



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

DIPARTIMENTO DI FISICA

Viale Ferdinando Stagno D'alcontres 31, S. Agata 98166 Messina



RAPPORTO DI ATTIVITA'

Anno 2009

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

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

INDICE

INTRODUZIONE	3
1 Struttura del Dipartimento	4
2 Organi	5
3 Personale	6
3.1 Professori di ruolo.....	6
3.2 Ricercatori	6
3.3 Personale Tecnico-Amministrativo dell'Università	6
3.4 Personale Tecnico-Amministrativo dell'INFN	7
3.5 Personale non strutturato	7
4 Dottorato in Fisica	8
5 Tesi di Laurea e di Dottorato di Ricerca in Fisica	9
6 Attivita' di Ricerca	11
6.1 Fisica dei plasmi generati da impulsi laser di potenza.....	12
6.2 Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia e correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie.....	17
6.3 Reazioni nucleari su nucleoni e nuclei.....	20
6.4 Materiali disordinati.....	23
6.5 Processi di rilassamento in sistemi disordinati: liquidi glass-forming e vetri a conduzione ionica.....	26
6.6 Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biotecnologico Metodologie fisiche applicate ai settori ambiente ed energia.....	28
6.7 Struttura e Dinamica di sistemi complessi puri e confinati. Fisica Applicazioni di metodologie fisiche nel campo dei Beni Culturali e Biofisico.....	32
6.8 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi.....	36
6.9 Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia.....	38
6.10 Studio di comportamenti anomali in sistemi con interazione a simmetria sferica.....	39
6.11 Fisica dei Sistemi Complessi.....	40
6.12 Studio di membrane biomimetiche e soluzioni di macromolecole	42
6.13 Teoria e simulazione numerica di sistemi modello di meccanica statistica	44
6.14 Meccanica statistica <i>ab initio</i> in sistemi metallici	45
6.15 Informatica: M ² AG: Milan-Messina Action Group.....	46
6.16 Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico	47
6.17 Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali.....	48
A. Contatti: telefono, posta elettronica e fax	49

INTRODUZIONE

L'anno 2009 è stato il ventunesimo 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 e successivamente anche dell'Istituto di Fisica Teorica. Il Dipartimento è costituito da 24 professori di ruolo, 10 ricercatori, 10 unità di personale tecnico e amministrativo. 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 2009 è documentata da oltre 70 lavori su riviste internazionali con referee, da 32 lavori su volume o proceedings e da numerose comunicazioni anche su invito a congressi internazionali (oltre 73 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 2008/09 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 2009 sono state portate a termine, presso il Dipartimento di Fisica, 20 tesi di Laurea e di Laurea Magistrale e 6 tesi di Dottorato di Ricerca (XX II Ciclo).

Fa parte del dipartimento, il Centro di Criogenia che da alcuni anni produce elio liquido e che dal 2008 si è arricchito anche di un nuovo liquefattore di azoto. Il centro rifornisce di liquidi criogenici non solo il nostro dipartimento ma anche numerosi dipartimenti dell'ateneo oltre a svolgere una attività conto terzi per utenti esterni.

Il dipartimento nel 2009 ha svolto anche una attività didattica di certificazione ECDL e CISCO a tutti i livelli di approfondimento, nonché ha siglato numerosi contratti e convenzioni per attività di ricerca conto terzi nei vari ambiti di competenza in esso presenti

Il Dipartimento con alcuni suoi docenti è coinvolto nell'allestimento e mantenimento 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 un *Gruppo Operativo*:

- Sezione di Struttura della Materia
- Sezione di Fisica Teorica e computazionale, informatica
- Sezione di Fisica Nucleare
- Centro di Criogenia
- Gruppo Operativo di Fisica Applicata *

*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 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 Antropici

2 - ORGANI

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

Consiglio di Dipartimento

11 Professori Ordinari, 13 Professori Associati, 10 Ricercatori, il Segretario Amministrativo, 1 Rappresentante dei dottorandi di ricerca (D. Loria), 1 Rappresentante degli Assegnisti (C.Corsaro), 1 Rappresentante del personale tecnico-amministrativo (E. Cosio).

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
G. D'ANGELO	Associato di Fisica Sperimentale
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
G. PIZZIMENTI	Associato di Fisica Teorica
A. PROVETTI	Associato di Informatica
L. TORRISI	Straordinario di Fisica Sperimentale
G. TRIPODO	Associato di Fisica Sperimentale
U. WANDERLINGH	Associato di Fisica Sperimentale

3.2 Ricercatori

C. BRANCA	Ricercatore – Settore FIS/01
D. COSTA	Ricercatore – Settore FIS/03
M. FEDERICO	Ricercatore – Settore FIS/01
G. FIUMARA	Ricercatore- Settore INF/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
A. TRIFIRO'	Ricercatore – Settore FIS/04

3.3 Personale Tecnico-Amministrativo

R. ARENA	Assistente Amministrativo (UNILAV)
D. BONANNO	Assistente Tecnico
M. CALVO	Assistente Tecnico
S. CAMPOBELLO	Coordinatore Amministrativo
D. COSIO	Agente Tecnico
E. COSIO	Assistente Tecnico
M. CURRAO	Assistente Amministrativo
P. DONATO	Assistente Amministrativo
C. GENTILE	Coordinatore Tecnico
G. PANTO'	Assistente Amministrativo (UNILAV)
S. RANDO	Assistente Amministrativo

3.5 Personale non strutturato

Ricercatore a tempo determinato del CNISM

Valentina Venuti

Assegnisti di Ricerca:

Carini Giovanni, Corsaro Carmelo, Mandaglio Giuseppe, Giuseppe Pellicane, Marina Trimarchi, Nathalie Morey, Francesca Longo, Romina Ruberto.

Borsisti Post-Doc:

Auditore Lucrezia, Federica Migliardo, Marina Manganaro, Mammano Francesco, Cristina Crupi

4. DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA

Coordinatore Prof. Carlo Cacciamo- Prof. Lorenzo Torrisi.

Il primo Dottorato di Ricerca in Fisica è stato istituito nell'anno ac. 1982/83 ed è continuato ininterrottamente fino all'anno solare 2009. In questo anno si sono tenuti i cicli XXII, XXIII e XXIV.

Dottorandi:

Ciclo XXII

Giacoppo Francesca, Giuffrè Emanuela, Lizio Domenico, Loria Dario, Scivoli Salvatore

Ciclo XXIII

Benedetto Antonio, Calabrò Emanuele, Conti Nibali Valeria, Giuffrida Lorenzo, Leone Nancy, Parrillo Francesco

Ciclo XXIV

Rifici Simona, Scardina Francesco, Trimarchi Antonio

Ciclo XXV

Di Bartolo Federico, Fisichella Maria, Minniti Triestino, Romanyuk Mariya, Santoro Simone

I seguenti cicli di lezioni (moduli) sono stati tenuti da docenti afferenti al Dipartimento di Fisica durante l'anno solare 2009:

Anno 2009

Lezioni Dottorato di Ricerca I anno XXIV ciclo

Fisica dello Stato Solido I Modulo	Prof. B. Ginatempo
Fisica dello Stato Solido II Modulo	Prof. E. Bruno
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. R. Barnà
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 2009

Lezioni Dottorato di Ricerca II anno XXIII 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

5- TESI DI LAUREA E DI DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA - ANNO 2009**A. Tesi di Laurea**

COGNOME E NOME	RELATORE	ARGOMENTO TESI di LAUREA
Triestino Minniti	L. Torrì	Produzione di ioni da plasm-laser per studi di reazioni nucleari D-D
Francesco Ingenito	A. Trifiro'	La fissione nucleare: produzione di energia e decadimento delle scorie
Claudia Raffa	R. Barnà	Radioattività ambientale: vie di ritorno all'uomo
Tiziana Borghese	G. Carini	La superfluidità e il secondo suono
Giovanni Rinaldi	D. Majolino	La fluorescenza X nel campo dei beni culturali.
La Rosa Giuseppe	U. Wanderlingh	Proprietà elastomeccaniche nella materia soffice
Ridolfo Alessandro Mario	E. Bruno	Teorie e tecniche "ab initio" nel calcolo della struttura elettronica e transizioni di fase nei sistemi metallici
Rifici Simona	U. Wanderlingh	Uno studio di spettroscopia nmr sulla mobilità diffusiva in biomembrane modello
Domenico Pasto	M. Federico	Web top managing
Giuseppe Arrigo	M. Federico	Frook Server point of view
Marcello Perone	M. Federico	Frook Desktop authoring
Gaspare Lombardo	M. Federico	Frook Mobile
Antonio Mangano	M. Federico	Frook User's opportunities
Salvatore Puliafito	M. Federico	Messaggi subliminali audio
Mario Boemi	A. Nucita	"Un software per la definizione e l'automazione di protocolli clinici .
Felice Roberta Merlo	A. Nucita	Controllo della qualità in uso di un sw per la gestione delle cartelle cliniche
Francesco Fiorino	A. Nucita	Un software per la sicurezza delle cartelle cliniche informatizzate
St. Giovanni Marino	A. Nucita	Generazione e modifica automatica nelle clinical guideline
Rosario Sanci	A. Nucita	La gestione di informazioni incomplete nelle clinical guideline

B. TESI DI DOTTORATO XXII CICLO IN FISICA

<i>DOTTORANDO</i>	<i>TITOLO TESI</i>	<i>TUTORE</i>
Giacoppo Francesca	NUCLEAR STRUCTURE STUDIES AT THE FRIBs FACILITY OF LNS	PROF. C. Barnà
Giuffrè Emanuela	PAIR CORRELATIONS AND ENTROPY OF TIP4P WATER: A NUMERICAL SIMULATION STUDY	Prof. Paolo V. Giaquinta
Lizio Domenico	Application of the GEANT4 Monte Carlo in Internal Dosimetry of Nuclear Medicine: A New Model for Dosimetry of Ellipsoidal Targets	PROF. CARLO CACCAMO
Loria Dario	SVILUPPO DI UNA TECNICA RADIOGRAFICA PER IL RICONOSCIMENTO DI MATERIALI MEDIANTE FASCI BREMSSTRAHLUNG PRODOTTI DA UN LINAC DI BASSA ENERGIA.	PROF. RENATO BARNA'
Scivoli Salvatore	Studio della Sensazione Psicoacustica e rielaborazione delle curve isofoniche	MAURO FEDERICO

C. Tesi di Dottorato in informatica sede di Milano XXII Ciclo

Giuseppe M Bernava, Rel. Giovanni Pizzimenti, Cor. Andrea Nucita. "ODESSy: Supporto alle decisioni in campo medico".

6. Attività di Ricerca

Le attività di ricerca del Dipartimento si articolano essenzialmente nelle seguenti 18 linee:

- 1) Fisica dei plasmi 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) Reazioni nucleari su nucleoni e nuclei*
- 4) Materiali disordinati*
- 5) Processi di rilassamento in sistemi disordinati: liquidi glass-forming e vetri a conduzione ionica*
- 6) Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biotecnologico – Metodologie fisiche applicate ai settori ambiente ed energia.*
- 7) Struttura e Dinamica di sistemi complessi puri e confinati. Fisica Applicazioni di metodologie fisiche nel campo dei Beni Culturali e Biofisico*
- 8) Studio teorico e simulativo di sistemi complessi*
- 9) Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia*
- 10) Studio di comportamenti anomali in sistemi con interazione a simmetria sferica*
- 11) Fisica dei Sistemi Complessi*
- 12) Studio di membrane biomimetiche e soluzioni di macromolecole*
- 13) Teoria e simulazione numerica di sistemi modello di meccanica statistica*
- 14) Meccanica statistica ab initio in sistemi metallici*
- 15) Informatica: M²AG: Milan-Messina Action Group*
- 16) Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico*
- 17) Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali*

6.1 Fisica dei plasmi generati da impulsi laser di potenza

Partecipanti:

Prof. L. Torrissi, Dr. F. Caridi, Dr. L. Giuffrida, Prof.ssa M.A. Mezzasalma, Prof. G. Mondio, Dr. S. Gammino, Dr. D. Margarone, Dr. A. Borrielli, Dr.ssa A.M. Visco, Dr. N. Campo.

Collaborazioni Straniere:

Accademia delle Scienze della Repubblica Ceca (ASCR); Laboratori PALS di Praga; Istituto di Fisica dei Plasmi e Laser Microfusion (IPPLM) di Varsavia.

Nel 2009 l'attività di ricerca del prof. Torrissi si è sviluppata sulle due seguenti tematiche:

1. Studio e Caratterizzazione di Plasmi generati da impulsi Laser di Potenza

I plasmi ottenuti da impulsi laser di potenza di breve durata producono una serie di fenomeni di non equilibrio caratterizzati da alte disuniformità di distribuzione di energia, di densità e di carica elettrica. Ad intensità laser dell'ordine di 10^{10} W/cm², ottenute con impulsi di durata di 3 ns presso il nostro "Laboratorio di Fisica dei Plasmi Laser", le temperature e le densità di plasma sono state misurate con differenti tecniche di analisi.

Tra queste la misura con Ion Collector (IC) in configurazione a tempo di volo (TOF), basate sulla teoria della distribuzione "Coulomb-Boltzmann-shiftata" CBS, ha permesso la determinazione della temperatura ionica di "core" che in differenti target metallici risulta essere dell'ordine di alcune decine di eV.

La spettroscopia ottica nel visibile e nel vicino UV, utilizzata raccogliendo la luce tramite fibra millimetrica utilizzando il laser in modalità 10 Hz repetition rate, ha evidenziato le righe caratteristiche di diseccitazione di atomi neutri di ioni con stato di carica fino a 3⁺. Il plot di Boltzmann ed il confronto con gli spettri di diseccitazione del data book NIST hanno permesso di valutare la temperatura coronale del plasma e la densità elettronica del plasma. Le misure hanno evidenziato temperature dell'ordine di 1 eV e massime densità dell'ordine di 10^{17} /cm³.

Misurando i volumi dei crateri prodotti da singoli impulsi laser in targhette solide e misurando il volume della luce visibile emessa dal plasma con una telecamera CCD veloce (tempo di esposizione 1-5 microsecondi) è stato possibile valutare la densità atomica del plasma a diversi tempi dall'impulso laser.

La disuniformità di carica elettrica generalmente portano alla formazione di un elevato campo elettrico dovuto ad una veloce emissione elettronica dalla targhetta irradiata che precede una più lenta emissione ionica dal cratere di ablazione in targhetta. Le valutazioni di tale campo elettrico, ottenute sulla base della teoria delle distribuzioni CBS, hanno stimato campi diretti lungo la normale alla superficie del target dell'ordine di una decina di MV/cm.

Le misure eseguite sono state confrontate con quelle di letteratura, ottenute con intensità laser I e con lunghezze d'onda λ simile, minore e superiore a quelle utilizzate al nostro laboratorio. Il confronto ha messo in evidenza che i processi di base sono influenzati da una dipendenza proporzionale al rapporto $(I/\lambda)^{2/3}$.

Sull'argomento di ricerca il Prof. Torrissi ha organizzato un Congresso Internazionale "PPLA2009" tenuto a Messina, Monte di Pietà nei giorni 18-20 Giugno 2009 che ha visto la partecipazione di numerosi gruppi di ricerca internazionali. Gli atti del Congresso sono stati accettati tutti sulla rivista internazionale "Radiation Effects and Defects in Solids" e verranno pubblicati nel Giugno 2010.

2. Analisi LAMS applicate al Campo dei Beni Culturali

L'utilizzo del Laser Nd:Yag per ablare sottovuoto campioni metallici, monitorandone il rilascio gassoso con la spettrometria a quadrupolo di massa, ha reso possibile l'utilizzo di tale tecnica per peculiari studi nel campo dei beni culturali. Presso il nostro "Laboratorio di Fisica dei Plasmi Laser" si è messa a punto la tecnica "Laser Ablation coupled to Mass Spectrometry (LAMS)", calibrandola con campioni standard di riferimento, per valutarne la minima invasività in funzione dei parametri dell'impulso laser (energia, lunghezza d'onda, dimensioni spot, condizioni di vuoto,...). Con un singolo impulso laser da 150 mJ di energia, 3 ns di durata a 1064 nm di lunghezza d'onda è possibile rimuovere, da differenti metalli, in maniera controllata e riproducibile strati di spessore attorno ad 1 micron da una superficie dell'ordine di 1 mm². L'utilizzo di una frequenza di ripetizione laser da 1 a 10 Hz permette di rimuovere automaticamente strati più profondi. La luce laser sfocalizzata permette la pulizia degli strati più superficiali del campione senza deteriorarlo. Laddove possibile, il sondaggio può arrivare a strati profondi quanto si vuole e contemporaneamente poter registrare la composizione di particolari masse del campione in funzione della profondità di indagine.

La tecnica presenta una microinvasività accettabile per molti campioni di interesse archeologico.

La spettrometria a quadrupolo di massa si avvale di uno spettrometro che ha una sensibilità superiore ad 1 ppm nel range 1-300 amu ed una risoluzione in massa inferiore ad 1 amu.

L'obiettivo è stato quello di poter investigare particolari elementi del campione, particolari composti chimici e particolari rapporti isotopici in monete antiche di interesse archeologico e numismatico. In campioni bronzei la tecnica è stata calibrata per il riconoscimento dei rapporti isotopici del piombo.

Generalmente la tecnica LAMS è preceduta da una spettroscopia XRF che permette di informare sulla composizione elementare del campione. La tecnica LAMS è poi diretta a valutare le concentrazioni relative tra alcuni elementi e/o composti chimici della patina superficiale o del bulk.

Per tali studi si è intrapresa una collaborazione con il Prof. G. Mondio del Dipartimento di Fisica della Materia e Ingegneria Elettronica dell'Università di Messina, noto numismatico, con gli archeologi Prof.ssa M. Caltabiano e Prof. D.E. Castrizio, della Facoltà di lettere e filosofia dell'Università di Messina e con la Dr.ssa M. Mastelloni, responsabile del Museo Interdisciplinare Regionale di Messina.

