



UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI MESSINA

Dip.to di Scienze Matematiche e Informatiche, Scienze Fisiche e Scienze della Terra (MIFT)

Viale Ferdinando Stagno D'Alcontres 31 - 98166 Messina



RAPPORTO DI ATTIVITA'

2015

INDICE

INTRODUZIONE	4
1. Struttura del Dipartimento	4
2. Organi	5
3. Personale	6
1. Personale Docente	6
2. Personale Tecnico-Amministrativo	10
3. Personale a tempo determinato	11
4. Dottorato in Fisica	12
4.1 Tesi di Dottorato	12
4.2 Tesi di Laurea	13
5. Attività di Ricerca	19
5.1 Gruppo di ricerca in Metodi Variazionali per Problemi Nonlineari	21
5.2 Gruppo di ricerca in Metodi Variazionali e Applicazioni	22
5.3 Gruppo di ricerca in Combinatoria	24
5.4 Gruppo di ricerca in Topologia Generale	26

5.5 Gruppo di ricerca in Topologia Generale, Topologia per Fibre e Topologia Digitale	27
5.6 Gruppo di ricerca in Analisi Numerica	28
5.7 Gruppo di ricerca in Informatica	30
5.8 Gruppo di ricerca in Informatica INF/01	32
5.9 Gruppo di ricerca in Algebre con identità Funzionali e Metodi Combinatori	33
5.10 Gruppo di ricerca in Algebra Commutativa e Combinatoria	35
5.11 Gruppo di ricerca in Metodi e Modelli in Fisica Matematica	38
5.12 Gruppo di ricerca in Problemi di Evoluzione in Meccanica dei Continui	39
5.13 Gruppo di ricerca in Teoria e Simulazione di Sistemi Atomici e Molecolari	43
5.14 Gruppo di ricerca in Micro e Nanosistemi	48
5.15 Gruppo di ricerca in Biofisica, Fisica Sperimentale dei Sistemi Complessi e Fisica Applicata ai Beni Culturali e Ambientali	56
5.16 Gruppo di ricerca in Studio di Reazioni Nucleari ad Energie Intermedie e delle Applicazioni degli Acceleratori di Elettroni di Bassa Energia	68
5.17 Gruppo di ricerca in Fisica dell'Interazione Radiazione-Materia, Plasmi generati da Impulsi Laser e Applicazioni	73

5.18 Gruppo di ricerca in Fisica dei Sistemi Complessi	79
5.19 Gruppo di ricerca in Geofisica Generale e Applicazioni Territoriali	80
5.20 Gruppo di ricerca in Geologia Ambientale e Territoriale	82
5.21 Gruppo di ricerca Caratterizzazione Strutturale di Sistemi Zeolitici e Studi Archeometrici di Beni Culturali	83
5.22 Gruppo di ricerca in Petrologia e Geochimica	88
5.23 Gruppo di ricerca in Mineralogia	89
5.24 Gruppo di ricerca in Vulcanologia, Petrologia, Geochimica ed Applicazioni in Campo Archeometrico	90
5.25 Gruppo di ricerca in Paleontologia	91
5.26 Gruppo di ricerca in Gruppo di Ricerca in “Chimica Industriale e Catalisi”	92

INTRODUZIONE

Il dipartimento di Scienze Matematiche, Scienze Fisiche e Scienze della Terra (MIFT) nasce con Decreto Rettorale n. 1477 del 6 Luglio 2015 su proposta di numerosi docenti provenienti principalmente dal dipartimento di Fisica e Scienze della Terra e dal dipartimento di Matematica ed Informatica non più attivi.

In data 23 Novembre 2015 il consiglio di dipartimento ha approvato il regolamento che è stato definitivamente emanato con D.R. n.435 del 24 Febbraio 2016.

Il Dipartimento è costituito da tutti i professori di ruolo, dai ricercatori di ruolo e a tempo determinato, e dalle unità di personale tecnico e amministrativo, i cui nomi sono indicati nell'elenco del "Personale Docenti" e "Personale Tecnico-Amministrativo" di seguito riportati.

E' sede del Dottorato di Ricerca in Fisica e partecipa al Dottorato di Ricerca in Matematica (sedi consorziate Università di Catania, Messina e Palermo). Inoltre è anche la sede elettiva in cui dottorandi di altri dottorati di ricerca dell'Università di Messina seguono corsi di dottorato e svolgono la loro attività di ricerca. Il Dipartimento è inoltre sede di un'unità di ricerca dell'Istituto Nazionale di Alta Matematica "F. Severi" (INdAM) ed è un Test Center AICA per le certificazioni informatiche.

I docenti e i ricercatori del Dipartimento svolgono la propria attività di ricerca principalmente nei settori dell'Analisi Matematica, dell'Analisi Numerica, della Fisica Matematica, delle Strutture algebriche e geometriche, della Fisica della Materia, della Fisica Nucleare, della Fisica applicata ai Beni culturali ed ambientali, della Geofisica degli studi mineralogici petrografici e geologici, dell'Informatica. Alcuni docenti del Dipartimento ricoprono ruoli di responsabilità gestionale e scientifica negli enti di ricerca e presso laboratori nazionali e internazionali. La produzione scientifica dei docenti del Dipartimento nell'anno 2015 è documentata da 169 lavori su riviste internazionali con referee (catalogo IRIS), da numerosi lavori su riviste nazionali e atti di convegno e numerose comunicazioni anche su invito a congressi internazionali.

I professori di ruolo del Dipartimento e i ricercatori svolgono la loro attività didattica oltre che presso i corsi di Laurea Triennale e Magistrale incardinati presso il MIFT anche in numerosi altri corsi di laurea dell'Ateneo. Inoltre i docenti del dipartimento partecipano alle attività didattiche del Percorso di Eccellenza nelle Scienze (PES) organizzato dalla SIR - Facoltà di Scienze e Tecnologie e al Piano Nazionale Lauree Scientifiche. Il MIFT organizza e coordina anche il test OFA di verifica delle conoscenze matematiche di base per gli studenti che intendono iscriversi ai corsi di laurea attivati presso la SIR - Facoltà di Scienze e Tecnologie. Nell'anno 2015 sono state portate a termine, presso il MIFT, con relatori afferenti al dipartimento, 119 tesi di Laurea e di Laurea Magistrale e 6 tesi di Dottorato di Ricerca .

Fanno parte del dipartimento, l'Osservatorio Geofisico e il Centro di Criogenia. Il primo svolge attività di ricerca e didattica avanzata (master di II livello) sui temi della protezione e mitigazione dei rischi sismici. Il Centro di Criogenia da alcuni anni produce elio liquido e azoto liquido e rifornisce di liquidi criogenici non solo il nostro dipartimento ma anche numerosi dipartimenti dell'Ateneo oltre a svolgere una attività conto terzi per utenti esterni.

Il dipartimento nel 2015 ha svolto al suo interno numerosi progetti di ricerca di cui è stato anche sede amministrativa. Nell'ambito degli aspetti formativi di alcuni dei progetti di ricerca finanziati sono state bandite circa 23 borse di studio e assegni di ricerca. Inoltre ha siglato numerosi contratti e convenzioni per attività di ricerca conto terzi nei vari ambiti di competenza in esso presenti.

Il Dipartimento con alcuni suoi docenti è coinvolto nell'allestimento e mantenimento delle sezioni di Matematica, Fisica e di Scienze della Terra all'interno del Museo della Scienza della ex Facoltà, mediante l'esposizione di strumentazione antica ed esperienze divulgative preparate da docenti del nostro Dipartimento.

1) **STRUTTURA DEL DIPARTIMENTO**

Il Dipartimento di Scienze Matematiche e Informatiche, Scienze Fisiche e di Scienze della Terra dell'Università di Messina è attualmente articolato nelle seguenti strutture interne:

- Sezione di Matematica ed Informatica;
- Sezione di Fisica;
- Sezione di Scienze della Terra

I Corsi di studio e di dottorato incardinati nel Dipartimento di Scienze Matematiche e Informatiche, Scienze Fisiche e di Scienze della Terra sono i seguenti:

- Corso di Laurea in Analisi e Gestione dei Rischi Naturali ed Antropici;
- Corso di Laurea in Fisica;
- Corso di Laurea in Informatica;
- Corso di Laurea in Matematica;
- Corso di Laurea Magistrale in Fisica;
- Corso di Laurea Magistrale in Matematica;
- Corso di Laurea Magistrale in Tutela e Gestione del Territorio e dell'Ambiente Naturale
- Dottorato di Ricerca in Fisica; -
- Corso di Tirocinio Formativo Attivo, Classe A038 Fisica; -
- Corso di Tirocinio Formativo Attivo, Classe A042 -- Informatica; -
- Corso di Tirocinio Formativo Attivo, Classe A047 -- Matematica; -
- Corso di Tirocinio Formativo Attivo, Classe A048 -- Matematica applicata; -
- Corso di Tirocinio Formativo Attivo, Classe A049 -- Matematica e Fisica; -
- Corso di Tirocinio Formativo Attivo, Classe A059 -- Matematiche e scienze nella scuola secondaria di I grado.

I Corsi di studio e di dottorato, non incardinati nel Dipartimento, ma svolti in concorrenza con altre strutture sono i seguenti:

- Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria e Scienze Informatiche (Engineering and Computer Science) incardinato presso il Dipartimento di Ingegneria dell'Università di Messina;
- Dottorato di Ricerca in Matematica e Informatica (in convenzione tra le Università di Catania, Messina e Palermo).

Inoltre anche il Dipartimento di Scienze chimiche, biologiche, farmaceutiche ed ambientali si avvale dei laboratori didattici e delle strutture del Dipartimento MIFT.

2 ORGANI DEL DIPARTIMENTO

Consiglio di Dipartimento

Direttore: Prof. Neri Fortunato

Segretario Amministrativo: Dr. Antonino Denaro

Componenti: tutti i professori di ruolo, i ricercatori di ruolo e a tempo determinato afferenti al Dipartimento, di cui all'elenco "*Personale Docente*" di seguito riportato; il Segretario Amministrativo; i rappresentanti degli studenti: Caminiti Gaetano Filippo, Caramazza Barbara, Donato MariaChiara, Gallo Giovanni, Itri Bruno Maria, Lachioiu Catalina Dorina, Romeo Vittorio, Ruggeri Dario, Sapuppo Orazio, Violante Antonino, Zito Placido; i rappresentanti degli assegnisti: Vasi Sebastiano e Ceccio Giovanni; i rappresentanti del personale tecnico e amministrativo: Calvo Massimo e Reggio Maria Teresa

Giunta

Direttore: Prof. Neri Fortunato

Segretario Amministrativo: Sig. Antonino Denaro

Componenti: Conforto Fiammetta, D'Angelo Giovanna, Distefano Salvatore, Fazio Enza, Fiumara Giacomo, Giaquinta Paolo Vittorio, Manganaro Natale, Majolino Domenico.

Responsabili di Sezione: Palumbo Annunziata (Matematica e Informatica), Carini Giuseppe (Fisica) Randazzo Giovanni (Scienze della Terra)

Commissione Paritetica (delibera CdD del 26/10/2015)

componente studenti: Vittorio Romeo e Orazio Sapuppo (Informatica); Belinda Calanni e Bruno Maria Itri – (Fisica); Antonino Violante e Placido Zito (Agrina); Barbagallo, Caminiti, Caramazza, Donato, Gallo, Lachioiu, Ruggeri

componente docenti: Prof. Giovanni Anello, Prof.ssa Carmela Currò, Prof. Salvatore Distefano, Prof. Salvatore Magazù, Dott.ssa Barbara Orecchio, Prof. Salvatore Savasta, Dott. Alessandro Tripodo, Dott. Giovanni Finocchio, Prof.ssa Giovanna D'Angelo, Prof.ssa Nunzia Palumbo, Prof. Lorenzo Torrisi, Prof.ssa Cinzia Marra, Dott. Giacomo Fiumara, Dott. Giancarlo Consolo

Delegati per le attività di orientamento e per i servizi agli studenti (prot. 10217 del 18/2/2016)

1. Prof.ssa Rosalba Saija
2. Prof.ssa Rosanna Utano

3 PERSONALE

3.1 Personale docente

Nome Cognome	Telefono	Mail	Qualifica
Maria Concetta Abramo	090 6765050	mariaconcetta.abramo@unime.it	Professori Associati
Santa Agreste	090 6765233	santa.agreste@unime.it	Ricercatori Legge 230/05 - t.det.
Giovanni Anello	090 6765079	giovanni.anello@unime.it	Professori Associati
Elvira Barbera	090 3977322	elvira.barbera@unime.it	Professori Associati
Maddalena Bonanzinga	090 6765071	maddalena.bonanzinga@unime.it	Professori Associati
Caterina Branca	090 6765017	caterina.branca@unime.it	Professori Associati
Carlo Caccamo	090 6765044	carlo.caccamo@unime.it	Professori Ordinari
Domenico Caccamo	090 6765091	domenico.caccamo@unime.it	Ricercatori Universitari
Filippo Cammaroto	090	filippo.cammaroto@unime.it	Professori Ordinari

Filippo Cammaroto	090 6765070	filippodomenico.cammaroto@unime.it	Ricercatori Universitari
Giuseppe Carini	090 6765014	pino.carini@unime.it	Professori Ordinari
Luisa Carini	090 6765074	luisa.carini@unime.it	Professori Associati
Gabriele Centi	090 6765609	gabriele.centi@unime.it	Professori Ordinari
Vincenzo Ciancio	090 6765061	vincenzo.ciancio@unime.it	Professori Ordinari
Fiammetta Conforto	090 6765063	fiammetta.conforto@unime.it	Professori Associati
Giancarlo Consolo	090 3977556	giancarlo.consolo@unime.it	Ricercatori Universitari
Dino Costa	090 6765040	dino.costa@unime.it	Ricercatori Universitari
Marilena Crupi	090 6765298	marilena.crupi@unime.it	Professori Associati
Vincenza Crupi	090 6765004	vincenza.crupi@unime.it	Professori Ordinari
Paolo Cubiotti	090 6765078	paolo.cubiotti@unime.it	Professori Ordinari
Carmela Curro'	090 6765060	carmela.curro@unime.it	Professori Ordinari
Maria Cutroni	090 6765013	maria.cutroni@unime.it	Professori Ordinari
Giovanna D'angelo	090 6765449	giovanna.dangelo@unime.it	Professori Associati
Vincenzo De Filippis	090 3977325	enzo.defilippis@unime.it	Professori Associati
Mario De Salvo	090 6765083	mario.desalvo@unime.it	Professori Associati
Salvatore Distefano	090 3977335	salvatore.distefano@unime.it	Professori Associati
Maria Bernadette Donato	090 6765464	mariabernadette.donato@unime.it	Ricercatori Universitari
Enza Fazio	090 6765394	enza.fazio@unime.it	Ricercatori Universitari
Riccardo Fazio	090 6765064	riccardo.fazio@unime.it	Professori Associati
Mauro Federico	090 6765015	mauro.federico@unime.it	Ricercatori Universitari
William Fenton	090 6765652	william.fenton@unime.it	Ricercatori Universitari
Giovanni Finocchio	090 3977555	giovanni.finocchio@unime.it	Ricercatori Legge 240/10 - t.det.

Giacomo Fiumara	090 6765049	giacomo.fiumara@unime.it	Ricercatori Universitari
Domenico Fusco	090 6765054	domenico.fusco@unime.it	Professori Ordinari
Sebastiano Giambo'	090 6765062	sebastiano.giambo@unime.it	Professori Ordinari
Paolo Vittorio Giaquinta	090 6765006	paolo.giaquinta@unime.it	Professori Ordinari
Maurizio Imbesi	090 6765072	maurizio.imbesi@unime.it	Ricercatori Universitari
Alessandra Jannelli	090 6765114	alessandra.jannelli@unime.it	Ricercatori Universitari
Paola Lanzafame	090 6765609	paola.lanzafame@unime.it	Ricercatori Universitari
Giovanni Lo Faro	090 6765077	giovanni.lofaro@unime.it	Professori Ordinari
Salvatore Magazu'	090 6765025	salvatore.magazu@unime.it	Professori Ordinari
Giacomo Maisano	090 6765030	giacomo.maisano@unime.it	Professori Ordinari
Domenico Majolino	090 6765237	domenico.majolino@unime.it	Professori Ordinari
Gianpietro Malescio	090 6765230	gianpietro.malescio@unime.it	Professori Associati
Francesco Mallamace	090 6765016	francesco.mallamace@unime.it	Professori Ordinari
Andrea Mandanici	090 6765011	andrea.mandanici@unime.it	Professori Associati
Natale Manganaro	090 6765053	natale.manganaro@unime.it	Professori Ordinari
Antonella Cinzia Marra	090 6765095	antonella.marra@unime.it	Professori Associati
Antonia Messina	090 6765093	antonia.messina@unime.it	Professori Ordinari
Angela Maria Mezza- salma	090 6765090	angelamaria.mezzasalma@unime.it	Professori Associati
Monica Milasi	090 6765464	monica.milasi@unime.it	Ricercatori Legge 240/10 - t.det.
Fortunato Neri	090 6765030	fortunato.neri@unime.it	Professori Ordinari
Giancarlo Neri	090 6765486	giancarlo.neri@unime.it	Professori Ordinari
Giorgio Nordo	090 6765073	giorgio.nordo@unime.it	Ricercatori Universitari
Francesco Oliveri	090 6765065	francesco.oliveri@unime.it	Professori Ordinari

Barbara Orecchio	090 6765102	barbara.orecchio@unime.it	Ricercatori Universitari
Annunziata Palumbo	090 6765108	annunziata.palumbo@unime.it	Professori Ordinari
Salvatore Patane'	090 3977373	salvatore.patane@unime.it	Professori Associati
Santi Prestipino Giarritta	090 6765041	santi.prestipino@unime.it	Professori Associati
Alessandro Provetti	090 6765505	alessandro.provetti@unime.it	Professori Associati
Luigia Puccio	090 6765056	luigia.puccio@unime.it	Professori Associati
Simona Quartieri	090 6765096	simona.quartieri@unime.it	Professori Ordinari
Giovanni Randazzo	090 6765103	giovanni.randazzo@unime.it	Professori Associati
Maria Rosaria Renna	090 6765490	mariarosaria.renna@unime.it	Ricercatori Universitari
Gaetana Restuccia	090	gaetana.restuccia@unime.it	Professori Ordinari
Liliana Restuccia	090 6765468	liliana.restuccia@unime.it	Professori Ordinari
Patrizia Rogolino	090 6765058	patrizia.rogolino@unime.it	Ricercatori Universitari
Domenica Sacca'	090 6765089	sacca.domenica@unime.it	Ricercatori Universitari
Rosalba Saija	090 6765647	rosalba.saija@unime.it	Professori Associati
Salvatore Savasta	090 6765393	salvatore.savasta@unime.it	Professori Associati
Alessandro Sergi	090 6765485	alessandro.sergi@unime.it	Professori Associati
Letteria Silipigni	090 6765143	letteria.silipigni@unime.it	Professori Associati
Maria Speciale	090 6765057	mariapaola.speciale@unime.it	Ricercatori Universitari
Antonio Teramo	090 360101	antonio.teramo@unime.it	Professori Associati
Domenica Termini	090 360101	domenica.termini@unime.it	Professori Associati
Lorenzo Torrisi	090 6765052	lorenzo.torrisi@unime.it	Professori Ordinari
Antonio Trifiro'	090 6765027	antonio.trifiro@unime.it	Professori Associati
Marina Trimarchi	090 6765451	marina.trimarchi@unime.it	Ricercatori Legge 230/05 - t.det.

Antoinette Tripodi	090 6765081	antoinette.tripodi@unime.it	Ricercatori Universitari
Alessandro Tripodo	090 6765105	alessandro.tripodo@unime.it	Ricercatori Universitari
Adriana Trozzi	090 6765653	adriana.trozzi@unime.it	Ricercatori Universitari
Rosanna Utano	090 6765075	rosanna.utano@unime.it	Professori Associati
Valentina Venuti	090 6765299	valentina.venuti@unime.it	Professori Associati
Carmela Vitanza	090 6765464	carmela.vitanza@unime.it	Professori Ordinari
Ulderico Wanderlingh	090 6765023	ulderico.wanderlingh@unime.it	Professori Associati

3.2 Personale tecnico-amministrativo

NOME COGNOME	TELEFONO	MAIL	QUALIFICA
Ettore Arena	090 6565085	ettore.arena@unime.it	Categoria C - Area amministrativa
Rosanna Arena	090 6765031	rosanna.arena@unime.it	Personale della Unilav S.C.p.A.
Santa Bardetta	090 6765098	santa.bardetta@unime.it	Personale della Unilav S.C.p.A.
Francesco Barreca	090 6765391	francesco.barreca@unime.it	Categoria D - Area tecnica, tecnico- scientifica ed elaborazione dati
Domenico Bonanno	090 6765037	domenico.bonanno@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico- scientifica ed elaborazione dati
Massimo Rosario Calvo	090 6765033	massimo.calvo@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico- scientifica ed elaborazione dati
Daniele Cosio	090 6765037	daniele.cosio@unime.it	Categoria B - Area servizi generali e tecnici
Emanuele Cosio	090 6765456	emanuele.cosio@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico- scientifica ed elaborazione dati
Marisa Currao	090 6765066	marisa.currao@unime.it	Categoria C - Area amministrativa
Domenica De Domenico	090 360101	domenica.dedomenico@unime.it	Categoria D - Area tecnica, tecnico- scientifica ed elaborazione dati
Antonino Denaro	090 6765010	antonino.denaro@unime.it	Categoria D - Area amministrativa- gestionale

Paola Donato	090 6765448	paola.donato@unime.it	Categoria D - Area amministrativa-gestionale
Angelo Genovese	090 3977498	angelo.genovese@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati
Caterina Giacoppo	090 6765035	caterina.giacoppo@unime.it	Personale della Unilav S.C.p.A.
Maria Giordano	090 360101	giordano.maria@unime.it	Personale della Unilav S.C.p.A.
Monica Interdonato	090 6765010	monica.interdonato@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati
Antonino Marino	090 360101	antonino.marino@unime.it	Categoria EP - Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati
Marco Noli Maio	090 6765235	marco.nolimaio@unime.it	Categoria C - Area amministrativa
Maria Teresa Reggio	389 9887348	mariateresa.reggio@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati
Rosario Sgarlata	090 6765098	rosario.sgarlata@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati
Alessandra Spano'	090 6765098	alessandra.spano@unime.it	Categoria C - Area amministrativa
Cynthia Wanderlingh	090 6765467	cwanderlingh@unime.it	Categoria C - Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati

3.3 Elenco del Personale a tempo determinato

NOME COGNOME	TELEFONO	MAIL	QUALIFICA
Maria Teresa Caccamo	090 6765019	mariateresa.caccamo@unime.it	Borsisti esenti
Antonio Crupi	090 6765103	antonio.crupi@unime.it	Borsisti esenti
Stefania Lanza	090 6765095	stefania.lanza@unime.it	Titolari di assegno di ricerca
Emanuele Morgana	090 393654	emanuele.morgana@unime.it	Borsisti esenti
Salvatore Spadaro	090 6765391	spadaro.salvatore@unime.it	Borsisti esenti
Cristina Totaro	090 6765102	cristina.totaro@unime.it	Titolari di assegno di ricerca
Claudia Triolo	090 3977385	claudia.triolo@unime.it	Borsisti esenti

4. DOTTORATI DI RICERCA

DOTTORATI DI RICERCA IN FISICA *Coordinatore Prof. Lorenzo Torrisi.*

Il primo Dottorato di Ricerca in Fisica è stato istituito nell'anno acc. 1982/83 ed è continuato ininterrottamente fino all'anno solare 2015. Nell'anno 2015 si sono tenuti i cicli XXVIII , XXIX e XXX.

Dottorandi:

Ciclo XXVIII

Khouzami Khaoula, Lucia Quattrocchi, Claudia Triolo.

Ciclo XXIX

Anastasi Antonio, Coppolino Salvina, De Luca Saverio, Foti Antonino, Muoio Annamaria, Norella Sebastianella.

Ciclo XXX

Cannavo' Antonino, Ceccio Giovanni, Macri' Vincenzo, Ruello Giovanna, Sanzaro Salvatore, Vasi Sebastiano.

DOTTORATO DI RICERCA IN TECNOLOGIE AVANZATE PER L'OPTOELETTRONICA E LA FOTONICA E MODELLIZZAZIONE ELETTRROMAGNETICA

Dottorandi:

Ciclo XXVIII

Cassone Giuseppe, Garziano Luigi.

4.1 TESI DI DOTTORATO discusse nel 2015

Dottorato di Ricerca in Fisica

<i>DOTTORANDO</i>	<i>TITOLO TESI DI DOTTORATO</i>	<i>TUTOR</i>
dr. Khouzami Khaoula (menzione di <i>Doctor Europaeus</i>)	Development and characterization of Chitosan based hydrogels as novel materials for improved physical stability of pharmaceuticals	Prof.ssa G. D'Angelo
dr. Quattrocchi Lucia	Study of two- and multi-particle correlations in Heavy Ion Collisions	Prof. A. Trifiro', Dr.ssa M. Trimarchi, Dr. G. Verde
dr. Triolo Claudia	Nano-optics for Lithography and Plasmonic Applications	Prof. S. Patane'
dr. Scolaro Cristina (XXVII ciclo)	Study, Physical Characterization and Wetting Ability Aspects of Biomaterials	Prof. L. Torrisi

Dottorato di Ricerca in Tecnologie Avanzate per l'Optoelettronica e la Fotonica e Modellizzazione Elettromagnetica

DOTTORANDO	TITOLO TESI DI DOTTORATO	TUTOR
dr. Cassone Giuseppe (titolo conseguito in co-tutela con l'Università "Pierre et Marie Curie", Sorbonne, Parigi, Francia e menzione di Doctor Europaeus).	Ab initio molecular dynamics simulations of H-bonded systems under electric field	Prof. S. Savasta Prof. M. Saitta (Sorbonne)
dr. Garziano Luigi	Ultrastrong coupling regime in hybrid quantum systems	Prof. S. Savasta

4.2 TESI di LAUREA

ANALISI E GESTIONE DEI RISCHI NATURALI ED ANTROPICI (AGRINA) TRIENNALE

Studente	Relatore	Titolo
BELLA FRANCESCA	SOMMA ROBERTA	ANALISI SEDIMENTOLOGICA E MINERALOGICA DI SABBIE DEL DESERTO AFRICANO
CARBONE CONCETTA	TRIPODO ALESSANDRO	IL VULCANISMO SEDIMENTARIO DELLE MACALUBE DI ARAGONA (Provincia di Agrigento): ASPETTI GEOLOGICI E GEOCHIMICI
CARONE LAURA	RENNA MARIA ROSARIA	STUDIO PETROGRAFICO DELLE PERIDOTITI AD ANFIBOLO DEL COMPLESSO DI FINERO (ALPI OCCIDENTALI, ITALIA)
DERACO MATTEO	RENNA MARIA ROSARIA	SVILUPPO DI UN OCEANIC CORE COMPLEX NELLA LITOSFERA OCEANICA ATTUALE E FOSSILE
DIANO ANGELO	RANDAZZO GIOVANNI	INTERVENTI URGENTI PER IL RIASETTO TERRITORIALE DELLE AREE A RISCHIO IDROGEOLOGICO RELATIVI ALLA FIUMARA S. AGATA
GENTILE MIRKO	RANDAZZO GIOVANNI	MONITORAGGIO SEDIMENTOLOGICO GEOMORFOLOGICO DELL'AREA COMPRESA TRA IL TORRENTE GALLO FINO AL TERRITORIO COMUNALE DI VENETICO
GROSSO SALVATORE	RANDAZZO GIOVANNI	GESTIONE INTEGRATA DELLE ZONE COSTIERE. APPROCCI UTILIZZATI NEL PORT PHILLIP BAY MELBOURNE E KINGSTON CITY COUNCIL
PELLE ANGELO	RANDAZZO GIOVANNI	ANALISI DEI POTENZIALI RISCHI GEO-IDROLOGICI CONNESSI CON IL CORSO DEL TORRENTE TERMINI-PATRI' NEL TERRITORIO COMUNALE DI RODI' MILICI (ME)
PETRUZZELLI DOMENICO	RANDAZZO GIOVANNI	"CARATTERIZZAZIONE DI INCLUSIONI SOLIDE IN OLIVINE MEDIANTE MICRORAMAN SU VULCANITI PROVENIENTI DALL'AREA DI REYANLI-KIRIKHAN, PROVINCIA DI HATAY, TURCHIA SE"
ROBERT MARTINA	NERI GIANCARLO	CONTRIBUTI ALLO STUDIO DELLA PERICOLOSITA' SISMICA LOCALE
SPARTA DEBORAH	TRIPODO ALESSANDRO	L'EVOLUZIONE GEO-VULCANOLOGICA DI MONTE PILATO (LIPARI, ISOLE EOLIE) ALLA LUCE DI NUOVI DATI STRATIGRAFICI, PETROLOGICI E GEOCHIMICI
VOLPINTESTA FRANCESCO	RENNA MARIA ROSARIA	SISTEMATICA DEGLI ELEMENTI DELLE TERRE RARE (REE) NEI FOSSILI DI VERTEBRATI
ZANGHI FRANCESCO	TRIPODO ALESSANDRO	"I PIGMENTI DEI VASI POLICROMI DEL PITTORE DI LIPARI: ANALISI NON DISTRUTTIVE IN FLUORESCENZA A RAGGI X"

FISICA TRIENNALE

Studente	Relatore	Titolo
COLNAGHI MARCO	CARINI GIUSEPPE	ORIGINE ASTROFISICA DEI RAGGI COSMICI AD ALTA ENERGIA
CONIGLIELLO CARMELO	WANDERLINGH ULDERICO	LE NANOTECNOLOGIE OGGI: SVILUPPO SCIENTIFICO E CAMPI D'APPLICAZIONE
CURRO' FRANCESCO	MAJOLINO DOMENICO	METODOLOGIE FISICHE PER I BENI CULTURALI
GRECO CRISTINA	MEZZASALMA ANGELA MARIA	MICROSCOPIA A SCANSIONE: APPLICAZIONI IN CAMPO FORENSE
LIA PAOLO	SAIJA ROSALBA	IL RUOLO DELLE POLVERI INTERSTELLARI NELL' EVOLUZIONE DELL'UNIVERSO
MIRAGLIOTTA FABIO TONI	SAVASTA SALVATORE	EFFETTO CASIMIR DINAMICO IN CIRCUITI SUPERCONDUTTORI
RESTUCCIA NANCY	TORRISI LORENZO	UTILIZZO DI NANOPARTICELLE DI Au IN RADIOTERAPIA E DIAGNOSTICA
SETTINERI ALESSIO	VENUTI VALENTINA	COMPLESSI DI INCLUSIONE PER IL DRUG DELIVERY: STABILITA' E COMPORTAMENTO TERMICO
VALENTI FRANCESCO	GIAQUINTA PAOLO VITTORIO	L'ACQUA E LE SUE ANOMALIE
VERDUCI ROSARIA	CRUPI VINCENZA	SPETTROSCOPIE VIBRAZIONALI A CONFRONTO

FISICA MAGISTRALE

Studente	Relatore	Titolo
BERENATO SALVATORE	TORRISI LORENZO	STUDIO ED IMPLEMENTAZIONE DI STRUMENTI DI CALCOLO PER DOSIMETRIA INTERNA A LIVELLO DI VOXEL NELLE TERAPIE DI MEDICINA NUCLEARE
BOTTARI CETTINA	CRUPI VINCENZA	MECCANISMI MOLECOLARI E COMPORTAMENTO TERMICO DI HYDROGELS A BASE DI CICLODESTRINA
BRANCATELLI GIUSEPPE	VENUTI VALENTINA	LA VILLA DEI QUINTILI: ANALISI MULTITECNICA PER L'IDENTIFICAZIONE DEGLI AGENTI PIGMENTANTI
COLANGIULO ANTONIO GIANNICOLA	MANDAGLIO GIUSEPPE	RICERCA DEL POSSIBILE CONTRIBUTO DELLA FORZA OSCURA NEL PROCESSO $e+e- \rightarrow \pi^+\pi^-$ gamma a KLOE
CORTESE ERIKA	SAVASTA SALVATORE	ECCITONI IN CATENE MOLECOLARI IN REGIME DI INTERAZIONE FORTE
CREAZZO FABRIZIO	GIAQUINTA PAOLO VITTORIO	AB-INITIO MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF NaCl WATER SOLUTIONS UNDER AN EXTERNAL ELECTRIC FIELD
FLERES IRENE	MEZZASALMA ANGELA MARIA	COMPOSTI COLLOIDALI DI NANOPARTICELLE METALLICHE PER APPLICAZIONI SENSORISTICHE
IGNAZZITTO VALERIA	MAJOLINO DOMENICO	SCATTERING DI NEUTRONI A PICCOLO ANGOLO (SANS) PER LO STUDIO DEL DEGRADO DI REPERTI DI INTERESSE STORICO ARTISTICO
MUSOTTO ROSA	MAGAZU' SALVATORE	DISCRIMINAZIONE TRA VARIANMTI COFFEA ARABICA E ROBUSTA MEDIANTE TECNICHE SPETTROSCOPICHE E GENETICHE COMPLEMENTARI
NUNNARI GIUSEPPE GABRIELE	MAGAZU' SALVATORE	MULTI-SCATTERING EVALUATION IN QENS SPECTRA BY USING SIMULATION PACKAGES

PALATELLA AMEDEO	COSTA DINO	COMPETIZIONE TRA SEPARAZIONE LIQUIDO-VAPORE E FORMAZIONE DI AGGREGATI IN FLUIDI CON INTERAZIONI MICROSCOPICHE ANTAGONISTE
RUBUANO CONCETTA KETTY	CACCAMO DOMENICO	SVILUPPI SULLA PREVISIONE DELLE FORTI REPLICHE E NORMALIZZAZIONI SPAZIO-TEMPORALI
SANTORO MARCO	NERI FORTUNATO	NANODISPOSITIVI POLIMERICI FUNZIONALIZZATI CON NANOPARTICELLE A BASE METALLICA PRODOTTE PER ABLAZIONE LASER
SOFIA ADRIANO	COSTA DINO	PROPRIETA' STRUTTURALI IN SISTEMI DI PARTICELLE CON INTERAZIONI MICROSCOPICHE ANTAGONISTE

GESTIONE DEI RISCHI TERRITORIALI (GERIT) TRIENNALE

Studente	Relatore	Titolo
ANTONUCCIO GIUSEPPE	LUPO ANTONIETTA	LA LOGISTICA NELLA PIANIFICAZIONE E GESTIONE DELL'EMERGENZA. ANALISI DELLA IV CIRCOSCRIZIONE DEL COMUNE DI MESSINA (AREA BOCCETTA).
DE SALVADORE ALBERTO FORTUNATO	BANDINI VALERIA	COMPORTAMENTO MECCANICO DI UNA SABBIA DI ORIGINE VULCANICA MEDIANTE PROVE TRIASSIALI A PERCORSO DI CARICO CONTROLLATO
FEMINO' DOMENICO	CREA FRANCESCO	VARIANTE TECNICA METODOLOGICA INERENTE LE OPERE NECESSARIE PER LA MESSA IN SICUREZZA OPERATIVA (MISOP) E PER LA MESSA IN SICUREZZA DI EMERGENZA (MISE) DELL'AREA PERIMETRATA DEL SITO PRODUTTIVO SARLUX S.r.L. NEL COMUNE DI SARROCH
GALTIERI FRANCESCO	RANDAZZO GIOVANNI	STUDIO E ANALISI DEL DISSESTO IDROGEOLOGICO DI MONFORTE S. GIORGIO: CON LA PROGETTAZIONE DI OPERE DI INGEGNERIA NATURALISTICA.
MARCIANÒ GIUSEPPE	TRIPODO ALESSANDRO	LE VULCANITI DI FEUDO PIETRANERA (S. STEFANO QUISQUINA, AGRIGENTO, SICILIA): ANALISI GEOCHIMICHE PRELIMINARI E DI MICROSCOPIA ELETTRONICA (S.E.M.)
MATINA GIUSEPPE	RANDAZZO GIOVANNI	SISTEMI INFORMATIVI GEOGRAFICI APPLICATI ALL'UNITA' FISIOGRAFICA CAPO TAORMINA - CAPO SCHISO'
MICALI CARLO	LUPO ANTONIETTA	VALUTAZIONE DEL LIVELLO DI PREPARAZIONE E CONOSCENZA DELLA POPOLAZIONE SUL RISCHIO SISMICO. PROPOSTE DI POTENZIAMENTO DELL'INFORMAZIONE PREVENTIVA.
RIZITANO GIACOMO	RANDAZZO GIOVANNI	ANALISI DELLA RESILIENZA COSTIERA SU TRE AREE SICILIANE
RUSSO LAURA	TRIPODO ALESSANDRO	ANALISI PRELIMINARI SULLE VELOCITA' DI LANCIO DI EJECTA ALLO STROMBOLI MEDIANTE SIMULAZIONI NUMERICHE E VALUTAZIONI SUL RISCHIO VULCANICO INDOTTO PER I CENTRI ABITATI DELL'ISOLA

