



**UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA**

**DIPARTIMENTO DI FISICA**

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



**RAPPORTO DI ATTIVITA'**

**Anno 2010**

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

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

## INDICE

<b>INTRODUZIONE</b> .....	3
<b>1 Struttura del Dipartimento</b> .....	4
<b>2 Organi</b> .....	5
<b>3 Personale</b> .....	6
3.1 Professori di ruolo.....	6
3.2 Ricercatori .....	6
3.3 Personale Tecnico-Amministrativo dell'Università .....	6
3.4 Personale Tecnico-Amministrativo dell'INFN .....	6
3.5 Personale non strutturato .....	7
<b>4 Dottorato in Fisica</b> .....	8
<b>5 Tesi di Laurea e di Dottorato di Ricerca in Fisica</b> .....	9
<b>6 Attivita' di Ricerca</b> .....	11
6.1 Fisica dei plasmi in non-equilibrio 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 Studio della dinamica nelle reazioni nucleari e fotoproduzione di mesoni.....	20
6.4 Materiali disordinati.....	23
6.5 Processi di rilassamento in sistemi disordinati: liquidi glass-forming e vetri a conduzione ionica.....	27
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.....	37
6.9 Fisica Teorica e Computazionale dello Stato Liquido della Materia.....	39
6.10 Studio di comportamenti anomali in sistemi con repulsione sofficiizzata 39.....	40
6.11 Fisica dei Sistemi Complessi.....	41
6.12 Studio di membrane biomimetiche e soluzioni di macromolecole .....	44
6.13 Teoria e simulazione numerica di sistemi modello di meccanica statistica .....	45
6.14 Meccanica statistica ab initio in sistemi metallici .....	46
6.15 Informatica: M <sup>2</sup> AG: Milan-Messina Action Group.....	47
6.16 Informatica: Applicazioni di Base di Dati .....	48
6.17 Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali.....	48
<b>A. Contatti: telefono, posta elettronica e fax</b> .....	49

## INTRODUZIONE

**L'anno 2010** è stato il ventiduesimo 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 2010 è documentata da oltre 100 lavori su riviste internazionali con referee, da circa 30 reports e atti di convegno e da numerose comunicazioni anche su invito a congressi internazionali (oltre 50 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 2009/10 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 2010 sono state portate a termine, presso il Dipartimento di Fisica, 35 tesi di Laurea e di Laurea Magistrale e 5 tesi di Dottorato di Ricerca (XX III Ciclo).

Fa parte del dipartimento, il Centro di Criogenia che da alcuni anni produce elio liquido ed azoto liquido. 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 2010 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 (T. Minniti ), 1 Rappresentante degli Assegnisti ( F. Longo), 1 Rappresentante del personale tecnico-amministrativo (E. Cosio).

### *Direttore*

Prof. G. MAISANO

### *Segr. Amm.vo:*

Sig.ra G. La Spada

### *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	Ordinario 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	Ordinario 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
D. COSIO	Agente Tecnico
E. COSIO	Assistente Tecnico
M. CURRAO	Assistente Amministrativo
P. DONATO	Assistente Amministrativo
C. GENTILE	Coordinatore Tecnico
G. LA SPADA	Segretario Amministrativo (Ad Interim)
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:**

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

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

Federica Migliardo, Marina Manganaro, Mammano Francesco, Cristina Crupi

#### **4. DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA**

*Coordinatore 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 2010. In questo anno si sono tenuti i cicli XXIII, XXIV e XXV.

##### **Dottorandi:**

##### **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 2010:

Anno 2009

Lezioni Dottorato di Ricerca I anno XXV 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 2010

Lezioni Dottorato di Ricerca II anno XXIV ciclo

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

## 5- TESI DI LAUREA E DI DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA - ANNO 2010

### A. Tesi di Laurea

COGNOME E NOME	RELATORE	ARGOMENTO TESI di LAUREA
Triestino Minniti	L. Torrisi	Produzione di ioni da plasmi-laser per studi di reazioni nucleari D-D
Lucia Quattrocchi	Antonio Trifirò	Titolo della tesi: Sistema di tagging di fasci esotici presso l'apparato CHIMERA
Giovanni Pirrone	A. Trifirò	Dosimetria per radiation processing: calibrazione e correlazione di due sistemi di lettura per pellicole radiocromiche.
Marco Sessa	Antonio Trifirò	Fisica dei collider e scoperta del numero quantico di colore
Salvatore Leotta	Antonio Trifirò	Reazioni nucleari fra ioni pesanti e processi di frammentazione
Antonino Foti	Antonio Trifirò	Radioattività naturale e rischi connessi al radon
Sebastianella Norella	Antonio Trifirò	Studio di tecniche per la rivelazione di particelle cariche
Francesca Curciarello	Giorgio Giardina	Rilevanti effetti dinamici nelle reazioni nucleari tra nuclei pesanti .
Veronica De Leo	Giorgio Giardina	Misure di asimmetria di fascio nella fotoproduzione di mesoni
D'Amico Andrea	Maria Cutroni	Proprietà dielettriche in sistemi disordinati
Bombaci Salvatore	Maria Cutroni	Nanomateriali di interesse tecnologico
Costanzo Francesco	Mauro Federico	Coibentazione attiva di un sonicatore
Picciolo Riccardo	M. Federico	Studio del fenomeno delle chatbox nell'ambito dell'intelligenza artificiale
Alizzi Antonio	M. Federico	Ecografia
Spanò Orazio	M. Federico	Realizzazione di interfaccia per impianti di domotica
Di Perri Fabio	M. Federico	Procedure informatiche di sicurezza per la protezione civile
Cubeta Francesco	M. Federico	Riconoscimento ambientale
Rosina Alessandro	M. Federico	Una soluzione informatica alla ridotta percezione della direzione dei segnali sonori
Sonia Mangraviti	D. Majolino	Interazioni selettive nei sistemi supramolecolari.
Claudia Triolo	D. Majolino	Proprietà vibrazionali dei complessi di inclusione.
Mariapompea Cutroneo	D. Majolino	Evidenze dell'esistenza di un attrattore strano alle piccole scale dello strato limite atmosferico.
Milko Angelo Giuffrida	C.CACCAMO	Auto-organizzazione di sfere colloidali in strutture altamente ordinate: applicazioni tecnologiche
Bruno Russo	P. Giaquinta	<i>Comportamento critico di una miscela fluida all'interno di una matrice porosa</i> ”.
Cristina Speranza	P. Giaquinta	<i>Meccanica statistica di sistemi di particelle con potenziali repulsivi soffici: il modello Gaussiano</i>

Salvatore Catanese	Giacomo Fiumara	Analisi XML/RDF di dati relativi al traffico telefonico mobile per scopi forensi
Aurelio Merenda	Giacomo Fiumara	Il social network Cinexpress: progettazione e sviluppo di un sistema di recommendation e collaborative filtering
Luca Provenzale	Giacomo Fiumara	Verso il Web Semantico: mash-up per il confronto di dati RDF
Gianfranco Gignina	Giacomo Fiumara	Mozilla framework per lo sviluppo di applicazioni crossplatform
Nicola Mazzitelli	Giacomo Fiumara	Realizzazione di un sovra-profilo utente per il Social Semantic Web
Mario Laganà	Giacomo Fiumara	Computer Forensics: estensione al tool The SleuthKit per l'estrazione e l'analisi dello slack space
Sebastiano Torre	Giacomo Fiumara	Verso il Web dei dati: informazioni relazionali accessibili in formato RDF
Pietro Manti	A. Nucita	Realizzazione di un Sistema Informatico per la Numismatica
Domenico Bettini	A. Nucita	Visualizzazione Dati Spaziali
Walter Geraci	A. Nucita	Sicurezza dei dati: DBMS a confronto
Eros Fidone	Andrea Nucita	Un algoritmo efficiente per lo Skyline

## B. TESI DI DOTTORATO XXIII CICLO IN FISICA

<i>DOTTORANDO</i>	<i>TITOLO TESI</i>	<i>TUTORE</i>
Lorenzo Giuffrida	Ion production from laser ion source (LIS), post-acceleration methods and their applications"	PROF. Lorenzo Torrisi
Valeria Conti Nibali	Dinamiche locali e collettive di sistemi di interesse biologico: approccio sperimentale e simulativo	G. D'Angelo.
Antonio Benedetto	PROTEIN DYNAMICS BY NEUTRON SCATTERING	S. Magazù
Emanuele Calabrò	EFFECTS OF EXTREMELY LOW FREQUENCIES (ELF) AND MICROWAVES (MW) ELECTROMAGNETIC FIELDS ON CELLS AND ON THE PROTEINS' STRUCTURE	S. Magazù
Nancy Leone	DYNAMIC ARREST: NEW RESULTS AND NEW IDEAS	F. Mallamace

## **6. Attività di Ricerca**

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

- 1) Fisica dei plasmi in non-equilibrio generati da impulsi laser di potenza*
- 2) Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia e correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie*
- 3) Studio della dinamica nelle reazioni nucleari e fotoproduzione di mesoni*
- 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 repulsione sofficiizzata*
- 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: M<sup>2</sup>AG: Milan-Messina Action Group*
- 16) Informatica: Applicazioni di Base di Dati*
- 17) Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali*

## 6.1 Fisica dei plasmi in non-equilibrio generati da impulsi laser di potenza

### Partecipanti:

Prof. L. Torrasi, 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.

Durante il 2010 il Prof. Torrasi ha coordinato numerosi esperimenti svolti presso il “Laboratorio di Fisica dei Plasmi Laser” del Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina da lui diretto, il “Laboratorio Laser” dell’INFN - Laboratori Nazionali del Sud di Catania al quale è associato in qualità di Responsabile Nazionale di Ricerca in Gruppo V ed il “Laboratorio PALS” di Praga (Repubblica Ceca) presso il quale è stato ospite più volte collaborando a ricerche di carattere Internazionale.

In particolare il Prof. Torrasi ha concluso nel 2010 l’esperimento denominato PLEIADI (Plasma Laser Energetic Ion Acceleration & DIagnostics) che ha avuto durata triennale e che recentemente è stato “up-gradato” ad esperimento LIANA (Laser Ion Acceleration for Nuclear Application) con durata 2011-2013.

Tali esperimenti sono stati rivolti allo studio della fisica di plasmi in non-equilibrio generati da impulsi laser di intensità nel range  $10^8 \text{ W/cm}^2 - 10^{16} \text{ W/cm}^2$ . All’interno di tali plasmi si realizzano elevatissimi campi elettrici che permettono di accelerare ioni da pochi keV ad energie dell’ordine del centinaio di MeV, raggiungibili attualmente solamente con l’utilizzo di grandi macchine acceleratrici. I plasmi ottenuti da impulsi laser di potenza e di breve durata (10ns-10 fs) producono una serie di fenomeni di non equilibrio caratterizzati da alte disuniformità di distribuzione di temperatura, di energia, di densità e di carica elettrica.

Ad intensità laser dell’ordine di  $10^8 \text{ W/cm}^2$ , ottenute con impulsi di 3 ns di durata e 150 mJ del laser Nd:Yag del Dipartimento di Fisica di Messina, le temperature del plasma sono dell’ordine di alcune decine di eV, le energie degli ioni sono dell’ordine di 200 eV/stato di carica, le densità massime di circa  $10^{16} \text{ ioni/cm}^3$  e gli stati di carica massimi di circa 8+.

Ad maggiori intensità laser, dell’ordine di  $10^{11} \text{ W/cm}^2$ , ottenute con impulsi di 9 ns di durata e 800 mJ del laser Nd:Yag dell’INFN-LNS di Catania, le temperature del plasma sono dell’ordine del centinaio di eV, le energie degli ioni sono dell’ordine di 500 eV/stato di carica, le densità massime di circa  $10^{18} \text{ ioni/cm}^3$  e gli stati di carica massimi di circa 12+. In tal caso un sistema di post accelerazione, utilizzato a 30 kV, permette di post accelerare gli ioni estratti dal plasma ad energie massime di circa 360 keV.

Ad alte intensità laser, dell’ordine di  $10^{16} \text{ W/cm}^2$ , ottenute con impulsi di 300ps di durata e 600 J del laser a miscela di iodio dei Laboratori PALS di Praga, le temperature del plasma sono dell’ordine del decine di keV, le energie degli ioni sono dell’ordine di 300 keV/stato di carica, le densità massime di circa  $10^{22} \text{ ioni/cm}^3$  e gli stati di carica massimi, in elementi pesanti, di oltre 50+.

All’interno del plasma, in espansione adiabatica in vuoto, esistono forti gradienti spaziali e temporali dei parametri sopra descritti.

La disuniformità di carica elettrica spaziale e temporale porta alla formazione di un elevato campo elettrico dovuto principalmente ad una rapida emissione elettronica dalla targhetta solida irradiata che precede una più lenta emissione ionica dal cratere di ablazione. Tale campo è diretto prevalentemente lungo la normale alla targhetta irradiata lungo la quale direzione può raggiungere, nel caso di alte intensità laser, valori superiori alla decina di GV/cm. Il campo elettrico è il responsabile della piccata distribuzione energetica degli ioni emessi dal plasma lungo la direzione normale. In targhette spesse l’emissione ionica avviene all’indietro (generalmente il laser incide con un angolo di incidenza di  $45^\circ$ ); in targhette sottili (10-100 microns) l’emissione del plasma avviene sia all’indietro (meno pronunciato) che in avanti.

Le misure effettuate hanno permesso di verificare che i plasmi pulsati possono essere adoperati per generare fasci di ioni leggeri pulsati, di alta energia e di elevata corrente.

In particolare le alte rese di ablazione laser e le alte direttività di emissione del plasma lungo la normale alla superficie della targhetta irradiata rendono possibile ottenere fasci di ioni pulsati ben concentrati e diretti verso un bersaglio. Le distribuzioni energetiche degli ioni sono ben rappresentate da funzioni di Boltzmann shiftate verso le alte energie all’aumentare dello stato di carica. Le correnti ottenibili con tali fasci possono essere superiori all’ampere nel caso di fasci pulsati a qualche Hz con alte intensità di impulso laser e di qualche decina di mA nel caso di impulsi di bassa intensità.

Lo studio della post accelerazione, focalizzazione e filtraggio di questi fasci fa prevedere che in un prossimo futuro sarà possibile la costruzione di nuovi tipi di acceleratori adoperanti “laser ion sources”, più economici e compatti di quelli attuali.

L’impiantazione ionica, la preparazione di fasci di protoni, la preparazione di intense sorgenti di elettroni, di radiazione UV e di raggi X, rappresentano solo alcuni dei tanti possibili prodotti finali ottenibili con tali tipi di fasci di radiazione estratti dai plasm generati da impulsi laser di potenza.

