

6. Attività di Ricerca

Le attività di ricerca del Dipartimento si articolano essenzialmente nelle seguenti 17 linee:

- 1) *Fisica dei plasmi generati da impulsi laser di potenza*
- 2) *Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia e correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie*
- 3) *Reazioni nucleari su nucleoni e nuclei*
- 4) *Materiali disordinati*
- 5) *Processi di rilassamento in sistemi disordinati: liquidi glass-forming e vetri a conduzione ionica*
- 6) *Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biotecnologico – Metodologie fisiche applicate ai beni ambientali.*
- 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 della transizione liquido-solido in condizioni estreme di pressione e temperatura*
- 11) *Fisica dei Sistemi Complessi*
- 12) *Studio di membrane biomimetiche*
- 13) *Studi strutturali in sistemi micellari e in soluzioni di proteine*
- 14) *Meccanica statistica ab initio in sistemi metallici*
- 15) *Informatica: M²AG: Milan-Messina Action Group*
- 16) *Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico*
- 17) *Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali*

11

6.1 Fisica dei plasmi generati da impulsi laser di potenza

Componenti: Prof. L. Torrìs (**Responsabile**); Prof.ssa A.M. Mezzasalma; Prof. G. Mondio, Dr. D. Margarone; Dr. F. Caridi; Dr. A. Borrielli; Dr. L. Giuffrida; Dr. J.J. Beltrano; Dr. C. Gentile.

Collaboratori esterni: Prof. S. Cavallaro (**Dip.to di Fisica, Università di Catania**); Dr. S. Gammino (**INFN-LNS, Catania**); Dr. J. Krasa e Dr. L. Laska (**ASCR, Praga, Repubblica Ceca**); Prof. J. Wolowski and Dr. J. Badziak (**IPPLM, Varsavia, Polonia**).

Nel 2008 presso il "Laboratorio di Fisica dei Plasmi generati da laser" del Dipartimento di Fisica della Ns. Università, grazie ai fondi INFN-Gr. V, sono stati completati i lavori del Progetto Nazionale triennale (2006-2008) denominato PLATONE (Pulsed Laser Ablation for Transient Obtainable Electric-field) di cui il Prof. Torrìs è responsabile Nazionale. Al progetto hanno partecipato il Dipartimento di Fisica di Messina, i laboratori LNS di Catania, la Sezione INFN di Lecce, l'Accademia delle Scienze della Repubblica Ceca (ASCR) e l'Istituto di Fisica dei Plasmi e microfusione laser (IPPLM) Polacco. Solo in parte il progetto è finanziato dai fondi PRA di Ateneo.

L'attività svolta presso la sede di Messina ha riguardato prevalentemente misure alla lunghezza d'onda laser di 532 nm, con impulsi di 3 ns, una energia di impulso di 300 mJ ed una ripetibilità di impulso di 10 Hz. In tale laboratorio un quadrupolo di massa ha permesso di rivelare le specie neutre e cariche emesse dal plasma in condizioni di alto vuoto ed estese fino a 300 amu misurandone la distribuzione energetica. Un modello teorico proposto ha permesso di giustificare i risultati sperimentali inerenti le soglie di ablazione e di spiegare i processi fisici che interessano la generazione del plasma alle basse intensità laser.

L'attività svolta si è inserita in un contesto di misure più generali, di tipo internazionale, che hanno permesso di concludere una serie di investigazioni nell'ambito della valutazione dell'intenso campo elettrico sviluppato internamente ai plasmi in non equilibrio generati da impulsi laser di potenza. Preliminari tests hanno evidenziato che gli ioni emessi dal plasma hanno distribuzioni energetiche alla Boltzmann che sono tanto più shiftate in energia quanto più è il loro stato di carica. In accordo al modello di distribuzione "Coulomb-Boltzmann-shifted" proposto da Torrìs et Al. (2002), lo shift energetico misurato è regolare con lo stato di carica e permette di quantizzare il potenziale equivalente di accelerazione. Tale potenziale assume valori

dell'ordine di centinaia di Volts per i plasmi ottenuti con le modeste intensità (10^{10} W/cm²) dei laser Nd:Yag del Dip.to di Fisica di Messina e dei LNS di Catania e valori dell'ordine di alcuni kV per i plasmi ottenuti con il laser a miscela di Iodio presso il PALS di Praga (10^{16} W/cm²).

Assumendo il plasma di trovarsi in condizioni di quasi equilibrio locale per tempi confrontabili con la durata dell'impulso laser (0.3 - 3 ns) e valutando le lunghezze di Debye nel plasma, ottenibili da misure di temperatura e di densità elettronica dei plasmi, è possibile stimare i campi elettrici per i plasmi ottenuti nei laboratori di Messina, Catania e PALS di Praga.

Nei primi due casi sono stati misurati campi elettrici dell'ordine di decine di MV/cm, mentre nel terzo caso i valori del campo elettrico possono arrivare a decine di GV/cm.

Tali campi elettrici sono altamente direttivi e rivolti lungo la normale alla superficie della targhetta irradiata dal fascio laser. Essi sono fortemente influenzati da campi elettrici e/o magnetici posti in vicinanza della superficie della targhetta ablata. Per esempio la polarizzazione positiva del target o la realizzazione di una trappola elettronica magnetica posta davanti al target permettono di modificare il valore di tale campo elettrico, potendolo aumentare, potendone migliorare la focalizzazione ionica ed incrementare gli stati di carica degli ioni prodotti.

A causa di tali elevatissimi campi elettrici possiamo giustificare le misure di alta accelerazione ionica prodotta sulle particelle cariche emesse al plasma. Misure basate sulla tecnica a tempo di volo, al PALS hanno evidenziato che è possibile adoperare tali metodiche per accelerare ioni ad energie superiori a 10 MeV, aprendo nuove prospettive per lo sviluppo di nuovi tipi di acceleratori e di sorgenti ioniche.

La tematica di ricerca in questione rappresenta una punta avanzata delle conoscenze fisiche nel campo dei plasmi e recentemente ha portato alla nascita di un nuovo progetto di ricerca INFN-Gr. V, denominato PLEIADI (Plasma Laser Energetic Ion Acceleration and Diagnostics) che sarà sviluppato negli anni 2009-2010 il cui responsabile Nazionale è il Prof. L. Torrìsi.

Su tale background scientifico il Progetto PLATONE è diventato leader nel settore degli studi di plasmi in non equilibrio generati da impulsi di laser di potenza, come dimostrano una serie di collaborazioni internazionali e nazionali che lo coinvolgono e lo citano.

Sulla base delle misure eseguite, una serie di possibili applicazioni sono state avanzate ed approfondite. Tra queste quella che riguarda l'iniezione di ioni emessi dal plasma in una tradizionale sorgente ionica ECR, con delle prove sulla sorgente SERSE dei LNS di Catania; il progetto di un nuovo tipo di acceleratore di particelle

12
con fascio multienergetico di elevata corrente e di piccole dimensioni che utilizza una post-accelerazione ionica, attualmente in fase di studio; l'utilizzo di processi di impiantazione ionica multi-energetica di fasci prodotti da plasmi laser in repetition rate per la modifica delle proprietà chimico-fisiche di strati di superficie di diversi materiali; peculiari applicazioni in campo medico, per la realizzazione di particolari profili morfologici in tessuti biologici; peculiari applicazioni nel campo dei beni culturali per l'indagine con la spettrometria di massa della composizione e della valutazione dei rapporti isotopici in particolari campioni di interesse archeologico.

L'attività di Ricerca nel 2008 è stata dunque molto proficua, grazie al notevole impegno che i ricercatori coinvolti hanno apportato, ed ha permesso di raggiungere dei traguardi di alto interesse nel campo dei plasmi prodotti da impulsi laser. Tale attività nel 2008 ha prodotto numerosi risultati di rilevanza internazionale che sono discussi in altrettanti lavori scientifici già pubblicati, come testimonia una ampia produttività scientifica sia a livello di pubblicazioni su riviste internazionali ISI con referee (39 lavori/2008) che di partecipazione a conferenze internazionali con referee e con invito (13 proceedings/2008) che di reports e partecipazioni a conferenze nazionali (9 lavori/2008).

PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI CON REFEREE

1) A.M. Visco, N. Campo, L. Torrìsi, M. Cristiani, D. Trombetta and A. Saija

“Electron beam irradiated UHMWPE: Degrading action of air and hyaluronic acid”

Bio-Medical Materials and Engineering 18, 137-148, 2008

2) L. Láská, K. Jungwirth, J. Krása, E. Krouský, K. Rohlena, J. Skála, A. Velyhan,

D. Margarone, L. Torrìsi, L. Ryć and J. Ullschmied

“Laser generation of Au ions with charge states above 50+”

Rev. Sci. Instrum. 79, 02C715, 1-4, (2008); DOI:10.1063/1.2821494

3) D. Margarone, L. Láská, L. Torrìsi, S. Gammino, J. Krasa, E. Krousky, P. Parys, M. Pfeifer,

- K. Rohlena, M. Rosinski, L. Ryc, J. Skala, J. Ullschmied, A. Velyhan and J. Wolowski
 “Studies of craters’ dimension for long-pulse laser ablation of metal targets at various experimental conditions”
Applied Surface Science 254 (2008) 2797–2803
- 4) L. Torrisci, F. Caridi, D. Margarone and A. Borrielli
 “Characterization of laser-generated silicon plasma”
Appl. Surf. Sci. 254, 2090-2095, 2008
- 5) A. Lorusso, A. Nassisi, V. Nassisi and F. Paladini, L. Torrisci, A. Mangione, A. Visco, N. Campo
 “Comparison of the laser effects induced on ultra-high-molecular-weight polyethylene”;
Rad. Eff. and Def. in Solids, V.163(4-6), 435-440, 2008
- 6) A. Lorusso, V. Nassisi, L. Velardi, L. Torrisci, D. Margarone and A. Mezzasalma
 “Characteristic modification of UHMWPE by laser-assisted ion implantation”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 447-452, 2008
- 7) A. Lorusso, V. Nassisi, A. Buccolieri, G. Buccolieri, A. Castellano, L. S. Leo, M. Di Giulio, L. Torrisci, F. Caridi and A. Borrielli
 “Laser ablation threshold of cultural heritage metals”;
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 325-330, 2008
- 8) A. Picciotto, G. Pucker, L. Torrisci, P. Bellutti and F. Caridi
 “Evidence of Plasmon Resonances of Nickel Particles Deposited by Pulsed Laser Ablation”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 513-518, 2008
- 9) D. Margarone, L. Torrisci, S. Cavallaro, E. Milani, G. Verona-Rinati, M. Marinelli, C. Tuvè, L. Láska, J. Krása, M. Pfeifer, E. Krousky, J. Ullschmied, L. Ryc, A. Mangione and A.M. Mezzasalma; “Diamond detectors for characterization of laser-generated plasma”;
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 463-470, 2008
- 10) L. Torrisci, D. Margarone, S. Gammino and L. Andò
 “Effects of magnetic field on laser-generated plasma”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 261-270, 2008
- 11) F. Caridi, L. Torrisci, D. Margarone and A. Borrielli
 “Laser-generated plasma investigation by electrostatic quadrupole analyzer”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 357-364, 2008
- 12) A. Borrielli, L. Torrisci, A.M. Mezzasalma, J. Badziak, J. Wolowski, L. Laska, J. Krasa and J. Ullschmied
 “Ion energy enhancement in laser-generated plasma of metallic doped polymers”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 339-348, 2008
- 13) A.M. Visco, N. Campo, J.J. Beltrano and L. Torrisci
 13
 “Laser irradiation effects on polyethylene sheets containing carbon nanotubes”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 579-588, 2008
- 14) A. Mangione, L. Torrisci, A.M. Visco, N. Campo, F. Bonaccorso, P.G. Gucciardi, F. Belloni
 “Carbon Nanotubes Irradiation Effects Induced by Pulsed Laser Beams”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 453-462, 2008
- 15) J.J. Beltrano, L. Torrisci, E. Campagna, E. Rapisarda, I. Finocchiaro and G. Olivi
 “Er,Cr,YSGG pulsed laser applied to medical dentistry”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 331-338, 2008
- 16) S. Gammino, L. Torrisci, L. Celona, G. Ciavola, F. Consoli, D. Margarone and F. Caridi
 “Perspectives for the eclipse method with 3rd generation ECRIS”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 277-286, 2008
- 17) D. Mascali, N. Gambino, R. Miracoli, S. Gammino and L. Torrisci
 “Plasma parameters measurements by means of langmuir probe”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 471-490, 2008
- 18) G. Privitera, L. Lanzanò, A. Scordino, S. Tudisco, F. Musumeci, D. Margarine, L. Torrisci
 “Time resolved analysis of the visible light emitted by a laser produced plasma”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 545-550, 2008
- 19) S. Cavallaro, D. Margarone, L. Torrisci, L. Laska, J. Krasa, J. Ullschmied
 “Detection of energetic ions emitted from laser produced plasma by means of CR39 solid state nuclear track detectors”

- Rad. Eff. and Def. in Solids*, V. 163(4-6), 371-380, 2008
- 20) L. Giuffrida, L. Torrisci, A. Czarnecka, J. Wolowsky, G. Quarta, L. Calcagnile, A. Lorusso and V. Nassisi
 “Ge Laser-generated plasma for ion implantation”
Rad. Eff. and Def. in Solids, V. 163(4-6), 401-410, 2008
- 21) L. Torrisci, F. Caridi, D. Margarone and A. Borrielli
 “Plasma-laser characterization by electrostatic mass quadrupole analyzer”
Nucl. Instr. and Methods in Physics Res. B 266, 308-315 (2008)
- 22) L. Torrisci, F. Caridi, D. Margarone and L. Giuffrida
 “Nickel-Plasma Produced by 532 nm and 1064 nm Pulsed Laser Ablation”
Plasma Physics Reports, 2008, Vol. 34, No. 7, pp. 547–554, 2008.
- 23) L. Torrisci, F. Caridi, D. Margarone and L. Giuffrida
 Versione russa di *Plasma Physics Reports*;
- 24) L. Torrisci, D. Margarone, L. Laska, M. Marinelli, E. Milani, G. Verona-Rinati, S. Cavallaro, L. Ryc, J. Krasa, K. Rohlena and J. Ullschmied
 “Monocrystalline diamond detector for ionizing radiation emitted by high temperature lasergenerated plasma”
J. of Appl. Physics 103, 083106, 1-6, 2008
- 25) A.M. Visco, N. Campo and L. Torrisci
 “Mechanical performance of in vacuum and in air electron beam irradiated uhmwpe”
Journal of Biomedical Materials Research: Part B - Applied Biomaterials, in press, 2008.
- 26) F. Caridi, L. Torrisci, D. Margarone and A. Borrielli
 “Investigations on low temperature laser-generated plasmas”
Laser and Particle Beams 26, 265-271, 2008
- 27) A. Lorusso, L. Velardi, V. Nassisi, F. Paladini, A.M. Visco, N. Campo, L. Torrisci, D. Margarone, L. Giuffrida and A. Rainò
 “Polymer processing by a low energy ion accelerator”
Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B 266 (2008) 2490–2493.
- 28) J. Badziak, A. Kasperczyk, P. Parys, T. Pisarczyk, M. Rosiński, L. Ryc, J. Wolowski, R. Suchańska, J. Krása, E. Krousky, L. Láska, K. Mašek, M. Pfeifer, K. Rohlena, J. Skala, J. Ullschmied, L. J. Dhareshwar, I. B. Földes, T. Suta, A. Borrielli, A. Mezzasalma, L. Torrisci and P. Pisarczyk
 “The effect of high-Z dopant on laser-driven acceleration of a thin plastic target”
Appl. Phys. Lett. 92, 211502 (2008); DOI:10.1063/1.2920705
- 29) D. Margarone, L. Torrisci, A. Borrielli and F. Caridi
 “Silver plasma by pulsed laser ablation”
Plasma Sources Sci. Technol. 17 (2008), 035019 (7pp)
- 30) L. Torrisci, D. Margarone, A. Borrielli and F. Caridi
 “Ion and photon emission from laser-generated titanium-plasma”
 14
Applied Surface Science 254 (2008) 4007–4012
- 31) L. Torrisci, D. Margarone, L. Laska, J. Krasa, A. Velyhan, M. Pfeifer, J. Ullschmied, L. Ryc
 “Self-focusing effect in Au-target induced by high power pulsed laser at PALS”
Laser and Particle Beams 26, 379-387, 2008.
- 32) F. Caridi, L. Torrisci, L. Andò, D. Margarone and A. Borrielli
 “Software for automatization of IEA-analysis of plasma-laser spectra”
Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B 266,4816-4821 (2008)
- 33) A. Borrielli, L. Torrisci, D. Margarone, F. Caridi, A.M. Mezzasalma
 “Spectroscopic measurements in Fe-plasma produced by pulsed laser ablation”
Nucl. Instr. and Methods in Phys. Res. B 266 (2008) 3968-3974
- 34) D. Mascali, L. Torrisci, S. Gammino, D. Margarone, F. Maimone, R. Miracoli and N. Gambino
 “Langmuir probe characterization of laser-generated plasmas”
Acta Technica CSAV 53 (2008), 333-345.
- 35) L. Torrisci, G. Mondio, A.M. Mezzasalma, D. Margarone, F. Caridi, T. Serafino, A. Torrisci
 “Laser and electron beams physical analyses applied to the comparison between two silver tetradrachm greek coins”

Eur. Phys. J. D (2008); DOI: 10.1140/epjd/e2008-00240-x

36) L. Torrisci, A. Borrielli, D. Margarone, F. Caridi, A.M. Mezzasalma

“Temperature and density spectroscopic measurements in different laser-generated plasmas”

Eur. Phys. J. D (2008); DOI: 10.1140/epjd/e2008-00229-5

37) L. Laska, S. Cavallaro, K. Jungwirth, J. Krasa, E. Krousky, D. Margarone, A. Mezzasalma, M. Pfeifer, K. Rohlena, L. Ryc, J. Skala, L. Torrisci, J. Ullschmied, A. Velyhan and G.