INFORMATICA TRIENNALE

Studente	Relatore	Titolo
BARCA LUCIANO MARIA FRANCESCO	NUCITA ANDREA	LA CARTELLA CLINICA ELETTRONICA
BARRESI DANILO	VILLARI MASSIMO	VIRTUALIZZAZIONE CONTAINER-BASED: TECNOLOGIA LINUX-CONTAINER (LXC)
BERTONE LOREDANA	FIUMARA GIACOMO	ALGORITMI DI COMMUNITY DETECTION
BUCOLO CARMELO	NUCITA ANDREA	ARCHITETTURA DISTRIBUITA PER LA GESTIONE DEI DATI CLINICI
CALENDI ROSY	FIUMARA GIACOMO	IL MOVIMENTO NoSQL: GRAPH DATABASES

CAMMAROTO ANDREA	PULIAFITO ANTONIO	TECNICHE DI DATA EXCHANGE CON L'USO DI WEB SERVICES
CARCIONE ANTONINO	FIUMARA GIACOMO	PROGETTAZIONE E REALIZZAZIONE DI UN QUADRIROTORE CON CONTROLLER ARDUINO
CASCIO MARCO	FIUMARA GIACOMO	ALGORITMI DI RISOLUZIONE DI ANAGRAMMI
CEFALI ANDREA	PULIAFITO ANTONIO	PANORAMICA SU PROTOCOLLI E SOLUZIONI DI SICUREZZA PER L'IoT
CHIRICOSTA LUIGI	GIORGIANI UMBERTO	L'UOMO, I ROBOT E L'INTELLIGENZA ARTIFICIALE
CRISICELLI STEFANO	PUCCIO LUIGIA	PAS PAINTING AUTHENTICATION SYSTEM ALGORITMO DI ANALISI SULL'AUTENTICITA' DEI DIPINTI
DE DOMENICO ROBERTO	FIUMARA GIACOMO	PROGETTAZIONE E SVILUPPO DI UN SOCIAL JUKEBOX
FARAONE ANDREA	DE MEO PASQUALE	MYNEWS: APP ANDROID PER IL RANKING DINAMICO E PERSONALIZZATO DELLE NOTIZIE
FOTI GIACOMO	FIUMARA GIACOMO	PERSONAGGI PUBBLICI SU FACEBOOK: DATA MINING E ANALISI DELLE INTERAZIONI SOCIALI
FUGAZZOTTO ANTONINO	MANDANICI ANDREA	ELABORAZIONE DI DATI SPERIMENTALI CON SOFTWARE ROOT PER LO STUDIO DELLA COSTANTE DIELETTICA DEI MATERIALI
FURFARI MARIACRISTINA	FIUMARA GIACOMO	QUANTUM COMPUTING E ALGORITMO DI FATTORIZZAZIONE DI SHOR
GIORDANO GIUSEPPE	FIUMARA GIACOMO	CONTROLLO E TRACCIAMENTO DEI RIFIUTI SOLIDI URBANI
GIUNTA MARCO	AGRESTE SANTA	ANALISI DEL LINGUAGGIO NATURALE IN PYTHON TEXT PROCESSING CON NLTK
GRECO VINCENZO	MAGAUDDA DORA PAOLA	APPLICAZIONE ANDROID: FAVORITE TWITTER SEARCHES
LENTINI RAFFAELE LUCA	PUCCIO LUIGIA	PROGETTAZIONE E SVILUPPO PER IL CATALOGO BIBLIOGRAFICO WEB DI ATENEIO
LETO ENRICO MARIA	VILLARI MASSIMO	TEORIA ED APPLICAZIONE DEI BIG DATA: DATA MINING, HADOOP E MONGODB
LO PRESTI ALESSANDRO	PULIAFITO ANTONIO	PROTOCOLLI PER L'IoT E COMPARAZIONE QUALITATIVA
MARESCA MICHELE	FIUMARA GIACOMO	PROGETTAZIONE E SVILUPPO DI UN SOCIAL GAME
MARRAMAO SIMONE	DE MEO PASQUALE	ANALISI COMPARATIVA DEI WEB FRAMEWORKS RAILS E DJANGO NELLA REALIZZAZIONE DI UNA WEB APPLICATION
MESSINA DANILO	VILLARI MASSIMO	GESTIONE DEGLI ACCESSI PER MEZZO DI TECNOLOGIA NFC
MICARI DOMENICO	OLIVERI FRANCESCO	TEORIA DEI GIOCHI E APPLICAZIONE AL TRESSETTE
MIGLIORE ANDREA	PUCCIO LUIGIA	REALIZZAZIONE DI BENCHMARK PER LO SVILUPPO DI APP IBRIDE E WEB APPLICATION E ANALISI DELLE PERFORMANCE
MILONE CARMEN	PUCCIO LUIGIA	LE POLITICHE OPEN ACCESS NELLE UNIVERSITA' ITALIANE: IMPLEMENTAZIONE DI UN REQUEST BUTTON PER FACILITARE L'ACCESSO AI RISULTATI DELLA RICERCA SCIENTIFICA.
PICCIONE GIUSEPPE	DE MEO PASQUALE	ANALISI COMPARATIVA DEGLI ALGORITMI DI CLUSTERING NEI GRAFI DIRETTI
POLITANO RAFFAELE	NUCITA ANDREA	CMS: INTERNET ALLA PORTATA DI TUTTI
PRUITI CIARELLO GRAZIANO	MOREY NATHALIE	REALIZZAZIONE DI UN PROTOTIPO DI WEBGIS CON STRUMENTI E DATI OPEN SOURCE PER IL COMUNE DI TORTORICI
PUGLISI DONATO	MOREY NATHALIE	I DATABASE SPAZIALI

RAGALMUTO COFFA ROBERTA	OLIVERI FRANCESCO	M-COMMERCE: UN'OPPORTUNITA' PER RIPARTIRE
RUGGERI MICHELE	FIUMARA GIACOMO	RUBY: UN LINGUAGGIO DI PROGRAMMAZIONE GENERAL-PURPOSE, DINAMICO E OBJECT-ORIENTED
RUGGERI ENRICO	PUCCIO LUIGIA	ANALISI "SCHEMI DI SUDDIVISIONE"
SANTORO MASSIMO	GRASSO GIORGIO MARIO	ALGORITMI AVANZATI PER LA SEGMENTAZIONE DI IMMAGINI TRAMITE CONTORNI ATTIVI
SCIMONE FRANCESCO	FEDERICO MAURO	IL PROBLEMA DEL RUMORE PER GLI IMPIEGATI FUORI SEDE DI LAVORO: ANALISI E SOLUZIONI
SPADARO GLORIA	GRASSO GIORGIO MARIO	LA CARTELLA CLINICA ELETTRONICA: ASPETTI IMPLEMENTATIVI E TESTING

INFORMATICA MAGISTRALE

Studente	Relatore	Titolo
CAPRI' MASSIMILIANO	FIUMARA GIACOMO	CONSOLE WEB PER LA GESTIONE DI SERVIZI PRIVATE CLOUD IN AMBIENTI DI VIRTUALIZZAZIONE MULTI-HYPERVISOR
FIUMARA GIACOMO	PROVETTI ALESSANDRO	PHARMA-C2B: CONSULTAZIONE E PRENOTAZIONE GEO-REFERENZIATA DI FARMACI
GIORGIANNI ANGELO	DE MEO PASQUALE	ANALISI COMPARATIVA DI TECNICHE DI NETWORK COVERING SU GRAFI SIMULATI E REALI: CASO PROPP PROCESS
MIGLIORATO VALENTINA	DE MEO PASQUALE	ANALISI COMPARATIVA DI TECNICHE DI NETWORK COVERING SU GRAFI SIMULATI E REALI: CASO "E-PROCESS"
PINO ANTONINO	PUCCIO LUIGIA	REALIZZAZIONE DI UN'ARCHITETTURA SOFTWARE PER LA GESTIONE DEI PROCESSI AZIENDALI
PISANI FRANCESCO	FIUMARA GIACOMO	MIDDLEWARE PER LA GESTIONE DI SERVIZI PRIVATE CLOUD IN AMBIENTI DI VIRTUALIZZAZIONE MULTI-HYPERVISOR
SALVIA FEDERICO	DE MEO PASQUALE	ANALISI COMPARATIVA DI TECNICHE DI NETWORK COVERING SU GRAFI SIMULATI E REALI: CASO "V - process"

MATEMATICA TRIENNALE

Studente	Relatore	Titolo
ALIBERTI CARMELA	NORDO GIORGIO	INTRODUZIONE AI FRATTALI MEDIANTE I SISTEMI DI FUNZIONI ITERATE
AMMENDOLIA FRANCESCO	CRUPI MARILENA	ALGEBRA ESTERNA E SUE APPLICAZIONI
BASILE FORTUNATA AURORA	BONANZINGA MADDALENA	SPAZI QUOZIENTE IN TOPOLOGIA: ESEMPI, PROPRIETA' ED APPLICAZIONI
CALDERONE PAOLA	RESTUCCIA LILIANA	UN MODELLO DI TERMODINAMICA DEL NON EQUILIBRIO PER UN MEZZO TERMOVISCOSO
CALDERONE ANTONELLA	RESTUCCIA GAETANA	GRUPPO SIMMETRICO E MODELLO DI BIRKHOFF
CAMINITI MARIAROSARIA	CARINI LUISA	LE PARTIZIONI DI UN INTERO n E LE RAPPRESENTAZIONI IRRIDUCIBILI DEL GRUPPO SIMMETRICO
CHILLE' GIOVANNA	BONANZINGA MADDALENA	DISUGUAGLIANZE CARDINALI E ASSIOMI DI SEPARAZIONE

COPPOLINO MARIA GRAZIA	CUBIOTTI PAOLO	ALCUNE NOTEVOLI CARATTERIZZAZIONI DEGLI SPAZI DI BANACH RIFLESSIVI
DA CAMPO UGO ANTONIO	CIANCIO VINCENZO	LA LEGGE DI DIFFUSIONE DEL CALORE NELL'AMBITO DELLA TERMODINAMICA DELLE VARIABILI INTERNE
DI NUZZO CINZIA	BONANZINGA MADDALENA	FUNZIONI CARDINALI IN SPAZI COMPATTI. COMPATTIFICAZIONI E DUE ESEMPI NOTEVOLI.
FESTA DANILA	CARINI GIUSEPPE	PROPAGAZIONE DEL SUONO NEI MEZZI REALI E TERMODINAMICA DEI PROCESSI IRREVERSIBILI
FORGIONE SABRINA	CUBIOTTI PAOLO	UN PROBLEMA AI LIMITI PER INCLUSIONI DIFFERENZIALI DEL SECONDO ORDINE CON SECONDO MEMBRO DISCONTINUO
GENOESE FRANCESCO SALVATORE	ANELLO GIOVANNI	FORME EQUIVALENTI DEI TEOREMI DI SEPARAZIONE
MARANO VALENTINO	BONANZINGA MADDALENA	DEBOLI FORME DI COMPATTEZZA: LA PARACOMPATTEZZA
MATTINA CRISTINA	CAMMAROTO FILIPPO	OMEOMORFISMI E PROPRIETA' TOPOLOGICHE
NAVARRA SALVINA	CRUPI MARILENA	ESTENSIONI DI CAMPI
PERLOTTI FRANCESCA	CRUPI MARILENA	MODULI SU ANELLI PRINCIPALI
PITRONE RICCARDO	PALUMBO ANNUNZIATA	ANALISI QUALITATIVA DEI SISTEMI DINAMICI: CONCETTI FONDAMENTALI E APPLICAZIONI
PRESTIGIACOMO RITA	UTANO ROSANNA	NUMERI DI FERMAT E LORO FATTORIZZAZIONE
PRINCIOTTO GRAZIELLA	CRUPI MARILENA	GRAFI E ALGEBRA LINEARE
RICCA LAURA	CRUPI MARILENA	ALGEBRE DI LIE E SISTEMI DI RADICI
RUGGERI CARMELA	DOLFIN MARINA	SU UN MODELLO DI BIOMATEMATICA
SAIA FRANCESCO	PALUMBO ANNUNZIATA	SULLE ONDE DI ACCELERAZIONE IN MAGNETOFLUIDODINAMICA RADIATIVA
SCOPELLITI DOMENICO	ANELLO GIOVANNI	CARATTERIZZAZIONE DEGLI SPAZI DUALI
TRAVAGLIA VALERIA	CUBIOTTI PAOLO	TEOREMI DI ESISTENZA PER IL PROBLEMA DEL QUASI-EQUILIBRIO
LIZZIO SIMONA	RESTUCCIA LILIANA	TERMODINAMICA DEL NON EQUILIBRIO ED EQUAZIONI DEL CALORE IN NANOSISTEMI

MATEMATICA MAGISTRALE

Studente	Relatore	Titolo
PAVIGLIANITI CRISTINA	UTANO ROSANNA	ALGEBRE KOSZUL E FILTRAZIONI
SARACENO SANTO	IMBESI MAURIZIO	UN APPROCCIO ALGEBRICO COMBINATORICO PER LA DETERMINAZIONE DEGLI ALBERI RICOPRENTI DI GRAFI DI JAHANGIR

5- ATTIVITA' DI RICERCA

Sezione *Matematica ed Informatica*

1. Gruppo di Ricerca in: **Metodi Variazionali per Problemi Nonlineari**

Componenti: P. Cubiotti, G. Anello, F. Cammaroto

2. Gruppo di Ricerca in: **Metodi Variazionali e Applicazioni**

Componenti: Carmela Vitanza, Monica Milasi, Maria Bernadette Donato

3. Gruppo di Ricerca in: **“Combinatoria”**

Componenti: M. De Salvo, E. M. Li Marzi, G. Lo Faro, A. Tripodi

4. Gruppo di Ricerca in: **Topologia Generale**

Componenti: Maddalena Bonanzinga, Filippo Cammaroto, Maria Vittoria Cuzzupè

5. Gruppo di Ricerca in: **“Topologia Generale – Topologia per Fibre - Geometria e Topologia Digitale”**

Componenti: Giorgio Nordo

6. Gruppo di Ricerca in: **: Analisi Numerica**

Componenti: Riccardo Fazio, Alessandra Jannelli, Luigia Puccio

7. Gruppo di Ricerca in: **Informatica**

Componenti: S. Agreste, S. Distefano, G. Fiumara

8. Gruppo di Ricerca in: **Informatica INF/01**

Componente: A. Provetti

9. Gruppo di Ricerca in: **Algebre con identità funzionali e metodi combinatori.**

Componenti: Luisa Carini, Vincenzo De Filippis

10. Gruppo di Ricerca in: **Algebra Commutativa e Combinatoria**

Componenti: Restuccia Gaetana, Crupi Marilena, Utano Rosanna, Imbesi Maurizio

11. Gruppo di Ricerca in: **Metodi e Modelli in Fisica Matematica**

Componenti: F. Oliveri, M. Speciale, R. Di Salvo, M. Gorgone

12. Gruppo di Ricerca in: **Problemi di evoluzione in Meccanica dei Continui**

Componenti strutturati: Elvira Barbera, Vincenzo Ciancio, Fiammetta Conforto, Giancarlo Consolo, Carmela Currò, Domenico Fusco, Natale Manganaro, Annunziata Palumbo, Liliana Restuccia, Patrizia Rogolino.

Sezione *Fisica*

13. Gruppo di Ricerca in: **: “Teoria e Simulazione di Sistemi Atomici e Molecolari”**

Componenti: Maria C. Abramo, Carlo Caccamo, Dino Costa, Paolo V. Giaquinta, Gianpietro Malescio, Gianmarco Munao', Santi Prestipino Giarritta, Alessandro Sergi

14. Gruppo di Ricerca in: **: “Micro e Nanosistemi”**

Componenti: Fortunato Neri, Salvatore Patanè, Angela Maria Mezzasalma, Letteria Silipigni, Rosalba Saija, Salvatore Savasta, Enza Fazio, Giovanni Finocchio

Dottorandi: Claudia Triolo, V. Macrì, L. Garziano, G. Cassone

Collaboratori: S. Spadaro, F. Barreca, S. Scibilia, S. Grimato, A. Scala, S. Panarello, A. Ridolfo, A. Cacciola, R. Stassi, O. Di Stefano, N. Boukortt, M. Gaeta, B. Azzerboni, S. De Caro.

15. Gruppo di Ricerca in: : Biofisica , Fisica sperimentale dei sistemi complessi e Fisica applicata ai Beni culturali e ambientali

Componenti: Giacomo Maisano (PO) , Giuseppe Carini (PO) , Maria Cutroni (PO), Salvatore Magazù (PO), Domenico Majolino (PO) , Vincenza Crupi (PO), Ulderico Wanderlingh (PA), Giovanna D'Angelo (PA), Caterina Branca (PA), Andrea Mandanici (PA), Valentina Venuti (PA), Mauro Federico (RU).

Dottorandi: Dr.ssa Maria Teresa Caccamo, Dr. Salvina Coppolino, Dr. Antonio Cannuli, Dr. Giuseppe Castorina, Dr. Franco Colombo, Dr.ssa Giovanna Ruello, Dr.ssa Khaoula Khouzami.

Collaboratori:

Prof.ssa Federica Migliardo, Dott.ssa Francesca Longo, Dott. Giovanni Carini, Dott.ssa Cristina Crupi, Dott.ssa Simona Rifici, Dott.ssa Valeria Conti Nibali, Dr. Emanuele Calabrò

16. Gruppo di Ricerca in: : Studio di reazioni nucleari ad energie intermedie e delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia

Componenti: L.Auditore, S.De Luca, A.Italiano, E.Morgana, S.Norella, L.Quattrocchi, A.Trifirò, M.Trimarchi

17. Gruppo di Ricerca in: : “Fisica dell’interazione radiazioni materia, plasmi generati da impulsi laser e applicazioni”

Componenti: Prof. Lorenzo Torrisi, Dr.ssa Mariapompea Cutroneo, Dr.ssa Cristina Scolaro, Dr. Giovanni Ceccio, Dr. Antonino Cannavò, Dr. Antonino Italiano, Dr. A. Torrisi, Prof.ssa Annamaria Visco, Prof. Salvatore Cavallaro, Prof.ssa Lucia Calcagno.

18. Gruppo di Ricerca in: “ Fisica dei sistemi Complessi”

Componenti: Prof. Francesco Mallamace (PO, Responsabile), Dr. Carmelo Corsaro (Collaboratore)

Sezione Scienze della terra

19. Gruppo di Ricerca in: Geofisica generale ed applicazioni territoriali

Componenti: Giancarlo Neri, Barbara Orecchio, Debora Presti, Cristina Totaro

20. Gruppo di Ricerca in: “ Geologia ambientale e territoriale

Componenti: Prof. Giovanni Randazzo, Dott.ssa Stefania Lanza

21. Gruppo di Ricerca in: Caratterizzazione strutturale di sistemi zeolitici e Studi archeometrici di Beni Culturali

Componenti: Prof. ssa Simona Quartieri (P.O.), Dr. Giuseppe Sabatino (tecnico laureato).

22. Gruppo di Ricerca in “Petrologia e Geochimica

Componente: Maria Rosaria Renna

23. Gruppo di Ricerca in “ Mineralogia”

Componenti: Saccà Domenica, Saccà Carmelo; Preziosa Nucera; Anna De Fazio.

24. Gruppo di Ricerca: “Vulcanologia, Petrologia, Geochimica ed applicazioni in campo Archeometrico”

Componenti: Dott. Alessandro Tripodo, Dott. Giuseppe Sabatino, Dott.ssa Marcella Di Bella

25. Gruppo di Ricerca in “Paleontologia”

Componenti: Antonella Cinzia Marra

26. Gruppo di Ricerca in “Chimica Industriale e Catalisi”

Componenti: Gabriele. Centi, Paola. Lanzafam

5.1 Gruppo di Ricerca in: “Metodi Variazionali per Problemi Nonlineari”

Componenti: P. Cubiotti, G. Anello, F. Cammaroto

Tematiche scientifiche

1. Sono state studiate le proprietà di monotonia e di regolarità della migliore costante di Sobolev λ_q per l'immersione $W^{1,p}(\Omega) \rightarrow L^q(\Omega)$, dove Ω è un aperto limitato di \mathbb{R}^N e $p \in (1, \infty)$. In particolare, denotato con p^* l'esponente critico per la suddetta immersione, è stato provato che la funzione $g(q) := \lambda_q |\Omega|^{p/q}$ risulta strettamente decrescente in $(0, p^*)$, Lipschitz continua sui compatti di $(0, p^*)$ e, nel caso $p < N$, assolutamente continua sui compatti di $(0, p^*]$. Questo risultato dà una risposta ad un problema aperto proposto da Y. X. Huang nell'articolo Y.X. Huang *A note on the asymptotic behavior of positive solutions for some elliptic equation*, *Nonlinear Anal.* **29**, 533–537 (1997)

2. Sia Ω un aperto limitato di \mathbb{R}^N e siano dati una funzione continua $f: [0, \infty) \rightarrow (0, \infty)$ e due parametri positivi λ, μ . Considerato il funzionale dell'energia

$$J(u) = \int_{\Omega} |\text{grad}(u)|^2 dx - \lambda \int_{\Omega} F(u) dx - \mu \int_{\Omega} |u_+|^q dx,$$

dove F è la primitiva di f che si annulla nello 0 e q è un esponente strettamente compreso tra 0 e 1, è stato dimostrato, sotto l'ipotesi che la funzione $t \rightarrow f(t)/t$ sia non crescente in $(0, \infty)$ e asintoticamente lineare a ∞ , che, per ogni $\mu > 0$ e per ogni λ strettamente minore di λ_{-1}/a , dove λ_{-1} è il primo autovalore del laplaciano su Ω e $a = \lim_{t \rightarrow \infty} f(t)/t$, il funzionale J ammette un unico punto di minimo globale in $W_0^{1,p}(\Omega)$ che risulta essere, altresì, l'unica soluzione positiva del problema

$$-\Delta u = \lambda f(u) + \mu u^{q-1} \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{su } \partial\Omega$$

Per $\lambda \geq \lambda_{-1}/a$ il funzionale J non ha minimi globali e il precedente problema non ammette soluzioni. Questo risultato è stato poi applicato, congiuntamente and risultato astratto di B. Ricceri sulle proprietà dei minimi globali unici di funzionali reali su spazi topologici di Hausdorff, per ottenere un risultato di ben positura per il funzionale J nel caso in cui $\lambda = \mu$.

3. Considerato il problema dei due punti

$$-(|u'|^{p-2}u')' = \lambda u^{s-1} - \mu u^{r-1} + u^{q-1} \quad \text{in } (0,1), \quad u(0) = u(1) = 0,$$

dove $p \in (1, \infty)$, $s \in (1, p)$, $r \in (1, s)$ e $\lambda, \mu \in (0, \infty)$, è stata provata l'esistenza di un insieme aperto non vuoto A in \mathbb{R}^2 tale che, per ogni $(\lambda, \mu) \in A$, il suddetto problema ammette almeno tre soluzioni positive con derivata positiva in 0 e negativa in 1. E' stata, inoltre, dimostrata l'esistenza di due curve distinte $\lambda = \lambda_{-1}(\mu)$ e $\lambda = \lambda_{-2}(\mu)$ tali che, per ogni (λ, μ) appartenenti al loro sostegno, il problema ammette almeno una soluzione positiva con derivata nulla in 0 e in 1. Successivamente, è stato considerato il caso risonante con il termine u^{q-1} sostituito da $\lambda_1 u^{p-1}$, dove λ_1 è il primo autovalore del Laplaciano su $(0,1)$, ed è stato ottenuto un risultato di unicità per le soluzioni positive, per ogni λ positivo e per ogni μ sufficientemente grande.

4. Dato un aperto limitato Ω di \mathbb{R}^N , è stato studiato il seguente problema singolare con secondo membro indefinito nel segno

$$-\Delta u = (\lambda u^{s-1} - u^{r-1}) \chi_{(u>0)} \quad \text{in } \Omega, \quad u = 0 \quad \text{su } \partial\Omega,$$

dove $s \in (1,2)$, $r \in (0,1)$, λ è un parametro positivo, e $\chi_{(u>0)}$ è la funzione caratteristica dell'insieme in cui u è positiva. Relativamente a tale problema è stato provato il seguente risultato: esiste $\Lambda > 0$ tale che il problema non ha soluzioni positive per $\lambda < \Lambda$ ed ha due distinte soluzioni non nulle e non negative per $\lambda > \Lambda$, una di esse appartenente all'interno del cono positivo di $C^1(\text{cl}(\Omega))$ e corrispondente a un minimo locale dell'associato funzionale dell'energia. Questo risultato migliora quello ottenuto in M. Montenegro, E. Silva, *Two solutions for a singular elliptic equation by variational methods*. *Ann. Sc. Norm. Super. Pisa Cl. Sci.* **11**, 143–165 (2012), dove non era stabilita né la positività e né la caratterizzazione variazionale di almeno una delle soluzioni.

5. È stata studiata l'esistenza di soluzioni generalizzate per problemi ai limiti relativi ad equazioni ed inclusioni differenziali del secondo ordine in forma implicita. Caratteristica principale dei risultati ottenuti è il tipo di discontinuità permessa alle funzioni ed alle multifunzioni che vi compaiono. Queste ultime infatti, pur soddisfacendo le ipotesi richieste, potrebbero, rispetto ad alcune variabili, essere discontinue (nel caso di funzioni) o non semicontinue inferiormente (nel caso delle multifunzioni) persino in ogni punto del dominio.

Publicazioni:

1. G. Anello, L. Vilasi, *Positive and compacton-type solutions for a quasilinear two-point boundary value problem*, J. Math. Anal. Appl. 431 (2015), 429–439.
2. G. Anello, F. Faraci, *Two solutions for a singular elliptic problem indefinite in sign*, Nonlinear Differ. Equ. Appl. 22 (2015), 1429–1443.
3. G. Anello, F. Faraci, A. Iannizzotto, *On a problem of Huang concerning best constants in Sobolev embeddings*, Ann. Mat. Pura Appl. 194 (2015), 767–779.
4. P. Cubiotti, J. C. Yao, *A boundary value problem for implicit vector differential inclusions without assumptions of lower semicontinuity*, Boundary Value Problems (2015) 2015:93. DOI: 10.1186/s13661-015-0354-0.
5. P. Cubiotti, J.C. Yao, *On the two-point problem for implicit second-order ordinary differential equations*, Boundary Value Problems (2015) 2015:211, DOI: 10.1186/s13661-015-0475-5.

Partecipazioni e comunicazione a congressi:

Giovanni Anello è stato tra gli organizzatori del “2° Corso Intensivo di Calcolo delle Variazioni” tenutosi a Catania dal 15-06-2015 al 20-06-2015, con relatori:

- Alberto Farina, dell'Università de Picardie “J. Verne” di Amiens
- Enrico Valdinoci, del Weierstrass Institute for Applied Mathematics and Stochastic di Berlino

Collaborazioni:

- Prof. Jen_Chieh Yao, Center for General Education, China Medical University, Taichung, Taiwan 40402, R.O.C.
- Prof. Francesca Faraci, Dipartimento di Matematica e Informatica, Università di Catania.
- Prof. Antonio Iannizzotto, Dipartimento di Matematica e Informatica, Università di Cagliari.
- Dott. Luca Vilasi, Università di Messina.

5.2 Gruppo di Ricerca in “Metodi Variazionali e Applicazioni”

Componenti: Carmela Vitanza, Monica Milasi, Maria Bernadette Donato

Tematiche scientifiche

1. **Teoria delle disequazioni variazionali e quasi-variazionali con applicazioni a diversi modelli di equilibrio economico generale.** Nell'ambito di questo argomento, le disequazioni variazionali hanno permesso di descrivere e studiare il problema dell'equilibrio economico generale, introdotto dall'economista francese Leon Walras. Il contributo dato in questo ambito consiste nell'aver fornito nuovi modelli di disequazioni variazionali e quasi-variazionali, per la riformulazione dell'equilibrio economico generale, e nell'aver elaborato una teoria relativa all'esistenza delle soluzioni delle disequazioni variazionali associate. Al fine di ottenere una più vasta applicabilità dei risultati ottenuti, all'economia matematica, si è cercato di assumere ipotesi sempre più generali sulle funzioni utilità, che rappresentano le preferenze dei consumatori sulle merci presenti nel mercato. Da un punto di vista matematico, l'assunzione di queste differenti ipotesi sulle funzioni utilità, permette di ottenere diverse riformulazioni dell'equilibrio mediante disequazioni variazionali, in cui gli operatori coinvolti sono opportune multimappe. Si sono dunque elaborati nuovi modelli di disequazioni variazionali e quasi-variazionali generalizzate per la riformulazione dell'equilibrio economico e l'applicazione dell'analisi variazionale e multivoca ha permesso quindi di fornire l'esistenza dell'equilibrio in ipotesi molto generali.

2. Approssimazioni di funzioni quasi concave. E' stata presa in esame una approssimazione di funzioni quasiconcave mediante funzioni semistrettamente quasiconcave. Diversamente dal caso concavo questa approssimazione non è immediata poiché, in generale, la somma di funzioni quasiconcave non è quasiconcava e questo rappresenta una difficoltà per la costruzione di funzioni approssimanti. Grazie a questa approssimazione si è riusciti ad ottenere l'esistenza dell'equilibrio in ipotesi di continuità e quasiconcavità delle funzioni utilità.

3. Ottimizzazione in spazi di dimensione infinita. Nell'ambito della teoria della dualità in spazi di dimensione infinita, viene esteso e migliorato un risultato relativo al metodo dei moltiplicatori di Lagrange generalizzato. Più precisamente, nell'ambito dell'ottimizzazione vettoriale vincolata per problemi non convessi, viene fornita una nuova formulazione del metodo dei moltiplicatori di Lagrange e viene così introdotta una condizione necessaria e una condizione sufficiente di ottimo per le soluzioni debolmente minimali. A tale scopo viene introdotta una nuova condizione di qualificazione dei vincoli che coinvolge la derivata di Fréchet delle mappe e il concetto di cono tangente allo spazio delle immagini.

Publicazioni

M. Milasi, R. Lucchetti, "Semistrictly quasiconcave approximation and an application to general equilibrium theory", *Journal Mathematical Analysis and Applications*, 428, pp. 445-456 (2015).

Partecipazioni e comunicazione a congressi

- M. B. Donato, "A variational approach for the study of a competitive economic equilibrium problem", Dipartimento di Scienze per l'Economia e l'Impresa dell'Università degli Studi di Firenze, 13 gennaio 2015.
- M. Milasi, Variational Problems and Application to a Competitive Equilibrium Problem, Facoltà di Matematica, Scienze Naturali e Tecnologie Informatiche (FAMNIT) dell'Università del Litorale di Capodistria (Slovenia), 25 Aprile - 2 Maggio 2015.
- M. B. Donato, "Optimality conditions for constrained vector equilibrium problems and applications", 13th Viennese Workshop on Optimal Control and Dynamic Games, Special Session "Variational inequalities and applications in economics", Vienna, 13-16 maggio 2015.
- M. Milasi, "Semistrictly quasiconvex approximation and application to variational problem", 13th Viennese Workshop on Optimal Control and Dynamic Games, Special Session "Variational inequalities and applications in economics", Vienna, 13-16 maggio 2015.
- M. B. Donato, "A survey on the study of an economic equilibrium with variational inequality arguments", 63rd International Workshop "Variational Analysis and Applications" International School of Mathematics G. Stampacchia, presso il Centro Ettore Majorana, Erice, 28 agosto-5 settembre 2015.

Collaborazioni

Altro

Maria Bernadette Donato è componente del Progetto di Ricerca STAR 2014 (Sostegno Territoriale alle Attività di Ricerca) assegnato dal Comitato di Programmazione e Monitoraggio della Convenzione tra la Compagnia di San Paolo e l'Università degli Studi di Napoli Federico II dal titolo "Variational Analysis and Equilibrium Models in Physical and Socio-Economic Phenomena", Principal Investigator: Prof.ssa Annamaria Barbagallo dell'Università degli Studi di Napoli Federico II (dal 01/09/2015 al 31/08/2017).

Maria Bernadette Donato e Monica Milasi hanno organizzato una Special Session (su invito del Professor Vladimir Veliov, della Vienna University of Technology) dal titolo "Variational inequalities and applications in economics" nell'ambito del 13th Viennese Workshop on Optimal Control and Dynamic Games, Vienna, 13-16 maggio 2015.

Maria Bernadette Donato e Monica Milasi sono state componenti del Progetto GNAMPA 2015 "Disequazioni Variazionali e Applicazioni a problemi Economici", Coordinatore Scientifico Prof.ssa Annamaria Barbagallo dell'Università degli Studi di Napoli Federico II.

5.3 Gruppo di Ricerca in “Combinatoria”

Componenti: M. De Salvo, E. M. Li Marzi, G. Lo Faro, A. Tripodi

Tematiche scientifiche

1. Teoria dei Disegni

- A) *“Squashing” di sistemi di cicli.* Nell’articolo “From squashed 6-cycles to Steiner triple systems” Lindner, Meszka e Rosa introducono il concetto di squash di un 6-ciclo in due triangoli e determinano lo spettro per i sistemi di 6-cicli con la proprietà che i loro cicli possono essere “squashed” in maniera tale da produrre sistemi di terne di Steiner. In tale contesto, si è esteso il risultato precedente dando una risposta al problema dell’esistenza di maximum packing con 6-cicli (ovvero terne (X,C,L) dove C è una famiglia di 6-cicli con vertici in X e senza spigoli in comune ed L , detto “leave”, è l’insieme degli spigoli di K_n non appartenenti ad alcun 6-ciclo di C , con L di cardinalità minima) che ammettono uno squashing in un maximum packing con terne (e cioè tali che la famiglia $S(C)$ dei triangoli ottenuta dallo “squashing” dei 6-cicli, con l’aggiunta di una eventuale terna appartenente al “leave” L , costituisce la famiglia di terne di un maximum-packing di K_n con terne). I risultati della ricerca sono contenuti in una nota scientifica pubblicata nel 2016.
- B) *Uniforme risolubilità.* Quella della risolubilità di un disegno è una tematica che risale al famoso *problema delle quindici scolare* che fu formulato da Kirkman nel 1850 e che poneva, più in generale, il problema dell’esistenza di sistemi di terne di Steiner risolubili, detti in seguito *Sistemi di Kirkman*, i cui blocchi si possono ripartire in classi di parallelismo, ovvero in sottoinsiemi di blocchi a due a due disgiunti e tali che ogni vertice appare in uno ed un solo blocco di ogni sottoinsieme. Da allora il problema dell’esistenza di decomposizioni del grafo completo i cui blocchi si possano ripartire in classi di parallelismo, dette anche fattori, ha focalizzato l’attenzione di molti matematici; in particolare, il problema è stato studiato nel caso in cui i blocchi sono tutti isomorfi ad un fissato ciclo, path o un sottografo connesso del grafo completo K_4 e in quest’ultimo caso è stato completamente risolto. Data una famiglia di grafi H , un H -disegno di ordine n è una decomposizione del grafo completo K_n in copie di grafi isomorfi a qualche grafo di H (dette blocchi). Una H -disegno si dice risolubile se è possibile ripartire i suoi blocchi in classi P_i tali che ogni vertice del disegno appare esattamente una volta in qualche blocco di ciascun P_i . Una H -disegno risolubile di G è detto anche H -fattorizzazione del grafo completo e una sua classe è detta H -fattore. Ai fattori di una H -fattorizzazione si possono imporre ulteriori restrizioni; ad esempio, un fattore si dice uniforme se ogni blocco della classe è isomorfo a uno stesso grafo di H . Se i fattori di una H -fattorizzazione sono tutti uniformi allora la H -fattorizzazione si dice uniforme. In particolare, quando $H=\{G_1, G_2\}$ si pone il problema di studiare l’esistenza di H -fattorizzazioni uniformi in cui il numero di G_1 -fattori è minimo (o, equivalentemente, quello di G_2 -fattori è massimo). Relativamente a questo tipo di problematica, di particolare nota sono i risultati di: Rees e Stinson riguardante il caso $H=\{K_2, K_3\}$; Hoffman e Schelleberg, caso $H=\{K_2, C_k\}$; Dinitz, Ling e Danziger, caso $H=\{K_2, K_4\}$; Kucukcifici, Milici e Tuza, caso $H=\{K_3, K_{1,3}\}$. In questo contesto si colloca lo studio delle H -fattorizzazioni del grafo completo nel caso in cui $H=\{K_2, K_{1,3}\}$ e che si è concretizzato in un articolo pubblicato nel 2015.