#### Publicazioni su riviste ISI

- 1) F. Caridi, L. Torrisci, L. Giuffrida  
“Time-of-flight and UV spectroscopy characterization of laser-generated plasma”  
*Nucl. Instr. and Meth. B* 268,499- 505, 2010
- 2) S. Gammino, L. Torrisci, S. Cavallaro, L. Celona, L. Giuffrida, D. Margarone, D. Mascali and R. Miracoli  
“Recent results of the laser ion source facility at INFN-LNS and applications to nuclear and applied research”  
*Rev. Sci. Instr.* 81, 1, 02A5081-02A5083, 2010
- 3) A. M. Visco, L. Torrisci, N. Campo and A. Picciotto  
“Comparison of Surface modifications induced by ion implantation in UHMWPE”  
*International Journal of Polymer Anal. Charact.*, 15: 1–15, 2010
- 4) L. Giuffrida, L. Torrisci, L. Calcagnile and M. Rosinski  
“Ge post-acceleration from laser-generated plasma”  
*Nucl. Instr. And Methods A* 623, 716-719, 2010
- 5) D. Margarone, J. Krasa, L. Laska, A. Velyhan, T. Mocek, J. Prokupek, E. Krousky, M. Pfeifer, S. Gammino, L. Torrisci, J. Ullschmied and B. Rus  
“Measurements of the highest acceleration gradient for ions produced with a long laser Pulse”  
*Review of Scientific Instruments* 81, 02A506, 2010
- 6) L. Torrisci, F. Caridi, L. Giuffrida, A. Torrisci, G. Mondio, T. Serafino, M. Caltabiano, E.D. Castrizio, E. Paniz, A. Salici  
“LAMQS analysis applied to ancient Egyptian bronze coins”  
*Nucl. Instr. and Methods B*268,1657-1664 (2010)
- 7) L. Torrisci, F. Caridi, L. Giuffrida  
“Comparison of Pd plasmas produced at 532 nm and 1064 nm by a Nd:YAG laser ablation”  
*Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B* 268, 2285-2291, 2010
- 8) L. Torrisci, D. Mascali, R. Miracoli, S. Gammino, N. Gambino, L. Giuffrida, D. Margarone  
“Measurements of electron energy distribution in tantalum laser-generated plasma”  
*J. of Appl. Physics* 107, 123303 (2010); doi:10.1063/1.3429242 (8 pages)
- 9) L. Torrisci, A.M. Visco, N. Campo and F. Caridi  
“Pulsed Laser treatments of polyethylene films”  
*Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B* 268, 3117-3121, 2010
- 10) L. Torrisci, L. Giuffrida, M. Rosinski and C. Schallhorn  
“Ge and Ti post-ion acceleration from laser ion source”  
*Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B* 268, 2808-2814, 2010
- 11) L. Torrisci, S. Cavallaro, L. Giuffrida, S. Gammino and L. Andò  
“Ti post-ion acceleration from laser ion source”  
*Rad. Effects & Defects in Solids: Incorporating Plasma Science & Plasma Technology*  
Vol. 165, No. 6, June 2010, 1–12
- 12) L. Torrisci, T. Minniti and L. Giuffrida  
“Data elaboration of proton beams produced by high-energy laser-generated plasmas”  
*Rad. Effects & Defects in Solids: Incorporating Plasma Science & Plasma Technology*  
Vol. 165, No. 6, June 2010, 721–729
- 13) A.M. Visco, N. Campo, L. Torrisci and A. Borrielli  
“Polyethylene film welding induced by 532 nm pulsed laser”  
*Rad. Effects & Defects in Solids: Incorporating Plasma Science & Plasma Technology*  
Vol. 165, No. 6, June 2010, 601–608
- 14) P. Cianciafara, A.M. Visco and L. Torrisci  
“A laser scanning vibrometry for monitoring of stiffness and density defects in fibre-reinforced plastics”  
*Rad. Effects & Defects in Solids: Incorporating Plasma Science & Plasma Technology*  
Vol. 165, No. 6, June 2010, 659-667
- 15) F. Caridi, L. Torrisci, A. Borrielli and G. Mondio

- “Isotopic ratio measurements with laser ablation coupled to mass quadrupole spectrometry”  
*Rad. Effects & Defects in Solids: Incorporating Plasma Science & Plasma Technology*  
 Vol. 165, No. 6, June 2010, 668–680
- 16) L. Torrasi, F. Caridi, A. Borrielli, L. Giuffrida, A. Torrasi, G. Mondio, A. Mezzasalma, T. Serafino, M. Caltabiano, E.D. Castrizio, E. Paniz, M. Romeo and A. Salici  
 “LAMQS and XRF analyses of ancient Egyptian bronze coins”  
*Rad. Effects & Defects in Solids: Incorporating Plasma Science & Plasma Technology*  
 Vol. 165, No. 6, June 2010, 626-636
- 17) L. Láška, J. Badziak, K. Jungwirth, M. Kálal, J. Krása, E. Krouský, P. Kubeš, D. Margarone, P. Parys, M. Pfeifer, K. Rohlena, M. Rosinski, L. Ryc, J. Skála, L. Torrasi, J.Ullschmied, A. Velyhan and J.Wolowski  
 “Analysis of processes participating during intense iodine-laser-beam interactions with laser-produced plasmas”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 463–471
- 18) A. Mangione, G. Lanzara, L. Torrasi and F. Caridi  
 “Mechanical properties of nanostructured carbon layers grown by CVD and PLD techniques”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 746–753
- 19) G.A.P. Cirrone, G. Cuttone, M. Maggiore, L. Torrasi and F. Tudisco  
 “Diagnostic for the radiotherapy use of laser-accelerated proton beams”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 767–773
- 20) N. Gambino, D. Mascali, R. Miracoli, S. Gammino, D. Margarone, F. Musumeci, S. Tudisco and L. Torrasi  
 “Comparison between time-of-flight measurements and numerical simulations for laser-generated plasmas”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 543–550
- 21) S. Gammino, D. Mascali, L. Neri, L. Celona, G. Ciavola, N. Gambino, R. Miracoli, L. Torrasi and S. Tudisco  
 “Perturbation of the ECR plasma ion energy distribution function during the interaction with a laser-generated plasma”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 618–625
- 22) S. Lanzafame, A.M. Mezzasalma, G. Mondio, T. Serafino, F. Barreca, L. Torrasi and G. Bruno  
 “Structural, electronic, and optical properties of ITO thin films prepared at room temperature by pulsed laser deposition”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 592-600
- 23) D. Mascali, S. Gammino, L. Neri, L. Celona, N. Gambino, R. Miracoli, L. Torrasi and S. Tudisco  
 “Numerical simulations of the ion capture process for laser-generated plasmas interacting with electron cyclotron resonance ion sources”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 472-480
- 24) R. Miracoli, D. Mascali, N. Gambino, S. Gammino, L. Giuffrida and L. Torrasi  
 “Plasma plume characterization through the analysis of ion current signals”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 584-591
- 25) A. Picciotto, L. Torrasi, D. Margarone and P. Bellutti  
 “Particle size determination of silver nanoparticles generated by plasma laser ablation using a deconvolution method”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 706-712
- 26) L. Giuffrida, L. Torrasi, S. Gammino, J.Wolowski and J. Ullschmied  
 “Surface ion implantation induced by laser-generated plasmas”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 534-542
- 27) D. Margarone, J. Krása, L. Láška, A. Velyhan, T. Mocek, L. Torrasi, L. Andò, S. Gammino, J. Prokupek, E. Krousky, M. Pfeifer, J. Ullschmied and B. Rus  
 “Preliminary studies on fast particle diagnostics for the future fs-laser facility at PALS”  
*Rad. Eff. & Defects in Solids: Inc. Plasma Sci. & Plasma Tech.* 165(6–10), 2010, 419-428
- 28) L. Torrasi  
 “Laser-induced ablation: Physics and diagnostics of ion emission”  
*Nukleonika*, in press 2010
- 29) L. Giuffrida and L. Torrasi  
 “Post-acceleration from laser-generated plasma”  
*Nukleonika*, in press 2010
- 30) L. Torrasi, F. Caridi, A.M. Visco and N. Campo  
 “Polyethylene welding by pulsed visible laser irradiation”

- Applied Surface Science 257 (2011) 2567–2575
- 31) L. Torrasi, F. Caridi and L. Giuffrida  
 “Protons and ion acceleration from thick targets at 1010 W/cm<sup>2</sup> laser pulse intensity”  
*Laser and Particle Beams*, in press, page 1 of 9, 2010
  - 32) D. Batani, L. Antonelli, A. Patria, O. Ciricosta, C. Cecchetti, P. Koester, L. Labate,  
 A. Giulietti, L. A. Gizzi, A. Moretti, M. Richetta, L. Giuffrida, L. Torrasi, M. Kozlov,  
 J. Nejd, M. Sawicka, D. Margarone, B. Rus, G. Schurtz, X. Ribeyre, M. Lafon,  
 C. Spindloe, T. O'Dell  
 “Laser-Plasma Coupling in the Shock-Ignition intensity regime”  
 Acta Technica- Nejaka Hlavicka 123 (2010), 123-456-466
  - 33) M. Maggiore, S. Cavallaro, G.A.P. Cirrone, G. Cuttone, L. Giuffrida, F. Romano,  
 L. Torrasi  
 “Design and realisation of a Thomson Spectrometer for Laser Plasma Facilities”  
 Acta Technica-Nejaka Hlavicka 123 (2020), 123-456
  - 34) L. Torrasi and L. Giuffrida  
 “Post-acceleration of Ions produced by laser-generated plasma”  
 Acta Technica-Nejaka Hlavicka in press, 2010
  - 35) L. Torrasi, F. Caridi, A.M. Visco and N. Campo  
 “Effect of filler amount in the welding of plastics induced by visible laser irradiation”  
 Acta Technica-Nejaka Hlavicka in press, 2010
  - 36) L. Torrasi, L. Giuffrida, D. Margarone, F. Caridi and F. Di Bartolo  
 “Low energy proton beams from laser-generated plasma”  
 NIMA, in press 2010
  - 37) D. Margarone, J. Krasa, A. Velyhan, J. Prokupek, E. Krousky, M. Pfeifer, L. Laska,  
 J. Ullschmied, B. Rus, A. Picciotto, L. Torrasi, L. Ryć, P. Parys  
 “High current, high energy proton beams accelerated by a sub-nanosecond laser”  
 NIMA, in press 2010

#### **Proceedings di Congressi Internazionali con Referees**

- 1) L. Torrasi and L. Giuffrida  
 “Post-acceleration of Ions produced by laser-generated plasma”  
 24<sup>th</sup> SPPT Int. Conference 14-17 June, Prague, Czech Republic
- 2) L. Torrasi, F. Caridi, A.M. Visco and N. Campo  
 “Visible laser irradiation applied for welding of plastic”  
 24<sup>th</sup> SPPT Int. Conference 14-17 June, Prague, Czech Republic
- 3) M. Maggiore, S. Cavallaro, G.A.P. Cirrone, G. Cuttone, L. Giuffrida, F. Romano, L. Torrasi  
 “Design and realisation of a Thomson Spectrometer for Laser Plasma Facilities”  
 24<sup>th</sup> SPPT Int. Conference 14-17 June, Prague, Czech Republic
- 4) S. Gammino, L. Celona, F. Maimone, D. Mascali, N. Gambino, R. Miracoli, G. Ciavola  
 and L. Torrasi  
 “Increase of beam brightness by means of improbe ECR heating in ECRIS – Electron  
 Cyclotron Resonance Ion Sources”  
 24<sup>th</sup> SPPT Int. Conference 14-17 June, Prague, Czech Republic
- 5) A. M. Mezzasalma, G. Mondio, L. Torrasi, F. Caridi  
 “Time-of-flight characterization of ZnO Laser-generated Plasma”  
 International Conference FLAMN-1 Fundamentals of Laser Assisted Micro-&  
 Nanotechnologies, July 5-8, 2010, St. Petersburg-Pushkin, Russia
- 6) D. Margarone, J. Krasa, A. Picciotto, A. Velyhan, J. Prokupek, L. Laska, L. Ryć, P. Parys,  
 L. Torrasi, P. Musumeci and B. Rus;  
 “Time-of-flight technique for detection of fast ions accelerated by high power laser”  
 XXXI ECLIM, 31st European Conference on Laser Interaction with Matter, P25, September  
 6-10, 2010, Danubius Hotel Gellért –Budapest, Hungary.
- 7) F. Caridi, L. Torrasi, L. Giuffrida and S. Gammino  
 “Ion detection from laser-generated plasma at intensities of 10<sup>10</sup> W/cm<sup>2</sup>”  
 37<sup>th</sup> EPS Conference on Plasma Physics, 21 - 25 June 2010, Dublin, Ireland
- 8) A. Torrasi, L. Giuffrida, F. Caridi, T. Serafino, E. Castrizio, G. Mondio and L. Torrasi  
 “Laser Ablation coupled to Mass Spectrometry (LAMS) applied to the Cultural Heritage”  
 Proc. YOUTH in CONSERVATION OF CULTURAL HERITAGE – YOCOCU, Palermo (Italy), 24<sup>th</sup> – 26<sup>th</sup>  
 May 2010
- 9) L. Torrasi, L. Giuffrida, D. Margarone, F. Caridi and F. Di Bartolo  
 “Low energy proton beams from laser-generated plasma”  
 Proc. Fourth International Conference on Superstrong fields in Plasma 2010, Varenna, 3-9

October 2010

- 10) D. Margarone, J. Krasa, A. Velyhan, J. Prokupek, E. Krousky, M. Pfeifer, L. Laska, J. Ullschmied, B. Rus, A. Picciotto, L. Torrisci, L. Ryć and P. Parys  
“High current, high energy proton beams accelerated by a sub-nanosecond laser”  
Proc. Fourth International Conference on Superstrong fields in Plasma 2010, Varenna, 3-9  
October 2010

### Proceedings e Reports Nazionali

- 1) L. Torrisci, S. Gammino, L. Giuffrida, L. Andò, F. Caridi, D. Mascali, F. Di Bartolo and A. Baglione  
“Plasma laser energetic ion acceleration & diagnostics (PLEIADI): Project upgrade 2010”  
INFN-LNS Report 2009, 250-253, printed 2010
- 2) S. Gammino, L. Celona, G. Ciavola, L. Torrisci, A.M. Mezzasalma, G. Mondio, D. Mascali, R. Miracoli, N. Gambino, F. Maimone, L. Neri, L. Andò, S. Manciangli, S. Lanzafame, T. Serafino, F. Caridi, H. Koivisto, V. Toivanen, O. Tarvainen, T. Ropponen, G. Machicoane, L. Sun, D. Cole, H. Laqua, M. Otte, Y. Podoba, S. Chikin  
“Report about the HELIOS activities in 2009”  
INFN-LNS Report 2009, 178-182, printed 2010
- 3) G.A.P. Cirrone, S. Cavallaro, G. Cuttone, L. Giuffrida, M. Maggiore, F. Romano, L. Torrisci  
“Preliminar studies for the realisation of a Thomson spectrometer for laser accelerated charged particles”  
INFN-LNS Report 2009, 148-151, printed 2010
- 4) N. Campo, A.M. Visco, L. Torrisci and F. Caridi  
“Giunzione di film polimerici indotta da sorgente laser”  
10° Conv. Naz.le AIMAT, Capo Vaticano (VV) 5-8 Settembre 2010
- 5) L. Torrisci, G. Mondio, A.M. Mezzasalma, F. Caridi, L. Giuffrida, T. Serafino, F. Di Bartolo, A. Baglione and A. Torrisci  
“Laser ablation coupled to mass quadrupole spectrometry (LAMQS) applied to ancient coins”  
II° Workshop “Plasmi, Sorgenti, Biofisica ed Applicazioni”, Lecce, 26 Ottobre 2010
- 6) F. Caridi, L. Torrisci, L. Giuffrida and F. Di Bartolo  
“Protons production by thin films laser ablation”  
II° Workshop “Plasmi, Sorgenti, Biofisica ed Applicazioni”, Lecce, 26 Ottobre 2010
- 7) L. Torrisci  
“Prima Giornata di Studio del Dottorato di Ricerca in Fisica dell’Università di Messina”  
Activity Report 2010, Dottorato di Ricerca in Fisica-Università di Messina,  
L. Torrisci Ed., ISSN 2038-5889, pg. 7-8, 2010
- 3.298) L. Giuffrida, L. Torrisci  
“Ion Implantation by post acceleration of ions produced by laser generated plasma”  
Activity Report 2010, Dottorato di Ricerca in Fisica-Università di Messina,  
L. Torrisci Ed., ISSN 2038-5889, pg. 35-38, 2010
- 8) F. Caridi, L. Torrisci  
“The research laboratories of the PhD courses in Physics”  
Activity Report 2010, Dottorato di Ricerca in Fisica-Università di Messina,  
L. Torrisci Ed., ISSN 2038-5889, pg. 73-76, 2010
- 9) F. Di Bartolo, L. Torrisci, F. Caridi, L. Giuffrida, A. Baglione  
“Acceleration of protons from thin targets irradiated by pulsed laser”  
Activity Report 2010, Dottorato di Ricerca in Fisica-Università di Messina,  
L. Torrisci Ed., ISSN 2038-5889, pg. 103-106, 2010

## **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), A. Italiano, D. Loria, E. Morgana T. Minniti, S. Santoro, 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 2010, 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 addizionato con acido ialuronico e 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 in varie percentuali ed irraggiati con elettroni, al fine di ottimizzare il trattamento per proporre il polimero per applicazioni biomediche quali, per esempio, la realizzazione di protesi.

