. T. F. Telling,  
"Temperature dependence of protein dynamics as affected by sugars: a neutron scattering study",  
European Biophysics Journal, 36, 685 (2007).

11- B. Varga, F. Migliardo, E. Takacs, B. Vertessy, S. Magazù, C. Mondelli  
“Neutron Scattering Studies on dUTPase Complex in Presence of Bioprotectant Systems”  
Chemical Physics, 342 (2007).

12- F. Migliardo  
“Il Fascino della Ricerca”  
Dynamic Air, 3, 64 (2007).

13- E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, U. Leuzzi, F. Migliardo, G. Galli, A. Galtieri, L. Minutoli, F. Squadrito  
“Neutron Scattering and HPLC Study on L-Ascorbic Acid and its Degradation”  
Chemical Physics, 342 (2007).

14- S. Magazù, F. Migliardo, A. J. Ramirez-Cuesta,  
“Changes in Water Vibrational Modes Induced by Bioprotectant Systems”,  
Biophysical Chemistry, 125, 138 (2007).

15- S. Magazù, F. Migliardo  
“An Overview on Complementary Light and Neutron Scattering Techniques for the Study of Biophysical Systems”.  
Monografia (2007).

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

1- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo,  
“Light and Neutron Scattering Study on PEGs as Protein Models”,  
International Workshop “Proteins at Work 2007”, 28-30 Maggio 2007, Perugia, Italia.

2- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo,  
“Neutron scattering and simulation study on systems of biophysical interest of increasing complexity”,  
International Workshop “Complexity, Metastability and Nonextensivity 2007”, 16-18 Settembre 2007,  
Catania, Italia.

#### **Altri prodotti di ricerca**

- Il Prof. S. Magazù dal 1 Luglio 2007 è membro del Committee scientifico “Structure and Dynamics of Liquids and Glasses” della Facility di scattering di neutroni europea Institut Max Von Laue – Paul Langevin (Grenoble, France); ha tenuto una plenary lecture all’International Workshop “Proteins at Work 2007”, 28-30 Maggio 2007, Perugia e, dal 9 al 13 Settembre 2007 un ciclo di lezioni sull’impiego dello scattering di neutroni nello studio di sistemi biofisici per le Giornate didattiche nazionali di spettroscopia neutronica organizzate dalla Società Italiana di Spettroscopia Neutronica SISN (Sestri Levante, 9-13 Settembre 2007).

- La Dr. Federica Migliardo nell’anno 2007 ha avuto i seguenti riconoscimenti:

a) il Premio Internazionale EUWIIN (EUROPEAN UNION WOMEN INVENTORS & INNOVATORS NETWORK) Special Recognition Award 2007 indetto dalla Comunità Europea “as innovative team member and leader” (premio ricevuto a Berlino, 16 Giugno 2007);

b) il Premio Giovani Ricercatori indetto dall’Università di Messina per la migliore produzione scientifica nell’anno 2004 per l’Area Scientifico-Tecnologica, prima classificata (premio ricevuto a Messina, 21 Febbraio 2007);

La Dr. F. Migliardo è stata ospite al Festival della Scienza di Genova, dove ha tenuto le conferenze:

1. “Il Fascino della ricerca” (29 Ottobre 2007)
2. “Perché diventare scienziato” (30 Ottobre 2007);

ed è stata citata nell’articolo “TIME TO GO?” pubblicato sulla rivista Science (vol 318, 9-11-2007).

La Dr. F. Migliardo ha collaborato con la Fondazione Umberto Veronesi per i seguenti progetti:

1. "I Giorni della Scienza"
2. "Le Sfide"
3. "Michelin".

- La Dr. F. Migliardo ha tenuto dal 9 al 13 Settembre 2007 un ciclo di esercitazioni per le Giornate didattiche nazionali di spettroscopia neutronica organizzate dalla Società Italiana di Spettroscopia Neutronica SISN (Sestri Levante, 9-13 Settembre 2007).

- Il Dr. Antonio Benedetto ha avuto il seguente riconoscimento: Premio nazionale Galluzzi per la Fisica 2007 indetto dall'Università degli Studi di Roma Tre per l'attività di ricerca svolta in seno al lavoro di tesi (premio ricevuto a Roma, Ottobre 2007) .

## 6.6 Struttura e Dinamica di sistemi complessi puri e confinati. Fisica Applicazioni di metodologie fisiche nel campo dei Beni Culturali e Biofisico.

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

L'attività di ricerca svolta nell'anno 2007 è stata dedicata allo studio spettroscopico delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi a legame idrogeno, sia nello stato di "bulk" che in geometrie ristrette, con particolare interesse rivolto alla natura delle interazioni "host-guest". Inoltre, tale attività è stata anche applicata in campo storico-artistico e biofisico, sempre grazie all'ausilio di metodologie spettroscopiche.

L'uso simultaneo di tecniche spettroscopiche differenti e nello stesso tempo complementari, come lo scattering di luce Raman, l'assorbimento FT-IR e la risonanza magnetica nucleare (NMR) presso i laboratori di del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina, la spettroscopia EXAFS e la diffrazione di neutroni presso grandi facilities europee quali ILL (Grenoble, F) e ISIS (Oxford, UK) ha reso possibile una trattazione quantitativa dettagliata dei complessi fenomeni inerenti le suddette problematiche.

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

L'attività di ricerca in questo campo è stata innanzitutto finalizzata ad una piena comprensione dell'influenza del confinamento nanoscopico sulle proprietà vibrazionali dei liquidi a legame idrogeno, come l'acqua ed il propylene glycol, investigazione per altro già iniziata negli anni precedenti dal presente gruppo di ricerca.

A tale scopo, sono state realizzate misure di scattering di luce Raman ad alta frequenza, su acqua confinata all'interno di pori di diverso diametro (75 Å e 200 Å) di un vetro GelSil, in funzione della temperatura. Dallo studio dettagliato della zona dello stretching OH ( $3800 - 3000 \text{ cm}^{-1}$ ) è stato mostrato che l'allargamento del diametro dei pori e l'abbassamento della temperatura producono un effetto simile sui diversi arrangements strutturali di molecole d'acqua adsorbite. Infine è stato confermato il ruolo "structure-breaker" della matrice confinante sull'acqua adsorbita, evidenziato in modo particolare al diminuire del diametro dei pori.