Sempre nell’ambito delle H -fattorizzazioni uniformi del grafo completo, è stato studiato il caso $H=\{K_2, P_3, P_4\}$ e per ogni n ammissibile sono state determinate tutte le possibili terne (r,s,t) per cui esiste una $\{K_2, P_3, P_4\}$ -fattorizzazione uniforme di K_n con r K_2 -fattori, s P_3 -fattori e t P_4 -fattori.

2. Teoria Spettrale dei Grafi.

La ricerca indicata nella seconda tematica ricade nell’ambito della Teoria Spettrale dei Grafi, disciplina che si occupa di trovare legami tra proprietà strutturali dei grafi e loro proprietà spettrali. I problemi affrontati riguardano la determinazione dei grafi con fissati invarianti che massimizzano un particolare autovalore e lo studio dei grafi che sono determinati dai propri autovalori. Tali studi hanno applicazioni in

altre tematiche, come la Chimica Organica e Reti Complesse. Nell'anno 2015 nella suddetta tematica, si è inviato per la pubblicazione un articolo che è stato pubblicato nel 2016. Nello specifico, l'indagine è stata indirizzata verso la generalizzazione della Teoria Spettrale dei Grafi ai Grafi Segnati, e si sono studiati gli autospazi dell'autovalore -2 relativi ai grafi degli spigolo di grafi segnati. La tecnica utilizzata è la cosiddetta "Star complement technique" che permette la costruzione degli autospazi attraverso i sottografi complementari ad un dato autovalore (nello specifico, l'autovalore -2). I risultati della ricerca sono contenuti in una nota scientifica pubblicata nel 2016.

3. Semi-ipergruppi semplici e zero-semplici

L'attività di ricerca svolta riguarda lo studio dei semi-ipergruppi completamente semplici e completamente zero-semplici. I risultati sono descritti nei seguenti due manoscritti che sono stati accettati, e sono in corso di pubblicazione, nella rivista *Journal of Mult.-Valued Logic and Soft Computing*:

- 1) A Family of 0-Simple Semihypergroups Related to Sequence A000070.
- 2) Hypercyclic subhypergroups of finite fully simple semihypergroup.

Nel primo articolo sono stati caratterizzati i semi-ipergruppi completamente zero-semplici le cui tabelle moltiplicative si possono riguardare come una sovrapposizione della tabella di uno zero-semigruppato con la tabella di un zero-semigruppato destro. Nel caso finito è stato calcolato il numero delle classi di isomorfismo. Più precisamente, è stato dimostrato che il numero delle classi di isomorfismo dei semi-ipergruppi completamente semplici di ordine $n+1$ è il termine $(n+1)$ -esimo della successione delle partizioni dell'intero $(n+1)$. Questa sequenza, i cui primi termini sono :

1, 2, 5, 10, 20, 36, 65, 110, 185, 300, 481, 752, 1165, 1770, 2665, 3956, 5822, 8470, . . .
 è indicata come A000712 nella On-Line Encyclopedia of Integer Sequences.

Nel secondo articolo vengono studiati i sotto semi-ipergruppi iperciclici dei semi-ipergruppi completamente semplici. In particolare, in cardinalità finita, viene dimostrato che questi sottosemi-ipergruppi hanno ordine minore o uguale a due. Questa proprietà è importante per caratterizzare dei semi-ipergruppi completamente semplici finiti le cui proprietà sono state pubblicate sulla rivista *Journal of Algebra* negli articoli:

- Fully simple semihypergroups – Vol. 399, (2014)
- Fully simple semihypergroups, transitive digraphs, and sequence A000712 - Vol. 415, (2014)

I risultati fin qui ottenuti non sono conclusivi e promuovono possibili sviluppi. Per esempio resta aperto il problema di caratterizzare e calcolare le classi d'isomorfismo dei semi-ipergruppi completamente zero-semplici le cui tabelle moltiplicative si possono riguardare come una sovrapposizione della tabella di uno zero-semigruppato con la tabella di un gruppo (in particolare di un 2-gruppo abeliano elementare finito). I risultati della ricerca sono contenuti in alcune note scientifiche in corso di stampa.

Pubblicazioni

1. S. Kucukcifci, G. Lo Faro, S. Milici, A. Tripodi, **Resolvable 3-star designs**, *Discrete Mathematics* 338 (2015), pp. 608-614.
- 2-G. Lo Faro, S. Milici, A. Tripodi, **Uniformly resolvable decompositions of K_n into paths on two, three and four vertices**, *Discrete Mathematics* 338, Issue 12 (2015), pp. 2212-2219

Partecipazioni e comunicazione a congressi:

M. De Salvo, E. Li Marzi, G. Lo Faro, A. Tripodi: International Conference on Topology (ICTM 2015), Messina, 7-11 Settembre 2015.

Collaborazioni

- C.Curt Lindner, Dipartimento di Matematica e Statistica, Auburn University, Alabama (U.S.A.).
- Selda Kucukcifci, Dipartimento di Matematica, Koç University, Istanbul, Turchia;
- Salvatore Milici, Dipartimento di Matematica e Informatica, Università di Catania, Italia.
- Francesco Belardo, Università degli Studi di Napoli "Federico II", Italia;

- Slobodan K. Simic, Mathematical Institute, Serbian Academy of Sciences and Arts, Serbia.
- Domenico Freni, Dipartimento di Matematica ed Informatica - Università degli Studi di Udine, Italia;
- Dario Fasino, Dipartimento di Matematica ed Informatica - Università degli Studi di Udine, Italia.

Altro

G. Lo Faro : Membro del Comitato Organizzatore del Convegno International Conference on Topology (ICTM 2015), Messina, 7-11 Settembre 2015.

5.4 Gruppo di ricerca in Topologia Generale

Componenti: Maddalena Bonanzinga, Filippo Cammaroto, Maria Vittoria Cuzzupè

Tematiche scientifiche.

1. **Gruppi Topologici.** In [A.V. Arhangel'skii, J. van Mill, *On topological groups with a first-countable remainder*, Top. Proc. {42} (2013), 157-163] è stato provato che il carattere di uno gruppo topologico non localmente compatto avente resto primo numerabile non eccede ω_1 . E' stato inoltre fornito un esempio di gruppo topologico non localmente compatto di carattere ω_1 avente una compattificazione il cui resto è primo numerabile. M. Bonanzinga e M.V. Cuzzupè hanno generalizzato questi risultati nel caso generale di un cardinale infinito arbitrario k . I risultati ottenuti sono contenuti nel seguente lavoro accettato per la pubblicazione. I risultati della ricerca sono contenuti in una nota scientifica pubblicata nel 2016.

2. Funzioni cardinali

a) *Assiomi di separazione e funzioni cardinali.* Gli assiomi di separazione giocano un ruolo importante in topologia ed esistono numerose generalizzazioni di essi in vari contesti. In particolare essi assumono grande importanza nella teoria delle funzioni cardinali. In quest'ultimo ambito sembra piuttosto naturale considerare generalizzazioni di tipo combinatorico. Nel 2011 M. Bonanzinga, F. Cammaroto e M. Matveev hanno introdotto una versione combinatorica degli spazi di Urysohn mentre nel 2013 M. Bonanzinga ha introdotto una versione combinatorica degli spazi di Hausdorff. M. Bonanzinga, D. Stavrova and P. Staynova hanno recentemente introdotto alcune versioni combinatoriche della regolarità investigando e migliorando, alla luce di tali definizioni, alcuni classici risultati sulla limitazione della cardinalità dello spazio e ponendo alcuni problemi. I risultati ottenuti sono contenuti nel seguente lavoro in fase di stampa. I risultati della ricerca sono contenuti in una nota scientifica in corso di stampa.

b) *Teorema di Arhangel'skii e funzioni cardinali non regolari.* Negli anni, F. Cammaroto, A. Bella, A. Catalioto e J. Portet hanno lavorato sulla disuguaglianza di Arhangel'skii $|X| \leq 2^{\chi(X)}$ per ogni spazio di Hausdorff X portando numerosi e significativi contributi con miglioramenti alla suddetta disuguaglianza per spazi di Urysohn, H -chiusi e numerose funzioni cardinali come la θ -tightness, la lunghezza delle successioni libere $F(X)$, $F_\theta(X)$, ecc. In corso di elaborazione e prossimi alla pubblicazione ci sono lavori con J. Porter e N. Carlson su disuguaglianze per spazi localmente compatti.

3. **Principi di selezione definiti mediante le stelle.** In una recente nota, S. Bhowmik ha introdotto, con un nome diverso, la seguente definizione: Uno spazio X è selettivamente assolutamente star-Lindelof se per ogni ricoprimento aperto \mathcal{U} di X e ogni successione numerabile di sottoinsiemi densi, esiste per ciascun denso un sottoinsieme finito tale che la stella dell'unione di tali insiemi finiti rispetto al ricoprimento coincide con X . M. Bonanzinga, M.V. Cuzzupè e M. Sakai hanno osservato che questa nozione, che ovviamente può essere riletta in termini di principi di selezione, si colloca tra la proprietà accolta da M. Matveev nel 1994 e tra la proprietà a -star-Lindelof introdotta da M. Bonanzinga nel 1998. Tale motivazione li ha portati a cercare esempi atti a distinguere la proprietà di Bhowmik da queste due proprietà e a studiare proprietà generali di spazi selettivamente a -star-Lindelof. I risultati della ricerca sono contenuti in una nota scientifica in corso di stampa.

4. **Versioni monotone di proprietà di ricoprimento.** M. Bonanzinga, F. Cammaroto e M. Sakai hanno provato che usando il teorema di Erdos-Rado (1) ogni spazio monotonicamente debolmente Lindelof soddisfa

la proprietà che ogni famiglia di cardinalità c^+ formata da aperti non vuoti ha una sottofamiglia linked più che numerabile; (2) ogni spazio monotonicamente Lindelof ha calibro forte (c^+ , ω_1), in particolare uno spazio monotonicamente Lindelof è ereditariamente c -Lindelof ed ereditariamente c -separabile. (1) fornisce una risposta ad una domanda posta da M.Bonanzinga, F.Cammaroto e B.Pansera nel (2011), e (2) dà una risposta parziale ad una domanda posta da R.Levy e M.Matveev nel (2008). Inoltre M.Bonanzinga, F. Cammaroto e M.Sakai hanno studiato altre proprietà della classe di spazi monotonicamente debolmente Lindelof. I risultati della ricerca sono contenuti in una nota scientifica in corso di stampa.

Collaborazioni:

- Masami Sakai, Department of Mathematics, Kanagawa University, Japan.
- D. Stavrova, P. Staynova, *University of Leicester, Department of mathematics, Leicester, United Kingdom.*

Partecipazioni, comunicazioni a congressi

International Conference on Topology, Messina, Italy, 7-11 Settembre 2015

Altro

M.Bonanzinga è stata membro del comitato organizzatore e scientifico della suddetta conferenza dedicata al Prof. Filippo Cammaroto in occasione del suo 65° compleanno. M.V.Cuzzupè è stata anche nel comitato organizzatore ed ha presentato una comunicazione dal titolo “On topological groups with remainder of character k ”, coautore M. Bonanzinga.

5.5 Gruppo di Ricerca in: “Topologia Generale – Topologia per Fibre - Geometria e Topologia Digitale”

Componenti: Giorgio Nordo

Tematiche scientifiche:

Come è noto lo scopo principale delle discipline ricadenti nell’ambito della Geometria e della Topologia Digitale riguardano soprattutto lo studio delle proprietà topologiche delle immagini prodotte da apparati digitali (come telecamere, scanner, apparecchiature mediche, ecc.) al fine di ottenere strategie e criteri di valutazione per metodologie di pattern recognition alternative a quelle offerte dalla Morfologia Matematica. In quest’area di ricerca, l’iniziale approccio di Rosenfeld costruito sulla teoria dei grafi è stato progressivamente affiancato da quello di Khalimsky basato sulle topologie discrete e da quello di Kovalevsky imperniato sui complessi di celle ed i vari tipi di relazioni di adiacenza tra essi.

In particolare, i due modelli più diffusi in letteratura , ossia quello della griglia dei punti Z^n ed i complessi cellulari astratti (ACC), vengono normalmente utilizzati in modo indipendente e sono stati usati a seconda della necessità senza mai evidenziare alcun legame. Questa ricerca ha invece portato alla luce, grazie ad una serie di proprietà preliminari, come esista una biiezione tra lo spazio digitale considerato come struttura di adiacenza e i complessi cellulari astratti che consente di affrontare uno stesso problema sotto entrambi i punti di vista, permettendoci di scegliere caso per caso lo strumento matematico più adatto a trattare un determinato problema. Tali risultati tecnici finora rivolti esclusivamente alla stesura di un articolo scientifico (recentemente pubblicato) che riguarda la trattazione di una specifica questione inerente le curve negli spazi 3D potranno costituire il punto di partenza per un lavoro più generale riguardo la costruzione di un “framework per lo spazio digitale” di arbitraria dimensione n .

Con il termine "gap" in Geometria Digitale si intende una porzione elementare di un oggetto digitale tridimensionale che un segmento discreto può attraversare senza intersecare alcun voxel dell’oggetto stesso. Poiché questa nozione è strettamente collegata con alcune applicazioni pratiche nel campo della computer grafica (ad esempio il rendering di una immagine 3D con la tecnica del raytracing) diversi lavori, tra i quali:

- V.E. Brimkov, A. Maimone, G. Nordo, R.P. Barneva, R. Klette, The number of gaps in binary pictures, Proceedings of the ISVC 2005, Lake Tahoe, NV, USA, December 5-7, 2005, (Editors: Bebis G., Boyle R., Koracin D., Parvin B.), Lecture Notes in Computer Science, Vol. 3804 (2005), 35 - 42.
- V.E. Brimkov, A. Maimone, G. Nordo, An explicit formula for the number of tunnels in digital objects, ARXIV (2005), <http://arxiv.org/abs/cs.DM/0505084>.

- V.E. Brimkov, A. Maimone, G. Nordo, Counting Gaps in Binary Pictures, Proceedings of the 11th International Workshop, IWZIA 2006, Berlin, GERMANY, June 2006, (Editors: Reulke R., Eckardt U., Flach B., Knauer U., Polthier K.), Lecture Notes in Computer Science, LNCS 4040 (2006), 16 - 24.
- V.E. Brimkov, A. Maimone, G. Nordo, R.P. Barneva, Genus and dimension of digital images and their time and space efficient computation, International Journal of Shape Modelling, 14 (2008), 147-168.

sono stati rivolti allo studio di 0-gap e 1-gap di oggetti nello spazio discreto Z^3 .

Più recentemente nei lavori:

- Maimone, G. Nordo, On 1-gaps in 3D Digital Objects, Filomat 25 (2011), 85-91.
- Maimone, G. Nordo, A formula for the number of n-2-gaps in digital n-objects, Filomat, 27 (2013), 547-557.

sono state trovate due formule che forniscono rispettivamente il numero di 1-gap di un oggetto digitale di dimensione 1 o 2 nello spazio 3d e, più genericamente, il numero di (n-2)-gap di un generico oggetto digitale di arbitraria dimensione n.

Allo scopo di particolareggiare questi risultati e renderli operativi in un ambito tipico del CAD e del rendering tridimensionale, si è ristretta l'attenzione al caso delle 0-curve negli spazi 3D, ossia di quei particolari oggetti digitali g di Z^3 in cui:

- 1) per ogni voxel, esistono al più altri due voxel 0-adiacenti, e
- 2) ogni coppia di voxel 0-adiacenti ad un voxel di g non può essere 0-adiacente

e si è trovato che il numero g_0 di gaps di questi oggetti è esprimibile come combinazione lineare dei numeri delle proprie i-celle, ossia delle celle di dimensione i , e precisamente che:

$$g_0 = \sum_{i=0}^3 (-1)^{i+1} 2^i c_i$$

Pubblicazioni:

- Giorgio Nordo, Angelo Maimone, 0-Gaps on 3D Digital Curves. In Applied Mathematics and Mathematical Physics (orig: Prikladnaja Matematika I Matematicheskaja Fizika) - ISSN: 2312-0975, vol.1(1),2015,pp.119-128,DOI:10.18262/ammp.2015.0101-08
- (url <http://schoolofscience.mfua.ru/journal/issues/tom-1-1-2015/>)
-

Collaborazioni:

- R.P. Barneva (State University of New York at Fredonia)
- V.E. Brimkov (State University of New York at Buffalo State)
- A. Maimone (Dottore di Ricerca, Università di Messina)

5.6 Gruppo di Ricerca in: Analisi Numerica

Titolo della ricerca: Modelli Matematici nelle Scienze Applicate

Componenti: Riccardo Fazio, Alessandra Jannelli, Luigia Puccio

Descrizione della ricerca: gli afferenti al gruppo coprono tutti gli aspetti dell'analisi numerica e della matematica computazionale con riferimento allo studio di modelli di interesse applicativo, allo sviluppo e all'analisi di algoritmi con relativo software specializzato.

I modelli matematici descritti da sistemi di equazioni differenziali rivestono un importante ruolo in molte moderne applicazioni. Uno degli obiettivi principali dell'attività di ricerca consiste nello studio e nello sviluppo di metodi numerici per l'integrazione di tali modelli nei diversi ambiti delle scienze applicate e nell'implementazione del software relativo. In particolare ci si propone di sviluppare metodi numerici alle differenze finite ed ai volumi finiti per l'integrazione numerica di problemi di interesse applicativo, anche in ambito industriale, come per esempio problemi di evoluzione e di frontiera libera. Lo studio e l'analisi di tali metodi, inoltre, sono completati dallo sviluppo di software integrato in librerie di sottoprogrammi in FORTRAN ed in MATLAB.

In relazione all'attività di ricerca sopra descritta, le principali tematiche sono:

1. Modelli matematici e metodi numerici per problemi di evoluzione;

2. Modelli matematici e metodi numerici per problemi di frontiera libera;
3. Invarianza di scala e metodi numerici;
4. Metodi numerici per problemi ai valori al contorno su domini infiniti.

L'interesse scientifico del gruppo di ricerca è rivolto verso le applicazioni della matematica anche in ambito industriale, applicazioni che comprendono problemi di sicurezza informatica e biometria, elaborazione di segnali e di immagini con applicazioni anche in ambiente biomedico, restoration di immagini, approssimazione di dati sperimentali e costruzione del software scientifico relativo.

In relazione all'attività di ricerca sopra descritta, le principali tematiche riguardano:

1. Metodi di approssimazione in vari spazi di funzione con particolare riferimento a funzioni wavelet. Studio, costruzione, implementazione e analisi di algoritmi per l'applicazione dei metodi a problemi di elaborazione di segnali e immagini. I risultati della ricerca sono contenuti in alcune note scientifiche in corso di stampa.
2. Nel settore dell'elaborazione di dati si sono analizzate la teoria e le applicazioni di specifiche classi di sistemi di suddivisione, wavelets e relativi sistemi di filtri per mezzo di nuove tecniche di suddivisione con formulazione stocastica. I risultati della ricerca sono contenuti in alcune note scientifiche in corso di stampa.

Publicazioni:

1. R. Fazio e A. Jannelli. Well-Posed Initial Conditions and Numerical Methods for One-Dimensional Models of Liquid Dynamics in a Horizontal Capillary, *Computational and Applied Mathematics*, pp. 1-11, 2015.
2. R. Fazio. A Posteriori Error Estimator for a Front-Fixing Finite Difference Scheme for American Options, *Lecture Notes in Engineering and Computer Science: Proceeding of World Congress on Engineering 2015*, 1-3 July 2015, London, U.K., pp 691-696, 2015.

Partecipazione e Comunicazioni a Congressi:

- R. Fazio. A Posteriori Error Estimator for a Front-Fixing Finite Difference Scheme for American Options. *World Congress on Engineering 2015*, 1-3 Luglio 2015, Londra.
- R. Fazio, A. Insana and A. Jannelli. Front Fixing Finite Difference Schemes for American Put Options Model. *International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM 2015)*, 23—29 Settembre 2015, Rodi, Grecia.
- Luigia Puccio. Digital Painting Representation Analysis for Artist Identification, *Adunanza Scientifica dell'Accademia Peloritana dei Pericolanti*, classe FMN. del 15/06/2015.

Collaborazioni

- Mattias Holschneider, Mathematics Department, University of Potsdam, Germany;
- Gerardo Iovane, Dipartimento di Informatica, Università di Salerno;
- Mariantonia Cotronei, Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione, delle Infrastrutture e dell'Energia Sostenibile, Università Mediterranea di Reggio Calabria;
- Francesca Pitolli, Dipartimento di Scienze di Base e Applicazioni per l'Ingegneria, Università di Roma "La Sapienza";
- Catterina Dgnino, Dipartimento di Matematica "Giuseppe Peano", Università di Torino.

Altro

1. Tutti i componenti del gruppo di ricerca sono Aderenti al Gruppo Nazionale per il Calcolo Scientifico (GNCS) dell'INdAM.
2. Per quanto riguarda Luigia Puccio:
 1. è stata Componente del Senato Accademico dell'Università di Messina, come rappresentante dell'Area 01 - Matematica e Informatica per il quadriennio 2013-2016 (mandato conclusosi il 30/9/2015, per entrata in vigore del nuovo Statuto dell'Università di Messina, che modifica radicalmente la composizione di questo Organo);
 2. è Componente del Gruppo di Lavoro Open Access dell'Università di Messina;
 3. è Componente del Gruppo di Attività SIMAI: SIMAI-SIMA (Signals, Images, Modeling and Approximation);
 4. è Coordinatore del Corso di Laurea in Informatica dal 21/12/2015

5.7 Gruppo di ricerca in Informatica

Componenti: S. Agreste, S. Distefano, G. Fiumara

Tematiche di ricerca

- 1. Analisi di reti sociali.** L'attività di ricerca nel settore delle reti sociali si concentra sull'applicazione delle tecnologie della Social Network Analysis a reti di particolare interesse. Nello specifico sono state analizzate reti bipartite composte da oggetti culturali e da utenti umani.
- 2. Analisi della robustezza di reti criminali ad attacchi interni ed esterni.** Le reti criminali non possono essere studiate con gli strumenti della Social Network Analysis a causa delle loro caratteristiche (incompletezza delle informazioni, particolarità del flusso delle informazioni e della topologia). Un aspetto particolarmente interessante è dato dalle caratteristiche di resilienza delle reti criminali rispetto ad attacchi di natura esogena (gruppi concorrenti o forze di polizia/intelligence) o di natura endogena (spinte secessioniste o lotte per il potere).
- 3. Analisi delle prestazioni e relativa ottimizzazione di codici per lo studio numerico di sistemi modello di interesse fisico.** Le miscele binarie di sfere rigide caratterizzate da fortissima asimmetria sono spesso studiate perché permettono di comprendere alcuni fenomeni caratteristici delle miscele colloidali, nello specifico il demiscelamento noto come effetto Asakura-Oosawa. I coefficienti del quinto ordine del viriale (utilizzati nell'equazione di stato) sono stati ottenuti mediante simulazione Monte Carlo.
- 4. Affective computing.** L'attività di ricerca nell'ambito dell'affective computing si focalizza prevalentemente nello studio della rappresentazione di paradigmi computazionali attraverso emozioni (emotion-based). Gli studi hanno portato alla definizione di alcune architetture cognitive bio-inspired (bio-inspired cognitive architecture) basate su neuromodulatori (serotonina, noradrenalina, dopamina) che adattano ed estendono il modello Cube of Emotion di Lovheim al contesto computazionale. Nella stessa attività si inquadra il lavoro relativo al modello P3 (Physiology-Psychology-Philosophy), che propone una architettura computazionale modulare a livelli strutturando meccanismi e politiche in maniera gerarchica.
- 5. Internet of Things.** L'attività nell'ambito dell'Internet of Things si è focalizzata in un nuovo paradigma che implementa una visione utilitaristica dell'IoT. L'idea è di gestire le things, raccolte, aggregate, uniformate e virtualizzate, col paradigma as a service utilizzando il modello Cloud Computing. Questa visione la si sta implementando in Stack4Things, estendendo OpenStack per la gestione di dispositivi mobili e schede che costituiscono gli elementi base dell'infrastruttura IoT.
- 6. Cloud computing.** In ambito Cloud si è prevalentemente lavorato al progetto Cloud@Home, che propone un paradigma di calcolo innovativo per estendere il Cloud con la contribuzione volontaria caratteristica di altre forme di computazione quali Volunteer, Peer to Peer e Global computing. In particolare l'attività di ricerca si è focalizzata verso l'implementazione di tale paradigma utilizzando ed estendendo soluzioni preesistenti quali OpenStack e WAMP.

Pubblicazioni

1. M. L. de Haro, C. F. Tejero, A. Santos, S. B. Yuste, G. Fiumara, F. Saija, Erratum: "Virial coefficients and demixing in the Asakura-Oosawa model", *Journal of chemical physics* 143 (2), 9902 2015.
2. A. Santos, M. L. de Haro, G. Fiumara, F. Saija: "The effective colloid interaction in the Asakura-Oosawa model. Assessment of non-pairwise terms from the virial expansion", *The Journal of chemical physics* 142 (22), 224903, 4, 2015.
3. M. L. de Haro, C. F. Tejero, A. Santos, S. B. Yuste, G. Fiumara, F. Saija, "Virial coefficients and demixing in the Asakura-Oosawa model", *The Journal of chemical physics* 142 (1), 014902 5, 2015.
4. B. Bonasera, E. Ferrara, G. Fiumara, F. Pagano, A. Proveti, "Adaptive search over sorted sets", *Journal of Discrete Algorithms* 30, 128-133, 2015.
5. E. Ferrara, S. Catanese, G. Fiumara, "Uncovering criminal behavior with computational tools", *Social Phenomena*, 177-207, 2015.

6. S. Agreste, P. De Meo, E. Ferrara, S. Piccolo, A. Provetti, “Trust Networks: Topology, Dynamics and Measurements”, *IEEE Internet Computing*, 19(6), 26–35, 2015.
7. S. Agreste, P. De Meo, E. Ferrara, S. Piccolo, and A. Provetti, “Analysis of a heterogeneous social network of humans and cultural objects”, *Transactions on Systems, Man and Cyber*, 45(4): 559–570, 2015.
8. S. Distefano, “Dependability Assessment of Critical Systems”, In *Journal of Ambient Intelligence and Humanized Computing*, 2015, Springer Publisher.
9. S. Distefano, G. Merlino, and A. Puliafito, “Device-centric Sensing: an Alternative to Data-centric Approaches”, In *IEEE Systems Journal*, 2015, IEEE Publisher.
10. S. Distefano, F. Longo, M. Scarpa “QoS Assessment of Mobile Crowdsensing Services” In *Journal of Grid Computing*, 2015, Springer Netherlands.
11. S. Distefano, M. Scarpa, and A. Puliafito. “The Software Performance Engineering Development Process”, in *International Journal of Software Engineering and Knowledge Engineering*, 2015, (ISSN: 0218-1940), World Scientific Publishing.
12. G. Merlino, D. Bruneo, S. Distefano, F. Longo, A. Puliafito, A. Al-Anbuky “A Smart City lighting case study on OpenStack-powered infrastructure” *Sensors*, 2015, Vol 15, No 7, pp 16314–16335, MDPI.
13. J. Carretero, S. Distefano, D. Petcu, D. Pop, T. Rauber, G. Runger, D. E. Singh “Energy-Efficient Algorithms for Ultrascale Systems” *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 2015, Vol 2, No 2, pp 77–104.
14. G. Merlino, S. Distefano, C. Papagianni, S. Arkoulis, A. Puliafito and S. Papavassiliou, “Mobile CrowdSensing as a Service: a platform for applications on top of Sensing Clouds”, *Future Generation Computer Systems*, 2015, Elsevier Publisher.

Partecipazione e Comunicazioni a Congressi:

- S. Agreste, P. De Meo, M. Marchi, M.F. Milazzo, S. Nunnari and A. Provetti, A case study on graph-based planning for emergency evacuation. *CEUR Workshop Proceedings*. 1459, 46–52, 2015.
- J. Vallverdu, M. Talanov, R. Delhibabu, S. Distefano, M. Mazzara “Neuromodulating Cognitive Architecture A New Step Towards Biomimetic Emotional AI” *The 29th IEEE International Conference on Advanced Information Networking and Applications (AINA-2015)*, Gwangju, South Korea, March 24-27, 2015.
- M. Bridges, S. Distefano, M. Mazzara, M. Minlebaev, M. Talanov, J. Vallverdu “Towards Anthropo-inspired Computational Systems” *The 9th International KES Conference on Agents and Multi-agent System: Technologies and Applications*, Sorrento, Italy, June 17-19, 2015.
- D. Bruneo, S. Distefano, F. Longo, G. Merlino, A. Puliafito “Software Defined Cities: a novel paradigm for Smart Cities through IoT Clouds” *The IEEE International Conference on Big Data and Cloud Computing - CBDCOM 2015*, Beijing, China, August 10-14, 2015.
- G. Merlino, D. Bruneo, S. Distefano, F. Longo and A. Puliafito, “Stack4Things: an OpenStack-based SAaaS framework for the Internet of Things” *International Conference on Cloudification of the Internet of Things, CIoT 2015*, June 10-11, 2015, Paris, France.
- F. Longo, D. Bruneo, S. Distefano, G. Merlino, and A. Puliafito, “Stack4Things: an OpenStack-based framework for IoT”, *Future Internet of Things and Cloud (FiCloud)*, 2015 International Conference on, Aug, 2015.
- G. Merlino, D. Bruneo, F. Longo, S. Distefano, A. Puliafito, “Cloud-Based Network Virtualization: An IoT Use Case” *International Conference on Ad Hoc Networks*, 12 November 2015, SanRemo, Italy. Vol. 155 of *Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social Informatics and Telecommunications Engineering* pp 199-210, Springer.
- S. Distefano, G. Merlino and A. Puliafito. “An OpenStack-based Implementation of a Volunteer Cloud” *Fourth European Conference on Service-Oriented and Cloud Computing (ESOCC 2015) - 1st International Workshop on Federated Cloud Networking, Communications in Computer and Information Science (CCSI)*: Springer Berlin Heidelberg, 2015.
- G. Merlino, D. Bruneo, S. Distefano, F. Longo and A. Puliafito, “Enabling mechanisms for Cloud-based network virtualization in IoT,” *Internet of Things (WF-IoT)*, 2015 IEEE 2nd World Forum on, Milan, 2015, pp. 268-273.

Collaborazioni

- Salvatore Catanese, Università degli Studi di Catania, Dottorato di Ricerca in Matematica e Informatica, XXIX Ciclo.
- Pasquale De Meo, Dipartimento di Civiltà Antiche e Moderne, Università degli Studi di Messina.

- Emilio Ferrara, University of Southern California.
- Mariano Lopez de Haro, Instituto de Energias Renovables, Universidad Nacional Autonoma de Mexico.
- Santos Bravo Yuste, Departamento de Fisica and Instituto de Computacion Cientifica Avanzad, Universidad de Extremadura.
- Carlos F Tejero, Facultad de Ciencias Fisicas, Universidad Complutense de Madrid.
- Andres Santos, Departamento de Fisica and Instituto de Computacion Cientifica Avanzada (ICCAEx), Universidad de Extremadura.
- Franz Saija, CNR-IPCF, Messina.
- A. Al-Anbuky, AUCKLAND UNIVERSITY OF TECHNOLOGY, AUCKLAND, NEW ZEALAND.
- C. Papagianni, NTUA Athens, Greece.
- S. Arkoulis, NTUA Athens, Greece.
- S. Papavassiliou, NTUA Athens, Greece.
- J. Carretero, University Carlos III of Madrid, Spain.
- D. Petcu, West University of Timisoara, Romania.
- D. Pop, West University of Timisoara, Romania.
- T. Rauber, University Bayreuth, Germany.
- G. Runger, Technical University Chemnitz, Germany.
- D. E. Singh, University Carlos III of Madrid, Spain.
- Jordi Vallverdu, Universitat Autònoma de Barcelona, Catalonia, Spain.
- Max Talanov, Kazan Federal University, Russia .
- Radhakrishnan Delhibabu, Kazan Federal University, Russia.
- Manuel Mazzara, Innopolis University, Russia.
- Mike Bridges, Carnegie Mellon University, iCarnegie Global Learning, Pittsburg, USA.
- Marat Minlebaev, Institut de Neurobiologie de la Mediterranee, Aix-Marseille University, France

5.8 Ricerca in “Informatica INF/01”

Componente: A. Provetti

Temi di ricerca

Algoritmica sperimentale: lo sviluppo di idee originate dalla tesi di Biagio Bonasera ha portato ad un nuovo algoritmo [3] per la ricerca su dataset ordinati che combina e migliora le prestazioni dei canonici algoritmi binary search e interpolation search. In sostanza viene minimizzato il numero di accessi alla struttura dati rispetto ad un semplice arbitrage fra gli indici suggeriti da binary e interpolation. Abbiamo verificato sperimentalmente l'incremento di prestazioni, sia su benchmark sintetici, con controllo della sparsita', che su dataset reali, estratti dallo spazio degli ID utente di Facebook.

Data mining: nelle c.d. *Computational Social Sciences* l'attivita' degli utenti di piattaforme di “social web” viene aggregata e valutata per trovare una semantica emergente dei comportamenti. Lo sviluppo del lavoro di tesi di Sebastiano Piccolo ha portato [1] a una caratterizzazione completa delle attivita'-utente sulla piattaforma anobii; abbiamo osservato la distribuzione fortemente asimmetrica del livello di partecipazione a gruppi di discussione e dell'attribuzione di tag (quindi di una semantica) a libri.

Successivamente, gli stessi autori hanno considerato l'evoluzione (e la direzione) delle interazioni online come indicatore dell'emergere di una relazione di fiducia (trust) fra utenti [2]. Abbiamo considerato sia interazioni basate su discussioni e recensioni, con dataset estratti da e-pinions e ciao, che attivita' finanziarie con micro-prestiti fra privati (piattaforma prosper). Il nostro lavoro indica che i modelli generativi correnti, come per esempio forest fire, non riescono a catturare la dinamica temporale da cui emerge il trust.

Programmazione dichiarativa: il lavoro di tesi di Salvatore Nunnari ha portato alla creazione di un pianificatore automatico per il ri-calcolo dei piani d'evacuazione in emergenza [4]. Questo progetto rappresenta una validazione sperimentale dello stack di programmazione dichiarativa con Answer set programming, e della capacita' del linguaggio di rappresentazione della conoscenza di catturare in modo

preciso e completamente dichiarativo (senza cioè dover riscrivere né cancellare alcun codice) il variare delle condizioni operative che richiedono interventi coordinati di protezione civile.