Inoltre, è stata intrapresa una nuova sistematica su hydrogels di PEO a vari pesi molecolari, cercando le migliori condizioni sperimentali per una sintesi di tipo industriale.

In collaborazione con l'Istituto Tecnologie Avanzate di Trapani and il DIFTER dell'Università di Palermo sono stati effettuati alcuni test mediante l'irraggiamento di bulk di nano tubi di carbonio al fine di studiare gli effetti delle radiazioni ionizzanti sulle proprietà meccaniche dei CNT e la loro resistenza alle radiazioni, avendo i CNT un forte potenziale nel campo della tecnologia nucleare e in altri settori tecnologici di notevole importanza.

Parallelamente alle ricerche sopraesposte, è iniziato lo sviluppo di un calorimetro controllabile da remoto, che consenta la misura dell'energia del fascio e che possa essere proposto come strumento di taratura per gli impianti di trattamento industriali.

### **Reazioni nucleari ed equazione di stato della materia nucleare**

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 multi rivelatore CHIMERA e viene svolto in collaborazione con le sezioni INFN di Catania, LNS, Milano, Napoli ed altri gruppi stranieri.

Nell'ambito di questo esperimento il gruppo di ricerca si sta muovendo su due diversi fronti. Da una parte si sta estendendo lo studio della dipendenza dei meccanismi di reazione dall'isospin (intrapreso negli anni precedenti) verso le *neutron* e *proton drip lines*. Presso i Laboratori Nazionali del Sud di Catania è stata implementata la produzione di fasci esotici tramite il metodo *in flight*, che permette la produzione di nuclidi instabili in un ampio range di isospin; essi però hanno vite medie brevissime quindi il loro utilizzo è molto problematico. Nel corso del 2010 è stato ottimizzato un apparato che permette di trasportare ed etichettare

questi nuclidi all'interno della camera di reazione che alloggia CHIMERA. I primi esperimenti effettuati hanno prodotto degli ottimi risultati, permettendo di studiare sistemi come il  $^{12}\text{Be}$  e  $^{17}\text{C}$ , che prima d'oggi erano impensabili. L'analisi dei dati acquisiti è tuttora in corso.

Parallelamente si sta sviluppando un progetto (ASYEOS) rivolto allo studio del termine di asimmetria dell'equazione di stato nucleare.

Recenti studi sulle reazioni tra ioni pesanti alle energie di Fermi hanno portato a significanti progressi nella determinazione del comportamento dell'energia nucleare di simmetria a densità inferiori a quella normale. Non sono invece disponibili informazioni sperimentali accurate sull'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 dell'equazione di stato bisogna misurare il flusso di nucleoni emessi in reazioni tra nuclei ricchi di neutroni ad energie elevate.

In quest'ottica è stato avviato un esperimento presso il GSI di Darmstadt (Germania), dove il Sincrotrone per ioni pesanti SIS è in grado di produrre fasci con energie superiori ad 1 GeV per nucleone.

Per la rivelazione dei prodotti di reazione sono stati accoppiati alcuni fra i più grandi rivelatori al mondo: la parte in avanti del multirivelatore CHIMERA, il Large Area Neutron Detector (LAND) del GSI, ALADiN TOF wall, l'odoscopio FOPI, un prototipo di R3B CALIFA ed il Krakow Phoswich Array.

Durante l'autunno gli apparati sperimentali sono stati posizionati nella cave C del GSI, interfacciati fra loro e testati con fasci parassiti, in vista del primo esperimento previsto per la primavera del 2011

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

1) J.Wilczynski, I.Skwira-Chalot, K.Siwiek-Wilczynska, A.Pagano, F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, V.Baran, J.Brzychczyk, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, M.Colonna, E.De Filippo, M.Di Toro, W.Gawlikowicz, E.Geraci, A.Grzeszczuk, P.Guazzoni, S. Kowalski, E.La Guidara, G.Lanzalone, J.Lukasik, C.Maiolino, Z.Majka, N.G.Nicolis, M.Papa, E.Piasecki, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, F.Porto, F.Rizzo, P.Russotto, K.Schmidt, A.Sochocka, L.Swidorski, A.Trifirò, M.Trimarchi, J.P.Wieleczko, L.Zetta, and W.Zipper "*Aligned breakup of heavy nuclear systems as a new type of deep inelastic collisions at small impact parameters*" **PHYSICAL REVIEW C 81**, 067604(2010)

2) P.Russotto, E.De Filippo, A.Pagano, E.Piasecki, F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, V.Baran, I.Berceanu, J.Blicharska, B.Borderie, R.Bougault, M.Bruno, J.Brzychczyk, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, A.Chbihi, M.Colonna, M.D'Agostino, R.Dayras, M.Di Toro, J.Frankland, E.Galichet, W.Gawlikowicz, E.Geraci, F.Giustolisi, A.Grzeszczuk, P.Guazzoni, D.Guinet, S. Kowalski, E.La Guidara, G.Lanzalone, G.Lanzanò, N.Le Neindre, C.Maiolino, Z.Majka, M.Papa, M.Petrovici, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, A.Pop, F.Porto, M.F.Rivet, F.Rizzo, E.Rosato, K.Schmidt, K.Siwiek-Wilczynska, I.Skwira-Chalot, A.Trifirò, M.Trimarchi, M.Vigilante, J.P.Wieleczko, J.Wilczynski, L.Zetta, and W.Zipper "*Strong enhancement of dynamical emission of heavy fragments in the neutron-rich  $^{124}\text{Sn}+^{64}\text{Ni}$  reaction at 35A MeV*" **PHYSICAL REVIEW C 81**, 064605(2010)

3) J.Wilczynski, I.Skwira-Chalot, K.Siwiek-Wilczynska, A.Pagano, F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, V.Baran, J.Brzychczyk, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, M. olonna, E.De Filippo, M.Di Toro, W.Gawlikowicz, E.Geraci, A.Grzeszczuk, P.Guazzoni, S. Kowalski, E.La Guidara, G.Lanzalone, J.Lukasik, C.Maiolino, Z.Majka, N.G.Nicolis, M.Papa, E.Piasecki, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, F.Porto, F.Rizzo, P.Russotto, K.Schmidt, A.Sochocka, L.Swidorski, A.Trifirò, M.Trimarchi, J.P.Wieleczko, L.Zetta, and W.Zipper "*Observation of fast collinear partitioning of the  $^{197}\text{Au}+^{197}\text{Au}$  system into three and four fragments of comparable size*" **PHYSICAL REVIEW C 81**, 024605 (2010)

#### Elenco Proceedings di Conferenze Internazionali:

1) F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, E.De Filippo, E.Geraci, L.Grassi, A.Grzeszczuk, P.Guazzoni, J.Han, 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, E.Rosato, P.Russotto, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Verde, M.Vigilante and L.Zetta “*STUDY OF EXOTIC BEAMS INDUCED REACTIONS IN THE REGION OF  $^{11}\text{Be}$  WITH CHIMERA ARRAY*”

**International Conference on Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei**, OCT 05-09, 2009 Messina ITALY

**INTERNATIONAL JOURNAL OF MODERN PHYSICS E-NUCLEAR PHYSICS VOL.19**

**Nos.5&6(2010)** 1096-1101

2) C.Parascandolo, D.Pierrotsakou, B.Martin, C.Agodi, R.Alba, A.Boiano, R.Coniglione, E.De Filippo, A.Del Zoppo, U.Emanuele, F.Farion, A.Guglielmetti, G.Inglima, M.La Commara, C.Maiolino, C.Mazzocchi, M.Mazzocco, M.Romoli, M.Sandoli, D.Santonocito, C.Signorini, R.Silvestri, A.Trifirò and M.Trimarchi

“*Dynamical dipole mode in heavy-ion fusion reactions*”

**10th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2009)**, AUG 16-21 2009 Beijing PEOPLES R CHINA

**NUCLEAR PHYSICS A 834(2010)** 198C-200C

3) F.Amorini, V.Sipala, G.Cardella, L.Auditore, C.Boiano, B.Carbone, A.Castoldi, A.Di Pietro, G.Fallica, P.Figuera, P.Finocchiaro, L.Grassi, E.La Guidara, C.Guazzoni, P.Guazzoni, I.Lombardo, D.Loria, A.Pappalardo, S.Pirrone, N.Randazzo, F.Rizzo, G.V.Russo, P.Russotto, C.Scirè, S.Scirè, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Valvo, L.Zetta

“*A new monolithic silicon detector telescope with bidimensional sensitivity for imaging applications*”

**10th International Conference on Nucleus-Nucleus Collisions (NN2009)**, )AUG 16-21 2009 Beijing PEOPLES R CHINA

**NUCLEAR PHYSICS A 834(2010)** 758C-760C

4) K.Schmidt, A.Benisz, A.Bubak, A.Grzeszczuk, S.Kowalski, W.Zipper, F.Amorini, A.Anzalone, L.Auditore, V.Baran, J.Brzychczyk, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, M.Colonna, E.De Filippo, M.Di Toro, W.Gawlikowicz, E.Geraci, P.Guazzoni, E.La Guidara, G.Lanzalone, J.Lukasik, C.Maiolino, Z.Majka, N.G.Nicolis, A.Pagano, M.Papa, E.Piasecki, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, F.Porto, F.Rizzo, P.Russotto, K.Siwiek-Wilczynska, I.Skwira-Chalot, A.Sochocka, L.Swidorski, A.Trifirò, M.Trimarchi, J.P.Wieleczko, J.Wilczynski, L.Zetta

“*LIGHT FRAGMENTS PRODUCTION AND ISOSPIN DEPENDENCES IN  $\text{Sn} + \text{Ni}$  AND  $\text{Sn} + \text{Al}$  CENTRAL COLLISIONS AT 25 MeV/A AND 35 MeV/A FROM REVERSE/ISOSPIN EXPERIMENTS*”

**31st Mazurian Lakes Conference on Physics**, AUG 30-SEP 06, 2009 Piaski POLAND

**ACTA PHYSICA POLONICA B 41(2010)**387-392

### 6.3 Studio della dinamica nelle reazioni nucleari e fotoproduzione di mesoni

**Componenti:** Prof. Giorgio Giardina (*Responsabile*), Prof. Giovanni Fazio, Dr. Giuseppe Mandaglio (Assegnista) e Dr. Marina Manganaro (Borsista Post-Doctoral). Dr. M. Romaniuk (Dottoranda XXV).

Sono stati sviluppati studi teorici e sperimentali nel campo delle reazioni nucleari indotte da ioni pesanti, al fine di metter in evidenza gli effetti del canale d'ingresso sui processi di cattura, quasifissione, fast fission, fusione completa, e sui prodotti finali di reazione (frammenti di fissione, emissione di particelle, e residui di evaporazione). I risultati ottenuti nell'indagine di diverse reazioni hanno sottolineato l'importanza della dinamica di reazione nei vari step del processo di formazione del sistema dinucleare fino all'ottenimento dei prodotti di reazione. È stato possibile valutare il contributo del processo di quasifissione nella misura dell'anisotropia angolare dei frammenti di fissione, anche in reazioni indotte da ioni relativamente leggeri quali  $^{32}\text{S}$ .

La decrescita delle sezioni d'urto dei residui di evaporazione nelle reazioni tra nuclei pesanti è spiegata dall'incremento della competizione del processo di quasifissione rispetto alla fusione completa, 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 di evaporazione e dei frammenti di fissione e quasifissione nella reazione  $^{48}\text{Ca}+^{154}\text{Sm}$  sono stati analizzati nell'ambito del metodo teorico basato sul concetto del sistema dinucleare nello stage della cattura, e dell'uso del modello statistico lungo i vari step della diseccitazione del nucleo composto. Tale metodo di calcolo è stato inoltre utilizzato per trovare le condizioni ottimali nella reazione 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  $^{64}\text{Ni}+^{238}\text{U}$  (reazioni in corso di indagine sperimentale presso i maggiori laboratori internazionali, quali il JINR di Dubna e il GSI di Darmstadt). I nostri calcoli dimostrarono che l'utilizzo della reazione  $^{54}\text{Cr}+^{248}\text{Cm}$  è preferibile in confronto alle altre due menzionate reazioni.

Sono state effettuate, inoltre, misure sperimentali della sezione d'urto di cattura nella reazione  $^{32}\text{S}+^{184}\text{W}$  ad energie di proiettile comprese nel range tra 118 e 144 MeV, presentando una ampia analisi di detta reazione anche a più alte energie di proiettile, nell'ambito del modello dinamico del sistema dinucleare.

Durante l'anno 2010, il gruppo ha partecipato allo sviluppo dei codici per l'analisi dei dati accumulati nell'esperimento GRAAL condotto presso la facility ESRF di Grenoble per lo studio della fotoproduzione dei mesoni prodotti nelle reazioni con proiettili  $\square$  polarizzati di energia compresa tra 0.6 e 1.5 GeV su un bersaglio di deuterio liquido.

Il Gruppo di Messina ha avuto la completa responsabilità dell'analisi dati per il canale di fotoproduzione del mesone  $\square^-$  su neutrone che ha portato alla pubblicazione del metodo sviluppato per l'identificazione degli eventi e delle prime asimmetrie di fascio ad alti valori di angolo polare nel sistema del centro di massa per energie di proiettili gamma utilizzati nell'esperimento Graal. Questo risultato è di particolare importanza perché ha evidenziato le attuali lacune dei maggiori modelli teorici (MAID, SAID e Gatchina-Bonn) interpretativi nella predizione dell'andamento delle asimmetrie di fascio e delle risonanze barioniche coinvolte.

Il gruppo ha organizzato il Simposio Internazionale "Quasifission Process in Heavy Ion Reactions" che si è tenuto presso l'Università di Messina nei giorni 8 e 9 Novembre 2010, a cui hanno partecipato studiosi-ricercatori degli Stati Uniti, Russia, Paesi della Comunità Europea, India, Cina e Giappone.