È ben noto che confinando l'acqua in una matrice nanoporosa, la temperatura di congelamento si abbassa fortemente, pertanto è possibile studiare le proprietà di tale sistema ben al di sotto della sua temperatura di nucleazione omogenea,  $T_H = 231 \text{ K}$ . Utilizzando quindi questo "espediente", è stato realizzato uno studio dettagliato, mediante spettroscopia FT-IR, dei modi vibrazionali di acqua sottoraffreddata nella regione dell'HOH bending e dell'OH-stretching, in un range di temperatura compreso tra 183 K e 273 K. Come sistema di confinamento è stata utilizzata una matrice nanoporosa di silice MCM-41-S, con pori di diametro di 14 Å, costituita da tubi cilindrici 1D formanti una struttura esagonale. È stata osservata, al diminuire della temperatura, la presenza di una nuova popolazione di oscillatori a legame idrogeno centrata a circa  $3120 \text{ cm}^{-1}$ , contributo particolarmente dominante nella regione di sottoraffreddamento. Questa popolazione ricorda fortemente l'acqua solida amorfa di bassa densità che infatti presenta un picco centrato alla stessa frequenza. Ciò ha suggerito che questi oscillatori siano dovuti ad una transizione di fase liquido-liquido (L-L) del primo ordine.

Allo scopo di distinguere il ruolo giocato dal semplice confinamento geometrico e/o dall'interazione specifica con la superficie confinante sul "pattern" di connettività dei diversi arrangements strutturali dell'acqua, sono state realizzate misure di scattering Raman, sempre nella zona intra-molecolare dello stretching OH, su H<sub>2</sub>O confinata in nanopori di GelSil, con diametro di 25 Å e 75 Å, cambiando la natura del substrato, da idrofilico a idrofobico. Le misure, realizzate in funzione della temperatura (da +5°C a +75°C), hanno fornito un chiaro quadro quantitativo sia dell'effetto della temperatura che dei diversi tipi di confinamento. In particolare la sostituzione dei gruppi idrofilici Si-OH con quelli idrofobici Si-OCH<sub>3</sub> (GelSil silanizzato), tende a ristabilire gli arrangements tipici del bulk, con più alta connettività, indicando pertanto che l'interazione specifica con la superficie riveste il ruolo principale nella "rottura" della struttura tipica dell'acqua.

Lo studio sulla diversa natura dell'interazione di sistemi a legame idrogeno con il substrato di adsorbimento, è successivamente proseguito attraverso l'investigazione della vibrazione di stretching OH del propylene glycol (PG), nell'intervallo di temperatura da -15°C a +60°C, nello stato di bulk e ancora confinato all'interno del vetro poroso GelSil con diametro dei pori di 25 Å. La modifica della natura del substrato da idrofilico ad idrofobico ha permesso di separare i contributi superficiali da quelli di ridotta dimensionalità, entrambi responsabili della dinamica vibrazionale ad alta frequenza del sistema. La banda di OH stretching è stata interpretata in termine di molecole di PG che esibiscono differenti stati a legame idrogeno. La

dipendenza dalla temperatura dei componenti di deconvoluzione ha fornito una descrizione quantitativa del ruolo giocato dalle interazioni superficie-polimero e dagli effetti di confinamento geometrico sulla distribuzione di connettività delle molecole di PG confinato.

È stata inoltre studiata la dinamica dell'acqua di idratazione nella proteina di lisozima nel range di temperatura che si estende da 180K a 360K, mediante misure di assorbimento FT-IR ad alta frequenza e di risonanza magnetica nucleare, NMR. Dall'evoluzione in temperatura dei modi vibrazionali dello stretching OH, del coefficiente di diffusione NMR e del tempo di rilassamento del reticolo di spin (spin-lattice), è stata evidenziata l'esistenza di due transizioni dinamiche nell'acqua di idratazione. Al di sotto della prima transizione, a circa 220K, l'acqua di idratazione mostra un evidente crossover dinamico da fragile a forte (fragile-to-strong), che si manifesta chiaramente nella perdita di flessibilità conformazionale della proteina. Al di sopra della seconda transizione, a circa 346K, quando la proteina si sfalda, la dinamica della acqua è completamente dominata dalla frazione di molecole di H<sub>2</sub>O non connesse da legame idrogeno.

## **II) APPLICAZIONI DI METODOLOGIE FISICHE NEL CAMPO DEI BENI CULTURALI E BIOFISICO**

L'investigazione scientifica di reperti antichi presenta numerose difficoltà, ma è al contempo nel campo della fisica applicata una delle più affascinanti. Grazie a tale tipo di studio infatti è possibile fornire preziose informazioni sulle prime tecnologie usate nella manifattura dei reperti, quindi conoscere la lavorazione dei materiali grezzi, la loro origine e la loro provenienza, riuscendo pertanto a darne una giusta collocazione geografico-temporale. 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'attività scientifica svolta nel campo ha visto l'applicazione di tecnologie assolutamente non distruttive grazie alle quali è stata possibile una completa caratterizzazione di reperti ceramici provenienti da differenti siti archeologici siciliani e appartenenti a differenti periodi storici, sia per quanto riguarda il corpo ceramico che la loro superficie decorata. In particolare, misure di diffrazione di neutroni su frammenti di anfore ritrovate in un sito di Gela risalenti al V sec. a.C., hanno permesso un'identificazione quantitativa delle fasi mineralogiche presenti, e misure XAS (spettroscopia ad assorbimento di raggi X), utilizzando radiazione di sincrotrone come sorgente, hanno invece portato ad una completa caratterizzazione, sempre non distruttiva, dei pigmenti delle superfici decorate di frammenti di ceramica ritrovate in uno scavo archeologico di Caltagirone, risalenti al XVIII sec a.C e XVI sec. d.C.. Inoltre, è stata realizzata una caratterizzazione geofisica della Chiesa di S. Sebastiano (Catania) mediante tecnica G.P.R. (Ground Penetrating Radar), grazie alla quale è stata rilevata l'esistenza di strutture nascoste.