Verona-Rinati

“Experimental studies of emission of highly charged Au-ions and of X-rays from the laserproduced plasma at high laser intensities”

Eur. Phys. J. D (2008), DOI: 10.1140/epjd/e2008-00226-8

38) L. Laska, K. Jungwirth, J. Krasa, E. Krousky, M. Pfeifer, K. Rohlena, A. Velyhan, J.

Ullschmied, S. Gammino, L. Torrisci, J. Badziak, P. Parys, M. Rosinski, L. Ryc and J.

Wolowski

“Angular distributions of ions emitted from laser plasma produced at various irradiation angles and laser intensities”

Laser and Particle Beams (2008), 26, 555–565.

39) Krasa J., Jungwirth K., Gammino S., Krousky E., Laska L., Lorusso A., Nassisi V., Pfeifer M., Rohlena K., Torrisci L., Ullschmied J., Velyhan A.

“Partial currents of ion species in an expanding laser-created plasma”

Vacuum 83-1, 180-184, (2008)

PROCEEDINGS DI CONFERENZE INTERNAZIONALI CON REFEREE

1) L. Torrisci, A. Borrielli, F. Caridi, D. Margarone, S. Gammino and N. Gambino

“Optical spectroscopy in laser-generated plasma at a pulse intensity of 10^{10} W/cm²”

35th EPS Conf. on Plasma Phys. Hersonissos, 9 - 13 June 2008 ECA Vol.32D, P-2.144

2) S. Gammino, L. Celona, G. Ciavola, N. Gambino, F. Maimone, D. Mascali, R. Miracoli, and L. Torrisci

“Microwave absorption in dense and overdense plasmas generated in a Plasma Reactor for Environmental Applications”

35th EPS Conf. on Plasma Phys. Hersonissos, 9 - 13 June 2008 ECA Vol.32D, P-1.174

3) L. Torrisci, G. Mondio, R. Miracoli and A. Torrisci

“Laser and electron beams physical analyses applied to the comparison between two silver Tetradrachm greek coins”

35th EPS Conf. on Plasma Phys. Hersonissos, 9 - 13 June 2008 ECA Vol.32D, P-4.170

4) J. Wolowski, J. Badziak, A. Borrielli, L. Dareshwar, I.B. Foldes, A. Kasperczuk, E. Krousky, L. Laska, K. Masek, A. Mezzasalma, P. Parys, M. Pfeifer, T. Pisarczyk, M. Rosinski, L. Ryc, R. Suchanska, T. Suta, L. Torrisci, J. Ullschmied and P. Pisarczyk

“Application of laser-induced double ablation of plasma for enhanced macroparticle acceleration”

The 5th Intern. Conference on Inertial Fusion Sciences and Applications (IFSA2007)

Journal of Physics: Conf. Series 112 (2008) 022072, 9–14 Sept. 2007, Kobe Center, Japan.

5) F. Caridi, L. Torrisci, A. M. Mezzasalma, G. Mondio, A. Borrielli

“Al₂O₃ plasma production during pulsed laser deposition”

SPPT-23th Symp. on Plasma Physics and Technology, 16-19 June, Prague, Czech Republic

6) L. Torrisci, G. Mondio, D. Margarone, T. Serafino, A.M. Mezzasalma and A. Torrisci

15

“Laser and electron beams physical analyses applied to the comparison between two silver tetradrachm greek coins”

SPPT-23th Symp. on Plasma Physics and Technology, 16-19 June, Prague, Czech Republic

7) L. Torrisci, A. Borrielli, D. Margarone, F. Caridi and A.M. Mezzasalma

“Spectroscopic measurements in different plasmas produced by pulsed laser ablation”

SPPT-23th Symp. on Plasma Physics and Technology, 16-19 June, Prague, Czech Republic

8) D. Mascali, L. Torrisci, S. Gammino, D. Margarone, F. Maimone, R. Miracoli and N. Gambino

“Langmuir probe characterization of laser-generated plasmas”

SPPT-23th Symp. on Plasma Physics and Technology, 16-19 June, Prague, Czech Republic.

9) L. Torrisci, D. Margarone, E. Milani, G. Verona-Rinati, G. Prestopino, C. Tuvè, R. Potenza, L. Láska, J. Krása

“Diamond Detectors for time-of-flight measurements in Laser-Generated Plasmas”

4th Workshop on European Collaboration for Higher Education and Research in Nuclear Engineering & Radiological Protection (CHERNE), 26-28 May 2008, Favignana, Italy

10) S. Almaviva, V. Bellini, F. Caridi, S. Costa, F. Mammoliti, D. Margarone, M. Marinelli, E. Milani, R. Potenza, G. Prestopino, C. Suter, L. Torrisoni, A. Tucciarone, C. Tuvè, C. Verona and G. Verona-Rinati

“Thin film CVD single crystal diamonds for high energy ion beam detection”

4th Workshop on European Collaboration for Higher Education and Research in Nuclear Engineering & Radiological Protection (CHERNE), 26-28 May 2008, Favignana, Italy

11) L. Torrisoni, D. Margarone, F. Caridi, A. Borrielli and S. Gammino,

“Laser-driven based new ion acceleration method”

EPAC Conference, Genova, June 23-27, MOCP024, 253-255, 2008

12) D. Margarone, D. Mascali, L. Torrisoni, R. Miracoli, N. Gambino, S. Gammino, G. Ciavola, L. Celona and F. Maimone

“Langmuir probe diagnostics of plasma produced by laser ablation”

35th EPS Conference on Plasma Phys. Hersonissos, 9 - 13 June 2008 ECA Vol.32D, P-2.142 (2008)

13) S. Cavallaro, D. Margarone, L. Torrisoni

“Charge and energy discrimination of ions in CR39 track detectors by diameter-depth correlations”

35th EPS Conference on Plasma Phys. Hersonissos, 9 - 13 June 2008 ECA Vol.32D, P-4.154 (2008)

PUBBLICAZIONI SU REPORTS E RIVISTE NAZIONALI

1) F. Caridi, L. Torrisoni, A. Borrielli and A. Mezzasalma

“TOF ion spectra deconvolution for laser-generated plasmas”

1° Workshop “Plasmi, Sorgenti, Biofisica ed Applicazioni”, Dip.to Fisica Lecce, 9 Ott. 2008.

2) A.M. Visco, N. Campo, L. Torrisoni

“Invecchiamento accelerato di Polietilene biomedico (UHMWPE) irraggiato con fasci di elettroni”

Atti 9° Conv. Naz. AIMAT, Sorrento 29 Giugno-2 Luglio 2008

3) L. Torrisoni, D. Margarone, F. Caridi, A. Borrielli and D. Mascali

“Pulsed Laser Ablation for Transient Obtainable Electric-field (INFN-PLATONE Gr.V-Project)”

INFN-LNS, ActivityReport, 151-154, 2007

4) Borrielli A., Caridi F., Giuffrida L., Margarone D., Torrisoni L.

“Accelerazione di ioni in plasmi prodotti da laser”

Atti XCIV Congr. Naz. Società Italiana di Fisica (SIF), Genova, 22-27, Sett. 2008

5) L. Torrisoni

“Ablazione laser e spettrometria di massa nel campo dei Beni Culturali”

Relazione su invito. Atti XCIV Congr. Naz. Società Italiana di Fisica (SIF), Genova, 22-27, Sett. 2008

6) L. Torrisoni, S. Cavallaro, A. Scuderi and S. Tudisco

Proton acceleration by laser-generated plasma for nuclear applications

1° Workshop “Plasmi, Sorgenti, Biofisica ed Applicazioni”, Dip.to Fisica Lecce, 9 Ott. 2008.

7) N. Campo, L. Torrisoni, A.M. Visco

“Polymer modifications due to absorption of different ionizing radiations”

1° Workshop “Plasmi, Sorgenti, Biofisica ed Applicazioni”, Dip.to Fisica Lecce, 9 Ott. 2008.

8) L. Giuffrida, L. Torrisoni, F. Caridi and A. Borrielli

“Ge ion implant from energetic plasma laser-generated”

1° Workshop “Plasmi, Sorgenti, Biofisica ed Applicazioni”, Dip.to Fisica Lecce, 9 Ott. 2008.

9) L. Torrisoni, G. Mondio, T. Serafino, F. Caridi, A. Borrielli, D. Margarone, L. Giuffrida, A. Torrisoni

“LAMQS, EDXRF and SEM analyses of old coins”

1° Workshop “Plasmi, Sorgenti, Biofisica ed Applicazioni”, Dip.to Fisica Lecce, 9 Ott. 2008.

16

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), V. D’Amico, U. Emanuele, A. Italiano, D. Loria, E. Morgana, A. Trifirò, M. Trimarchi

Studio delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia

La presenza, presso il Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina, di un acceleratore lineare di elettroni da 5 MeV, interamente progettato e realizzato in sede, ha consentito al gruppo di

avviare, già da qualche anno, una linea di ricerca interamente incentrata sull'acceleratore e volta allo studio delle applicazioni del trattamento con le radiazioni ionizzanti. In particolare, l'acceleratore in questione rappresenta una facility interdisciplinare grazie alla quale, in collaborazione con altri gruppi di ricerca e con ditte private, vengono sviluppate svariate applicazioni, quali lo studio delle modifiche delle proprietà chimico-fisiche dei mezzi irradiati, la sintesi di nuovi materiali biocompatibili, la sterilizzazione di materiali di interesse biologico, la fattibilità di processi industriali innovativi. Nel corso dell'anno 2008, in collaborazione con alcuni ricercatori dei Dipartimenti di Fisica, di Scienze Biomediche, di Orto-Floro-Arbicoltura e Tecnologie Agro-Alimentari dell'Università degli Studi di Catania, mediante l'acceleratore è stata studiata la possibilità di decontaminazione di derrate alimentari mediante il trattamento con elettroni. In particolare, campioni di farina di semola commerciale sono stati irraggiati alla dose di 10 kGy, e le analisi strumentali non hanno mostrato grandi variazioni dei parametri misurati.

In collaborazione con il Dipartimento di Chimica industriale ed Ingegneria dei Materiali dell'Università di Messina è stata studiata la risposta alla trazione meccanica di campioni di UHMWPE trattati con fasci di elettroni in vuoto e ad alta temperatura.

Parallelamente alle ricerche sopraesposte, si è continuato lo studio sperimentale sulle performances dell'acceleratore, al fine di migliorarne le caratteristiche ai fini applicativi. In particolare, uno studio esteso è stato condotto sulla possibilità di variare l'energia del fascio di elettroni al variare della potenza erogata dal generatore a radiofrequenza. Le caratteristiche del fascio ottenuto in corrispondenza dei valori di potenza possibili sono state valutate sperimentalmente, e si è trovato un range di variabilità compreso fra i 2,5 ed i 5,5 MeV.

Realizzazione di un impianto accelerante per scopi industriali e di ricerca

Nel corso dell'anno 2008 è proseguita l'attività connessa al P.I.T. 22 'La via dell'argilla', che prevede la realizzazione presso il Centro Servizi dedicato di Villafranca Tirrena del 'Laboratorio di ricerche sul Radiation Processing e gli Acceleratori Lineari di Elettroni' che consiste in un impianto di irraggiamento da 10 MeV per scopi industriali e di ricerca.

Il docente di riferimento del gruppo, prof. Renato C. Barnà, è Responsabile Scientifico del progetto TECNA Territorio, e l'attività di progettazione ed allestimento dell'impianto svolta nel 2008 è consistita nel montaggio dell'acceleratore e nell'allestimento del laboratorio di elettronica e dell'officina meccanica.

In vista della futura attività in conto terzi che si auspica per l'impianto di irraggiamento, il gruppo di ricerca ha sviluppato il lavoro di simulazione delle performances dell'impianto mediante appositi codici, al fine di caratterizzare completamente i range di variazione dell'energia, della dose e del doserate dell'impianto.

L'approfondita conoscenza delle condizioni di irraggiamento ottenibili mediante l'impianto consentirà di rispondere in maniera appropriata alle richieste del mondo industriale e della ricerca scientifica.

Correlazioni fra ioni pesanti ad energie intermedie

Per quanto riguarda l'attività di questo gruppo in fisica nucleare, essa si svolge presso i Laboratori Nazionali del Sud dell'INFN, nell'ambito dell'esperimento EXOCHIM, che fa uso del multirivelatore CHIMERA, e che viene svolto in collaborazione con le sezioni INFN di Catania, LNS, Milano e Napoli. Nell'ambito di questo esperimento il gruppo di ricerca nel corso del 2008 ha contribuito alle operazioni di trasporto, montaggio e test del multi rivelatore CHIMERA e dell'elettronica associata nella sala acquisizioni dedicata presso i LNS di Catania. Inoltre, nel secondo semestre del 2008 il

gruppo di ricerca ha partecipato a diverse campagne di raccolta dati nella nuova configurazione sperimentale. Per quanto riguarda l'analisi dei dati raccolti negli anni precedenti, nel corso del 2008 il gruppo di ricerca ha completato l'identificazione in carica e massa delle particelle prodotte durante la reazione $^{124}\text{Sn}+^{58}\text{Ni}$ a 35 MeV/nucleone nonché la valutazione del loro tempo di volo.

Elenco lavori pubblicati su riviste internazionali con referee:

1) J. Wilczynski, I. Skwira-Chalot, K. Siwek-Wilczynska, W. Gawlikowicz, J. Lukasik, 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, A. Grzeszczuk, P. Guazzoni, S. Kowalski, E. La Guidara, G. Lanzano, G. Lanzalone, C. Maiolino, Z. Majka, N.G. Nicolis, A. Pagano, E. Piasecki, S. Pirrone, R. Planeta, G. Politi, F. Porto, F. Rizzo, P. Russotto, K. Schmidt, A. Sochocka, L. Swiderski, A. Trifirò, M. Trimarchi, J.P. Wieleczko, L. Zetta, W. Zipper "Re-separation modes of $^{197}\text{Au} + ^{197}\text{Au}$ system at sub-Fermi energies" **Intl. J. of Mod. Phys. E** **17** (1) (2008) 41-52

2) R. Planeta, F. Amorini, A. Anzalone, L. Auditore, V. Baran, A. Benisz, I. Berceanu, A. Bonasera, B. Borderie, J. Borgensztajn, R. Bougault, M. Bruno, J. Brzychczyk, G. Cardella, S. Cavallaro, M.B. Chatterjee, A. Chbihi, M. Colonna, M. D'Agostino, R. Dayras, E. De Filippo, M. Di Toro, J. Frankland, E. Galichet, W. Gawlikowicz, E. Geraci, G. Giuliani, F. Giustolisi, A. Grzeszczuk, P. Guazzoni, D. Guinet, S. Kowalski, M. Krauze, E. La Guidara, G. Lanzano, G. Lanzalone, N. Le Neindre, J. Lukasik, C. Maiolino, Z. Majka, N.G. Nicolis, A. Pagano, M. Papa, M. Petrovici, E. Piasecki, S. Pirrone, G. Politi, A. Pop, F. Porto, M.F. Rivet, E. Rosato, F. Rizzo, P. Russotto, K. Schmidt, K. Siwek-Wilczynska, I. Skwira-Chalot, A. Sochocka, L. Swiderski, A. Trifirò, M. Trimarchi, G. Vannini, M. Vigilante, J.P. Wieleczko, J. Wilczynski, L. Zetta and W. Zipper "Centrality dependence of isospin effects signatures in $^{124}\text{Sn} + ^{64}\text{Ni}$ and $^{112}\text{Sn} + ^{58}\text{Ni}$ reactions" **Physical Review C** **77**, 014610 (2008)

3) F. Amorini, V. Sipala, G. Cardella, C. Boiano, B. Carbone, L. Cosentino, E. Costa, A. Di Pietro, U. Emanuele, G. Fallica, P. Figuera, P. Finocchiaro, E. La Guidara, C. Marchetta, A. Pappalardo, A. Piazza, N. Randazzo, F. Rizzo, V. Russo, P. Russotto, C. Scirè, S. Scirè, A. Trifirò, M. Trimarchi and G. Valvo, "Imaging monolithic silicon detector telescopes" **NIM A** **589** (2008) 280-289