## Publicazioni

1. G. Mandaglio *et al.*, “*Beam asymmetry  $\eta$  measurements of  $\eta$  photoproduction on neutrons*”, Phys. Rev. C **82**, 045209 (2010).
2. J. P. Bocquet *et al.*, “*Limits on light-speed anisotropies from Compton scattering of high-energy electrons*”, Phys. Rev. Lett. **104**, 241601 (2010).
3. S. P. Maydanyuk, V. S. Olkhovsky, G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, and G. Giardina “*Bremsstrahlung emission of high energy accompanying spontaneous fission of  $^{252}\text{Cf}$* ” Phys. Rev. C **82**, 014602 (2010).
4. C. L. Zhang, H. Q. 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*”, Phys. Rev. C. **81**, 034611 (2010).
5. G. Mandaglio *et al.*, “*Data analysis and event identification of the  $\eta + n \rightarrow \eta + p$  reaction*”, Acta. Phys. Pol. B **41**, 399 (2010).
6. A.K. Nasirov, G. Mandaglio, M. Manganaro, A.I. Muminov, G. Fazio, G. Giardina, “*Quasifission and difference in formation of evaporation residues in the  $^{16}\text{O}+^{184}\text{W}$  and  $^{19}\text{F}+^{181}\text{Ta}$  reactions*”; Phys. Lett. B **686**, 72 (2010).
7. G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro, “*The interaction between radiation and linen of Turin*”; Rad. Eff. and Defect. in Sol. **165**, 337 (2010).
8. H. Q. Zhang, C. L. Zhang, H. M. Jia, C. J. Lin, F. Yang, Z.H. Liu, Z.D. Wu, F. Jia, X. X. Xu, A. Richard, A.K. Nasirov, G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Giardina, K. Hagino, “*Studies of heavy ion reactions around Coulomb barrier*” - Nuclear Physics Trends - AIP Conf. Proc. **1235**, 50 (2010).
9. D. O. Eremenko, V. A. Drozdov, S. Yu. Platonov, O. V. Fotina, O. A. Yuminov, G. Giardina, G. Mandaglio, and M. Manganaro, “*Dynamic Model of Mass–Angular Correlations of QuasiFission Fragments*” Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics **74**, 509 (2010) (ISSN 1062-8738), and in Russian in Izvestiya Rossiiskoi Akademii Nauk. Seriya Fizicheskaya **74**, 541 (2010).
10. G. Mandaglio *et al.*, “*Beam asymmetry  $\eta$  of the  $\eta$  photoproduction off neutron*”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 965 (2010).
11. V. Vegna *et al.*, “ *$\eta$  photoproduction at Graal*”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 1241 (2010).
12. A. Mushkarenkov *et al.*, “*photoproduction of  $\eta$  on the proton and deuteron at  $E_{\eta} = 0.7 - 1.5 \text{ GeV}$* ”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 1197 (2010).
13. M. Manganaro *et al.*, “*Preliminary results on  $\eta'$  photoproduction at Graal*”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 1177 (2010).
14. V.A. Drozdov *et al.*, “*Dynamic-statistical approach to the description of the induced fission in wide excitation energy range*”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 1249 (2010).
15. N.V. Eremin *et al.*, “*New experimental method of investigation the rare nuclear transformations accompanying atomic processes: bremsstrahlung emission in spontaneous fission of  $^{252}\text{Cf}$* ”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 1183 (2010).
16. S. Maydanyuk *et al.*, “*Bremsstrahlung emission accompanying decays and spontaneous fission of heavy nuclei*”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 1189 (2010).
17. V.A. Drozdov *et al.*, “*Dynamic approach to analysis of angular distributions of fission and quasifission fragments*”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 1125 (2010).
18. A. Nasirov *et al.*, “*Mechanisms producing fissionlike binary fragments in heavy ion collisions*”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 997 (2010).
19. G. Giardina *et al.*, “*Expectation and limits to synthesize nuclei with  $z > 120$* ”, Int. J. Mod. Phys. E **19**, 882 (2010).
20. G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro. “*The tracks of burial ointments on the Shroud of Turin*”. Science and Technology for Cultural Heritage. **19** 53 (2010) ISSN: 1724-1847
21. C. L. Zhang, H. Q. 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*”, Nuclear Physics A **834**, 201c (2010).
22. A K Nasirov, A I Muminov, G Giardina, G Mandaglio, M Manganaro, “*Mixing of fusion-fission and quasifission products in reaction with massive nuclei*”, Journal of Physics: Conference Series **205**, 012018 (2010).

## Comunicazioni a congressi

1. A.K. Nasirov, G. Fazio, G. Giardina, A.I. Muminov, G. Mandaglio, M. Manganaro “*Appearance of nuclear shell effects and initial charge (mass) asymmetry in formation of products in heavy ion collisions*” 17<sup>th</sup> Nuclear Physics

Workshop "Marie & Pierre Curie" Kazimierz 2010. G Giardina, A K Nasirov, G Mandaglio, F Curciarello, V De Leo, G Fazio, M Manganaro, M Romaniuk, C Saccà "Investigation on the quasifission process by theoretical analysis of experimental data of fissionlike reaction products" International Symposium "Quasifission Process in Heavy Ion Collisions", Messina (Italy) 8-9 November 2010.

2. A. Nasirov, G. Giardina, G. Mandaglio, M. Manganaro, W. Scheid "Dynamics of dinuclear system formation and its decay in heavy ion collisions" International Symposium "Quasifission Process in Heavy Ion Collisions", Messina (Italy) 8-9 November 2010.

3. H. Q. Zhang, C. L. Zhang, C. J. Lin, A. K. Nasirov, G. Mandaglio, M. Manganaro, and G. Giardina "Fusion-fission and quasifission competition in the  $^{32}\text{S}+^{184}\text{W}$  reaction" International Symposium "Quasifission Process in Heavy Ion Collisions", Messina (Italy) 8-9 November 2010.

4. S. P. Maydanyuk, V. S. Olkhovsky, G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina, and C. Saccà "Bremsstrahlung emission of photons accompanying ternary fission of  $^{252}\text{Cf}$ " International Symposium "Quasifission Process in Heavy Ion Collisions", Messina (Italy) 8-9 November 2010.

5. N. V. Eremin, S. S. Markochev, A. A. Paskhalov, G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina and M. V. Romaniuk "Investigation of high energy  $\gamma$ -rays accompanying spontaneous fission of  $^{252}\text{Cf}$  in double and triple neutron- $\gamma$  coincidences" International Symposium "Quasifission Process in Heavy Ion Collisions", Messina (Italy) 8-9 November 2010.

### ***Altri prodotti della ricerca***

Pubblicazione dei Proceedings della Conferenza Internazionale "Nuclear Reactions on Nucleons and Nuclei" sull'International Journal of Modern Physics E Volume 19 Numeri 5-6. Editori: Giorgio Giardina (University of Messina), Sigur Hofmann (GSI di Darmstadt) e Carlo Schaerf (University of Rome Tor Vergata). Publisher: Worldscientific.

Comitati del Simposio Internazionale "Quasifission Process in Heavy Ion Reactions", Messina 8-9 Novembre 2010 (**Chairman**: G. Giardina (Messina); **Co-Chairmen**: A.K. Nasirov (Dubna - Russia) e S. Pirrone (Catania); **Segretari Scientifici**: G. Mandaglio (Messina) e A. Di Pietro (Catania); **Comitato Organizzativo Locale**: G. Fazio (Messina), G. Giardina (Messina), G. Mandaglio (Messina), M. Manganaro (Messina), M. Romaniuk (Messina), C. Saccà (Messina), A. Di Pietro (Catania), S. Pirrone (Catania), A. Nasirov (Dubna).

## 6.4 Materiali disordinati

**Componenti:** Giuseppe Carini (PO), Giovanna D'Angelo (PA), Gaspare Tripodo (PA); Giovanni Carini (Assegno di Ricerca), Cristina Crupi (Borsa post-doc).

### 4. 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),

#### Tematiche scientifiche:

##### A. *Vibrational Dynamics and Relaxations in Glasses and Amorphous Polymers*

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

(i) **Local and Cooperative Molecular Mobility, Fragility and Anharmonicity in Interpenetrating Polymer Networks.**

An intriguing aspect of the dynamic behaviour of polymers is the understanding of the microscopic mechanisms regulating the temperature dependence of cooperative segmental relaxations. Polymers exhibit a complex molecular structure characterized by different intra- and inter-molecular forces, so that the chain environment gives rise to significant deviations from linearity and exponentiality of the cooperative primary or  $\alpha$ -relaxation over the glass-rubber transition region. From this point of view the “fragility” of a glass-forming liquid, a concept introduced by C. A. Angell, is an important property which measures the departure from the Arrhenius behaviour of its viscosity  $\eta$ . “Fragile” liquids, such as polymers, are substances with non-directional intermolecular bonds which permit drastic changes in the local order at the glass transition leading to pronounced deviations from the Arrhenius behaviour for the viscosity. Interpenetration of a polycyanurate network with linear polyurethane leads to the formation of semi-interpenetrating polymer networks (semi-IPNs) which exhibit an increasing dynamic fragility and a nearly constant thermodynamic fragility (measured by  $\frac{C_{p,l}}{C_{p,g}}$ , the ratio of

the liquid to glassy specific heat capacities at  $T_g$ ). These findings raise some doubts about the existence of a correlation between the cooperative molecular mobility and the variations of the configurational entropy at  $T_g$  characterizing the system, when it goes through the glass-rubber transition.

A further important question concerns the distinct correlation between the vibrational anharmonicity characterizing the glassy phase of semi-IPNs and the fragility. These observations imply that the fragility regulating the dynamics of a glass-forming liquid at the glass transition could play a significant role in determining the anharmonicity of the resulting glassy phase. “Fragile” as opposed to “strong” glass-formers should have an overall larger anharmonicity regulating their vibrational properties.

- (ii) **Structural Transformations in permanently densified vitreous B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.**  
Inelastic light scattering spectra of normal and permanently densified B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> glasses were investigated over the frequency range between 6 and 1600 cm<sup>-1</sup>. Densification from 1826 kg/m<sup>3</sup> up to 2400 kg/m<sup>3</sup> was obtained by loading B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> glasses in a multi-anvil apparatus for the synthesis at 2 and 4 GPa; they were fused at temperatures between 1400 and 1500 K and then quenched at that pressure. The compacted glasses exhibit an enormous increase of the elastic moduli by up to a factor 5 compared to those of normal glass. The low frequency Raman scattering includes the Boson peak, which dominates the spectra between 10 and 100 cm<sup>-1</sup>. Densification significantly decreases the intensity of the Boson peak and shifts its position from about 26 cm<sup>-1</sup>, through 39 cm<sup>-1</sup> (2 GPa glass), up to 74 cm<sup>-1</sup> (4 GPa glass), this increase being stronger than that expected from the hardening of the elastic continuum. At higher frequencies, no significant variations of the spectral features of the bands associated to the vibrational motion of units building up the network are revealed in 2 GPa glass, except for a decrease of the intensity of the band at 808 cm<sup>-1</sup> which implies a reduction of number of boroxol rings in the network. Further densification obtained at 4 GPa gives rise to the appearance of a band at 770 cm<sup>-1</sup>, ascribed to the vibrations of tetrahedral BO<sub>4</sub> groups in the network, and to a further decrease of the band at 808 cm<sup>-1</sup>. These observations imply that densification drives the system toward a structure having a more efficient packing of molecular units, giving rise to substantial variations of the short and medium-range order and to the formation of tetra-coordinated states of boron atoms.
- (iii) **Low-Temperature Thermal Conductivity and Specific Heat of Caesium Borate Glasses.**  
Low-temperature specific heat and thermal conductivity measurements have been performed on cesium borate glasses as a function of cesium oxide content. We have found experimental evidence of a concurrent growth of specific heat and thermal conductivity with increasing Cs<sup>+</sup> content. This finding shows the existence of an uncommon relationship between the peak in C<sub>p</sub>/T<sup>3</sup> and the plateau in thermal conductivity in glasses and represents the most intriguing result for these alkaline borate glasses. The role of local modes associated with heavy cations on the vibrational dynamics in oxide glasses has been considered. Furthermore, a possible correlation between low-temperature thermal properties and the structure on the nanometer length scale of these glasses is put forward.
- (iv) **Prepeak and First Sharp Diffraction Peak in the Structure Factor of (Cs<sub>2</sub>O)<sub>0.14</sub>(B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0.86</sub> Glass.**  
Neutron diffraction measurements on (Cs<sub>2</sub>O)<sub>0.14</sub>(B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0.86</sub> glass reveal two peaks over the same Q range where the first sharp diffraction peak (FSDP) is observed in the static structure factor of almost all glass-forming systems. The intensities of these peaks increase with temperature, and their positions shift to lower Q values, in agreement with the peculiarities of the FSDP of network glasses. A description of this anomalous temperature dependence in terms of thermal relaxations of strained bonding arrangements of boron oxide units lying on the boundaries of cages present in the boron skeleton matrix is suggested. By comparing the diffraction patterns of a (Cs<sub>2</sub>O)<sub>0.14</sub>(B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>0.86</sub> sample before and after a high temperature thermal treatment with the spectra of caesium crystals, a correspondence between the medium range structure in the glass and the related crystalline phases has been inferred.
- (v) **Vibrational and thermal properties of permanently densified GeO<sub>2</sub> glasses.**  
Vitreous GeO<sub>2</sub>, one of the main prototypes of strong glasses, was densified at several pressures up to 6 GPa, achieving more than 20% of densification. The density

dependence of the vibrational density of states and of the low temperature properties of these glasses was investigated by means of inelastic neutron scattering and calorimetric measurements. With increasing density, both the boson peak and the bump in  $\tilde{c}_p T^3$  vs  $T$  plot exhibit variations which are stronger than the elastic medium expectation. If one reduces the measured spectra to a common master curve, one finds that this is only possible for the densified samples; the first densification step has an additional effect, similar to other cases in the literature. Nevertheless, the existence of a master curve for the three densified samples proves that the total number of excess modes remains constant on further densification. At temperatures below 2 K, an additional contribution over that predicted by the Debye theory is observed:  $C_p$  follows an approximately linear temperature dependence disclosing a well-definite decrease with increasing glass density. By comparison with the observations in normal v-GeO<sub>2</sub>, we conclude that glass densification reduces the excess density of low-energy vibrational states over the Debye prediction, affecting significantly the density of two-level systems which are the source for the linear term. The results prove unambiguously that the density variations of the low-energy vibrational dynamics cannot be accounted for by the modifications of the elastic continuum.

### ***B. Structural and Dynamical Properties of Biological Systems.***

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

#### **(i) Low frequency dynamics of lysozyme.**

The low frequency vibrational dynamics of hen egg white dry lysozyme has been investigated by Raman scattering and low temperature specific heat ( $C_p$ ). The occurrence of low energy extra excitations have been revealed both in the light scattering spectrum and in the  $C_p/T^3$  vs.  $T$  plot. A perfect agreement in the frequency and temperature position of the Boson Peak in this protein has been observed. At temperature below 3 K it has been found a contribution to the specific heat similar to that revealed in glassy systems. This, together with the other analogies discovered between thermal properties of amorphous and biological systems, suggests the possibility of making the most of the knowledge about the former in order to understand some glassy-like behaviours of proteins.

#### **(ii) Effects of a short length alcohol on dimyristoylphosphatidylcholine system.**

Dimyristoylphosphatidylcholine systems having a high concentration of butanol (two molecules per phospholipid) have been investigated by performing X-Ray diffraction, differential scanning calorimetry and density measurements. A lowering of the main transition temperature for the membrane/alcohol system has been observed. The phospholipid bilayer/alcohol system is characterized by a higher density value than the pure membrane as determined by volumetric measurements. The analysis of diffraction patterns has put into evidence the existence of a more packed structure due to the presence of alcohol. The area of polar head has been also estimated.

### **Publicazioni.**

1. "Vibrational dynamics of permanently densified GeO<sub>2</sub> 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. **132**, 124508 (2010).
2. "Secondary cooperative mechanical relaxations and activation entropy in heterocyclic polymer networks", A. Bartolotta, G. Carini Jr, G. Carini, G. Di Marco, G. Tripodo, Macromolecules **43**, 4798 (2010).
3. "Low temperature specific heats of permanently densified glassy GeO<sub>2</sub>", G. Carini Jr, G. Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo L. Orsingher, A. Fontana, Phil. Mag. (2010) on line published: 10 December 2010.
4. "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).

5. "Fragility and anharmonicity in interpenetrating polymer networks", A. Bartolotta, G. Carini, G. D'Angelo, A. Fainleib, in *Thermostable Polycyanurates*, Editor Alexander Fainleib, (Nova Science Publishers Inc., New York 2010) Chapter 5, page 143.
6. "Local and cooperative molecular mobility in semi- and full-interpenetrating polymer networks of polycyanurates and polyurethanes", A. Bartolotta, G. Di Marco, G. Tripodo, A. Fainleib, in *Thermostable Polycyanurates*, Editor Alexander Fainleib, (Nova Science Publishers Inc., New York 2010) Chapter 4, page 113.
7. "Low frequency dynamics of lysozyme: A Raman scattering and low temperature specific heat study", C. Crupi, G. D'Angelo, U. Wanderlingh, V. Conti Nibali and C. Vasi, *Spectroscopy Biomedical Applications* 24, 201-205 (2010).
8. "Interaction of alcohol with phospholipid membrane: NMR and XRD investigations on DPPC-hexanol system", U. Wanderlingh, G. D'Angelo, V. Conti Nibali, C. Crupi, S. Rifici, C. Corsaro and G. Sabatino, *Spectroscopy Biomedical Applications* 24, 375-380 (2010).
9. "Prepeak and First Sharp Diffraction Peak in the Structure Factor of  $(\text{Cs}_2\text{O})_{0.14}(\text{B}_2\text{O}_3)_{0.86}$  Glass: Influence of Temperature", G. D'Angelo, C. Crupi, M. A. Gonzalez, E. Basile, V. Conti Nibali and C. Mondelli, *J. Phys. Chem. B* 114, 12565-12571 (2010).
10. "Raman spectroscopic and low temperature calorimetric investigation on the low energy vibrational dynamics of hen egg-white lysozyme, C. Crupi, G. D'Angelo, U. Wanderlingh and C. Vasi, *Phil. Mag.* (2010) in press.
11. "Effects of a short length alcohol on dimyristoylphosphatidylcholine system", S. Rifici, C. Crupi, G. D'Angelo, G. Di Marco, G. Sabatino, V. Conti Nibali, A. Trimarchi and U. Wanderlingh, *Phil. Mag.* (2010) in press.
12. "A Raman scattering study of permanently densified vitreous  $\text{B}_2\text{O}_3$ ", Giovanni Carini Jr, *Il Nuovo Cimento C* (2010) in press.