In campo biofisico, è stato realizzato uno studio mediante spettroscopia FTIR-ATR su complessi solidi di  $\alpha$ -Ciclodestrine ( $\alpha$ -CyDs) di diverso tipo con farmaci, allo scopo di caratterizzare le interazioni "host-guest" fra tali macrocicli e la genisteina, molecola biologicamente attiva di grande efficacia per la salute umana, grazie alle sue proprietà antiossidanti.

Le  $\alpha$ -CyDs sono oligomeri ciclici naturali formati da 7 unità di D-glucosio unite tra loro mediante legami 1,4  $\alpha$ -glucosidici. Hanno forma toroidale con un anello all'interno non polare e due anelli esterni idrofilici. Grazie alla loro struttura inusuale, tali macromolecole agiscono da sistemi ospitanti per una grande varietà di molecole ospiti, polari e non-. La genisteina risulta poco solubile in acqua, pertanto per migliorare la sua biodisponibilità, vengono realizzati complessi di inclusione con le  $\alpha$ -CyDs.

Sono state quindi realizzate misure di assorbimento FTIR-ATR in vari complessi di inclusione (1:1) formati da  $\alpha$ -Ciclodestrina ( $\alpha$ -CyD), (2-hydroxypropyl)- $\alpha$ -ciclodestrina (HP- $\alpha$ -CyD) e methyl- $\alpha$ -ciclodestrina (Me- $\alpha$ -CyD) con la genisteina, allo scopo di investigare le interazioni host-guest a livello molecolare. Nei profili spettrali dei complessi, confrontati con le corrispondenti bande della genisteina pura e della miscela fisica, sono stati osservati notevoli cambiamenti. Le differenze rivelate sono state interpretate in termini di differenze nel grado di associazione via legame idrogeno durante il processo di complessazione.

## ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI CON REFEREE

- 1) V.Crupi, D.Majolino, F.Longo, P.Migliardo, V.Venuti.  
“Hydrogen bonding in the Raman O-H stretching band of propylene glycol in nanometer-confined space. Surface interactions and finite-size effects”;  
Philosophical Magazine **87**, 705-714 (2007).
- 2) D.Barilaro, C.Branca, S.Gresta, S.Imposa, A.Leone, D. Majolino.  
“Ground penetrating radar (G.P.R.) surveys applied to the research of crypts in San Sebastiano's church in Catania (Sicily) ”;  
Journal of Cultural Heritage **8**, 73-76 (2007).
- 3) V.Crupi, F.Longo, D.Majolino, V.Venuti.  
“Raman spectroscopy: probing dynamics of water molecules confined in nanoporous silica glasses”;  
The European Physical Journal – Special Topics **141**, 61-64 (2007).
- 4) D.Barilaro, V.Crupi, D.Majolino, V.Venuti, G.Barone, F.D’Acapito, F.Bardelli, F.Giannici.  
“Decorated pottery study: Analysis of pigments by x-ray absorbance spectroscopy measurements.”;  
Journal of Applied Physics **101**, Art. No..064909 (2007).
- 5) F.Mallamace, M.Broccio, C.Corsaro, A.Faraone, D.Majolino, V.Venuti, L.Liu, C.Y.Mou, S.H.Chen.  
“Evidence of the existence of the low-density liquid phase in supercooled, confined water”;  
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **104**, 424-428 (2007).
- 6) D.Barilaro, V.Crupi, D.Majolino, V.Venuti, G.Barone, W.Kockelmann.  
“Neutrons as a probe of large volume specimens: the case of archaeological pottery findings.”;  
Journal of Archaeological Science **34**, 1148-1152 (2007).
- 7) V.Crupi, R.Ficarra, M.Guardo, D.Majolino, R.Stancanelli, V.Venuti.  
“UV–vis and FTIR–ATR spectroscopic techniques to study the inclusion complexes of genistein with  $\beta$ -cyclodextrins”;  
Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis **44**, 110-117 (2007).
- 8) F.Mallamace, S.H.Chen, M.Broccio, C.Corsaro, V.Crupi, D.Majolino, V.Venuti, P.Baglioni, E. Fratini, C. Vannucci, H. E. Stanley.  
“The role of the solvent in the dynamical transition of proteins: the case of the lysozyme-water system”;  
Journal of Chemical Physics **127**, Art. No. 045104 (2007).