4) L. Auditore, R.C. Barnà, D. De Pasquale, U. Emanuele, D. Loria, E. Morgana, A. Trifirò, M. Trimarchi "Radiation Processing with the Messina electron linac" **NIM B** **266** (2008) 2130-2133

5) L. Auditore, R.C. Barnà, U. Emanuele, D. Loria, A. Trifirò, M. Trimarchi "X-RAY tomography system for industrial applications" **NIM B** **266** (2008) 2138-2141

6) I. Skwira-Chalot, K. Siwek-Wilczynska, J. Wilczynski, 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, G. Lanzano, J. Lukasik, C. Maiolino, Z. Majka, N.G. Nicolis, A. Pagano, E. Piasecki, S. Pirrone, R. Planeta, G. Politi, F. Porto, F. Rizzo, P. Russotto, K. Schmidt, A. Sochocka, L. Swiderski, A. Trifirò, M. Trimarchi, J.P. Wieleczko, L. Zetta and W. Zipper "Fast ternary and quaternary breakup of the $^{197}\text{Au} + ^{197}\text{Au}$ system in collisions at 15 MeV/nucleon" **PRL** **101** (2008) 262701

Elenco comunicazioni a Congressi Nazionali ed Internazionali:

1) Dario Loria, Lucrezia Auditore, Renato Calogero Barnà, Umberto Emanuele, Emanuele Morgana, Antonio Trifirò, Marina Trimarchi, Massimo Carpinelli, Antonio Franconieri, Mauro Gambaccini "Dual Energy Material Recognition: Preliminary Results Obtained with the Radio-tomographic System Hosted in Messina" 11th **European Particle Accelerator Conference (EPAC08), June 23-27, 2008 Genoa** TUPP159

2) Auditore L., Barnà R.C., Carpinelli M., Di Domenico G., Emanuele U., Franconieri A., Gambaccini M., Loria D., Morgana E., Trifirò A., Trimarchi M. "Verso una Dual Energy ad alta energia: sviluppo di una tecnica radiografica di riconoscimento dei materiali mediante il linac di Messina." **XCIV Congresso Nazionale S.I.F., Genova, 22-27 Settembre 2008**

3) Auditore L., Barnà R.C., Emanuele U., Loria D., Morgana E., Trifirò A., Trimarchi M. "Centro **TECNATerritorio: Il Laboratorio di Ricerche sul Radiation Processing.**" **XCIV Congresso Nazionale S.I.F., Genova, 22-27 Settembre 2008**

18

4) Agodi A., Auditore L., Barchitta M., Barnà R.C., Bellia G., Emanuele U., Ferrante M., Lanza C.M., Loria D., Mazzaglia A., Sciacca S., Trifirò A., Trimarchi M. "L'uso di radiazioni ionizzanti per la decontaminazione di derrate alimentari." **XCIV Congresso Nazionale S.I.F., Genova, 22-27 Settembre 2008**

5) Grassi L., Amorini F., Anzalone A., Auditore L., Berceanu I., Blicharska J., Bruno M., Brzychczyk J., Cardella G., Cavallaro S., Chatterjee M.B., De Filippo E., Emanuele U., Galichet E., Gawlikowicz W., Geraci E., Giustolisi F., Grzeszczuk A., Guazzoni P., Kowalski S., La Guidara E., Lanzalone G., Lanzano G., Lombardo I., Maiolino C., Majka Z., Pagano A., Papa M., Petrovici M., Piasecki E., Pirrone S., Planeta R., Politi G., Pop A., Porto F., Rizzo F., Russotto P., Schmidt K., Sochocka A., Siwek-Wilczynska K., Skwira I., Swiderski L., Trifirò A., Trimarchi M., Vigilante M., Wilczynski J., Zetta L., Zipper W. "Studio dell'effetto dell'isospin nelle collisioni $^{112}\text{Sn} + ^{58}\text{Ni}$ e $^{124}\text{Sn} + ^{64}\text{Ni}$ a 35 MeV/nucleone tramite il multirivelatore Chimera." **XCIV Congresso Nazionale S.I.F., Genova, 22-27 Settembre 2008**

6) Amorini F., Agodi C., Anzalone A., Arena N., Auditore L., Barnà R., Benisz A., Berceanu I., Chatterjee M.B., Cardella G., Cavallaro S., De Filippo E., Emanuele U., Gawlikowicz W., Grassi L., Giuliani G., Giustolisi F., Grzeszczuk A., Guazzoni P., Kowalski S., La Guidara E., Lombardo I., Lanzalone G., Lo Nigro S., Loria D.,

Maiolino C., Nicolis N.G., Pagano A., Papa M., Pawelczak I., Petrovici M., Piasecki E., Pirrone S., Planeta R., Politi G., Pop A., Porto F., Previdi F., Quinlan M., Rizzo F., Rosato E., Russotto P., Schroder U., Skwira-Chalot I., Sipala V., Siwek-Wilecynska K., Schmidt K., Sperduto M.L., Sochocka A., Stiro M., Swiderski L., Trifirò A., Trimarchi M., Toke J., Verde G., Vigilante M., Wilczynski J., Zetta L., Zipper W. "Programma di esperimenti del multirivelatore CHIMERA con fasci radioattivi presso i Laboratori Nazionali del Sud di Catania." **XCIV Congresso Nazionale S.I.F., Genova, 22-27 Settembre 2008**

19

6.3 Reazioni nucleari su nucleoni e nuclei

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

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

Sono state studiate le sezioni d'urto dei residui per la reazione $^{48}\text{Ca}+^{154}\text{Sm}$ nell'intervallo di energia $E_{c.m.} = 130-200$ MeV ed angoli di orientazione del bersaglio $\alpha_T < 45^\circ$ o $\alpha_T > 45^\circ$. Le sezioni d'urto variano tra 10 – 100 mb nel primo caso, e tra 0.1 e 10 mb nel secondo caso.

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

È stato studiato inoltre lo spettro di probabilità della emissione di bremsstrahlung in coincidenza con il decadimento α del ^{226}Ra ($E_{\alpha} = 4.8$ MeV) attraverso l'uso del modello presentato nel precedente studio del decadimento α del ^{214}Po ($E_{\alpha} = 7.7$ MeV)

Il presente gruppo di ricerca ha partecipato durante l'anno 2008 agli esperimenti GRAAL presso la facility ESRF di Grenoble per lo studio della fotoproduzione di mesoni ottenuti nelle reazioni con proiettili γ polarizzati di energia 0.6 - 1.5 GeV su un bersaglio di deuterio liquido. Sono state estratte le asimmetrie di fascio per la fotoproduzione dei mesoni η , π_0 e π^- su neutrone ed è stato inoltre misurato l'impulso di Fermi nel deuterio. È stato trovato che l'asimmetria di fascio di η e π_0 su protone libero e quasi libero risultano molto simili, e ciò ha consentito di arguire che un analogo comportamento è atteso sulle reazioni di fotoproduzione su neutrone quasi libero e sul neutrone libero nell'ipotesi che questo possa essere prodotto. Lo studio teorico delle asimmetrie di fascio nella fotoproduzione di η su protone libero e quasi libero ha portato alla valutazione dell'interferenza tra le risonanze S11(1535) e D13(1520). È stato possibile inoltre estrarre il contributo della risonanza F15(1670) evidenziata dalla forma piccata in avanti dell'asimmetria di fascio. Nel caso della produzione del mesone η nella reazione su neutrone è stato osservato il contributo predominante della risonanza D15(1675). Dal confronto fra la fotoproduzione di η su neutrone e protone è emerso il ruolo della risonanza P11(1670) e dell'interferenza tra le risonanze S11(1650) e P11(1710). Lo studio dell'asimmetria di fascio del π_0 su neutrone ha consentito inoltre di stimare il contributo della risonanza P11(1710).

Publicazioni

- 1) G. Fazio, G. Giardina, F. Hanappe, G. Mandaglio, M. Manganaro, A.I. Muminov, A.K. Nasirov, C. Saccà. "Role of the target orientation angle and orbital angular momentum in the evaporation residue production", J. Phys. Soc. Jpn. 77 (12), 124201 (2008).
- 2) G. Giardina, G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro, S.P. Maydanyuk, V.S. Olkhovskiy, N.V. Eremin, A.A. Paskhalov, D.A. Smirnov, C. Saccà. "Bremsstrahlung emission during alpha-decay of ^{226}Ra ". Mod. Phys. Lett. A 23, 2651 (2008).
- 3) G. Fazio, G. Giardina, F. Hanappe, G. Mandaglio, M. Manganaro, A.I. Muminov, A.K. Nasirov, C. Saccà. "Role of the target orientation angle and orbital angular momentum in the evaporation residue production", J. Phys. Soc.

Jap. 77 (12), 124201 (2008).

4) A. Fantini, R. Di Salvo, O. Bartalini, V. Bellini, J.P. Bocquet, L. Casano, M. Castoldi, A. D'Angelo, D. Franco, G. Gervino, F. Ghio, G. Giardina, B. Girolami, A. Giusa, V. Kuznetsov, A. Lapik, P.L. Sandri, A. Lleres, F. Mammoliti, G. Mandaglio, M. Manganaro, D. Moricciani, A.N. Mushkarenkov, V. Nedorezov, L. Nicoletti, C. Randieri, D. Rebreyend, F. Renard, N. Rudnev, G. Russo, C. Schaerf, M.L. Sperduto, M.C. Sutura, A. Turinge, V. Vegna, A. Fix, L. Tiator, S. Kamalov, "First Measurement of η beam asymmetry for eta photoproduction on the neutron" Phys. Rev. C 78, 015203 (2008).

5) G. Giardina, G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro, C. Saccà, N.V. Eremin, A.A. Paskhalov, D.A. Smirnov, S.P. Maydanyuk and V.S. Olkhovskiy "Bremsstrahlung emission accompanying alpha-decay of ^{214}Po " Eur. Phys. J. A 36, 31 (2008).

6) L. Stuttge, C. Schmitt, O. Dorvaux, N. Rowley, T. Materna, F. Hanappe, V. Bouchat, Y. Aritomo, A. Bogatchev, I. Itkis, M. Itkis, M. Jandel, G. Knyazeva, J. Kliman, E. Kozulin, N. Kondratiev, L. Krupa, Y. Oganessian, I. Pokrovski, E. Prokhorova, V. Voskresenski, N. Amar, S. Grevy, J. Peter, G. Giardina "Dynamics of capture, quasifission and fusion-fission competition", Dynamical Aspects of Nuclear Fission, 22-35 (2008).
ISI:000263639200003

7) V. Bellini, J. P. Bocquet, L. Casano, M. Castoldi, A. D'Angelo, J. P. Didelez, R. Di Salvo, A. Fantini, D. Franco, G. Gervino, F. Ghio, G. Giardina, B. Girolami, A. Giusa, M. Guidal, E. Hourany, R. Kunne, A. Lapik, P. Levi Sandri, A. Lleres, F. Mammoliti, G. Mandaglio, M. Manganaro, D. Moricciani, A. Mushkarenkov, V. Nedorezov, L. Nicoletti, C. Randieri, D. Rebreyend, N. Rudnev, G. Russo, C. Schaerf, M.-L. Sperduto, M.-C. Sutura, A. Turinge, V. Vegna. "Recent results from the GRAAL and LEGS beams" VI International Conference on Perspectives in Hadronic Physics, May 12-16, 2008, ICTP, Trieste, Italy AIP Conference Proceedings, Volume 1056, ISBN 978-0-7354-0586-8 (2008), DOI:10.1063/1.3013072.

8) V. Bellini, A. Giusa, F. Mammoliti, C. Randieri, G. Russo, M.L. Sperduto M.C. Sutura G. Giardina, G. Mandaglio, M. Manganaro, O. Bartalini, A. D'Angelo, A. Fantini, L. Nicoletti, C. Schaerf, L. Casano, R. Di Salvo, D. Moricciani, M. Capogni, P. Levi Sandri, C. Gaulard, B. Girolami, F. Ghio, J.P. Bocquet, P. Calvat, A. Lleres, D. Rebreyend, F. Renard, T. Russev, J.P. Didelez, M. Guidal, E. Hourany, R. Kunne, A. Lapik, A.N. Mushkarenkov, V. Nedorezov, N. Rudnev, A. Turinge, M. Castoldi, G. Gervino, V. Kuznetsov " η photoproduction in Hydrogen and Deuterium" Nucl. Phys. A 805, 84-86 (2008).

9) G. Fazio, G. Mandaglio, "Does an $I(z)$ correlation exist for the back-part of the Shroud body image?". Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali, vol. LXXXVI, ISSN: 1825-1242, doi: 10.1478/C1A0802005, (2008).

10) G. Fazio, G. Mandaglio, "The absorbed energy in the Shroud body image formation appears as contributed by discrete values" Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali, vol. LXXXVI, ISSN: 1825-1242, doi: 10.1478/C1A0802004, (2008).

Comunicazioni a congressi

1) G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina, A.I. Muminov, A. K. Nasirov "Influence of the projectile-target orientation angles on the production of residue nuclei" NPAE-Kyiv, 9-15 Giugno 2008

2) S. P. Maydanyuk, V. S. Olkhovskiy, N. V. Eremin, G. Giardina, G. Fazio, G. Mandaglio, M. Manganaro, C. Saccà "bremsstrahlung emission accompanying alpha-decay of deformed nuclei", NPAE-Kyiv 2008 9-15 Giugno 2008

3) A.K. Nasirov, A.I. Muminov, G. Giardina, G. Mandaglio, M. Manganaro "Analysis of yields of fusion-fission and quasifission fragments in heavy ion collisions", NPAE-Kyiv, 9-15 Giugno 2008

4) G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina, C. Saccà, S.P. Maydanyuk, V.S. Olkhovskiy, N. V. Eremin, A. A. Paskhalov, D. A. Smirnov: "Bremsstrahlung Radiation Accompanying the α -Decay of Heavy Nuclei", CHERNE, Favignana 25-28 Giugno 2008

5) G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina, C. Saccà, A.I. Muminov, and A.K. Nasirov: "Role of the Orientation Angles of Reacting Nuclei on the Evaporation Residue Production", CHERNE, Favignana 25-28 Giugno 2008

6) G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Giardina, V. Bellini, A. Giusa, M. Mammoliti, C. Randieri, G. Russo, M.L. Sperduto, C. Sutura, A. D'Angelo, R. Di Salvo, A. Fantini, D. Franco, D. Moricciani, C. Schaerf, V. Vegna, J.P. Bocquet, A. Lleres, D. Rebreyend, F. Renard: "Vertex Identification of Events in Photonuclear Reactions by Multiwire Proportional Cylindrical Chambers", CHERNE, Favignana 25-28 Giugno 2008.

7) G. Mandaglio, G. Fazio, G. Giardina, F. Hanappe, M. Manganaro, A. I. Muminov, A. K. Nasirov, C. Saccà, "Investigation of the role of the projectile-target orientation angles on the evaporation residue production", 58 Meeting On Nuclear Spectroscopy And Nuclear Structure, Russia, Moscow, June 23 - 27,

2008.

8) G. Mandaglio, M. Manganaro, G. Fazio, G. Giardina, A.K. Nasirov, C. Saccà: “*Aspettative per la reazione $^{136}\text{Xe} + ^{136}\text{Xe}$ di produrre l'elemento superpesante Hassium in confronto alla reazione $^{26}\text{Mg} + ^{248}\text{Cm}$* ”; XCIV Congresso SIF, Genova, 22-27 Settembre, 2008, book-abstact pag.221.

9) A. K. Nasirov, G. Fazio, S. Hofmann, G. Giardina, A. I. Muminov, G. Mandaglio, M. Manganaro, W. Scheid: “*Comparison of characteristics of fusion-fission and quasifission fragments in heavy ion*

21 reactions”; 58 Meeting On Nuclear Spectroscopy And Nuclear Structure, Russia, Moscow, June 23 - 27, 2008.

10) A.K. Nasirov, G. Fazio, G. Giardina, F. Hanappe, A.I. Muminov, G. Mandaglio, M. Manganaro “*Comparison of the fusion-fission and quasifission mechanisms in heavy-ion collisions*” 15th Nuclear Physics Workshop “Marie & Pierre Curie” Kazimierz 2008.

11) F. Mammoliti, V. Bellini, A. Giusa, C. Randieri, G. Russo, M.L. Sperduto, M.C. Sutura, A. D'Angelo, R. Di Salvo, A. Fantini, D. Moricciati, C. Schaerf, V. Vegna, P. Levi Sandri, G. Mandaglio, G. Giardina “*Charged particle detection at GRAAL*”; CHERNE, Favignana 25-28 Giugno 2008.