I risultati sinora ottenuti sono stati molto interessanti, permettendo la comparazione tra diversi tipi di monete in funzione del periodo storico, la comparazione tra il metallo adoperato per realizzare la moneta e il possibile sito mineralogico da cui è stato estratto e il riconoscimento di potenziali monete falsificate.

Publicazioni su riviste internazionali ISI con Referee

- 1) L. Torrasi, G. Mondio, A.M. Mezzasalma, D. Margarone, F. Caridi, T. Serafino, A. Torrasi
"Laser and electron beams physical analyses applied to the comparison between two silver tetradrachm greek coins"
Eur. Phys. J. D **54**, 225–232 (2009)
- 2) L. Laska, S. Cavallaro, K. Jungwirth, J. Krasa, E. Krousky, D. Margarone, A. Mezzasalma, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Ryc, J. Skala, L. Torrasi, J. Ullschmied, A. Velyhan, G. Verona-Rinati
"Experimental studies of emission of highly charged Au-ions and of X-rays from the laser-produced plasma at high laser intensities"
Eur. Phys. J. D **54**, 487–492 (2009)
- 3) A.M. Mezzasalma, G. Mondio, T. Serafino, F. Caridi, L. Torrasi
"Electronic properties of thin films of laser-ablated Al₂O₃"
Applied Surface Science **255**, 4123–4128 (2009)
- 4) F. Caridi, L. Torrasi, A.M. Mezzasalma, G. Mondio and A. Borrielli
"Al₂O₃ plasma production during pulsed laser deposition"
Eur. Phys. J. D **54**, 467–472 (2009)
- 5) L. Torrasi, D. Margarone, E. Milani, G. Verona-Rinati, G. Prestopino, C. Tuvè, R. Potenza, L. Láska, J. Krása and J. Ullschmied
"Diamond detectors for time-of-flight measurements in laser-generated plasmas"
Rad. Eff. And Def. In Solids **164**(5–6), May–June 2009, 369–375
- 6) S. Almagiva, V. Bellini, F. Caridi, S. Costa, F. Mammoliti, D. Margarone, M. Marinelli, E. Milani, R. Potenza, G. Prestopino, C. Sutura, L. Torrasi, A. Tucciarone, C. Tuvè, C. Verona and G. Verona-Rinati
"Thin-film CVD single-crystal diamonds for high-energy ion beam detection"
Radiation Effects & Defects in Solids **164**(5–6), May–June 2009, 363–368
- 7) L. Laska, J. Krasa, A. Velyhan, K. Jungwirth, E. Krousky, D. Margarone, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Ryc, J. Skala, L. Torrasi and J. Ullschmied
"Experimental studies of generation of \sim 100 MeV Au-ions from the laser-produced plasma"
Laser and Particle Beams (2009), **27**, 137–147
- 8) J. Krasa, K. Jungwirth, S. Gammino, E. Krousky, L. Laska, A. Lorusso, V. Nassisi, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Torrasi, J. Ullschmied and A. Velyhan
"Partial currents of ion species in an expanding laser-created plasma"
Vacuum **83** (2009) 180–184
- 9) L. Torrasi, G. Foti, L. Giuffrida, D. Puglisi, J. Wolowski, J. Badziak, P. Parys, M. Rosinski, D. Margarone, J. Krasa, A. Velyhan and J. Ullschmied
"Single crystal silicon carbide detector of emitted ions and soft x-rays from power laser-generated plasmas"
J. Appl. Phys. **105**, 123304 (2009)
- 10) L. Torrasi, A. Borrielli, F. Caridi and A.M. Mezzasalma
"Ion acceleration enhancement in laser-generated plasma by metallic doped hydrogenated polymers"
Atti Acc. Pelor. Dei Peric. V.LXXXVII, C1A0901003 (2009)
- 11) J. Badziak, T. Pisarczyk, T. Chodukowski, A. Kasperczyk, P. Parys, M. Rosiński, J. Wolowski, E. Krousky, J. Krasa, K. Mašek, M. Pfeifer, J. Skala, J. Ullschmied, A. Velyhan, L. J. Dhareshwar, N. K. Gupta, Yong-Joo Rhee, L. Torrasi, and P. Pisarczyk
"Formation of a supersonic laser-driven plasma jet in a cylindrical channel"
Phys. Plasmas **16** (11), 114506 (2009)

- 12) F. Caridi, L. Torrissi, L. Giuffrida
“Time-of-flight and UV spectroscopy characterization of laser-generated plasma”
Nucl. Instr. and Meth. B, 57106, in press, 2009

Proceedings di Conferenze Internazionali con Referee

- 1) A. Picciotto, G. Pucker, A. Lui, L. Torrissi, D. Margarone, P. Belluti
“Surface plasmon resonance analysis of Ag nanoparticles generated by pulsed laser ablation”
SPIE Europe- Microtechnologies for the new millennium, Spie Conference 4-6 May 2009,
Intern. Congress Centre, Dresden, Germany
- 2) S. Gammino, L. Celona, G. Ciavola, N. Gambino, G. Lanzalone, F. Maimone, D. Mascali, R. Miracoli, F. Samperi, L. Torrissi, S. Tudisco, A. Tumino
“A Plasma Reactor for Environmental Applications”
XIX Congresso AIV, Senigallia (AN), 19-21 Maggio 2009
- 3) D. Margarone, J. Krasa, B. Rus, L. Laska, A. Velyhan, T. Mocek, L. Torrissi, L. Andò, S. Gammino, J. Prokupek, E. Krousky, M. Pfeifer and J. Ullshmiel
“Preliminary studies on fast particles’ diagnostics for the future fs-laser facility at PALS”
4th Workshop PPLA09, p. 11, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 4) L. Laska, J. Badziak, K. Jungwirth, M. Kalal, E. Krousky, P. Kubes, D. Margarone, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, M. Rosinski, L. Ryc, J. Skala, L. Torrissi, J. Ullshmiel, A. Velyhan and J. Wolowski
“Analysis of processes participating at intense iodine-beam interactions with laser produced plasmas”
4th Workshop PPLA09, p.17, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 5) D. Mascali, S. Gammino, L. Neri, L. Celona, N. Gambino, R. Miracoli, L. Torrissi, S. Tudisco
“Numerical simulations of the ion capture process for laser generated plasmas interacting with electron resonance ion sources”
Workshop PPLA09, p. 19, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 6) M. Maggiore, S. Tudisco, F. Maimone, G.A.P. Cirrone, A. Anzalone, S. Cavallaro, L. Celona, F. Musumeci, N. Gambino, D. Mascali, R. Miracoli, S. Gammino and L. Torrissi
“Design study of a Thompson spectrometer for the time-resolved MeV ions identification”
Workshop PPLA09, p. 23, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 7) L. Torrissi, S. Cavallaro, S. Gammino, L. Giuffrida and L. Andò
“Ti post-ion acceleration from laser ion source”
Workshop PPLA09, p. 25, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 8) L. Giuffrida, L. Torrissi, S. Gammino, J. Wolowski and J. Ullshmiel
“Surface ion implantation induced by laser-generated plasmas”
Workshop PPLA09, p. 28, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 9) N. Gambino, D. Mascali, R. Miracoli, S. Gammino, D. Margarone, F. Musumeci, L. Torrissi and S. Tudisco
“Comparison between time of flight measurements and numerical simulations for laser generated plasmas”
Workshop PPLA09, p. 29, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 10) R. Miracoli, D. Mascali, N. Gambino, S. Gammino, L. Giuffrida and L. Torrissi
“Plasma plume characterization through the analysis of the ion current signals”
Workshop PPLA09, p. 35, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 11) S. Lanzafame, A.M. Mezzasalma, G. Mondio, T. Serafino, F. Barreca, L. Torrissi, G. Bruno
“Structural, electronic and optical properties of ITO thin films prepared at room temperature by pulsed laser deposition”
Workshop PPLA09, p. 36, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 12) A.M. Visco, N. Campo, L. Torrissi and A. Borrielli
“Polyethylene modifications induced by 532 nm pulsed laser”
Workshop PPLA09, p. 37, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 13) S. Gammino, D. Mascali, L. Neri, L. Celona, L. Ciavola, N. Gambino, R. Miracoli, L. Torrissi and S. Tudisco
“Perturbation of the ECR plasma ion Energy distribution function during the interaction with a laser generated plasma”
Workshop PPLA09, p. 39, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009
- 14) G. Mondio, L. Torrissi, A.M. Mezzasalma, T. Serafino, F. Caridi, A. Borrielli, L. Giuffrida, S. Lanzafame, M. Caltabiano and E.D. Castrizio
“Laser ablation coupled to mass spectroscopy for analysis in the cultural heritage field”
Workshop PPLA09, p. 40, Monte di pietà, Messina 18-20 June 2009

- 15) P. Cianciafara, A.M. Visco and L. Torrissi
 “Laser scanning vibrometry for monitoring of stiffness and density of defects in fibre-reinforced plastics”
Workshop PPLA09, p. 44, Monte di piet , Messina 18-20 June 2009
- 16) F. Caridi, L. Torrissi, G. Mondio and A. Torrissi
 “Isotopic ratio measurements with laser ablation coupled to mass quadrupole spectrometry (LASMQS)”
Workshop PPLA09, p. 45, Monte di piet , Messina 18-20 June 2009
- 17) A. Picciotto, L. Torrissi, D. Margarone and P. Bellutti
 “Identification of silver nanoparticles generated by plasma laser ablation by means deconvolution method procedure”
Workshop PPLA09, p. 52, Monte di piet , Messina 18-20 June 2009
- 18) L. Torrissi, A. Minniti, F. Caridi and L. Giuffrida
 “Data elaboration of proton beams produced by high Energy laser-generated plasmas”
Workshop PPLA09, p. 55, Monte di piet , Messina 18-20 June 2009
- 19) S. Tudisco, A. Bonanno, N. Gambino, S. Ivanovski, D. Mascali, A. Anzalone, S. Cavallaro, S. Gammino, G. Lanzalone, F. Musumeci and L. Torrissi
 “Colliding laser-produced plasmas: a new tool for nuclear strophysical studies”
Workshop PPLA09, p. 57, Monte di piet , Messina 18-20 June 2009
- 20) A. Mangione, G. Lanzara, L. Torrissi and F. Caridi
 “Mechanical properties of nanostructured carbon layers grown by CVD and PLD techniques”
Workshop PPLA09, p. 59, Monte di piet , Messina 18-20 June 2009
- 21) G.A.P. Cirrone, G. Cuttone, M. Maggiore, L. Torrissi and S. Tudisco
 “Radiotherapy investigations using power laser accelerated proton beams”
Workshop PPLA09, p. 64, Monte di piet , Messina 18-20 June 2009
- 21) L. Torrissi, S. Cavallaro and L. Giuffrida
 “Ion implantation from post-acceleration laser-generated plasma”
36th EPS Conference on Plasma Physics, June 29 - July 3, 2009, Sofia, Bulgaria
- 22) L. Torrissi, F. Caridi, L. Giuffrida, A. Borrielli and G. Mondio
 “Laser ablation mass spectrometry (LAMS) technique for isotopic ratio measurements”
36th EPS Conference on Plasma Physics, June 29 - July 3, 2009, Sofia, Bulgaria
- 23) L. Giuffrida, L. Torrissi et al
 “Ge post-acceleration from laser-generated plasma”
Proc. 1st Intern. “Conference on Frontiers in Diagnostic Technologies”,
 24-27 Nov. 2009, Laboratori Nazionali di Frascati

Libri, Pubblicaz. su Reports, Riviste Nazionali e Proceed. di Conferenze Nazionali

- 1) C. Benedetti, V. Lucarini, P. Londrillo, S. Rambaldi, A. Sgattoni, G. Servizi, G. Turchetti, F. Zanlungo (Sez. INFN-BO); R. Bonifacio, M. Castellano, A. Clozza, L. Cultrera, G. Di Pirro, A. Drago, M. Esposito, M. Ferrario, D. Filippetto, A. Gallo, G. Gatti, P. Gaudio, A. Ghigo, A. La Monaca, M. Migliorati, D. Nanni, E. Pace, L. Palumbo, M. Richetta, C. Sanelli, F. Tazzioli, A. Tenore, F. Terra, S. Tomassini, C. Vaccarezza, C. Vicario (LNF); L. Calabretta, C. Cavallaro, L. Giuffrida, R. Miracoli, L. Torrissi (LNS); A. L. Bacci, F. Broggi, M.M.Cola, G. D’angelo, C. De Martinis, A. Fazzi, A. S. Giulini Castiglioni, C. Maroli, M. Passoni, V. Petrillo, N. Piovella, A. Pola, R. Pozzoli, M. Rome’, A. R. Rossi, L. Serafini, P. Tomassini (Sez. INFN-MI); A. Galassi, D. Batani, G. Lucchini, R. Jafer, R. Redaelli, R. Benocci, T. Desai (Sez. INFN_MI Bicocca); U. De Angelis, S. De Nicola, R. Fedele, G. Fiore, C. Stornaiolo (Sez. INFN-NA); S. Betti, C.A. Cecchetti, A. Giulietti, D. Giulietti, A. Gamucci, L.A. Gizzi, P. Koester, L. Labate, T. Levato, A. Macchi, M. Vaselli (Sez. INFN & CNR-PI); “PLASMONX”
Report INFN, Gennaio 2009
- 2) L. Torrissi, S. Cavallaro, S. Gammino, S. Tudisco, L. Giuffrida, D. Mascali, L. And , R. Miracoli, N. Gambino and D. Margarone
 “Plasma laser energetic ion acceleration & diagnostics (PLEIADI) project”
INFN-LNS Annual Report 08, pp.172-175, 2008
- 3) L. Torrissi
 “Utilizzo di fasci laser in campo bio-medico”
IX Giornata di Studio Ing. Biomedica: Progettazione dei Materiali protesici ed aspetti clinico-Applicativi-Facolt  di Ingegneria, p. 13, Universit  di Messina, Messina 3 Luglio 2009,
 ISBN: 978-88-96398-08-1

- 4) N. Campo, A.M. Visco, L. Torrisi, M. Trimarchi and R. Barnà
“Degradazione bio-ossidativa del polietilene biomedico modificato con fasci di elettroni”
IX Giornata di Studio Ing. Biomedica: Progettazione dei Materiali protesici ed aspetti clinico-Applicativi-Facoltà di Ingegneria, p. 39, Università di Messina, Messina 3 Luglio 2009,
ISBN: 978-88-96398-08-1
- 5) L. Torrisi, S. Cavallaro, L. Giuffrida
“Ion implantation induced by laser-generated plasma and post-ion acceleration”
SIF09, Bari 28Sett.-3 Ott. 2009
- 6) N. Campo, A.M. Visco, L. Torrisi, A. Picciotto, G. Di Marco
“Effetti dell’impiantazione ionica sul polietilene biomedico (UHMWPE)”
AIM-XIX Conv. Ital. di Scienze Tecn. Macrom., Milano 13-17 Sett. 09, 2.55-2.56.
- 7) S. Gammino, L. Celona, G. Ciavola, N. Gambino, F. Maimone, D. Mascali, R. Miracoli,
L. Torrisi, F. Samperi
“A plasma reactor for environmental Applications”
INFN-LNS Annual Report 08, pp.176-179, 2008

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

Componenti: L. Auditore, R. C. Barnà (responsabile), 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 2009, in collaborazione con il Dipartimento di Chimica industriale ed Ingegneria dei Materiali dell'Università di Messina la ricerca sul miglioramento delle proprietà meccaniche dell'UHMWPE trattato con fasci di elettroni, già iniziata negli anni precedenti, è proseguita con un ampliamento della sistematica di ricerca sperimentale.

In particolare, è stata studiata la risposta alla trazione meccanica, all'usura ed all'invecchiamento di campioni di polimero addizionati con acido ialuronico ed irraggiati con elettroni. Gli irraggiamenti, effettuati in diverse condizioni sperimentali (in aria, nel vuoto, a temperatura ambiente e ad alte temperature) hanno consentito di determinare le migliori condizioni di trattamento ai fini dell'uso del polimero per applicazioni biomediche quali, per esempio, la realizzazione di protesi.

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, è stato progettato un metodo innovativo per la misura dell'energia del fascio di elettroni, basato sull'uso congiunto di un elettromagnete e di un dosimetro calorimetrico, che consentiranno, data la variabilità dell'energia del fascio di elettroni entro il range che va da 2.5 a 5.5 MeV, di determinare con accuratezza tutti i valori energetici ottenibili a seconda delle necessità sperimentali.

Realizzazione di un impianto accelerante per scopi industriali e di ricerca

Nel corso dell'anno 2009 è stata completata la realizzazione, nell'ambito del P.I.T. 22 'La via dell'argilla', del 'Laboratorio di ricerche sul Radiation Processing e gli Acceleratori Lineari di Elettroni' di Villafranca Tirrena, che consiste in un impianto di irraggiamento da 10 MeV per scopi industriali e di ricerca.

Il docente di riferimento del gruppo, prof. Renato C. Barnà, è Responsabile Scientifico del progetto TECNA Territorio.

In vista della futura attività in conto terzi che si auspica per l'impianto di irraggiamento, il gruppo di ricerca ha iniziato uno studio sullo sviluppo della metodologia di tracciabilità e validazione del trattamento, con particolare riguardo alle attività di sterilizzazione di presidi medico chirurgici, acquisendo le competenze necessarie ad una futura implementazione del processo.

Inoltre, un attento studio di valutazione e confronto è stato effettuato sui vari metodi dosimetrici utilizzati a livello industriale, al fine di rispondere in maniera appropriata alle richieste del mondo industriale e della ricerca scientifica.

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 EXOCHIM, 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 nel corso del 2009 ha partecipato a diverse campagne di raccolta dati presso i LNS di Catania, ed ha aderito al progetto ASYEOS, che si propone lo studio delle equazioni di stato della materia nucleare, ed in particolare del termine di asimmetria.