Il case study considerato è il piano d'evacuazione compilato dalla Prefettura di Messina per la zona circostante la raffineria di petrolio di Milazzo. La validazione dei piani proposti dal nostro software è stata effettuata da un ingegnere esperto del corpo dei VVFF.

Pubblicazioni

1. S. Agreste, P. De Meo, E. Ferrara, S. Piccolo A. Provetti, 2015. *Trust Networks: Topology, Dynamics and Measurements*. IEEE Internet Computing, Vol. 19:6, pp. 26--35. DOI: <http://dx.doi.org/10.1109/MIC.2015.93>
2. S. Agreste, P. De Meo, E. Ferrara, S. Piccolo, and A. Provetti, 2015. *Analysis of a heterogeneous social network of humans and cultural objects*. IEEE Trans. on Systems, Man and Cybernetics: Systems, Vol. 45:4, pp. 559--570. DOI: <http://dx.doi.org/10.1109/TSMC.2014.2378215>
3. B. Bonasera, E. Ferrara, G. Fiumara, F. Pagano and A. Provetti, 2015. *Adaptive search over sorted sets*. Journal of Discrete Algorithms, Vol. 30, pp. 128--133. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jda.2014.12.007>
4. S. Agreste, P. De Meo, M. Marchi, M.F. Milazzo, S. Nunnari, and A. Provetti, 2015. *A case study on graph-based planning for emergency evacuation*. CILC 2015, Italian Conf. on Computational Logic. CEUR-WS series, Vol. 1459, pp. 46--52. Web: <http://ceur-ws.org/Vol-1459/>

Partecipazione e Comunicazioni a Congressi:

IC2S2: International Conference on Computational Social Sciences, Helsinki Web: <http://www.iccss2015.eu/>

Comitati di programma

ICSC: IEEE Int'l Conference on Semantic Computing;

WIMS: Int'l Conference on Web Intelligence, Mining and Semantics;

AMW: 9th Alberto Mendelzon Workshop on Foundations of Data Management;

EAP Cogsci: EuroAsianPacific Joint Conference on Cognitive Science;

CILC: Convegno Italiano di Logica Computazionale

Collaborazioni

- Pasquale De Meo, dipartimento DICAM.
- M. Francesca Milazzo, dipartimento d'Ingegneria.
- Stefania Costantini, dip. d'Informatica, Univ. degli Studi di L'Aquila.
- Mario Ornaghi, dip. d'Informatica, Univ. degli Studi di Milano
- Angelo Montanari, dip. d'Informatica e Matematica, Univ. degli Studi di Udine
- Luca M. Aiello, Yahoo Europe Ltd, Londra.
- Emilio Ferrara, University of Southern California.
- Tim Furche, Oxford University, UK.
- Sebastian Ventura, Univ. de Cordoba, Spagna.
- Pedro Cabalar, Univ. de La Coruna, Spagna.
- Carles Sierra e Nardine Osman, IIIA-CSIC, Spagna.

Altro

Valutazione di progetti di ricerca industriale su bando regionale.

5.9 Gruppo di Ricerca in “Algebre con identità funzionali e metodi combinatori.”

Componenti: Luisa Carini, Vincenzo De Filippis

Tematiche scientifiche

1. **Algebre prime e semiprime con identità funzionali.** Una identità funzionale (FI) in un'Algebra può essere informalmente descritta come una identità che coinvolge elementi arbitrari dell'Algebra con

funzioni (a priori sconosciute). Più precisamente, un polinomio funzionale è costruito attraverso la composizione di elementi dell'Algebra con le valutazioni delle funzioni in essa definite. L'obiettivo della Teoria delle FI è in generale quello di determinare la forma delle funzioni che compaiono nei polinomi funzionali considerati, ovvero determinare la struttura di un'Algebra soddisfacente opportune FI.

Le FI sono strettamente connesse ai problemi sulle mappe di Lie in anelli, per le quali I.N. Herstein nel 1961 formulò un programma di studi nel caso di anelli associativi primi. Recentemente, una serie di autori (Beidar, Brešar, Mikhalev e Martindale III) hanno fornito soluzioni complete alle congetture di Herstein sugli Omomorfismi di Lie e le Derivazioni di Lie.

L'obiettivo della teoria delle FI è in definitiva quello di ottenere risultati su mappe che preservino le proprietà algebriche degli elementi. In letteratura le FI maggiormente studiate possono assumere denominazioni differenti, in dipendenza delle funzioni tramite le quali vengono costruite.

In particolare, se le funzioni sono polinomi, le FI coincidono con le identità polinomiali (PI). Se le funzioni sono derivazioni, le FI vengono dette identità differenziali (DI). Se le funzioni sono derivazioni generalizzate, le FI sono dette identità differenziali generalizzate (GDI). Infine, se le funzioni sono mappe additive definite tramite derivazioni generalizzate ed automorfismi (meglio note come α -derivazioni generalizzate o derivazioni generalizzate sghembe o oblique), le FI sono dette identità α -differenziali generalizzate, note anche come "skew generalized differential identities" (SGDI).

La nostra attenzione è stata rivolta allo studio della composizione di mappe additive e le condizioni di tipo Engel da esse soddisfatte. In particolare si sono affrontati i casi in cui una derivazione generalizzata e/o una derivazione generalizzata sghemba soddisfa condizioni di tipo Engel su ideali sinistri/destri di un anello primo, oppure sull'insieme delle valutazioni di un polinomio multilineare oppure anche su gli elementi di un ideale di Lie dell'anello stesso (vedi pubblicazioni 1-8).

Si sono quindi ottenute sia una completa descrizione delle mappe coinvolte, che una descrizione della struttura delle Algebre soddisfacenti le identità funzionali introdotte.

- 2. Metodi combinatori per il calcolo dei pletismi delle funzioni di Schur.** Tale attività di ricerca si svolge nell'ambito della Teoria delle funzioni simmetriche ed è rivolta allo studio dei pletismi di funzioni di Schur con particolare riferimento al pletismo del polinomio di Newton (o somma di potenze) con una funzione di Schur. Un problema fondamentale in tale ambito è quello di determinare quale di questi pletismi sia privo di molteplicità, nel senso che gli unici coefficienti che intervengono nella loro decomposizione in somma di funzioni di Schur siano 0, 1, -1. Tali pletismi hanno importanti applicazioni nell'ambito della Teoria della rappresentazione del gruppo simmetrico, della Teoria degli invarianti e della Fisica. La ricerca è tuttora in corso di svolgimento.

Publicazioni

1. V. De Filippis, L. Oukhtite, Generalized Jordan semiderivations in prime rings, *Canadian Math. Bulletin* 58 (2015), 263-270.
2. V. De Filippis, Generalized skew derivations as Jordan homomorphisms on multilinear polynomials, *Journal of Korean Math. Soc.* 52/1 (2015), 191-207.
3. V. De Filippis, G. Scudo, Generalized derivations which extend the concept of Jordan homomorphism, *Publicationes Mathematicae Debrecen* 86 (2015), 187-212.
4. V. De Filippis, O.M. Di Vincenzo, Generalized Skew Derivations on Semiprime Rings, *Linear Multilinear Algebra* 63/5 (2015), 927-939.
5. V. De Filippis, C. Demir, Generalized skew derivations on Lie ideals, *Bulletin of the Institute of Mathematics - Academia Sinica New Series* 10/1 (2015), 113-129.
6. B. Dhara, V. De Filippis, K. G. Pradhan, Generalized derivations with annihilator conditions in prime rings, *Taiwanese J. Math.* 19/3 (2015), 943-952.
7. V. De Filippis, S. Huang, Power-commuting skew derivations on Lie ideals, *Monatshefte für Mathematik* 177/3 (2015), 363-372.
8. V. De Filippis, N. ur Rehman, A.Z. Ansari, Lie Ideals and Generalized Derivations in Semiprime Rings, *Iranian Journal of Mathematical Sciences and Informatics* 10/2 (2015), 45-54.

Collaborazioni

- Vesselin Drensky: Institute of Mathematics and Informatics, Bulgarian Academy of Sciences, Bulgaria

- Jeffrey Remmel: University of California, San Diego, USA
- F. Wei: Beijing Institute of Technology – Cina
- O.M Di Vincenzo: Università di Potenza
- N. Argac, E. Albas, C. Demir: Ege University, Izmir, Turchia
- B. Dhara: Belda College, Belda, India
- R. K. Sharma: Indian Institute of Technology, India
- S. Ali, A. Ali, N. Rehman, M. Ashraf: Aligarh Muslim University, India
- M. N. Daif: Al-Azhar University, Egitto
- S. Huang: Chuzhou University, Cina
- A. Fosner: University of Primorska, Cankarjeva, Koper, Slovenia

Altro

Vincenzo De Filippis è stato membro del comitato scientifico del "International conference on recent advances in mathematical biology, analysis and applications", svoltosi ad Aligarh (India) dal 4 al 6 Giugno 2015.

5.10 Gruppo di Ricerca in Algebra Commutativa e Combinatoria

Componenti: Restuccia Gaetana, Crupi Marilena, Utano Rosanna, Imbesi Maurizio

Tematiche scientifiche

1. Classi di ideali monomiali “squarefree” e loro invarianti algebrici. Sia $S = K[x_1, \dots, x_n]$ un anello di polinomi in n variabili a coefficienti in un campo K . Una tra le classi più note di ideali monomiali dell’anello S è quella costituita dagli ideali monomiali squarefree, ovvero dagli ideali generati da monomi squarefree (liberi da quadrati). Tali ideali sono fortemente legati ai complessi simpliciali e più precisamente all’ideale di Stanley-Reisner del complesso simpliciale. Un noto risultato stabilisce infatti che ad ogni ideale monomiale di S , generato da monomi squarefree di grado ≥ 2 , è possibile associare in modo naturale un complesso simpliciale Δ su n vertici. Molti algebristi commutativi hanno studiato le proprietà combinatoriche di ideali squarefree assegnando sull’anello S un *ordinamento monomiale*. Numerosi sono i risultati ottenuti ordinando S rispetto all’ordinamento lessicografico (squarefree), pochi invece nel caso di altri ordinamenti monomiali su S . E’ stato pertanto intrapreso lo studio di ideali monomiali squarefree in anelli S in cui è definito quello lessicografico inverso (squarefree).

Sono state studiate inoltre proprietà dell’algebra simmetrica degli ideali lato e Z -complessi di ideali lato di grafi (anch’essi squarefree). Un’ulteriore aspetto della ricerca ha riguardato lo studio degli alberi ricoprenti e dei complessi simpliciali ricoprenti di grafi ciclici, di ideali dei ricoprimenti di vertici per ideali grafo generalizzati e, infine, di ideali lato di grafi generati da d -successioni.

2. Invarianti algebrici di algebre graduate. Siano K un campo, V uno spazio vettoriale di dimensione finita ed E l’algebra esterna di V . Dallo studio della funzione di Hilbert dell’algebra graduata E/J si osserva come teoremi classici sulle funzioni di Hilbert per ideali graduati nell’anello dei polinomi abbiano i loro analoghi nella teoria delle algebre esterne. Ad esempio il teorema di Macaulay che descrive tutte le possibili funzioni di Hilbert di K -algebre standard graduate può essere formulato per algebre graduate del tipo E/J , e nel caso in cui J sia un ideale monomiale, si ritrova esattamente il Teorema di Kruskal-Katona. Tale teorema è fondamentale se si vogliono studiare gli invarianti algebrici, quali la profondità, la regolarità di Castelnuovo Mumford e i numeri di Betti graduati, di ideali graduati di un’algebra esterna con assegnata funzione di Hilbert.

Una congettura fatta da Richard Stanley nel suo articolo “*Linear Diophantine equations and local cohomology*” (1982) riguarda un limite superiore per la profondità di un modulo multigradato. Precisamente Stanley ha congetturato che, se M è un S -modulo finitamente generato \mathbb{Z}^n -graduato, allora si verifica che $depth M \leq sdepth M, \forall M$. Questo limite superiore congetturato è oggi chiamato la *Stanley depth* del modulo. La congettura è difficile da provare perché mette a confronto due invarianti di moduli di natura molto diversa; infatti la Stanley depth è un invariante puramente combinatorio e non dipende dal campo K , mentre la depth è un invariante omologico e, nel caso di ideale monomiale squarefree, un invariante topologico del complesso simpliciale associato, che potrebbe dipendere dal

campo K . Per calcolare la Stanley depth di un modulo si dovrebbero considerare tutte le possibili decomposizioni di Stanley del modulo, che sappiamo essere infinite. In generale non è noto alcun algoritmo per il calcolo della Stanley depth. La congettura di Stanley è stata verificata per la classe degli ideali di prodotti misti, introdotta da Restuccia e Villarreal nel 2001.

Si è studiata inoltre l'algebra simmetrica di moduli su anelli commutativi noetheriani, finitamente generati da una s -successione, in particolare di ideali generati da una s -successione. Nella classe di ideali di prodotti misti è nota la classificazione (dovuta a M. La Barbiera-G. Restuccia) degli ideali di prodotti misti generati da una s -successione. Per altre classi di ideali di prodotti misti "vicini" a quelli precedenti, ma non generati da una s -successione, è possibile ancora calcolare gli invarianti algebrici della loro algebra simmetrica. Sono quelli costruiti con ideali generati da s -successioni. Il caso generale è aperto.

3. Semigruppri numerici generalizzati. Semigruppri e monoidi sono oggetti fondamentali in algebra e il loro studio ha portato a nuovi approfondimenti in diversi campi tra cui la teoria dei gruppi, la geometria algebrica, la teoria dei codici. Numerosi sono i risultati riguardanti semigruppri numerici $S \subseteq \mathbb{N}$. Sono stati introdotti e studiati i semigruppri numerici generalizzati (GNS), che sono sottomonoidi cofiniti $S \subseteq \mathbb{N}^d$. La cardinalità di $\mathbb{N}^d \setminus S$ è il genere g di S . E' stata descritta una famiglia di algoritmi, parametrizzati da ordini monomiali, che può essere utilizzata per generare gli alberi di semigruppri con ogni GNS che appare esattamente una volta. Il numero $N_{g,d}$ dei semigruppri numerici $S \subseteq \mathbb{N}^d$ di genere g viene calcolato per piccoli valori di g, d e vengono studiati limiti asintotici per grandi valori di g . Per un g fissato, $F_g(d) = N_{g,d}$ è stato provato essere una funzione polinomiale di grado g .

Publicazioni

1. M. Crupi, C. Ferrò, *Squarefree revlex ideals*, Journal of Commutative Algebra, Volume 7, Number 1, Spring, 9-23, 2015.
2. M. Crupi, *Algebraic invariants of graded ideals with a given Hilbert function in an exterior algebra*, Bull. Math. Soc. Sci. Math. Roumanie, Tome 58(106) No. 4, 2015, 393-403.
3. M. Crupi, C. Ferrò, *Bounding Betti numbers of monomial ideals in the exterior algebra*, Pure Appl. Math. Q., Volume 11, Number 2, 267-281, 2015.
4. G. Failla, C. Peterson, R. Utano, *Algorithms and Asymptotics for Generalized Numerical Semigroups in \mathbb{N}^d* , Semigroup Forum, Pubblicato online: 31 Gennaio 2015, DOI: 10.1007/s00233-015-9690-8 su rivista: Aprile 2016, Volume 92, Issue 2, pp 460-473.
5. G. Restuccia, Z. Tang, R. Utano, *Stanley Conjecture on monomial ideals of mixed products*, 2015, Journal of Commutative Algebra, Volume 7, Number 1, Spring 2015, 77-88.
6. G. Failla, M. Lahyane, R. Utano, J.B. Frías Medina, *Geometry of Rings: An Elementary Introduction*, Boll. di Mat. Pura ed appl., Vol. VIII (2015), 1-105.
7. G. Restuccia, P. L. Stagliano, *Ideals generated by linear forms and symmetric algebras*, Mathematics and its applications, Vol.7, N.2 (2015).
8. M. Imbesi, M. La Barbiera, Z. Tang, *Some monomial sequences arising from graphs*, Bull. Korean Math. Soc., **52**, 4 (2015), 1201-1211.
9. M. Imbesi, M. La Barbiera, *Theoretic properties of the symmetric algebra of edge ideals*, Bull. Belg. Math. Soc. Sim., **22**, 2 (2015), 331-342.
10. M. Imbesi, M. La Barbiera, Z. Tang, *On the graphic realization of certain monomial sequences*, J. Alg. Appl., **14**, 5 (2015).
11. M. Imbesi, M. La Barbiera, *On a class of vertex cover ideals*, Anal. Stiint. Univ. Al. I. Cuza Iasi (S.N) Mat., **61**, 2 (2015), 319-326.
12. S. Heidarkhani, M. Imbesi, *Multiple solutions for partial discrete Dirichlet problems depending on a real parameter*, J. Diff. Equat. Appl., **21**, 2 (2015), 96-110.
13. M. Imbesi, M. La Barbiera, *On algebraic properties of Veronese bi-type ideals arising from graphs*, Turk. J. Math., (online 11/10/2015), doi: 10.3906/mat-1505-49

Partecipazioni e comunicazioni a congressi:

- M. Crupi, *Algebraic invariants of graded ideals in an exterior algebra*, XX Congresso dell'Unione Matematica Italiana, Siena, 7-12 Settembre 2015

- R. Utano, *Invariants of the symmetric algebra of the first syzygy of a graded maximal ideal*, Conference on Combinatorial aspects in commutative algebra and graph theory, Messina, 7 Luglio 2015
- R. Utano, *On invariants of certain symmetric algebras*, Workshop On the Algebraic-Geometric-Combinatoric Aspects of Projective Varieties, Messina, 12-13 Novembre 2015.
- R. Utano, *Jacobian duality and Groebner bases*, II Incontro ACCA&AP-SIMAI, Messina, 11 Novembre 2015.
- G. Restuccia, *Rees algebras of modules not generated by an s-sequence*, Conference on Combinatorial aspects in commutative algebra and graph theory, Messina, 7 Luglio 2015.
- M. Imbesi, *Algebraic approaches in solving discrete Dirichlet problems*, Conference on Combinatorial aspects in commutative algebra and graph theory, Messina, 7 Luglio 2015.
- M. Imbesi, *Blowing-up of the projective plane at a finite number of points*, Workshop On the Algebraic-Geometric-Combinatoric Aspects of Projective Varieties, Messina, 13 Novembre 2015.
- G. Restuccia, *Groebner bases in Birkhoff model*, II Incontro ACCA& AP SIMAI , 11 Novembre 2015, Messina

Collaborazioni

- Prof. Zhongming Tang , Suzhou University, Cina.
- Prof. Juergen Herzog, Università di Essen, Germania.
- Prof. Viviana Ene, Università di Costanza, Romania.
- Prof. Mustapha Lahyane, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Messico.
- Prof J. B. Frías Medina, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Messico.
- Prof. Brenda De La Rosa Navarro, University of Baja California, Messico.
- Prof. Gioia Failla, Università di Reggio Calabria.
- Prof. S. Heidarkhani, Univ. Razi, Iran.
- Prof. G. Molica Bisci, Univ. Reggio Calabria.
- Dr M. La Barbiera, Dr. P.L. Staglianò, Univ. Messina.

Altro

Tesi di dottorato (Gaetana Restuccia):

1. Annamaria Stanganelli (Unipa), relatrice: Algebre simmetriche di ideali di prodotti misti
2. Pietro Milici (Unipa) (correlatrice): A quest for exactness: Machines, Algebra and Geometry for fractional constructions of differential equations
3. Vincenzo Iorfida (Unical)(correlatrice): Recenti sviluppi dell'Algebra e della Geometria Computazionale nell'Arte e nella Comunicazione

Organizzazione Convegni e Scuole:

- International School on Computational Commutative Algebra and Algebraic Geometry, Messina, 20-24 Aprile 2015
- II Incontro ACCA& AP SIMAI , 9-11 Novembre 2015, Messina
- Workshop On the Algebraic-Geometric-Combinatoric Aspects of Projective Varieties, Messina, 12-13 Novembre 2015.

Professori visitatori

- Prof. Zhongming TANG, Sozhou University, Cina (1-31luglio 2015) su finanziamento INDAM-GNSAGA (Prof. Gaetana Restuccia).
- Prof. Mustapha LAHYANE, University of Michoacan, Messico (19 Ottobre - 16 Novembre 2015) su finanziamento INDAM-GNSAGA (Prof. Rosanna Utano).

5.11 Gruppo di Ricerca in Metodi e Modelli in Fisica Matematica

Componenti: F. Oliveri, M. Speciale, R. Di Salvo, M. Gorgone

Tematiche scientifiche

- 1. Simmetrie e trasformazioni di equivalenza di equazioni differenziali.** La ricerca in questo ambito ha riguardato i legami tra equazioni alle derivate parziali del primo ordine con derivate in forma polinomiale e la loro trasformazione, suggerita dalle simmetrie di Lie ammesse, in forma polinomiale omogenea o quasilineare. Si è altresì considerato il problema del disaccoppiamento di sistemi quasilineari del primo ordine, e la costruzione di leggi di conservazione. I risultati sono stati presentati in convegni internazionali svolti nel 2015 e hanno prodotto la stesura di n. 5 preprint.
- 2. Modelli operatoriali per sistemi macroscopici.** La ricerca in questo ambito ha riguardato la scrittura di modelli operatoriali basati su operatori fermionici la cui evoluzione è regolata da un operatore Hamiltoniano auto-aggiunto indipendente dal tempo. Sono state analizzate le equazioni differenziali (sia lineari che non lineari). Un risultato notevole ha riguardato la descrizione della dinamica delle folle in un ambiente in cui è scattato un allarme, la modellizzazione di processi di desertificazione in un ecosistema, e la dinamica di colture batteriche sotto stress.
- 3. Analisi della seconda legge della termodinamica.** La ricerca in questo ambito ha riguardato l'analisi della disuguaglianza di Clausius-Duhem per sistemi continui con leggi costitutive non locali attraverso l'uso del metodo esteso di Liu proposto e descritto in alcuni lavori precedenti.

Pubblicazioni:

1. V. A. Cimmelli, F. Oliveri, A. R. Pace. A nonlocal phase-field model of Ginzburg–Landau–Korteweg fluids. *CONTINUUM MECHANICS AND THERMODYNAMICS*, **27**, pp. 367-378, 2015.
2. F. Bagarello, F. Gargano, F. Oliveri. A phenomenological operator description of dynamics of crowds: Escape strategies. *APPLIED MATHEMATICAL MODELLING*, **39**, 2276-2294, 2015.
3. F. Bagarello, F. Gargano, F. Oliveri, S. Spagnolo. Complessità e sport. *STRENGTH & CONDITIONING*, **IV**, pp. 2281-3772, 2015.

Partecipazioni e comunicazioni a congressi

- R. Di Salvo, RKHS interpolation based on random subdivision, Workshop on Subdivision, Refinability, Signals and Approximation, Berried (Germania), 2-6 Marzo 2015.
- M. Speciale, Construction of Autonomous Conservation Laws, WASCOM 2015, Cetraro, 1-5 Giugno 2015.
- F. Oliveri, First Order Partial Differential Equations: Symmetries, Equivalence and Decoupling. WASCOM 2015, Cetraro, 1-5 Giugno 2015.
- R. Di Salvo, Data interpolation using random subdivision techniques , WASCOM 2015, Cetraro, 1-5 Giugno 2015.
- M. Gorgone, Decoupling of first order quasilinear systems, WASCOM 2015, Cetraro, 1-5 Giugno 2015.
- F. Oliveri, First Order Partial Differential Equations: Equivalence and Decoupling, Workshop on “Integrable Nonlinear Equations”, Mikulov (Repubblica Ceca), 18-24 Ottobre 2015.
- M. Speciale, Assemblea Scientifica GNFM 2015, 22-24 ottobre 2015, Montecatini Terme (PT).

Collaborazioni.

- F. Bagarello (Università di Palermo).
- V. A. Cimmelli (Università della Basilicata).
- F. Gargano (Università di Palermo).
- A. R. Pace (Università della Basilicata).
- M. Ruggieri (Università Kore).
- S. Spagnolo (Università di Palermo).
- R. Vitolo (Università del Salento).

5.12 Gruppo di Ricerca in Problemi di Evoluzione in Meccanica dei Continui

Componenti strutturati: Elvira Barbera, Vincenzo Ciancio, Fiammetta Conforto, Giancarlo Consolo, Carmela Currò, Domenico Fusco, Natale Manganaro, Annunziata Palumbo, Liliana Restuccia, Patrizia Rogolino.

Tematiche scientifiche

- 1. Studio di problemi ai valori iniziali e al contorno per modelli quasilineari iperbolici multicomponenti.** Lo studio dell'interazione non lineare fra onde semplici è usualmente condotto per i sistemi del primo ordine 2×2 iperbolici e omogenei. Nel caso di sistemi a più componenti il problema dell'analisi dei processi di interazione fra onde non lineari è tutt'ora di difficile trattazione. In questo contesto abbiamo sviluppato un opportuno procedimento di riduzione che ha permesso di dare una descrizione esatta dell'interazione fra onde per un sistema quasi lineare del primo ordine iperbolico a più componenti di interesse nella cromatografia. In particolare, oltre ad aver caratterizzato classi di soluzioni esatte per tale modello, diversi problemi al contorno sono stati analizzati e differenti processi di interazione che modellizzano la separazione di una miscela in singole componenti sono stati descritti in dettaglio.
- 2. Formazione di sub-shock in soluzioni di tipo struttura d'urto.** Le soluzioni di tipo struttura d'urto per un sistema iperbolico di leggi di bilancio sono state ampiamente studiate in letteratura e, in particolare, il problema della formazione di urti, detti sub-shock, all'interno di una struttura d'urto nel contesto della termodinamica dei fluidi è un problema di grande interesse per il quale esistono diversi risultati sia analitici, che numerici. Com'è ben noto, in questo contesto, almeno tre delle equazioni sono leggi di conservazione (della massa, del momento e dell'energia totali) ed il sistema deve essere compatibile con il secondo principio della termodinamica.

Relativamente al problema della formazione di sub-shock all'interno della struttura d'urto, i risultati più importanti si devono a Boillat e Ruggeri che, alla fine degli anni novanta, hanno dimostrato l'esistenza di una soglia per la velocità del fronte d'onda, data dalla massima velocità caratteristica calcolata nello stato imperturbato (cioè lo stato in cui si propaga l'onda) al di sopra della quale il sistema non ammette soluzioni continue.

Ad oggi, non esiste una dimostrazione rigorosa sull'esistenza di soluzioni di classe C^1 per velocità del fronte al di sotto di tale soglia, sebbene il problema sia stato ampiamente affrontato in diversi contesti. Recentemente, nella termodinamica delle miscele multi-temperatura, sia nel contesto della teoria cinetica, che in quello della termodinamica estesa, si è mostrato che anche al di sotto della suddetta soglia si possono formare sub-shock e che, a seconda della concentrazione delle componenti e dello stato imperturbato, la struttura d'urto può presentare al più tanti sub-shock quante sono le componenti della miscela.

- 3. Studio delle proprietà dinamiche dei materiali ferromagnetici, analizzate su scala mesoscopica mediante la teoria del micromagnetismo.** È stato affrontato lo studio delle proprietà delle onde di spin emesse in guide d'onda magnetiche unidimensionali sotto l'azione di campi magnetici statici e correnti elettriche. Per tali sistemi, l'equazione che governa le dinamiche è l'equazione di Landau-Lifshitz-Gilbert-Slonczewski. È stato dimostrato analiticamente che le proprietà esibite alla soglia di eccitazione lineare possono essere significativamente diverse da quelle osservate nelle geometrie estese di tipo point-contact. I parametri d'onda caratteristici (tra cui soglia di eccitazione, frequenza, lunghezza d'onda, decay rate) sono stati determinati dapprima in maniera qualitativa per un guida d'onda di lunghezza infinita considerando un modello semplificato, quindi in maniera quantitativa mediante un modello più sofisticato. Infine, è stata presa in considerazione una guida d'onda di lunghezza finita, ed il modello corrispondente ha tenuto conto del fenomeno di interferenza tra onde incidenti e riflesse al bordo.
- 4. Modellizzazione e studio qualitativo di fenomeni biologici mediante sistemi di E. D. P. iperbolici di tipo reattivo-diffusivo.** È stato affrontato lo studio delle stabilità lineare degli stati di equilibrio, con particolare enfasi all'occorrenza delle biforcazioni di tipo Hopf e Turing. È stata caratterizzata la connessione tra stati di equilibrio mediante travelling waves. È stata altresì determinata la connessione tra stati di equilibrio in presenza di una superficie d'urto nello spazio degli stati. I modelli iperbolici,

dedotti nell'ambito della termodinamica estesa, sono stati applicati a fenomeni di interesse in biomatematica, tra cui formazione di pattern di vegetazione in ambienti semi-aridi e dinamiche tra specie trofiche acquatiche.

5. Studio della probabilità di impatto di frammenti prodotti dall'esplosione di serbatoi in processi industriali. In processi industriali, il termine "effetto domino" denota una catena di incidenti avente luogo in ambito industriale, generata da un evento iniziale che causa altri eventi accidentali in cascata. In tali processi, l'evento scatenante è tipicamente l'esplosione di un serbatoio contenente del liquido infiammabile. Lo studio verte sulla possibilità di incorporare il fenomeno dell'effetto domino all'interno della cosiddetta QRA (Quantitative Risk Analysis), definendo un modello probabilistico per la probabilità di impatto dei singoli frammenti. A tal scopo, la probabilità di impatto è stimata applicando un metodo MonteCarlo alla soluzione analitica del set di equazioni che descrive il moto dei frammenti assumendo come variabili aleatorie la massa, la geometria e la velocità iniziale di lancio dei frammenti.

6. Termodinamica del non equilibrio.

a) Nell'ambito delle teorie fenomenologiche il comportamento termodinamico di una miscela, costituita da due o più componenti, può essere descritto con l'introduzione di un numero finito di variabili di stato interne, atte a descrivere i fenomeni che si verificano a livello microscopico o mesoscopico, e che obbediscono ad equazioni fenomenologiche. In tale contesto:

□ per una miscela binaria si è postulato l'esistenza di una variabile interna scalare, che influenza l'energia libera della miscela, e si è applicato il metodo di Liu generalizzato al fine di ottenere le restrizioni sulle relazioni costitutive derivanti dal principio di entropia, descrivendo gli effetti non locali mediante i gradienti spaziali delle variabili di campo e della variabile interna, generalizzando così risultati ottenuti in precedenza;

□ è stato studiato il fenomeno della termodiffusione in una miscela di n componenti reagenti chimicamente con l'introduzione di n variabili di stato interne di natura vettoriale. L'applicazione dei metodi della termodinamica irreversibile classica permette di determinare le equazioni fenomenologiche per il flusso di calore, i flussi di diffusione, il tensore degli sforzi e le variabili interne. La successiva eliminazione delle variabili interne conduce alle equazioni di evoluzione per i flussi dissipativi di calore e di massa, che rappresentano la versione termodinamica di equazioni di tipo Jeffreys.

b) Studio dei fenomeni di dissipazione del calore in mezzi magnetizzabili anisotropi, in cui sono presenti fenomeni di rilassamento magnetico. In particolare, usando i metodi della termodinamica del non-equilibrio, si deriva la funzione di dissipazione del calore per mezzi magnetizzabili in cui differenti tipi di fenomeni irreversibili microscopici, descritti tramite variabili interne, danno origine al rilassamento magnetico. Si osserva che tale funzione, nel caso linearizzato, è dovuta ai fenomeni irreversibili del flusso viscoso, della conduzione elettrica e del rilassamento magnetico, come si verifica in mezzi complessi dove differenti tipi di molecole aventi diversi tempi di rilassamento, contribuiscono alla magnetizzazione totale. Notevoli sono le applicazioni in medicina ed altri campi.

c) Modelli termodinamici per semiconduttori di tipo n e di tipo p con dislocazioni, con applicazioni in nanotecnologia. In particolare, usando i metodi della termodinamica del non-equilibrio, si studiano le proprietà termiche, elettriche, meccaniche e della struttura geometrica di tali mezzi. Si derivano le equazioni costitutive e le equazioni di evoluzione per il flusso di calore e le variabili interne, che descrivono i cristalli considerati, e si vede come i coefficienti di trasporto subiscono modificazioni in presenza di difetti di dislocazioni.

d) Temperature del non-equilibrio ed equazioni di trasporto del calore in nanostrutture con difetti. In particolare, si definisce la temperatura calorica del non-equilibrio e la temperatura entropica del non equilibrio, e le relazioni fra di esse, in cristalli con dislocazioni, soggetti ad un flusso di energia esterna. Le dislocazioni possono avere una forte influenza sulla conducibilità termica, e la loro dinamica ha effetti d'interazione con la dinamica del flusso di calore. Si derivano, nel caso lineare, le relazioni costitutive e le equazioni di evoluzione per il campo di dislocazioni ed il

flusso di calore, e si ottiene, nel caso anisotropo e isotropo, un' equazione del calore del tipo equazione dei telegrafisti, che descrive perturbazioni termiche con velocità finita.

- e) Applicazione dei metodi della termodinamica irreversibile con variabili interne per lo studio di fenomeni termici in mezzi con rilassamento termico. In particolare, introducendo una variabile interna vettoriale ed una tensoriale del secondo ordine, che influenzano le proprietà termiche del mezzo, si sono derivate le equazioni fenomenologiche e si è visto, come nel caso isotropo, si ottiene la ben nota equazione di Maxwell-Cattaneo per il trasporto del calore, che descrive perturbazioni termiche con velocità finita e dove è preso in considerazione il tempo di rilassamento del flusso del calore.
- f) Principio di oggettività e principio d'indifferenza materiale in fisica classica e studio della struttura matematica dello spazio-tempo Galileano. Applicazioni ai fluidi. In particolare, in quadriformulazione Galileana, si è costruito un tensore massa-momento- densità di energia per un fluido ad un componente e si è derivata la sua equazione di bilancio.

7. Equazioni costitutive per la termoelettricità su scala nanometrica. Sono stati introdotti dei modelli termodinamici per equazioni non lineari atte a descrivere, su scala nanometrica, la conduzione del calore in presenza di effetti termoelettrici. L'analisi di questi effetti è basata sulla seconda relazione di Kelvin, che esprime lo stretto legame tra l'effetto Peltier, cioè lo sviluppo di energia termica in seguito ad un passaggio di corrente elettrica, e l'effetto Seebeck, cioè la comparsa di elettricità dovuta ad una differenza di temperatura. Nei cristalli utilizzati per la costruzione delle celle termoelettriche il trasporto del calore è dovuto ai fononi, mentre il trasporto dell'elettricità è dovuto agli elettroni. Si sono sviluppati, inoltre, modelli in cui elettroni e fononi abbiano temperature differenti, studiandone le proprietà alla luce della teoria delle miscele con differenti temperature. In particolare:

- si è verificata la validità, anche in regime non lineare, della seconda relazione di Kelvin e, più in generale, delle relazioni di simmetria di Onsager, da cui essa deriva;
- si è calcolata l'efficienza termodinamica di alcuni nanocircuiti, discutendo come la non linearità dei fenomeni di elettricità e di trasporto del calore possa influire su di essa;
- si è investigata la possibilità di dedurre dalle misure dell'efficienza termoelettrica il valore delle temperature degli elettroni.