22

6.4 Materiali disordinati

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

Progetti di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale:

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)

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

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

(i) Studio della struttura di vetri borati alcalini tramite dinamica molecolare

La struttura di vetri borati alcalini $(\text{M}_2\text{O})_x(\text{B}_2\text{O}_3)_{1-x}$, con $\text{M}=\text{Li}, \text{Na}, \text{K}, \text{Rb}$ e Cs , è stata investigata tramite simulazioni di dinamica molecolare. I risultati indicano che gli atomi di Li entrano negli interstizi della matrice borata senza indurre grandi modifiche del network, anche ad elevate concentrazioni. Quando altri cationi alcalini sono aggiunti alla struttura ospite, il network si apre per accomodare i cationi di più grandi dimensioni. Queste modifiche inducono la comparsa di un pre-picco a piccoli valori del momento trasferito Q , la cui intensità aumenta all'aumentare della concentrazione alcalina e del raggio ionico del catione.

Calore specifico a bassa temperatura in network di polimeri eterociclici.

Networks di polimeri eterociclici (HPN) aventi differenti densità di network rivelano un eccesso di calore specifico C_p a basse temperature rispetto a quello previsto dalla teoria di Debye, avente la forma di un picco ben definito in un plot di C_p/T^3 con un massimo a circa 5 K. L'aumento della densità di network causa un leggero decremento del calore specifico d'eccesso. Quando scalati per il contributo di Debye, i calori specifici di differenti HPN risultano essere quasi coincidenti entro l'errore sperimentale, fornendo forte evidenza che la sorgente dell'eccesso di C_p potrebbero essere vibrazioni addizionali associate con i monomeri che costituiscono il network polimerico. Il confronto tra gli andamenti della “fragilità”, definita secondo la classificazione proposta da Angell, e l'eccesso di C_p rivela che gli HPN non seguono l'andamento usualmente osservato nei vetri inorganici e nei polimeri lineari amorfi, dove un maggiore eccesso di vibrazioni addizionali di bassa energia è osservato in sistemi definiti “strong”.

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

Lo studio delle curve di frizione interna ipersoniche, determinate tramite spettroscopia Brillouin ad alta risoluzione fra 15 K e 300 K in vetri borati alcalini, mostra che differenti meccanismi statici e dinamici contribuiscono all'attenuazione del suono nell'intervallo dei GHz: (i) un background di attenuazione dovuto alla presenza di fluttuazioni di densità dentro il volume di scattering, (ii) il moto localizzato di stati di difetto, e (iii) l'anarmonicità vibrazionale. La

dipendenza dalla temperatura dell'attenuazione ipersonica è caratterizzata da un picco, la cui temperatura T_{peak} si adatta molto bene sul plot di Arrhenius determinato dalle temperature dei picchi, rivelati a frequenze ultrasoniche, indicando che i rilassamenti termicamente attivati, che determinano l'attenuazione ultrasonica, contribuiscono anche alla perdita ipersonica. Per $T > T_{\text{peak}}$, Q^{-1} decresce solo leggermente all'aumentare della temperatura evidenziando un eccesso di attenuazione, derivante da un meccanismo di "viscosità fononica", proposto da Akhiezer, che si origina dalle interazioni anarmoniche delle onde ipersoniche longitudinali con i fononi termici.

23

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

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

(iv) Proprietà ottiche ed acustiche di vetri di GeO_2 permanentemente densificati

Uno studio di caratterizzazione acustica, ottica e spettroscopica condotto su vetri di GeO_2 permanentemente densificati tramite pressioni variabili nell'intervallo fra 2 e 6 GPa ha rivelato le seguenti peculiarità:

- (i) le velocità del suono di onde trasverse e longitudinali nell'intervallo di frequenze dai MHz ai GHz aumentano all'aumentare della densificazione, in accordo con l'irrigidimento del mezzo elastico;
- (ii) la densificazione determina una significativa riduzione del numero degli stati di difetto soggetti a rilassamenti termicamente attivati, che causano un eccesso di attenuazione del suono nei vetri;
- (iii) la densificazione determina una evoluzione del Boson Peak, che si sposta verso più alte frequenze e diminuisce in intensità all'aumentare della densità.

B. Proprietà strutturali e dinamiche di sistemi biologici.

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

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

Pubblicazioni

1. "A molecular dynamics study of the role of the cation in modifying the structure of alkali borate glasses", M. A. Gonzalez, C. Mondelli, G. D'Angelo, C. Crupi and M. R. Johnson, *J. Non-Crystalline Solids* **354**, 203-207 (2008)
2. "Influence of gramicidin on the dynamics of DMPC studied by incoherent elastic neutron scattering", U. Wanderlingh, G. D'Angelo, V. Conti Nibali, M. A. Gonzalez, C. Crupi and C. Mondelli, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 104214 (2008).
3. "CURRENT ISSUES OF PHYSICS IN MALAYSIA: National Physics Conference 2007 - PERFIK 2007", AIP Conference Proceedings vol. 1017, **H. B. Senin, G. Carini, J. B. Abdullah, and D. A. Bradley Editors**, (2008). ISBN: 978-0-7354-0538-7.
4. "Acoustic and Thermal Properties of Glasses: Defect Modes and Vibrational Anharmonicity", G. Carini, AIP Conf. Proc. 1017, 35-43 (2008).
5. "Low-temperature specific heat of heterocyclic polymer networks: effect of network density", G. Carini Jr, G. Carini, G. D'Angelo, G. Tripodo, A. Bartolotta, G. Salvato, L. Hong, *Phil Mag.* **88**, 3999-4005 (2008).
6. "Boson peak in alkaline borate glasses: Raman spectroscopy, neutron scattering and specific heat measurements", G. D'Angelo, G. Carini, C. Crupi, M. Koza, G. Tripodo, C. Vasi, *Phys. Rev.* **B 79**, 014206 (2009).
7. "Thermally activated relaxations and vibrational anharmonicity in alkali-borate glasses: Brillouin scattering study",

G. Carini Jr, G. Tripodo, L. Borjesson, *Phys. Rev.* **B 78**, 024104 (2008).

8. "Optical and spectroscopic characterization of permanently densified v-GeO₂", L. Orsingher, M. Calicchio, G. Carini Jr, R. Del Maschio, D. Fioretto, A. Fontana, P. Fumagalli, E. Gilioli, M. Mattarelli, E. Moser, and F. Rossi, *Phil Mag.* **88**, 3907-3914 (2008).

9. "Acoustic behaviour of normal and densified vitreous GeO₂", G. Carini Jr., L. Orsingher, G. Tripodo and E. Gilioli, *Phil Mag.* **88**, 4143-4150 (2008).

10. "Physical study of dynamics in fully hydrated phospholipid bilayers", G. D'Angelo, U. Wanderlingh, V. Conti

24
Nibali, C. Crupi, C. Corsaro and G. Di Marco, *Phil Mag.* **88**, 4033-4046 (2008).

Partecipazioni e Comunicazioni a congressi

1. "Low temperature specific heat of heterocyclic polymer networks: effect of network density", Giovanni Carini Jr, Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Gaspare Tripodo, Antonio Bartolotta, Gaetano Di Marco, Gabriele Salvato, *11th Int. Workshop on Disordered Systems*, 17-20 March 2008, Andalo (Trento), Italy.

2. "Acoustic behaviours of permanently densified vitreous GeO₂", Giovanni Carini Jr, Gaspare Tripodo, Laura Orsingher, Edmondo Gilioli, *11th Int. Workshop on Disordered Systems*, March 2008, Andalo (Trento), Italy.

3. "Optical characterization of densified v-GeO₂", L. Orsingher, A. Fontana, G. Baldi, G. Carini Jr, G. Carini, G. Tripodo, *11th Int. Workshop on Disordered Systems*, 17-20 March 2008, Andalo (Trento), Italy.

4. "Physical study of dynamics in fully hydrated phospholipid bilayers", G. D'Angelo, U. Wanderlingh, V. Conti Nibali, C. Crupi, C. Corsaro and G. Di Marco, *11th Int. Workshop on Disordered Systems*, 17-20 March 2008, Andalo (Trento), Italy.

5. "Secondary relaxations in heterocyclic polymer networks: a study of mechanical spectroscopy", Giovanni Carini Jr, Giuseppe Carini, Sergio La Rocca, Gaspare Tripodo, Antonio Bartolotta, Gaetano Di Marco, Eleonora G. Privalko, 15th Int. Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy ICIFMS-15, Luglio 2008, Perugia, Italy.

6. "Ultrasonic and hypersonic behavior in cesium borate glass", Giovanni Carini Jr, Gaspare Tripodo, Lars Borjesson, 15th Int. Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy ICIFMS-15, Luglio 2008, Perugia, Italy.

7. "Effect of thermal history on the acoustic attenuation of dry and wet B₂O₃", G. D'Angelo, C. Crupi, V. Conti Nibali, M. A. Ramos, 15th Int. Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy ICIFMS-15, Luglio 2008, Perugia, Italy.

8. "Elastic moduli and structure of caesium borate glasses", G. D'Angelo, C. Crupi, F. Di Stefano, G. Tripodo, 15th Int. Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy ICIFMS-15, Luglio 2008, Perugia, Italy

Collaborazioni nazionali ed internazionali

- Prof. Lars Borjesson, Chalmers University, Department of Applied Physics, Goteborg, Sweden
- Prof. Steve Martin, Iowa State University, Department of Materials Science and Engineering, Ames, IOWA, USA
- Dr. Miguel A. Gonzalez, Institute Laue-Langevin, Grenoble, France.
- Prof. Miguel A. Ramos, Departamento de Fisica de la Materia Condensada, Universidad Autonoma de Madrid
- Prof. Alexander Fainleb, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 02160 Kyiv, Ukraine
- Dr. Eleonora Privalko, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 02160 Kyiv, Ukraine

25

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

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

(a) Liquidi glass-forming. Lo studio dei processi di rilassamento secondari ha assunto in questi anni sempre maggiore importanza in relazione allo studio della transizione vetrosa e delle proprietà dinamiche dei sistemi glass-forming. Le ricerche compiute nel corso del 2008 hanno messo in evidenza interessanti correlazioni fra proprietà dinamiche e struttura molecolare di materiali glass-forming a basso peso molecolare, partendo dai recenti risultati sulle caratteristiche dinamiche dell'etilcicloesano [*J. Phys. Chem. B* **111**, 10999 (2007)] ottenuti dallo stesso gruppo di ricerca mediante misure di attenuazione e velocità di propagazione di onde meccaniche a frequenze ultrasoniche. Lo studio si è basato sul confronto fra risposta

dielettrica e risposta meccanica, tenendo conto delle proprietà termodinamiche del materiale [*J. Chem. Phys.* **125**, 054514 (2006)]. Ai fini di questa ricerca è stato necessario andare oltre le convenzionali tecniche di spettroscopia dielettrica, utilizzando un moderno approccio ad alta risoluzione [*J. Chem. Phys.* **128**, 124505 (2008)]. In questo modo è stato possibile rilevare: (i) un comportamento peculiare della forma del rilassamento primario in funzione della frequenza; (ii) l'esistenza di un processo di rilassamento secondario - nonostante la sua debolissima intensità; (iii) l'esistenza di un crossover dinamico che segna la transizione fra due diversi regimi Vogel-Fulcher-Tammann del rilassamento strutturale. Il confronto fra il rilassamento dielettrico secondario in prossimità della *glass-transition temperature* ed il rilassamento meccanico secondario osservato nel liquido ad alta temperatura suggerisce che lo stesso meccanismo microscopico dia vita ad entrambi i tipi di rilassamento e possa conservare lo stesso comportamento attivato fino allo stato vetroso. Questa ipotesi, supportata dal confronto con le proprietà dinamiche di altri liquidi caratterizzati da una struttura molecolare simile, indica che il rilassamento secondario in questione potrebbe trarre origine da gradi di libertà intramolecolari. I risultati di ulteriori analisi [*Phil. Mag.* **88**, 3961 (2008)] hanno confermato che il processo di rilassamento secondario nell'etilcicloesano ha proprietà distinte da quelle attese per un possibile rilassamento di Johari-Goldstein. Questo ha consentito anche di spiegare la forma anomala del rilassamento primario osservata ad alcune temperature.

(b) Vetri a conduzione ionica. Fra i materiali a conduzione ionica i vetri molibdati d'argento presentano elevata conducibilità ed anche un andamento peculiare della risposta meccanica a frequenze ultrasoniche. E' stato infatti osservato un picco di attenuazione acustica originato dalla sovrapposizione di due contributi rilassamentali distinti; tale aspetto risulta più evidente per alcune specifiche composizioni. Non è però ancora stato chiarito il possibile legame fra queste proprietà e gli aspetti strutturali microscopici. Inoltre anomalie del coefficiente di dilatazione termica in funzione della temperatura sono state precedentemente riscontrate sia in alcuni molibdati cristallini, sia in vetri a conduzione ionica. Su questa base è stata studiata la dilatazione termica dei vetri molibdati in un vasto range di temperatura da 300 K a 5 K con l'obiettivo di porre in luce eventuali anomalie da analizzare a confronto con le rilevanti proprietà della risposta meccanica. Gli esperimenti sono stati svolti utilizzando un metodo ad elevata risoluzione basato su un dilatometro capacitivo. I risultati hanno mostrato che l'espansione termica dei vetri molibdati d'argento è superiore a quella di altri vetri a conduzione ionica e non assume valori negativi nel vasto intervallo che va da temperature criogeniche fino in prossimità della temperatura di transizione vetrosa. Inoltre il meccanismo microscopico responsabile per l'esistenza dei due contributi di rilassamento meccanico sembra non indurre anomalie nell'andamento del coefficiente di dilatazione termica, che indica comunque rilevanti contributi anarmonici. Ulteriori indagini sulla dinamica degli stessi vetri sono state effettuate mediante spettroscopia dielettrica in funzione della frequenza (10mHz – 40 GHz) e della temperatura (450 K – 3 K) e poste a confronto con misure di attenuazione e velocità di propagazione di onde acustiche a frequenze ultrasoniche, oltre che con le informazioni ottenute mediante tecniche di indagine complementari (NMR, EXAFS). E' stata inoltre effettuata una caratterizzazione preliminare di vari materiali amorfi a conduzione ionica, proseguendo la ricerca sulle correlazioni fra proprietà dinamiche e proprietà strutturali, ed è stata avviata l'attività inerente al progetto PRIN menzionato nel testo seguente.

Progetti di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale:

26

CARATTERIZZAZIONE CHIMICO-FISICA E PROFILO TOSSICOLOGICO IN VITRO E IN VIVO DI NANOPARTICELLE DI SILICE E NANOTUBI DI CARBONIO (coordinatore nazionale: prof. L. Manzo). Biennale. Attivato dal settembre 2008.

Pubblicazioni

- 1) "Dynamics of glass-forming liquids. XII. Dielectric study of primary and secondary relaxations in ethylcyclohexane" A. Mandanici, W. Huang, M. Cutroni, R. Richert, *J. Chem. Phys.*, **128**, 124505 (2008)
- 2) "Experimental study of the thermal expansion of the $(AgI)_{0.67}(Ag_2MoO_4)_{0.33}$ ionic glass from 300 K to 5 K" A. Raimondo, A. Mandanici, M. A. Ramos, J. G. Rodrigo, C. Armellini, M. Cutroni, S. Vieira, *Philosophical Magazine*, **88**, 3973-3978 (2008)
- 3) "On the features of the dielectric response of supercooled ethylcyclohexane" A. Mandanici, W. Huang, M. Cutroni, R. Richert, *Philosophical Magazine*, **88**, 3961-3971 (2008)

Partecipazioni e comunicazioni a congressi

1) M. Cutroni, 15th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy (ICIFMS-15) July 20-25, 2008 – Perugia, Italy, **National Advisory Committee, Session Chairperson.**

2) A. Mandanici, W. Huang, M. Cutroni, and R. Richert, "Primary and secondary relaxations in ethylcyclohexane", XI International Workshop on Complex Systems, 17-20 March 2008, Andalo (Trento) – Italy, **oral presentation**

3) A. Raimondo, A. Mandanici, M. Cutroni, M. A. Ramos, J. G. Rodrigo, S. Vieira, C. Armellini, F. Rocca, "Thermal expansion of silver molybdate glasses at low temperatures", XI International Workshop on Complex Systems, 17-20 March 2008, Andalo (Trento) – Italy

4) A. Mandanici, M. Cutroni, "Mechanical relaxations in a molecular glass former at ultrasonic frequencies", 15th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy (ICIFMS-15) July 20-25, 2008 – Perugia, Italy, **oral presentation**

5) A. Mandanici, A. Raimondo, M. Cutroni, M. Federico, F. Rocca, "Mechanical relaxation processes in ionic glasses vs. their frequency dependent electric response", 15th International Conference on Internal Friction and Mechanical Spectroscopy (ICIFMS-15) July 20-25, 2008 – Perugia, Italy

6) A. Mandanici, W. Huang, M. Cutroni, R. Richert, "Properties and nature of the secondary relaxations in ethylcyclohexane and related materials at low and high temperatures", 5th Int. Conf. on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications, 26-29 August, 2008, Lyon

7) A. Mandanici, W. Huang, M. Cutroni, R. Richert, "An apparent exception to the general correlation between the fragility and the shape of the α -relaxation: problem and solution", International Workshop on "Fragility of Viscous Liquids: Cause(s) and Consequences", Carlsberg Academy Copenhagen, October 8-10, 2008

Collaborazioni nazionali e internazionali

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

27

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

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

Le tematiche di ricerca affrontate nell'anno 2008 sono state molteplici e sotto alcuni aspetti anche diverse, per quanto emerge un comune motivo conduttore: l'uso integrato di tecniche di indagine sperimentale, quali la diffusione di luce laser e l'assorbimento infrarosso in trasformata di Fourier, (con esperimenti realizzati nei laboratori del Dipartimento di Fisica dell'Università di Messina e presso il Laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moleculaires di Lille, F), lo scattering di neutroni (con esperimenti realizzati presso l'Institute Laue Langevin di Grenoble, e presso la Facility ISIS del Rutherford Laboratory di Oxford, UK), per la caratterizzazione delle correlazioni spazio-temporali di sistemi materiali. Tali sistemi sono caratterizzati da una *struttura dinamica* parametrizzabile per mezzo di opportune scale spazio-temporali. In questo riferimento i temi di ricerca possono così sintetizzarsi:

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

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

Particolare attenzione è stata rivolta all'analisi delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione, anche sotto il profilo delle ricadute applicative. L'analisi dei meccanismi molecolari coinvolti

nei processi di bioprotezione ha fornito dati di fondamentale importanza sui processi di stabilizzazione. In questo riferimento si inserisce lo studio di sistemi ternari macromolecola/bioprotettore/solvente. Il risultato più generale raggiunto nell'ambito del progetto è stato l'ampliamento delle conoscenze nel campo delle interazioni e delle trasformazioni strutturali di bioprotettori in relazione alla morfologia nanostrutturale di tali sistemi interagenti con "strutture biomolecolari complesse" ed alla integrità e funzionalità cellulare.