Recenti studi sulle reazioni tra ioni pesanti alle energie di Fermi hanno portato a significanti progressi nella determinazione del comportamento della energia nucleare di simmetria a densità inferiori a quella normale. Non sono invece disponibili informazioni sperimentali accurate sulla energia di simmetria a densità superiori a quella normale. I flussi differenziali di protoni e neutroni giocano un ruolo fondamentale tra le osservabili sensibili al comportamento ad alte densità della energia di simmetria, quindi per porre dei vincoli sperimentali su questa componente delle equazioni di stato bisogna misurare il flusso di nucleoni emessi in reazioni tra nuclei ricchi di neutroni a differenti energie. A tale scopo è stato eseguito uno studio di fattibilità per l'accoppiamento del rivelatore Chimera (attualmente installato presso i Laboratori Nazionali del Sud dell'INFN) ed il Large Area Neutron Detector (LAND) del GSI (Darmstadt, Ge). Nel mese di settembre sono stati effettuati dei test presso l'heavy ion synchrotron SIS, e gli ottimi risultati ottenuti hanno determinato l'avvio dei lavori per il trasferimento di chimera al GSI.

Per quanto riguarda l'analisi dei dati raccolti negli anni precedenti, nel corso del 2009 il gruppo di ricerca ha completato l'identificazione in carica e massa delle particelle prodotte durante le reazioni $^{124}\text{Sn} + ^{27}\text{Al}$ a 25 MeV/nucleone e $^{112}\text{Sn} + ^{64}\text{Ni}$ a 35 MeV/nucleone nonché la valutazione del tempo di volo delle particelle prodotte durante la reazione $^{124}\text{Sn} + ^{58}\text{Ni}$ a 25 e 35 MeV/nucleone. Il gruppo ha inoltre iniziato l'analisi fisica dei dati della reazione $^{112}\text{Sn} + ^{112}\text{Sn}$ a 35 MeV/nucleone acquisiti durante la campagna di misure del 2003, e l'identificazione in carica e massa delle particelle prodotte nell'ambito della campagna di misure TIMESCALE del 2008.

Elenco lavori pubblicati su riviste internazionali con referee:

- 1) A. M. Visco, L. Torrisi, N. Campo, U. Emanuele, A. Trifirò, M. Trimarchi '*Mechanical performance of electron-beam-irradiated UHMWPE in vacuum and in air*' **JOURNAL OF BIOMEDICAL MATERIALS RESEARCH PART B-APPLIED BIOMATERIALS 89B/1** (2009) 55-64
- 2) De Filippo E, Amorini F, Anzalone A, Auditore L, Baran V, Berceanu L, Blicharska J, Brzychczyk J, Borderie B, Bougault R, Bruno M, Brzychczyk J, Cardella G, Cavallaro S, Chatterjee MB, Chbihi A, Colonna M, D'Agostino M, Dayras R, Di Toro M, Emanuele U., Frankland J, Galichet E, Gawlikowicz W, Geraci E, Giustolisi F, Grassi L, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Guinet D, Kowalski S, La Guidara E, Lanzalone G, Lanzano G, Le Neindre N, Lombardo I, Maiolino C, Majka Z, Pagano A, Papa M, Petrovici M, Piasecki E, Pirrone S, Planeta R, Politi G, Pop A, Porto F, Rivet MF, Rosato E, Rizzo F, Russo S, Russotto P, Schmidt K, Siwek-Wilczynska K, Skwira I, Sochocka A, Swiderski L, Trifiro A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M, Wieleczko JP, Wilczynski J, Zetta L, Zipper W '*Dynamical signals in fragmentation reactions: time scale determination from three fragments correlations by using the 4 pi Chimera multidetector*' **Acta Physica Polonica B 40 No 4** (2009) 1199-1207

Elenco lavori pubblicati su riviste nazionali con referee:

- 1) V. Giannone, C. Longo, L. Auditore, U. Emanuele, D. Loria, S. Lo Nigro and L. Lo Nigro "*Applicazione dell'irraggiamento per la sanificazione di materie prime e ingredienti alimentari*", **Aromi Additivi Semilavorati, Ingredienti Alimentari, (Chiriotti Editori), Anno 8, N. 47**, (Novembre/Dicembre 2009), 13-15

Elenco Proceedings di Conferenze Nazionali ed Internazionali:

- 1) Cardella G, Amorini F, Anzalone A, Arena N, Auditore L, Barna R, Benisz A, Berceanu I, Chatterjee MB, Cavallaro S, De Filippo E, Emanuele U, Gawlikowicz W, Geraci E, Grassi L, Giuliani G, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Kowalski S, La Guidara E, Lanzalone G, Lombardo I, Lo Nigro S, Loria D, Maiolino C, Nicolis NG, Pagano A, Papa M, Pawelczak I, Petrovici M, Pirrone S, Planeta R, Politi G, Pop A, Porto F, Previdi F, Quinlan M, Rizzo F, Rosato E, Russotto P, Schroder WU, Skwira-Chalot I, Siwek-Wilczynska K, Schmidt K, Sochocka A, Swiderski L, Trifiro A, Trimarchi M, Toke J, Verde G, Vigilante M, Wilczynski J, Zetta L, Zipper W '*Isospin Effects in Heavy-Ion Collisions: Some Results From CHIMERA Experiments At LNS And Perspectives With Radioactive Beams*' **Perspectives in Nuclear Physics 1120** (2009) 38-43
- 2) G.Cardella, F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, E.De Filippo, E.Geraci, L.Grassi, A.Grzeszczuk, P.Guazzoni, E.La Guidara, G.Lanzalone, I.Lombardo, S.Lo Nigro, D.Loria, C.Maiolino,

A.Pagano, M.Papa, S.Pirrone, G.Politi, F.Porto, F.Rizzo, P.Russotto, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Verde, M.Vigilante and L.Zetta "Study of nuclei far from stability by using the CHIMERA 4π Detector and radioactive beams at LNS" **Nuclear Structure and Dynamics '09: Proceedings of the International Conference, Dubrovnik (Croatia), 4-8 May 2009** 309-312

Elenco comunicazioni a Congressi Nazionali ed Internazionali:

- 1) L. Auditore, R.C.Barnà, D.Loria, E.Morgana, A.Trifirò, M.Trimarchi, M Carpinelli, A.Franconieri, M.Gambaccini: "Material Recognition by Means of Different Bremsstrahlung Beams: Is that Really Possible?" **Particle Acceleration Conference PAC09, Vancouver, Canada May 4-8 2009.**
- 2) V. Giannone, C. Longo, L. Auditore, U. Emanuele, D. Loria, S. Lo Nigro and L. Lo Nigro "Effetti di fasci di elettroni sulla sopravvivenza di agenti patogeni tellurici delle piante", **9° Congresso Italiano di Scienza e Tecnologia degli Alimenti, Fiera Milano, 11-12 giugno 2009**
- 3) N.Campo, A.M.Visco, L.Torrisi, D.Loria, E.Morgana "Degradazione bio-ossidativa del polietilene biomedico modificato con fasci di elettroni". **IX Giornata di Studio INGEGNERIA BIOMEDICA: progettazione dei materiali protesici ed aspetti clinico-applicativi Messina, 3-07-2009.**
- 4) Franconieri A, Gambaccini M, Marziani M, Taibi A, Auditore L, Barnà R.C, Loria D., Morgana E, Trifirò A, Trimarchi M "Caratterizzazione di una sorgente Linac di raggi X con tecniche di imaging". **Società Italiana di Fisica - XCV Congresso Nazionale - Bari 28 Settembre - 3 Ottobre 2009.**
- 5) L.Auditore, R.C.Barnà, M.Carpinelli, A.Franconieri, M.Gambaccini, D.Loria, E.Morgana, A.Trifirò, M.Trimarchi "Sviluppo di una tecnica di riconoscimento dei materiali mediante l'uso di due fasci bremsstrahlung." **Società Italiana di Fisica - XCV Congresso Nazionale - Bari 28 Settembre - 3 Ottobre 2009.**
- 6) Amorini F, Anzalone A, Auditore L, Cardella G, Cavallaro S, Chatterjee MB, De Filippo E, Geraci E, Grassi L, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Han J, La Guidara E, Lanzalone G, Lombardo I, Lo Nigro S, Loria D, Maiolino C, Pagano A, Papa M, Pirrone S, Politi G, Porto F, Rizzo F, Russotto P, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M, Zetta L "Il sistema di tagging per fasci radioattivi per il multi rivelatore CHIMERA". **Società Italiana di Fisica - XCV Congresso Nazionale - Bari 28 Settembre - 3 Ottobre 2009.**
- 7) Amorini F, Anzalone A, Auditore L, Cardella G, Cavallaro S, Chatterjee MB, De Filippo E, Geraci E, Grassi L, Grzeszczuk A, Guazzoni P, Han J, La Guidara E, Lanzalone G, Lombardo I, Lo Nigro S, Loria D, Maiolino C, Pagano A, Pirrone S, Politi G, Porto F, Rizzo F, Russotto P, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M, Zetta L "Studio di reazioni indotte da nuclei instabili nella regione del ^{11}Be con il multirivelatore CHIMERA". **Società Italiana di Fisica - XCV Congresso Nazionale - Bari 28 Settembre - 3 Ottobre 2009**

6.3 Reazioni nucleari su nucleoni e nuclei

Componenti: Prof. Giorgio Giardina (*Responsabile*), Prof. Giovanni Fazio, Dr. Giuseppe Mandaglio (Assegnista) e Dr. Marina Manganaro (Dottorando del XXI ciclo).

Nella presente ricerca è stata investigata la influenza della orientazione angolare degli assi di simmetria dei nuclei (al momento della loro interazione e formazione del sistema dinucleare) sulla produzione dei residui di evaporazione ottenuti a seguito della diseccitazione del nucleo composto.

Sono state studiate le sezioni d'urto dei residui per la reazione $^{48}\text{Ca}+^{154}\text{Sm}$ nell'intervallo di energia $E_{\text{c.m.}} = 130\text{-}200$ MeV ed intervalli angolari di orientazione del bersaglio $\square_{\text{T}} < 45^\circ$ o $\square_{\text{T}} > 45^\circ$. Le sezioni d'urto variano tra 10 – 100 mb nel primo caso, e tra 0.1 e 10 mb nel secondo caso.

La decrescita delle sezioni d'urto dei residui nelle reazioni con nuclei pesanti è spiegata dalla crescita dalla competizione tra i processi di quasifissione e completa fusione, e a causa della decrescita della probabilità di sopravvivenza dei nuclei caldi e rotanti nei confronti del processo di fissione lungo i vari step della cascata di diseccitazione del nucleo composto. I dati sperimentali dei residui e dei frammenti di fissione e quasifissione nella reazione $^{48}\text{Ca}+^{154}\text{Sm}$ sono analizzati nell'ambito del metodo teorico combinato basato sul concetto del sistema dinucleare e del modello statistico. Tale metodo di calcolo è stato inoltre utilizzato per trovare le condizioni ottimali nel processo di sintesi del nuovo elemento superpesante $Z=120(A=302)$ attraverso lo studio delle funzioni di diseccitazione dei residui di evaporazione nelle reazioni $^{54}\text{Cr}+^{248}\text{Cm}$, $^{58}\text{Fe}+^{244}\text{Pu}$ e $^{64}\text{Ni}+^{238}\text{U}$. I calcoli dimostrarono che l'utilizzo della reazione $^{54}\text{Cr}+^{248}\text{Cm}$ è preferibile in confronto alle altre due reazioni prima menzionate.

È stato studiato inoltre lo spettro di probabilità della emissione di bremsstrahlung in coincidenza con il decadimento \square del ^{226}Ra ($E_{\square} \square 4.8$ MeV) attraverso l'uso del modello precedentemente realizzato e descritto nel caso del decadimento \square del ^{210}Po ($E_{\square} \square 7.7$ MeV)

Il gruppo di ricerca ha partecipato durante l'anno 2009 all'analisi dati dell'esperimento GRAAL condotto presso la facility ESRF di Grenoble per lo studio della fotoproduzione di mesoni ottenuti nelle reazioni con proiettili \square polarizzati di energia 0.6 - 1.5 GeV su un bersaglio di deuterio liquido. Sono state estratte le asimmetrie di fascio per la fotoproduzione dei mesoni \square , \square' , \square e \square su neutrone ed è stato inoltre misurato l'impulso di Fermi nel deuterio. È stato trovato che l'asimmetria di fascio di \square e \square su protone libero e quasi libero risultano molto simili, e ciò ha consentito di arguire che un analogo comportamento è atteso sulle reazioni di fotoproduzione su neutrone quasi libero e sul neutrone libero nell'ipotesi che questo possa essere prodotto.

Lo studio teorico delle asimmetrie di fascio nella fotoproduzione di \square su protone libero e quasi libero ha portato alla valutazione dell'interferenza tra le risonanze S11(1535) e D13(1520). È stato possibile inoltre estrarre il contributo della risonanza F15(1670) evidenziata dalla forma piccata in avanti dell'asimmetria di fascio.

Nel caso della produzione del mesone \square nella reazione su neutrone è stato osservato il contributo predominante della risonanza D15(1675). Dal confronto fra la fotoproduzione di \square su neutrone e protone è emerso il ruolo della risonanza P11(1670) e dell'interferenza tra le risonanze S11(1650) e P11(1710).

Lo studio dell'asimmetria di fascio del \square su neutrone ha consentito inoltre di stimare il contributo della risonanza P11(1710).

Publicazioni

1. L. Casano, A. D'Angelo, J.P. Didelez, D. Franco, G. Gervino, F. Ghio, G. Giardina, B. Girolami, A. Giusa, M. Guidal, E. Hourany, R. Kunne, A. Lapik, P. Levi Sandri, A. Lleres, M. Manganaro, D. Moricciani, A.N. Mushkarenkov, V. Nedorezov, C. Randieri, D. Rebreyend, N. Rudnev, G. Russo, C. Schaerf, M.L. Sperduto, M.C. Sutura, A. Turinge, V. Vegna (GRAAL Collaboration), A. Fix, S.S.Kamalov, and L. Tiator, "Measurement of \square beam asymmetry in \square photoproduction off the neutron in the second and third resonances region", Eur. Phys. J. A 42, 151 (2009).
2. S. P. Maydanyuk, V.S. Olkhovsky, G. Giardina, G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro: "Bremsstrahlung emission accompanying \square -decay of deformed nuclei", Nucl. Phys. A 823, 38 (2009).

3. A. Lleres, O. Bartalini, JP. Bocquet, P. Calvat, M. Capogni, L. Casano, A. D'Angelo, JP. Didelez, R. DiSalvo, A. Fantini, D. Franco, C. Gaulard, G. Gervino, F. Ghio, B. Girolami, A. Giusa, M. Guidal, E. Hourany, R. Kunne, V. Kuznetsov, A. Lapik, P. LeviSandri, F. Mammoliti, G. Mandaglio, D. Moricciani, AN. Mushkarenkov, V. Nedorezov, L. Nicoletti, C. Perrin, C. Randieri, D. Rebreyend, F. Renard, N. Rudnev, T. Russew, G. Russo, C. Schaerf, ML. Sperduto, MC. Sutura, A. Turinge, V. Vegna: "Measurement of beam-recoil observables O_x , O_z and target asymmetry for the reaction $\gamma p \rightarrow K \Lambda$ ", Eur. Phys. J. A 39, 149 (2009).
4. A.K. Nasirov, G. Giardina, G. Mandaglio, M. Manganaro, F. Hanappe, S. Heinz, S. Hofmann, A. I. Muminov, W. Scheid: "Quasifission and fusion-fission in massive nuclei reactions. Comparison of reactions leading to the $Z=120$ element", Phys.Rev. C 79, 024606 (2009).
5. A. K. Nasirov, G. Fazio, S. Hofmann, G. Giardina, A. I. Muminov, G. Mandaglio, M. Manganaro, and W. Scheid "Comparison of the Characteristics of the Fusion-Fission and QuasiFission Products in Reactions with Heavy Ions" Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics 73, 1476 (2009) (ISSN 1062-8738), and in Russian in Izvestiya Rossiiskoi Akademii Nauk. Seriya Fizicheskaya 73, 1571 (2009).
6. G. Mandaglio, G. Fazio, G. Giardina, F. Hanappe, M. Manganaro, A. I. Muminov, A. K. Nasirov, C. Saccà, "Investigation of the Role of the Projectile-Target Orientation Angles on the Evaporation Residue Production", Physics of Atomic Nuclei 72, 1693 (2009).
7. A.K. Nasirov, G. Fazio, G. Giardina, G. Mandaglio, M. Manganaro, F. Hanappe, A.I. Muminov, W. Scheid "Comparison of the fusion-fission and quasifission mechanisms in heavy-ion collisions", Int. Jour. of Mod. Phys. E, 18, 841 (2009).
8. G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Giardina, V. Bellini, A. Giusa, F. Mammoliti, C. Randieri, G. Russo, M.L. Sperduto, C. Sutura, L. Casano, A. D'Angelo, R. Di Salvo, A. Fantini, D. Franco, D. Moricciani, C. Schaerf, V. Vegna, P. Levi Sandri, B. Girolami, F. Ghio, G. Gervino, J.P. Bocquet, A. Lleres, D. Rebreyendi, F. Renardi, A.S. Ignatov, A.M. Lapik, A.N. Mushkarenkov "Vertex identification of events in photonuclear reactions by cylindrical multiwire proportional chambers" Radiat. Eff. Defects Solids 164, 325 (2009).
9. G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina, C. Saccà, A. I. Muminov, A. K. Nasirov "Role of the orientation angles of reacting nuclei in evaporation residue production" Radiat. Eff. Defects Solids 164, 287 (2009).
10. G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Giardina, G. Fazio, C. Saccà, S. P. Maydanyuk, V. S. Olkhovsky, N. V. Eremin, A. A. Paskhalov, D. A. Smirnov "Radiation of bremsstrahlung accompanying the α -decay of heavy nuclei" Radiat. Eff. Defects Solids 164, 283 (2009).
11. F. Mammoliti, V. Bellini, A. Giusa, C. Randieri, G. Russo, M. L. Sperduto, M. C. Sutura, A. D'Angelo, R. Di Salvo, A. Fantini, D. Franco, D. Moricciani, C. Schaerf, V. Vegna, P. Levi Sandri, G. Mandaglio, G. Giardina, "Charged particle detection at GRAAL" Radiat. Eff. Defects Solids 164, 357 (2009).
12. G. Mandaglio, G. Fazio, G. Giardina, M. Manganaro, A. I. Muminov, A. K. Nasirov: "Influence of the projectile-target orientation angles on the production of residue nuclei" Proc. of The 2-nd International .Conf. "Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy", Kyiv, Ukraine, 9-15 June, 2008, Editors I.M. Vishnevskiy, V. M. Kolomietz, I. M. Kadenko, INP, Kyiv, p.187-191 (2009).
13. A. K. Nasirov, G. Giardina, F. Hanappe, S. Heinz, S. Hofmann, G. Mandaglio, M. Manganaro, A. I. Muminov, W. Scheid: "Analysis of yields of fusion-fission and quasifission fragments in heavy ion collisions" Proc. of The 2-nd International .Conf. "Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy", Kyiv, Ukraine, 9-15 June, 2008, Editors I.M. Vishnevskiy, V. M. Kolomietz, I. M. Kadenko, INP, Kyiv, 2007, p.342-346 (2009).
14. S. P. Maydanyuk, V. S. Olkhovsky, N. V. Eremin, G. Giardina, G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro, C. Saccà "Bremsstrahlung emission accompanying α -decay of deformed nuclei" Proc. of The 2-nd International .Conf. "Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy", Kyiv, Ukraine, 9-15 June, 2008, Editors I.M. Vishnevskiy, V. M. Kolomietz, I. M. Kadenko, INP, Kyiv, p.417-421 (2009).