Publicazioni

- 1) E. Barbera, C. Currò, G. Valenti, On discontinuous travelling wave solutions for a class of hyperbolic reaction-diffusion models, *Physica D*, 308, 116-126, 2015.
- 2) E. Barbera, G. Consolo, G. Valenti, A two or three compartments hyperbolic reaction-diffusion model for the aquatic food chain *Mathematical Biosciences and Engineering*, 12 (3), 451-472, 2015.
- 3) V. Ciancio, L. Restuccia, On heat equation in the frame work of classical irreversible thermodynamics with internal variables, *International Journal of Geometric Methods in Modern Physics*, online ready, 2015, doi: 10.1142/S021988781640003X.
- 4) F. Conforto, S. Giambò, V. La Rosa, Non-equilibrium relaxation models for two phase relativistic flows, *Bollettino di Matematica Pura e Applicata*, 8, 107-124 (2015).
- 5) G. Consolo, C. Currò, G. Valenti, Spin-transfer-driven spin-waves excitation in a finite-size magnetic waveguide, *Physics Letters* 379 A 1161–1168 (2015).
- 6) C. Currò, D. Fusco, N. Manganaro, Exact description of simple wave interactions in multicomponent chromatography, *J. Phys. A: Math. Theor.* 48 (2015), 015201.
- 7) C. Currò, D. Fusco, N. Manganaro, Nonlinear wave interactions in multicomponents chromatography, *Proceedings of the International Conference DAYS on DIFFRACTION 2014*, pp. 59-64, IEEE 2014 (2015).
- 8) C. Currò, D. Fusco, N. Manganaro, Exact solutions in ideal chromatography via differential constraints method, *AAPP , Atti Accad. Pelorit. Pericol. Cl. Sci. Fis. Mat. Nat.*, Vol. 93, No. 1, A2 (2015).

- 9) M.F. Milazzo, G. Consolo, R. Lisi, G. Maschio, Estimation of the impact probability of fragments produced by explosions of vessels: a case study, *Safety and Reliability: Methodology and Applications* (2015), 1377-1384.
- 10) M.F. Milazzo, G. Consolo, R. Lisi, G. Maschio, Estimation of the impact probability in domino effects due to the projection of fragments, *Process Safety and Environmental Protection* 93 (2015), 99-110.
- 11) L. Restuccia, Non-equilibrium temperatures and heat transport in systems with nanoscopic internal variables, (2015) *Proceedings of 2014 FJIM, First Joint International Meeting, Bilbao, Spagna, June 30 - July 4, 2014.*
- 12) P. Rogolino, A. Sellitto, V. A. Cimmelli, Influence of the electron and phonon temperature and of the electric-charge density on the optimal efficiency of thermoelectric nanowires *MECHANICS RESEARCH COMMUNICATIONS* vol. 68, pp.77-82, 2015.
- 13) P. Rogolino, A. Sellitto, V. A. Cimmelli, Influence of nonlinear effects on the efficiency of a thermoelectric generator *ZEITSCHRIFT FUR ANGEWANDTE MATHEMATIK UND PHYSIK* vol. 66 (5), pp.2829-2842, 2015.

Partecipazioni e comunicazione a congressi

E. Barbera ha partecipato al “XVI International Conference on Waves ad Stability in Continuous Media (WASCOM 15)” tenutosi a Cetraro (Cosenza, Italy) dall’1 al 5 Giugno 2015.

G. Consolo ha partecipato al “XVI International Conference on Waves ad Stability in Continuous Media (WASCOM 15)” tenutosi a Cetraro (Cosenza, Italy) dall’1 al 5 Giugno 2015 presentando una comunicazione dal titolo "Linear and Autonomous dynamics of a magnetic auto-oscillatory system subject to competing dissipative phenomena: a lagrangian approach" ed alla XL Summer School on Mathematical Physics, Ravello (SA) (Italy), 14-26 Settembre 2015 presentando un seminario dal titolo " Pattern formation in a hyperbolic reaction-diffusion-advection vegetation model for semi-arid environments".

F. Conforto ha tenuto una conferenza su invito dal titolo Sub–shock formation in gas mixture, presso il Department of Mechanical Engineering and Science, Kyoto University, Japan, 9 aprile 2015; ha partecipato all’“XVI International Conference on Waves ad Stability in Continuous Media (WASCOM 15)” tenutosi a Cetraro (Cosenza, Italy) dall’1 al 5 Giugno 2015, tenendo una comunicazione dal titolo Sub–shock formation in gas mixture e ha tenuto la comunicazione su invito dal titolo Shock structure and multiple sub-shocks in multi-temperature mixtures of gases, nel Workshop - Recent advances in kinetic equations and applications, University of Parma, Italy, 1-2 October 2015.

C. Currò, “On discontinuous travelling wave solutions for a class of hyperbolic reaction-diffusion models”, WASCOM 2015, Cetraro Giugno 2015.

N. Manganaro, “Supplementary Laws for a Real Gas”, WASCOM 2015, Cetraro, Giugno 2015.

L. Restuccia ha tenuto un ciclo di conferenze su invito della Prof. Lidia Palese dal 9 Giugno-16 Giugno 2015, presso il Dipartimento di Matematica dell’Università di Bari dal titolo Teorie termodinamiche del non-equilibrio con applicazioni ai corpi complessi con struttura interna.

P. Rogolino, “Influence of electron and phonon temperature on thermoelectric efficiency” Assemblea Scientifica GNFM 2015 Montecatini Terme, 22-24 Ottobre 2015.

Collaborazioni

Prof. Marzia Bisi, Dipartimento di Matematica e Informatica, Università di Parma

Prof. Francesca Brini, Università degli Studi di Bologna.

Dott.ssa I. Carlomagno Università della Basilicata,

Prof. V.A. Cimmelli, Università della Basilicata,

Prof. Laurent Desvillettes, Université Paris Diderot, Paris, France

Prof. David Jou del Dipartimento di Fisica Statistica, dell’Università Autonoma di Barcellona di Spagna

Prof. H. Kaminski della Technological University of Poznan (Polonia).

Dr. Giorgio Martalò, Université de Bordeaux, CNRS, INRIA, Bordeaux, France

Prof. B. Maruszewski della Technological University of Poznan (Polonia).

Prof. Andrea Mentrelli, Dipartimento di Matematica, Università di Bologna

Prof. Roberto Monaco, Dipartimento Interateneo di Scienze, Progetto e Politiche del Territorio, Politecnico di Torino

Prof. Maria Stella Mongiovi, dell’Università di Palermo

Prof. W. Muschik, della Technische Universität Berlin, Institut für Theoretische Physik, Germania

Prof. Lidia Palese, dell'Università di Bari (Dipartimento di matematica)

Prof. S. Preston del Department of Mathematics and Statistics, Portland State University, Portland, OR, USA

Prof. Tommaso Ruggeri, Dipartimento di Matematica, Università di Bologna

Dott. A. Sellitto Università di Salerno.

Prof. R. Starosta della Technological University of Poznan (Polonia).

Prof. Peter Vàn, del Wigner Research Center for Physics, of University of Technology and Economics of Budapest (Hungary).

Altro

Il Prof. Vincenzo Ciancio e la Prof. Liliana Restuccia hanno ospitato come visiting professor, dal 9 Novembre al 9 Dicembre 2015, il Prof. Peter Vàn, del Wigner Research Center for Physics, of University of Technology and Economics of Budapest (Hungary).

La prof.ssa F. Conforto ed il dott. G. Consolo hanno partecipato al Progetto Giovani INdAM-GNFM dal titolo "Un modello euleriano/lagrangiano per fronti di combustione" con partner: Università di Bologna, Messina, Milano, Bilbao Basque Country (Spain).

Il dott. G. Consolo ha anche partecipato al Progetto "Safera" Smart PROcess INdustry CranEs" (SPRINCE), con partner Messina, Belgrado (Serbia), Brno (Repubblica Ceca).

La Prof. Liliana Restuccia nel 2015 è stata coordinatrice del Gruppo di attività SisTeNe-SIMAI (Sistemi Termodinamici del Non- Equilibrio).

5.13 Gruppo di ricerca in "Teoria e Simulazione di Sistemi Atomici e Molecolari"

Componenti: Maria C. Abramo, Carlo Caccamo, Dino Costa, Paolo V. Giaquinta, Gianpietro Malescio, Gianmarco Munaò, Santi Prestipino Giarritta, Alessandro Sergi

TEMATICHE SCIENTIFICHE

5.13.a. Studio teorico e simulativo di sistemi complessi

Partecipanti: Maria C. Abramo (PA), Carlo Caccamo (PO), Dino Costa (RU), Gianmarco Munaò, (assegnista), Santi. Prestipino (PA)

- Equilibri di fase e struttura di liquidi semplici, e di liquidi complessi costituiti da particelle dotate di siti o patches ad interazione distribuita

Si è indagata la possibilità di tracciare linee di transizione di fase accurate mediante integrazione termodinamica dell'equazione di stato calcolata in una simulazione canonica. Usando il fluido semplice Lennard-Jones come esempio, si è visto che, controintuitivamente, i problemi legati alla metastabilità possono essere alleviati riducendo (anziché accrescendo) la dimensione del sistema. Mentre la sola integrazione termodinamica basta a predire esattamente la coesistenza liquido-vapore, lo stesso metodo appare non accurato per la transizione liquido-solido, dove, allo scopo di minimizzare l'errore, la strategia che si rivela più conveniente consiste nel seguire, fino alla fusione, l'espansione del cristallo difettoso scaturito in precedenza dal decadimento del liquido metastabile.

Si è inoltre indagata, all'interno della regione di coesistenza liquido-vapore, la pressione di equilibrio di un fluido semplice in geometria finita, simulato con condizioni periodiche al contorno. Questa presenta caratteristici "salti" e plateau in corrispondenza dei cambiamenti di forma della frazione liquida. Prendendo lo spunto da un lavoro di altri autori, è stata formulata una teoria semplice di queste "transizioni geometriche", provvedendo anche le necessarie estensioni al caso di scatole di simulazione elongate.

Sono stati confrontati due approcci differenti, specificamente il Reference interaction site model (RISM) e la optimized perturbation theories (OPT) per studiare la termodinamica e il comportamento di fase di un fluido di dumbbells al variare del potenziale di interazione tra i siti molecolari. Dal confronto con la simulazione numerica emerge come la RISM sia sistematicamente più predittiva della OPT nel prevedere il comportamento della linea di equilibrio liquido-vapore, nonché della pressione e dell'energia libera man mano che l'interazione tra i dumbbells viene diminuita, andando verso il limite di particelle Janus.

Sono state poi indagate le strutture osservate in un sistema di Janus dumbbells, strutture formantesi a seguito di un processo di self-assembly. I risultati, ottenuti tramite la simulazione Monte Carlo, hanno messo in luce la

comparsa di una ricca varietà di aggregati sopramolecolari, come micelle e lamelle; è stato inoltre indagato il modo in cui il self-assembly compete con la separazione di fase liquido-vapore.

Sono stati infine proposti ed investigati dei semplici modelli, basati su un potenziale di tipo core-softened, per studiare le proprietà strutturali e termodinamiche di alcuni alcoli, specificamente metanolo, etanolo e 1-propanolo. A questo scopo sono state impiegate tecniche teoriche (basate sul Reference Interaction Site Model (RISM)) e simulate (basate sul metodo Monte Carlo). I risultati ottenuti sono stati confrontati con i valori critici sperimentalmente noti di questi tre alcoli, mostrando un ragionevole accordo. La teoria si è inoltre dimostrata conforme con la simulazione nel predire una struttura fluida in cui il legame idrogeno viene progressivamente indebolito passando dal metanolo all'etanolo e all'1-propanolo.

- Modelli colloidali con interazioni microscopiche antagoniste

Per quanto concerne lo studio della formazione di aggregati in fluidi modello con interazioni antagoniste, sono state studiate le proprietà di un modello d'interazione "continuo a tratti", costituito da una sfera rigida interagente con le altre particelle del sistema tramite una buca attrattiva quadrata, seguita a distanze intermedie da una repulsione nella forma di una rampa linearmente decrescente con la distanza interparticellare (modello Square-Well/Linear-Ramp). In questa fase preliminare di caratterizzazione del modello sono state studiate le proprietà di aggregazione al variare dei parametri costitutivi (che possono essere cambiati indipendentemente fra loro e da ciò deriva la particolare utilità del modello), valutando l'accuratezza della teoria hypernetted chain in confronto con dati di simulazione Monte Carlo.

Contributi A Convegni o Congressi

D. Costa

- ITN-SNAL Workshop "Soft Interaction in Bio-Nanostructures" (Roccalumera, Messina, 23 Luglio 2015) Invited Talk: *Effective interactions in lysozyme aqueous solutions: A SANS and Molecular Dynamics study*

- Invited Researcher presso il Laboratoire de Physique des Milieux Denses, Université de Lorraine, Metz, France (Settembre 2015).

G. Munao'

ITN-SNAL Workshop: "Soft Interactions in Bio-Nanostructures" (Roccalumera, Messina, 23 Luglio 2015) Invited Talk:: *"Modeling self-assembly of patchy and Janus colloids into micelles, tubes and bilayers"*.

- Workshop "Appunti di Fisica 2015", 15/12/2015, Messina.

Invited talk: *"Modelli per l'incapsulamento di nutraceutici tramite dimeri colloidali"*.

Collaborazioni

C..Caccamo :

Dr. A. Baumketner, Lviv University (Ukraine)

D. Costa

Dr. Jean-Marc Bomont e Prof. Jean-Louis Bretonnet, Laboratoire de Physique des Milieux Denses, Université de Lorraine, Metz, France.

G. Munao'

- Dr. Francisco Gamez, Spanish National Research Council, Madrid.

- Prof. Achille Giacometti, Università Ca' Foscari, Venezia.

- Dr. Toby S. Hudson, University of Sidney.

- Dr. Patrick O'Toole, University of Sidney.

- Prof. Francesco Sciortino, Sapienza Università di Roma.

- Prof. Tomaz Urbic, University of Ljubljana.

5.13.b. Fisica teorica e computazionale dello stato liquido della materia

Responsabile: Paolo V. Giaquinta

Attività scientifica

È stato indagato, con metodi di simulazione dinamica *ab initio*, il fenomeno della dissociazione ionica e del conseguente trasporto protonico nel metanolo sotto l'azione di campi elettrici stazionari. Si è trovato che la struttura a legame idrogeno di questa sostanza è più robusta e persistente per valori dell'intensità del campo elettrico inferiori alla soglia di dissociazione molecolare (circa 0.31 V/\AA), valore questo che risulta leggermente superiore a quello dell'acqua. Un flusso stabile e sostenuto di corrente ionica, con caratteristiche ohmiche, è stato osservato per campi elettrici di intensità superiore a 0.36 V/\AA ; la conducibilità elettrica risulta inferiore di circa un ordine di grandezza a quella dell'acqua, una circostanza che evidenzia la minore efficienza dei processi di trasferimento protonico nel metanolo.

È stata inoltre rivisitata la tematica della determinazione delle linee di coesistenza di sostanze monoatomiche, rappresentate mediante il modello di Lennard-Jones, con tecniche di integrazione termodinamica affiancate da calcoli di simulazione numerica, con particolare riguardo alla transizione di fase fluido-solido.

Attività editoriale

Nella qualità di Presidente del Comitato Editoriale della rivista scientifica intitolata “*Atti della Accademia Peloritana dei Pericolanti - Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali*” (ISSN: 1825-1242; URL: <http://www.actapeloritana.it>), ho curato nel corso del 2015 la pubblicazione del volume N. 93, composto da due fascicoli ordinari [DOI: <http://dx.doi.org/10.1478/Vol93>].

Comunicazioni A Congressi

1. Giaquinta PV (2015). “The volumetric anomaly of water: A short chronicle of a controversial discovery”, invited talk delivered at *Novel Developments in Classical and Quantum Systems*, a workshop in honour of Prof. Flavio Toigo; Botanical Garden, University of Padova (Italy), 4-5 June 2015 (URL: <http://ndcqs.dfa.unipd.it/Abstract/Giaquinta.pdf>)
2. Aliotta F, Giaquinta PV, Ponterio RC, Prestipino S, Saija F, Vasi C (2015). “Recalescence from supercooled water”, Italian National Conference on Condensed Matter Physics – FisMat2015, (Palermo, 28 Settembre – 2 Ottobre, 2015)
3. Cassone G, Giaquinta PV, Saija F, Saitta AM (2015). “Proton transfer in liquid methanol”, Italian National Conference on Condensed Matter Physics – FisMat2015, (Palermo, 28 Settembre – 2 Ottobre, 2015)

Collaborazioni Scientifiche

- *Istituto per i Processi Chimico-Fisici* del Consiglio Nazionale delle Ricerche (Sezione di Messina): Dott. F. Aliotta; Dott. F. Saija.
- *Université Pierre et Marie Curie - Sorbonne e Institut de Minéralogie et de Physique des Milieux Condensés*, Parigi (Francia): Prof. A. M. Saitta.

5.13.c. Studio teorico e computazionale del comportamento di fase di sistemi modello

Componente: G.Malescio .

1. Analisi della stabilità di fase di sistemi con repulsione finita

E' stato considerato un sistema modello rappresentante un fluido caratterizzato da un'interazione con una repulsione gaussiana più una debole attrazione anch'essa di tipo gaussiano. Si è analizzato il suo comportamento di fase in funzione della intensità della forza attrattiva. Al di sopra di un valore di soglia il sistema diviene termodinamicamente instabile e collassa in un cluster di size finita. Nell'avvicinarsi al valore soglia da valori minori, la linea di coesistenza liquido-gas mostra un allargamento anomalo a basse temperature, con una apparente divergenza della densità del liquido in corrispondenza della soglia. Al sopra della soglia il

piano termodinamico è diviso in due regioni: una in cui il collasso avviene rapidamente, e l'altra in cui invece il tempo di collasso è molto maggiore (più grande della durata delle simulazioni effettuate). Lo studio effettuato suggerisce dunque che anche nel caso di un sistema termodinamicamente instabile, a seconda dei valori dei parametri termodinamici, il collasso può avvenire secondo una dinamica caratterizzata da tempi (e processi) molto differenti.

2. Determinazione della coesistenza di fase mediante integrazione termodinamica

Si è indagata la possibilità di tracciare linee di transizione di fase accurate mediante integrazione termodinamica dell'equazione di stato calcolata in una simulazione canonica. Mentre la sola integrazione termodinamica basta a predire esattamente la coesistenza liquido-vapore, lo stesso metodo fallisce per la transizione liquido-solido, dove, allo scopo di minimizzare l'errore, la strategia che si rivela più conveniente consiste nel seguire, fino alla fusione, l'espansione del cristallo difettoso scaturito in precedenza dal decadimento del liquido metastabile.

All'interno della regione di coesistenza liquido-vapore la pressione di equilibrio di un fluido finito, simulato con condizioni periodiche al contorno, presenta caratteristici "salti" e plateau in corrispondenza dei cambiamenti di forma della frazione liquida. È stata formulata una teoria semplice di queste "transizioni geometriche", provvedendo anche le necessarie estensioni al caso di scatole di simulazione elongate.

5.13.d. Teoria e simulazione di sistemi modello di meccanica statistica

Componente unico: Santi Prestipino Giarritta (PA).

Collaboratori esterni: Domenico Gazzillo e Nicola Tasinato (Università di Venezia)

Attività scientifica

(art. 2-in Elenco PUBBLICAZIONI) Insieme con altri, ho indagato sulla possibilità di tracciare linee di transizione accurate mediante integrazione termodinamica dell'equazione di stato calcolata in una simulazione canonica con mosse locali. Questo metodo non ha alternative nel caso in cui non si conosca la fase cristallina stabile. Usando il modello Lennard-Jones come esempio, dimostriamo che, controintuitivamente, i problemi legati alla metastabilità possono essere alleviati riducendo (anziché accrescendo) la dimensione del sistema. Mentre la coesistenza liquido-vapore può essere predetta esattamente mediante la semplice integrazione termodinamica, tale metodo fallisce miseramente per la transizione liquido-solido, dove, allo scopo di minimizzare l'errore, la strategia che si è rivelata più conveniente consiste nel seguire, fino alla fusione, l'espansione del solido difettoso scaturito in precedenza dal decadimento del liquido metastabile.

(art. 9-in Elenco PUBBLICAZIONI) Assieme a ricercatori di UniVe sono tornato ad indagare la termodinamica di un insieme di particelle penetrabili in 1 dimensione, interagenti secondo un potenziale limitato nell'origine avente una forma gaussiana generalizzata (GEM4). Ad un siffatto potenziale non si applicano le conclusioni del famoso teorema di Van Hove, che esclude la possibilità di più fasi distinte in uno spazio unidimensionale continuo. In effetti, un lavoro di simulazione svolto nel 2014 aveva dato segni dell'esistenza, all'aumentare della pressione, di una sequenza infinita di fasi distinte (una fase fluida e le altre cristalline a cluster). Usando tre diversi approcci teorici, in ordine crescente di sofisticazione, viene infine raggiunta la conclusione che le presunte transizioni di fase del GEM4 sono in realtà dei semplici crossover.

(art. 3-in Elenco PUBBLICAZIONI) All'interno della regione di coesistenza liquido-vapore la pressione di equilibrio di un fluido finito, simulato con condizioni periodiche al contorno, presenta caratteristici "salti" e plateau. Al di sotto della densità critica, ad ogni salto della pressione cambia la forma della frazione liquida, che passa da sferica a cilindrica, a "slab-like". Prendendo lo spunto da un precedente lavoro di Binder e collaboratori, formuliamo una teoria semplice di queste "transizioni geometriche", provvedendo anche le necessarie estensioni al caso di scatole di simulazione elongate. La teoria funziona piuttosto bene per il modello Lennard-Jones. Le forme più esotiche della frazione liquida che talvolta si manifestano nel corso delle simulazioni sono classificate dalla teoria come metastabili.

(art.8-in Elenco PUBBLICAZIONI) Il comportamento statistico di dispersioni di macromolecole è descritto solitamente in termini di interazione effettiva tra i centri di massa delle particelle del soluto. Per molecole come catene polimeriche o dendrimeri, il potenziale effettivo assume un valore finito nell'origine, il che significa che i centri di massa di molecole differenti possono anche coincidere. Utilizzando un potenziale doppio-Gaussiano come esempio rappresentativo, con G. Malescio ho studiato il comportamento statistico di un sistema

inizialmente fluido in funzione della forza di attrazione U . Sopra una soglia critica U_c , il fluido è instabile nel senso di Ruelle, ovvero collassa prima o poi in un "cluster" di volume finito. Avvicinandosi ad U_c dal basso, la regione liquido-vapore subisce un allargamento anomalo a bassa temperatura, e la densità di coesistenza del liquido apparentemente diverge alla soglia di stabilità. Sopra U_c , il piano termodinamico è diviso in due regioni: nella prima (alte densità) il fluido collassa in un tempo relativamente breve, mentre nell'altra (basse densità) il collasso richiede un tempo enormemente lungo. Dotando il potenziale di un piccolo nocciolo duro, il sistema ridiventa stabile e la linea che delimita le due regioni si trasforma nella curva spinodale di una transizione tra fasi fluide.

Congressi e Comunicazioni Nel 2014:

- 1) "Fismat 2015", Palermo (28/9-2/10, 2015). In tale occasione ho tenuto un seminario dal titolo: "Phase portrait of a system near and above the threshold of thermodynamic stability".

5.13.e Simulazione numerica della dinamica quantistica dissipativa di sistemi modello

Componenti: Alessandro Sergi

Attività Scientifica

Il controllo della dinamica dei sistemi quantistici aperti è di fondamentale importanza per l'ingegnerizzazione di dispositivi capaci di fornire prestazioni superiori a quelli basati su fenomeni squisitamente classici. L'attività di ricerca è stata incentrata sullo sviluppo di nuove metodologie teorico-computazionali per rappresentare la dissipazione (sia di natura termica che probabilistica) in sistemi quantistici modello soggetti a campi esterni. In particolare, sono stati elaborati nuovi formalismi per il calcolo delle correlazioni e la simulazione della dinamica quanto-classica in presenza di sorgenti o pozzi di probabilità per il sottosistema quantistico. L'effetto della disordine termico è stato invece studiato mediante la simulazione di modelli di meta-molecole plasmoniche e di stati fononici squeezed soggetti a campi esterni dipendenti dal tempo.

Partecipazioni E Comunicazione A Congressi

Talk su invito "Approximate Computational Complexity in Numerical Simulation", presentato al National Institute of Theoretical Physics (NITheP), Westville, Sud Africa (Settembre 9, 2015).

Collaborazioni

1. Dr. K. G. Zloshchastiev, Institute of Systems Science, Durban University of Technology, P.O. Box 1334, Durban 4000, South Africa
2. Dr. D. A. Uken, School of Chemistry and Physics, University of KwaZulu-Natal in Pietermaritzburg, Private Bag X01, Scottsville 3209, South Africa

PUBBLICAZIONI

ARTICOLI PUBBLICATI SU RIVISTE INTERNAZIONALI (peer-reviewed)

- 1) Cigala G., Costa D., Bomont J.-M., Caccamo C.,
Aggregate formation in a model fluid with microscopic piecewise-continuous competing interactions,
MOLECULAR PHYSICS **113**, 2583 (2015)
- 2) Abramo M.C., Caccamo C., Costa D., Giaquinta, P. V., Malescio G., Munao G., Prestipino S.,
On the determination of phase boundaries via thermodynamic integration across coexistence regions,
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **142**, AR 214502 (2015)
- 3) Prestipino S., Caccamo C., Costa D., Malescio G., Munao G.,
Shapes of a liquid droplet in a periodic box PHYSICAL REVIEW E **92**, AR 022141 (2015)

- 4) Munao, G. O'Toole, P. Hudson, T. S., Costa, D., Caccamo, C., Sciortino, F., Giacometti, A., *Cluster formation and phase separation in heteronuclear Janus dumbbells*, JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER **27**, AR 234101 (2015)
- 5) Munao G., Gamez F., Costa. D., Caccamo C., Sciortino F., Giacometti A. *Reference interaction site model and optimized perturbation theories of colloidal dumbbells with increasing anisotropy*, JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **142**, AR 224904 (2015)
- 6) Munao, G, Urbic, T. *Structure and thermodynamics of core-softened models for alcohols* JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **142**, AR 214508 (2015)
- 7) Cassone G, Giaquinta PV, Saija F, Saitta AM (2015). "Liquid methanol under a static electric field". THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, vol. 142, 054502 (7 pages), ISSN: 0021-9606, DOI: 10.1063/1.4907010
- 8) G.Malescio and S.Prestipino, Phase behavior near and beyond the thermodynamic stability threshold Phys. Rev. E **92**, 050301(R) (2015)
- 9) S. Prestipino, D. Gazzillo, and N. Tasinato, Probing the existence of phase transitions in one-dimensional fluids of penetrable particles, Phys. Rev. E **92**, 022138 (2015).
- 10) D. A. Uken and A. Sergi, "Quantum dynamics of a plasmonic metamolecule with a time dependent driving", Theoretical Chemistry Accounts **134**, 141 (8pp) (2015). DOI 10.1007/s00214-015-1749-9
- 11) A. Sergi, "Embedding quantum systems with a non-conserved probability in classical environments", Theoretical Chemistry Accounts **134**, 79 (9pp) (2015). DOI 10.1007/s00214-015-1679-6
- 12) A. Sergi and K. G. Zloshchastiev, "Time correlation functions for non-Hermitian quantum systems", Physical Review A **91**, 062108 (9pp) (2015). DOI 10.1103/PhysRevA.91.062108
- 13) S. Sewran, K. G. Zloshchastiev and A. Sergi, "Non-Hamiltonian Modeling of Squeezing and Thermal Disorder in Driven Oscillators", Journal of Statistical Physics **159**, 255-273 (2015). DOI 10.1007/s10955-015-1193-1

5.14 Gruppo di Ricerca "Micro e Nanosistemi"

Componenti: Fortunato Neri, Salvatore Patanè, Angela Maria Mezzasalma, Letteria Silipigni, Rosalba Saija, Salvatore Savasta, Enza Fazio, Giovanni Finocchio

Dottorandi: Claudia Triolo, V. Macrì, L. Garziano, G. Cassone

Collaboratori: S. Spadaro, F. Barreca, S. Scibilia, S. Grimato, A. Scala, S. Panarello, A. Ridolfo, A. Cacciola, R. Stassi, O. Di Stefano, N. Boukortt, M. Gaeta, B. Azzerboni, S. De Caro.

Tematiche scientifiche

1. Sintesi e diagnostica di materiali nanostrutturati

L'attività di ricerca ha riguardato lo sviluppo di tematiche di diagnostica e di processo nel settore della scienza dei materiali. Sono state realizzate, mediante la tecnica di ablazione laser, nanostrutture metalliche e di ossidi metallici dalla "tunata" distribuzione dimensionale e composizionale le cui proprietà chimico-fisiche sono state caratterizzate mediante spettroscopia fotoelettronica a raggi X (XPS), ottica convenzionale e microscopia elettronica. La risposta ottica non lineare dei sistemi sintetizzati è stata investigata analizzando i dati acquisiti mediante tecnica z-scan. Si è inoltre approfondito lo studio delle proprietà chimico-fisiche di: 1) sistemi nanocompositi Pt/TiO₂/CNTs e V-doped ZnO:Ca preparati mediante la tecnica sol-gel per diverse applicazioni tecnologiche quali sensori di gas; 2) polveri di ossido di grafene per valutarne il grado di funzionalizzazione ed esfoliazione e la chimica di superficie in vista di applicazioni biomedicali. Analoghe attività sono state realizzate per studiare la risposta catalitica di sistemi a base zeolitica contenenti Sn di interesse nel settore della conversione delle biomasse, attività svolta in collaborazione con un gruppo dell'Università di Aveiro (Portogallo). Nell'ambito di un'attività destinata alla realizzazione di dispositivi per la conversione fotovoltaica svolta in collaborazione con ricercatori dell'Università di Palermo, si è continuato lo studio, mediante spettroscopia XPS, delle proprietà chimico-fisiche di nanostrutture amorfe di ossido di molibdeno elettrodepositate da soluzioni ac-

quose. In collaborazione con ricercatori dell'Ateneo e del CNR sezione di Messina, sono stati preparati a RT film nanoibridi di $\text{Li}_{2x}\text{Mn}_{1-x}\text{PS}_3/\text{GO}$ mediante un semplice protocollo di mixing tra nanosheet di GO ed esfoliato di MnPS_3 . I film così ottenuti sono stati analizzati mediante diffrazione a raggi X, spettroscopia Raman ed XPS, ottenendo informazioni sulla natura dell'interazione tra la matrice MnPS_3 e la specie ospite GO.

2. Biomarcatori e diagnostica molecolare e sistemi di drug delivery

Sono state avviate e messe a punto metodologie d'indagine mediante tecniche di spettroscopia ottica per la diagnostica molecolare ad alta risoluzione, alta sensibilità ed elevate selettività. Sono stati caratterizzati diversi sistemi cellulari (cellule tumorali e batteri ad esempio) ed, utilizzando un sistema di spettroscopia micro-Raman, sono stati acquisiti un numero statisticamente rilevante di spettri Raman, opportunamente trattati ed analizzati mediante "*principal component analysis (PCA)*" per l'identificazione degli acidi nucleici e delle proteine presenti nei sistemi. Inoltre, l'ingegnerizzazione di opportuni sistemi biosensoristici (sensori basati su peptidi espressi su fagi M13 funzionalizzati con nanoparticelle metalliche prodotte per ablazione laser) ha consentito la selezione di peptidi in grado di riconoscere e legare in modo selettivo eventuali cellule neoplastiche circolanti. Le interazioni di legame che coinvolgevano gruppi funzionali specifici sono state investigate mediante spettroscopia di assorbimento infrarosso in trasformata di Fourier.

Infine, sono stati realizzati nanocompositi polimerici e membrane polimeriche, mediante elettrospinning, addizionate con nanoparticelle di Au, Ag ed ossido di ferro controllabili otticamente e magneticamente per il rilascio locale e controllato di farmaci in terapia locale. E' stato infine valutato il grado di compatibilizzazione dei nanocompositi per massimizzare la loro affinità ai tessuti target.

3. Tematica Analisi chimico-fisiche applicate allo studio di reperti archeologici metallici, ceramici e lapidei di interesse storico-artistico.

Sono state condotte analisi di carattere chimico fisico su monete d'argento risalenti al periodo compreso tra il V ed il II secolo a.c.. Le tecniche d'indagine usate hanno permesso una determinazione qualitativa e semi-quantitativa della composizione chimica (SEM-EDX) e la composizione elementale (XPS) delle monete. Inoltre, usando la procedura di sputtering, è stato possibile effettuare misure di depth profile che hanno permesso di determinare sia la composizione della patina superficiale che quella degli strati più interni. Tutti i dati così ottenuti hanno permesso di fornire utili informazioni circa la produzione, il periodo ed i luoghi di utilizzo delle monete a supporto di una corretta datazione delle stesse.

4. Nanoscienze e nanotecnologie applicate alla fotonica ed all'optoelettronica

Le nanotecnologie coinvolgono oggi ambiti molto diversi che vanno dallo studio dell'interazione radiazione materia alla realizzazione di dispositivi per la microelettronica alla studio di strutture molecolari che trovano applicazione nel settore della biochimica e della medicina. Sono stati studiati film sottili di aggregati J. Una simulazione numerica ha dimostrato che questi materiali, nonostante il loro carattere dielettrico, si comportano, dal punto di vista ottico, come particelle metalliche e consentono di ottenere una concentrazione locale del campo elettromagnetico, utile nella realizzazione di substrati otticamente attivi e per la conversione dell'energia. E' stato realizzato un dispositivo elettroluminescente che lavora in regime di accoppiamento ultraforte ottenuto realizzando un OLED all'interno di una microcavità ottica. Infine, sono stati studiati aggregati supramolecolari ottenuti dall'associazione di un calixirene in soluzione acquosa dimostrando la possibilità di utilizzare queste micelle per una efficace somministrazione di farmaci. Le nanotecnologie oggi sono anche una parola chiave nel settore della microelettronica. I moderni processori dei PC fanno largo uso di dispositivi di dimensioni < di 50 nm. Per questo motivo oggi è di grande interesse lo studio ed il design di nuovi elementi attivi che esibiscano performance in termini di efficienza energetica e velocità di risposta superiori allo standard attuale. I Fin-FET fanno parte proprio di questa classe di dispositivi. Utilizzando un programma di simulazione numerica è stato possibile dimostrare che la tensione di soglia decresce riducendo la work function del metallo utilizzato per realizzare il gate. Inoltre un'opportuna scelta del metallo consente ragionevolmente di controllare e migliorare la corrente di leakage.

5. Nano ottica e ottica quantistica

L'attività di ricerca svolta a livello teorico nell'anno 2014, pur in stretta collaborazione con gruppi sperimentali, si colloca nel settore scientifico-disciplinare di Fisica della Materia. La ricerca è rivolta allo studio della interazione su scala nanometrica fra la radiazione elettromagnetica e strutture a bassa dimensionalità. In particolare è stato studiato il comportamento ottico di micro particelle di argento e di nanostrutture core-shell di Au/ PEG, inoltre sono state studiate le forze ottiche generate nella interazione radiazione-materia. E' stata dimostrata anche la possibilità di ottenere un accoppiamento ultra-forte, tipico delle micro cavità planari a semiconduttore,

fra campo elettromagnetico e strutture con dimensioni nanometriche. Abbiamo focalizzato il nostro studio anche su nanostrutture costituite da molecole organiche mostrando che con questi oggetti possono essere progettati dispositivi e nano circuiti plasmonici ultraveloci a controllo ottico. In collaborazione con il prestigioso Quantum Condensed Matter Research Group di Riken, è stata sviluppata un'analisi del regime di accoppiamento luce-materia ultraforte in circuiti quantistici superconduttori. Il gruppo si è anche occupato di effetto Casimir dinamico in circuiti superconduttori e di optomeccanica quantistica esplorando il regime di interazione ultraforte anche in questi sistemi.

6. Spintronics

L'attività di ricerca è volta a studiare il comportamento statico e dinamico della magnetizzazione in materiali ferromagnetici di dimensioni sub-micrometriche utilizzando il modello del micromagnetismo. L'attività di ricerca segue principalmente due filoni, (i) lo sviluppo e l'ottimizzazione di algoritmi numerici incluso calcolo parallelo e multi-GPU, per l'integrazione di equazione differenziali alle derivate parziali, (ii) modellizzazione e descrizione di dispositivi spintronici quali oscillatori, ricevitore alle microonde, energy harvesting e memorie a trasferimento di momento magnetico di spin. L'attività teorica è svolta in collaborazione con diversi centri di ricerca leader nella spintronica sperimentale.