L'obiettivo finale è stato la messa a punto, attraverso il contributo sinergico delle competenze interdisciplinari di chimica e fisica e biologia, di nuove metodologie non-empiriche per l'azione di biopreservazione di strutture cellulari basate sull'impiego di bioprotettori naturali.

Mediante misure di scattering di neutroni a piccolo angolo e di spettroscopia a correlazione di fotoni è stata investigata la denaturazione del lisozima in assenza e in presenza di trealosio. Tali tecniche consentono di caratterizzare le proprietà conformazionali dei soluti in soluzione, determinandone le dimensioni e la forma. Le misure sono state realizzate in funzione della temperatura al fine di osservare gli effetti indotti dalla variazione termica sulla proteina. Lo stesso sistema ternario è stato studiato mediante l'impiego dello scattering inelastico e quasi-elastico di neutroni. Le misure, a bassa frequenza, permettono di valutare il rapporto tra il contributo vibrazionale e quello rilassamentale nello spettro totale, consentendo di caratterizzare le rigidità del sistema. Infine la mobilità nanoscopica e la rigidità strutturale di lisozima in matrici di PEO sono state investigate mediante scattering di neutroni a piccolo angolo e scattering elastico e quasi-elastico di neutroni. Le evidenze sperimentali conducono alla conclusione che la mobilità delle proteine in acqua risulta significativamente ridotta quando sono presenti bioprotettori, come si evince dall'andamento della larghezza di banda traslazionale, che risulta avere valori maggiori in assenza dei bioprotettori, così rivelando un rallentamento nella dinamica.

L'aspetto applicativo della ricerca è stato curato in collaborazione con Sanofi-Aventis, Dompè e Labplants. Nell'ambito del gruppo operativo di Fisica applicata, ambientale, sanitaria e dei beni culturali, sono state impiegate alcune metodologie fisiche nei settori ambientale ed energetico. Più specificatamente, tecnologie fisiche sono state impiegate per la valutazione 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.

E' stata avviata un'attività di ricerca in collaborazione con il Policlinico Universitario di Messina, concernente gli effetti dei campi elettromagnetici dovuti ad elettrosmog, con particolare riferimento alle

28

microonde emesse da unità di telefonia mobile su colture cellulari neuronali mantenute alle condizioni fisiologiche dell'organismo umano.

Si è inoltre avviata un'attività di ricerca volta allo studio di processi di conversione termoacustica dell'energia. Sebbene i principi di funzionamento dei sistemi termoacustici siano abbastanza complessi, le implementazioni pratiche degli stessi risultano relativamente semplici. Ciò offre grandi vantaggi sul fronte della realizzabilità economica di questa tecnologia. I sistemi sono privi di parti in movimento, sfruttano strumenti di facile utilizzo e solo materiali ordinari. La caratteristica più interessante è che le diverse applicazioni possono essere sviluppate basandosi sugli stessi principi tecnologici. Ciò significa che i componenti di ogni sistema possono essere prodotti in grande quantità e a basso costo. L'obiettivo di questa attività è quello di valutare la realizzabilità di alcune applicazioni termoacustiche. Questa attività di ricerca è la prima iniziativa finanziata a livello europeo mediante un progetto FP7.

Nel corso dell'anno 2008 sono stati attivati protocolli di collaborazione con la Provincia Regionale di Messina, l'Agriscientifica, la B&T e la SOLCO.

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

- Progetto MAE Italia-Sud Africa 2008-2009 "Studi fisici e biochimici dei meccanismi molecolari di bioprotezione in piante resistenti alla siccità".

- Progetto MIUR – Internazionalizzazione del Sistema Universitario triennio 2004-2006 art. 23 - D.M. 5 agosto 2004, n. 262 intitolato "Studio dell'efficacia stabilizzante e conservante del trealosio su prodotti ad elevato valore aggiunto".

- Progetto FP6-2005-FOOD NoE "MONIQA: Towards the harmonisation of Analytical Methods for Monitoring Quality and Safety in the Food Chain".

- Progetto FP-6 LIFESCIHEALTH - II scrIN-SILICO: "Finding promising drug

candidates against tuberculosis with multidisciplinary protocol based non-conventional search”.

- Progetto FP-7 THATEA “ThermoAcoustic Technology for Energy Applications”.

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

Articoli su riviste internazionali

1 - S. Magazù, G. Zaccai

“Guest editors’ introduction”

Chemical Physics, 345, 131 (2008).

2 - S. E. Pagnotta, M. A. Ricci, F. Bruni, S. McLain, S. Magazù

“Water structure around trehalose”

Chemical Physics, 345, 159 (2008).

3 - E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, U. Leuzzi, F. Migliardo, G. Galli, A. Galtieri, L. Minutoli, F. Squadrito

“Neutron Scattering and HPLC Study on L-Ascorbic Acid and its Degradation”

Chemical Physics, 345, 191 (2008).

4 - B. Varga, F. Migliardo, E. Takacs, B. Vertessy, S. Magazù, C. Mondelli

“Neutron Scattering Studies on dUTPase Complex in Presence of Bioprotectant Systems”

Chemical Physics, 345, 250 (2008).

5 - S. Magazù, F. Migliardo, M. T. F. Telling

“Structural and Dynamical Properties of Water in Sugar Mixtures”

Food Chemistry, 106, 1460 (2008).

6 - D. Barreca, E. Bellocco, G. Laganà, U. Leuzzi, S. Magazù, F. Migliardo, A. Galtieri

“Spectroscopic Investigation of Structure-Breakers and Structure-Makers on Ornithine Carbamoyltransferase”

Food Chemistry, 106, 1438 (2008).

7 - S. Magazù, F. Migliardo

“Study of the Correlation between the Temperature Dependence of Viscosity and Fragility in Glycerol”

Journal of Physics Condensed Matter, 20, 104202 (2008).

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

“Mean Square Displacement from Self-Distribution Function Evaluation by Elastic Incoherent Neutron Scattering”

Journal of Molecular Structure, 882, 140 (2008).

9 - S. Magazù, F. Migliardo, D. Barreca, E. Bellocco, G. Laganà

“Neutron Scattering Study on the Interaction between PolyEthylene Glycol and Lysozyme”

Physica B, 403, 2408 (2008).

10 - B. Varga, F. Migliardo, E. Takacs, B. Vertessy, S. Magazù

“Experimental Study on dUTPase-Inhibitor Candidate and dUTPase/Disaccharide Mixtures by PCS and ENS”

Journal of Molecular Structure, 886, 128 (2008).

29

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

“Mean Square Displacement Evaluation by Elastic Neutron Scattering Self-Distribution Function”

Physical Review E, 77, 061802 (2008).

12 - L. Minutoli, D. Altavilla, A. Bitto, F. Polito, E. Bellocco, G. Laganà, T. Fiumara, S. Magazù, F. Migliardo, F. S. Venuti, F. Squadrito

“Trehalose: A Biophysics Approach to Modulate the Inflammatory Response During Endotoxic Shock”

European Journal of Pharmacology, 589, 272 (2008).

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

“Elastic Incoherent Neutron Scattering on Systems of Biophysical Interest: Mean Square Displacement Evaluation from Self-Distribution Function”

Journal of Physical Chemistry B, 112, 8936 (2008).

14 - S. Magazù, G. Maisano, F. Migliardo, G. Galli, A. Benedetto, D. Morineau, F. Affouard, M. Descamps

“Characterization of Molecular Motions in Biomolecular Systems by Elastic Incoherent Neutron Scattering”

Journal of Chemical Physics, 129, 155103 (2008).

15 - D. Barreca, E. Bellocco, G. Laganà, U. Leuzzi, S. Magazù, F. Migliardo, A. Galtieri

“Influences of Temperature and Threshold Effect of NaCl Concentration on *Alpias vulpinus* OCT”

International Journal of Biological Macromolecules, 43, 474 (2008).

Proceedings e articoli su volume

1 - E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, S. Ficarra, E. Tellone, S. Magazù, F. Migliardo, U. Leuzzi, A. Galtieri

“Ascorbic Acid Antioxidant Activity in Presence of Stabilising Agents”

Proceedings of the 53rd National Meeting of the Italian Society of Biochemistry and Molecular Biology (SIB) and

National Meeting of Chemistry of Biological Systems Italian Chemical Society (SCI- Section CSB), 23-26 Settembre 2008 Riccione (RM), Firenze University Press, ISBN: 978-88-8453-820-8, pp. 4.6.

2 - E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, S. Ficarra, E. Tellone, S. Magazù, F. Migliardo, U. Leuzzi, A. Galtieri
“First Evidence of Potential Antioxidant Activity of Allium Sativum Protein Extract”

Proceedings of the 53rd National Meeting of the Italian Society of Biochemistry and Molecular Biology (SIB) and National Meeting of Chemistry of Biological Systems Italian Chemical Society (SCI- Section CSB), 23-26 Settembre 2008 Riccione (RM), Firenze University Press, ISBN: 978-88-8453-820-8, pp. 4.7.

3 - E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, S. Ficarra, E. Tellone, S. Magazù, F. Migliardo, U. Leuzzi, A. Galtieri
“Influences of Ternary and Quaternary Complexes of Ornithine Transcarbamoylase Stabilization Process”

Proceedings of the 53rd National Meeting of the Italian Society of Biochemistry and Molecular Biology (SIB) and National Meeting of Chemistry of Biological Systems Italian Chemical Society (SCI- Section CSB), 23-26 Settembre 2008 Riccione (RM), Firenze University Press, ISBN: 978-88-8453-820-8, pp. 15.18.

4 - E. Bellocco, D. Barreca, G. Laganà, S. Ficarra, E. Tellone, S. Magazù, F. Migliardo, U. Leuzzi, A. Galtieri
“ESI-MS/MS Determination of Lysozyme Conformation Changes in Presence of Trehalose”

Proceedings of the 53rd National Meeting of the Italian Society of Biochemistry and Molecular Biology (SIB) and National Meeting of Chemistry of Biological Systems Italian Chemical Society (SCI- Section CSB), 23-26 Settembre 2008 Riccione (RM), Firenze University Press, ISBN: 978-88-8453-820-8, pp. 15.20.

5- A. Benedetto, G. Laganà, S. Magazù, G. Maisano, E. Ruello, L. Zito, I. Venza
“Rotation and vibration motions characterization in polymeric systems”

Highlights of Frontiers in Translational Research in the Mediterranean Area, Volume IFTS-Cipe, Edizioni EDAS, Messina, ISBN: 978-88-7820-308-2, 7-13 (2008).

6 - A. Benedetto, L. Denaro, S. Magazù, G. Maisano, C. Sansotta, G. Zappi
“The key relationship between instrumental resolution and relaxation process”

Highlights of Frontiers in Translational Research in the Mediterranean Area, Volume IFTS-Cipe, Edizioni EDAS, Messina, ISBN: 978-88-7820-308-2, 23-30 (2008).

7 - D. Barreca, E. Bellocco, A. Bitto, M. Caristi, G. Galli, D. Lombardo, C. Mondelli, F. Squadrito, F. Zappi
“Study of a protein model for biotechnological applications: the lysozyme”

Highlights of Frontiers in Translational Research in the Mediterranean Area, Edizioni EDAS, Messina, ISBN: 978-88-7820-308-2, 1-6 (2008).

8 - D. Altavilla, G. Galli, T. Fiumara, F. Migliardo, L. Minutoli, F. Polito, F. Squadrito, F. Bevacqua, B. Arena
“Relaxation processes in glass-forming systems”

Highlights of Frontiers in Translational Research in the Mediterranean Area, Edizioni EDAS, Messina, ISBN: 978-88-7820-308-2, 14-22 (2008).

9 - D. Barreca, E. Bellocco, M. A. Gonzales, G. Laganà, R. La Torre, F. Migliardo, N. P. Malomuzh, I. V. Blazhnov, G. Virzi, G. Spoto

“Fragility determination by elastic neutron scattering”

Highlights of Frontiers in Translational Research in the Mediterranean Area, Edizioni EDAS, Messina, ISBN: 978-88-7820-308-2, 40-47 (2008).

Comunicazioni orali a congresso

30

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

“Elastic and Quasi-Elastic Neutron Scattering on Hydrogen-Bonded Systems”

International Conference “Modern Problems in Physics of Liquids 2008”, 23-26 Maggio 2008, Kiev, Ucraina. (lecture)

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

“Mean Square Displacement Evaluation by Elastic Neutron Scattering Self-Distribution Function on Model Systems of Biophysical Interest”

International Conference “Modern Problems in Physics of Liquids 2008”, 23-26 Maggio 2008, Kiev, Ucraina. (comunicazione)

3 - A. Benedetto

“Elastic and QuasiElastic Incoherent Neutron Scattering: an Integrated Experimental, Theoretical and Simulative Approach on Systems of Biophysical Interest of Increasing Complexity”

Congresso Nazionale della Società Italiana di Fisica (SIF), 22-27 Settembre 2008, Genova, Italia. (comunicazione)

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

“Dynamical Properties of Protein-Stabilizer Mixtures by Elastic and Quasi-elastic Neutron Scattering”

International Conference “Biomolecular Dynamics 2008”, 24-26 Settembre 2008, Munich, Germania. (lecture)

5 - F. Migliardo

Conferenza “UNESCO-YIPE Come salvare il pianeta?”, Centro UNESCO, 11 Novembre 2008, Torino, Italia.

(seminario)

6 - F. Migliardo

Conferenza “Orientagiovani”, Confindustria, 14 Novembre 2008, Genova, Italia. (seminario)

Altri prodotti di ricerca

Il Prof. S. Magazù è membro del Committee scientifico “Structure and Dynamics of Liquids and Glasses” della Facility di scattering di neutroni europea Institut Max Von Laue – Paul Langevin (Grenoble, Francia).

E’ membro della Giunta della Società Italiana per la Spettroscopia Neutronica (SISN).

E’ stato membro dello Scientific Committee dell’International Conference “Biomolecular Dynamics 2008”, 24-26 Settembre 2008, Monaco, Germania.

E’ stato membro dello Scientific Committee all’International Conference “Modern Problems in Physics of Liquids 2008”, Kiev, Ucraina.

E’ stato membro del Comitato Scientifico del Congresso Nazionale della Società Italiana di Spettroscopia Neutronica 2008, Sirolo.

Nell’anno 2008 è stato Guest Editor della rivista internazionale Chemical Physics.

E’ stato membro della Commissione giudicatrice per l’esame finale di dottorato all’Università di Rennes (Francia).

E’ presidente del Comitato d’Area Fisica per l’Università di Messina.

All’International Conference “Biomolecular Dynamics 2008”, Monaco, ha tenuto una lecture dal titolo “Mean Square Displacement Evaluation by Elastic Neutron Scattering Self-Distribution Function on Model Systems of Biophysical Interest”.

All’International Conference “Modern Problems in Physics of Liquids 2008”, Kiev, ha tenuto una lecture dal titolo: “Elastic and Quasi-Elastic Neutron Scattering on Hydrogen-Bonded Systems”.

La Dr. Federica Migliardo nell’anno 2008 ha svolto attività di ricerca congiunta tra il Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina e il Laboratoire de Dynamique et Structure des Matériaux Moleculaires dell’Università di Lille (Francia). Presso l’Università francese ha svolto anche attività didattica con esercitazioni in seno al corso “Laboratoire de Physique” per gli studenti del corso di laurea in Fisica, e i seguenti seminari per studenti, dottoranti e post-doc: “Spectroscopic Techniques on Systems of Biophysical Interest” e “Study of Disordered Systems”.