## ELENCO DELLE COMUNICAZIONI A CONFERENZE NAZIONALI E INTERNAZIONALI:

- 1) D. Barilaro, V. Crupi, S. Interdonato, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, M. F. La Russa, F. Bardelli.  
“Characterization of blue decorated Renaissance pottery fragments from Caltagirone (Sicily)”  
Workshop: Science & Technology of Cultural Heritage Materials : Art Conservation and Restoration  
E-MRS 2007 Spring Meeting  
28 Maggio -1 Giugno 2007, Strasburgo (Francia).
- 2) G. Barone, V. Crupi, M. F. La Russa, D. Majolino, P. Mazzoleni, A. Pezzino  
“Characterisation and differentiation of pigments used on the façade of “Noto Valley”’s monuments (Sicily)”.  
Workshop: Science & Technology of Cultural Heritage Materials : Art Conservation and Restoration  
E-MRS 2007 Spring Meeting  
28 Maggio -1 Giugno 2007, Strasburgo (Francia).
- 3) C. Cannavà, V. Crupi, P. Ficarra, M. Guardo, D. Majolino, R. Stancanelli, V. Venuti  
“Physicochemical characterization of coumestrol/ $\beta$ -cyclodextrins inclusion complexes by UV-Vis and FTIR-ATR spectroscopies”.  
4th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy  
10-15 Giugno 2007, Corfù (Grecia).
- 4) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, G. Tigano, V. Venuti  
“A FT-IR study of proto-maiolic potteries from Southern Italy”.  
4th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy  
10-15 Giugno 2007, Corfù (Grecia).
- 5) V. Venuti, D. Barilaro, V. Crupi, S. Imberti, W. Kockelmann, D. Majolino, G. Tigano  
“Neutron Diffraction for the Characterization of Proto-maiolic Pottery Fragments”.  
4th European Conference on Neutron Scattering.  
25-29 Giugno 2007, Lund (Svezia).
- 6) V. Crupi, S. Interdonato, D. Majolino, V. Venuti  
“Raman study of the effects of confinement in the vibrational dynamics of water within silica nanopores”.  
XX Congresso Nazionale GNSR  
27-29 Giugno 2007, Catania (Italia).
- 7) R. Stancanelli, M. Guardo, P. Ficarra, S. Tommasini, R. Gitto, L. De Luca, V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, R. Ficarra  
“Anticonvulsant Agent: Enhancement of Physicochemical properties”.  
12<sup>th</sup> International Meeting on Recent Developments in Pharmaceutical Analysis.  
23-26 settembre 2007, Isola d’Elba (Italia).
- 8) R. Stancanelli, C. Cannavà, M. Guardo, M.L. Calabrò, P. Ficarra, R. Ottanà, R. Maccari, V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, R. Ficarra  
“Spectroscopic Investigation of Inclusion Complex of 9-Fluorenonic Derivative with (2-Hydroxypropyl)- $\beta$ -Cyd.”  
12<sup>th</sup> International Meeting on Recent Developments in Pharmaceutical Analysis.  
23-26 settembre 2007, Isola d’Elba (Italia).

## 6.7 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi

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

L'attività di questo gruppo di ricerca è proseguita con successo nell'indagine delle condizioni di vetrificazione di sistemi caratterizzati da interazioni a range relativamente corto, e nell'applicazione di teorie microscopiche atomiche e molecolari alla determinazione di proprietà termodinamiche e strutturali di fluidi atomici e molecolari, anche a più componenti.

E' stata anche intrapresa una nuova linea di ricerca su sistemi fluidi in geometria confinata ancora nell'ambito di un trattamento teorico microscopico.

### PUBBLICAZIONI DEL 2007

1. Costa, D ; Munao, G ; Saija, F ; Caccamo, C

Title: Reference interaction site model and molecular dynamics study of structure and thermodynamics of methanol

JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, v.127 : Art. No. 224501 (2007)

2. Costa, D ; Ruberto, R ; Sciortino, F ; Abramo, MC ; Caccamo, C

Title: Glass transition line in C-60: A mode-coupling/molecular-dynamics

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, v.111, 10759-10764 (2007)

3. Pellicane, G ; Caccamo, C ; Giaquinta, PV ; Saija, F

Title: Virial coefficients and demixing of athermal nonadditive mixtures

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, v.111, 4503-4509 (2007)

4. Pellicane, G ; Lee, LL

Title: Phase separation of model adsorbates in random matrices

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, v.9 , 1064-1069 (2007)

### COMUNICAZIONI ORALI A CONGRESSI

1. G.Pellicane: Workshop "Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids", Bad Gastein, Austria (gennaio, 20 -24 2007)

2. G.Pellicane: Workshop "Fluid phase behaviour and critical phenomena from liquid state theories and simulation", Cecam, Lyon, France (luglio, 5-7 2007)

3. D.Costa: CECAM workshop "New directions in liquid state theory" Lione (FR), July 02 2007 to July 04 2007

"RISM and MD study of structure and thermodynamics of liquid methanol"

4. D.Costa: Grid Open Days all'Universita' di Palermo, Palermo, 6/7 Dicembre 2007

"Structural properties of methanol and carbon tetrachloride mixtures: A molecular dynamics study

### COMUNICAZIONI POSTER A CONGRESSI

1. D. Costa: CECAM workshop "Fluid phase behavior and critical phenomena from liquid state theories and simulations", Lione (FR), 5/7 Luglio 2007

POSTER: "RISM and MD study of structure and thermodynamics of liquid methanol"

### PARTECIPAZIONI A CONGRESSI

1. D.Costa: Partecipazione al Winter Discussion Workshop on "Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids",

Bad Gastein (AU), 20/24 Gennaio 2007

2. D.Costa: Partecipazione al Meeting in Honour of Jean-Pierre Hansen, Cambridge (UK), 23/25 Luglio 2007

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

- Responsabile: **Paolo V. Giaquinta**
- Partecipanti: **Santi Prestipino Giarritta** (ricercatore confermato)  
**Alessandro Sergi** (titolare di un assegno di ricerca fino al 31/07/07)  
**Emanuela Giuffr ** (dottoranda di ricerca, XXII ciclo)
- Collaboratori esterni: **Franz Saija** (IPCF-CNR, Messina)  
**A. Marco Saitta** (Universit  Pierre et Marie Curie, Parigi)
- Finanziamenti: **Programmi di Ricerca di Ateneo** (PRA UniME)

L'attivit  del gruppo che insiste su questa linea di ricerca ha riguardato nel 2007 i seguenti temi:

- MISCELE BINARIE LIQUIDE: RUOLO DELLA NON-ADDITIVIT  DELL'INTERAZIONE REPULSIVA TRA SPECIE DISTINTE NELLO SMESCOLAMENTO DELLA MISCELA.   stata studiata la stabilit  relativa (rispetto alla solidificazione) della transizione fluido-fluido in una miscela binaria di sfere rigide. Per il calcolo delle propriet  termodinamiche della miscela   stata utilizzata l'equazione di stato di Barboy e Gelbart estesa fino al quarto ordine in densit  attraverso il calcolo dei coefficienti del viriale. L'analisi   stata condotta in vari regimi termodinamici, al variare del rapporto dei raggi delle due specie e del parametro di non-additivit .
- DIAGRAMMA DI FASE DI CRISTALLI LIQUIDI.   stato studiato con la simulazione numerica un modello semplificato di cristallo liquido costituito da particelle di forma ellissoidale orientate parallelamente le une rispetto alle altre. L'interazione tra le particelle   stata assunta repulsiva, con profilo gaussiano. Sono state identificate le fasi solide del sistema al variare della pressione ed   stato osservato il fenomeno della fusione rientrante.   stata altres  rilevata l'esistenza di una fase colonnare stabile, con ordine spaziale intermedio tra quelli esibiti dalla fase solida e dalla fase fluida.
- MODELLI RETICOLARI. La fusione inversa   un fenomeno in base al quale un cristallo fonde quando viene raffreddato a pressione costante. Questa transizione di fase, per certi aspetti anomala,   stata osservata in entrambi gli isotopi dell'elio. Per comprenderne meglio le caratteristiche sono stati studiati due diversi modelli di gas reticolare bidimensionale nei quali   stato osservato, attraverso la simulazione numerica, un fenomeno analogo. Tuttavia, a differenza dell'elio, la fase in cui il solido "reticolare" si trasforma al diminuire della temperatura e in condizioni isobariche   essa stessa solida, bench  meno densa del solido osservato a pi  alta temperatura.
- MECCANICA STATISTICA NON-HAMILTONIANA DI SISTEMI QUANTO-CLASSICI. Questa attivit  di ricerca si   incentrata sulla formulazione della meccanica statistica non-Hamiltoniana di sistemi nei quali pochi gradi di libert  quantistici interagiscono con un numero molto grande di gradi di libert  classici. Tali sistemi sono denominati sistemi misti quanto-classici e sono particolarmente interessanti nel caso in cui si vogliono studiare reazioni chimiche con trasferimento di cariche elettroniche o protoniche. Sono stati ottenuti i seguenti risultati teorici:
  -   stata introdotta una dinamica deterministica (di Nos -Hoover) per il controllo della temperatura in sistemi quanto-classici;
  -   stata formulata la dinamica quanto-classica tramite equazioni non-lineari per campi d'onda;
  -   stato proposto un formalismo per la definizione di vincoli olonomi in sistemi quanto-classici.

I risultati ottenuti permetteranno di definire nuovi algoritmi per la simulazione al calcolatore di reazioni chimiche quantistiche in ambienti molecolari classici.

### PUBBLICAZIONI

1. G. Pellicane, C. Caccamo, P.V. Giaquinta, and F. Saija: *Virial coefficients and demixing of athermal nonadditive mixtures*, Journal of Physical Chemistry B (Condensed Matter, Materials, Surfaces,

- Interfaces & Biophysical) **111**, 4503-4509 (2007)  
[ISSN: 1520-6106].
2. A. Sergi and P. V. Gaquinta: *On the geometry and entropy of non-Hamiltonian phase space*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment P02013 (2007)  
[ISSN: 1742-5468].
  3. S. Prestipino: *Inverse melting in lattice-gas models*, Physical Review E **75**, 011107 (2007) [ISSN: 1539-3755].
  4. F. Saija and S. Prestipino: *Phase diagram of Gaussian-core nematics*, Journal of Chemical Physics **126**, 194902 (2007) [ISSN: 0021-9606].
  5. A. Sergi: *Deterministic constant-temperature dynamics for dissipative quantum systems*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **40**, F347-F354 (2007)  
[ISSN: 1751-8113].
  6. A. Sergi: *Quantum-classical dynamics of wave fields*, Journal of Chemical Physics **126**, 074109 (2007)  
[ISSN: 0021-9606].
  7. E. Giuffr  and F. Saija: *Melting line of Krypton in extreme thermodynamic regimes*, Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti - Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali **85**, C1A0701001 (2007) [ISSN: 1825-1242].
  8. SERGI A.; TRIPODI G. (2007). **Il metodo della fisica e le problematiche della biologia**. ATTI DELLA ACCADEMIA PELORITANA DEI PERICOLANTI, CLASSE DI SCIENZE FISICHE, MATEMATICHE E NATURALI. Vol. LXXXV - Issue 1. pp. 1-15. 10.1478/c1c0701001. ISSN: 1825-1242.

#### COMUNICAZIONI A CONGRESSI

- 1) S. Prestipino: *Inverse melting in lattice-gas models*; STATPHYS 23 (Genova, 2007).
- 2) G. Pellicane, F. Saija, C. Caccamo, and P. V. Giaquinta: *Phase diagram of binary athermal mixtures*; Soft, Complex, and Biological Matter Conference (Terrasini, 2007).
- 3) F. Saija and S. Prestipino: *A Gaussian-core interaction for a liquid-crystal model*; Soft, Complex, and Biological Matter Conference (Terrasini, 2007).
- 4) A. Sergi: *Quantum-classical dynamics of wave fields*; XIV Central European Workshop on Quantum Optics (Palermo, 2007).

## 6-9 Fisica dei sistemi Complessi

F. Mallamace (PO), U. Wanderlingh (PA), R. Giordano (PA), C. Branca (RC), M. Broccio (AS), C. Corsaro (AS), N. Gonzalez (R\_EU), J. Spooren (R\_EU).

### Attività di Ricerca

L'attività di ricerca del gruppo si è sviluppata essenzialmente lungo due linee principali: proprietà fisiche dell'acqua e studio dei fenomeni che caratterizzano i liquidi complessi all'arresto dinamico.

Sono state utilizzate essenzialmente metodologie sperimentali quali: Scattering di luce, Scattering di neutroni, Risonanza Magnetica Nucleare e Misure dei parametri termodinamici.

Nel primo caso abbiamo verificato, confinando il liquido in nanopori così piccoli da impedire il congelamento, la consistenza del modello a due liquidi nella descrizione del sistema acqua. Il sconfinamento ci ha permesso di sottoraffreddare il liquido fino a 160 K. In questo contesto abbiamo mostrato che le dinamiche dell'acqua sono determinate dalla esistenza di un crossover nelle sue capacità di *glass former* da "fragile" a "forte"; tale proprietà è stata evidenziata sia nel coefficiente di self-diffusion, che nei tempi di rilassamento longitudinali, da una transizione in funzione della temperatura da super-Arrhenius (VFT) a singolo Arrhenius.