Elenco delle pubblicazioni

- 1) Magazzu, A. et al.
Optical tweezers: a non-destructive tool for soft and biomaterial investigations
RENDICONTI LINCEI-SCIENZE FISICHE E NATURALI Volume: 26 Supplement: 2 Pages: 203-218
Published: AUG 2015
- 2) Arena, S. et al.
Plasmonic Absorption Enhancement of a Single Quantum Dot
PLASMONICS Volume: 10 Issue: 4 Pages: 955-962 Published: AUG 2015
- 3) Amendola, Vincenzo et al.
Superior plasmon absorption in iron-doped gold nanoparticles
NANOSCALE Volume: 7 Issue: 19 Pages: 8782-8792 Published: 2015
- 4) Messina, E. et al.
Optical trapping of silver nanoplatelets
OPTICS EXPRESS Volume: 23 Issue: 7 Pages: 8720-8730 Published: APR 6 2015
- 5) Spadaro, Donatella et al.
Scaling of optical forces on Au-PEG core-shell nanoparticles
RSC ADVANCES Volume: 5 Issue: 113 Pages: 93139-93146 Published: 2015
- 6) Garziano, Luigi et al.
Multiphoton quantum Rabi oscillations in ultrastrong cavity QED
PHYSICAL REVIEW A Volume: 92 Issue: 6 Article Number: 063830 Published: DEC 18 2015
- 7) Stassi, Roberto et al.
Quantum control and long-range quantum correlations in dynamical Casimir arrays
PHYSICAL REVIEW A Volume: 92 Issue: 1 Article Number: 013830 Published: JUL 20 2015
- 8) Garziano, L. et al.
Single-step arbitrary control of mechanical quantum states in ultrastrong optomechanics
PHYSICAL REVIEW A Volume: 91 Issue: 2 Article Number: 023809 Published: FEB 5 2015
- 9) R. Inguanta, T. Spanò, S. Piazza, C. Sunseri, F. Barreca, E. Fazio, F. Neri, L. Silipigni
Electrodeposition and Characterization of Mo oxide nanostructures
Chemical Engineering Transactions vol. 43, 685(2015)
- 10) P. Frontera, A. Malara, S. Stelitano, E. Fazio, F. Neri, L. Scarpino, P. L. Antonucci, S. Santangelo
A new approach to the synthesis of titania nano-powders enriched with very high contents of carbon nanotubes by electro-spinning
Mat. Chem. and Phys. 153, 338-345 (2015)
- 11) A. Allegra, E. Fazio, D. Franco, M. Nicolò, S. Trusso, F. Neri, C. Musolino, S. Guglielmino
Low-energy laser irradiation promotes cellular damage in Glucocorticoids-resistant Multiple Myeloma cells
Leukemia & Lymphoma, May 2015; 56(5): 1514–1516

- 12) M.C. Spadaro, E. Fazio, F. Neri, S. Trusso, P. M. Ossi
On the role of the ablated mass on the propagation of a laser-generated plasma in an ambient gas
Europhysics Letters, 109, 25002 (2015)
- 13) P. Cardiano, E. Fazio, G. Lazzara, S. Manickam, S. Milioto, F. Neri, P. G. Mineo, A. Piperno, S. Lo Schiavo
Highly untangled multiwalled carbon nanotube@polyhedral oligomeric silsesquioxane ionic hybrids: synthesis, characterization and nonlinear optical properties
Carbon, 86, (2015) 325-337
- 14) A. Piperno, G. Neri, A. Scala, F. Barreca, E. Fazio, P. G. Mineo, A. Mazzaglia, G. Grassi
Engineering of carbon based nanomaterials by ring-opening reaction of reactive azlactone graphene platform, *Chemical Communications*, 51, 4846 – 4849 (2015)
- 15) E. Fazio, M. Hjiri, R. Dhahri, L. El Mir, G. Sabatino, F. Barreca, F. Neri, S. G. Leonardi, S. Pistone, G. Neri
Ammonia sensing properties of V-doped ZnO:Ca nanopowders prepared by sol-gel synthesis
Journal of Solid State Chemistry, 226, 192-200 (2015)
- 16) R. Dhahri, M. Hjiri, L. El Mir, E. Fazio, F. Neri, F. Barreca, N. Donato, A. Bonavita, G. S. Leonardi, G. Neri
ZnO:Ca nanopowders with enhanced CO₂ sensing properties
J. Phys. D: Appl. Phys. 48 (2015) 255503 (7pp)
- 17) V. Rebuttin, E. Fazio, S. Santangelo, F. Neri, G. Caputo, C. Martin, T. Brousse, F. Favier, N. Pinna
Chemical modification of graphene oxide through diazonium chemistry and its influence on the structure-properties relationships of graphene oxide-iron oxide nanocomposites
Chemistry - A European Journal 21 (35), pp. 12465-12474 (2015).
- 18) M. M. Antunes, S. Lima, P. Neves, A. Magalhães, E. Fazio, F. Neri, C. M. Silva, S.M. Rocha, M. Pillinger, A. Urakawa, A. A. Valente:
One-pot conversion of furfural to useful bio-products in the presence of a Sn-containing zeolite beta catalyst prepared via post-synthesis routes
Journal of Catalysis 329, 522–537 (2015)
- 19) G. Lentini, E. Fazio, F. Calabrese, L. M. De Plano, M. Puliafico, D. Franco, M. S. Nicolò, S. Carnazza, S. Trusso, A. Allegra, F. Neri, C. Musolino, S. P. P. Guglielmino
Phage-Ag NPs complex as SERS probe for U937Cell identification
Biosensors and Bioelectronics 74, 398–405 (2015).
- 20) N. Lavanya, E. Fazio, F. Neri, A. Bonavita, S. G. Leonardi, G. Neri, C. Sekar
Simultaneous electrochemical detection of epinephrine and uric acid in the presence of ascorbic acid using SnO₂/graphene nanocomposite modified glassy carbon electrode
Sensors and Actuators, B: Chemical, 221, 1412-1422 (2015)
- 21) F. Caridi, E. Fazio, S. Scibilia, G. Sabatino, A.M. Mezzasalma, F. Neri, D. Castrizio
Microchemical investigations of historical and circulating national coins
Radiation Effects and Defects in Solids, 170 (7-8), 696-706 (2015)
- 22) P. A. Russo, S. Santangelo, R. Zhang, E. Fazio, F. Neri, M. D'Arienzo, N. Pinna
Stabilization of titanium dioxide nanoparticles at the surface of carbon nanomaterials promoted by microwave heating
Chemistry - A European Journal, 21 (42), pp. 14901-14910 (2015);
- 23) E. Fazio, A. Scala, S. Grimato, A. Ridolfo, G. Grassi, F. Neri
Laser light triggered smart release of Silibinin from a PEGylated-PLGA gold nanocomposite
J. Mat. Chem. B, 3, 9023-9032 (2015)
- 24) G. Neri, A. Scala, E. Fazio, P.G Mineo, A. Rescifina, A. Piperno, G. Grassi:
Repurposing of oxazolone chemistry gaining access to functionalized graphene nanosheets in a top-down approach from graphite
Chem. Sci., 6, 6961–6970 (2015)
- 25) C. Triolo, E. Fazio, F. Neri, A.M. Mezzasalma, S. Trusso, S. Patanè
Correlation between structural and electrical properties of PLD prepared ZnO thin films used as a photodetector material
Appl. Surf. Sci. 359 (2015), 266–271

- 26) Bonghi, M., Adriani, O., Albergo, S., Auditore, L., Bagliesi, M.G., Berti, E., Bigongiari, G., Boezio, M., Bonechi, L., Bonechi, S., Bonvicini, V., Botta, S., Brogi, P., Carotenuto, G., Cassese, A., Castellini, G., Cattaneo, P.W.I., Cauz, D., Cumani, P., D'Alessandro, R., Detti, S., Fasoli, M., Gregorio, A., Lamberto, A., Lenzi, P., Maestro, P., Marrocchesi, P.S., Mezzasalma, A., Miritello, M., Mori, N., Papini, P., Pauletta, G., Rappazzo, G.F., Rappoldi, A.I., Ricciarini, S., Spillantini, P., Starodubtsev, O., Sulaj, A., Tiberio, A., Trifirò, A., Trimarchi, M., Vannuccini, E., Vedda, A., Zampa, G., Zampa, N., Zerbo, B.
CALOCUBE: An approach to high-granularity and homogenous calorimetry for space based detectors
Journal of Physics: Conference Series, 587(1), 2015, Art. Numb. 012029
- 27) A. Cacciola, C. Triolo, O. Di Stefano, A. Genco, M. Mazzeo, R. Saija, S. Patanè, S. Savasta
Subdiffraction Light Concentration by J-Aggregate Nanostructures”*ACS Photonics*, (2015)
- 28) Barbera L, Gattuso G, F.H.Kohnke, A. Notti, S. Pappalardo, M.F. Parisi, S. Patanè, N. Micali, V. Villari
Self-assembly of amphiphilic anionic calix[4]arenes and encapsulation of poorly soluble naproxen and flurbiprofen,
Organic and Biomolecular Chemistry, 13, 6468-6473, (2015).
- 29) N. Boukourt, B. Hadri, A. Caddemi, S. Patanè, G. Crupi
Simulation of Nanoscale SOI n-FinFET at 8 nm Gate Length in 3D Using ATLAS SILVACO, *Trans. Electr. Electron. Mater.*, 16, 156-161 (2015)
- 30) M. Allietta, M. Scavini, A. Naldoni, M. Coduri, S. Cappelli, C. Oliva, S. Santangelo, C. Triolo, S. Patanè, A. Lascialfari, V. Scagnoli
Interplay of structural and magnetic nanoscale phase separation in layered cobaltites
Phys. Rev. B 92, 054202 (2015).
- 31) S. Gambino, A. Genco, G. Accorsi, O. Di Stefano, S. Savasta, S. Patanè, G. Gigli, M. Mazzeo
Ultrastrong light-matter coupling in electroluminescent organic microcavities
Applied Materials Today 1 (2015) 33–36
- 32) M. Castriciano, R. Zagami, M. Trapani, A. Romeo, S. Patanè, L. Monsù Scolaro
Investigation of the Aggregation Properties of a Chiral Porphyrin Bearing Citronellal Meso Substituent Groups.
Chirality, 27 (12), 900-6 (2015)
- 33) G. Finocchio et al
Skyrmion based microwave detectors and harvesting
Appl. Phys. Lett. 107, (2015) 262401
- 34) S. Fin, R. Tomasello, D. Bisero, M. Marangolo, M. Sacchi, H. Popescu, M. Eddrief, C. Hepburn, G. Finocchio, M. Carpentieri, A. Rettori, M. G. Pini, S. Tacchi
In-plane rotation of magnetic stripe domains in Fe_{1-x}Gax thin films
Phys. Rev. B, 92, (2015) 224411
- 35) M. Carpentieri, R. Tomasello, R. Zivieri, G. Finocchio
Topological, non-topological and instanton droplets driven by spin-transfer torque in materials with perpendicular magnetic anisotropy and Dzyaloshinskii-Moriya Interaction
Scientific Reports, 5, (2015) 16184
- 36) D. Milardi - M. Gaeta - S. Marino - A. Arrigo - G. Vaccarino - E. m. Mormina - G. Rizzo - C. Milazzo - G. Finocchio - A. Baglieri - G. Anastasi - A. Quartarone
Basal Ganglia Network by Constrained Spherical Deconvolution: A Possible Cortico-Pallidal Pathway?
Movement Disorders, 30(3), (2015) 342-9
- 37) G. Siracusano, R. Tomasello, V. Puliafito, A. Giordano, M. Carpentieri, B. Azzerboni, A. La Corte, M. Carpentieri, G. Finocchio
Intrinsic synchronization of an array of spin-torque oscillators driven by the spin-Hall effect
Journal of Applied Physics, 117,(2015) 17E504
- 38) D. Milardi, et al
Cortical and sub-cortical connections of the human claustrum revealed in vivo by high definition fiber tractography constrained spherical deconvolution tractography
Cerebral Cortex, vol. 25, (2), (2015) 406-414
- 39) M. Madami, et al
Micro-focused Brillouin light scattering study of the magnetization dynamics driven by Spin Hall effect in a transversely magnetized NiFe nanowire
Journal of Applied Physics, 117, (2015) 17D504

Partecipazioni e comunicazione a congressi

- R.C. Ponterio, S. Trusso, M. Tommasini, E. Fazio, C. Zanchi, P.M. Ossi
“SERS-active low-cost flexible substrates for direct sampling of organic dyes”
 TECHNART2015 Conference, 27–30 aprile 2015 Monastero dei Benedettini, Catania
 (Book of Abstract, Poster Section 2, P2-108)
- S. Scibilia, G. Lentini, E. Fazio, D. Franco, F. Neri, A. M. Mezzasalma, S. Guglielmino
“Self-assembly of silver nanoparticles and bacteriophage”
 Symposium V : Bioinspired and biointegrated materials as frontiers nanomaterials V of the E-MRS
 2015 Spring Meeting, Lille (France) 11-15 maggio 2015.
- G. Lentini, F. Calabrese, S. Carnazza, L. M. De Plano, D. Franco, E. Fazio, S. Trusso, F. Neri, S. Gu-
 glielmino
“Phage-based biosensor for rapid detection of bacterial pathogen in blood”
 Symposium U : Materials and biosensor systems for in vitro diagnostic applications of the E-MRS 2015
 Spring Meeting, Lille (France) 11-15 maggio 2015.
- S. Filice, D. D’Angelo, S.F. Spanò, G. Compagnini, M. Sinatra, E. Fazio, L. D’Urso, V.
 Privitera and S. Scalese:
*“Modification of graphene oxide and graphene oxide-TiO₂ solutions by pulsed laser irradiation
 for dye degradation”*
 Materials Science in Semiconductor Processing Elsevier (proceeding of symposium B *“Materials for
 water splitting and water purification”* of E-MRS spring meeting in Lille, France), 11-15 maggio
 2015.
- Tescione, S. Marchionni, E. Fazio, C. Romano, F. Tassi, F. Neri, M. Mattei, S. Conticelli
*“Coupled isotopic and Raman study of the oenological food chains of Red and White wines from the
 same Vineyard for defining the fringerprint relevant for the geographic traceability”*
 1st MS-Wine Day MS for grapes, wine, spirits, Firenze, 16-17 aprile 2015.
- P. A. Russo, R. Zhang, S. Santangelo, E. Fazio, F. Neri, N. Pinna
*“Stabilization of TiO₂ nanoparticles at the reduced graphene oxide surface promoted by microwave
 heating”*
 The Graphene Week 2015 ; 22 – 26 giugno 2015 Manchester, UK.
- S. Grimato, A. Ridolfo, M. Santoro, A. Scala, G. Grassi, F. Neri, E. Fazio:
“Laser triggered release from polymeric matrix loaded with metallic nanoparticles”
 Soft Interaction in Bio-Nanostructures Workshop, Roccalumera (Me), 23 luglio 2015
- G. Neri, N. Micale, A. Scala, E. Fazio, G.P. Mineo, G. Sortino, A. Mazzaglia, G. Grassi, A. Piperno:
“Synthesis of Nanoterapeutics based on G/HA platforms for osteosarcoma targeting”
 Soft Interaction in Bio-Nanostructures Workshop, Roccalumera (Me), 23 luglio 2015
- P. A. Russo, S. Santangelo, R. Zhang, E. Fazio, F. Neri, M. D’Arienzo, N. Pinna
“Stabilization of TiO₂ nanoparticles at the carbon surface promoted by microwave heating”
 Conference on Diamond and Carbon Materials , Bad Homburg, Germany, 6-10 September (2015)
- S. Santangelo, P. Frontera, S. Stelitano, A. Malara, E. Fazio, F. Neri, P. Antonucci
*“Free-standing and flexible carbon eriche Co₃O₄-based mats as electrode materials in lithium-ion bat-
 teries”*
 Conference on Diamond and Carbon Materials , Bad Homburg, Germany, 6-10 September
 ber (2015)
- P. Frontera, F. Pantò, P.L. Antonucci, A. Malara, E. Fazio, F. Neri, S. Stelitano, S. Santangelo
“Flexible Graphene-Enriched Fibrous Electrode Nanomaterials”
 GraphITA Workshop, Bologna, 14-18 settembre 2015.
- A. Ridolfo, S. Scibilia, S. Santangelo, L. D’Urso, S. Spadaro, D. Cosio, A. M. Mezzasalma, F. Neri, E.
 Fazio
“Enhanced non linear optical properties of ZnO nanocolloids”
 ICES 2015 Conference, Messina 12-15 ottobre (2015)
- A. Piperno, G. Neri, A. Scala, E. Fazio, P. G. Mineo, A. Rescifina, G. Grassi:
“Synthesis and characterization of graphene/gold nanocomposites”
 ICES 2015 Conference, Messina 12-15 ottobre (2015)

- M. Marelli, F. Malara, A. Naldoni, M. Allieta, S. Santangelo, S. Patané, C. Triolo, R. Psaro, V. Dal Santo:
“Si-modified solvothermal synthesis of α -Fe₂O₃ for photoelectrochemical applications” “MCM 2015”,
Multinational Congress on Microscopy Eger (Hu), 23–28 August 2015
- S. Santangelo, P. Frontera, F. Pantò, A. Naldoni, F. Malara, M. Marelli, V. Dal Santo, S. Patané, C. Triolo, P.L. Antonucci
“Electro-spun hematite fibrous films as photo-anode for water splitting” “NanoTechITALY2015”,
International Conference on Cross-cutting KETs for Responsible Innovation Bologna (I), 25–27
November 2015
- Triolo C., Trusso S., Savasta S., Patané S., Saija R.
“Near-field plasmons from gold nanoparticles: theoretical and experimental evidence” “ COST Action
MP1403 “Nanoscale Quantum Optics”, , Belgrade (Serbia), 9th-10th of April 2015
- Triolo C, Cacciola A, Di Stefano O, Genco A, Mazzeo M, Saija R, Patané S, Savasta S
“Plasmon-like Subdiffraction Light Concentration by J-Aggregate Nanostructures” 3th Conference
Plasmonica 2015, July 1-3, 2015 Padova, Italy
- Triolo C, Cacciola A, Genco A, Mazzeo M, Saija R, Patané S, Savasta S, O. Di Stefano
“Localized Surface Polaritons in J-Aggregate Nanostructures”, FisMat2015, 28 September-2 October
2015, Palermo Italy.
- Boukortt N, Caddemi A, Cardillo E, Crupi G, Hadri B, Patané S
“Inverse Modeling of an AlGaAs/GaAs HEMT from DC and Microwave Measurements”, TELSIKS
2015, Nis, Serbia, October 14-17 (2015)
- Boukortt N, Hadri B, Torrisi L, Patané S, Caddemi A, Crupi G
“Work Function and Gate Length Effect On Electrical Characteristics Of n-FinFET in 3D Using AT-
LAS SILVACO”, nanoPT 2015, Porto, Portugal, February 11-13 (2015)
- Boukortt N, Hadri B, Torrisi L, Patané S, Caddemi A, Crupi G
“3D Simulation of DG-FinFET transistor with different channel materials and gate dielectrics”, Nano-
tech France 2015 Paris- France, Jun 15-17 (2015)
- M.A. Iati, A. Cacciola, R. Saija, B. Fazio, O.M. Maragò, P.G. Gucciardi
“Plasmon coupling in metal nanoparticles: Evidence for a universal scaling behaviour?”, Plasmonica
2015, Padova, 1-3 luglio 2015
- M.A. Iati, A. Cacciola, R. Saija, B. Fazio, O.M. Maragò, P.G. Gucciardi
“Plasmon coupling in metal dimers and nanoshells: Some issues about the universal size-scaling of
plasmon interaction”, ICES 2015, 2nd International Conference on Enhanced Spectroscopies, Messina,
12-15 Ottobre 2015
- M.A. Iati, A. Cacciola, R. Saija, B. Fazio, O.M. Maragò, P.G. Gucciardi
“Accoppiamento plasmonico tra nanoparticelle metalliche: una discussione sull’universalità della legge
di scala dell’interazione”, Congresso dell’Istituto per i Processi Chimico-Fisici del CNR, Sant’Alessio
Siculo (Messina), 4-6 ottobre 2015.
- M.G. Donato, E. Messina, D. Spadaro, M.A. Iati, A. Foti, B. Fazio, R. Saija, P.G. Gucciardi, O.M. Mara-
gò
“Intrappolamento ottico di nanostrutture plasmoniche”, Congresso dell’Istituto per i Processi Chimico-
Fisici del CNR, Sant’Alessio Siculo (Messina), 4-6 ottobre 2015.
- S. Savasta
“Ultrastrong coupling regime of excitons interacting with microcavity photons or localized surface
plasmons”, Relazione su invito al 79th Annual Meeting of the DPG and DPG Spring Meeting, Berlino,
15 - 20 March 2015

- G.Finocchio
 “Design of skyrmion based devices from racetrack to microwave detectors and oscillators” (INVITED talk). Joint meeting of Club Español de Magnetismo and IEEE Magnetic chapter Spain. Seville, Spain, December 10-11, 2015.

 G.Finocchio “Skyrmion magnetic technology” (INVITED talk). workshop in "Topological Spintronics & Skyrmionics". Grenoble, France, October 5-7, 2015.
- R. TOMASELLO - E. MARTINEZ - R. ZIVIERI - L. TORRES - M. CARPENTIERI - G.Finocchio
 "Skyrmion Racetrack Memory Driven By Spin Hall Effect". O1. 10th Hysteresis Modeling and Micromagnetics HMM 2015. IASI, Romania, 18-20 May 2015.
- G.Finocchio - M. CARPENTIERI - B. AZZERBONI - B. FANG - Z. ZENG
 "Advances In Spin-Torque Diode Sensitivity: Theory And Experiments". O25. 10th Hysteresis Modeling and Micromagnetics HMM 2015. IASI, Romania, 18-20 May 2015.
- R. ZIVIERI - R. TOMASELLO - M. CARPENTIERI - G.Finocchio
 "Skyrmion motion induced by spin-Hall current in constrained geometries". (oral presentation) AF-07. INTERMAG Asia 2015. 11-15 May 2015, Beijing, China.
- M. CARPENTIERI - R. TOMASELLO - G.Finocchio - R. ZIVIERI
 "Topological Skyrmion Dynamics Driven by Spin-Transfer Torque". (oral presentation) CB-10. INTERMAG Asia 2015. 11-15 May 2015, Beijing, China.
- A. GIORDANO - A. LAUDANI - G. GUBBIOTTI - B. AZZERBONI - M. CARPENTIERI - G.Finocchio
 "Spin-Hall Nano-oscillator: a study based on the synchronization". (oral presentation) BB-07. INTERMAG Asia 2015. 11-15 May 2015, Beijing, China.
- R. TOMASELLO - M. RICCI - P. BURRASCANO - M. LANUZZA - A. GIORDANO - M. CARPENTIERI - G.Finocchio
 "Skyrmion Based Microwave Detector and STT-MRAM". (oral presentation) CB-11. INTERMAG Asia 2015. 11-15 May 2015, Beijing, China.

Collaborazioni scientifiche esterne:

- Fritz Haber Institute of the Max Planck Society (Berlin), Dr. Nicola Pinna.
- Southampton University Prof. Simone De Liberato
- Center for Emergent Matter Science (CEMS), in RIKEN, F. Nori.
- University College London, dr. Phil Jones
- Bilkent University, Ankara, Prof. G. Volpe
- Dipartimento di Fisica, Università di Pisa, Prof.ssa M. Allegrini, Prof. Francesco Fuso
- Dipartimento di Matematica e Fisica “E. de Giorgi” - Università del Salento, Via Monteroni, 73100, Lecce (Italy), Prof. G. Gigli
- NNL CNR Istituto Nanoscienze, Via per Amesano 16, 73100, Lecce (Italy), Prof. Marco Mazzeo
- ST Microelectronics, Stabilimento di Catania, Dott. Davide Patti, Ing. Sebastiano Russo.
- Dipartimento di Ingegneria Chimica Gestionale Informatica Meccanica dell’Università di Palermo, Prof. Sunseri e Dott. R. Inguanta.
- Dipartimento di Energia – Politecnico di Milano, Prof. P. Ossi
- Dipartimento di Chimica – Università di Catania, Prof. G. Compagnini, Dr.ssa L.D’Urso
- Dipartimento di Meccanica & Materiali - Università Mediterranea di Reggio Calabria Prof.ssa S. Santangelo
- Istituto C.N.R.: Dr. S. Trusso, Dr. A. Mazzaglia, Dr. G. Salvato, Dr. F. Aliotta, O. Maragò, A. Iatì.
- Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche ed Ambientali - Università di Messina Prof.ssa G. De Luca.
- Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche ed Ambientali - Università di Messina, Prof. L. Monsù Scolaro, Prof. G. Gattuso.
- Dip.to Ingegneria Elettronica, Chimica e Ingegneria Industriale, Università di Messina, Prof.ssa I. Milone, Prof. G. Neri

- Dipartimento di Scienze biologiche e ambientali - Università di Messina, Prof. S. Guglielmino.
- Dipartimento di Chirurgia generale, Oncologia e Anatomia Patologica - Università di Messina, Dr. A. Allegra.
- INGV - Via di Vigna Murata, 605 - 00143 Roma - Dr. M. Chiappini
Dipartimento di Ingegneria Industriale, Università di Perugia – Perugia (PG) Prof. E. Cardelli
- “Departamento de Física Aplicada” Universidad de Salamanca – Salamanca (Spagna) Prof. L. Torres, Prof. L. Lopez Diaz
- Department of Physics and Astronomy, Irvine University – Irvine, CA (USA) Prof. I. N. Krivorotov
- Laboratory of Atomic and Solid State Physics Cornell University – Ithaca, NY (USA) Prof. D. C. Ralph, Prof. B. Buhrman
- Bogazici University, Physics Department, KB 331-O –34342 Bebek/Istanbul, Turkey Prof. O. Ozatay
- Department of Applied Mathematics, University of Crete, Heraklion, Greece. Prof. S. Komineas
- INRIM – Istituto di Ricerca Metrologica, Elettromagnetic Division, Torino, Italy, Dr. P. Tiberto
- POLITECNICO OF BARI - Department of Elettrotecnica ed Elettronica, Bari, Italy. Dr. M. Carpentieri
- Suzhou Institute of Nanotech and Nanobionics, Suzhou, China, Prof. Z. Zeng

5.15 Gruppo di ricerca in “ Biofisica , Fisica Sperimentale dei Sistemi Complessi e Fisica Applicata ai Beni Culturali e Ambientali”

Componenti: Giacomo Maisano (PO) , Giuseppe Carini (PO), , Maria Cutroni (PO), Salvatore Magazù (PO), Domenico Majolino (PO), Vincenza Crupi (PO), Ulderico Wanderlingh (PA), Giovanna D’Angelo (PA), Caterina Branca (PA), Andrea Mandanici (PA), Valentina Venuti (PA), Mauro Federico (RU).

Dottorandi: Dr.ssa Maria Teresa Caccamo, Dr. Salvina Coppolino, Dr. Antonio Cannuli, Dr. Giuseppe Castorina, Dr. Franco Colombo, , Dr.ssa Giovanna Ruello, Dr.ssa Khaoula Khouzami.

Collaboratori:

Prof.ssa Federica Migliardo, Dott.ssa Francesca Longo, Dott. Giovanni Carini, Dott.ssa Cristina Crupi, Dott.ssa Simona Rifici, Dott.ssa Valeria Conti Nibali, Dr. Emanuele Calabrò

TEMATICHE SCIENTIFICHE

5.15.a. Fisica sperimentale della materia e Fisica applicata ai Beni culturali.

Componenti: Prof. Domenico Majolino (Responsabile), Prof. Giacomo Maisano, Prof.ssa Vincenza Crupi, Prof.ssa Valentina Venuti, Dott.ssa Francesca Longo.

L’attività di ricerca svolta nell’anno 2015, è stata focalizzata sull’investigazione delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi organici sopramolecolari, con particolare riguardo a sistemi costituiti da complessi di inclusione e da nanopugne (CDNS) a base di ciclodestrina.

Entrambi i sistemi sono di grande interesse biofisico, presentano infatti idonee caratteristiche di solubilità e stabilità per la loro applicazione in campo farmaceutico in grado di incapsulare farmaci diversi e capaci di controllare il rilascio degli stessi. Tale attività di ricerca, che ha previsto l’impiego congiunto di differenti e complementari tecniche spettroscopiche supportate da simulazioni quanto-meccaniche, è stata portata avanti nell’ambito di un’ampia collaborazione con i gruppi di ricerca del prof. Andrea Mele (Politecnico di Milano) e del prof. Francesco Trotta (Università di Torino), quest’ultimo detentore anche del brevetto per la sintesi delle nanopugne a base di ciclodestrine e con le colleghe Prof.ssa C. A. Ventura, Prof.ssa R. Stancanelli e Prof.ssa S. Tommasini del Dipartimento di Scienze del Farmaco e dei Prodotti per la Salute dell’Università di Messina, oggi Dipartimento di Scienze chimiche, biologiche, farmaceutiche e ambientali.

Infine, per quanto riguarda la ricerca svolta nel campo dei beni culturali, essa ha avuto come obiettivo la caratterizzazione chimico-fisica, mineralogico-petrografica e tecnologica di varie tipologie di manufatti

(ceramiche e intonaci decorati). In particolare l'uso di protocolli metodologici innovativi e di strumentazioni portatili si è rivelato cruciale per una completa e non invasiva caratterizzazione del reperto che ha portato ad una corretta collocazione storico-geografica.

Le sopraccitate linee di ricerca possono pertanto essere dettagliate secondo le seguenti tematiche:

Tematica 1 Studio delle proprietà strutturali e dinamiche di sistemi supra-molecolari

Per quanto concerne i complessi di inclusione, è stato investigato, in acqua, l'effetto della complessazione con sulfobutiletere- β -ciclodestrina sull'assorbimento UV di genisteina (Gen) e daidzeina (Dai). Uno studio di solubilità fase è stato eseguito secondo il metodo riportato da Higuchi e Connors, onde valutare i cambiamenti degli isoflavoni nello stato complessazione e i diagrammi di solubilità ottenuti per entrambi suggeriscono che essi formano complessi in rapporto molare 1:1. La complessazione è provata aumentare fortemente la solubilità in acqua di isoflavoni. Sono stati altresì preparati complessi di inclusione allo stato solido in rapporto molare 1: 1, caratterizzati poi mediante spettroscopia FTIR-ATR, con particolare riguardo alle vibrazioni di stretching O-H e C=O, ottenendo informazioni strutturali sulle modificazioni indotte dalla complessazione sul network a legame idrogeno.

Per quanto riguarda invece le nanospugne a base di ciclodestrina (CDNS), sono state innanzitutto investigate, sulla scala temporale dei picosecondi, l'entità e la natura delle fluttuazioni termiche in questa classe innovativa di polimeri reticolati mediante esperimenti di scattering elastico e quasi elastico di neutroni. Lo studio presentato ha lo scopo di chiarire la natura dei riarrangiamenti conformazionali attivati dall'aumento della temperatura nel polimero, e i vincoli imposti dal legame idrogeno intra- ed intermolecolare sulla dinamica interna della macromolecola. I risultati suggeriscono uno schema secondo cui i riarrangiamenti conformazionali che coinvolgono la torsione dei gruppi OH intorno ai legami C-O dominano le dinamiche interne del polimero nella scala temporale dei picosecondi. Inoltre, i valori stimati degli spostamenti quadratici medi rivelano che i movimenti degli atomi di idrogeno nelle nanospugne vengono progressivamente ostacolati all'aumentare del grado di reticolazione del polimero. Ancora, lo studio dei rilassamenti molecolari suggerisce un riarrangiamento dinamico del network a legame idrogeno, caratterizzato da una diffusione "jump" degli atomi di idrogeno più mobili appartenenti ai gruppi OH delle unità ciclodestriniche.

Parallelamente, la dinamica dei due componenti principali di sistemi idrogel a base di ciclodestrina, vale a dire acqua e matrice polimerica, è stata esplorata, nel caso paradigmatico di CDNS rigonfiate in acqua, mediante l'uso combinato di UV Raman e spettroscopia FTIR-ATR. La contemporanea presenza, nella struttura della CDNS, di siti idrofili e idrofobi imita la complessità di idrogel di polisaccaridi, dove il bilancio tra idrofilia/idrofobia e il grado di entanglement della matrice polimerica rappresenta il parametro principale per l'esistenza di fasi gel o liquid-like.

Le modifiche della dinamica vibrazionale degli idrogels a base di CDNS sono state studiate in funzione del livello di idratazione del polimero in acqua e della composizione molecolare della matrice, ovvero il grado di reticolazione. In questo modo, il contributo fornito dai gruppi idrofobi e idrofili dei polimeri rigonfiati in acqua nella formazione della fase gel è stato separatamente valutato. Come principale risultato, abbiamo osservato che i gruppi CH idrofobi inseriti nell'anello aromatico delle CDNS sperimentano una perturbazione dinamica più pronunciata rispetto ai gruppi carbonilici a causa della collisione tra il solvente e gli atomi vibranti del polimero.

Tematica 2 Metodologie fisiche applicate ai beni culturali

In questo ambito, è stata innanzitutto messa in luce la potenzialità dello scattering di neutroni a piccolo angolo (SANS) come strumento analitico non invasivo per lo studio di aspetti tecnologici, unitamente ad altre, più usuali, metodologie come la microscopia elettronica a scansione (SEM), al fine di indagare approfonditamente la tecnologia di produzione di ceramiche siciliane risalenti all'Età del Bronzo Medio.

E' stato poi effettuato, mediante l'uso congiunto di strumentazioni portatili, vale a dire un analizzatore di fluorescenza a raggi (XRF) e uno spettrometro Raman entrambi portatili, la superficie dipinta di intonaci provenienti da diverse aree di un importante complesso monumentale romano, noto come Villa dei Quintili (Roma, Italia), risalente alla prima metà del II sec. a. C.. Le misure XRF e Raman hanno permesso l'identificazione dei pigmenti attraverso, rispettivamente, la composizione elementare e molecolare. In particolare, l'approccio multi-tecnica, non invasivo, si è rivelato fondamentale per distinguere i due pigmenti rossastri. Per confermare e integrare i risultati XRF e Raman, due metodi micro distruttivi da laboratorio, cioè microscopia ottica (OM) e microscopia elettronica a scansione accoppiata con uno spettrometro a raggi X a

dispersione di energia (SEM-EDS), sono stati utilizzati sugli stessi campioni. Tutti i risultati sperimentali gettano luce sui materiali che caratterizzano lo strato superficiale verniciato e sulle metodologie di manifattura, fornendo informazioni utili per eventuali processi di restauro.

Pubblicazioni su riviste ISI

- 1) R. Stancanelli, V. Venuti, A. Arigo, M.L. Calabrò, C. Cannavà, V. Crupi, D. Majolino, S. Tommasini, C.A. Ventura, *JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY*, **83** (1-2), 27-36 (2015).
- 2) B. Rossi, V. Venuti, A. Mele, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, F. D'Amico, A. Gessini, *JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS* **142** (1) Article Number: 014901 (2015).
- 3) B. Rossi, V. Venuti, F. D'Amico, A. Gessini, A. Mele, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, C. Masciovecchio, *SOFT MATTER* **11** (29), 5862-5871 (2015).
- 4) V. Venuti, B. Rossi, F. D'Amico, A. Mele, F. Castiglione, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, A. Gessini, C. Masciovecchio, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS* **17** (15), 10274-10282 (2015).
- 5) B. Rossi, V. Venuti, A. Paciaroni, A. Mele, S. Longeville, F. Natali, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, *SOFT MATTER* **11** (11), 2183-2192 (2015).
- 6) B. Rossi, V. Venuti, F. D'Amico, A. Gessini, F. Castiglione, A. Mele, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, C. Masciovecchio, *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS* **17** (2), 963-971 (2015).
- 7) V. Crupi, G. Galli, M.F. La Russa, F. Longo, G. Maisano, D. Majolino, M. Malagodi, A. Pezzino, M. Ricca, B. Rossi, S.A. Ruffolo, V. Venuti, *APPLIED SURFACE SCIENCE* **349**, 924-930 (2015).
- 8) S. Raneri, G. Barone, V. Crupi, F. Longo, D. Majolino, P. Mazzoleni, D. Tanasi, J. Teixeira, V. Valentina, *PERIODICO DI MINERALOGIA* **84** (1), 1-22 (2015).