Ha tenuto dal 28 al 30 Giugno 2008 un ciclo di esercitazioni per le Giornate didattiche nazionali di spettroscopia neutronica, organizzate dalla Società Italiana di Spettroscopia Neutronica SISN, che si sono svolte in due fasi: la prima basata su lezioni teoriche ed esercitazioni a Sirolo (An) e la seconda rappresentata da uno stage presso l’Institut Laue Langevin (ILL). Le esercitazioni tenute dalla Dr. F. Migliardo hanno riguardato la teoria dello scattering elastico di neutroni, lo spettrometro IN13 dell’ILL, l’acquisizione, la riduzione e l’analisi dei dati.

Ha ricevuto il premio internazionale UNESCO-L’Oréal Fellowship for Young Women in Life Sciences 2008 indetto da UNESCO-L’Oréal e conferito a 15 ricercatrici nel mondo per ricerche nel settore delle Scienze della Vita (premio ricevuto a Parigi, 5 Marzo 2008).

Ha collaborato con la Fondazione Umberto Veronesi per i progetti “I Giorni della Scienza” (Palermo, 29 Gennaio 2009) e “Le Sfide” ed è stata ospite alla Conferenza “UNESCO-YIPE Come salvare il pianeta?” organizzata dall’UNESCO (Torino, 11 Novembre 2008) e alla Conferenza “Orientagiovani” organizzata da Confindustria (Genova, 14 Novembre 2008).

E’ stata nominata Gold Member per l’EUWIIN (European Union Women Inventors & Innovators Network) ed è Membro dell’Advisory Board per l’*International Journal Advances in Natural and Applied Sciences*.

31

E’ stata protagonista del documentario “Passione Fisica” per “Fuoriclasse” di RAI Educational, di due speciali per “TG Leonardo” della RAI, e ospite a “Otto e mezzo” de La7 nella puntata del 20 Ottobre 2008 dedicata all’Università e alla ricerca italiana. E’ stata intervistata da Lilli Gruber “Streghe – La riscossa delle donne d’Italia”, Rizzoli, 2008.

Il Dr. Antonio Benedetto è stato Esercitatore del corso di Laboratorio IA del Corso di Laurea Triennale in Fisica dell’Università di Messina negli Anni Accademici 2007/2008 e 2008/2009.

Ha ricevuto il Premio “Gilberto Bernardini” 2008 per “l’operosità scientifica” bandito dalla Società Italiana di Fisica (SIF) nel 2008 e destinato ad un giovane dottore in Fisica laureatesi dopo il maggio 2005 in ragione dell’attività di ricerca svolta.

È stato selezionato, unico fisico su 50 giovani talenti italiani, ed ha partecipato al BEST (Bologna Experience for Superior Talents) 2008 (27 Settembre-1 Ottobre 2008, Bologna), organizzato dall’Alma Graduate School e dall’Università di Bologna sul tema “Merito e Regole” sotto l’Alto Patronato del Presidente della Repubblica.

32

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

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

L'attività di ricerca svolta nell'anno 2008 è stata principalmente focalizzata alla comprensione delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi a legame idrogeno, quali l'acqua, sia nello stato di "bulk" che nello stato confinato all'interno di regioni nanoscopiche, e di sistemi macromolecolari costituiti da "complessi di inclusione" formati da principi attivi e sistemi "carriers" con particolari caratteristiche di biodisponibilità, adatti ad applicazioni in campo farmaceutico. Tale studio sperimentale, finalizzato all'investigazione delle interazioni host/guest tra sistema confinato e matrice confinante, è stato realizzato grazie all'ausilio di varie tecniche spettroscopiche complementari.

Infine, la ricerca è stata anche realizzata nel campo dei beni culturali, al fine di caratterizzare reperti ceramici di interesse archeologico per capirne il processo di manifattura e la loro provenienza., grazie all'ausilio di metodologie spettroscopiche non-invasive.

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

I) STRUTTURA E DINAMICA DI SISTEMI COMPLESSI PURI E CONFINATI

L'attività di ricerca in questo campo è stata principalmente finalizzata alla piena comprensione dell'influenza del confinamento nanoscopico sulle proprietà vibrazionali del liquido a legame idrogeno per eccellenza, l'acqua, investigazione per altro già iniziata negli anni precedenti dal presente gruppo di ricerca. A tale scopo, sono state realizzate misure di scattering di luce Raman nella regione fondamentale dello stretching OH ($3800 - 3000 \text{ cm}^{-1}$), in acqua confinata all'interno di pori di diverso diametro (25 \AA e 75 \AA) di un vetro GelSil, in funzione della temperatura, da $+5$ a $+75^\circ\text{C}$, e al variare della natura del substrato, passando da una superficie idrofilica (SiOH) ad una idrofobica (SiOCH₃). In questo modo è stato possibile distinguere il diverso ruolo giocato, sulla dinamica delle differenti strutture dell'acqua, da parte del puro confinamento geometrico e dell'interazione specifica con la superficie. Al fine di dare una interpretazione quantitativa alla variazione della banda OH nel range di temperatura analizzato ed in funzione degli effetti del confinamento, tutti gli spettri Raman sono stati deconvoluti in una somma di sotto-bande, ciascuna rappresentante un particolare arrangement strutturale dell'acqua caratterizzato da un differente tipo di legame idrogeno. È stata inoltre studiata la dinamica diffusionale traslazionale dell'acqua, confinata all'interno di pori di diametro di 200 \AA sempre di un vetro di silicio sol-gel (GelSil), con l'ausilio di misure di risonanza magnetica nucleare (NMR). Lo studio, realizzato in funzione del diverso livello di idratazione della matrice vetrosa, ha evidenziato un aumento del coefficiente di auto-diffusione in corrispondenza di un singolo strato di acqua e per i monolayers inferiori. Una spiegazione di tale evidenza sperimentale è stata data in termini di un processo a 2 fasi caratterizzato da un passaggio veloce di molecole dalla fase liquida alla fase di vapore. Inoltre, è stato misurato il coefficiente di diffusione dell'acqua di superficie contenuta all'interno dei pori riempiti parzialmente. I risultati hanno evidenziato un valore 4 volte inferiore rispetto a quello dell'acqua liquida nei pori idratati al 100%.

In fine, è stato realizzato uno studio mediante spettroscopia ad assorbimento infrarosso in geometria ATR (FTIR-ATR) su complessi di inclusione solidi formati da sistemi drug-carriers quali β -Ciclodestrine (β -CyDs) di diverso tipo con differenti principi attivi. Lo scopo principale di tale studio è stato quello di caratterizzare le interazioni "host-guest" fra tali macrocicli e le molecole ospiti, biologicamente attive e di grande efficacia in campo farmaceutico a motivo delle loro proprietà antiossidanti, anti- infiammatorie e anti-cancerogene.

Le β -CyDs sono oligomeri ciclici di forma toroidale, con all'interno un anello idrofobico e all'esterno due anelli idrofilici. Grazie alla loro struttura inusuale, tali macromolecole agiscono da sistemi ospitanti per una grande varietà di molecole polari e non-. La formazione dei complessi di inclusione fra le ciclodestrine ed i principi attivi che spesso sono poco solubili in acqua, migliora notevolmente la biodisponibilità di questi ultimi.

33

Dal confronto fra i profili spettrali dei complessi di inclusione con le corrispondenti bande della miscela fisiche e delle molecole ospiti pure, sono stati osservati dei notevoli cambiamenti nelle principali bande di assorbimento. Le differenze rivelate sono state interpretate quantitativamente, tramite un procedimento di

best-fit, in termini di variazioni nel grado di associazione del legame idrogeno a seguito del processo di complessazione.

II) APPLICAZIONI DI METODOLOGIE FISICHE NEL CAMPO DEI BENI CULTURALI

L'approccio scientifico nel campo dei beni culturali è diventato oggi indispensabile e ormai anche ben consolidato nella risoluzione delle problematiche archeometriche, legate ai processi di manifattura, alla provenienza e alla giusta collocazione geografico-temporale dei reperti di interesse storico-artistico. Ciò grazie alla possibilità di utilizzare tecniche non-distruttive in questo campo di ricerca nel quale è di assoluta priorità la non invasività dei metodi utilizzati, a motivo della preziosità e spesso unicità dei campioni in studio.

L'attività di ricerca in questo campo, è stata pertanto finalizzata ad una completa caratterizzazione non distruttiva di reperti ceramici antichi decorati in superficie, provenienti da differenti siti archeologici siciliani e risalenti ad un vasto arco cronologico. In particolare, sono stati investigati frammenti ceramici ritrovati in vari siti Siciliani (Milazzo, Messina e Caltagirone) al fine di caratterizzarne la loro manifattura, che in linea di principio permette di ricostruire il loro percorso artistico, tecnologico e commerciale. Le analisi sperimentali sono state realizzate innanzitutto sul corpo ceramico dei reperti (classificati come proto-maioliche) usando tecniche spettroscopiche complementari, disponibili nei laboratori IR e Raman del Dipartimento di Fisica e presso le principali facilities europee, quali ad esempio il Rutherford Appleton Laboratory (RAL, UK). Dalle misure di assorbimento IR (FT-IR) e di diffrazione di neutroni a tempo di volo (ND-TOF) è stata possibile una identificazione quantitativa della composizione mineralogica dei campioni, che ha rivelato differenze composizionali evidenti, che sono state pertanto legate all'esistenza di diverse "fabbriche" di produzione nella stessa area.

Infine, è stato completato uno studio, iniziato precedentemente, su reperti ceramici trovati in un sito archeologico di Caltagirone risalenti al XVIII sec a.C e XVIsec. d.C., per caratterizzare gli agenti pigmentanti del rivestimento decorato. Sono state quindi realizzate misure non distruttive di spettroscopia ad assorbimento di raggi X, utilizzando radiazione di sincrotrone come sorgente (SR-XAS) presso la facility ESRF (Grenoble, F). Tali misure, congiuntamente a investigazioni di microscopia elettronica a scansione e spettrometria a raggi X in dispersione di energia (SEM/EDS), realizzate sul colore blu di tali decorazioni, hanno permesso di identificare nello "smalto" il pigmento utilizzato e la sua "ricetta" di preparazione.

Programma di Ricerca Scientifica di Rilevante Interesse Nazionale, PRIN 2007

Titolo generale del progetto:

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

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

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

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

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

ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI SU RIVISTE INTERNAZIONALI CON REFEREE

1) C. Cannavà, V. Crupi, P. Ficarra, M. Guardo, D. Majolino, R. Stancanelli, V. Venuti.

"Physicochemical characterization of coumestrol/beta-cyclodextrins inclusion complexes by UV-vis and FTIRATR spectroscopies".

Vibrational Spectroscopy 48, 172-178 (2008).

2) D. Barilaro, G. Barone, V. Crupi, D. Majolino, P. Mazzoleni, G. Tigano, V. Venuti.

"FT-IR absorbance spectroscopy to study Sicilian "proto-majolica" pottery".

Vibrational Spectroscopy 48, 269-275 (2008).

34

3) R. Stancanelli, V. Crupi, L. De Luca, P. Ficarra, R. Ficarra, R. Gitto, M. Guardo, N. Iraci, D. Majolino, S. Tommasini, V. Venuti.

"Improvement of water solubility of non-competitive AMPA receptor antagonists by complexation with betacyclodextrin".
Bioorganic & Medical Chemistry 16, 8706-8712 (2008).

- 4) R. Stancanelli, R. Ficarra, C. Cannavà, M. Guardo, M.L. Calabro, P. Ficarra, R. Ottana, R. Maccari, V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti.
 “UV-vis and FTIR-ATR characterization of 9-fluorenon-2-carboxyester/(2-hydroxypropyl)-beta-cyclodextrin inclusion complex”.
 Journal of Pharmaceutical and Biomedical 47, 704-709 (2008).
- 5) D. Barilaro, V. Crupi, S. Interdonato, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, M. F. La Russa, F. Bardelli.
 “Characterization of blue decorated Renaissance pottery fragments from Caltagirone (Sicily, Italy).”
 Applied Physics A-Materials Science & Processing 92 , 91-96 (2008).
- 6) M. F. La Russa, G. Barone, P. Mazzoleni, A. Pezzino, V. Crupi, D. Majolino.
 “Characterisation and differentiation of pigments employed on the facade of "Noto's Valley" monuments (Sicily).”
 Applied Physics A-Materials Science & Processing 92 , 185-190 (2008).
- 7) D. Majolino, C. Corsaro, V. Crupi, V. Venuti, U. Wanderlingh.
 “Water diffusion in nanoporous glass: An NMR study at different hydration levels”
 Journal of Physical Chemistry B 112 , 3927-3930 (2008).
- 8) D. Barilaro, V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, G. Tigano, S. Imberti, W. Kockelmann.
 “A non-invasive analysis of 'proto-majolica' pottery from southern Italy by TOF neutron diffraction”.
 Journal of Physics-Condensed Matter 20, Article Number: 104254 (2008).
- 9) V. Crupi, S. Interdonato, F. Longo, D. Majolino, P. Migliardo, V. Venuti.
 “New insight on the hydrogen bonding structures of nanoconfined water: a Raman study”.
 Journal of Raman Spectroscopy 39, 244-249 (2008).

ELENCO DELLE COMUNICAZIONI A CONFERENZE NAZIONALI E INTERNAZIONALI:

- 1) C. Cannavà, V. Crupi, P. Ficarra, M. Guardo, D. Majolino, A. Mazzaglia, N. Micali, R. Stancanelli, V. Venuti, V. Villari
 “Nanoaggregates of amphiphilic cyclodextrin with genistein: a spectroscopy characterisation by UV-Vis, Dynamic Light Scattering and FTIR-ATR”.
 The 14th International Cyclodextrins Symposium 8-11 Maggio 2008, Kyoto (Giappone).
- 2) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, G. Barone, S. Imberti, W. Kochelmann, J. Teixeira, F. Bardelli.
 “Using large facilities to solve archaeometric problems”.
 XCIV Congresso Nazionale, Società Italiana di Fisica. 22-27 Settembre, 2008, Genova
- 3) V. Crupi, D. Majolino, S. Interdonato, V. Venuti, M. R. Mondello
 “Spectroscopic study of morphological changes in biological tissues: some case reports”.
 International Conference on Free Radicals and Oxidative Stress in Biology and Medicine.
 26-27 Settembre 2008, Messina.

35

6.8 Studio teorico e simulativo di sistemi complessi

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

Ottenere cristalli di proteine di elevata qualità è uno dei problemi principali nella determinazione della struttura e quindi della funzione biologica delle proteine. La selezione di condizioni ottimali di cristallizzazione è limitata dalla conoscenza insufficiente delle loro interazioni all'interno di una soluzione acquosa. E' d'altronde opinione piuttosto diffusa che un ruolo importante nella formazione del cristallo sia giocato da interazioni direzionali, e quindi specifiche. Sebbene vi sia una certa evidenza che tali interazioni abbiano luogo principalmente fra le parti idrofobiche della superficie delle proteine, la loro natura, estensione ed intensità rimangono un motivo di intenso dibattito all'interno della comunità scientifica. Nel corso di quest'anno abbiamo fatto uso di dinamica molecolare di non-equilibrio allo scopo di rivelare i dettagli microscopici di queste interazioni fra contatti idrofobici nel cristallo. Abbiamo altresì messo in luce il ruolo delle diverse specie ioniche presenti in soluzione nel determinare qualitativamente tali interazioni. Infine, abbiamo rilevato che l'entità dello svuotamento di molecole d'acqua nell'interfaccia rappresenta un fenomeno che influenza in maniera quantitativa l'attrazione fra le parti delle due proteine che vanno a costituire l'interfaccia. Lo scopo ultimo di questa linea di ricerca consiste nello sviluppo di modelli semplificati per soluzioni di proteine globulari per studiare fenomeni di nucleazione e transizioni di fase attraverso la simulazione al computer ed approcci teorici.

Altre indagini hanno riguardato il comportamento critico di miscele fluide adsorbite all'interno di materiali porosi disordinati. Tali fluidi possono esibire caratteristiche molto particolari in condizione di criticità. Recentemente, è stato mostrato come le proprietà critiche di miscele colloide-polimero all'interno di matrici

polimeriche siano compatibili con il cosiddetto Random Field Ising Model. D'altro canto, specie molecolari che posseggono modalità di interazione simili e che si accoppiano in modo non preferenziale alle pareti dei materiali porosi posseggono un comportamento critico completamente diverso. Quest'ultimo è stato messo in luce attraverso studi di scala di simulazione Monte Carlo. E' stata anche compiuta un'indagine estesa per verificare l'accuratezza di teorie integrali per modelli di miscele colloide-polimero adsorbite all'interno di matrici polimeriche/colloidali.