Alla temperatura di tale crossover è stata individuata una non singolare violazione della legge di "Stokes-Einstein". Il che comporta lo sviluppo nel sistema di ben precise e caratteristiche eterogeneità dinamiche che governano il sistema nei regimi di elevata superconducibilità. La temperatura del crossover denominata "temperatura di Widom" identifica il luogo dei massimi del calore specifico del sistema (T=240K).

Abbiamo inoltre mostrato la esistenza di un minimo nella densità dell'acqua a circa 200 K. Tale minimo fornisce consistenza alla ipotesi di un secondo punto critico del sistema. Comunque la variazione della densità in funzione della temperatura ha permesso il calcolo della espansività termica in un range molto grande di temperatura in regioni fino ad ora non esplorate. Queste misure ci hanno permesso di evidenziare un fatto estremamente importante nella Fisica del sistema acqua: nelle regioni di elevato sottoraffreddamento le anomalie nei parametri termodinamici, in passato associate (da estrapolazioni) a possibili divergenze "critiche" sono in realtà precise singolarità caratterizzate da massimi e minimi in funzione della temperatura.

Tali osservazioni, hanno permesso di riconsiderare in termini diversi dal passato le proprietà del sistema acqua soprattutto come il solvente della biologia. Di recente in collaborazione con i teams del Prof. Stanley (Boston Univ.) ed il Prof. Chen (MIT) combinando dati di scattering di neutroni con diffusione NMR e simulazione di dinamica molecolare (MD) abbiamo mostrato che la temperatura di Widom (crossover strong-fragile) coincide con il passaggio della proteina (lisozima) dallo stato vetroso a quello di piena attività biologica. Inoltre abbiamo verificato che il processo di denaturazione irreversibile delle proteine è preceduto da una regione di reversibilità folding-unfolding. In entrambi i processi il ruolo principale è dettato dalla capacità delle molecole di acqua a formare legami idrogeno (HB). Alla temperatura di Widom si ha la formazione completa del network tetraedrico di IHB; mentre i processi di denaturazione si innescano quando la composizione dell'acqua è dominata esclusivamente da molecole non-legate.

Per quanto riguarda i processi di arresto dinamico abbiamo studiato il ruolo delle eterogeneità dinamiche in sistemi dispersi quali colloidi e polimeri. Abbiamo proposto prima e verificato poi che tali effetti sono fondamentalmente associati alla capacità di questi sistemi di originare processi di clustering. Esiste quindi una forte similitudine (universalità) almeno nelle fasi di arresto o di jamming fra l'acqua ed i liquidi complessi, inclusi i materiali granulari.

### Pubblicazioni

1) H.E. STANLEY, P. KUMAR, L. XU, Z. YAN, M.G. MAZZA, S.V. BULDYREV, S.-H. CHEN, **MALLAMACE F.** (2007). The puzzling unsolved mysteries of liquid water: Some recent progress. *PHYSICA. A.* vol. 386, pp. 729-743 ISSN: 0378-4371.

2) **MALLAMACE F, BROCCIO M, CORSARO C, FARAONE A, MAJOLINO D, VENUTI V, LIU L, MOU CY, CHEN SH.** (2007). Evidence of the existence of the low-density liquid phase in supercooled, confined water. *PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA.* vol. 104, pp. 424-428 ISSN: 0027-8424.

- 3) **MALLAMACE F**, **CHEN SH**, **BROCCIO M**, **CORSARO C**, **CRUPI V**, **MAJOLINO D**, **VENUTI V**, **BAGLIONI P**, **FRATINI E**, **VANNUCCI C**, **STANLEY HE** (2007). Role of the solvent in the dynamical transitions of proteins: The case of the lysozyme-water system. *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*. vol. 127, pp. 045104(1)-045104(4) ISSN: 0021-9606.
- 4) **MALLAMACE F.**, **BRANCA C**, **BROCCIO M**, **CORSARO C**, **MOU CY**, **CHEN SH**. (2007). The anomalous behavior of the density of water in the range  $30\text{K} < T < 373\text{K}$ . *PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA*. vol. 104, pp. 18387-18391 ISSN: 0027-8424, ISI:000251292500010.
- 5) **GIORDANO R**, **TEIXEIRA J**, **TRISCARI M**, **WANDERLINGH U** (2007). Porosimetric and particle-size measurements by small-angle neutron scattering. *EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY*. vol. 19, pp 223-228 ISSN: 0935-1221.
- 6) C.M.C.GAMBI, **R.GIORDANO**, A.CHITTOFRATI, R.PIERI, M LAURATI,P.BAGLIONI AND J.TEIXEIRA, "Small-angle neutron scattering of mixed ionic perfluoropolyether micellarsolutions" *J.Phys. Chem.B* 111 (6): 1348-1353 FEB 15 2007

#### **Comunicazioni a congressi (Orali e su invito)**

- 1) M. Broccio: Arrested Matter Network Bad Gastein Workshop, Austria, January 20 to 24, 2007.
- 2) F. Mallamace: International Congress "STATICS AND DYNAMICS OF GRANULAR MEDIA AND COLLOIDAL SUSPENSIONS", Napoli (Italy) July 4-6 2007
- 3) F. Mallamace: 392th WE-Heraeus Seminar "Transport, Localization, and Fluctuations in Complex Systems", September 2-5, 2007, Ilmenau, Germany.
- 4) F. Mallamace: EU Network DYSONET Palermo 26-27 November.