Partecipazioni e comunicazione a congressi) V. Crupi, V. Allodi, G. Galli, M.F. La Russa, F. Longo, D. Majolino, G. Mariotto, B. Rossi, S.A. Ruffolo, V. Venuti, A. Pezzino.

“Non-destructive investigation of pigments by Raman spectroscopy: the case of “Villa dei Quintili” (Rome, Italy)”

TECHNART 2015 – Catania, April 27 - 30, 2015

2) R. Albin, V. Ciao, V. Crupi, M. F. La Russa, F. Longo, A. Macchia, D. Majolino, B. Rossi, S. A. Ruffolo, A. Pezzino, V. Venuti

“Catacombs of San Gennaro: multi analytical investigation of decorated Plasters”.

TECHNART 2015 – Catania, April 27 - 30, 2015.

3) V. Crupi, M. Interdonato, F. Longo, G. Maisano, D. Majolino, B. Rossi, V. Venuti

“Coulometry for the detection of water content in archaeological findings”

Accademia Peloritana dei Pericolanti, Classe di Scienze Fisiche, Matematiche e Naturali - Adunanza scientifica 15 Giugno 2015 – Messina.

4) V. Crupi, D. Majolino, V. Venuti, S. Ruffolo, A. Pezzino

“Multi-technique spectroscopic investigation in Cultural Heritage”

Congresso SIMP - SGI - So.Ge.L - AIV

Il Pianeta Dinamico: sviluppi e prospettive a 100 anni da Wegener

1-4 Settembre 2015, Firenze.

5) V. Crupi, G.M. Crisci, M. F. La Russa, D. Majolino, A. Pezzino, M. Ricca, B. Rossi, S. Ruffolo, J. Teixeira, V. Venuti.

“SANS investigation of the salt-crystallization- and surface-treatment-induced degradation on limestones of historical interest”

Metrology for Archaeology – 1st International Conference

22-25 Ottobre 2015, Benevento.

6) V. Crupi, F. D'Amico, A. Gessini, D. Majolino, C. Masciovecchio, B. Rossi, R. Stancanelli, V. Venuti, C. A. Ventura

“Thermodynamic behaviour of host-guest interactions in cyclodextrins inclusion complexes”

3rd Conference on Frontiers in Water Biophysics

7-12 Settembre 2015, Erice.

- 7) B. Rossi, F. D'Amico, A. Gessini, V. Venuti, A. Mele, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, C. Masciovecchio
 "Hydrophobic/hydrophilic effects in water dynamics as probed by UV Raman scattering"
 3rd Conference on Frontiers in Water Biophysics
 7-12 Settembre 2015, Erice.
- 8) V. Venuti, B. Rossi, F. D'Amico, A. Mele, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, A. Gessini, C. Masciovecchio
 "Vibrational properties of a drug model in cyclodextrin-based cross-linked polymers: a combined FTIR-ATR and Raman spectroscopy investigation"
 4th European Conference on Cyclodextrins
 6-9 Ottobre 2015, Lille, France.
- 9) B. Rossi, V. Venuti, F. D'Amico, A. Gessini, A. Mele, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, C. Masciovecchio
 "Towards an understanding of the mechanism of thermo-activated release of active agents in cyclodextrin nanosponge hydrogels"
 4th European Conference on Cyclodextrins
 6-9 Ottobre 2015, Lille, France.
- 10) B. Rossi, F. D'Amico, A. Gessini, C. Masciovecchio, V. Venuti, V. Crupi, D. Majolino, A. Mele, C. Punta, L. Melone, A. Paciaroni, G. Fadda, F. Trotta
 "Tuning the pore size and water adsorption of amorphous biodegradable hydrogels for drug delivery"
 II Workshop on Stability on Amorphous Pharmaceutical
 10-12 Dicembre 2015, Pisa.
- 11) B. Rossi, F. D'Amico, A. Gessini, V. Venuti, A. Mele, C. Punta, L. Melone, V. Crupi, D. Majolino, F. Trotta, C. Masciovecchio
 "Hydrophobic/hydrophilic effects in the hydration dynamics of polysaccharide hydrogels by UV Raman scattering"
 XIV International Workshop on Complex Systems
 22-25 Marzo 2015, Fai della Paganella (TN).

Collaborazioni

- 1) Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Trento.
- 2) Dipartimento di Chimica, dei Materiali, e di Ingegneria Chimica "G. Natta, Politecnico di Milano.
- 3) Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Torino.
- 4) Dipartimento di Informatica, Università degli Studi di Verona.
- 5) Dipartimento di Scienze e Tecnologia del Farmaco, Università degli Studi di Torino.
- 6) Dipartimento di Dipartimento di Scienze chimiche, biologiche, farmaceutiche e ambientali, Università degli Studi di Messina.
- 7) Dipartimento di Biologia, Ecologia e Scienze della Terra, Università degli Studi della Calabria.
- 8) Dipartimento di Scienze Biologiche, Geologiche e Ambientali - Sezione di Scienze della Terra, Università degli Studi di Catania.
- 9) Elettra - Sincrotrone Trieste, Italia.
- 10) Institut Laue Langevin - ILL - Grenoble, Francia.
- 11) Laboratoire Leon Brillouin - LLB - Saclay, Francia.
- 12) Jülich Centre for Neutron Science - JCNS - Garching, Germania.
- 13) European Synchrotron Radiation Facility - ESRF - Grenoble, Francia
- 14) Rutherford Appleton Laboratory (RAL) - Didcot, Inghilterra.
- 15) CNR Istituto di Chimica del Riconoscimento Molecolare, Milano, Italia.
- 16) CNR, Istituto di Biofisica, Trento, Italia.
- 17) Dipartimento di Fisica e Geologia - Università degli Studi di Perugia.
- 18) Soprintendenza Speciale per i Beni Archeologici di Roma.
- 19) Soprintendenza BB.CC.AA. – Sezione per i beni archeologici – Messina.
- 20) Dipartimento di Civiltà antiche e moderne - Università degli Studi di Messina.

Esperimenti presso Large Facilities europee

- 1) ELETTRA Sincrotrone di Trieste, Trieste (I): Esperimento CERIC di SR-based FTIR spectroscopy n. 20147024 presso la linea SISSI dal 27 al 30 gennaio 2015.

- 2) ELETTRA Sincrotrone di Trieste, Trieste (I): Esperimento CERIC di SR-based Raman spectroscopy n. 20147024 presso la linea IUVS dal 27 al 30 gennaio 2015.
- 3) ELETTRA Sincrotrone di Trieste, Trieste (I): Esperimento di SR-based Raman spectroscopy n. 20145189 presso la linea IUVS dal 10 al 15 Marzo 2015.
- 4) Slovenian NMR Centre, Ljubljana (SLO): Esperimento CERIC di Nuclear Magnetic Resonance n. 20147045 presso lo spettrometro 600 MHz NMR (MAGIC) dal 13 al 16 Aprile 2015.
- 5) Laboratoire Leon Brillouin (LLB), Saclay (F): Esperimento di Small Angle Neutron Scattering n. 12066 sulla small angle neutron scattering facility PAXY dal 4 al 5 maggio 2015.
- 6) Laboratoire Leon Brillouin (LLB), Saclay (F): Esperimento di Spin Echo n. 12010 sullo spettrometro spin echo MUSES dal 4 al 14 maggio 2015.
- 7) ELETTRA Sincrotrone di Trieste, Trieste (I): Esperimento CERIC di SR-based Raman spectroscopy n. 20147045 presso la linea IUVS dal 26 al 28 maggio 2015.
- 8) Budapest Neutron Center (BNC) (H): Esperimento CERIC di PGAA n. 20147024 presso la Prompt Gamma Activation Analysis Station dall'1 al 3 luglio 2015. Principal Investigator
- 9) ELETTRA Sincrotrone di Trieste, Trieste (I): Esperimento di SR-based Raman spectroscopy n. 20150363 presso la linea IUVS dal 14 al 19 Settembre 2015.
- 10) ELETTRA Sincrotrone di Trieste, Trieste (I): Esperimento CERIC di SR-based Raman spectroscopy n. 20152053 presso la linea IUVS dal 20 al 22 ottobre 2015.
- 11) ISIS Facility al Rutherford Appleton Laboratory (RAL), Oxford (UK): Esperimento di Inelastic Neutron Scattering RB N. 1520179 sullo spettrometro a tempo di volo ad elevata risoluzione TOSCA dal 26 Novembre al 01 Dicembre 2015.
- 12) Budapest Neutron Center (BNC) (H): Esperimento CERIC di Small Angle Neutron Scattering n. 20152053 sullo spettrometro YELLOW SUBMARINE dal 15 al 18 dicembre 2015.

5.15.b Ricerca in Biofisica, Fisica dell'ambiente e meteorologia

Componenti: Prof. Salvatore Magazù (*Responsabile*), Dr.ssa Federica Migliardo, Dr.ssa Maria Teresa Caccamo, Dr. Salvina Coppolino, Dr. Antonio Cannuli, Dr. Giuseppe Castorina, Dr. Franco Colombo, Dr. Emanuele Calabrò.

1. Tematica 1

Caratterizzazione strutturale e dinamica di sistemi materiali di interesse biofisico.

2. Tematica 2

Metodologie fisiche applicate al monitoraggio settori ambiente ed energia.

3. Tematica 3

Meteorologia e modellistica ambientale.

Le tematiche di ricerca trattate nel corso del 2015 sono state molteplici e sotto alcuni aspetti anche diverse, per quanto emerga un comune motivo conduttore: l'uso integrato di tecniche di indagine sperimentali per la caratterizzazione delle correlazioni spazio-temporali di sistemi materiali di interesse biofisico; tali sistemi sono caratterizzati da una *struttura dinamica* parametrizzabile per mezzo di opportune scale *spazio-temporali* che possono essere investigate sperimentalmente e mediante approcci teorici e simulativi. In questo riferimento i temi di ricerca possono così sintetizzarsi: a) studio delle distanze e dei tempi caratteristici, per cui il concetto di *ordine* risulta dominante; b) studio delle influenze che tali proprietà di ordine esercitano sui meccanismi microscopici e sui comportamenti macroscopici (processi di rilassamento, idratazione, coordinazione, denaturazione, resilienza, flessibilità, etc...). I sistemi sottoposti ad indagine hanno compreso soluzioni di disaccaridi in presenza di glicerolo e glucosio, proteine, bioprotettori, polimeri e sistemi complessi di interesse biotecnologico. Particolare attenzione è stata rivolta all'analisi delle proprietà chimico-fisiche rilevanti nei meccanismi di bioprotezione. L'analisi dei moti molecolari coinvolti nei processi di bioprotezione ha fornito dati di fondamentale importanza sui processi di stabilizzazione. In questo riferimento si inserisce lo studio di sistemi binari bioprotettore/solvente e ternari macromolecola/bioprotettore/solvente. L'attenzione è stata anche rivolta anche alla cosiddetta transizione dinamica che viene osservata nelle proteine idratate come un incremento repentino del loro spostamento quadratico medio a valori in temperatura di circa $T_D=200\div 250$ K. Sono state eseguite delle misure di scattering di neutroni e di spettroscopia IR su lisozima anidro e idratato, con l'aggiunta (al variare della concentrazione) di soluzioni di trealosio e glicerolo e polimeri di crescente peso molecolare. Inoltre questi sistemi sono stati investigati al variare del range di temperatura, della rapidità di cooling e heating, del pH e in presenza di campi elettromagnetici esterni; in quest'ultimo caso l'attenzione è

stata indirizzata ai processi di denaturazione di alcune proteine e al danno biologico anche in presenza di bioprotettori. Per quanto concerne le indagini sulle cellule, si sono utilizzate cellule neuronali di neuroblastoma (differenziate) a seguito di una collaborazione con il Policlinico di Messina. Inoltre, presso la facility ESRF sono stati realizzati esperimenti di diffrazione su membrane e sistemi binari di bioprotettori. Sotto il profilo applicativo l'obiettivo è rappresentato dalla messa a punto, attraverso il contributo sinergico di competenze interdisciplinari, di nuove metodologie non-empiriche per l'azione di preservazione basate sull'impiego di bioprotettori naturali. Più specificatamente sono stati analizzati i dati relativi a sistemi glass-forming a differente concentrazione. In questo riferimento, la trasformata wavelet si è rivelata un potente strumento per l'analisi e l'elaborazione dei segnali registrati. In particolare è stata impiegata l'analisi wavelet per: l'analisi dei dati dell'intensità elastica in funzione del vettore d'onda scambiato e della temperatura, producendo scalogrammi bi e tridimensionali; l'analisi di dettaglio e approssimazione del segnale registrato; denoising del segnale; l'individuazione di anomalie nel comportamento delle grandezze separate. Inoltre è stata impiegata una sorgente di neutroni portatile per applicazioni biofisiche ed elettroniche (test di dispositivi elettronici). Nello specifico si è fatto impiego di un generatore di neutroni MP320 Thermo Scientific, utilizzato congiuntamente ad un rivelatore di fotoni a stato solido, modello PINS-GMX Ortec solid-state photon detector. Sono già state effettuate delle simulazioni con MCNP (Montecarlo N-Particles software) ed è stato progettato una speciale schermatura per effettuare misure indoor. Le principali applicazioni della sorgente sono strettamente correlate con le altre tematiche di ricerca trattate come il campo della fisica biomedica, delle scienze ambientali e della scienza dei materiali.

Nell'ambito della Fisica applicata al settore ambientale, sono state impiegate alcune tecnologie fisiche per la misurazione dei valori di inquinamento acustico e del 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. Alcune tecniche spettroscopiche, quali lo scattering Raman e la spettroscopia IR sono state impiegate per l'identificazione di specie inquinanti, insieme a specifica sensoristica. Per quanto attiene l'attività di ricerca nel settore meteorologia e modellistica ambientale, in seno ad una collaborazione/convenzione con il *Servizio Informativo Agrometeorologico Siciliano* (SIAS), si sono investigati dati meteorologici, relativi all'ultimo decennio, della rete di rilevamento costituita da oltre cento stazioni meteo dislocate sull'intero territorio regionale. Particolare riguardo è stato rivolto agli eventi estremi che hanno interessato la Sicilia al fine di stabilire delle correlazioni quantitative tra tutti parametri fisici monitorati. E' stato successivamente realizzato un interfacciamento remoto di un set di stazioni meteo portatili mediante microcontrollori ARDUINO che hanno permesso di monitorare costantemente parametri meteo (direzione e intensità del vento, precipitazioni, temperature, umidità relativa); tale rete di rilevamento è stata utilizzata per il monitoraggio di siti interessati, in passato, da eventi meteo estremi. Si è inoltre proceduto allo sviluppo e all'ottimizzazione di un modello fisico – matematico ad area limitata e ad alta risoluzione per la previsione meteorologica, con specifico riferimento alla Regione Sicilia. Al riguardo si è utilizzato il “core” ARW (Advanced Research WRF) del modello WRF (Weather Research Forecast). La configurazione del modello è stata ottimizzata per il territorio siciliano mediante: a) l'acquisizione di parametri meteo mediante stazioni portatili e stazionarie specificamente predisposte e utilizzate per migliorare l'inizializzazione del modello; b) l'aumento della risoluzione dei dati geografici statici iniziali e l'ottimizzazione dei parametri locali di uso del suolo e copertura vegetativa; c) l'analisi fisica e l'adozione di configurazioni parametriche ad hoc per l'ottimizzazione delle performances del modello; d) l'acquisizione dei dati delle temperature del mare in modalità dinamica. La validazione degli approcci applicati è stata effettuata mediante analisi statistiche cross-correlation-wavelet.

Nel corso del 2015 il Prof. S. Magazù ha ricoperto i seguenti ruoli:

- Presidente del Consorzio Internazionale *Le Studium – COSMO*.
- Presidente del Consorzio Interuniversitario *CISFA*.
- Responsabile scientifico del Progetto MIUR - Divulgazione "Exhibit su biofisica della vita in condizioni ambientali estreme" finanziato dal MIUR (L.6/2000).
- Responsabile del Progetto PIK: “Resolution Elastic Neutron Scattering Time-of-flight Spectrometer Operating in the Repetition Rate Multiplication Mode”.
- Responsabile scientifico del Progetto MIUR Viral Cluster PAC02L3_00038.
- Responsabile del Progetto “Sviluppo di Metodologie avanzate di analisi per la produzione di
- Informazioni Meteorologiche e climatiche in Agricoltura – SMIMA” in collaborazione col Servizio Informativo Agrometeorologico Siciliano (SIAS).

- Componente del Centro Universitario di Ricerca per lo studio degli Ambienti Estremi e degli Estremofili, con sede presso il Dipartimento di Scienze Biologiche ed Ambientali del nostro Ateneo.
- Editor in Chief di: Open Journal of Biochemistry, Scientific Online Publishing, website://www.scipublish.com/journals/BIOC/.
- Membro dell'editorial board di: Journal of Electrical and Control Engineering (JECE) American V-King Scientific Publishing, <http://www.vkingpub.com/journal/jece/>.
- Membro dell'editorial board di: Jacobs Journal of Medicinal Chemistry, <http://www.jacobspublishers.com/>.
- Membro dell'editorial board di: The Open Access Journal of Science and Technology.
- Membro dell'editorial board di: AIMS Biophysics.
- Membro dell'editorial board di: SOP Transactions on Applied Physics.
- Membro dell'editorial board di: Physics International (Science publication: <http://www.thescipub.com/index.html>).
- Membro dell'editorial board di: International Scholarly Research Network Spectroscopy - ISRN Spectroscopy.
- Organizzatore e Chairman della Conferenza Internazionale “Le Studium: Third COSMO meeting”, Hotel Dupanloup Orléans dal 16/02/2015 al 20/02/2015.
- Organizzatore dell’“Exhibit su biofisica della vita in condizioni ambientali estreme”, Messina, 4 Maggio 2015.
- Organizzatore dell’evento “Fotovoltaico ed energie alternative”, Conference of European Solar Days, Messina, 12 Maggio 2015.
- Co-organizzatore con la Dr.ssa F. Migliardo dell’International School Spectroscopic Techniques Applied to Life Sciences, Lampedusa, 20-22 Maggio 2015.
- Co-organizzatore con la Dr.ssa F. Migliardo e Chairman dell’International Workshop BIONEUTRON 2015: Neutron Scattering Highlights in Life Sciences, Lampedusa, 23-24 Maggio 2015.
- Organizzatore del Workshop sul progetto di ricerca dell’ESA, “Applicazioni dei bioprotettori in ambito agricolo per contrastare i processi di desertificazione”, Lampedusa, 25 Maggio 2015.
- Organizzatore del 1° meeting del progetto Viral Cluster, Messina, 27 Febbraio 2015.
- Editore del volume “Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione” EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6.
- Co-editore con la Dr.ssa F. Migliardo del volume International Interdisciplinary Event “Science for Life 2015”, 20th-25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.

Publicazioni e comunicazioni a congresso

- E. Calabrò, S. Magazù, “FTIR Spectroscopy Analysis of Molecular Vibrations in Gasoline Fuel under 200 mT Static Magnetic Field Highlighted Structural Changes of Hydrocarbons Chains”, *Petroleum Science and Technology*, Vol. 33, 1676-1684, 2015.
- D. Lombardo, M. Kiselev, S. Magazu, and P. Calandra, “Amphiphiles Self-assembly: Basic Concepts and Future Perspectives of Supramolecular Approaches”, *Advances in Condensed Matter Physics*, Hindawi, 2015.
- E. Calabrò, Motor Gasoline’s Hydrocarbons Vibration Bands in the Mid-Infrared Region under Exposure to a Static Magnetic Field, *Spectroscopy Letters: An International Journal for Rapid Communication*, Vol.48 (8), 593-599, 2015.
- E. Calabrò and S. Magazù, “Fourier –Self –Deconvolution Analysis of β -sheet Contents in the Amide I Region of Haemoglobin Aqueous Solutions under Exposure to 900 MHz Microwaves and bioprotective effectiveness of sugars and salt solutions”, *Spectroscopy Letters: An International Journal for Rapid Communication*, 48, 741-747 (2015).
- M. T. Caccamo, A. Cannuli, S. Magazù, “Wavelet Analysis of Meteorological Data Collected by an Automated Microcontroller-Weather Station System”, *International Journal of Engineering Research and General Science* Volume 3, Issue 6, pp. 6-13, November-December, 2015, ISSN 2091-2730.
- E. Calabrò, S. Magazù, On the Bioprotective Effectiveness of Trehalose against Man-Made Electromagnetic Fields – Chapter 2 in “Advances in Chemistry Research”, Vol. 24, pag. 25-50, James C. Taylor Editor, Nova Science Publishers, Inc. New York, 2015, ISBN: 978-1-63463-872-2 (eBook).
- M. T. Caccamo, E. Calabrò, A. Cannuli, S. Magazù, “Wavelet Study of Meteorological Data Collected by Arduino Weather Station: Impact on Solar Energy Collection Technology”, *MATEC Web of Conferences mateconf/20165502004 CPEEA 6*, 2015.

- N. Marchese, S. Magazù, A. Cannuli, F. Migliardo, M.T. Caccamo, I. Ielo, C. Giordano, A. Parlato, C. Pace, "Shielding of a D-D Portable Neutron Generator by MCNP Monte Carlo simulation", 101 Congresso Nazionale - SIF - 101th National Congress, Roma, Italy, 21-25 settembre 2015.
- N. Marchese, A. Cannuli, S. Magazù, I. Ielo, C. Giordano, A. Parlato and C. Pace, "Neutrons Transport in the Shielding of a Portable Fast Neutron Generator for Indoor Applications", 24th International Conference on Transport Theory ICTT-24, Taormina, Italy, 7-11 September 2015.
- N. Marchese, M.T. Caccamo, A. Cannuli, C. Giordano, S. Magazù, F. Migliardo, A. Parlato, C. Pace, "Study of Neutrons Irradiation Effects by a D-D Portable Generator", Workshop RAIN15 -RADiazione per l'INnovazione 2015, Laboratori Nazionali INFN e Centro Ricerca ENEA di Frascati, Roma, Italy 12-13 ottobre 2015.
- M. T. Caccamo, S. Magazù, F. Migliardo, Multiresolution Analysis of Elastic Incoherent Neutron Scattering (EINS) Data on Polymeric Systems of Biophysical Interest, p.108, in International Interdisciplinary Event "Science for Life 2015", 20th -25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.
- M. T. Caccamo, S. Magazù, Modeling the Science for Life Stakeholder Kinetic Aggregation Process, p.109, in International Interdisciplinary Event "Science for Life 2015", 20th -25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.
- P. Carilli, T. Castaldi, T. Carratta, T. Di Paola, V. Vecchio, S. Magazù, G. Di Dio, The Viral Cluster Project, p.111, in International Interdisciplinary Event "Science for Life 2015", 20th -25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.
- S. Coppolino, M.T. Caccamo, L. Mavilia, S. Magazù, F. Migliardo, Study of the Gaussian Approximation for MSD Evaluation from EINS Data by Using the Normalization, p.112, in International Interdisciplinary Event "Science for Life 2015", 20th -25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.
- N. Marchese, A. Cannuli, I. Ielo, C. Giordano, C. Pace, L. Mavilia, S. Magazù, A. Parlato, F. D'Aleo, D-D Neutron Generation for Biophysical and Electronic Applications, p.115, in International Interdisciplinary Event "Science for Life 2015", 20th -25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.
- G. Nunnari, F. Migliardo, M. T. Caccamo, S. Magazù, D-D Neutron Generation for Biophysical and Electronic Applications, p.117, in International Interdisciplinary Event "Science for Life 2015", 20th -25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.
- E. Calabrò, S. Magazù, Transition from α -helix to β -sheet structures occurs in myoglobin in deuterium oxide solution under exposure to microwaves (PD 044), in 29th Annual Symposium of the Protein Society, July 22-25, 2015, Barcelona, Spain.
- E. Calabrò, A. Cannuli, Fourier Transform Infrared Spectroscopy can be used to highlight effects of electromagnetic fields on proteins' secondary structure, p. 110, in International Interdisciplinary Event "Science for Life 2015", 20th -25th May 2015, Lampedusa, Italy, ISBN 978-88-7820-440-9.
- S. Magazù, Thermal Behavior Modeling of Macromolecular Amphiphilic Polymeric Systems: EINS and RENS Approach, in Workshop Soft Interaction in Bio-Nanostructures from Modeling to Advanced Applications, 23 July 2015, Roccalumera, (ITALY).
- M.T. Caccamo, A. Cannuli, S. Magazù "La desertificazione in Sicilia", in Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione, pp. 1-7, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- M.T. Caccamo, S. Magazù, "Equazioni differenziali stocastiche e analisi wavelet per lo studio del clima", in Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione, pp. 9-17, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- S. Magazù, M.T. Caccamo, A. Cannuli "Sistemi Informativi Territoriali per il monitoraggio in Sicilia", in Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione, pp. 19-24, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- A. Cannuli, E. Barberi, S. Magazù, "Il clima in Sicilia", volume EDAS "Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione", 25-26, 2015 - ISBN: 978-88-7820-441-6.
- A. Cannuli, E. Barberi, S. Magazù, "Tecnologie ingegneristiche per il monitoraggio ambientale", volume EDAS "Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione", 27-30, 2015 - ISBN: 978-88-7820-441-6.

- G. Castorina, V. Insinga, “Eventi meteorologici estremi in Sicilia”, volume EDAS “Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione”, 31-35, 2015 - ISBN: 978-88-7820-441-6.
- M.T. Caccamo, S. Magazù “Coltura in vitro e micropropagazione”, in “Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione”, pp. 37-45, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- M.T. Caccamo, S. Magazù “I bioprotettori naturali e loro applicazioni in ambito agricolo”, in Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione, pp. 47-78, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- M.T. Caccamo, F. Migliardo, S. Magazù “Exhibit: i bioprotettori naturali contro la desertificazione”, in Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione, pp. 79-87, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- M.T. Caccamo, S. Magazù “Modellizzazione dei processi aggregativi degli stakeholder nell’ambito della ricerca di misure di contrasto alla desertificazione in seno alla piattaforma informatica Viral Cluster”, in Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione, pp. 89-90, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- E. Calabrò, S. Magazù, On the Influence of Desertification on the Ground Albedo Solar Radiation, in “Applicazioni di bioprotettori naturali per il contrasto della desertificazione”, pp. 91-98, EDAS, ISBN 978-88-7820-441-6, 2015.
- S. Coppolino, M. T. Caccamo, S. Magazù, “Gaussian Approximation and Data Normalization for MSD evaluation”, Activity Report PhD (2015) ISSN 2038-5889, p.35, Lorenzo Torrisi Editore, 2015.
- A. Cannuli, M. T. Caccamo, S. Magazù, “Monte Carlo Simulations of a RENS Operating ToF Neutron Spectrometer”, Activity Report PhD (2015) ISSN 2038-5889, p.83, Lorenzo Torrisi Editore, 2015.
- G. Castorina, U. Wanderlingh, F. Catalano, “A device for the measurement of thermodynamic constants”, Activity Report PhD (2015) ISSN 2038-5889, p.87, Lorenzo Torrisi Editore, 2015.
- Colombo Franco, “Methods of spectral analysis applied to climate data”, Activity Report PhD (2015) ISSN 2038-5889, p.91, Lorenzo Torrisi Editore, 2015.

Altro: (Collaborazioni, progetti finanziati)

Collaborazione con Ente Aeronautico - avamposto meteorologico di Messina.

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

- Progetto Europeo “ETPGAH: European Technology Platform for Global Animal Health”.
- Progetto Europeo FP6-2005-FOOD NoE “MONIQA: Towards the harmonisation of Analytical Methods for Monitoring Quality and Safety in the Food Chain”.
- Progetto Ente Siciliano per l’Agricoltura.
- Progetto PIK-ST: “Resolution Elastic Neutron Scattering Time-of-flight Spectrometer operating in the Repetition Rate Multiplication Mode”.
- Progetto MIUR-Divulgazione "Exhibit su biofisica della vita in condizioni ambientali estreme" finanziato dal MIUR (L.6/2000).
- Progetto MIUR Viral Cluster PAC02L3_00038
- Progetto Regione Siciliana, “Sviluppo di Metodologie avanzate di analisi per la produzione di Informazioni Meteorologiche e climatiche in Agricoltura” SMIMA.

5.15.c : Struttura, dinamica vibrazionale, Processi di Rilassamento e Conducibilità Ionica in Materiali Disordinati

Componenti: Giuseppe Carini , Maria Cutroni, Giovanna D'Angelo, Andrea Mandanici, Mauro Federico

Collaboratori: (i) Dr. Antonio Bartolotta, Dr. Giovanni Carini, Dr.ssa Cristina Crupi, Dr. Gaetano Di Marco, Dr. Cirino Vasi, IPCF-CNR, Sede di Messina, Italy; (ii) Dr.ssa Valeria Conti Nibali, Università di Bochum, Germany.

Tematiche scientifiche:

1. **Dinamica vibrazionale e di rilassamento di vetri densificati a pressioni nell’intervallo dei GPa.**

Sono state studiate le modifiche strutturali, le proprietà termiche, la dinamica vibrazionale e di rilassamento in vetri di ossido di boro (B₂O₃) densificati mediante l'applicazione di alte pressioni a temperature superiori alla temperatura di transizione vetrosa T_g. E' stata osservata una sensibile diminuzione della eccitazioni vibrazionali addizionali di bassa energia all'aumentare della densità. In particolare è stato effettuato uno studio comparativo di scattering inelastico dei neutroni e della luce (scattering Raman), e di calore specifico a basse temperature. Da tale confronto è stato dedotto che le anomalie vibrazionali e termiche dei solidi amorfi sono causate dall'eccesso di volume (minore densità) del vetro, e non dal disordine strutturale. Inoltre è stato osservato che il volume in eccesso che caratterizza il network vetroso favorisce la formazione di specifiche unità super-strutturali, gli anelli borossilici, che generano il picco bosonico. La riduzione della popolazione di anelli borossilici, ottenuta aumentando la pressione di sintesi, causa la progressiva depressione delle vibrazioni addizionali di bassa energia fino alla loro completa scomparsa nella fase cristallina, in cui gli anelli sono mancanti. Le osservazioni ottenute su un ampio intervallo di densità vetrose sono state confrontate con le predizioni di vari modelli teorici che spiegano la natura del BP, ottenendo consistenza con i risultati di uno studio di simulazione in base al quale le vibrazioni di un sistema di particelle compresse diminuiscono al crescere della frazione di impacchettamento. Queste osservazioni dimostrano che le vibrazioni "soffici" supplementari dei vetri derivano da unità specifiche, che rappresentano la base strutturale dell'ordine a medio raggio e si formano a causa dello scarso impacchettamento atomico della struttura. Inoltre è stato provato che i rilassamenti termicamente attivati di queste unità super-strutturali, unitamente all'anarmonicità vibrazionale, regolano l'attenuazione e la velocità del suono nei vetri. Questi difetti strutturali, localmente mobili, sono assenti nella fase cristallina il cui comportamento acustico è determinato solo dall'accoppiamento anarmonico tra onde acustiche e vibrazioni termiche.

2. . Origine del primo picco di diffrazione (FSDP) nei vetri.

E' stata investigata l'origine del primo intenso picco di diffrazione (FSDP) che appare nel fattore di struttura statico dei vetri e dei liquidi glass-forming. Tale picco caratterizza l'ordinamento strutturale su scale di lunghezze nanometriche e cambia in maniera anomala con la temperatura, la pressione e la composizione chimica, rispetto agli altri picchi presenti nello spettro di diffrazione. Attualmente, l'origine strutturale del FSDP è oggetto di controversie teoriche. L'analisi dei risultati di una serie di esperimenti di diffrazione neutronica condotti in vetri borati alcalini, contenenti differenti concentrazioni di ossido metallico, ha permesso di sviluppare un modello in cui il FSDP descrive la periodicità dei contorni di vuoti strutturali di dimensioni nanometriche, omogeneamente distribuiti nel network vetroso. Tali vuoti in un vetro sono definiti dalla disposizione disordinata delle unità formanti il network. Le variazioni nell'intensità e nella posizione del FSDP con la pressione riflettono le variazioni nelle distribuzioni delle dimensioni e del numero di tali vuoti strutturali.

3. Proprietà dinamiche di liquidi ionici.

Le proprietà dei liquidi ionici sono di interesse per diverse applicazioni. Dal punto di vista della fisica di base è importante comprendere le relazioni fra struttura a livello microscopico e proprietà macroscopiche quali la conducibilità e le proprietà dielettriche di tali materiali. Utilizzando come tecnica di studio la spettroscopia dielettrica a larga banda, nel range fra 100 mHz e 3 GHz, è stata analizzata la risposta dielettrica di miscele di liquidi ionici al variare della temperatura. E' stata posta l'attenzione non solo sulla conducibilità e sulla sua dipendenza dalla viscosità, ma anche sull'andamento in frequenza della costante dielettrica complessa. I risultati ottenuti hanno consentito di studiare lo scaling degli spettri dielettrici in funzione della temperatura e della composizione.

4. Proprietà dinamiche e strutturali di sostanze anfifiliche e loro miscele

Miscela di sostanze anfifiliche quali l'acido ottanoico e la bis(2-ethyl-hexyl)ammine hanno conducibilità elettrica molto superiore rispetto ai componenti puri. Oltre a questa interessante proprietà delle suddette miscele, è stato messo in luce che il comportamento della conducibilità in funzione della temperatura intorno a 45 °C transisce dal tipo Arrheniano al tipo anti-Arrheniano. Questa inusuale caratteristica è stata spiegata sulla base del meccanismo microscopico proposto per la conduzione elettrica: la costituzione di aggregati su scala nanometrica consente una conduzione protonica, ma all'aumentare della temperatura la formazione di tali aggregati è sfavorita, riducendo la conducibilità. Lo studio è stato esteso ad altre miscele di sostanze anfifiliche, mettendo in evidenza la relazione fra la struttura molecolare dei componenti delle miscele e la conducibilità elettrica determinata sperimentalmente.

5. Sviluppo di applicazioni per elaborazione di dati con software libero di calcolo scientifico

L'elaborazione di dati sperimentali è un punto chiave di molti ambiti di ricerca. In collaborazione con i colleghi G. Fiumara e G. Mandaglio sono stati utilizzati gli strumenti messi a disposizione dal framework libero ROOT

per il calcolo scientifico, sviluppando un'applicazione per il calcolo della costante dielettrica complessa dei materiali a partire dai valori sperimentali dei coefficienti di trasmissione complessi per una linea a microonde.

Partecipazioni e comunicazione a congressi

A. Mandanici, G. Polimeni, M. Federico, M. Cutroni, and A. Matic, "Conductivity and dielectric relaxation in liquid and supercooled liquid PYR_{1,4}TFSI doped with Li TFSI". Poster presented at the XIV International Workshop on Complex Systems, 22 – 25 March 2015, Fai della Paganella (Italy)

A. Mandanici, P. Calandra, V. Turco Liveri, " Conductivity enhancement, dielectric relaxation, and non Arrhenius trends in octanoic acid / bis(2-ethylhexyl)amine binary mixtures ". Poster presented at the XIV International Workshop on Complex Systems, 22 – 25 March 2015, Fai della Paganella (Italy)

A. Mandanici, P. Calandra, D. Lombardo, V. Turco Liveri, and M. Cutroni, "Conductivity and dielectric relaxation in octanoic acid / bis (2-ethylhexyl)amine systems: anti-Arrhenian and non-Arrhenian trends". Poster presented at the Workshop on Soft Interaction in Bio-Nanostructures. From modeling to advanced applications. 23 July 2015. Roccalumera, Italy.