Comunicazioni a congressi

1. G. Giardina, G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro, A. Nasirov, C. Saccà "Expectations and limits to synthesize nuclei with $Z > 120$ " International Conference Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei, Messina 5-9 Ottobre 2009.
2. H. Q. Zhang, C. L. Zhang, C. J. Lin, A. K. Nasirov, G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Giardina, "Competition between fusion-fission and quasifission processes in $^{32}\text{S} + ^{184}\text{W}$ reaction"; the 10th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions, August 16-21, 2009 Beijing, Cina.
3. A K Nasirov, A I Muminov, G Giardina, G Mandaglio, M Manganaro, "Mixing of fusion-fission and quasifission products in reaction with massive nuclei", XVIII International School on Nuclear Physics, Neutron Physics and Applications September 21 - 27, 2009 Varna, Bulgaria.
4. G. Mandaglio et al., "Data analysis and event identification of the $\alpha + n \rightarrow \alpha + p$ reaction", XXXI Mazurian Lake Conference "Nuclear Physics and the road to FAIR", August 30 - September, 6 2009 Piaski Poland.
5. G. Mandaglio et al., "Beam Asymmetry α and invariant mass measurement on the α photoproduction" International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.

6. A.K. Nasirov, A.I. Muminov, G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro "Mechanism producing fission-like binary fragments in heavy ion collisions" International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.
7. V.A. Drozdov, D.O. Eremenko, G. Mandaglio, M. Manganaro, S.Yu Platonov, O.V. Fotina, G.A. Yuminov "Dynamic model of angular distributions of fission and quasifission fragments" International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.
8. M. Manganaro et al., "Preliminary results on the π^+ photoproduction at GRAAL" International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.
9. N.V. Eremin, S.S. Markochev, A.A. Paskhalov, G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina "New experimental method of investigation rare nuclear transformations accompanying atomic processes: bremsstrahlung emission in spontaneous fission of ^{252}Cf " International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.
10. S.P. Maydanyuk, V.S. Olkhovskiy, G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Giardina, G. Fazio, C. Saccà "Bremsstrahlung emission accompanying decays, fission and collisions" International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.
11. V. Vegna et al. "OMEGA photoproduction at GRAAL" International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.
12. V.A. Drozdov, D.O. Eremenko, G. Mandaglio, M. Manganaro, S.Yu. Platonov, O.V. Fotina, O.A. Yuminov "Dynamic-statistical approach to the description of the induced fission in wide excitation energy range" International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.
13. A. Mushkarenkov et al., "Photoproduction of $\pi^+\pi^-$ on the deuteron at $E_\pi=0.7-1.5\text{ GeV}$ " International Conference "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" Messina 5-9 Ottobre 2009.

6.4 Materiali disordinati

Tematiche scientifiche:

A. Dinamica vibrazionale e di rilassamento in vetri e polimeri amorfi

Ricercatori: Giovanni Carini, Giuseppe Carini, Valeria Conti Nibali, Cristina Crupi, Giovanna D'Angelo, Gaspare Tripodo.

(i) **Rilassamenti secondari in network di polimeri eterociclici.**

La dipendenza dalla temperatura del modulo di storage E' e della frizione interna Q^{-1} di network di polimeri eterociclici reticolati rivelano andamenti anelastici che sono principalmente governati dal rilassamento primario α e da quello secondario β , a più basse temperature. L'aggiunta di cross-links nel network di polimero lineare causa lo shift verso più alte temperature della transizione vetrosa. Differentemente dal rilassamento α , la cui intensità diminuisce al crescere della concentrazione di cross-links, l'intensità del rilassamento β aumenta notevolmente. Questa osservazione implica l'assenza di qualunque gerarchia dinamica fra i moti segmentali locali e cooperativi in questi sistemi.

(ii) **Attenuazione e velocità del suono a frequenze ultrasoniche ed ipersoniche in vetri borati di Cesio.**

Lo studio delle curve di frizione interna ipersoniche, determinate tramite spettroscopia Brillouin ad alta risoluzione fra 15 K e 300 K in vetri borati di Cesio, mostra che due differenti meccanismi dinamici contribuiscono all'attenuazione del suono nell'intervallo dei GHz: (i) il moto localizzato di stati di difetto e (ii) l'anarmonicità vibrazionale. La dipendenza dalla temperatura dell'attenuazione ipersonica è caratterizzata da un picco, la cui temperatura T_{peak} si adatta molto bene sul plot di Arrhenius determinato dalle temperature dei picchi, rivelati a frequenze ultrasoniche, indicando che i rilassamenti termicamente attivati, che determinano l'attenuazione ultrasonica, contribuiscono anche alla perdita ipersonica. Per $T > T_{\text{peak}}$, 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.

(iii) **Dinamica vibrazionale di bassa energia in vetri borati.**

L'analisi del Boson Peak (BP) in vetri borati alcalini $(M_2O)_{0.14}(B_2O_3)_{0.86}$, con $M=Li, Na, K, Rb$ e Cs , è stata effettuata tramite misure di scattering inelastico della luce (Raman) e dei neutroni e di calore specifico a basse temperature. I risultati mostrano che l'introduzione di differenti ioni alcalini nella matrice borata producono cambi significativi nella dinamica vibrazionale a bassa frequenza. Tale studio ha permesso di ipotizzare che le vibrazioni originanti il BP derivano da regioni di bassa densità atomica, che ospitano i cationi alcalini. I modi vibrazionali di tali regioni sono regolati dai vincoli imposti dai cationi sugli spostamenti trasversi delle unità strutturali costituenti le regioni stesse.

(iv) **Dinamica vibrazionale di vetri di GeO_2 permanentemente densificati**

La dipendenza dalla densità del Boson peak (BP), osservato nella densità degli stati vibrazionali, e del calore specifico a bassa temperatura è stata investigata in vetri di GeO_2 , permanentemente densificati tramite pressioni variabili nell'intervallo fra 2 e 6 GPa. La densificazione determina una evoluzione del BP e del picco in C_p/T^3 , rispettivamente verso più alte frequenze e più alte temperature, che sono maggiori delle variazioni subite dal continuo elastico. L'esistenza di una master curve per i vetri densificati prova che il numero totale dei modi d'eccesso, che determinano sia il BP che il picco in C_p/T^3 , rimane costante. L'analisi dei dati sperimentali permette di calcolare una scala di lunghezze di correlazione ξ che diminuisce all'aumentare della densificazione.

(v) **Dinamica rotazionale di bassa energia in cristalli contenenti terre rare**

L'analisi della struttura fine (FS) delle linee degli spettri di assorbimento, indotte dalle transizioni del campo cristallino (CF) degli ioni di terre rare Er^{3+} and Tm^{3+} disciolti in monocristalli di BaY_2F_8 , ha rivelato l'esistenza di una struttura rotazionale usualmente coperta dalle più comuni ampie linee di assorbimento elettronico. Sequenze di linee deboli, molto strette

(0.03–0.1 cm^{-1}) e finemente spaziate (0.2–0.8 cm^{-1}) sono state osservate negli spettri di assorbimento effettuati fra 2000 e 24000 cm^{-1} ed a una temperatura di 9 K. Le linee FS svaniscono a temperature fra 40 e 60 K e la stretta spaziatura suggerisce che esse possono essere attribuite alla eccitazione simultanea delle transizioni elettroniche CF degli ioni di RE e dai modi di rotazione ostacolata o di librazione dei gruppi $\text{RE}^{3+}\text{-F}^-$. Misure complementari di calore specifico fra 1.5 e 25 K mostrano che i cristalli drogati con Er^{3+} rivelano un contributo addizionale oltre a quello vibrazionale, che scala con la concentrazione di Er^{3+} . Tale contributo d'eccesso è stato interpretato in termini di due anomalie di Schottky ad alte ($T_{\text{peak}}=17$ K) e basse ($T_{\text{peak}}<1$ K) temperature derivanti rispettivamente dalle transizioni elettroniche CF fra i più bassi livelli del multipletto fondamentale e dalle eccitazioni corrispondenti alle coppie di livelli separati da 0.55 e 0.36 cm^{-1} , in accordo con le linee FS osservate negli spettri di assorbimento.

B. Proprietà strutturali e dinamiche di sistemi biologici.

Ricercatori: Cristina Crupi, Giovanna D'Angelo, Valeria Conti Nibali.

Sono stati investigati con i neutroni i moti molecolari lenti (scala temporale delle decine di picosecondi) di membrane fosfolipidiche idratate altamente orientate costituite da DMPC(1,2- dimyristoyl-sn-glycero-3-phosphatidylcholine) e da DMPC/Gramicidina a varie concentrazioni. Dall'analisi in temperatura dell'intensità di scattering a vari vettori q scambiati sono ottenute informazioni sullo scongelamento dinamico delle catene aciliche. Inoltre dall'osservazione della dipendenza in q dell'intensità scatterata a differenti temperature sono state ottenute informazioni riguardanti le dinamiche parallele e perpendicolari al piano della membrana. L'inclusione della Gramicidina appare influenzare i moti delle catene.

Progetti di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale:

- (i) **PRIN 2007 - (Prot. 20078F2XHX_004), Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Gaspare Tripodo, "Dinamica vibrazionale e di rilassamento in vetri permanentemente densificati tramite pressioni fra 1 e 10 GPa" (responsabile scientifico: G. Carini, coordinatore nazionale: prof. F. Sacchetti),**

Pubblicazioni.

1. "Boson peak in alkaline borate glasses: Raman spectroscopy, neutron scattering and specific heat measurements", G. D'Angelo, G. Carini, C. Crupi, M. Koza, G. Tripodo, C. Vasi, *Phys. Rev. B* **79**, 014206 (2009). 128.
2. "Secondary relaxations in heterocyclic polymer networks: a study of mechanical spectroscopy", Giovanni Carini Jr, Giuseppe Carini, Sergio La Rocca, Gaspare Tripodo, Antonio Bartolotta, Gaetano Di Marco, Eleonora G. Privalko, *J. Materials Science and Engineering A* **521-522**, 251-254 (2009).
3. "Vibrational dynamics of permanently densified GeO_2 glasses: densification-induced changes of the boson peak", L. Orsingher, A. Fontana, G. Carini Jr, G. Carini, G. Tripodo, T. Unruh, U. Buchenau, *J. Chem. Phys.*, (February 2010) accepted.
4. "Hypersonic attenuation in cesium borate glasses: Relaxation and Anharmonicity", Giovanni Carini Jr , Gaspare Tripodo, Lars Borjesson, *J. Materials Science and Engineering A* **521-522**, 247-250 (2009).
5. "Hindered rotations probed by rare earths in crystals: Er^{3+} and Tm^{3+} in BaY_2F_8 ", A. Baraldi, E. Buffagni, R. Capelletti, M. Mazzer, N. Magnani, G. Carini, Jr. and G. D'Angelo, *Phys. Rev.* **B 80**, 155121 (2009).
6. "Relation between Low-Temperature Thermal Conductivity and the Specific Heat of Cesium Borate Glasses", G. D'Angelo, C. Crupi, G. Tripodo and G. Salvato *J. Phys. Chem. B* **114**, 2467–2475 (2010).
7. "Effects of thermal history on the acoustic attenuation of dry and wet B_2O_3 glasses", G. D'Angelo, C. Crupi, V. Conti Nibali and M.A. Ramos, *Materials Science and Engineering: A* **521-522**, 263-267 (2009)

Partecipazioni e Comunicazioni a congressi

1. "Local elastic heterogeneities and low frequency vibrational dynamics in glasses, G. D'Angelo, 6th Int. Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, September 2009, Rome, Italy. Invited talk.
2. "Local and cooperative segmental dynamics in model heterocyclic polymer networks", G. Carini, 6th Int. Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, September 2009, Rome, Italy. Invited talk.
3. "Vibrational dynamics of permanently densified GeO₂ glasses: densification induced changes of the boson peak", L. Orsingher, A. Fontana, G. Carini Jr, G. Carini, G. Tripodo, T. Unruh, U. Buchenau, 6th Int. Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, September 2009, Rome, Italy.
4. "Low temperature thermal and acoustic properties of permanently densified vitreous GeO₂", Giovanni Carini Jr, Giovanna D'Angelo, Gaspare Tripodo, Laura Orsingher, Aldo Fontana, 6th Int. Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, September 2009, Rome, Italy.
5. "Influence of Acetyl-D-Glucosamine (NAG) Inhibitor on Low frequency Dynamics of Lysozyme", C. Crupi, G. D'Angelo, U. Wanderlingh, V. Conti Nibali and C. Vasi, 13th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, 28 Agosto- 2 Settembre 2009, Palermo , Italy.
6. "Microscopic origin of the very-low energy vibrational dynamics in proteins", Giovanna D'Angelo, Valeria Conti Nibali, Cristina Crupi, Alessandro Paciaroni, , Ulderico Wanderlingh, 7th European Biophysics Congress, EBSA 2009 meeting, July 2009, Genova, Italy.
7. "Phospholipid membranes dynamics: molecular dynamics vs neutron scattering", V. Conti Nibali, M.Tarek, G.D'Angelo, U.Wanderlingh, 7th European Biophysics Congress, EBSA 2009 meeting, July 2009, Genova, Italy.
8. "Hydrogen dynamics in bio-mimetic membrane, and the effect of pore forming peptides", U. Wanderlingh, G.D'Angelo, V.Conti Nibali, C.Crupi, 7th European Biophysics Congress, EBSA 2009 meeting, July 2009, Genova, Italy.
9. "Boson Peak in alkaline borate glasses: Raman spectroscopy, neutron scattering and specific heat measurements", C. Crupi, G. D'Angelo, G. Carini, and G. Tripodo, Boll. SIF, pag. 39; XCV Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica", Settembre 2009, Bari, Italy.
10. "Single-particle and collective dynamics of protein hydration water", V. Conti Nibali, G. D'Angelo, M. Tarek, A. Paciaroni, Boll. SIF, pag. 50; XCV Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica", Settembre 2009, Bari, Italy.
11. "Acoustic behaviour of normal and permanently densified GeO₂ glasses", Giovanni Carini Jr, Gaspare Tripodo, Laura Orsingher, Aldo Fontana, Boll. SIF, pag. 43; XCV Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica", Settembre 2009, Bari, Italy.

Collaborazioni nazionali ed internazionali

- Prof.ssa R. Capelletti, Dip. Fisica, Università di Parma, Italy
- 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
- Dr. Miguel A. Gonzalez, Institute Laue-Langevin, Grenoble, France.
- Prof. Miguel A. Ramos, Departamento de Fisica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid
- Prof. Alexander Fainleb, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 02160 Kyiv, Ukraine

6.5 Processi di rilassamento in sistemi disordinati: liquidi glass-forming e vetri a conduzione ionica

Componenti: Maria Cutroni, Mauro Federico, Anna Raimondo, Andrea Mandanici

(a) Liquidi glass-forming. Sono state studiate le proprietà dinamiche dei liquidi glass-forming ponendo particolare attenzione ai processi di rilassamento secondari in relazione al fenomeno della transizione vetrosa. Le ricerche sono state basate sul confronto fra risposta dielettrica e risposta meccanica dei materiali. Sono state effettuate misure di attenuazione e velocità ultrasonica da temperatura ambiente fino alla temperatura di transizione vetrosa su diversi liquidi glass-forming; le proprietà dielettriche sono state studiate tramite un approccio ad alta risoluzione. I risultati hanno consentito, nel caso di una sostanza a basso peso molecolare e a carattere molto debolmente polare, l'etilcicloesano, di mettere in evidenza un contributo rilassamentale le cui caratteristiche sono in accordo con quelle del processo di rilassamento secondario cosiddetto di Johari-Goldstein [*Mat. Sci. Eng. A* 521, 279 (2009)], secondo il criterio proposto da K.L. Ngai.