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

**Personale afferente alla Linea di Ricerca:** Ezio Bruno (PA), **Francesco Mammano** (D).

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 formulato un nuovo approccio teorico basato su una fattorizzazione del termine cinetico del funzionale della densità elettronica di Hohenberg e Kohn, tale approccio da noi detto Generalized Coherent Potential Approximation (GCPA) in quanto, in certi casi limite si riduce a teorie già note quali la CPA o la Polymorphous CPA. Lo schema è in grado di includere la dipendenza dello scattering elettronico dall'ambiente chimico e presenta, rispetto alla tradizionale formulazione CPA, il vantaggio di potere trattare composti intermetallici ordinati oltre che leghe parzialmente o completamente disordinate. Si è inoltre dimostrato come una conveniente linearizzazione della GCPA sia del tutto equivalente alla Charge Excess Functional theory (CEF), sviluppata precedentemente dallo stesso gruppo. L'integrazione di CEF e GCPA 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 è 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 è 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 è stato possibile determinare le proprietà di ordinamento atomico e le energie libere in funzione della temperatura. Una parte considerevole del lavoro svolto è 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 è trovato che essa risomma interazioni di range infinito e a tutti gli ordini in uno sviluppo a molti corpi.

### Publicazioni

1. **Ezio Bruno** "The charge excess functional theory and ordering properties of metallic alloys", *Mat. Sci. & Engin. A* 462, 456 (2007).

2. **Ezio Bruno, Francesco Mammano, Antonino Fiorino, and Emanuela V. Morabito**, "Coarse-grained density functional theories for metallic alloys: Generalized coherent-potential approximations and charge-excess functional theory", *Phys. Rev. B* (accepted for publication as BH10476, preprints: [arXiv:0708.0340v1](https://arxiv.org/abs/0708.0340v1) [cond-mat.mtrl-sci])

### Partecipazione a convegni:

Ezio Bruno and Francesco Mammano, "Transizioni di fase ordine-disordine in Leghe metalliche", Workshop di Fisica Teorica, Messina, Febbraio 2007

Ezio Bruno and Francesco Mammano, "The Order-Disorder Phase Transition in Cu<sub>0.50</sub>Zn<sub>0.50</sub> Alloys: CEF-MonteCarlo calculations", EUROMAT 2007, 10-13 September 2007, Nurburg (Germany)

## 6.11 Transizioni di fase ed anomalie termodinamiche

Responsabile: G. Malescio

Il quadro generale dei comportamenti di fase associati alle anomalie termodinamiche e dinamiche, tipiche di sistemi come l'acqua, il silicio, la silice, etc., rimane tuttora poco chiaro. Sebbene le anomalie siano state collegate all'esistenza di transizioni liquido-liquido, si è trovato che queste transizioni possono avvenire anche in assenza di anomalie, mentre d'altro canto anomalie sono state riportate anche per sistemi puramente repulsivi (nei quali, ovviamente, non vi è alcuna fase liquida). Le transizioni liquido-liquido derivano dalla presenza di due strutture locali in competizione tra loro, una caratteristica che dà origine anche ad una regione rientrante nella linea di melting. Si è quindi investigata la relazione tra il comportamento di melting e l'onset di anomalie termodinamiche e dinamiche in un sistema modello di fluido isotropo a due stati, in cui l'hard core è circondato da una regione repulsiva soffice. Si è osservato che la repulsione soffice gioca un duplice ruolo rispetto alle anomalie. Essa, infatti, da un lato rende possibile l'esistenza stessa delle anomalie, che derivano proprio dalla presenza di una zona repulsiva penetrabile, dall'altro, sotto certe condizioni, può dare origine ad un fenomeno di clustering delle particelle che, secondo quanto osservato, contrasta l'onset delle anomalie.

Tali risultati gettano nuova luce sull'origine delle anomalie termodinamiche ed in particolare permettono di spiegare perché lo stesso comportamento generale di fase, che include transizioni liquido-liquido e melting rientrante, possa essere aver luogo sia in presenza che assenza di anomalie

### Publicazioni

- 1) G.Malescio, "Complex phase behavior from simple potentials" (topical review, articolo su invito) *J.Phys.: Condens. Matter.* **19** 073101 (2007)
- 2) G.Malescio, "Broad distributions from resource partitioning", *Physica A* **383**, 643 (2007)
- 3) G.Malescio, "Justifying the funding of basic science", *Physics Today* **60** n.10, 14 (2007)

## 6.12 Informatica: M^2AG: Milan-Messina Action Group

Componenti: A. Provetti (PA, INF01), G. Fiumara (dottore di ricerca, Cultore della materia, INF01), M. Marchi (dottore di ricerca, Assegnista di ricerca, INF01), N. Spada (Prof. a contratto, INF01, Facolta' di Lettere e Filosofia), Giovanni Pirrotta (laureato frequentatore, ruolo tecnico dell'ateneo)

I due obbiettivi scientifici di lungo termine di questo gruppo sono:

- i) teoria, implementazione e applicazione dell'Answer set programmino e, in quest'ultimo ambito,
- ii) esplorazione e verifica dell'applicabilita' di sistemi guidati da politiche dichiarative nel contesto del trattamento di dati e di decisioni relative al Web.

Da Febbraio 2007 la nostra attivita' di ricerca consiste, al 50% con l'esecuzione del progetto di ricerca co-finanziato PRIN 2006: "DLP\* in ambiti applicativi innovativi".

L'unita' di Messina, integrata con i colleghi Ornaghi, Fiorentini e Momigliano del Dip. di Scienze dell'Informazione dell'Universita' di Milano, compare come una delle tre unita' locali del progetto.

-- Pubblicazioni --

[1] Giacomo Fiumara, Massimo Marchi, Alessandro Provetti:

Adaptive Web Data Extraction Policies.

Poster nei Proc. of IEEE Conf. on POLICY 2007, p. 281

[2] Massimo Marchi, Romeo Penzo, Alessandro Provetti:

Policy-Based Parametric Firewall Configuration: A Real-Case Application.

Poster nei Proc. of POLICY 2007, p. 276

[3] Giacomo Fiumara, Massimo Marchi, Rosamaria Pagano and Ferdinando Roto:

Rule-based e-mail annotations,

CILC2007, Convegno Italiano di Logica Computazionale

[4] Giacomo Fiumara:

Automated Information Extraction from Web Sources: a Survey,

Proc. of BOF, Between Ontologies and Folksonomies Workshop in 3rd

International Conference on Communities and Technology 2007

Volume 312 of CEUR Workshop Proceedings series.