### Partecipazioni e Comunicazioni a congressi

1. "Low frequency Raman scattering and low temperature specific heat of densified vitreous  $\text{B}_2\text{O}_3$ ", Giovanni Carini Jr, Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Edmondo Gilioli, Gaspare Tripodo, C. Vasi, *11th Int. Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials, July 2010, Paris, France*. Oral communication, page 88.
2. "Vibrational dynamics, phonon localization and structural correlations on the nanometric length scale in glasses", G. D'Angelo and C. Crupi, *11th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials, July 2010, Paris, France*.
3. "Low temperature specific heat of densified vitreous  $\text{B}_2\text{O}_3$ ", Giovanni Carini Jr, Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Edmondo Gilioli, Gaspare Tripodo, *Boll. SIF 96*, page 49. Bologna 2010.
4. "A Raman scattering study of densified vitreous  $\text{B}_2\text{O}_3$ ", Giovanni Carini Jr, Giuseppe Carini, Edmondo Gilioli, Gaspare Tripodo, Cirino Vasi, *Boll. SIF 96*, page 49. Bologna 2010.
5. "Raman scattering spectra of densified vitreous  $\text{B}_2\text{O}_3$ ", Giovanni Carini Jr, Edmondo Gilioli, Gaspare Tripodo, Cirino Vasi, *XII International Workshop on Complex Systems, Andalo (Trento), 15-18 Marzo 2010*.
6. "Low temperature specific heats of permanently densified glassy  $\text{GeO}_2$ ", G. Carini Jr, G. Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo L. Orsingher, A. Fontana, *XII International Workshop on Complex Systems, Andalo (Trento), 15-18 Marzo 2010*.
7. "Anomalous dispersion of low temperature sound velocity in oxide glasses", C. Crupi, G. D'Angelo and G. Carini, *XII International Workshop on Complex Systems, Andalo (Trento), 15-18 Marzo 2010*.

### Collaborazioni nazionali ed internazionali

- Prof. U. Buchenau, Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, Germany
- Dr. A. Bartolotta, Dr. G. Di Marco, Dr. C. Vasi, IPCF-CNR, Messina, Italy.
- Dr. E. Gilioli, IMEM-CNR, Parma, Italy.
- Dr. Miguel A. Gonzalez, Institute Laue-Langevin, Grenoble, France.
- Prof. Alexander Fainleib, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 02160 Kyiv, Ukraine.
- Prof. A. Fontana, Dipartimento di Fisica, Università di Trento, Italy.
- Prof. Steve Martin, Iowa State University, Department of Materials Science and Engineering, Ames, IOWA, USA.

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

Componenti: Maria Cutroni, Mauro Federico, Andrea Mandanici

### Tematiche scientifiche:

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

**(a) Liquidi glass-forming.** Con l'ausilio del sistema per misure dielettriche broadband realizzato in sede sono state studiate le proprietà rilassamentali di vari liquidi glass-forming, non polimerici, a basso peso molecolare. Basandosi sul confronto fra proprietà dielettriche e risposta meccanica a frequenze ultrasoniche in funzione della temperatura è stato possibile porre in luce alcuni aspetti rilevanti che riguardano i processi di rilassamento secondari [Journal of Non-Crystalline Solids **357**, 264–266]. E' stato inoltre intrapreso uno studio sistematico delle proprietà dielettriche di liquidi ionici (RTIL, room temperature ionic liquids) nell'ambito di un progetto di collaborazione con i colleghi del Dipartimento di Chimica Inorganica, Chimica Analitica e Chimica Fisica dell'Università di Messina.

**(b) Vetri a conduzione ionica.** Sono state studiate le proprietà dinamiche di vetri a conduzione ionica al di sotto della temperatura di transizione vetrosa mediante effettuate misure dielettriche in funzione della frequenza (1 mHz – 40 GHz) e della temperatura (450 K – 3 K). I risultati sono stati discussi a confronto con le proprietà meccaniche a frequenze ultrasoniche. Sono stati studiati vari aspetti riguardanti la conducibilità dc, la permittività dielettrica complessa ed il modulo elettrico complesso, mettendo in evidenza forti analogie fra risposta dielettrica e risposta meccanica [A. Mandanici, M. Cutroni, M. Federico, 10th International Workshop on Non-crystalline solids, Barcelona 2010].

### Publicazioni

“On the features of the secondary relaxations: The case of cyclohexane derivatives”,  
A. Mandanici, M. Cutroni, R. Richert  
*Journal of Non-Crystalline Solids* **357** (2011) 264–266

### Seminari, comunicazioni e partecipazioni a congressi

1. A. Mandanici, M. Cutroni,  
”Focus on selected features of secondary relaxations”  
XII<sup>th</sup> International Workshop on Complex Systems, Andalo (TN) – Italy, 15-18 March 2010
2. A. Mandanici, M. Cutroni, M. Federico,  
” Investigating on mechanical and electric response of ionic glasses at ultrasonic frequencies” XII<sup>th</sup> International Workshop on Complex Systems, Andalo (TN) – Italy, 15-18 March 2010
3. A. Mandanici, M. Cutroni, M. Federico  
” Relaxation processes in ionic glasses studied by ultrasonic and dielectric spectroscopy”  
10<sup>th</sup> International Workshop on Non-Crystalline Solids- IWNC10, Barcelona (Spain) 20-23 April 2010 - Oral presentation
4. M. Cutroni, A. Mandanici, 6<sup>th</sup> International ECNP conference on Nanostructured Polymers and Nanocomposites, Madrid (Spain) 28-30 apr. 2010
5. A. Mandanici, “New results and questions on secondary relaxations”,  
Department of Applied Physics, Chalmers University of Technology  
Göteborg (Sweden), 8 october 2010.

## **6.6 Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biofisico – Metodologie fisiche applicate ai settori ambiente ed energia**

### **Componenti:**

Prof. Salvatore Magazù, Prof. Giacomo Maisano, Dr.<sup>ssa</sup> Federica Migliardo, Dr. Antonio Benedetto, Dr. Emanuele Calabrò, Dr. Francesco Parrillo, Dr. Alessandro Magazzù

### **Relazione sull'attività di ricerca (1 o max 2 Cartelle) svolta nell'anno 2010:**

Le tematiche di ricerca affrontate nell'anno 2010 sono state molteplici e sotto alcuni aspetti anche diverse, per quanto emerge 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.

Sono state impiegate le tecniche di indagine sperimentale disponibili 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 (F) e del CEMHTI di Orléans (F) 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 BENSF 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. L'attenzione è stata anche rivolta anche alla cosiddetta transizione dinamica che viene osservata nelle proteine idratate come un incremento improvviso del loro spostamento quadratico medio a valori in temperatura di circa  $T_D=200\div 250$  K. Sono state eseguite delle misure di scattering elastico di neutroni su lisozima dry, idratato, idratato con aggiunta di trealosio ed idratato con aggiunta di sucrosio. Inoltre, 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. Per quanto concerne le indagini sulle cellule, si sono utilizzate cellule neuronali di neuroblastoma (differenziate) a seguito di una collaborazione con il Dipartimento di Scienze Biochimiche, Fisiologiche e Nutrizionali del Policlinico di Messina. In collaborazione con le facilities ILL, Soleil ed ESRF, 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; inoltre è stata 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.

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 proseguita la 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 Europeo "ETPGAH: European Technology Platform for Global Animal Health".
- Progetto Europeo FP6 LIFESCIHEALTH - Il scrIN-SILICO: "Finding promising drug candidates against tuberculosis with multidisciplinary protocol based non-conventional search".
- 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 Ente Siciliano per l'Agricoltura.

Nel 2010 il Prof. S. Magazù è stato: a) chairman del Committee scientifico "Disordered Systems and Liquids" della facility European Synchrotron Radiation ESRF (Grenoble); b) responsabile e coordinatore per l'Italia del Working group "Spectroscopy" per la European Spallation Source (ESS); c) membro del Working Group "Training" per la European Spallation Source; d) membro del Committee scientifico "Disordered Systems and Liquids" della facility European Synchrotron Radiation ESRF (Grenoble); e) 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); f) membro della Giunta della Società Italiana per la Spettroscopia Neutronica (SISN); g) membro del Comitato Scientifico del Congresso Nazionale della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica 2010 di Sirolo; h) rappresentante della Società Italiana per la Spettroscopia Neutronica in occasione del meeting della Società Europea di Spettroscopia Neutronica (Vienna, 2010).

Nel 2010 la Dr. F. Migliardo 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). Ha tenuto il 28 Giugno 2010 le lezioni e le esercitazioni per le Giornate didattiche nazionali di spettroscopia neutronica, organizzate dalla SISN. Ha ricevuto il Premio Giovani Ricercatori indetto dall'Università di Messina. E' collaboratore scientifico della Fondazione Umberto Veronesi, di Le Scienze Web News e Agora. E' "Esperta in scienze della vita" per FEBS/EMBO/ELSO e membro dell'Advisory Board per l'*International Journal Advances in Natural and Applied Sciences*. E' membro della Giunta Esecutiva della SISN e del Consiglio Scientifico del Festival della Scienza di Genova.

Nel 2010 il Dr. A. Benedetto (dottorando di ricerca, tutore: Prof. S. Magazù) è stato esercitante dei corsi di Laboratorio IA e di Fisica IA del corso di laurea triennale in Fisica, tutor del corso di Fisica e di Matematica del corso di laurea triennale in Matematica del cdl in Biologia ed Ecologia Marina. Nello stesso anno ha partecipato a esperimenti di spettroscopia neutronica e, in seno al lavoro di tesi, ha trascorso periodi di attività presso la facility internazionale di spettroscopia neutronica Institut Laue-Langevin (Grenoble, Francia).

Nel 2010 il Dr. E. Calabrò (dottorando di ricerca, tutore: Prof. S. Magazù) ha svolto attività di ricerca congiunta tra il Dipartimento di Fisica e il Dipartimento di Biochimica del Policlinico Universitario di Messina. Ha partecipato al Convegno CPEM 2010 (Precision Electromagnetic Measurements 2010), Daejeon, 13-18 Giugno 2010 e alla scuola SISN "Introduzione alle tecniche neutroniche per lo studio microscopico della materia, con applicazioni alla Fisica, Chimica,

Biologia e Geologia” dal 27 Giugno al 5 Luglio 2010 – Sessione teorica a S. Giovanni (BZ) (25 ore) – Sessione sperimentale all’ Institut Laue-Langevin di Grenoble (45 ore).  
Nel 2010 il Dr. F. Parrillo (dottorando di ricerca, tutore: Prof. S. Magazù) ha svolto attività di ricerca congiunta tra il Dipartimento di Fisica e l’Istituto di Acustica Corbino (IDAC) del CNR di Roma.

### Articoli

- 1 - S. Magazù, F. Migliardo, F. Affouard, M. Descamps, M. T. F. Telling  
“Study of the relaxational and vibrational dynamics of bioprotectant glass-forming mixtures by neutron scattering and molecular dynamics simulation”  
Journal of Chemical Physics, 132, 184512 (2010).
- 2 - S. Magazù, F. Migliardo  
“Spectroscopic Study of the Physical Properties Making Trehalose a Stabilizing and Shelf life Extending Compound in Food Industry”  
Quality Assurance and Safety of Crops & Foods, 2, 56 (2010).
- 3 - S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, A. Benedetto  
“Motion Characterization by Self-Distribution-Function Procedure”  
Biochimica Biophysica Acta, 1804, 49 (2010).
- 4 - S. Magazù, F. Migliardo, A. Benedetto  
“Mean Square Displacements from Elastic Incoherent Neutron Scattering Evaluated by Spectrometers Working with Different Energy Resolution on Dry and Hydrated H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O Lysozyme”  
Journal of Physical Chemistry B, 114, 9268 (2010).
- 5 - D. Barreca, G. Laganà, S. Ficarra, E. Tellone, U. Leuzzi, S. Magazù, A. Galtieri, E. Bellocco. “Anti-aggregation properties of trehalose on heat-induced secondary structure and conformation changes of bovine serum albumin”.  
Biophysical Chemistry, 147(3), 146-152, 2010
- 6 - S. Magazù, F. Migliardo  
“Molecular Mechanisms of Bioprotection Process by Trehalose”  
Current Nutrition & Food Science, 6, 157 (2010).
- 7 - B. Varga, F. Migliardo, E. Takacs, B. Vertessy, S. Magazù, M. T. F. Telling  
“Study of the Solvent-Protein Coupling Effects by Neutron Scattering”  
Journal of Biological Physics, 36, 207 (2010).
- 8 - S. Magazù, F. Migliardo, A. Benedetto, M. Gonzalez, C. Mondelli  
“Self-distribution-function procedure in elastic incoherent neutron scattering for biosystems molecular motion characterization”  
Spectroscopy, 24, 387 (2010).
- 9 - S. Magazù, E. Calabrò, S. Campo  
“FTIR Spectroscopy Studies on the Bioprotective Effectiveness of Trehalose on Human Hemoglobin Aqueous Solutions under 50 Hz Electromagnetic Field Exposure”,  
The Journal of Physical Chemistry B 114, 12144, (2010).
- 10 - E. Calabrò, S. Magazù  
“Monitoring Electromagnetic Field Emitted by High Frequencies Home Utilities”,  
Journal of Electromagnetic Analysis & Applications 2(9), 571, (2010).
- 11 - E. Calabrò, S. Magazù  
“Inspections of Mobile Phone Microwaves Effects on Proteins Secondary Structure by means of Fourier Transform Infrared Spectroscopy”,  
Journal of Electromagnetic Analysis & Applications 2(11), 607, (2010).
- 12 - S. Magazù, F. Migliardo, A. Benedetto, E. Calabrò  
“Bioprotective Effects of Trehalose and Sucrose On Lysozyme”,  
Food Biophysics (accepted and in press) (2010).
- 13 - S. Magazù, E. Calabrò, S. Campo, S. Interdonato  
“New Insights into Bioprotective Effectiveness of Disaccharides : a FTIR Study of Human Haemoglobin Aqueous Solutions exposed to Static Magnetic Fields”,  
Journal of Biological Physics, DOI: 10.1007/s10867-010-9209-1 (in press) (2010).
- 14 - E. Calabrò, S. Magazù  
“Measure of electromagnetic field of mobile phone microwaves by means of Narda SRM 3000”  
in *Precision Electromagnetic Measurements (CPEM)-2010 Conference*, ISBN 978-1-4244-6795-2, 747 , (2010)
- 15- D’Amico S., Caccamo D., Parrillo F., Laganà C., Barbieri F.M., 2010. “The 20th september 1999 Chi-Chi earthquake (Taiwan): a case of study for its aftershock seismic sequence”. *Izvestiya, Physics of the Solid Earth*, 2010, Vol. 46, N° 4, pp. 317-326.