(b) Vetri a conduzione ionica. E' stato esteso lo studio riguardante le proprietà dinamiche dei vetri molibdati d'argento, ponendo l'attenzione sulle caratteristiche di dilatazione termica in funzione della temperatura nel vasto intervallo da 5 K fino in prossimità della temperatura di transizione vetrosa dei materiali considerati. Dal punto di vista dell'indagine sperimentale, in collaborazione con il prof. M.A. Ramos ed i ricercatori del Laboratorio de Bajas Temperaturas della Universidad Autonoma de Madrid, sono stati messi a confronto due diversi metodi di misura del coefficiente di dilatazione termica. I risultati sono stati discussi [*J. Chem. Phys.* 130, 204508 (2009)] in relazione alle proprietà dinamiche degli stessi materiali e di altri sistemi amorfi poste in luce da indagini precedenti. Su vetri ionici di diversa composizione sono state effettuate misure dielettriche in funzione della frequenza (1 mHz – 40 GHz) e della temperatura (450 K – 3 K), studiando principalmente il confronto con le proprietà meccaniche a frequenze ultrasoniche [*Mat. Sci. Eng. A* 521, 276 (2009)].

Sono state anche intraprese attività di ricerca sperimentale su nuove tematiche proseguendo la collaborazione con l'Università degli Studi di Pavia nell'ambito di un

Progetto di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale PRIN 2007-2009 (coordinatore nazionale Prof. L. Manzo) sulla "Caratterizzazione chimico-fisica e profilo tossicologico in vitro e in vivo di nanoparticelle di silice e nanotubi di carbonio"

Publicazioni

1) "A trace of the Johari-Goldstein relaxation in the mechanical response of supercooled ethylcyclohexane ?", A. Mandanici, M. Cutroni, *Materials Science and Engineering A*, 521-522, 279-282 (2009)

2) "Thermal expansion of silver iodide-silver molybdate glasses at low temperatures" A. Mandanici, A. Raimondo, M. Cutroni, M. A. Ramos, J. G. Rodrigo, S. Vieira, C. Armellini, F. Rocca, *J. Chem. Phys.*, 130, 204508 (2009)

3) "Mechanical relaxation in a ternary silver borate below the glass transition temperature and corresponding features of the electrical response" A. Mandanici, A. Raimondo, M. Cutroni, M. Federico, F. Rocca, *Materials Science and Engineering A*, 521-522, 276-278 (2009)

Comunicazioni a congressi

1. A. Mandanici, M. Cutroni,
"Secondary relaxations in ethylcyclohexane above and below the calorimetric glass transition temperature"
6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma, 30 Aug – 4 Sept. 2009
2. A. Mandanici, M. Cutroni, M. Federico,
"Analogies between the dielectric properties of some AgI-based ionic glasses and their mechanical response at ultrasonic frequencies"
6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems, Roma, 30 Aug – 4 Sept. 2009
3. A. Mandanici, M. Cutroni,
"Dynamical properties of ethylcyclohexane investigated by dielectric and mechanical spectroscopy"
XCV Congresso Nazionale - Società Italiana di Fisica, Bari 28 Sept-3 Oct. 2009
Oral presentation

Collaborazioni nazionali e internazionali

- Dipartimento di Chimica-Fisica, Università di Pavia, prof. A. Magistris, prof. P. Mustarelli
- Institut für Physikalische-Chemie, University of Münster (D), prof. K. Funke; Sonderforschungsbereich SFB 458 'Ionic motion in materials with disordered structures – from elementary steps to macroscopic transport'.
- CNR – ITC Trento, Istituto per la Fotonica e le Nanotecnologie, Dott. F. Rocca
- Dipartimento di Fisica, Università di Trento, prof. G. Dalba, prof. P. Fornasini
- CNR- Istituto per i Processi Chimico-Fisici, Messina, Dott. A. Triolo
- 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 Física de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid
- Prof. J. C. Dyre, IMFUFA Roskilde University, "Glass and time" Danish Research Foundation Centre for Viscous Liquids Dynamics
- Prof. Rolf Pelster, Universität des Saarlandes, Saarbrücken.

6.6 Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biotecnologico – Metodologie fisiche applicate ai beni ambientali ed energia.

Componenti: Prof. Salvatore Magazù, Prof. Giacomo Maisano, Prof. , Dr.^{ssa} Federica Migliardo, Dr. Antonio Benedetto, Dr. Emanuele Calabrò, Dr. Francesco Parrillo, Dr. Alessandro Magazzù

Le tematiche di ricerca affrontate nell'anno 2009 sono state molteplici e sotto alcuni aspetti anche diverse, per quanto emerga un comune motivo conduttore: l'uso integrato di tecniche di indagine sperimentali 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 sui comportamenti macroscopici (processi di rilassamento, idratazione, coordinazione, denaturazione, resilienza, flessibilità, etc...).

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

Grazie all'attivazione di nuove collaborazioni scientifiche e al consolidamento di quelle già esistenti, sono state impiegate le tecniche di indagine sperimentale disponibili, principalmente, presso i laboratori del Dipartimento di Fisica, del Dipartimento di Chimica Organica e Biologica della Facoltà di Scienze e del Dipartimento di Biochimica del Policlinico Universitario di Messina, del LDSMM di Lille e del CEMHTI di Orléans e presso facilities di scattering di neutroni e luce di sincrotrone quali l'Institute Laue Langevin di Grenoble, la facility ISIS del Rutherford Appleton Laboratory di Oxford, la facility BENSIC di Berlino, l'ESRF di Grenoble e la facility Soleil di Saclay.

Particolare attenzione è stata rivolta all'analisi delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione. L'analisi dei moti 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 binari bioprotettore/solvente e ternari macromolecola/bioprotettore/solvente. Misure di scattering elastico, quasi elastico e inelastico hanno permesso di valutare il rapporto tra il contributo vibrazionale e quello rilassamentale nello spettro totale, consentendo di caratterizzare le rigidità di un'ampia classe di sistemi bioprotettori, quali disaccaridi amorfi ottenuti seguendo protocolli diversi e sistemi misti come, ad esempio disaccaridi/glicerolo. In questo contesto è stata formulata una nuova procedura per la determinazione dello spostamento quadratico medio da misure di scattering elastico incoerente di neutroni congiuntamente a una nuova procedura per correggere gli effetti della risoluzione strumentale.

In collaborazione con il Dipartimento di Chimica Organica e Biologica della Facoltà di Scienze e il Dipartimento di Biochimica del Policlinico Universitario di Messina sono stati investigati, al variare delle condizioni esterne, quali la temperatura, il pH, la presenza di campi elettromagnetici esterni, i processi di denaturazione per alcune proteine e il danno biologico e l'attività cellulare di colture cellulari neuronali, anche in presenza di bioprotettori. In collaborazione con le facilities ILL ed ESRF e il CEMHTI, sono stati realizzati studi strutturali e dinamici su sistemi liquidi ad alta temperatura, grazie a dispositivi di riscaldamento mediante irraggiamento laser e tecniche di levitazione, al fine di eliminare il contatto con i portacampioni, e, quindi, meccanismi di nucleazione eterogenea (ILL News, 51, 8 (2009)); inoltre è stata già pianificata la realizzazione di un dispositivo di levitazione acustica per lo studio di sistemi di interesse biofisico.

Sotto il profilo applicativo l'obiettivo è rappresentato dalla messa a punto, attraverso il contributo sinergico di competenze interdisciplinari, di nuove metodologie non-empiriche per l'azione di preservazione basate

sull'impiego di bioprotettori naturali. L'aspetto applicativo della ricerca è stato curato in collaborazione con Sanofi-Aventis, Dompè, Labplants, Cosmetic Valley ed ESA.

Nell'ambito della Fisica applicata nei settori ambientale ed energetico, alcune tecnologie fisiche sono state impiegate per la misurazione dei valori di campo elettromagnetico che sono stati trattati mediante l'impiego di Sistemi Informativi Territoriali (Geographic Informative Systems, GIS) ai fini dell'analisi e della trasposizione multimediale delle informazioni. Si è inoltre proseguito lo studio, già avviato lo scorso anno, dei processi di conversione dell'energia. Infine è stata attivata una collaborazione con l'Istituto di Acustica Corbino (IDAC) del CNR di Roma nell'ambito di ricerca riguardante le emissioni acustiche, prodotte da sistemi fisici, che vengano sottoposti a stress o a torsioni.

L'attività di ricerca si è svolta, principalmente, in seno ai seguenti progetti:

- Progetto MAE Italia-Sud Africa 2008-2009 "Studi fisici e biochimici dei meccanismi molecolari di bioprotezione in piante resistenti alla siccità" con l'Università di Cape Town (Sud Africa).
- Progetto MIUR – Internazionalizzazione del Sistema Universitario 2004-2006 "Studio dell'efficacia stabilizzante e conservante del trealosio su prodotti ad elevato valore aggiunto" con il LDSMM dell'Università di Lille 1 (Francia).
- Progetto Europeo FP6-2005-FOOD NoE "MONIQA: Towards the harmonisation of Analytical Methods for Monitoring Quality and Safety in the Food Chain".
- Progetto Studium 2009-2010 « Structure et dynamique dans les matériaux fondus » in collaborazione con il CEMHTI di Orléans (Francia).
- Progetto Europeo "ETPGAH: European Technology Platform for Global Animal Health".
- Progetto Europeo FP6 LIFESCIHEALTH - II scrIN-SILICO: "Finding promising drug candidates against tuberculosis with multidisciplinary protocol based non-conventional search".
- Progetto Europeo FP7 THATEA "THERmoAcoustic Technology for Energy Applications".
- Progetto Dompè s.r.l, intitolato: "Impiego integrato di tecniche spettroscopiche complementari per lo studio di sistemi macromolecolari di crescente complessità strutturale".
- Progetto Ente Siciliano per l'Agricoltura.

Articoli

- 1- S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, A. Benedetto
"Biomolecular Motion Characterization by Self Distribution-Function Procedure in Elastic Incoherent Neutron Scattering"
Physical Review E, **79**, 041915 (2009).
- 2- S. Magazù, F. Migliardo, D. Barreca, E. Bellocco, G. Galli and G. Laganà
"Chemical-Physical Properties of Bioprotectant-Biomolecule Systems"
Chemical Physics Research Journal, **3** (2009).
- 3- S. Magazù, R. Ammer, J. Kozaily, M. Koza, H. Fisher, E. Lelievre-Berna, L. Hennet, F. Kargl
"Aerodynamic Levitation and Laser Heating of Samples at IN6"
ILL News, **51**, 8 (2009)
- 4- D. Barreca, E. Bellocco, G. Galli, G. Laganà, U. Leuzzi, S. Magazù, F. Migliardo, A. Galtieri
"Stabilization Effects of Kosmotrope Systems on Ornithine Carbamoyltransferase"
International Journal of Biological Macromolecules, **45**, 120 (2009).
- F. Migliardo
"Estremofili: Meccanismi di sopravvivenza e applicazioni biotecnologiche"
Le Scienze Web News, 2009 (DOI: 10.3268/lsw.2009.02.14).
- 5- S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, A. Benedetto
"Biomolecular Motion Characterization by Self-Distribution-Function Procedure in Elastic Incoherent Neutron Scattering"
Virtual Journal of Biological Physics Research, **17** (2009).
- 6- S. Magazu, F. Migliardo
"Fragility of Bioprotectant Glass-Forming Systems in Extremophiles"
Journal of Atomic, Molecular and Optical Physics, **1**, 638063 (2009).
- 7- S. Magazù, F. Migliardo, A.J. Ramirez-Cuesta, M. T. F. Telling
"Spectroscopic Study of the Effects of Bioprotectant Systems on the Protein Stability"
Open Biomaterials Journal, **1**, 34 (2009).
- 8- S. Magazu, F. Migliardo
"Relationship among viscosity and excess quantities in glass-forming systems"
Journal of Non-crystalline Solids, **355**, 2634 (2009).
- 9- S. Magazù

“Understanding molecular and cellular processes using neutron scattering experiments - Health and biotechnologies”
Neutrons reveal all, ISBN: 978-84-692-4285-5, J. Campo Editor, ESS-Bilbao, 1, 28 (2009).

Comunicazioni a congresso

1- S. Magazù

“Elastic and Quasi Elastic Neutron Scattering Investigations of Molecular Motions in Systems of Biophysical Interest”
Conferenza Internazionale “International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems 2009”, 30 Agosto-4 Settembre 2009, Roma, Italia. Talk su invito

2- S. Magazù

“Neutron scattering on glass-forming systems of biophysical interest”
Conferenza Internazionale “Journées Soleil”, 9-10 novembre 2009, Orléans, Francia. Talk su invito

3- S. Magazù, F. Migliardo, A. Benedetto

“Biomolecular Motions Characterization by Elastic and Quasi-Elastic Neutron Scattering”
Conferenza Internazionale “Quasi Elastic Neutron Scattering QENS 2009”, 10-13 Febbraio 2009, Villigen, Svizzera. Comunicazione

4- S. Magazù, F. Migliardo

“INS Study on the Dynamical Properties of Melt-formed and Damage-formed Amorphous Trehalose”
Conferenza Internazionale “International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems 2009”, 30 Agosto-4 Settembre 2009, Roma, Italia. Comunicazione

5- A. Benedetto, S. Magazù, M. A. Gonzalez, F. Migliardo, C. Mondelli

“Elastic Incoherent Neutron Scattering Study of Molecular Motions in Systems of Biophysical Interest”
Conferenza Internazionale “XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules”, 28 Agosto - 2 Settembre 2009, Palermo, Italia. Comunicazione

6- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo

“ThermoAcoustic and Photovoltaic Energy Transformation and Bio-inspired Energetic Systems”
Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica, 28 Settembre-3 Ottobre 2009, Bari, Italia. Comunicazione

7- A. Benedetto, S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo

“Biomolecular Motion Characterization”
Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica, 28 Settembre-3 Ottobre 2009, Bari, Italia. Comunicazione

8- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo

“Fisica Applicata al Settore Energetico – Caratterizzazione di Materiali Innovativi e Sistemi Bio-inspired”
Salone internazionale dell’Edilizia “Caratterizzazione di sistemi innovativi nel settore energetico”, 19 Aprile 2009, Portorosa, Italia. Talk su invito

9- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo

“Fisica Applicata al Settore Energetico - Studio dei Meccanismi di Trasformazione Termoacustica dell'Energia e dell'Ottimizzazione dei Sistemi Fotovoltaico”
Salone internazionale dell’Edilizia “Caratterizzazione di Sistemi Innovativi nel Settore Energetico”, 19 Aprile 2009, Portorosa, Italia. Talk su invito

10- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo

“Biofisica e Fisica Applicata al Settore Energetico – Tecniche di Neutroni e Tecniche Spettroscopiche di Luce”
Festival Nazionale dell’Energia, 14-17 Maggio 2009, Lecce, Italia. Comunicazione

11- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo

“Biofisica e Fisica Applicata al Settore Energetico - Trasformazione Termoacustica dell'Energia”
Festival Nazionale dell’Energia, 14-17 Maggio 2009, Lecce, Italia. Comunicazione

12- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo

“Caratterizzazione di Materiali Innovativi nel Settore Energetico”, Solar Days, Milazzo 2009. Talk

13- A. Benedetto, S. Magazù, F. Migliardo

“Meccanismi di Trasformazione Termoacustica dell'Energia e Ottimizzazione di Sistemi Fotovoltaici”
Solar Days, 15 Maggio 2009, Milazzo, Italia. Talk su invito

Altri prodotti della ricerca

Il Prof. S. Magazù dal 17 Dicembre 2009 è membro del Committee scientifico “Disordered Systems and Liquids” della facility European Synchrotron Radiation ESRF (Grenoble, Francia); è membro del Committee scientifico “Structure and Dynamics of Liquids and Glasses” della facility di scattering di neutroni Institut Max Von Laue – Paul Langevin (ILL, Grenoble, Francia); è membro della Giunta della Società Italiana per la Spettroscopia Neutronica (SISN); è stato membro del Comitato Scientifico del Congresso Nazionale della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica 2009 di Sirolo; è stato organizzatore e chairman della giornata dedicata alle energie alternative al Salone internazionale dell’Edilizia di Portorosa e dei Solar Days di Milazzo.

La Dr. Federica Migliardo nell’anno 2009 ha svolto attività di ricerca congiunta tra il Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina e il Laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moléculaires dell’Università di Lille (Francia). Presso l’Università francese ha svolto anche attività didattica con esercitazioni in seno al corso “Laboratoire de Physique” per gli studenti del corso di laurea in Fisica, e i seguenti seminari per studenti, dottoranti e

post-doc: “Spectroscopic Techniques on Systems of Biophysical Interest” e “Study of Disordered Systems”. Da settembre 2009 è membro del Consiglio Scientifico del Festival della Scienza di Genova. Ha tenuto il 24 Giugno 2009 le esercitazioni per le Giornate didattiche nazionali di spettroscopia neutronica, organizzate dalla SISN. Ha ricevuto a Milano il 20 Gennaio 2009 il premio per il Decennale del Premio Sapio per la Ricerca Italiana 2008 indetto dal Gruppo Sapio e a Messina il 16 Marzo 2009 il premio Città di Messina 2008 indetto dal Comune di Messina e dalla Giomi Spa. Ha collaborato con la Fondazione Umberto Veronesi per i progetti “I Giorni della Scienza” (Palermo, 29 Gennaio 2009). E’ collaboratore scientifico di Le Scienze Web News e Agora. E’ stata nominata “Esperta in scienze della vita” per FEBS/EMBO/ELSO e Gold Member per l’EUWIIN (European Union Women Inventors & Innovators Network) ed è membro dell’Advisory Board per l’*International Journal Advances in Natural and Applied Sciences*.

Il Dr. Antonio Benedetto è stato esercitatore dei corsi di Laboratorio IA e di Fisica IA del cdl in Fisica, tutor del corso di Fisica e del corso di Matematica del cdl in Biologia ed Ecologia Marina. Ha, inoltre, svolto le esercitazioni del corso di Fisica con laboratorio del cdl in Biotecnologie. Nello stesso anno ha partecipato a tre esperimenti di spettroscopia neutronica presso la Facility ILL.

Il Dr. Emanuele Calabrò ha svolto attività di ricerca congiunta tra il Dipartimento di Fisica e il Dipartimento di Biochimica del Policlinico Universitario di Messina.

Il Dr. Francesco Parrillo ha svolto attività di ricerca congiunta tra il Dipartimento di Fisica e l’Istituto di Acustica Corbino (IDAC) del CNR di Roma.