[5] Giacomo Fiumara, Mario La Rosa, Tommaso Pimpo:

(X)querying RSS/Atom Feeds Extracted from News Web Sites: a Cocoon-based Portal,

Proc. of BOF, Between Ontologies and Folksonomies Workshop in 3rd

International Conference on Communities and Technology 2007

Volume 312 of CEUR Workshop Proceedings series.

-- Eventuali altri prodotti di ricerca --

Il sito Web <http://mag.dsi.unime.it/eer2datalog/> sviluppato a partire dalla tesi di M. Amalfi.

Organizzazione del XXII convegno italiano di Logica computazionale (CILC07).

Il convegno si e' svolto nei locali della Facolta' il 21 e 22 giugno 2007.

-- Tesi di laurea --

Su XML e testi bibliografici (collaborazione con la Facolta' di Lettere e Filosofia)

-E. Torre, C. Crisafulli, D. Giorgianni

## 6.13 Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico

Componenti; *Andrea Nucita, Giovanni Pizzimenti*

### *Sintesi dell'attività di ricerca*

L'attività di ricerca si è riferita particolarmente alla definizione di strumenti informatici utili al supporto alle decisioni in ambito medico. Gli aspetti principali sono due:

- la gestione dei dati attraverso un sistema GIS per la logistica e l'epidemiologia
- la gestione e l'utilizzo dei protocolli clinici automatizzati per la gestione dei pazienti e delle cure

Per il primo punto si è cercato di trovare degli strumenti informatici utili alla gestione della logistica e alla ricerca epidemiologica in ambiti in cui la gestione dei pazienti è complicata dalla particolare diffusione dei pazienti sul territorio. A differenza dei paesi occidentali, nei paesi in via di sviluppo, ad esempio, si deve affrontare un ulteriore elemento di difficoltà nella gestione dei pazienti in cura: la loro dispersione sul territorio. Spesso infatti i centri di cura servono pazienti residenti in piccoli villaggi lontani dalle città, con grosse difficoltà di trasporto e comunicazione. Lo scopo è quindi quello di utilizzare strumenti GIS per la gestione dei pazienti e per la razionalizzazione delle risorse dei centri di cura, per la mappatura del territorio e per l'elaborazione dei dati relativi alla diffusione dei pazienti e dei dati epidemiologici.

Il secondo punto riguarda l'utilizzo dei protocolli clinici per il supporto alle decisioni, in ambito logistico ed epidemiologico. Mentre spesso i protocolli clinici sono usati per definire lo stato di un paziente, possono invece essere uno strumento cruciale per gestire le terapie e supportare il lavoro dei medici, attraverso un sistema automatizzato. In aggiunta, l'uso dei protocolli clinici con modelli statistici può essere utile per determinare i fattori di successo di una terapia e per correggere eventuali errori metodologici.

### *Pubblicazioni*

#### Atti di conferenza

- NUCITA A., GIUSEPPE M. BERNAVA, MICHELANGELO BARTOLO, FABIO DI PANE MASI, PIERO GIGLIO, MARCO PERONI, GIOVANNI PIZZIMENTI. Un supporto GIS per la cura dei malati di HIV/AIDS nell'Africa rurale: l'esperienza di DREAM in Malawi. In: atti della 11a Conferenza Nazionale ASITA. 11a Conferenza Nazionale ASITA. Torino. 6-9 novembre 2007. (vol. 2, pp. 1635-1638).

### *Partecipazioni a congressi*

1. 11a Conferenza Nazionale ASITA, Torino 6-9 novembre 2007. Presentazione poster.
2. Fifth Symposium on Human-Computer Interaction. HCIItaly 2007, Padova 28-30 Giugno 2007.

## A. ELENCO TELEFONICO E INDIRIZZI DI POSTA ELETTRONICA

COGNOME E NOME	POSTA ELETTRONICA	telefono	fax
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	090-6765051	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	090-6765043	090-6765042
CRUPI VINCENZA	vcrupi@unime.it	090-6765447	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	090-6765449	090-395004
DONATO PAOLA	pdonato@unime.it	090-6765448	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	090-6765235	090-395004
GALLI GIOVANNI	giovanni.galli@unime.it	090-3977310	090-395004
GENTILE CLAUDIO	gentile@unime.it	090-6765026	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	090-6765047	090-6765042
INTERDONATO SALVATORE	interdonatos@unime.it	090-6765036	090-395004
ITALIANO ANTONIO	antonio.italiano@me.infn.it	090-6765021	090-395004
MAGAZU' SALVATORE	salvatore.magazu@unime.it	090-6765025	090-395004
MAISANO GIACOMO	giacomo.maisano@unime.it	090-6765017	090-395004
MAJOLINO DOMENICO	majolino@unime.it	090-6765237	090-395004
MALESCIO GIANPIETRO	malescio@unime.it	090-6765230	090-6765042
MALLAMACE FRANCESCO	francesco.mallamace@unime.it	090-6765016	090-395004
MANDANICI ANDREA	andrea.mandanici@unime.it	090-6765010	090-395004
MIGLIARDO FEDERICA	federica.migliardo@unime.it	090-6765012	090-395004
MIGLIARDO PLACIDO	placido.migliardo@unime.it	090-6765018	090-395004
NUCITA ANDREA	andrea@informatica.unime.it	090-6765232	090-6765042
PAGANO FRANCESCA	pagano@unime.it	090-6765031	090-395004
PELLICANE GIUSEPPE	gpellicane@unime.it	090-6765043	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	090-6765041	090-6765041
RANDO SALVATORE	randos@unime.it	090-6765042	090-6765042
TORRISI LORENZO	lorenzo.torrisi@unime.it	090-6765052	090-6765042
TRIFIRO' ANTONIO	Antonio.trifiro@me.infn.it	090-6765451	090-395004
TRIPODO GASPARE	gaspare.tripodo@unime.it	090-6765032	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