- 16- Caccamo D., Barbieri F.M., Laganà C., Parrillo F., Rubuano C., De Luca S., D'Amico S., 2010. "Investigating possible anomalies in the temporal decay of seismic sequence". Atti del XXIX Convegno Gruppo Nazionale Geofisica della Terra Solida, Trieste, Prato, 26-28 ottobre 2010, pp. 17-18.
- 17- S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, A. Benedetto, Biomolecular Motion Characterization by "Self-Distribution-Function Procedure in Elastic Incoherent Neutron Scattering", 1° Activity Report, ISSN 2038-5889, (2010).
- 18 - E. Calabrò, S. Magazù, R. Ientile, S. Campo, S. Condello "Non ionizing radiation effects on organic systems studied by Fourier Transform Infrared Spectroscopy", in Activity Report 2010, ISSN 2038-5889, ed. L. Torrisi, (2010).
- 19 - F. Parrillo, G. P. Gregori, S. Magazù. "Research of periodicities in Acoustic Emissions". 1° Activity Report, ISSN 2038-5889, (2010).

### **Comunicazioni e/o partecipazioni a congresso:**

1. - Salvatore Magazù  
*R&D Inelastic Neutron Scattering and Techniques*  
The ESS Project [European Spallation Source] opportunity for the Italian research?  
C.N.R. Aula Convegni Roma, 16 Novembre 2011. Talk su invito.
2. - Salvatore Magazù  
*Elastic Neutron Scattering on systems of biophysical interest*  
SISN Congresso Annuale 2010 23 Giugno, 2010, Università Roma Tre, Roma. Talk su invito.
3. - Salvatore Magazù  
*On the effectiveness of bioprotectant glass-forming systems*  
Hercules XX Symposium 20th Anniversary, Grenoble 25 Marzo 2010. Talk su invito.
4. - Salvatore Magazù  
*Water structural and dynamical properties changes induced by homologous disaccharides: a biophysical study*  
Frontiers in Water Biophysics, Trieste, 26 Maggio 2010. Talk su invito.
- 5.- F. Affouard, M. Descamps, S. Magazù, F. Migliardo  
*Dynamical Properties of Amorphous Bioprotectant Systems*  
International Symposium "HERCULES 2010 (20th anniversary)", 23-25 Marzo 2010, Grenoble, France.
- 6 - S. Magazù, F. Migliardo  
*Trehalose as a Stabiliser and Shelf-life Extending Compound in Cosmetics*  
International Conference "COSM'Innov 2010", 30-31 Marzo 2010, Orléans, France.
- 7 - A. Benedetto, S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo.  
*Effetti Bioprotettivi su sistemi di Proteine,*  
II Giornata di Ricerca d'Ateneo, Facoltà di Ingegneria, Università degli Studi di Messina, 15 luglio 2010. Talk.
- 8 - A. Benedetto, S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo.  
*Biomolecular Motion Characterization by Self-Distribution-Function Procedure in Elastic Incoherent Neutron Scattering,*  
I Giornata di Studio del Dottorato di Ricerca in Fisica dell'Università degli Studi di Messina, 10 Novembre 2010. Talk.
- 9 - E. Calabrò, S. Magazù, R. Ientile, S. Campo, S. Condello.  
"Non ionizing radiation effects on organic systems studied by Fourier Transform Infrared Spectroscopy",  
I Giornata di Studio del Dottorato di Ricerca in Fisica dell'Università degli Studi di Messina, 10 Novembre 2010. Talk.
- 10- F. Parrillo, G. P. Gregori, S. Magazù.  
"Research of periodicities in Acoustic Emissions".  
I Giornata di Studio del Dottorato di Ricerca in Fisica dell'Università degli Studi di Messina, 10 Novembre 2010. Talk.

## **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

Oggetto dell'attività di ricerca svolta nell'anno 2010 è stato lo studio di sistemi supramolecolari dovuti all'interazione non covalente tra due molecole, costituenti un complesso definito "host/guest" in cui una molecola agisce da recettore o legando dell'altra molecola. Complessi 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. Questi sistemi innovativi, oltre ad agire come promotori di assorbimento, consentono anche di realizzare formulazioni farmaceutiche a rilascio controllato e mirato in tempo e luogo. Tali formulazioni rendono, inoltre, possibile la somministrazione per vie alternative. L'attenzione è stata focalizzata, in particolare, su sistemi drug/carriers con idonee caratteristiche di solubilità e stabilità per l'applicazione in campo farmaceutico, quali complessi di inclusione con ciclodestrine sia native che modificate e sistemi nanoaggregati. E' stata pertanto effettuata una dettagliata indagine spettroscopica, implementata da approcci simulativi, delle proprietà strutturali e dinamiche dei suddetti sistemi, che, nel loro insieme, hanno la caratteristica di presentare un comportamento peculiare e di svolgere una funzione che le molecole prese singolarmente non svolgono.

La ricerca è stata inoltre anche svolta nel campo dei beni culturali ed ha avuto come obiettivo la caratterizzazione chimico-fisica, mineralogico-petrografica e tecnologica di differenti tipologie di manufatti ceramici, per una corretta collocazione storico-geografica. Particolare attenzione è stata poi rivolta alla individuazione degli agenti pigmentanti caratterizzanti le decorazioni del rivestimento ceramico, fornendo così informazioni importanti sulle ricette utilizzate per la colorazione, anch'esse espressioni del particolare periodo storico e della locazione geografica.

Le sopraccitate linee di ricerca possono pertanto essere così dettagliate:

### **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 traduce, nell'organismo, in una maggiore velocità di dissoluzione e biodisponibilità. In questo contesto, lo studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi drug/carrier aventi idonee caratteristiche di solubilità e stabilità è stato oggetto di crescente interesse scientifico. La nostra attenzione è stata prevalentemente rivolta ai complessi di inclusione "host-guest" e ai sistemi nanoaggregati. In particolare, le ciclodestrine, oligosaccaridi macrociclici costituiti da legami glucosidici tra unità monomeriche di D-glucosio, sono state largamente impiegate come host di riferimento in chimica supramolecolare grazie alla loro capacità di includere una vasta classe di molecole all'interno delle loro cavità idrofobiche per mezzo di interazioni non-covalenti. In vista dell'enorme importanza che tali sistemi rivestono in campo farmaceutico, è infatti noto il vantaggio della complessazione sulle proprietà organolettiche, farmacocinetiche e sulla stabilità della molecola guest, per la protezione ambientale e nell'industria alimentare, l'investigazione delle proprietà chimico-fisiche delle ciclodestrine e dei loro complessi di inclusione con una varietà di molecole apolari, è stata portata avanti, sia in soluzione acquosa, mediante l'ausilio di tecniche sperimentali, quali spettroscopia di assorbimento ultravioletto e visibile, che in fase solida, per mezzo di studi di spettroscopia Raman ed infrarossa (FT-IR).

Tra i risultati di maggiore rilievo ottenuti vanno ricordati gli studi riguardanti le proprietà dinamiche, in fase solida, di complessi di inclusione in -CD della Genisteina (Gen, C<sub>15</sub>H<sub>10</sub>O<sub>5</sub>), un

isoflavone agente sia nella profilassi e nella terapia del cancro sia in quella di altre malattie croniche. Le spettroscopie di assorbimento IR in traformata di Fourier in Attenuated Total Reflectance Geometry (FTIR-ATR) e Raman hanno permesso di caratterizzare le interazioni host-guest a livello molecolare. Sono stati rilevati cambiamenti nelle forme di banda FTIR-ATR e Raman del complesso rispetto alla Gen pura e alla miscela fisica (semplice mescolanza dei due componenti senza complessazione), interpretati confrontando i dati sperimentali con le frequenze vibrazionali e le intensità Raman e IR ottenute mediante simulazione della molecola guest "free" e complessata. Differenze nel grado di associazione via legame idrogeno durante la complessazione sono state postulate per spiegare le variazioni spettrali osservate nel profilo di stretching O-H, C=O, C=C, C-O-C, C-O e di bending C-H. Seguendo questa strategia, è stato possibile approfondire la comprensione delle interazioni host-guest coinvolte nella formazione e stabilizzazione di complessi, ponendo in particolare l'attenzione sul ruolo giocato dai gruppi chimici della molecola guest, e disaccoppiare gli effetti direttamente relati al processo di complessazione da quelli ascrivibili ad altri fattori, quali la dimerizzazione non covalente del guest. Sulla base di questi risultati, ci si è chiesti se altresì i moti della Gen sulla scala temporale dei ps risentono della formazione dei complessi di inclusione. Questa informazione può essere cruciale per chiarire le interazioni tra farmaco e macrociclo durante la complessazione, e, di conseguenza, per controllare il rilascio del farmaco onde ottenere specifici effetti terapeutici.

I sistemi farmaco-ciclodestrine non consentono un rilascio controllato, in tempo e luogo, dei farmaci. Studi recenti indicano che i nanoaggregati di ciclodestrine sono più efficaci incapsulatori di farmaci rispetto alla singola molecola di ciclodestrina, e che possono intrappolare e rilasciare in modo controllato guests alle cellule, preservando l'attività biologica delle molecole incapsulate. È stato pertanto effettuato uno studio FTIR-ATR della Gen in presenza di nanoaggregati di una ciclodestrina anfifilica, SC6OH [(2-O-oligo(ethyleneoxide)-6-hexylthio)-CD], a rapporto molare host/guest 1:1. Le differenze nelle caratteristiche spettrali FTIR-ATR del complesso rispetto alla miscela fisica hanno evidenziato i gruppi funzionali coinvolti nelle interazioni host-guest che pilotano la complessazione. Gli studi FTIR-ATR hanno rivelato la mancata inclusione del guest all'interno della cavità dell'host e la formazione di legame idrogeno tra il farmaco e le catene idrofiliche di PEG del macrociclo. Queste interazioni host-guest sono ipotizzate essere responsabili della stabilità termica del complesso, osservata nell'intervallo fisiologico di temperatura. Queste evidenze gettano luce sulla complessazione di farmaci in nanocarriers host in fase solida e aprono la strada per l'individuazione delle interazioni supramolecolari in specie complessate host/drug/receptor per il rilascio mirato di farmaci.

## **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 degli oggetti da analizzare. In tal senso l'analisi dei reperti in oggetto può essere realizzata sviluppando tecniche spettroscopiche assolutamente non distruttive che nel contempo favoriscano il riconoscimento 'in situ' di componenti presenti anche a livello di tracce. In tale riferimento lo studio in questo campo è stato principalmente rivolto alla caratterizzazione chimico-fisica, mineralogico-petrografica e tecnologica di differenti tipologie di reperti ceramici decorati.

L'identificazione dei pigmenti utilizzati per la decorazione dei manufatti ceramici si rivela estremamente importante per la loro datazione ed autenticazione, dal momento che le ricette utilizzate nella preparazione delle sostanze coloranti sono diverse a seconda della collocazione temporale del reperto stesso. A tale scopo, sono state utilizzate tecniche analitiche di superficie che hanno permesso di investigare le decorazioni senza intaccarne l'integrità. In questo contesto, sono state realizzate misure di spettroscopia di assorbimento di raggi X (XAS) utilizzando come sonda luce di sincrotrone presso il laboratorio internazionale European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble (Fr). La radiazione di sincrotrone (SR) ha recentemente portato enormi vantaggi all'applicazione dell'usuale scattering di raggi X ai beni culturali, essendo tale tecnica selettiva del

singolo elemento, non distruttiva, estremamente sensibile e capace di esaminare spessori dell'ordine di pochi  $\mu\text{m}$ . Tale tipo di analisi ha permesso di caratterizzare il principale agente pigmentante delle decorazioni di diverso colore e quindi di risalire alle diverse tecniche di preparazione utilizzate per i rivestimenti dei reperti. In particolare, sono stati analizzati con tecnica SR-XAS, unitamente a misure di microscopia elettronica a scansione accoppiata a spettrometria a dispersione di energia (SEM-EDS), frammenti ceramici rinascimentali ritrovati in un sito siciliano presso Caltagirone. Tale studio congiunto ha consentito una completa caratterizzazione microchimica e microstrutturale del rivestimento invetriato al fine di determinarne la natura dei pigmenti gialli e verdi utilizzati negli stati decorativi, e l'invetriatura stessa.

**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.

**Programma di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale, PRIN 2009 sottomesso: - (Prot. 20097PHWKR\_003)**

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

“Indagine chimico-fisica delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi supramolecolari”.

Coordinato Scientifico Nazionale: Prof. Daniele Fioretto, Università degli Studi di Perugia.

Responsabile Scientifico dell'Unità di Ricerca di Messina: Prof. Domenico Majolino, Università degli Studi di Messina.

**Programma di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale, PRIN 2009 sottomesso: - (Prot. 2009KNMK8L\_002)**

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

“Analisi tessiturale 2D e 3D delle rocce: protocollo metodologico di tecniche micro- e non distruttive di indagine strutturale dal microscopico al macroscopico e sua applicazione all'ambiente, alle georisorse e ai Beni Culturali”.

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.

**Bando FIRB - Programma "Futuro in Ricerca" 2010, sottomesso: - (Prot: RBFR10744M):**

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

“Metodologie innovative per la caratterizzazione composizionale, microstrutturale e tessiturale di rocce impiegate nel campo dei beni culturali”.

Coordinato Scientifico della Ricerca: Dott.ssa Francesca Longo, Università degli Studi di Messina.

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

1) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, P. Mazzoleni, A. Pezzino, M.F. La Russa, S.A. Ruffolo, F. Bardelli

“Non-destructive identification of green and yellow pigments: the case of some Sicilian Renaissance glazed pottery”  
Applied Physics A-Materials Science & Processing, 100, 845-853 (2010).

2) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, A. Paciaroni, B. Rossi, R. Stancanelli, V. Venuti, G. Viliani  
“The effect of hydrogen bond on the vibrational dynamics of genistein free and complexed with beta-cyclodextrins”  
Journal of Raman Spectroscopy, 41, 764-770 (2010).

3) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Guella, I. Mancini, B. Rossi, P. Verrocchio, G. Villani, R. Stancanelli,  
“Temperature Effect on the Vibrational Dynamics of Cyclodextrin Inclusion Complexes: Investigation by FTIR-ATR Spectroscopy and Numerical Simulation”  
Journal of Physical Chemistry A, 114, 6811-6817 (2010).

4) V. Crupi, G. Guella, D. Majolino, I. Mancini, B. Rossi, R. Stancanelli, V. Venuti, P. Verrocchio, G. Viliani  
“T-dependence of the vibrational dynamics of IBP/diME-beta-CD in solid state: A FT-IR spectral and quantum chemical study”  
Journal of Molecular Structure, 972, 75-80 (2010).

5) C. Cannavà, V. Crupi, P. Ficarra, M. Guardo, D. Majolino, A. Mazzaglia, R. Stancanelli, V. Venuti  
“Physico-chemical characterization of an amphiphilic cyclodextrin/genistein complex”  
Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 51, 1064-1068 (2010).