Il Dr. Alessandro Magazzù ha svolto lo stage intitolato “Data treatment and analysis of an INS experiment”, dal 14/09/2009 al 15/12/2009, in seno a un contratto di ricerca stipulato tra l’ILL e il Dipartimento di Fisica.

6.7 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. Vincenza Crupi, dott. Valentina Venuti, dott. Francesca Longo

L'attività di ricerca svolta nell'anno 2009 è stata focalizzata sulla comprensione delle proprietà dinamiche di sistemi complessi, quali i sistemi drug/carriers aventi idonee caratteristiche di solubilità e stabilità per la loro applicazione anche in campo farmaceutico. L'attenzione è stata prevalentemente rivolta ai complessi di inclusione con ciclodestrine, oligomeri ciclici di forma toroidale, in grado di incapsulare principi attivi diversi e capaci di controllare il rilascio degli stessi. L'interpretazione e la correlazione dei dati sperimentali ottenuti ha contribuito a fornire un'indagine alquanto completa del sistema investigato, iniziata precedentemente dal gruppo di ricerca, a partire dalla quale è possibile formulare ipotesi sulla natura del complesso, definendone la geometria e chiarendo la natura delle interazioni intermolecolari in gioco.

La ricerca svolta nell'anno 2009 è stata anche indirizzata all'applicazione di differenti tecniche micro-distruttive e non- nel campo dei beni culturali, al fine di caratterizzare la struttura di reperti ceramici di interesse archeologico dal dominio microscopico al mesoscopico, strettamente connessa al loro processo di manifattura e alla loro provenienza.

L'uso simultaneo di tecniche spettroscopiche differenti e nello stesso tempo complementari, come l'assorbimento IR in Trasformata di Fourier in geometria ATR (Riflessione Totale Attenuata, ATR-FTIR) presso i laboratori del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina, la diffrazione e lo scattering di neutroni presso facilities europee quali ISIS (Oxford, UK) e LLB (Saclay, F) ha reso possibile una trattazione quantitativa dettagliata dei complessi fenomeni inerenti le suddette problematiche.

D) Studio delle interazioni host/guest in sistemi complessi.

L'utilità terapeutica di molecole bioattive naturali e di sintesi è limitata da alcune sfavorevoli caratteristiche chimico-fisiche delle stesse, specialmente la scarsa idrofilia. Una loro migliorata idrosolubilità, oltre a facilitare l'allestimento di formulazioni farmaceutiche, si tradurrebbe, nell'organismo, in una maggiore velocità di dissoluzione e biodisponibilità. Con questo obiettivo, l'attività di ricerca svolta è incentrata sullo studio di complessi di inclusione, sistemi supramolecolari dovuti all'interazione di non legame tra due molecole, per formare un complesso definito *host/guest* in cui una molecola agisce da recettore o legando dell'altra molecola. È, infatti, noto il vantaggio derivante dalla complessazione sulle proprietà organolettiche, farmacocinetiche e sulla stabilità della molecola ospite. Sistemi di questo tipo hanno trovato vasta applicazione in campo farmacologico, con lo scopo di solubilizzare molecole bioattive naturali e di sintesi poco solubili in ambiente acquoso, aumentandone quindi la biodisponibilità e migliorandone l'utilità terapeutica, ma anche per prevenire reazioni di degradazione quali l'idrolisi.

È stata in particolare intrapresa una dettagliata indagine spettroscopica delle proprietà dinamiche di tali sistemi che, nel loro insieme, esibiscono un comportamento peculiare e svolgono una funzione che le molecole prese singolarmente non svolgono. Tale studio, oltre ad aspetti più specificatamente applicativi, permette di approfondire la conoscenza delle stesse interazioni intermolecolari deboli (legame idrogeno, interazioni di Van der Waals, di coordinazione) che si esercitano in sistemi supramolecolari naturali come le proteine e gli enzimi.

Sono state investigate le proprietà dinamiche di complessi di inclusione in β -ciclodestrina (β -CyD, $C_{42}H_{70}O_{35}$) sistema di notevole interesse come drug carrier altamente biocompatibile. In particolare, si è scelto di focalizzare l'attenzione, quale molecola *guest*, sulla Genisteina (4',5,7-trihydroxyisoflavone, Gen, $C_{15}H_{10}O_5$), il più abbondante isoflavone contenuto nella soia, rivelatosi un potente agente sia nella profilassi e nella terapia del cancro sia in quella di altre malattie croniche. A motivo della sua struttura chimica, la Gen è scarsamente solubile in acqua e la sua dissoluzione è lenta. Ciò impone alcuni limiti alle sue applicazioni terapeutiche. Al fine di migliorare la sua velocità di assorbimento ed acquisire una rapida attività sono stati preparati complessi di inclusione di Gen con β -CyD in rapporto molare 1:1. Uno studio precedente di solubilità di fase, in accordo al metodo di Higuchi e Connors, ha permesso di valutare i cambiamenti dell'isoflavone nello stato complessato.

Sulla base di risultati spettroscopici, precedentemente ottenuti con misure di assorbimento FTIR-ATR e scattering Raman al fine di investigare le interazioni host-guest a livello molecolare, ci si è chiesti se i moti della Gen sulla scala temporale dei picosecondi risentissero della formazione dei complessi di inclusione. Questa informazione può essere cruciale per chiarire le interazioni tra farmaco e macrociclo durante la complessazione, già evidenziate mediante le misure FTIR-ATR e, di conseguenza, per controllare il rilascio del farmaco onde ottenere specifici effetti terapeutici. A tal fine, mediante misure ENS, realizzate con lo spettrometro in backscattering IN13 presso ISIS (RAL, Oxford, UK) è stato misurato, nell'intervallo di temperatura 150 - 340K, lo spostamento quadratico medio (MSD) degli atomi di idrogeno del complesso Gen/ β -CyD, confrontato con le singole componenti e la miscela fisica. L'intensità elastica di tutti i campioni è stata interpretata in termini di un modello a doppia buca di potenziale. Nel caso della Gen, si è osservata una dinamica prevalentemente armonica attribuita alla riorientazione di gruppi laterali. Per altri sistemi in esame, un andamento non-Gaussiano dell'intensità elastica è attivato a $T_d \cong 220 - 230K$. Questo comportamento, che richiama la cosiddetta transizione dinamica, è stato legato al ruolo plasticizing delle molecole d'acqua di cristallizzazione. La dinamica del complesso appare impedita rispetto alla miscela fisica, possibilmente a motivo del riarrangiamento strutturale delle molecole d'acqua di cristallizzazione insieme all'attivazione di alcune specifiche interazioni host-guest, in accordo con precedenti dati FTIR-ATR.

II) Applicazioni di metodologie fisiche nel campo dei beni culturali.

La conoscenza della collocazione geografico-temporale e dell'autenticità di manufatti di interesse storico artistico rappresenta sicuramente uno dei temi di ricerca nel campo della fisica applicata di maggiore fascino. La non distruttività delle tecniche scientifiche da utilizzare in questo campo risulta di assoluta priorità data la preziosità e l'unicità dei reperti da analizzare. In tal senso l'analisi dei campioni esaminati può essere realizzata sviluppando tecniche microspettroscopiche assolutamente non distruttive che nel contempo favoriscano il riconoscimento 'in situ' di componenti presenti anche a livello di tracce. In tale riferimento lo studio in questo campo è stato principalmente rivolto alla caratterizzazione chimico-fisica, mineralogico-petrografica e tecnologica di differenti tipologie di reperti ceramici. Studi archeometrici su tali reperti sono in grado di fornire informazioni riguardanti la composizione in termini di elementi e minerali, le proprietà strutturali mesoscopiche, fino alle disomogeneità macroscopiche.

E' noto che la diffrazione è un mezzo estremamente utile per investigare quantitativamente la composizione mineralogica dei materiali, poichè ogni fase minerale esibisce un proprio "pattern" di diffrazione. In questo contesto, sono state di recente effettuate misure di diffrazione di neutroni a tempo di volo (TOF-ND) finalizzate alla caratterizzazione di frammenti ceramici finemente decorati provenienti da Gioiosa Guardia (VI-V sec a.C). L'indagine svolta, assolutamente non distruttiva dal momento che le misure sono state effettuate sul frammento integro senza alcun campionamento, ha avuto lo scopo di ottenere la determinazione quantitativa delle fasi mineralogiche del bulk ceramico di reperti, acquisendo una corretta classificazione relativa alla loro iniziale dubbia provenienza.

Per una caratterizzazione della struttura del bulk ceramico su scala mesoscopica si è fatto inoltre uso dello Small Angle Neutron Scattering (SANS) per estrarre i parametri mesoscopici caratteristici di due serie di campioni di riferimento prodotti in laboratorio utilizzando argille di composizione nota e cotti in condizioni controllate. Tali parametri sono stati confrontati con quelli ottenuti su tre serie di ceramiche archeologiche provenienti dall'area dello "Stretto di Messina" e risalenti al VII-III secolo a.C.. La tecnica SANS si è rivelata particolarmente utile per la classificazione, mediante raggruppamento, dei campioni ceramici investigati, e per documentarne la tecnologia di produzione. In particolare ipotizzando, nei reperti analizzati, la presenza simultanea di due popolazioni indipendenti, costituite rispettivamente da unità "piccole" (precipitati/clusters di minerali di nuova formazione/cristalliti) e "grandi" (vuoti/aggregati di minerali), tenendo in considerazione le similarità rilevate nell'arrangiamento strutturale mesoscopico dei campioni antichi e di riferimento, il raggio di girazione R_g e la dimensione frattalica delle interfacce α sono state utilizzate con successo per fornire una stima della massima temperatura di cottura dei manufatti. Ancora, la dimensione frattalica delle interfacce α misurata tramite SANS si è rivelata un parametro appropriato per ottenere informazioni sulla porosità, che sono risultate in buon accordo con quelle ricavate mediante metodi convenzionali.

Programma di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale, PRIN 2007 - (Prot. 2007Z8FYPA_002)

Titolo generale del progetto:

"Individuazione dei campi di applicazione delle metodologie innovative non-distruttive e microdistruttive nell'analisi dei reperti ceramici di interesse storico-archeologico attraverso il confronto sistematico con le metodologie tradizionali"

Titolo specifico del Progetto svolto dall'Unità di Ricerca di Messina:

"Protocollo metodologico di impiego congiunto di tecniche non distruttive e microdistruttive per la caratterizzazione strutturale di reperti ceramici dal dominio microscopico al macroscopico".

Coordinato Scientifico Nazionale: Prof. Paolo Mazzoleni, Università degli Studi di Catania.

Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca di Messina: Prof.ssa Vincenza Crupi, Università degli Studi di Messina.

ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI CON REFEREE

- 1) D. Barilaro, V. Crupi, S. Interdonato, F. Longo, G. Maisano, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, P. Mazzoleni, G. Tigano, S. Imberti, W. Kockelmann.
"Archaeometric investigation of red-figure pottery fragments from Gioiosa Guardia (Messina, Sicily) by INAA, FT-IR and TOF-ND techniques".
Nuovo Cimento della Società Italiana di Fisica C - Geophysics and Space Physics **31**, 371-388 (2008).
- 2) G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, P. Mazzoleni, J. Teixeira, V. Venuti.
"Small angle neutron scattering as fingerprinting of ancient potteries from Sicily (Southern Italy)".
Journal of Applied Physics **106**, Art. No. 054904 (2009).
- 3) V. Crupi, D. Majolino, A. Paciaroni, R. Stancanelli, V. Venuti.
"Influence of the "Host-Guest" Interactions on the Mobility of Genistein/beta-Cyclodextrin Inclusion Complex".
Journal of Physical Chemistry B, **113**, 11032-11038 (2009).

ELENCO DELLE COMUNICAZIONI A CONFERENZE NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- 1) V. Crupi, D. Majolino, A. Paciaroni, B. Rossi, R. Stancanelli, V. Venuti, G. Viliani.
"Vibrational dynamics investigation of host-guest systems: the case of genistein-cyclodextrin".
XXI Congresso GNSR 2009
10-13 Febbraio 2009, Milano (Italia).
- 2) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, P. Mazzoleni, S. Imberti, W. Kochelmann, F. Bardelli.
"Non-invasive analysis of ancient potteries from Sicily (Southern Italy) using neutrons and synchrotron radiation"
13^a Giornata di Archeometria della Ceramica – Nuove Metodologie Analitiche e di Trattazione dei Dati nello Studio della Ceramica in Archeologia ed in Architettura
26-27 Marzo 2009, Catania (Italia).
- 3) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, P. Mazzoleni, J. Teixeira.
"Small Angle Neutron Scattering per la caratterizzazione di reperti ceramici siciliani"
13^a Giornata di Archeometria della Ceramica – Nuove Metodologie Analitiche e di Trattazione dei Dati nello Studio della Ceramica in Archeologia ed in Architettura
26 – 27 Marzo 2009, Catania (Italia).
- 4) V. Crupi, G. Guella, I. Mancini, D. Majolino, B. Rossi, R. Stancanelli, V. Venuti, P. Verrocchio, G. Viliani.
"Effect of Temperature on the Vibrational Dynamics of IBP/ β -CD Inclusion Complexes: Investigation by FTIR-ATR Spectroscopy and Numerical Simulation"
II° Congresso Nazionale di Chimica e Tecnologia delle Cicloestrine
3 - 5 Maggio 2009, Asti (Italia).
- 5) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, P. Mazzoleni, M. F. La Russa, F. Bardelli.
"Identification of green and yellow pigments: the case of some Sicilian Renaissance glazed pottery"
E-MRS 2009 Spring Meeting, Symposium S: Precise Processing of Materials of Art Diagnostics, Characterization, Identification & Restoration
8 – 12 Giugno 2009, Strasburgo (Francia).
- 6) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, M. F. La Russa
"Caratterizzazione di pigmenti mediante tecniche spettroscopiche non invasive"
XCV Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica (SIF)
28 Settembre – 3 Ottobre 2009, Bari (Italia).
- 7) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, P. Mazzoleni, J. Teixeira
"Small Angle Neutron Scattering as tool for the interpretation of mesoscopic structure of ancient potteries"
Geoitalia 2009, VII Forum Italiano di Scienze della Terra
9-11 Settembre 2009, Rimini (Italia).

- 8) V. Crupi, G. Guella, D. Majolino, I. Mancini, B. Rossi, R. Stancanelli, V. Venuti, P. Verrocchio, G. Villani.
“T-dependence of the vibrational dynamics of IBP/ β -CDs inclusion complexes by FTIR-ATR spectroscopy and numerical simulation”.
XVIII International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research, H2BR 2009.
14-18 Settembre 2009, Parigi (Francia).
- 9) A. Mazzaglia, C. Cannavà, V. Crupi, P. Ficarra, M. Guardo, G. Guglielmo, D. Majolino, N. Micali, R. Stancanelli, V. Venuti, V. Villari
“Amphiphilic cyclodextrins as nanocarriers of genistein: a spectroscopic investigation pointing out the structural properties of the host/isoflavon complex system in water and at the solid state”
The First European Cyclodextrin Conference
11 – 13 Ottobre 2009, Aalborg (Danimarca).
- 10) C. Ingoglia, G. Barone, P. Mazzoleni, V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti
“Il contributo dell’archeometria allo studio della pittura ellenistica in Sicilia: l’esempio di Licata”
Convegno “Linguaggi e Tradizioni della Pittura Ellenistica in Italia e in Sicilia”
24 – 25 Settembre 2009, Messina (Italia).

6.8 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi

Componenti: Maria C. Abramo, C. Caccamo, D. Costa, G. Munaò e G. Pellicane

E' proseguito lo studio teorico/simulativo di fluidi molecolari, con lo scopo di ottimizzare l'approccio teorico noto come RISM (Reference Interaction Site Model). Questo e' sviluppato per calcolare la struttura di sistemi molecolari, rappresentati come un'opportuna distribuzione di siti d'interazione che riproduce la geometria della molecola stessa.

Lavorando su un sistema biatomico particolarmente semplificato, costituito da due sfere rigide vincolate a stare ad una certa distanza fra loro (fused hard spheres) si è dimostrato [1-2] che e' possibile risolvere le equazioni RISM in modo autoconsistente, cioè imponendo l'eguaglianza fra le predizioni ottenute da diverse vie dalla struttura alla termodinamica. Si è poi verificato che le predizioni teoriche riproducono accuratamente i dati Monte Carlo sullo stesso modello ottenuti per varie elongazioni della molecola biatomica.

Per quanto concerne fluidi semplici ad un singolo sito d'interazione centrale, è stato condotto uno studio su modelli con interazioni competitive, cioè attrattive a corto raggio e repulsive a lungo raggio, basato sia su simulazioni Monte Carlo che su un'accurata chiusura all'equazione di Ornstein-Zernike autoconsistente nel senso descritto prima. E' stato dimostrato [3] che l'approccio teorico riproduce accuratamente l'insorgenza di stati non omogenei (caratterizzati dalla formazione di aggregati di particelle nel fluido omogeneo a bassa densità), tipici delle soluzioni di proteine globulari.

L'attività del gruppo si è inoltre fortemente focalizzata sullo sviluppo di un approccio coarse-grain alla descrizione delle soluzioni di proteine globulari. Si è assunto che tali macromolecole siano descrivibili come sfere con una distribuzione superficiale di siti carichi che corrispondono, sia per posizione che per carica, ai residui aminoacidici della proteina reale. Il solvente acquoso e gli ioni del sale aggiunto vengono descritti implicitamente dal potenziale di interazione invocato tra i siti di due macromolecole diverse. Un codice di Dinamica Molecolare per molecole rigide a molti siti è stato adottato per calcoli riguardanti tale tipo di sistemi. In particolare, sono stati effettuati calcoli per un modello, già proposto da altri autori per una soluzione di lisozima in acqua con sale aggiunto, da noi opportunamente modificato per meglio adattarlo alla Dinamica Molecolare. La disponibilità di informazioni sulla dinamica del sistema, non ancora indagata per soluzioni proteiche, ha consentito di evidenziare [4], fra l'altro, l'approccio della soluzione alla separazione liquido-vapore a partire da uno stato notevolmente sottoraffreddato. L'insorgenza della transizione richiede tempi dell'ordine di un centinaio di nanosecondi, corrispondenti a diversi milioni di passi di simulazione. Tali calcoli molto impegnativi sono stati resi possibili dalla particolare architettura parallela di computer disponibile presso il Centro di Calcolo della sede di Messina.