Sono inoltre proseguiti gli studi di liquidi molecolari relativamente semplici come metanolo, tetracloruro di carbonio e loro miscele, tramite impiego di Dinamica Molecolare e dell'equazione integrale per fluidi molecolari nota come RISM (Reference Interaction Site Model). Oltre che allo studio specifico di questi sistemi, dei quali sono stati messi in luce le principali caratteristiche strutturali, lo scopo più ampio di questa linea di ricerca è quello di ottimizzare approcci teorico-simulativi in grado di descrivere in modo soddisfacente sistemi formati da particelle su cui siano presenti alcuni (pochi) siti di interazione. Vi sono infatti importanti evidenze che particelle dotate di una tale "valenza limitata" diano luogo a diagrammi di fase caratterizzati da ampie zone di metastabilità e da elevata facilità di accesso a regimi termodinamici in cui hanno luogo fenomeni di gelazione di grande interesse.

Infine è stato studiato un modello semplificato di fullerite di C36 effettuato tramite dinamica molecolare atomistica. Il C36 solido è stato oggetto di notevole interesse per alcune caratteristiche di superconduzione che possono insorgere, in certe condizioni, in questo materiale. Le nostre indagini hanno consentito di chiarire quale tipo di potenziale efficace semplificato può essere adottato per descrivere il solido, e attraverso quale metodologia simulativa si possa giungere alla determinazione del potenziale stesso, in un approccio estensibile anche ad altri fullereni di corrente interesse.

PUBBLICAZIONI DEL 2008

1) Lucentini De Sanctis P.G. e Pellicane G. ,

" Critical Behavior of Symmetrical Fluid Mixtures in Random Pores"
PHYSICAL REVIEW LETTERS, v.101, Art. No. 246101 (2008)

2) Pellicane G. , Smith G. e Sarkisov L.

"Molecular Dynamics Characterization of Protein Crystal Contacts in Aqueous Solutions"
PHYSICAL REVIEW LETTERS, v.101 , Art. No. 248102 (2008)

3) Costa D., Munao G. , Saija F. e Caccamo C.

" Reference interaction site model and molecular dynamics study of
36

structure and thermodynamics of methanol" (vol 127, art no 224501, 2007)
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, v.128 , Art. No. 149901 (2008)

4) Pellicane G., Vink R.L.C. , Caccamo C. e Lowen H.,

" Colloid-polymer mixtures in the presence of quenched disorder: a theoretical and computer simulation study"
JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER, v.20 , Art. No. 115101 (2008)

5) Abramo M.C. e Caccamo C.,

" Atomistic molecular dynamics simulations of model C-36 fullerite"
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, v.128 , Art. No. 074503 (2008)

6) Costa D., Saija F., Munao' G. and Caccamo C.:

"Molecular Dynamics of Methanol and Carbon Tetrachloride Mixtures",
in Proceedings of the Workshop "Grid Open Days at the University of Palermo" (2008)
WEBSITE: <http://indico.ct.infn.it/conferenceDisplay.py?confId=24>.

COMUNICAZIONI A CONFERENZE INTERNAZIONALI

1) COSTA

"Improving the basic Reference Interaction Site Model Theory performances for extensive applications to complex fluids" , Final Arrested Matter European Network Conference, Taormina, Italy
22/26 Novembre 2008 (<http://www.arrestedmatter.net/>).

2) G.PELLICANE

"A numerical assessment of solvated protein interactions underlying hydrophobic patches"
Transnational Access Meeting, Stuttgart, Germany.15-17 December 2008

3) G.PELLICANE

"Molecular dynamics characterization of protein crystal contacts in aqueous solutions"
Final Arrested Matter European Network Conference, Taormina, Italy
22/26 Novembre 2008 (<http://www.arrestedmatter.net/>).

4) G.PELLICANE

“Molecular dynamics characterization of protein crystal contacts in aqueous solutions”
Polyelectrolytes 16-19 June 2008, Coimbra, Portugal.

5) G.PELLICANE

“Coarse graining of complex fluids: two case-studies”

Institute of Theoretical Physics, University of Göttingen, Germany.

16 December 2008

7) G.PELLICANE:

“Modeling of globular protein solutions: the computational challenge”

School of Physics, University of Kwazulu-Natal, Durban, Republic of South Africa.

24 October 2008

8) G.PELLICANE:

“Modeling of globular protein solutions: the computational challenge”

School of Physics, University of Kwazulu-Natal, Pietermaritzburg, Republic of South Africa.

21 October 2008

9) D.COSTA, F.SAIJA, G. MUNAÒ e C. CACCAMO, "Studio teorico e simulativo di miscele di fluidi polari e apolari", Conferenza Nazionale "Italian E-Science" (nell'ambito di COMETA), Napoli, 27/29 Maggio 2008

10) D. COSTA, F. SAIJA, G. MUNAÒ e C. CACCAMO, "Theory and simulation of methanol and carbon tetrachloride mixtures"

VII Liquid Matter Conference, Lund, Sweden 27 June - 1 July 2008

37

6.9 Fisica teorica e computazionale dello stato liquido della materia

Componenti: Paolo V. Giaquinta (Responsabile), Santi Prestipino Giarritta (RC),

Giuseppe Pellicane (Assegnista), Emanuela Giuffrè (dottoranda di ricerca)

Collaboratori esterni: Franz Saija (IPCF-CNR, Messina), A. Marco Saitta (Université Pierre et Marie Curie, Parigi), Alessandro Sergi (University of KwaZulu-Natal, Sud Africa)

Finanziamenti: Programmi di Ricerca di Ateneo (PRA UniME)

TRANSIZIONI DI FASE

Lo studio della transizione liquido-solido è notoriamente difficile a causa dell'esistenza di un “collo di bottiglia” dinamico tra le due fasi che ne prolunga artificiosamente la stabilità ben oltre la soglia di equilibrio. La cosiddetta “metadinamica” di Laio e Parrinello costituisce un modo per ovviare a questo problema e svelare così il profilo del potenziale termodinamico generalizzato che governa il fenomeno del congelamento. A questo scopo, tutto ciò che si richiede è il calcolo della pressione di equilibrio per tutte le densità comprese nella regione di coesistenza fra le fasi. Per un sistema bidimensionale tipico, abbiamo dimostrato che anche una stima rapida, dunque assai imprecisa, della pressione è sufficiente a produrre il risultato corretto che, nel caso specifico, è noto per altra via.

In condizioni termodinamiche estreme di temperatura e pressione, tutte le sostanze, elementari e non, evidenziano un comportamento termodinamico “anomalo” caratterizzato da un ricco polimorfismo in fase solida nonché dall'esistenza di regioni di “fusione rientrante”. Tali anomalie sono ben conosciute per sistemi quali sospensioni colloidali e soluzioni polimeriche, esempi paradigmatici di “materia soffice”. Il semplice potenziale “exp-6”, a lungo impiegato in passato per descrivere il comportamento dei gas rari ad alta pressione, è in effetti in grado di cogliere l'aspetto qualitativo di queste anomalie. Questa scoperta si deve al riconoscimento, mai effettuato prima d'ora, del carattere soffice della repulsione exp-6 a corte distanze, una caratteristica analitica del potenziale che lo rende simile ad altre leggi di interazione efficace comunemente utilizzate per descrivere le proprietà termodinamiche della materia soffice.

MISURA DELL'ORDINE STRUTTURALE DI UN LIQUIDO BASATA SULL'ENTROPIA

A) IL GAS DI TONKS. Sono state riesaminate le proprietà di equilibrio di un modello unidimensionale di particelle rigide alla luce delle predizioni offerte dal criterio di ordinamento strutturale proposto a suo tempo da Giaquinta e Giunta (1992) e basato sul comportamento termodinamico della cosiddetta “entropia residua a molti corpi”.

B) L'ACQUA. Una caratterizzazione sintetica della qualità e del grado di ordine strutturale presente in un liquido molecolare è anche possibile utilizzando opportuni “parametri d'ordine” costruiti in modo da fornire una misura integrata dell'intensità delle correlazioni posizionali e angolari che si instaurano tra coppie o, più

in generale, tra gruppi di molecole. A questo riguardo, è stato proseguito uno studio, basato sulla dinamica molecolare, del modello TIP4P (“Transferable Interaction Potential, 4-Point”) dell’acqua [R. Esposito *et al.*, Physical Review E **73**, 040502 (2006)], con lo scopo di estendere l’analisi già condotta sull’acqua liquida anche alle sue fasi amorfe.

PUBBLICAZIONI

- 1) S. Prestipino and P. V. Giaquinta: *Liquid-solid coexistence via the metadynamics approach*, The Journal of Chemical Physics **128**, 114707 (2008) [ISSN: 00219606]
- 2) G. Malescio, F. Saija, and S. Prestipino: *Anomalous melting behavior under extreme conditions: Hard matter turning “soft”*, The Journal of Chemical Physics **129**, 241101 (2008) [ISSN: 00219606]
- 3) P. V. Giaquinta: *Entropy and ordering of hard rods in one dimension*, Entropy **10**, 248 (2008) [ISSN: 10994300]

COMUNICAZIONI A CONGRESSI

- 1) S. Prestipino and P. V. Giaquinta: *Liquid-solid coexistence via the metadynamics approach*; 7th Liquid Matter Conference (27 June – 1 July 2008, Lund, Sweden)
38
- 2) S. Prestipino, A. Laio, and E. Tosatti: *The surface free energy of a quasi-spherical critical nucleus*; 7th Liquid Matter Conference (27 June – 1 July 2008, Lund, Sweden)
- 3) E. Giuffrè, F. Saija, A. M. Saitta, and P. V. Giaquinta: *A novel structural approach to the study of order in a molecular fluid*; 7th Liquid Matter Conference (27 June – 1 July 2008, Lund, Sweden)
39

6.10 Studio della transizione liquido-solido in condizioni estreme di pressione e temperatura

Responsabile: G.Malescio

Normalmente nella transizione liquido-solido la temperatura di melting cresce in modo monotono con l’aumentare della pressione. In un certo numero di sostanze, tuttavia, tale comportamento si modifica radicalmente ad alte pressioni, e la linea di coesistenza liquido-solido può passare per un massimo seguito da una zona con pendenza dT/dP negativa, per poi riassumere a pressioni ancora più alte, pendenza nuovamente positiva. Nella regione in cui la pendenza è negativa, il sistema va incontro al cosiddetto melting rientrante, ovvero il solido fonde aumentando la pressione a temperatura costante, contrariamente al comportamento usuale. Man mano che le tecniche sperimentali permettono di estendere le misure a pressioni e temperature più alte, si è trovato che un numero sempre maggiore di sostanze mostra un melting con le caratteristiche su delineate.

Per comprendere il fenomeno descritto, abbiamo studiato il comportamento di fase di un sistema di particelle interagenti attraverso il potenziale exp-6, largamente utilizzato nella fisica delle alte pressioni per descrivere le interazioni efficaci tra molecole. La nostra analisi, condotta utilizzando la simulazione numerica, si estende a regimi termodinamici estremi, che in studi precedenti non erano stati presi in considerazione. Ciò ha permesso di evidenziare che il modello exp-6 presenta, contrariamente a quanto supposto sinora, una regione di melting rientrante. Grazie all’analisi condotta, le ragioni di tale comportamento sono state individuate nella relativa sofficietà della parte repulsiva del potenziale, che dà luogo a due differenti scale di lunghezza: quella soffice, più grande, efficace a basse pressioni, e quella dura, più piccola, efficace ad alte pressioni.

Lavori pubblicati

G.Malescio, F.Saija and S.Prestipino
“Anomalous melting behavior under extreme conditions: Hard matter turning soft”
Journal of Chemical Physics **129**, 241101 (2008)

Comunicazioni a congresso

Relazione su invito alla conferenza internazionale "Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids", Taormina, Italy, Novembre 22-26, 2008, organizzata dal Marie-Curie Research and Training Networks (RTN), conferenza conclusiva del progetto EU RTN on Arrested Matter
40

6-11 Fisica dei sistemi Complessi

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

L’attività di ricerca del gruppo comprende in particolare lo studio delle proprietà fisiche dell’acqua e di soluzioni acquose e lo studio dei fenomeni che caratterizzano i liquidi complessi all’arresto dinamico. La ricerca utilizza metodologie sperimentali quali lo Scattering di luce, la Risonanza Magnetica Nucleare e lo Scattering di neutroni avvalendosi della collaborazione dei team di ricerca del Prof. Stanley (Boston Univ.) e

del Prof. Chen (MIT).

Fra i risultati scientifici di maggior rilievo spiccano le recenti scoperte riguardanti le proprietà dell'acqua in regime sottoraffreddato sia in ambiente confinato sia in interazione con molecole di interesse biologico. Il confinamento dell'acqua in nanopori così piccoli da impedire il congelamento, ha consentito il sottoraffreddamento del liquido fino a 160 K. In questo contesto, è stato possibile ricavare il calore specifico configurazionale dell'acqua, confinata in MCM e nella prima shell d'idratazione del lisozima, mediante misure di "chemical shift" della risonanza magnetica nucleare. È stato evidenziato come il comportamento di questa funzione di risposta termodinamica direttamente proporzionale alle fluttuazioni microscopiche di entropia, al diminuire della temperatura non è divergente bensì è caratterizzato da un massimo alla temperatura di circa 240 K. Questo importante risultato sperimentale, insieme a quelli precedentemente ottenuti, si inquadra coerentemente all'interno della teoria che prevede l'esistenza di un secondo punto critico dell'acqua localizzato a circa 200 K e 1600bar, e la cui presenza basta a giustificare le anomalie termodinamiche che caratterizzano le proprietà dell'acqua liquida a bassa temperatura.

Per quanto riguarda gli studi su sistemi biologici, è stata rivolta particolare attenzione al ruolo dell'acqua in interazione con molecole anfifiliche come le proteine. Ad alta temperatura (circa 353K), dove avviene il processo di denaturazione, si è osservato che la popolazione delle molecole d'acqua non coinvolte in legami idrogeno stabili, è dominante. A bassa temperatura, circa 225K, l'acqua d'idratazione mostra un cambiamento nella dinamica, collegato alla cosiddetta transizione vetrosa delle proteine, guidato dal forte accoppiamento fra la proteina e l'acqua idratazione. In particolare, si è mostrato che la temperatura di Widom coincide con il passaggio della proteina (lisozima) dallo stato vetroso a quello di piena attività biologica.

In questo contesto sono state inoltre investigate le proprietà del sistema acqua-metanolo focalizzando l'attenzione sul comportamento termico dei tempi di rilassamento NMR della soluzione evidenziando l'effetto competitivo tra idrofilicità e idrofobicità. I risultati ottenuti sono stati interpretati in termini dell'esistenza di cluster stabili acqua-metanolo alle alte temperature, fino a circa 240 K, e di cluster a singola specie alle più basse temperature come evidenziato dal comportamento termico del tempo di rilassamento "spin-lattice" T_1 dei due gruppi ossidrilici presenti in soluzione.

L'ottimo accordo con i dati ottenuti per l'acqua confinata in nanotubi suggerisce che la dinamica di sistemi acqua-anfifile, attraversando la Widom line, è governata dall'acqua e dalla sua proprietà di formare estesi network di legami idrogeno caratteristici della fase liquida dell'acqua a bassa densità (LDL).

Organizzazione Eventi

Final Conference of the EU RTN Arrested Matter on Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids

Taormina, Hotel Villa Diodoro, 22-26 November, Italy

Co-financed by the FP6 Marie Curie Research and Training Excellence Network MRTN-CT-2003-504712

Pubblicazioni 2008

1) Mallamace F, Corsaro C, Broccio M, Branca C, Gonzalez-Segredo N, Spooren J, Chen SH, Stanley HE (2008). "NMR evidence of a sharp change in a measure of local order in deeply supercooled confined water".

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **105**, 12725-12729 (2008).

2) Corsaro C, Spooren J, Branca C, Leone N, Broccio M, Kim C, Chen SH, Stanley HE, Mallamace F. "Clustering dynamics in water/methanol mixtures: A nuclear magnetic resonance study at $205\text{ K} < T < 295\text{ K}$ "

Journal of Physical Chemistry B, **112**, pp.10449-10454 (2008)

3) Stanley HE, Kumar P, Franzese G, Xu L, Yan Z, Mazza MG, Buldyrev SV, Chen SH, Mallamace, F. "Liquid polyamorphism: Possible relation to the anomalous behaviour of water"

European Physical Journal-Special Topics, **161**, pp.1-17 (2008).