## ELENCO DELLE COMUNICAZIONI A CONFERENZE NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- 1) E. Aquilia, G. Barone, V. Crupi, C. Ingoglia, F. Longo, D. Majolino, P. Mazzoleni, V. Venuti  
“Caratterizzazione di superfici decorate: il caso della pittura ellenistica in Sicilia”  
VI Convegno Nazionale di Archeometria  
15-18 Febbraio 2010, Pavia (Italia).
- 2) V. Crupi, G. Guella, D. Majolino, I. Mancini, A. Paciaroni, B. Rossi, R. Stancanelli, P. Verrocchio, G. Viliani, V. Venuti  
“Effect of the chiral recognition process on the vibrational properties of (R)-, (S)- and (R, S)-ibuprofen/ $\beta$ -cyclodextrins inclusion complexes”  
XII International Workshop on Complex Systems  
15-18 March 2010, Andalo (Italy).
- 3) V. Venuti, V. Crupi, G. Guella, D. Majolino, I. Mancini, B. Rossi, R. Stancanelli, P. Verrocchio, G. Villani  
“An experimental-numerical study of chiral recognition properties of  $\beta$ -Cyds vs. IBP”  
Frontiers in Water Biophysics  
23-26 May 2010, Trieste (Italy).
- 4) D. Majolino, E. Aquilia, G. Barone, V. Crupi, C. Ingoglia, F. Longo, P. Mazzoleni and V. Venuti  
“Pigment characterization of ancient Sicilian plasters”  
European Conference on X-ray Spectrometry  
20-25 June 2010, Figueira da Foz, Coimbra (Portugal).
- 5) G. Barone, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, P. Mazzoleni, G. Spagnolo, V. Venuti, E. Aquilia  
“Potentiality of non-destructive XRF for determining the provenance of archaeological potteries: the case of Corinthian B amphorae”  
European Conference on X-ray Spectrometry  
20-25 June 2010, Figueira da Foz, Coimbra (Portugal).
- 6) F. Bardelli, G. Barone, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, P. Mazzoleni, V. Venuti  
“Combined non-destructive XRF and SR-XAS study of archaeological artefacts”  
1st International Congress Chemistry for Cultural Heritage (ChemCH 2010)  
30 June - 3 July 2010, Ravenna (Italy).
- 7) F. Longo  
“Caratterizzazione di pigmenti mediante tecniche spettroscopiche”  
Ciclo di Seminari - Appunti di Fisica 2010  
8 Luglio 2010 Messina.
- 8) F. Longo, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, P. Mazzoleni, V. Venuti  
“Characterization of archaeological pottery: the case of Ionic Cups”  
30th European Congress of Molecular Spectroscopy  
29 August - 3 September 2010, Florence (Italy)
- 9) V. Venuti, G. Barone, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, P. Mazzoleni, D. Tanasi  
“FTIR spectroscopic analysis to study the firing processes of prehistoric ceramics”  
30th European Congress of Molecular Spectroscopy  
29 August - 3 September 2010, Florence (Italy)
- 10) V. Venuti, V. Crupi, D. Majolino, A. Mazzaglia, A. Paciaroni, R. Stancanelli  
“Chiral recognition and complexation behaviour of  $\alpha$ -CyDs vs. L-, D- and DL-serine by FTIR-ATR spectroscopy”  
30th European Congress of Molecular Spectroscopy  
29 August - 3 September 2010, Florence (Italy)
- 11) D. Majolino, E. Aquilia, G. Barone, V. Crupi, C. Ingoglia, F. Longo, P. Mazzoleni, V. Venuti  
“Pigment characterization of ancient Sicilian plasters”  
Società Italiana di Fisica, XCVI Congresso Nazionale  
20 - 24 Settembre 2010 Bologna (Italia).
- 12) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, P. Mazzoleni  
“Characterisation of ancient findings by means of x-ray fluorescence and Fourier transform infrared absorbance spectroscopy”  
Synchrotron Radiation in Art & Archaeology (SR2A-2010)  
7 - 10 November 2010, Amsterdam (Netherlands)
- 13) V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, C.M. Belfiore, P. Mazzoleni, L. Bartoli  
“Comparison between TOF-ND and XRD quantitative phase analysis of ancient potteries”  
Synchrotron Radiation in Art & Archaeology (SR2A-2010)  
7 - 10 November 2010, Amsterdam (Netherlands)
- 14) C. Ingoglia, A. Toscano Raffa, G. Barone, P. Mazzoleni V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, F. Longo  
“Rivestimenti parietali a Gela in età ellenistica: stato degli studi e prospettive di ricerca”  
Risorse ambientali e impianti produttivi a Gela nell'antichità: primi risultati di un progetto di ricerca congiunto

22-23 Ottobre 2010, Gela (Italia).

15) G. Barbera, G. Barone, P. Mazzoleni, V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, F. Longo

“Analisi non distruttive per la caratterizzazione di rocce calcarenitiche: potenzialità ed applicazioni ai materiali musealizzati”

Risorse ambientali e impianti produttivi a Gela nell'antichità: primi risultati di un progetto di ricerca congiunto

22-23 Ottobre 2010, Gela (Italia).

## 6.8 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi

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

Si è sviluppato un approccio coarse-grain alla descrizione delle soluzioni di proteine globulari. Si è assunto un modello a interazioni distribuite basato su siti carichi corrispondenti ai residui aminoacidici della proteina reale. Il solvente e gli ioni del sale aggiunto sono stati descritti tramite un potenziale efficace tra i siti di macromolecole diverse. Sono stati effettuati, per un tale sistema, calcoli di Dinamica Molecolare per un potenziale di interazione già proposto da altri autori, idoneo alla descrizione di una soluzione di lisozima in acqua con sale aggiunto, da noi opportunamente modificato ai fini dell' algoritmo dinamico-molecolare. È stato così possibile evidenziare l' approccio della soluzione alla separazione liquido-vapore a partire da uno stato notevolmente sottoraffreddato. La transizione inosorge su tempi dell'ordine di un centinaio di nanosecondi, corrispondenti a diversi milioni di passi di simulazione.

È stata anche svolta una ricerca in collaborazione con il Laboratoire de Physique des Milieux Denses dell'Università di Metz, nella quale si è dimostrato che un'accurata teoria integrale dello stato fluido fornisce risultati molto precisi per la caratterizzazione strutturale e termodinamica di sistemi in grado di esibire delle microseparazioni di fase in cui nel fluido omogeneo si osserva la formazione di aggregati di particelle. L'indagine ricopre particolare interesse nell'ambito dello studio di soluzioni di proteine globulari e di sospensioni colloidali, che spesso danno origine alla formazione di aggregati, che evolvono verso stati arrestati differenti (wigner glass, gel).

Sono state inoltre indagate tramite dinamica molecolare e la teoria molecolare nota come Reference Interaction Site Model (RISM), miscele di metanolo e tetracloruro di carbonio. Lo studio che ha riguardato l'intero range di concentrazioni della miscela, si è maggiormente focalizzato sull'analisi dei fattori di struttura: totale, parziali, e concentrazione-concentrazione, esaminando in dettaglio il limite a  $k \rightarrow 0$  di queste funzioni. I risultati della simulazione confermano la tendenza del metanolo all'autoassociazione con formazione di strutture ad anello nel regime di alte diluizioni, in accordo con gli studi sperimentali. Il comportamento fortemente non ideale della miscela emerge anche dallo studio delle correlazioni tra fluttuazioni di concentrazione. Si trova anche che la compressibilità isoterma della miscela è in buon accordo con i dati sperimentali. Le predizioni della RISM sono state poi sistematicamente confrontate con la simulazione ed emerge che la teoria è più accurata nel descrivere il solvente apolare che le proprietà dell'alcool. La self-associazione del metanolo viene riprodotta qualitativamente, con un trend meno marcato di quanto previsto dalla simulazione.

### PUBBLICAZIONI

- 1) Abramo M.C., Caccamo C., Costa D., Pellicane G. e Ruberto R.  
"Molecular Dynamics of an Embedded-Charge Model of Lysozyme Aqueous Solutions",  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, vol.114, 9109 (2010).
- 2) Bomont J.M., Bretonnet J.L. e Costa D.  
"Temperature study of cluster formation in two-Yukawa fluids",  
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, vol.132, Art. No. 184508 (2010).
- 3) Munaò G., Costa D., Saija F. e Caccamo C.  
"Simulation and reference interaction site model theory of methanol and carbon tetrachloride mixtures",  
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, vol.132, Art. No. 084506 (2010).

## **RELAZIONI SU INVITO PRESSO CONFERENZE INTERNAZIONALI**

G. Pellicane

"Effective interactions on globular protein solutions"

Translational Access Meeting (TAM) 2010, Helsinki, Finland (15-17 June 2010).

## **SEMINARI SU INVITO**

G. Pellicane

1) "A Computational approach to the study of globular protein solutions"

Department of Chemical & Materials Engineering, California State Polytechnic University, Pomona, USA (8 July 2010).

2) "Critical behavior of binary fluid mixtures in random pores"

Department of Chemical & Materials Engineering, California State Polytechnic University, Pomona, USA. (29 July 2010)

## 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 dell'acqua pura e di soluzioni diluite di macromolecole in acqua. Per quanto concerne questo secondo aspetto, è stata avviata una collaborazione con il Prof. JAN ZIELKIEWICZ (Department of Chemistry, *Gdańsk University of Technology*, Polonia) nell'ambito della quale un suo collaboratore, il Sig. DARIUSZ CZAPIEWSKI, ha visitato il Dipartimento di Fisica dal 20 Ottobre 2010 al 20 Gennaio 2011, fruendo del supporto di una borsa di studio assegnatagli nell'ambito del progetto intitolato "Development of interdisciplinary Doctoral Studies at Gdansk University of Technology in the area of novel technologies", cofinanziato dall'Unione Europea attraverso il Fondo Sociale Europeo. Il progetto congiunto attualmente in corso è focalizzato sullo studio degli effetti di solvatazione in acqua TIP3P di un polipeptide sferoidale (Williopsis mrakii killer toxin); uno degli obiettivi di questa indagine consiste nel tracciare la "mappa d'ordine" della soluzione, basata sul calcolo dei contributi posizionale e angolare all'entropia di coppia del sistema.

### Attività editoriale

Ho pubblicato il Volume LXXXVIII degli "Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti - Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali" [URL: <http://www.actapeloritana.it>], nella qualità di Presidente del Comitato Editoriale della summenzionata rivista; il volume, accessibile all'URL <http://dx.doi.org/10.1478/Vol88>, comprende quattordici articoli di AA.VV., distribuiti sui seguenti due numeri:

Issue 1: [http://dx.doi.org/10.1478/Vol88\\_Issue1](http://dx.doi.org/10.1478/Vol88_Issue1)

Issue 2: [http://dx.doi.org/10.1478/Vol88\\_Issue2](http://dx.doi.org/10.1478/Vol88_Issue2)

### Publicazioni

- 1) Giuffré, S. Prestipino, F. Saija, A. M. Saitta, and P. V. Giaquinta, "Entropy from correlations in TIP4P water", *Journal of Chemical Theory and Computation* 6, 607-624 (2010) [URL: <http://dx.doi.org/10.1021/ct900627q>]
- 2) P. V. Giaquinta, "A major step forward: Moving to the OJS platform", *Atti Accad. Pelorit. Pericol. Cl. Sc. Fis. Mat. Nat.* 88, C1E1001001 (2010) [URL: <http://dx.doi.org/10.1478/C1E1001001>]

## 6.10 Studio di comportamenti anomali in sistemi con repulsione sofficiizzata

**Responsabile:** G.Malescio

Nel corso del 2010 è continuato lo studio del comportamento di sistemi di particelle caratterizzati da interazioni a simmetria sferica con componente repulsiva sofficiizzata. Tali sistemi costituiscono modelli rilevanti sia nell'ambito della materia soffice (star polymers, sospensioni colloidali, etc.) che per quanto riguarda elementi ad altissima pressione. Se la sofficiizzazione è significativa, come in tutti i casi sinora considerati nella letteratura, essa genera due scale distinte di lunghezza nel potenziale di interazione. Ciò dà luogo all'esistenza di strutture locali espanse e compatte che competono tra loro, una caratteristica che mima in modo semplificato quanto avviene in sostanze come l'acqua, il silicio, il fosforo, caratterizzate da interazioni complesse con legami aventi una natura direzionale. Al pari di tali sostanze, i sistemi isotropi con repulsione sofficiizzata mostrano, nonostante la simmetria sferica delle interazioni, 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.

Abbiamo investigato il comportamento di sistemi di particelle interagenti attraverso potenziali aventi un core duro più una componente repulsiva soffice con gradi diversi di sofficiità. Si è studiato come cambiano al variare della sofficiità i comportamenti di fase e le proprietà strutturali e termodinamiche. Un risultato particolarmente significativo è l'aver mostrato che per dar vita a comportamenti anomali in sistemi isotropi non è necessaria la presenza di due scale repulsive come comunemente ritenuto sinora. Infatti i risultati ottenuti mostrano che tali comportamenti possono avere luogo anche per interazioni caratterizzate da una repulsione in cui il grado di sofficiizzazione sia talmente debole da generare solo un tipo di struttura locale. Si tratta quindi di sistemi con una sola scala di lunghezza repulsiva che però, al contrario di quanto avviene per esempio in una repulsione di tipo inverse-power, non diminuisce monotonamente all'aumentare della pressione, ma con un rate che ha un massimo locale in corrispondenza della regione del re-entrant melting, il che rende localmente la scala di lunghezza definita in modo meno netto rispetto alla regioni adiacenti. I risultati ottenuti hanno notevole rilevanza in quanto estendono considerevolmente la classe di sistemi in grado di esibire comportamenti anomali.

Lavori pubblicati

- 1) E. Lascaris, G. Malescio, S. V. Buldyrev and H. E. Stanley  
"Cluster formation, water-like anomalies, and re-entrant melting for a new family of bounded repulsive interaction potentials"  
Phys. Rev. E **81**, 031201 (2010)
- 2) F.Saija, G.Malescio and S.Prestipino  
"Re-entrant melting of the exp-6 fluid: the role of the repulsion softness"  
Physics and Chemistry of Liquids vol. **48**, Nr. 4, 477 (2010)
- 3) S.Prestipino, F.Saija, and G.Malescio  
"Anomalous phase behavior in a model fluid with a single repulsive length scale"  
J.Chem.Phys. **133**, 144504 (2010)

## 6-11 Fisica dei sistemi Complessi

**Componenti:** F. Mallamace (PO), C. Corsaro (AS), N. Leone (PhD)

La ricerca utilizza metodologie sperimentali ed in particolare lo Scattering di luce e la Risonanza Magnetica Nucleare per lo studio delle proprietà dei sistemi complessi. L'attività di ricerca si avvale della collaborazione con importanti strutture nazionali, quali il Consorzio Interuniversitario per lo Sviluppo dei Sistemi a Grande Interfase di Firenze, ed internazionali quali la Boston University e il Massachusetts Institute of Technology.

Fra i risultati scientifici di maggior rilievo spiccano le recenti scoperte riguardanti le proprietà dinamiche dei materiali glass-forming. Estendendo le precedenti osservazioni sull'acqua in regime sottoraffreddato sia in ambiente confinato sia in interazione con molecole di interesse biologico, è stato osservata una transizione fragile-forte per un elevato numero di liquidi. Questa sembra essere una proprietà di base che governa il modo in cui l'acqua e molti altri liquidi si comportano rispetto ai cambi di temperatura. Tale transizione avviene ad una temperatura chiamata temperatura di crossover dinamico più alta approssimativamente del 20 - 30 percento della più nota temperatura di transizione vetrosa. Alla temperatura di crossover dinamico tutte le proprietà di trasporto dello stato liquido cambiano drasticamente; la viscosità sembra assumere un valore universale per una grande classe di liquidi che include sostanze così familiari come acqua, ammoniaca e benzene.

La dimostrazione di questo crossover e del fatto che tutti i liquidi studiati mostrano grossomodo lo stesso livello di viscosità al loro punto di crossover è stata definita "impressionante" da Ben Widom professore emerito di chimica alla Cornell University (una autorità scientifica del campo, medaglia Boltzmann equivalente al Premio Nobel, e riconosciuto uno dei padri della fisica statistica).

In tale studio è stato inoltre riscontrata la corrispondenza alla temperatura del crossover dinamico con il disaccoppiamento fra diversi parametri di trasporto. L'accoppiamento fra i parametri di trasporto quali ad esempio viscosità e self-diffusione è espresso dalla ben nota relazione di Stokes-Einstein. Tale relazione, alla stessa stregua della relazione di Debye-Stokes-Einstein che lega la viscosità al tempo di rilassamento strutturale di un sistema, viene infatti violata alla temperatura del crossover dinamico in quanto si sviluppano in seno al sistema le cosiddette eterogeneità dinamiche. Mediante un "approccio di scala", senza l'uso di alcuni modelli teorici è stato possibile osservare come vi sia una variazione nell'esponente di scala proprio al crossover dinamico.