L'attività di ricerca è anche proseguita verso la caratterizzazione di interazioni efficaci fra proteine globulari in soluzione. In particolare, e' stato effettuato uno studio sistematico del potenziale di forza media fra proteine solvate avvalendosi di ulteriori tecniche di simulazione di dinamica molecolare di non-equilibrio e di indagini di equilibrio (umbrella sampling, constrained molecular dynamics) [5-7]. Inoltre, ci si è concentrati sulla analisi del comportamento critico di modelli di fluidi all'interno di matrici porose. Tale analisi è consistita nella validazione dello studio compiuto precedentemente [8], sia in termini di simulazioni Monte Carlo che calcoli di energia libera convenzionali quali l'umbrella sampling [9].

Bibliografia

- [1] G. Munaò; D. Costa; C. Caccamo
J.Chem. Phys. v.130 (14): Art. No. 144504 (2009)
- [2] G. Munaò; D. Costa; C. Caccamo
Chem Phys. Lett. v. 470 (4-6): 240-243 (2009)
- [3] J.M.Bomont, J.-L. Bretonnet and D. Costa, J.Chem.,Phys (subm.)
- [4] M.C.Abramo, C.Caccamo, D. Costa, G.Pellicane
and R. Ruberto, J.Phys.Chem B (subm.)

- [5] G. Pellicane and L. Sarkisov, J. Chem. Phys. (subm.)
[6] G. Pellicane, L. Sarkisov and G.R. Smith Science and Supercomputing in Europe - 553, ISBN 978-88-86037-22-8, (2009).
[7] G. Pellicane G. , G. Smith and L. Sarkisov L. Phys. Rev. Lett. v.101 , Art. No. 248102 (Dic.2008)
[8] P. G. Lucentini De Sanctis and G. Pellicane Phys. Rev. Lett. v.101, Art. No. 246101 (Dic. 2008)
[9] G. Pellicane, B. Russo, R.L.C. Vink and P.V. Giaquinta (in prep.).

PUBBLICAZIONI

- 1) Munao, G ; Costa, D ; Caccamo, C
Title: Reference interaction site model investigation of homonuclear hard dumbbells under simple fluid theory closures: Comparison with Monte Carlo simulations
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 130 (14): Art. No. 144504 (2009)
2) Munao, G ; Costa, D; Caccamo, C
Title: Thermodynamically consistent reference interaction site model theory of the tangent diatomic fluid
CHEMICAL PHYSICS LETTERS, 470 (4-6): 240-243 (2009)
3) G. Pellicane, L. Sarkisov and G.R. Smith
"Molecular Dynamics studies of protein-protein interactions: linking atomistic and mesoscales",
Science and Supercomputing in Europe - 553, ISBN 978-88-86037-22-8, (2009).

RELAZIONI SU INVITO PRESSO CONFERENZE INTERNAZIONALI

G.Pellicane:
15-18 July 2009 - Workshop "New Trends in Simulating Colloids: from Models to Applications"
CECAM, Lausanne, Switzerland.

PROGETTI DI RICERCA FINANZIATI

G.Pellicane:
Programma di accesso transnazionale di HPC-EUROPA-2:
"Towards a new generation of efficient polyelectrolyte membranes: Computer simulation and theoretical models of composite silica/Nafion materials."
Settembre-Dicembre 2009- Permanenza presso
Edinburgh Parallel and Computing Centre (EPCC).

6.9 Fisica teorica e computazionale dello stato liquido della materia

Responsabile: Paolo V. Giaquinta

L'attività di ricerca ha riguardato prevalentemente lo studio numerico, condotto con il metodo della Dinamica Molecolare, delle proprietà termodinamiche e strutturali che emergono dal modello TIP4P (*"Transferable Interaction Potential, 4-Point"*) dell'acqua. In particolare, è stata calcolata la funzione di distribuzione a due corpi completa, che dipende dalla separazione radiale tra due molecole e dai cinque angoli che ne determinano l'orientamento relativo nello spazio, in fase liquida. È stato altresì determinato il contributo delle correlazioni di coppia tra fluttuazioni locali nel numero di particelle all'entropia configurazionale del liquido. Questo studio è stato oggetto di una tesi di dottorato e di un articolo sottomesso al *Journal of Chemical Theory and Computation* della *American Chemical Society* il 24/11/2009 e pubblicato il 22/02/2010.

PUBBLICAZIONI (2009)

1. P. V. Giaquinta, *Comment on "Residual multiparticle entropy does not generally change sign near freezing"*, *J. Chem. Phys.* **130**; 037101 (2009)
2. P. V. Giaquinta *Editorial: A look to the past and to the future of the APP journal for physical, mathematical and natural sciences*
Atti Accad. Pelorit. Pericol. Cl. Sc. Fis. Mat. Nat. **87**, C1E0901001 (2009).
3. P. V. Giaquinta, *New editorial accomplishments*
Atti Accad. Pelorit. Pericol. Cl. Sc. Fis. Mat. Nat. **87**, C1E0902001 (2009).

6.10 Studio di comportamenti anomali in sistemi con interazione a simmetria sferica

Responsabile: G.Malescio

Negli ultimi anni ha assunto grande importanza lo studio del comportamento di sistemi di particelle caratterizzati da interazioni a simmetria sferica con componente repulsiva sofficiata. Grazie a tale sofficiata, il potenziale possiede due diverse scale di lunghezza repulsiva. Ciò dà luogo all'esistenza di strutture locali espanse e compatte che competono tra loro, una caratteristica grazie alla quale tali sistemi sono in grado di mostrare, nonostante la loro natura isotropa, una gamma di comportamenti anomali che vanno dal melting rientrante, al polimorfismo sia in fase solida che in fase liquida, alla presenza di anomalie termodinamiche, dinamiche e strutturali. Tali comportamenti sono simili a quelli osservati in sostanze, come l'acqua, il silicio, il fosforo, caratterizzate da interazioni ben più complesse aventi una natura direzionale.

Nel corso del 2009 abbiamo investigato il comportamento di sistemi di particelle interagenti attraverso potenziali aventi un core duro più una componente repulsiva soffice con gradi diversi di sofficiata. Tali sistemi rappresentano modelli rilevanti sia nell'ambito della materia soffice (star polymers, sospensioni colloidali, etc.) che per quanto riguarda elementi ad alta pressione. In condizioni estreme di pressione, infatti, la struttura elettronica viene modificata e le interazioni repulsive vanno incontro ad una parziale sofficiata. Negli studi effettuati abbiamo investigato come cambiano al variare della sofficiata i comportamenti di fase e le proprietà strutturali e termodinamiche.

Un risultato particolarmente significativo è l'aver mostrato che per avere comportamenti anomali in sistemi isotropi non è necessaria la presenza di una regione del potenziale in cui al diminuire della distanza r tra particelle la forza repulsiva diminuisca o al più rimanga costante. Tale andamento, in contrasto con quanto avviene normalmente, era infatti ritenuto essere un requisito essenziale per l'esistenza di anomalie in sistemi a simmetria sferica. Facendo uso di simulazione numerica e di calcoli esatti a $T=0$, abbiamo mostrato l'esistenza di uno spettro completo di comportamenti anomali (linea di melting con varie zone di melting rientrante, ricco polimorfismo con presenza di strutture cristalline non-Bravais come cI16 e diamante, transizioni solido-solido, anomalie water-like) per un potenziale repulsivo strettamente convesso. Pur essendo in questo caso la forza repulsiva sempre crescente al diminuire di r , la condizione per l'esistenza di due scale di lunghezza è soddisfatta grazie alla presenza di una regione in cui la forza repulsiva aumenta, al diminuire di r , molto più lentamente che nelle regioni adiacenti. Questo risultato estende considerevolmente la classe di sistemi in grado di esibire comportamenti anomali.

Lavori pubblicati

- 1) S. Prestipino, F. Saija and G. Malescio
"The zero-temperature phase diagram of soft-repulsive particle fluids"
Soft Matter **5** 2795-2803 (2009)
- 2) F.Saija, S.Prestipino and G.Malescio
"Anomalous phase behavior of a soft-repulsive potential with a strictly monotonic force"
Physical Review E **80** 031502 1-7 (2009)
- 3) S. V. Buldyrev, G. Malescio, C. A. Angell, N. Giovanbattista, S. Prestipino, F. Saija, H. E. Stanley, and L. Xu
"Unusual phase behavior of one-component systems with two-scale isotropic interactions"
J.Phys.: Condens. Matter **21** 504106 (2009)
IOP Select article (articles chosen from IOP Journals by the Editors for their novelty, significance and potential impact on future research)

6-11 Fisica dei sistemi Complessi

Componenti: F. Mallamace (PO), C. Branca (RC), C. Corsaro (AS), J. Spooren (RC EU), N. Leone (PhD)

Attività di Ricerca

La ricerca utilizza metodologie sperimentali quali lo Scattering di luce e la Risonanza Magnetica Nucleare avvalendosi della collaborazione dei team di ricerca del Prof. Stanley (Boston Univ.) e del Prof. Chen (MIT). Fra i risultati scientifici di maggior rilievo spiccano le recenti scoperte riguardanti le proprietà dell'acqua in regime sottoraffreddato sia in ambiente confinato sia in interazione con molecole di interesse biologico.

Sebbene l'acqua sia un liquido comune, essa è caratterizzata da proprietà fisiche "anomale", se paragonate con quelle di liquidi classificati "semplici", che le hanno fatto guadagnare l'appellativo di sostanza "unica". E' ormai provato che proprio queste proprietà inusuali sono in qualche modo alla base del manifestarsi dei processi biologici e quindi della vita. Resta pertanto giustificato l'enorme interesse scientifico da parte di molteplici aree disciplinari rivolto allo studio delle sue proprietà chimico-fisiche. Il diagramma di fase dell'acqua è particolarmente complesso per la presenza di numerosi punti tripli e di uno (o due secondo alcuni studi) punto critico. Tra la temperatura di nucleazione omogenea T_H , 231 K, e la temperatura di cristallizzazione, T_X , 150 K, vi è un intervallo di 80 K, conosciuto come "no man's land" (terra di nessuno), non facilmente accessibile sperimentalmente. L'obiettivo dell'attività di ricerca svolta in quest'anno è stato realizzare esperimenti all'interno di questo intervallo di temperatura, esperimenti che sono fondamentali per rispondere agli innumerevoli interrogativi concernenti le proprietà dell'acqua sottoraffreddata. Per poter realizzare questi esperimenti, evitando la cristallizzazione, l'acqua è stata confinata in nanotubi cilindrici con diametro non superiore alla ventina di Angstrom (MCM-41-S), potendo così studiarne le proprietà nel suo stato liquido fino a circa 180 K.

Tramite misure di "chemical shift" della risonanza magnetica nucleare, è stato possibile valutare il calore specifico configurazionale dell'acqua confinata in MCM. Infatti il chemical shift dei nuclei d'idrogeno dell'acqua è una funzione sia del numero di legami idrogeno che dei loro parametri, i.e. distanze ed angoli intermolecolari. Il chemical shift δ (T) è quindi connesso al numero di possibili configurazioni che una molecola d'acqua può assumere, numero che è inversamente proporzionale al numero medio di legami idrogeno. Dalla derivata temporale del chemical shift è stato quindi valutato il contributo configurazionale del calore specifico a pressione costante per l'acqua confinata in matrici di silicio MCM-S-41. Mettendo a confronto il valore ottenuto con il valore valutato sia con tecniche calorimetriche tradizionali che con una simulazione al computer usando il modello TIP5P è stato evidenziato un buon accordo fra i diversi dati che mostrano un analogo comportamento termico. In particolare è evidente un massimo a circa 240 K cioè all'attraversamento della temperatura che individua la linea di Widom.

La bontà dell'approccio seguito è stato inoltre confermato dalla valutazione del calore specifico configurazionale dell'acqua di idratazione del lisozima, una delle proteine più studiate. Anche in questo caso si è osservato un ottimo accordo con i valori di calore specifico misurati tramite Calorimetria a Scansione Modulata in Temperatura (TMSC). Il vantaggio offerto dal nuovo approccio risiede nella possibilità di investigare un più ampio range di temperature, fino al regime sottoraffreddato, il che ha consentito di evidenziare la presenza di due massimi relativi alla due transizioni osservate per l'acqua di idratazione della proteina: una transizione ad alta temperatura (circa 353 K) dove avviene il processo di denaturazione del lisozima in cui domina la popolazione delle molecole d'acqua non coinvolte in legami idrogeno stabili, ed una transizione dinamica a bassa temperatura (circa 225 K) del tutto analoga a quella osservata nell'acqua confinata in MCM-41-S. In corrispondenza di tale transizione si è osservato lo sviluppo di un esteso network di legami idrogeno dell'acqua d'idratazione responsabile della disattivazione delle funzionalità biologiche della proteina stessa.

Infine, sono stati di recente messi a confronto i parametri dinamici come il coefficiente di self-diffusione, il tempo di rilassamento traslazionale e la viscosità dell'acqua confinata in differenti environment caratterizzati da una diversa dimensionalità. Lo scopo era verificare che i fenomeni osservati di recente per l'acqua nel regime sottoraffreddato, quali la transizione fragile-forte e la violazione della Stokes-Einstein, sono una conseguenza di una transizione verso una struttura con un network di legami idrogeno più aperto. E' stato osservato come questi processi risultano essere indipendenti dalle dimensioni della struttura in cui l'acqua è confinata e quindi sono da considerare caratteristiche tipiche dell'acqua. In particolare, la FSC e la SEV avvengono in tutti i sistemi studiati alla stessa temperatura di crossover al di sotto della quale i parametri D_s ,

$\langle \tau_T \rangle$, and η sono legati tra loro da una legge di scala il cui esponente dipende dalla temperatura e dalla dimensionalità $d=1,2,3$ del sistema.

Publicazioni 2009

1) Chong, SH; Chen, SH; Mallamace, F

“A possible scenario for the fragile-to-strong dynamic crossover predicted by the extended mode-coupling theory for glass transition”

Journal of Physics –Condensed Matter, **21**, Art. No. 504101 (2009)

2) Chen, S. H., Zhang, Y., Lagi, M., Chong, S. H., Baglioni, P., Mallamace, F.

“Evidence of dynamic crossover phenomena in water and other glass-forming liquids: experiments, MD simulations and theory”

Journal of Physics –Condensed Matter, **21**, Art. No. 504102 (2009)

3) Stanley, H. E., Kumar, P., Han, S., Mazza, M. G., Stokely, K., Buldyrev, S. V., Franzese, G. Mallamace, F., Xu, L.
“Heterogeneities in confined water and protein hydration water”

Journal of Physics –Condensed Matter, **21**, Art. No. 504105 (2009)

4) Mallamace, F

The liquid water polymorphism

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, **106**, 15097-15098 (2009)

5) Xu, Limei, Mallamace, F, Yan, Zhenyu, Starr, F.W., Buldyrev, S.V., Stanley, H.E.

“Appearance of a fractional Stokes-Einstein relation in water and a structural interpretation of its onset”

Nature Physics, **5**, 565-569 (2009)

6) Zhang, Y., Lagi, M., Liu DZ, Mallamace, F., Fratini E, Baglioni P, Mamontov E., Hagen M., Chen SH

“Observation of high-temperature dynamic crossover in protein hydration water and its relation to reversible denaturation of lysozyme”

Journal of Chemical Physics, **130**, Art. No. 135101 (2009)

7) Johari G.P., Tombari E., Salvetti G, Mallamace F.

“Does water need a lambda-type transition?”

Journal of Chemical Physics, **130**, Art. No. 126102 (2009)

Relazioni su invito

1- COMPLEX'2009

The First International Conference on Complex Systems:

Theory and Applications

February 23-25 2009,

Shanghai, China

2- THE SCIENCE OF COMPLEXITY

International ISF and Minerva Workshop

Minerva Center, Department of Physics,

March 29 - April 1 2009

Bar-Ilan University, Ramat-Gan, Israel

3- Conferenza Interdisciplinare di Ateneo “Il Sistema Acqua: dalla Fisica alla Biologia”

15 Maggio 2009, Messina

4- 6th IDMRCS

6th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems

30 Agosto – 5 Settembre 2009, Roma

5- Società Italiana di Fisica

XCV Congresso Nazionale

28 Settembre - 3 Ottobre 2009, Bari

6.12 Studio di membrane biomimetiche e soluzioni di macromolecole

Componenti: Ulderico Wanderlingh, Giordano Rita, Rifici Simona, Trimarchi Antonio.

Lo studio delle membrane biologiche e la loro interazione con le biomolecole è un campo di ricerca fortemente interdisciplinare che conduce a ricadute nel campo medico farmacologico e in quello della biosensoristica. Le biomembrane inoltre sono un esempio di sistemi colloidali e mostrano particolari proprietà fisiche che sono essenziali per la funzionalità biologica. Nonostante la loro complessità, lo studio delle membrane ci permette di esplorare le relazioni tra modulazioni biochimiche e proprietà fisiche dei biomateriali e la loro implicazione nel controllo delle funzioni biologiche.

La possibilità di realizzare membrane modello, formate da doppi strati di fosfolipidi separati da strati di solvente acquoso, permette di studiarne le interazioni a livello molecolare. Inoltre è eventualmente possibile l'inserimento di specifici anfifilici/polipeptidi/proteine nel doppio strato fosfolipidico per studiarne l'interazione con la stessa membrana. Lo studio delle biomembrane riguarda anche il possibile ruolo di proprietà fisiche universali, caratteristiche dei sistemi bidimensionali, nel comportamento/funzione dei materiali biologici.