4) Mallamace F, Branca C, Broccio M, Corsaro C, Gonzalez-Segredo N, Spooren J, Stanley HE, Chen SH. "Transport properties of supercooled confined water"

41

European Physical Journal-Special Topics, **161**, pp.19-33 (2008)

5) Chen SH, Mallamace, F, Liu L, Liu DZ, Chu XQ, Zhang Y, Kim C, Faraone A, Mou CY, Fratini E, Baglioni P, Kolesnikov AI, Garcia-Sakai V. "Dynamic crossover phenomenon in confined supercooled water and its relation to the existence of a liquid-liquid critical point in water"

Complex Systems- AIP Conference Proceedings, **982**, pp.39-52 (2008)

6) Stanley H.E., Kumar P, Franzese G, Xu L.M., Yan Z.Y., Mazza M.G., Chen, S.-H., Mallamace F., Buldyrev S.V. "Liquid polyamorphism: Some unsolved puzzles of water in bulk, nanoconfined, and biological environments"

Complex Systems- AIP Conference Proceedings, **982**, pp: 251-271 (2008)

7) Lagi M., Chu XQ, Kim CS, Mallamace F, Baglioni P, Chen SH "The low-temperature dynamic crossover phenomenon in protein hydration water: Simulations vs experiments"
Journal of Physical Chemistry B, **112**, pp:1571-1575 (2008)

Comunicazioni a congressi

1) Mallamace F. "Experimental studies of dynamical properties of protein hydration water, from the supercooled regime to the denaturation temperature". **Invited speaker**

XXI SITGES Conference on Statistical Mechanics- Statistical Mechanics of Molecular Biophysics

Sitges, Barcelona, Spain 2-6 June 2008

2) Mallamace F. **Invited speaker**

Gordon Research Conferences -Water & Aqueous Solutions Holderness School NH , USA, July 27 August 1, 2008

3) Spooren J. "A Nuclear Magnetic Resonance Study on the dynamics of water-methanol mixtures". Faraday Discussions 141: Water – From Interfaces to the Bulk. Heriot-Watt University, Edinburgh, UK 27-29 August.

4) Corsaro C. "Clustering dynamics in water/methanol mixtures: a Nuclear Magnetic Resonance study at $205\text{ K} < T < 295\text{ K}$ ".

Final Conference of the EU RTN Arrested Matter on Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids. Taormina, Hotel Villa Diodoro, Italy, 22-26 November.

5) Spooren J. "Study on the dynamics of water-methanol mixtures; the influence of water on a small amphiphile".

Final Conference of the EU RTN Arrested Matter on Dynamical Arrest of Soft Matter and Colloids. Taormina, Hotel Villa Diodoro, Italy, 22-26 November.

42

6.12 Studio di membrane biomimetiche

Componenti: Ulderico Wanderlingh

Lo studio delle membrane biologiche e la loro interazione con le biomolecole è un campo di ricerca fortemente interdisciplinare che conduce a ricadute nel campo medico farmacologico e in quello della biosensoristica.

Le biomembrane inoltre sono un esempio di sistemi colloidali e mostrano particolari proprietà fisiche che sono essenziali per la funzionalità biologica. Nonostante la loro complessità, lo studio delle membrane ci permette di esplorare le relazioni tra modulazioni biochimiche e proprietà fisiche dei biomateriali e la loro implicazione nel controllo delle funzioni biologiche.

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

In questa indagine abbiamo studiato membrane biomimetiche realizzate con DMPC

(Dimiristoilfosfatidilcolina) e con DPPC (Dipalmitoilfosfatidilcolina) in condizione di full-hydration, depositate su supporti di muscovite. Con questa tecnica si realizzano multistrati formati dalla sovrapposizione di parecchi doppi strati lipidici, in una struttura altamente ordinata. Nel caso delle membrane di DMPC, sono stati anche studiati campioni con diverse concentrazioni di gramicidina, una particolare sequenza di peptidi in grado di formare dei fori attraverso le membrane stesse.

Tali sistemi sono stati investigati tramite tecniche di Risonanza Magnetica Nucleare, la cui applicazione al nucleo ^1H , presente nella testa polare dei fosfolipidi, ne permette di determinarne l'allineamento. Inoltre tramite tecniche di Pulse Gradient Spin Echo NMR sull'atomo ^1H è stata misurata la mobilità su scale mesoscopiche sia dei lipidi che dell'acqua di idratazione in funzione della temperatura, fornendo nuovi risultati in particolare nella fase gel del sistema.

Tramite misure di Spettroscopia Neutronica, realizzate presso l'Istituto Laue Langevin (FR), si sono invece studiate le dinamiche di tali sistemi (DMPC e DPPC) su scala molecolare osservando differenti dinamiche in funzione della temperatura e della lunghezza della catena fosfolipidica, in particolare nelle due fasi principali di tali sistemi: gel e liquido-cristallina. Sono anche state investigate le modifiche prodotte dalla presenza della gramicidina nella dinamica dei fosfolipidi.

L'utilizzo della Diffrazione di Raggi X, presso il Centro Interdipartimentale di Diffrettomertria, ha permesso di verificare l'allineamento e la distanza interplanare dei diversi campioni di biomembrane preparati.

All'indagine strumentale è stata affiancata anche la tecnica della Dinamica Molecolare, simulando un sistema di 64 molecole lipidiche e 1645 molecole d'acqua, utilizzando il programma DL Poly fatto girare

nella versione parallela su 8 processori sul cluster Enadi del Centro di Calcolo di Messina. Dai risultati di simulazione sono stati ricavati parametri quali la distribuzione degli atomi nella direzione perpendicolare alla membrana ed i coefficienti di diffusione dei lipidi, che sono in buon accordo con i risultati sperimentali.

Elenco dei lavori pubblicati

- 1) D'Angelo, G., Wanderlingh, U., Nibali, V. C., Crupi, C., Corsaro, C. and Di Marco, G. (2008) 'Physical study of dynamics in fully hydrated phospholipid bilayers', *Philosophical Magazine*, 88:33,4033-4046
- 2) U. Wanderlingh; G. D'Angelo.; V.C. Nibali; M. Gonzalez; C. Crupi; C. Mondelli; (2008). 'Influence of gramicidin on the dynamics of dmpe studied by incoherent elastic neutron scattering'. *Journal of Physics: Cond. Matter*. Vol. 20 pp 104214-104420
- 3) Telling M.; Corsaro C.; Wanderlingh U.; Middendorf H.; (2008). 'Low temperature dynamics of hydrated peptides'. *Chemical Physics*. Vol. 345 pp. 245-249
- 4) Majolino D.; Corsaro C; Crupi V; Venuti V; Wanderlingh U; (2008). 'Water diffusion in nanoporous glass: an nmr study at different hydration levels.' *Journal of Physical Chemistry. B, Cond, Matter*, .vol. 112 pp. 3927-3930

43

Partecipazioni a congresso

- 1) U. Wanderlingh; G. D'Angelo; V.C. Nibali; C. Crupi; (2008). 'Influence of a pore forming peptide on dynamics of a phospholipid membrane.' 11th int. workshop on disordered systems Andalo (trento), Italy 17-20 march 2008
- 2) Wanderlingh U.; Middendorf H.; Albergamo F; Hayward R; (2008). Neutron scattering from model peptides and small oligopeptides at high energy transfers. Poster at International Symposium on pulsed neutron and muon science IPS 2008 (5-8 march), Mito & Tokai, Materials & Life Sciences facility, J-Parc, Tokai (Japan).

44

6.13 Studi strutturali in sistemi micellari e in soluzioni di proteine

Componenti: Prof. Rita Giordano

Tramite tecniche di Scattering di neutroni a Piccolo Angolo si sono studiati sistemi ternari ionici (acqua/olio/surfactante) in funzione della quantità di acqua, e del tipo di ione metallico della testa polare del surfactante, utilizzando ioni monovalenti, bivalenti e trivalenti.

Si è potuto così determinare la transizione della forma della microemulsione da strutture sferiche a strutture allungate in funzione del contenuto di acqua. Su questi sistemi si è anche studiato l'effetto dell'aggiunta di alcoli, che a seconda della lunghezza della catena si partiziona all'interno o nell'interfaccia della micella, influenzandone sia la forma che la struttura.

Vengono inoltre studiati sempre con Scattering di Neutroni a Piccolo Angolo sistemi binari non ionici, in funzione delle caratteristiche della testa idrofilica e della coda idrofobica. Gli esperimenti sono stati effettuati a Saclay (Francia) e Julich (Germania).

I risultati sono in corso di pubblicazione.

Si è continuato lo studio sulla struttura di soluzioni di proteine tramite scattering di neutroni a piccolo angolo.

Le macromolecole in soluzione acquosa sono sistemi molto complessi a causa del potenziale di interazione che deriva dalla distribuzione della carica e dalle proprietà del solvente. Sono stati proposti vari modelli; i potenziali più usati sono stati lo Yukawa e il DLVO, ma questi sono insufficienti per la comprensione delle interazioni; per approfondire lo studio sono state fatte misure su soluzioni di lisozima e pepsina in funzione del pH e temperatura.

Gli esperimenti sono stati effettuati a Saclay (Francia). I risultati sono in corso di pubblicazione.

Studi strutturali su materiali lapidei.

R. Giordano ha intrapreso una nuova linea di ricerca nell'ambito delle Scienze della Terra e Beni culturali. I risultati sono in corso di pubblicazione.

Collaborazioni scientifiche

Giovanni D'Arrigo (Università di Roma)

Ezio Bruno e Ulderico Wanderlingh (Università di Messina)

Cecilia Gambi e Piero Baglioni (Università di Firenze)

6.14 Meccanica statistica *ab initio* in sistemi metallici

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

Si è sviluppato un nuovo metodo che consente la simulazione quantistica da ‘principi primi’ di leghe metalliche. Il metodo realizza un corso graining del funzionale della densità elettronica (DF) di Hohenberg e Kohn attraverso l’ approssimazione GCPA (Generalized Coherent Potential Approximation) e, per mezzo dell’ implementazione di una simulazione MonteCarlo (MC) basata sull’ Hamiltoniana configurazionale efficace CEF (Charge Excess Functional), permette la determinazione delle proprietà strutturali, atomiche ed elettroniche, come pure la distribuzione statistica degli eccessi di carica in un ensemble (T, c) , a temperatura e concentrazione molare fissate. Sono stati realizzati e testati tutti i relativi codici che costituiscono la suite di calcolo sotto denominata DF-GCPA-CEF.

Si è inoltre formalmente dimostrata l’ equivalenza tra l’ approssimazione GCPA alla teoria DF e l’ Hamiltoniana CEF, che fornisce la base teorica dei calcoli DF-GCPA-CEF, e sono state studiate le prestazioni della GCPA-DFT per leghe metalliche ordinate, verificando che la teoria approssimata è in grado di calcolare, per le configurazioni rilevanti, differenze di energie compatibili con quelle ottenute attraverso calcoli DF standard.

La teoria e i codici DF-GCPA-CEF sono stati applicati allo studio delle transizioni ordine-disordine in due sistemi, CuZn e Ni₃V, che presentano due differenti reticoli. I risultati ottenuti per le proprietà termodinamiche e strutturali, atomiche ed elettroniche, e il soddisfacente accordo con l’ esperimento per quanto riguarda le temperature di transizione hanno consentito di verificare l’ accuratezza e l’ affidabilità dello schema teorico e dei codici di calcolo. Un successo particolarmente significativo è la capacità dimostrata dalla teoria di distinguere correttamente la natura del primo ordine della transizione ordinedisordine in Ni₃V dalla transizione del secondo ordine in CuZn. Va inoltre rilevato che lo studio svolto su CuZn e Ni₃V ha richiesto l’ impiego di supercelle contenenti circa 2000 atomi: si è trattato del primo calcolo completamente quantistico eseguito per sistemi metallici così estesi.

La soddisfacente qualità dei risultati ottenuti ci ha spinto a progettare lo studio della cinetica delle transizioni ordine-disordine e di segregazione in sistemi metallici, impiegando il paradigma del MonteCarlo Dinamico (DMC). Tale studio è estremamente impegnativo perché richiede l’ impiego di celle di simulazione contenenti 10⁶ atomi, tali sono infatti le dimensioni minime che possano consentire l’ osservazione della nucleazione di germi eterofase. Purtroppo l’ algoritmo DF-GCPA-CEF già implementato impiega un tempo di calcolo che scala come N^3 , essendo N il numero di atomi, e, se distribuito su un cluster parallelo, richiederebbe comunicazioni non locali massicce, a causa della natura a lungo raggio dell’ interazione coulombiana tra gli eccessi di carica presenti in ciascun sito atomico. Allo scopo di rendere trattabile il problema, si è ottenuta una Hamiltoniana efficace diversa, rinormalizzando formalmente le interazioni CEF in uno schema perturbativo che, di fatto, sostituisce le interazioni coulombiane pure con interazioni schermate. Tale riformulazione della teoria DF-GCPA-CEF dovrebbe consentire la realizzazione di un algoritmo parallelo che scala come N , tanto per il tempo di calcolo quanto per le comunicazioni tra i processori. Sono in corso la valutazione dell’ approssimazione così introdotta e lo sviluppo del relativo codice parallelo.

Pubblicazioni

1. Ezio Bruno, Francesco Mammano, Antonino Fiorino and Emanuela V. Morabito, “Coarse-grained density functional theories for metallic alloys: Generalized coherent-potential approximations and charge-excess functional theory”, Phys. Rev. B **77**,155108 (2008)
2. Ezio Bruno, Francesco Mammano, Beniamino Ginatempo, “Coarse grained Density Functional theory of orderdisorder phase transitions in metallic alloys”, submitted for publication. Preprint: arXiv:0810.5367v1 [cond-mat.mtrlsci].

6.15 Informatica: M²AG: Milan-Messina Action Group

Componenti: A. Provetti, G. Fiumara, M. Marchi, N. Spada, Giovanni Pirrotta

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

- i) teoria, implementazione e applicazione dell’ Answer set programmino e, in quest’ ultimo ambito,
- ii) esplorazione e verifica dell’ applicabilità di sistemi guidati da politiche dichiarative nel contesto del

trattamento di dati e di decisioni relative al Web.

Nell'anno 2008 la nostra attività di ricerca ha consistito, al 50% con l'esecuzione del progetto di ricerca cofinanziato

PRIN 2006: "DLP* in ambiti applicativi innovativi".

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

Pubblicazioni

Giacomo Fiumara, Massimo Marchi, Alessandro Provetti

Adaptive Web Data Extraction Policies

Atti dell'Accademia Peloritana dei Pericolanti

Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali

Vol. LXXXVI, C1A0802011

Maria Amalfi, Alessandro Provetti:

"From Extended Entity-Relationship schemata to illustrative instances"

Logic in Databases (LID'08) workshop

Giovanni Pirrotta e Alessandro Provetti,

"A Java Wrapper for Answer Set Programming Inferential Engines"

CILC08, 23-esimo Convegno Italiano di Logica Computazionale

Eventuali altri prodotti di ricerca

Il sito Web <http://mag.dsi.unime.it/jaspwrapper/> sviluppato da G. Pirrotta,

47

6.16 Informatica: Applicazioni di sistemi informatici in ambito medico

Componenti: Andrea Nucita, Giovanni Pizzimenti

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

- la gestione dei dati attraverso un sistema GIS per la logistica e l'epidemiologia

- la gestione e l'utilizzo dei protocolli clinici automatizzati per la gestione dei pazienti e delle cure

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

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

Pubblicazioni

1) Andrea Nucita, Giuseppe M Bernava, Michelangelo Bartolo, Fabio Di Pane Masi, Pietro Giglio, Marco Peroni, Giovanni Pizzimenti and Leonardo Palombi. *A global approach to the management of EMR (Electronic Medical Records) of patients with HIV/AIDS in Sub-Saharan Africa: the experience of DREAM Software*. BMC Medical Informatics and Decision Making. *Sottomesso*

48

6.17 Studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali

Componenti: Giorgio Grasso

L'attività scientifica è stata focalizzata sullo studio di tecniche per l'elaborazione delle immagini digitali, sia in ambito medicale che industriale. Sono state investigate metodologie per il riconoscimento automatico e l'interpretazione autonoma di contenuti digitali. In particolare sono stati applicati metodi Neuronal per la classificazione *supervised* di immagini dell'encefalo acquisite in ambito clinico sperimentale, che hanno consentito la valutazione quantitativa di parametri utili a fini di *follow-up* diagnostico di pazienti patologici. E' stata sviluppata una nuova tecnica di riconoscimento della materia organica tramite analisi a raggi X,

finalizzata alla classificazione delle componenti organiche presenti nel packaging alimentare, basata sulla risposta non lineare di radio-opacità al variare dell'energia di radiazione, nonché sull'organizzazione delle risposte multi spettrali in spazi parametrici multidimensionali. Nel contesto della biomeccanica si è proceduto all'analisi modellistica ed alla successiva valutazione sperimentale delle caratteristiche di risposta meccanica del tessuto osseo, in collaborazione con la Facoltà di Ingegneria dell'Università di Catania.

Pubblicazioni

Celona A., Lanzafame P., Bonanno L., Marino S., Spanò B., Grasso G., Puccio L., Bramanti P. (2009). *Artificial Neural Network (ANN) Morphological Classification by Euclidean Distance Histograms for Prognostic Evaluation of Magnetic Resonance Imaging in Multiple Sclerosis*. Communications to SIMAI Congress. ISSN 1827-9015, Vol. 3 (2009).

Comunicazioni

Grasso G. (2008). *Neural Network Classification of Multi-energy X-ray imaging*. International Conference in memory of Prof. A.M. Anile: New trends in Industrial and Applied Mathematics. Casa della Cultura Villa Citelli. Catania (Invited Speaker).