Precedentemente a tale studio, sono stati 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 già osservati 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. È 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 tutte le condizioni considerate alla stessa temperatura al di sotto della quale i parametri di trasporto sono legati tra loro da una legge di scala il cui esponente dipende dalla temperatura e dalla dimensionalità  $d=1,2,3$  del sistema. L'obiettivo dell'attività di ricerca svolta in quest'anno è stato quindi focalizzato allo studio di quei fenomeni che avvengono all'interno di una regione di temperatura in cui i sistemi sono caratterizzati da un equilibrio metastabile, per tentare di chiarire quale fra i diversi scenari interpretativi del fenomeno dell'arresto dinamico sia più fisicamente sensato.

Inoltre, tramite misure NMR ad elevatissima risoluzione (High Resolution Magic Angle Spinning) su campioni di lisozima idratato è stato studiato il processo di folding/unfolding precedente la denaturazione termica di tale proteina. Sono stati eseguiti diversi esperimenti in modo da realizzare tanto cicli termici completi, la cui temperatura finale si trova al di là della soglia di denaturazione,

quanto cicli termici parziali per studiare la reversibilità del processo di folding/unfolding. Dallo studio della forma di riga del segnale NMR dovuto ai protoni dell'acqua della prima shell d'idratazione del lisozima, è emerso che esistono due temperature caratteristiche del processo di folding/unfolding del lisozima. La prima è  $T=325\text{K}$  dove il network di legami idrogeno formato dall'acqua, mediante il quale vengono tenuti insieme i residui amminoacidici della proteina, comincia a rompersi. Questa temperatura definisce il confine fra la regione di temperatura nel quale la proteina si trova nel suo stato nativo e la regione intermedia all'interno della quale il processo di denaturazione è reversibile. La seconda temperatura caratteristica è  $T=346\text{K}$ , temperatura alla quale mediante precedenti misure calorimetriche alcuni ricercatori avevano osservato un massimo nel calore specifico isobarico del sistema. A tale temperatura la maggior parte delle molecole d'acqua è essenzialmente libera, ovvero non coinvolta in legami idrogeno stabili, e le catene laterali della proteina si aprono irreversibilmente. Mediante l'analisi della variazione in temperatura del "chemical shift" della risonanza magnetica nucleare, è stato possibile valutare il calore specifico configurazionale dell'acqua di idratazione del lisozima. 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  $\delta(T)$  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. Mettendo a confronto il valore ottenuto con il valore ottenuto mediante le tecniche calorimetriche tradizionali è stato evidenziato un ottimo accordo e un analogo comportamento termico. In particolare è evidente un massimo a circa 346 K cioè alla temperatura che definisce il limite della reversibilità del processo di denaturazione del lisozima.

### Publicazioni

- 1) Mallamace, F; Branca, C; Corsaro, C; Leone, N; Spooren, J; Chen, SH; Stanley, HE  
 "Transport properties of glass-forming liquids suggest that dynamic crossover temperature is as important as the glass transition temperature"  
*Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* **107**, 22457-22462 (2010).
- 2) Stanley, HE; Buldyrev, SV; Franzese, G; Havlin, S; Mallamace, F; Kumar, P; Plerou, V; Preis, T "Correlated randomness and switching phenomena"  
*Physica A-Statistical Mechanics And Its Applications* **389**, 2880-2893 (2010).
- 3) Stanley, HE; Buldyrev, SV; Franzese, G; Kumar, P; Mallamace, F; Mazza, MG; Stokely, K; Xu, L "Liquid polymorphism: water in nanoconfined and biological environments"  
*Journal Of Physics-Condensed Matter* **22**, 284101 (2010).
- 4) Mallamace, F; Branca, C; Corsaro, C; Leone, N; Spooren, J; Stanley, HE; Chen, SH  
 "Dynamical Crossover and Breakdown of the Stokes-Einstein Relation in Confined Water and in Methanol-Diluted Bulk Water"  
*Journal Of Physical Chemistry B* **114**, 1870-1878 (2010).
- 5) Stanley, HE; Kumar, P; Xu, LM; Buldyrev, SV; Yan, Z; Mallamace, F; Chen, SH  
 "PHYS 6-New experiments and simulations on water in bulk, nanoconfined, and biological environments"  
*Abstracts Of Papers Of The American Chemical Society* **236**, 6-PHYS (2010).
- 6) Iacono, F; Cappello, T; Corsaro, C; Branca, C; Maisano, M; Gioffre, G; De Domenico, E; Mauceri, A; Fasulo, S  
 "Environmental metabolomics and multibiomarker approaches on biomonitoring of aquatic habitats"  
*Comparative Biochemistry And Physiology A-Molecular & Integrative Physiology* **157**, S50 (2010).
- 7) Wanderlingh, U; D'Angelo, G; Nibali, VC; Crupi, C; Rifci, S; Corsaro, C; Sabatino, G  
 "Interaction of alcohol with phospholipid membrane: NMR and XRD investigations on DPPC-hexanol system"  
*Spectroscopy-An International Journal* **24**, 375-380 (2010).

### Relazioni a congressi

International Workshop On  
 Dynamic Crossover Phenomena In Water And Other Glass-Forming Liquids  
 11-13 November, 2010

Hotel Villa Bencista', Fiesole, Florence, Italy

International School of Physics "Enrico Fermi"  
"Complex materials in physics and biology"  
Varenna (Lake Como) 29 June - 9 July 2010

**Organizzazione di eventi**

International School of Physics "Enrico Fermi"  
"Complex materials in physics and biology"  
Varenna (Lake Como) 29 June - 9 July 2010  
Directors: F. Mallamace (Università di Messina), E. Stanley (Boston University)

## 6.12 Studio di membrane biomimetiche e soluzioni di macromolecole

**Componenti:** Ulderico Wanderlingh, Giordano Rita, Branca Caterina, Rifichi 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 bio-sensoristica. 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 condizioni 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 Scattering Quasi-elastico di Neutroni ad alta risoluzione, realizzate con lo spettrometro IN5 presso l'Institut Laue Langevin (FR), al fine di studiare le dinamiche su scala molecolare. Queste misure hanno evidenziato la presenza di tre regimi dinamici che è possibile associare ad una dinamica veloce dell'atomo di idrogeno (rattling), una dinamica intermedia associata alla dinamica conformazionale delle catene aciliche (kinks dynamics) ed a una dinamica lenta associata ai moti roto-traslazionali dell'intero fosfolipide.

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). Dalle traiettorie così ottenute è stato ricavato il Fattore di Struttura dinamico incoerente ottenendo risultati in ottimo accordo con le misure sperimentali. Questo potrà permettere, attraverso il calcolo dei Fattori di Struttura parziali di individuare quali parti del fosfolipide contribuiscono alle dinamiche osservate sperimentalmente.

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. 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.

### Lavori pubblicati

- 1) C. CRUPI, G. D'ANGELO, U. WANDERLINGH, CONTI NIBALI V., C. VASI. (2010). Low frequency dynamics of lysozyme: A Raman scattering and low temperature specific heat study.. SPECTROSCOPY (OTTAWA). Vol. 24 201 - 205 ISSN: 0712-4813
- 2) U. WANDERLINGH, G. D'ANGELO, CONTI NIBALI V., C. CRUPI, S. RIFICI, C. CORSARO, G. SABATINO. (2010). Interaction of alcohol with phospholipid membrane: NMR and XRD investigations on DPPC-hexanol system. SPECTROSCOPY (OTTAWA). Vol. 24 375 - 380 ISSN: 0712-4813

### Comunicazioni a Congressi

- 1) RIFICI S., WANDERLINGH U., D'ANGELO G., CORSARO C., CRUPI C., TRIMARCHI A., CONTI NIBALI V. (2010). Uno studio di spettroscopia NMR sulla mobilità diffusiva in membrane fosfolipidiche in interazione con alcol. XCVI Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica Bologna, Italia 20-24 Settembre 2010

## 6.13 Teoria e simulazione numerica di sistemi modello di meccanica statistica

**Responsabile:** Santi Prestipino Giarritta

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

1) In condizioni termodinamiche estreme, molte sostanze atomiche e molecolari semplici presentano un comportamento statistico "anomalo" caratterizzato da un ricco campionario di fasi solide e fusione rientrante. Simili caratteristiche anomale sono note da tempo per sistemi quali sospensioni colloidali e soluzioni polimeriche, esempi di materia soffice. La mia ricerca ha riguardato la messa a punto di potenziali modello classici, isotropi e a due corpi, che riescano a cogliere almeno il carattere generico di queste anomalie. A tal fine, si e' dimostrato che basta rendere marginalmente soffice una repulsione efficace a corte distanze per indurre, anche in presenza di una sola scala di lunghezze, caratteristiche anomale quali fusione rientrante, polimorfismo solido ed altre anomalie termodinamiche, dinamiche e strutturali del genere di quelle presenti nell'acqua. In aggiunta, ho ideato un criterio, basato sull'applicazione della teoria dell'elasticita', per prevedere con successo ed in modo immediato l'andamento qualitativo della linea di fusione.

2) Il primo stadio di un processo di trasformazione di fase (p.es. la solidificazione) e' la formazione spontanea di un nucleo critico, ossia di un seme della nuova fase che sia sufficientemente grande da essere destinato a crescere ulteriormente invece che a dissolversi. Nella teoria classica della nucleazione (CNT), il nucleo critico e' 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 considera 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 del medesimo in funzione del volume e dell'area della superficie, riuscendo cosi' a quantificare gli scostamenti dalla CNT. La stessa teoria statistica puo' essere derivata, nel limite di piccole deviazioni dalla coesistenza, da una teoria di Landau per un parametro d'ordine scalare, col risultato che e' possibile fornire espressioni "microscopiche" per tutti i parametri presenti nell'hamiltoniana di superficie.

3) Per tre diversi stati termodinamici del modello TIP4P dell'acqua, ho contribuito insieme con altri a calcolare numericamente la funzione di distribuzione di coppia in termini di distanza e orientazione reciproca delle molecole. Da questa funzione e' possibile risalire ai diversi contributi, traslazionale ed orientazionale, all'entropia a due corpi dell'acqua. Tali contributi, misurando di fatto le quantita' di ordine spaziale traslazionale ed orientazionale presenti nel sistema, rappresentano uno strumento prezioso per identificare, nel diagramma delle fasi dell'acqua, regimi strutturalmente differenti di comportamento collettivo delle molecole.

### PUBBLICAZIONI

1) E. Giuffre', S. Prestipino, F. Saija, A. M. Saitta, and P. V. Giaquinta, "Entropy from correlations in TIP4P water", *J. Chem. Theory Comput.* 6, 625 (2010).

2) F. Saija, G. Malescio, and S. Prestipino, "Re-entrant melting of the exp-6 fluid: the role of the repulsion softness", *Phys. Chem. Liq.* 48, 477 (2010).

3) S. Prestipino, F. Saija, and G. Malescio, "Anomalous phase behavior in a model fluid with only one type of local structure", *J. Chem. Phys.* 133, 144504 (2010).

### CONGRESSI E COMUNICAZIONI

1) "ISMC2010", Granada, Spain (5-8/7, 2010).

In questa occasione, ho presentato un poster dal titolo "Minimal recipe for waterlike anomalies".

2) "II Giornata della Ricerca dell'Universita' degli Studi di Messina",

Messina (15/7/2010). In questa occasione, ho tenuto un seminario dal titolo "Barriera di nucleazione per un nucleo quasi-sferico".

#### **6.14 Meccanica statistica *ab initio* in sistemi metallici**

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

RELAZIONE NON PERVENUTA

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

### **Componenti:**

Giacomo Fiumara (RU)  
Alessandro Proveti (PA), in sabbatico fino al 31.X.2010  
Pasquale De Meo (RUTD), dal 31.XII.2010  
Francesco Pagano (Dottorando in Informatica, sede consorziata di Milano, XXIV ciclo)  
Emilio Ferrara (Dottorando in Matematica, XXIV ciclo)  
Salvatore Catanese (studente Laurea Magistrale in Informatica)

### Ambiti di ricerca

- Rappresentazione della conoscenza
- Analisi di network sociali
- Analisi forense di traffico telefonico cellulare
- Estrazione automatica di dati da sorgenti Web (in particolare da network sociali)

### **Pubblicazioni**

- 1) S. Costantini and A. Proveti, 2010.  
A Lower bound for Answer Set Computation.  
Inteligencia artificial, Vol. 14:48, pp. 41--52.
- 2) Giacomo Fiumara, Dario Maggiorini, Alessandro Proveti and Laura Anna Ripamonti,  
Knowledge Representation in Virtual Teams: A Perspective Approach for Synthetic Worlds,  
in Collaborative Networks for a Sustainable World - 11th IFIP WG 5.5 Working Conference on Virtual Enterprises, PRO-VE 2010,  
St. Etienne, France 11-13 October 2010.
- 3) Salvatore Amato Catanese and Giacomo Fiumara,  
A visual tool for forensic analysis of mobile phone traffic,  
Proc. of the 2nd ACM workshop on Multimedia in forensics, security and intelligence (MiFor'10)  
Firenze (Italy) 29 October 2010
- 4) Giacomo Fiumara, Massimo Marchi, Rosamaria Pagano, Alessandro Proveti,  
Rule-Based Spam E-mail Annotation,  
in Web Reasoning and Rule Systems - Fourth International Conference, RR 2010, Bressanone (Brixen) 22-24 September 2010
- 5) S. Costantini and A. Proveti, 2010.  
Graph representations of logic programs: properties and comparison.  
Proc. of the 5th Latin-American Workshop on New forms of Reasoning (LANMR10).  
CEUR-WS series, Vol. 677, pp. 1-14.
- 6) Salvatore Catanese, Pasquale De Meo, Emilio Ferrara, Giacomo Fiumara,  
Analyzing the Facebook Friendship Graph,  
in MIFI, First Workshop on Mining the Future Internet, Berlin 20 September 2010
- 7) Emilio Ferrara, Giacomo Fiumara and Francesco Pagano,  
Living city: a collaborative browser-based Massively Multiplayer Online Game,  
in DISIO 2010, DIStributed SIMulation & Online gaming, Malaga 15 March 2010

## **6.16 Informatica: Applicazioni di Base di Dati**

Componenti: Andrea Nucita

L'attività di ricerca si è orientata principalmente alle basi di dati. Breve descrizione dell'attività svolta per soggetto:

### *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.

### **Publicazioni**

1) Cuzzocrea A., Nucita A., "Reasoning on Incompleteness of Spatial Information for Effectively and Efficiently Answering Range Queries over Incomplete Spatial Databases". Data & Knowledge Engineering (Elsevier). Accettato, in attesa di pubblicazione.

2) Belussi A., Cuzzocrea A., Nucita A., "A Grid-based Approach for Effectively and Efficiently Supporting Selectivity Estimation of Spatial Joins and its Extension to Other Classes of Spatial Database Queries", Information Sciences (Elsevier). Ha superato la prima revisione.

## **6.17 Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali**

Componenti: Giorgio Grasso

RELAZIONE NON PERVENUTA

## A. ELENCO TELEFONICO E INDIRIZZI DI POSTA ELETTRONICA

COGNOME E NOME	POSTA ELETTRONICA	telefono	fax
ARENA ROSANNA	rarena@unime.it	090-6765031	090-395004
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
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
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
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
PELLICANE GIUSEPPE	gpellicane@unime.it	090-6765043	090-395004

<b>COGNOME E NOME</b>	<b>POSTA ELETTRONICA</b>	<b>telefono</b>	<b>fax</b>
PIZZIMENTI GIOVANNI	pizzimen@unime.it	090-6765048	090-6765042
PRESTIPINO GIARRITTA SANTI	prestipino@unime.it	090-6765041	090-6765041
RANDO SALVATORE	randos@unime.it	090-6765042	090-6765042
TORRISI LORENZO	lorenzo.torrisi@unime.it	090-6765052	090-6765042
TRIFIRO' ANTONIO	antonio.trifiro@me.infn.it	090-6765451	090-395004
TRIPODO GASPARE	gaspare.tripodo@unime.it	090-6765032	090-395004
VENUTI VALENTINA	vvenuti@unime.it	090-6765010	090-395004
WANDERLINGH ULDERICO	uwanderlingh@unime.it	090-6765023	090-395004