In questa indagine abbiamo studiato membrane biomimetiche realizzate con DMPC (Dimiristoilfosfatidilcolina) e con DPPC (Dipalmitoilfosfatidilcolina) in condizione di full-hydration, depositate su supporti di muscovite. Con questa tecnica si realizzano multistrati formati dalla sovrapposizione di parecchi doppi strati lipidici, in una struttura altamente ordinata. Tali sistemi sono stati studiati tramite misure di Spettroscopia Neutronica, realizzate presso l'Institut Laue Langevin (FR), al fine di studiare le dinamiche su scala molecolare. Si è così potuto osservare che lo spostamento quadratico medio in funzione della temperatura mostra una attivazione di dinamiche non armoniche a $T \approx 220\text{K}$. Al crescere della temperatura le componenti dinamiche parallele e perpendicolari al piano delle membrane si differenziano, essendo leggermente maggiore la componente parallela, fino a che non viene superata la temperatura di transizione liquido cristallina.

Sono anche state studiate, tramite diffrazione X, le interazioni tra doppio strato di fosfolipidi e alcoli che sono rilevanti per la comprensione di vari processi biologici tra cui la permeabilità della membrana plasmatica e meccanismi molecolari dell'anestesia. La parte idrofobica dell'alcol interagisce favorevolmente con catene lipidiche mentre il gruppo polare rimane libero di formare legami idrogeno con gli atomi polari che si trovano vicino all'interfaccia acqua/lipidi. Le misure hanno dimostrato che l'alcol, ad alta concentrazione, può indurre una fase interdigitata, diminuendo lo spessore del bilayer. Inoltre abbiamo trovato che la presenza di una elevata concentrazione di alcol sposta la temperatura di transizione verso valori più bassi, ed ha un effetto disordine sulle catene fosfolipide nella fase di gel. Su tali sistemi sono anche state avviate misure di Dinamica Molecolare, simulando un sistema di 64 molecole lipidiche e 1645 molecole d'acqua, utilizzando il programma NAMD in collaborazione con il Gruppo di Dynamics of the Membrane Assemblies, CNRS, Nancy University (francia).

Lavori pubblicati

1- U.N. Wanderlingh a, F. Albergamo b, R.L. Hayward c, H.D. Middendorf
"Neutron scattering from model peptides and small oligopeptides at high energy transfers" Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 600 (2009) 285–287

2-G. D'Arrigo, R. Giordano and J. Teixeira
"Temperature and concentration dependence of SANS spectra of aqueous solutions of shortchain amphiphiles" Eur. Phys. J. E 29, 37–43 (2009)

Presentazioni a congresso

1-Conti Nibali V., Tarek M., Wanderlingh U., D'Angelo G. (2009).
"Phospholipid membranes dynamics: molecular dynamics vs neutron scattering."

7th EBSA European Biophysics Congress. 11/7-15/7, Genova, Italy,
2-Wanderlingh U., D'Angelo G., Conti Nibali V., Crupi C. (2009).
"Hydrogen dynamics in bio-mimetic membranes, and the effect of pore forming peptide" 7th EBSA European Biophysics Congress. 11/7-15/7, Genova, Italy,
3-Rifici S., Wanderlingh U., Corsaro C., Spooren J., Conti Nibali V. (2009).
"Interazione degli alcol con le membrane di fosfolipidi. Un'indagine con nmr ad alta risoluzione." XCV Congresso nazionale della Società Italiana di Fisica. 28/9-3/10, Bari, Italia,
4-Wanderlingh U., D'Angelo G., Trimarchi A., Conti Nibali V. (2009).
"Model membrane dynamics by quasi-elastic neutron scattering." 6th International Discussion Meeting on relaxations in Complex Systems (6IDMRCS). 30/8-4/9, Roma, Italy,
5-Wanderlingh U., Rifici S., Corsaro C., D'Angelo G., Conti Nibali V., Trimarchi A. (2009).
"Interaction of alcohol with phospholipid membrane, an nmr and xrd investigation on dppc-alcohol" XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules. 28/8-2/9, Palermo, Italy,
6-Crupi C., D'Angelo G., Wanderlingh U., Conti Nibali V., Vasi C. (2009).
"Influence of acetyl-d-glucosamine (nag) inhibitor on low frequency dynamics of lysozyme." XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules. 28/8-2/9, Palermo, Italy
7-Conti Nibali V., D'Angelo G., Paciaroni A., Petrillo C., Sacchetti F., Tarek M., Wanderlingh U. (2009).
"Single-particle and collective dynamics of protein hydration water. molecular dynamics simulations and neutron scattering insights." 6th International Discussion Meeting on relaxations in Complex Systems (6IDMRCS). 30/8-4/9, Roma, Italy
8-D'Angelo G., Conti Nibali V., Crupi C., Paciaroni A., Wanderlingh U. (2009).
"Microscopic origin of the very-low energy vibrational dynamics in proteins." 7th European Biophysics Congress, EBSA 2009 Meeting. 11-15 luglio, Genova, Italy

6.13 Teoria e simulazione numerica di sistemi modello di meccanica statistica

Responsabile: Santi Prestipino Giarritta

Collaboratori esterni

Franz Saija (IPCF-CNR, Messina), Erio Tosatti e Alessandro Laio (SISSA, Trieste)

Finanziamenti: Programma di Ricerca di Ateneo (PRA UniME 2008)

ATTIVITA' DI RICERCA SVOLTA NEL 2009

1) In condizioni termodinamiche estreme, la maggior parte delle sostanze atomiche e molecolari semplici presentano un comportamento "anomalo" caratterizzato da un ricco polimorfismo in fase solida nonché dall'esistenza nel diagramma delle fasi di regioni di fusione rientrante. Tali caratteristiche anomale sono ben conosciute per sistemi quali sospensioni colloidali e soluzioni polimeriche, esempi di "materia soffice".

La mia ricerca ha riguardato lo studio delle proprietà di equilibrio di sistemi classici di particelle interagenti secondo potenziali isotropi studiati allo scopo di cogliere almeno il carattere generico di queste anomalie. A tal fine, risulta sufficiente che la repulsione efficace

a corte distanze abbia, a fianco del nocciolo duro, una spalla soffice, ossia docile alla penetrazione. Questo determina, nei casi indagati, l'esistenza di due distinte scale di lunghezza in fase fluida, oltre che un ricco campionario di fasi solide a più bassa temperatura (inclusi alcuni cristalli non-Bravais) ed altre anomalie "water-like" a carico di svariate funzioni di risposta termodinamiche.

2) Quando un insieme di particelle va incontro ad una trasformazione di fase discontinua, ha luogo una riorganizzazione strutturale a livello microscopico che richiede del tempo per giungere a termine.

Il primo stadio di questo processo è la formazione di un nucleo critico, ossia di un seme della nuova fase che si trova in equilibrio instabile con la fase genitrice. Nella teoria classica della nucleazione (CNT), il nucleo critico è assunto sferico e dotato della stessa tensione superficiale dell'interfaccia piana.

In collaborazione con Erio Tosatti ed Alessandro Laio della SISSA, ho messo a punto una teoria statistica del nucleo critico che si distingue dalla CNT per due aspetti: 1) consente piccole deviazioni del nucleo dalla forma sferica e 2) di queste deviazioni si tiene in conto anche il costo energetico legato alla flessione della superficie.

Con questa teoria, si possono valutare le correzioni di size finita alla tensione superficiale del nucleo e costruire la superficie d'energia libera dello stesso in funzione del volume e dell'area della superficie, riuscendo così a quantificare gli scostamenti dalla CNT.

PUBBLICAZIONI

1. S. Prestipino, F. Saija, and G. Malescio,

"The zero-temperature phase diagram of soft-repulsive particle fluids",
Soft Matter vol.5, 2795 (2009).

2. F. Saija, S. Prestipino, and G. Malescio,

"Anomalous phase behavior of a soft-repulsive potential
with a strictly monotonic force",
Phys. Rev. E vol.80, 031502 (2009).

3. S. V. Buldyrev, G. Malescio, C. A. Angell, N. Giovambattista, S. Prestipino, F. Saija, H. E. Stanley, and L. Xu,

"Unusual phase behavior of one-component systems with two-scale isotropic interactions",
J. Phys.: Condens. Matter vol.21, 504106 (2009).

6.14 Meccanica statistica *ab initio* in sistemi metallici

Componenti: Ezio Bruno (PA), Beniamino Ginatempo (PO), Francesco Mammano (DR)

Attività di Beniamino Ginatempo

Proprietà fisiche di leghe metalliche

Nel periodo indicato si è affrontato lo studio dei meccanismi microscopici che determinano le proprietà fisiche di equilibrio di sistemi metallici approfondendo il ruolo della struttura elettronica nel determinarle, in relazione alla distribuzione di carica elettrica.

1. Sistemi

I sistemi in studio sono stati leghe metalliche di interesse tecnologico (leghe di Cu-Zn, Ni₃V.);

2. Proprietà fisiche

Le proprietà cui ci siamo interessati sono state:

- 1- La stabilità di fase e le transizioni di fase nello stato solido nelle leghe metalliche, sistemi magnetici e superconduttori;
- 2- Superfici di Fermi e loro ruolo nelle proprietà al punto 2.1;

3. Metodologie ed approssimazioni

Le metodologie usate sono state:

- 1- Teoria dello scattering multiplo (KKR) per la determinazione della struttura elettronica per i sistemi nelle fasi ordinate, tutte nell'ambito della Density Functional Theory e della Local Density Approximation (LDA);
- 2- La Generalized Coherent Potential Approximation (GCPA) nell'ambito della teoria dello scattering multiplo (KKR-CPA) e LDA per le leghe nelle fasi disordinate (soluzione solida, fase paramagnetica);

4. Collaborazioni scientifiche

Si sono sempre attive collaborazioni con

- Università di Warwick (UK), J.B. Staunton
- Università di Bristol (UK), M.A. Alam, S.B. Dugdale
- Oak Ridge National Laboratory (USA), G.M.Stocks

Elenco pubblicazioni recensite su riviste internazionali

Bruno, E., Mammano, F., Ginatempo, B.

- *Coarse grained density functional theory of order-disorder phase transitions in metallic alloys*
Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics vol 79 (1-8) 2009, art. no. 184204,

Attività pubblicistica e divulgativa

Seminario Energia Nucleare, Circolo Sinistra unita di Vittoria (RG), 27/02/2009

Seminario su Energia e sue trasformazioni presso ccl in Scienze Biologiche 27/03/2009

Seminario su Energia e Entropia, presso associazione Terra e Cielo, 25/11/2009

Seminario su Entropia e freccia del Tempo, Facoltà di Lettere 11/11/2009

Articolo su piano energetico siciliano su La Repubblica-Palermo, 22/2/2009

Articolo su rischio sismico La Repubblica-Palermo, 22/05/2009

Articolo su problematica dei rifiuti in Sicilia, Quotidiano di Sicilia del 13/10/2009

6.15 Informatica: M²AG: Milan-Messina Action Group

Componenti:

- A. Provetti(PA, INF01, Fac. di Scienze MMFFNN, in sabbatico dal'1.XI.2009)
- G. Fiumara (RU, INF01, Fac. di Statistica)
- M. Marchi (dottore di ricerca, INF01)
- F. Pagano (dottorando in Informatica)
- E. Ferrara (dottorando in Informatica)
- G. Pirrotta(dottorando in Matematica, ruolo tecnico-informatico (cat. D) presso la Fac. di Sc. Politiche)
- N. Spada (ruolo tecnico-informatico (cat. D) presso la Facolta' di Lettere e Filosofia)
- R. Pagano (ruolo tecnico-informatico (cat. C) presso la struttura d'Ateneo CARECI)
- tesisti triennali e magistrali indicati in basso

Attività di ricerca

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

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

Nell'anno 2009 la nostra attività di ricerca ha consistito principalmente in attività riconducibili ai PRA degli anni precedenti:

- Rappresentazione della conoscenza
- Estrazione automatica di dati da sorgenti web (in particolare da social network)

La proposta PRIN 2008 "Integrazione tra Programmazione Logica Disgiuntiva e RDF: Applicazioni" come sede consorziata ha ottenuto valutazione positiva (56/60) ma non è stata ammessa a finanziamento.

-- Pubblicazioni --

- 1-G. Grossi, M. Marchi, E. Pontelli and A. Provetti, 2009.
Experimental Analysis of Graph-based Answer Set Computation over Parallel and Distributed Architectures.
Journal of Logic and Computation, Vol. 19:4 pp. 697--715.
- 2-B. Bonasera, F. Pagano, A. Provetti, 2009
Flexible Interpolated-Binary Search over Sorted Sets.
Preprints of the Italian Conference on Theoretical Computer Science (ICTCS09).
- 3-S. Costantini and A. Provetti, 2009.
A Lower bound for Answer Set Computation.
Proc. of LANMR09, the 4th Latin-American Workshop on Nonmonotonic Reasoning.
Vol. 533 of CEUR-WS series.

6.16 Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico

Componenti: Andrea Nucita, Giovanni Pizzimenti

Attività scientifica

L'attività di ricerca si è orientata sui due soggetti principali: le basi di dati spaziali e l'informatica medica.

Entrambi i temi hanno portato a pubblicazioni scientifiche di seguito riportate.

Basi di Dati Spaziali

Nei lavori relativi a questo tema, è stato riportato un contributo originale riguardo alla integrazione di diversi tipi di rappresentazione dell'informazione spaziale (geometrica e topologica), al fine di migliorare la risposta alle interrogazioni di selezione spaziale.

La recente diffusione dei dati georeferenziati, e la loro integrazione (soprattutto sul Web) pone questioni riguardanti l'integrazione di dati provenienti da sorgenti eterogenee. È stato quindi proposto un sistema per l'integrazione di dati rappresentati al livello topologico e geometrico, insieme ad una tecnica per rispondere alle interrogazioni avvantaggiandosi di entrambe le rappresentazioni, anche in presenza di informazione incompleta.

Informatica medica

Nell'ambito di questa tematica sono state affrontate due questioni molto importanti nell'ambito dell'applicazione delle metodologie informatiche alla medicina: l'informatizzazione della cartella clinica e il supporto alle decisioni in ambito medico.

Diversi studi sono stati condotti al fine di applicare le tecniche e le metodologie informatiche (come le Basi di Dati, i Sistemi Informativi Geografici e l'analisi dei dati in genere) alla medicina, in contesti di studio e reali.

Pubblicazioni

1- NUCITA A., GIUSEPPE M BERNAVA, MICHELANGELO BARTOLO, FABIO DI PANE MASI, PIETRO GIGLIO, MARCO PERONI, GIOVANNI PIZZIMENTI AND LEONARDO PALOMBI (2009).

A global approach to the management of EMR (Electronic Medical Records) of patients with HIV/AIDS in Sub-Saharan Africa: the experience of DREAM Software.

BMC MEDICAL INFORMATICS AND DECISION MAKING; p. 9-42, ISSN: 1472-6947, doi: 10.1186/1472-6947-9-42.

2- CUZZOCREA, NUCITA A. (2009).

I-SQE: A Query Engine for Answering Range Queries over Incomplete Spatial Databases.

LNAI - KES 2009. Santiago, Chile, 28, 29 and 30 September 2009 Springer Berlin / Heidelberg.

3- CUZZOCREA, NUCITA A. (2009).

Reasoning on Incompleteness of Spatial Information for Effectively and Efficiently Answering Range Queries over Incomplete Spatial Databases.

FQAS 2009 - Flexible Query Answering Systems. Roskilde, Denmark, October 26-28, 2009 Springer Berlin / Heidelberg.

6.17 Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali

Componenti: Giorgio Grasso

Attività scientifica

L'attività scientifica è stata focalizzata sullo studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali, sia in ambito medicale che industriale. Sono state investigate metodologie per il riconoscimento automatico e l'interpretazione autonoma di contenuti digitali. In particolare sono stati applicati metodi Neuronali per la classificazione supervised di immagini dell'encefalo acquisite in ambito clinico sperimentale, che hanno consentito la valutazione quantitativa di parametri utili a fini di follow-up diagnostico di pazienti patologici. E' stata sviluppata una nuova tecnica di riconoscimento della materia organica tramite analisi a raggi X, finalizzata alla classificazione delle componenti organiche presenti nel packaging alimentare, basata sulla risposta non lineare di radio-opacità al variare dell'energia di radiazione, nonché sull'organizzazione delle risposte multi spettrali in spazi parametrici multidimensionali.

Pubblicazioni

1. Celona A., Lanzafame P., Bonanno L., Marino S., Spanò B., Grasso G., Puccio L., Bramanti P. (2009). Artificial Neural Network (ANN) Morphological Classification by Euclidean Distance Histograms for Prognostic Evaluation of Magnetic Resonance Imaging in Multiple Sclerosis. Communications to SIMAI Congress. ISSN 1827-9015, Vol. 3 (2009).
2. Grasso G., Celona A., Pizzimenti G. (2009). Multi-Energy X-Ray Imaging for Automatic Classification of Packaged Foods. Submitted to Machine Vision and Applications.

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
BONANNO DOMENICO	dbonanno@unime.it	090-6765037	090-395004
BRANCA CATERINA	cbranca@unime.it	090-6765017	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
CAMPOBELLO STELLARIO	stellario.campobello@unime.it	090-6765035	090-396004
CARINI GIUSEPPE	carini@unime.it	090-6765014	090-395004
COSIO DANIELE	dcosio@unime.it	090-6765037	090-6765042
COSIO EMANUELE	ecosio@unime.it	090-6765456	090-395004
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
FIUMARA GIACOMO	giacomo.fiumara@unime.it	090-676	090-6765042
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	090-6765045	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	090-6765018	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	090-6765011	090-395004
MIGLIARDO FEDERICA	federica.migliardo@unime.it	090-6765012	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

COGNOME E NOME	POSTA ELETTRONICA	telefono	fax
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	090-6765010	090-395004
WANDERLINGH ULDERICO	uwanderlingh@unime.it	090-6765023	090-395004