Collaborazioni

- Dipartimento di Chimica-Fisica, Università di Pavia, prof. P. Mustarelli;
- Department of Applied Physics, Chalmers Univ. of Technology (Sweden), Condensed Matter Physics Group, prof. A. Matic;
- Prof. R. Richert, Department of Chemistry and Biochemistry, Arizona State University;
- Dott. F. Rocca, CNR – ITC Trento, Istituto per la Fotonica e le Nanotecnologie;
- Dipartimento di Fisica, Università di Trento, prof. G. Dalba;
- Dott. D. Lombardo, CNR- Istituto per i Processi Chimico-Fisici, Messina;
- Dr. P. Calandra, Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati, CNR-ISMN, Consiglio Nazionale delle ricerche, Roma;
- Prof. Vincenzo Turco Liveri, Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche “STEBICEF”, Università degli Studi di Palermo;
- Prof. G. B. McKenna, Department of Chemical Engineering, Texas Tech University.
- Prof. U. Buchenau, Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, Germany
- Dr. E. Gilioli, IMEM-CNR, Parma, Italy.
- Dr. Miguel A. Gonzalez, Institute Laue-Langevin, Grenoble, France.
- Prof. Alexander Fainleb, Institute of Macromolecular Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 02160 Kyiv, Ukraine.
- Prof. Daniele Fioretto, Dipartimento di Fisica, Università di Perugia, Italy.
- Prof. A. Fontana, Dipartimento di Fisica, Università di Trento, Italy.
- Prof. Steve Martin, Iowa State University, Department of Materials Science and Engineering, Ames

5.15.d Sistemi biofisici e biopolimerici, caratterizzazione ed applicazioni

Componenti: Wanderlingh U. (PA), Branca C.(PA), D’Angelo G. (PA), Khouzami K. (PhD student), Ruello G. (PhD student).

1. Membrane Biomimetiche

Le biomembrane 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 bio-chimiche e proprietà fisiche dei biomateriali e la loro implicazione nel controllo delle funzioni biologiche.

Esperimenti di Scattering Quasielastico di neutroni su biomembrane modello, formate da doppi strati di fosfolipidi separati da strati di solvente acquoso, hanno permesso di determinare le principali dinamiche presenti in tali sistemi a temperatura ambiente, nel range dal nano alle centinaia di pico secondi. In particolare, tramite lo sviluppo di uno modello semplificato della struttura del fosfolipide, si è messa in evidenza la notevole differenza di mobilità tra i vari segmenti della catena lipidica, ed è stata inoltre caratterizzata la geometria della dinamica diffusiva locale.

E’ stata inoltre investigata la dinamica collettiva vibrazionale dei doppi strati fosfolipidici nelle fasi gel e liquida mediante simulazione di dinamica molecolare, tecniche di scattering coerente di neutroni e di spettroscopia far-FTIR.

Questi studi hanno mostrato che lo spettro delle eccitazioni vibrazionali collettive nei doppi strati lipidici consiste di modi acustici e longitudinali modificati dal disordine e di una serie di modi ottici. E' stata inoltre fornita evidenza di una interazione risonante fra il modo acustico longitudinale e il modo ottico di più bassa frequenza.

2. Nanocompositi a matrice polimerica

I nanocompositi polimerici sono utilizzati nei più svariati campi di applicazioni grazie alle loro eccezionali prestazioni meccaniche e funzionali. Infatti le proprietà meccaniche, ottiche, termiche e chimico fisiche sono notevolmente superiori rispetto ai microcompositi particellari tradizionali. Particolare interesse hanno suscitato i nanocompositi realizzati a partire da biopolimeri quali i carboidrati in cui è presente una fase di rinforzo sotto forma di particelle, lamelle o fibre dell'ordine nanometrico. Viste le alte potenzialità di questa particolare classe di compositi, negli ultimi anni c'è un crescente interesse nella sintesi e caratterizzazione delle loro proprietà che non dipendono banalmente dalle proprietà dei singoli componenti bensì dalla morfologia e dalle caratteristiche all'interfaccia.

Obiettivo del gruppo di ricerca è la sintesi e lo studio delle proprietà dinamico-strutturali di nanocompositi formati da polisaccaridi, quali il chitosano, la guar gum e l'alginato di sodio, in presenza di un'argilla quale la montmorillonite. In particolare, vengono prima studiate le proprietà strutturali e morfologiche tramite FTIR e XRD e SEM, in modo da evidenziare la presenza di particolari conformazioni morfologiche quali l'intercalazione, l'esfoliazione o la presenza di tattoidi. Vengono inoltre investigate le proprietà dinamiche e reologiche tramite spettroscopia a correlazione di fotoni e tecniche reometriche classiche e microreometriche tramite diffusing wave spectroscopy. Questo studio ha consentito di evidenziare lo stretto legame esistente tra le proprietà diffusive e strutturali dei nanocompositi e la loro morfologia come quest'ultima sia fortemente influenzata da molteplici fattori ambientali.

Collaborazioni:

Ruhr-University Bochum Institute for Physical Chemistry, Germany;

Dipartimento di Fisica-Università di Perugia, Italy;

CNRS UHP, Université de Lorraine, Nancy, France;

IPCF-CNR, UOS di Messina, Italy.

PUBBLICAZIONI SU RIVISTE ISI attività 5.15.c - 5.15.d

1. Cristina Crupi, Giuseppe Carini, Miguel Gonzalez, Giovanna D'Angelo

“Origin of the first sharp diffraction peak in glasses”

PHYSICAL REVIEW B, 92 Issue: 13, 134206 (2015)

DOI: 10.1103/PhysRevB.92.134206

2. Giovanni Carini Jr., Giuseppe Carini, Giovanna D'Angelo, Edmondo Gilioli & Cirino Vasi

“Origin of excess low-energy vibrations in densified B₂O₃ glasses”

Philosophical Magazine, 95, 2596-2606, 2015

<http://dx.doi.org/10.1080/14786435.2015.1067733>

3. Branca, Caterina, Wanderlingh, Ulderico, D'Angelo, Giovanna, Crupi, Cristina, Rifici, Simona

“Study of the dynamical behavior of sodium alginate/myoglobin aqueous solutions: A dynamic light scattering study”

JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS 209, 294-300 (2015)

DOI: 10.1016/j.molliq.2015.06.002

4. Branca, Caterina, Crupi, Cristina, D'Angelo, Giovanna, Khouzami, Khaoula, Rifici, Simona, Visco, Annamaria, Wanderlingh, Ulderico

Effect of Montmorillonite on the Rheological Properties of Dually Crosslinked Guar Gum-Based Hydrogels

JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 132, 41373 (2015)

DOI: 10.1002/app.41373

5. Carini, Giovanni, Jr., Parrino, Francesco, Palmisano, Giovanni, Scandura, Gabriele, Citro Ilaria, Calogero, Giuseppe, Bartolotta, Antonino, Di Marco, Gaetano

“Nanostructured anatase TiO₂ densified at high pressure as advanced visible light photocatalysts”

PHOTOCHEMICAL & PHOTOBIOLOGICAL SCIENCES, 14, 1685-1693 (2015)

DOI: 10.1039/c5pp00149h

6. Anti-Arrhenian behaviour of conductivity in octanoic acid-bis(2-ethylhexyl)amine systems: a physico-chemical study", P. Calandra, V. Turco Liveri, A. M. Ruggirello, M. Licciardi, D. Lombardo, and A. Mandanici, JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY C , Volume: 3, Issue: 13, Pages: 3198-3210, DOI: 10.1039/c4tc02500h

5.16 Gruppo di Ricerca: Studio di reazioni nucleari ad energie intermedie e delle applicazioni degli acceleratori di elettroni di bassa energia

Componenti: L.Auditore, S.De Luca, A.Italiano, E.Morgana, S.Norella, L.Quattrocchi, A.Trifirò, M.Trimarchi

Tematiche scientifiche

1. Reazioni nucleari ad energie intermedie

L'attività di questo gruppo in fisica nucleare fondamentale si svolge nell'ambito dell'esperimento NEWCHIM (in collaborazione con le sezioni INFN di Catania, LNS, Milano, Napoli ed altri gruppi stranieri), che fa uso del multi rivelatore CHIMERA e del nuovo correlatore FARCOS, sviluppati presso i Laboratori Nazionali del Sud di Catania.

Negli ultimi anni sono stati realizzati vari esperimenti rivolti a studiare il termine di simmetria dell'equazione di stato della materia nucleare. In particolare sono stati studiati i vari meccanismi di reazione che portano alla produzione di frammenti di massa intermedia in reazioni nucleari fra isotopi pesanti con differenti valori di isospin. L'analisi della scala temporale che caratterizza la formazione di questi frammenti ha evidenziato una forte correlazione fra i tempi di emissione e l'isospin dei frammenti stessi. Ad esempio, i frammenti di velocità intermedia emessi nella fase di pre-equilibrio della reazione mostrano un rapporto N/Z ed un'anisotropia decisamente superiori a quanto si osserva nei processi sequenziali e statistici.

Per disaccoppiare gli effetti legati all'energia di simmetria da quelli indotti dalla variazione di massa degli isotopi ricchi in neutroni, durante il 2013, è stato realizzato l'esperimento InKiIsSy (Inverse Kinematic Isobaric Systems), utilizzando dei sistemi proiettile-bersaglio poveri in neutroni, aventi masse uguali ai sistemi *neutron-rich* studiati in precedenza.

L'analisi dei dati effettuata sui sistemi isobarici studiati ha mostrato che gli effetti osservati dipendono prevalentemente dall'isospin piuttosto che dalla massa totale dei partners di reazione.

Durante l'anno è stato inoltre portato avanti lo studio di funzioni di correlazione a due o più particelle per dinamica nucleare e spettroscopia.

Per effettuare analisi di correlazione sono richieste delle altissime risoluzioni angolari ed energetiche, in modo da misurare con grande precisione il momento relativo fra le particelle rivelate in coincidenza. Per questo motivo negli ultimi anni è stata avviata la costruzione del nuovo correlatore FARCOS (Femtoscope ARray for COrelations and Spectroscopy), un array modulare di telescopi progettato presso i Laboratori Nazionali del Sud dell'INFN. E' stato completato un prototipo del correlatore costituito da quattro telescopi tripli, ed è stato testato in diversi esperimenti effettuati con il multirivelatore chimera. Il prototipo realizzato è stato accoppiato ad un sistema di acquisizione basato sull'elettronica GET (General Electronics for Tpc), un sistema di acquisizione di nuova generazione creato inizialmente per le Time Projection Chamber. GET rispetto all'elettronica tradizionale è in grado di gestire parecchie migliaia di canali paralleli riducendo enormemente ingombri, pesi e consumi energetici; ciò permette fra l'altro di trasportare con facilità l'intero correlatore per accoppiarlo ad altri apparati di rivelazione esistenti.

Parallelamente è stata completata l'analisi dati del test Correlation, effettuato per valutare la possibilità di compiere misure di correlazione fra particelle leggere di energia intermedia utilizzando l'apparato Chimera.

Le misure di correlazione possono fornire importanti informazioni sulla evoluzione spazio-temporale delle sorgenti di emissione che si formano durante le reazioni nucleari fra ioni pesanti, permettendo così la caratterizzazione dei complessi meccanismi di reazione coinvolti. Esse inoltre rappresentano un valido strumento per esplorare stati instabili di nuclei esotici.

L'analisi ha permesso di studiare alcune strutture a cluster in nuclei leggeri, come ad esempio lo stato a 3 alpha ipotizzato da Hoyle per il ^{12}C , che riveste un ruolo chiave nei processi di nucleosintesi stellare. In tale ambito è stato sviluppato un metodo particolare, basato sui Dalitz plot, che permette di valutare i contributi sequenziali e

diretti nel decadimento dei suddetti stati a cluster. I risultati hanno messo in evidenza la possibile presenza di un importante contributo diretto, contrariamente a quanto evidenziato da precedenti studi effettuati su processi meno dissipativi. Ciò ha suggerito la possibilità che i meccanismi di decadimento in questione possano essere fortemente influenzati dal mezzo nucleare in cui si verificano, ed ha aperto la strada a nuovi esperimenti che verranno effettuati nei prossimi anni.

2.Applicazioni degli acceleratori di bassa energia

Il gruppo da anni porta avanti anche una linea di ricerca basata su un acceleratore lineare di elettroni da 5 MeV, volta allo studio delle applicazioni del radiation processing. Il trattamento con le radiazioni ionizzanti infatti consente di innescare a temperatura ambiente, in qualsiasi fase, e senza uso di catalizzatori o additivi, qualsiasi reazione chimica nei materiali irraggiati. E pertanto questo acceleratore rappresenta una facility interdisciplinare grazie alla quale, in collaborazione con altri gruppi di ricerca o aziende private, vengono sviluppate varie 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 nuovi processi industriali innovativi.

Nel corso del 2015 il gruppo ha continuato a studiare la problematica delle modifiche indotte dalla radiazione su colloidi di Ag, preparati mediante ablazione laser e poi irradiati al variare della dose e del dose rate, al fine di verificare e quantificare le modifiche indotte dalla radiazione sulle nano strutture.

Lo studio si inquadra nel contesto delle nano particelle metalliche, le quali, presentando proprietà ottiche, elettroniche e catalitiche uniche, risultano applicabili in molteplici campi.

Il vantaggio della sintesi per irraggiamento consiste nel fatto che esso può avvenire in assenza degli agenti chimici tradizionalmente utilizzati, e pertanto il prodotto sintetizzato risulta più puro, ed inoltre non esistono by product da smaltire.

Le competenze del Gruppo nell'ambito dell'interazione radiazione materia e nel funzionamento dei rivelatori di particelle ha inoltre consentito l'adesione alla collaborazione Calocube, che ha per fine lo sviluppo di calorimetria ad alta accettazione per lo studio di raggi cosmici nello spazio.

In questo ambito, il Gruppo nel corso del 2015 ha partecipato a due campagne di raccolta dati con fasci di muoni e di elettroni di alta energia presso il Cern di Ginevra, e l'esame degli spettri in luce raccolti dagli scintillatori utilizzati, al fine anche di verificare e caratterizzare le conseguenze dell'uso di appositi filtri, è tutt'ora in corso.

Pubblicazioni scientifiche dell'anno 2015

Articoli su Riviste Internazionali con Referee:

- 1) R.Najman, R.Łaneta, A.Sochoka, F.Amorini, L.Auditore, T.Cap, G.Cardella, E.De Filippo, E.Geraci, A.Grzeszczuk, S.Kowalski, T.Kozik, G.Lanzalone, I.Lombardo, Z.Majka, N.G.Nicolis, A.Pagano, E.Piasecki, S.Pirrone, G.Politi, F.Rizzo, P.Russotto, K.Siwiek-Wilczyńska, I.Skwira-Chalot, A.Trifiró, M.Trimarchi, J.Wilczyński and W.Zipper

“Freeze-out configuration properties in the $^{197}\text{Au}+^{197}\text{Au}$ reaction at 23 A MeV”

PHYSICAL REVIEW C **92**, 064614 (2015)

ISI: 000367379900008 **SCOPUS:** 2-s2.0-84954166075

- 2) G.Cardella, L.Acosta, F.Amorini, L.Auditore, I.Berceanu, A.Castoldi, E. De Filippo, D.Dell'Aquila, L.Francalanza, B.Gnoffo, C.Guazzoni, G.Lanzalone, I.Lombardo, T.Minniti, E.Morgana, S.Norella, A.Pagano, E.V.Pagano, M.Papa, S.Pirrone, G.Politi, A.Pop, L.Quattrocchi, F.Rizzo, E.Rosato, P.Russotto, A.Trifiró, M.Trimarchi, G.Verde, M.Vigilante

“Particle gamma correlations in ^{12}C measured with the CsI(Tl) based detector array CHIMERA”

Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A **799** (2015) 64-69

ISI: 000361877300011 **SCOPUS:** 2-s2.0-84939215953

- 3) Papa M, Berceanu I, Acosta L, Amorini F, Agodi C, Anzalone A, Auditore L, Cardella G, Cavallaro S, Chatterjee M.B, De Filippo E, Francalanza L, Geraci E, Grassi L, Gnoffo B, Han J, La Guidara E, Lanzalone G, Lombardo I, Maiolino C, Minniti T, Pagano A, Pagano EV, Pirrone S, Politi G, Porto F, Quattrocchi L, Rizzo F, Rosato E, Russotto P, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M
“Dipolar degrees of freedom and isospin equilibration processes in heavy ion collisions”

PHYSICAL REVIEW C91, 041601 (2015)

ISI: 000352345400002 **SCOPUS:** 2-s2.0-84928983925

- 4) P.Russotto, E.De Filippo, A.Pagano, L.Acosta, L.Auditore, V.Baran, I.Berceanu, B.Borderie, R.Bougault, M.Bruno, T.Cap, G.Cardella, S.Cavallaro, M.B.Chatterjee, A.Chbihi, M.Colonna, M.D’Agostino, M.Di Toro, L.Francalanza, J.Frankland, E.Galichet, W.Gawlikowicz, E.Geraci, B.Gnoffo, A.Grzeszczuk, P.Guazzoni, S.Kowalski, G.Lanzalone, G.Lanzanò, N.Le Neindre, I.Lombardo, C.Maiolino, T.Minniti, EV Pagano, M.Papa, E.Piasecki, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, F.Porto, L.Quattrocchi, M.F.Rivet, E.Rosato, F.Rizzo, K.Schmidt, K.Siwiek-Wilczynska, I.Skwira-Chalot, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Verde, M.Vigilante, JP Wieleczko, J.Wilczynski, L.Zetta, W.Zipper
“Production cross sections for intermediate mass fragments from dynamical and statistical decay of projectile-like fragments in $124\text{Sn}+64\text{Ni}$ and $112\text{Sn}+58\text{Ni}$ collisions at 35 AMeV”

PHYSICAL REVIEW C91, 014610 (2015)

ISI: 000348729800006 **SCOPUS:** 2-s2.0-84921466787

Proceedings in Extenso su Riviste Internazionali:

- 1) T.Cap, K.Siwiek-Wilczynska, I.Skwira-Chalot, J.Wilczynski, F.Amorini, L.Auditore, G.Cardella, E.De Filippo, E.Geraci, L.Grassi, A.Grzeszczuk, E.La Guidara, J.Han, T.Kozik, G.Lanzalone, I.Lombardo, R.Najman, NG Nicolis, A.Pagano, M.Papa, E.Piasecki, S.Pirrone, R.Planeta, G.Politi, F.Rizzo, P.Russotto, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Verde, W.Zipper
“Polar-side emission of heavy IMFs in $\text{Au}197+\text{Au}197$ collisions at 23 AMeV”

IWM-EC2014 – International Workshop on Multi Facets of EOS and Clustering, Catania(Italy) 06-09 May 2014

EPJ Web of Conferences, 88 (2015) 00007

ISI: 000358447700006; **SCOPUS:** 2-s2.0-84969769880

- 2) G.Cardella, L.Acosta, F.Amorini, L.Auditore, I.Berceanu, M.B.Chatterjee, E.De Filippo, L.Francalanza, L.Grassi, E.La Guidara, G.Lanzalone. I.Lombardo, T.Minniti, A.Pagano, EV Pagano, M.papa, S.Pirrone, G.Politi, L.Quattrocchi, F. Rizzo, E.Rosato, P.Russotto, A.Trifirò, M.trimarchi, G.Verde, M.Vigilante
“Status and perspectives of fragmentation beams at LNS with CHIMERA detector”

IWM-EC2014 – International Workshop on Multi Facets of EOS and Clustering, Catania(Italy) 06-09 May 2014

EPJ Web of Conferences, 88 (2015) 00012

ISI: 000358447700010; **SCOPUS:** 2-s2.0-84969776950

- 3) E.V. Pagano, L.Acosta, L.Auditore, R.Bassini, C.Boiano, G.Cardella, A.Castoldi, M.D’Andrea, E.De Filippo, F.Fichera, L.Francalanza, N.Giudice, B.Gnoffo, A.Grimaldi, C.Guazzoni, G.Lanzalone, I.Lombardo, T.Minniti, E.Morgana, A.Pagano, M.Papa, G.Passaro, S.Pirrone, G.Politi, F.Porto, L.Quattrocchi, F.Rizzo, E.Rosato, P.Russotto, G.Saccà, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Verde, M.Vigilante
“The FARCOS project – Status and perspective”

IWM-EC2014 – International Workshop on Multi Facets of EOS and Clustering, Catania(Italy) 06-09 May 2014

EPJ Web of Conferences, 88 (2015) 00013

ISI: 000358447700011; **SCOPUS:** 2-s2.0-84969869942

- 4) L.Quattrocchi, L.Acosta, L.Auditore, V.Baran, T.Cap, G.Cardella, M.Colonna, E.De Filippo, L.Francalanza, E.Geraci, B.Gnoffo, G.lanzalone, I.Lombardo, C.Maiolino, G.Marquinez – Duran, E. Morgana, T.Minniti, S.Norella, A.Pagano, E.V.Pagano, M.Papa, E.Piasecki, S.Pirrone, G.Politi, F.Porto, F.Rizzo, E.Rosato, P.Russotto, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Verde, M.Vigilante, J.Wilczynski
*“The InKiIsSY experiment at LNS: a study of the size vs. isospin effects with Xe-124+Zn-64 and Sn-124,Sn-112*Ni-64,Ni-58 reactions”*

IWM-EC2014 – International Workshop on Multi Facets of EOS and Clustering, Catania(Italy) 06-09 May 2014

EPJ Web of Conferences, 88 (2015) 00014

ISI: 000358447700038; **SCOPUS:** 2-s2.0-84969822572

- 5) P.Russotto, M.Chartier, M.D.Coza, E.De Filippo, A. Le Fevre, S.Gannon, I.Gasparic, M.Kis, S.Kupny, Y.Leifels, R.C.Lemmon, Q.Li, J.Lukasic, P.Marini, P.Pawlowski, W.Trautmann, L.Acosta, M.Adamczyk, A. Al-Ajlan, M.Al-garawi, S.Al-Homaidi, F.Amorini, L.Auditore, T.Aumann, Y.Ayyad, V.Baran, Z.Basrak, R.Bassini, J.Benlliure, C.Boiano, M.Boisjoli, K.Boretzky, J.Brzychczyk, A.Budzanowski, G.Cardella, P.Cammarata, Z.Chajecki, A.Chbihi, M.Colonna, B.Czech, M.Di Toro, M.Famiano, V.Greco, L.Grassi, C.Guazzoni, P.Guazzoni, M.Heil, L.Heilborn, R.Introzzi, T.Isobe, K.Kezzar, A.Krasznahorkay, N.Kurz, E.La Guidara, G.Lanzalone, P.Lasko, I.Lombardo, WG.Lynch, Z.Matthews, L.May, T.Minniti, M.Mostazo, A.Pagano, M.Papa, S.Pirrone, R.Pleskac, G.Politi, F.Porto, R.Reifarth, W.Reisdorf, F.Riccio, F.Rizzo, E.Rosato, D.Rossi, S.Santoro, H.Simon, I. Skwirczynska, Z.Sosin, L.Stuhl, A.trifirò, M.Trimarchi, MB Tsang, G.Verde, M.Veselsky, M.Vigilante, A.Wieloch, P.Wigg, HH. Wolter, P.Wu, S.Yennello, P.Zambon, L.Zetta, M.Zoric
“The ASY-EOS experiment at GSI: constraining the symmetry energy at supra-saturation densities”

IWM-EC2014 – International Workshop on Multi Facets of EOS and Clustering, Catania(Italy) 06-09 May 2014

EPJ Web of Conferences, 88 (2015) 00022

ISI: 000358447700018; **SCOPUS:** 2-s2.0-84969895459

- 6) D.Dell’Aquila, L.Acosta, R.Andolina, L.Auditore, I.Berceanu, G.Cardella, M.B.Chatterjee, E.De Filippo, L.Francalanza, B.Gnoffo, A.Grzeszczuk, G.Lanzalone, I.Lombardo, N.Martorana, T.Minniti, A.Pagano, E.V.Pagano, M.Papa, S.Pirrone, G.Politi, A.Pop, F.Porto, L.Quattrocchi, F.Rizzo, E.Rosato, P.Russotto, A.Trifirò, M.Trimarchi, G.Verde, M.Vigilante
“Investigation of 10Be and 16C structure with break-up reactions at intermediate energies”

Proc. 14th Intern. Conf. on Nuclear reaction Mechanisms, NRM2015, Varenna(Italy) 15-19 Jun 2015, p.209-213

SCOPUS: 2-s2.0-84973596618

- 7) Parascandolo C, Pierrousakou D, Alba R, Del Zoppo A, Maiolino C, Santonocito D, Agodi C, Baran V, Boiano A, Colonna M, Coniglione R, De Filippo E, Di Toro M, Emanuele U, Farinon f, Guglielmetti A, La Commara M, Martin B, Mazzocchi C, Mazzocco M, Rizzo C, Romoli M, Signorini C, Silvestri R, Soramel F, strano E, Torresi D, Trifirò A, Trimarchi M
“Dynamical Dipole mode in heavy-ion fusion reactions in the Pb-192 mass region”

1st NUBA International Conference on Nuclear Physics and AstroPhysics, Antalya, Turkey, September 14-21 2014

Journal of Physics Conference Series 590 (2015) 012052

ISI: 000354773900052 SCOPUS: 2-s2.0-84927546367

- 8) **M.Bongi**, O.Adriani, S.Albergo, L.Auditore, M.G.Bagliesi, E.Berti, G.Bigongiari, M.Boezio, L.Bonechi, S.Bonechi, V.Bonvicini, S.Bottai, P.Brogi, G.Carotenuto, A.Cassese, G.Castellini, P.W.Cattaneo, D.Cauz, P.Cumani, R.D'Alessandro, S.Detti, M.Fasoli, A.Gregorio, A.Lamberto, P.Lenzi, P.Maestro, P.S.Marrocchesi, A.Mezzasalma, M.Miritello, N.Mori, P.Papini, G.Pauletta, G.F.Rappazzo, A.Rappoldi, S.Ricciarini, P.Spillantini, O.Starodubtsev, A.Sulaj, A.Tiberio, A.Trifirò, M.Trimarchi, E.Vannuccini, A.Vedda, G.Zampa, N.Zampa and B.Zerbo
“CALOCUBE: an approach to high-granularity and homogenous calorimetry for space based detectors”

16th International Conf. on Calorimetry in High Energy Physics (CALOR 2014), Giessen (Germany) 6-11 April 2014

Journal of Physics: Conference Series 587 (2015) 012029

ISI: 000352292400029 SCOPUS: 2-s2.0-84923233914

Partecipazioni e comunicazione a congressi

- 1) **Dell'Aquila D**, Acosta L, Andolina R, Auditore L, Berceanu I, Cardella G, Chatterjee M.B, De Filippo E, Francalanza L, Gnoffo B, Grzasczuk A, Lanzalone G, Lombardo I, Pagano A, Pagano EV, Papa M, Pirrone S, Politi G, Pop A, Porto F, Quattrocchi L, Rizzo F, Rosato E, Russotto P, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M
“Studio della struttura a cluster dei nuclei neutron – rich ^{10}Be e ^{16}C attraverso reazioni di break-up”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.46

- 2) **Gnoffo B**, Ademard G, Auditore L, Beck C, Berceanu I, Bonnet E, Borderie B, Cardella G, Chbihi A, Colonna M, De Filippo E, D'onofrio A, Frankland JD, Geraci E, Henry E, La Commara M, Lanzalone G, Lautesse P, Lebhertz D, Le Neindre N, Lombardo I, Mazurek K, Norella S, Pagano A, Pagano EV, Papa M, Piasecki E, Pirrone S, Politi G, Porto F, Quattrocchi L, Quinlan M, Rizzo F, Rosato E, Russotto P, Schroeder WU, Spadaccini G, Trifirò A, Trimarchi M, Toke J, Verde G, Vigilante M, Wieleczko JP
“Competizione tra i modi di decadimento ed influenza dell'isospin nei sistemi prodotti nelle collisioni $78,80\text{Kr}+40,48\text{Ca}$ a 10AMeV ”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.46

- 7) **Pagano EV**, Acosta L, Auditore L, Boiano C, Cardella G, Castoldi A, D'andrea M, De Filippo E, De Luca S, Fichera F, Francalanza L, Giudice N, Gnoffo B, Grimaldi A, Guazzoni C, Lanzalone G, Lombardo I, Minniti T, Norella S, Pagano A, Papa M, Pirrone S, Politi G, Porto F, Quattrocchi L, Rizzo F, Russotto P, Sacca G, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M
“Recenti progressi nella costruzione del correlatore FARCOS”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.47

- 8) **Quattrocchi L**, Acosta L, Auditore L, Cardella G, Chbihi A, De Filippo E, Francalanza L, Gnoffo B, Lanzalone G, Lombardo I, Martel I, Norella S, Pagano A, Pagano EV, Papa M, Pirrone S, Politi G, Porto F, Rizzo F, Rosato E, Russotto P, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Veselsky M, Vigilante M
“Studio di Correlazioni a due o più particelle nelle reazioni $^{12}\text{C}+^{24}\text{Mg}$ e $^{12}\text{C}+^{208}\text{Pb}$ a $E=35\text{AMeV}$ ”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.48

- 9) **Norella S**, Acosta L, Auditore L, Baran V, Cap T, Cardella G, Colonna M, De Filippo E, Francalanza L, Gnoffo B, Lanzalone G, Lombardo I, Maiolino C, Marquinez-Duran G, Minniti T, Pagano A, Pagano EV, Papa M, Piasecki E, Pirrone S, Politi G, Porto F, Quattrocchi L, Rizzo F, Rosato E, Russotto P, Siwek-Wilczynska K, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M, Wilczynski J
“L'esperimento InKiIsSy: effetti di Isospin e di size nella produzione dei frammenti di massa intermedia”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.48

- 10) **De Filippo E**, Russotto, P., Chartier, M., Cozma, M.D., Le Fèvre, A., Gannon, S., Gašparić, I., Kiš,

M., Kupny, S., Leifels, Y., Lemmon, R.C., Li, Q., Łukasik, J., Marini, P., Pawłowski, P., Santoro, S., Trautmann, W., Veselsky, M., Acosta, L., Adamczyk, M., Al-Ajlan, A., Al-Garawi, M., Al-Homaidhi, S., Amorini, F., Auditore, L., Aumann, T., Ayyad, Y., Baran, V., Basrak, Z., Bassini, R., Benliure, J., Boiano, C., Boisjoli, M., Boretzky, K., Brzychczyk, J., Budzanowski, A., Cardella, G., Cammarata, P., Chajecki, Z., Chbihi, A., Colonna, M., Czech, B., Di Toro, M., Famiano, M., Greco, V., Grassi, L., Guazzoni, C., Guazzoni, P., Heil, M., Heilborn, L., Introzzi, R., Isobe, T., Kezzar, K., Krasznahorkay, A., Kurz, N., La Guidara, E., Lanzalone, G., Lasko, P., Lombardo, I., Lynch, W.G., Matthews, Z., May, L., Minniti, T., Mostazo, M., Pagano, A., Papa, M., Pirrone, S., Pleskac, R., Politi, G., Porto, F., Reifarh, R., Reisdorf, W., Riccio, F., Rizzo, F., Rosato, E., Rossi, D., Simon, H., Skwirczynska, I., Sosin, Z., Stuhl, L., Trifirò, A., Trimarchi, M., Tsang, M.B., Verde, G., Vigilante, M., Wieloch, A., Wigg, P., Wolter, H.H., Wu, P., Yennello, S., Zambon, P., Zetta, L., Zoric, M.

“L’esperimento ASYEOS: studio dell’energia di simmetria ad alta densità. Risultati e prospettive future”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.49

- 11) **Martorana N**, Agodi C, , Auditore L, Berceanu I, Cardella G, Chatterjee MB, De Filippo E, Geraci E, Gnoffo B, Lanzalone G, Lombardo I, Maiolino C, Norella S, Pagano A, Pagano EV, Papa M, Pirrone S, Politi G, Porto F, Rizzo F, Rosato E, Russotto P, Quattrocchi L, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M
“Equilibratura di isospin in reazioni nucleari nel regime delle energie intermedie ai LNS”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.50

- 12) **De Luca S**, Acosta L, Auditore L, Boiano C, Cardella G, Castoldi A, D’Andrea M, De Filippo E, Fichera F, Francalanza L, Gnoffo B, Guazzoni C, Lanzalone G, Lombardo I, Minniti T, Norella S, Pagano A, Pagano EV, Papa M, Pirrone S, Politi G, Quattrocchi L, Rizzo F, Russotto P, Saccà G, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M

“Test dell’elettronica GET per CHIMERA e FARCOS”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.51

- 13) **Auditore L**, Cardella G, De Filippo E, Francalanza L, Gnoffo B, Lanzalone G, Lombardo I, Norella S, Pagano A, Pagano EV, Papa M, Pirrone S, Politi G, Porto F, Quattrocchi L, Rizzo F, Russotto P, Trifirò A, Trimarchi M, Verde G, Vigilante M

“Ricostruzione del segnale neutronico in accoppiamento CHIMERA e FARCOS”

Società Italiana di Fisica – 101° Congresso Nazionale, Roma, 21-25 Settembre 2015, p.51

Collaborazioni

- Esperimento INFN NEWCHIM (CSN III)
- Esperimento INFN CALOCUBE (CSN V)

5.17 Gruppo di Ricerca in “Fisica dell’interazione radiazioni materia, plasmii generati da impulsi laser e applicazioni”

Componenti: Prof. Lorenzo Torrisi, Dr.ssa Mariapompea Cutroneo, Dr.ssa Cristina Scolaro, Dr. Giovanni Ceccio, Dr. Antonino Cannavò, Dr. Antonino Italiano, Dr. A. Torrisi, Prof.ssa Annamaria Visco, Prof. Salvatore Cavallaro, Prof.ssa Lucia Calcagno.

Partecipanti delle Università di Catania, Lecce e Pisa: Prof. S. Cavallaro, Prof.ssa L. Calcagno, Prof. P. Musumeci, Prof. V. Nassisi, Prof. D. Giulietti, Prof. L. Andò

Partecipanti INFN- Sez. CT e LNS: Dr. A. Italiano

Collaborazioni Straniere: Accademia delle Scienze della Repubblica Ceca (ASCR); Laboratori PALS di Praga; Istituto di Fisica dei Plasmii e Laser Microfusion (IPPLM) di Varsavia, Istituto di Fisica Nucleare di Rez, Repubblica Ceca; Institute of Optoelectronics-Military University of Technology, Warszawa, Poland.

Collaborazioni con INFN, CNR ed ENEA.

Attività Scientifica svolta:

- 1) Fisica dei plasmi NLTE generati da impulsi laser di potenza
- 2) Fisica dei Biomateriali
- 3) Analisi nel campo dei Beni Culturali e Ambientali

1) Nel 2015 il Prof. Torrisi ha diretto numerosi esperimenti svolti presso il “Laboratorio di Fisica dei Plasmi Laser” del Dipartimento di Fisica dell’Università di Messina e presso il “Laboratorio Laser” dell’INFN - Laboratori Nazionali del Sud di Catania al quale è associato in qualità di Responsabile Nazionale di Ricerca in Gruppo V. Ha coordinato e diretto esperimenti di carattere internazionale eseguiti presso il “Laboratorio PALS” di Praga (Repubblica Ceca) e presso il “fs-laser” dell’Istituto di Fisica dei Plasmi e Laser Microfusion (IPPLM) di Varsavia (Polonia) e il TW fs laser del Celia, CNRS-Università di Bordeaux, in Francia. In tali centri, coordinando un gruppo di ricerca internazionale (Italia-Repubblica Ceca-Polonia), il Prof. Torrisi ha potuto espletare il Proposal Project No.: pals001823 con Project leader: L. Torrisi, Univ. of Messina & INFN Catania, Italy, LASERLAB-EUROPE Access, intitolato “High energy proton acceleration from thin advanced targets at PALS”. Grazie agli ottimi risultati ottenuti recentemente gli è stato accettato un successivo Proposal dal Laser-Lab Europe che dovrebbe essere espletato entro il 2016.

Tali esperimenti hanno mirato alla generazione di plasmi in non equilibrio prodotti da impulsi laser di alta potenza e all’accelerazione di ioni ad alto stato di carica, elevata energia e bassa emittanza. Particolare interesse è stato rivolto alla radiazione laser adoperata, ai processi di interazione laser-materia, alla diagnostica veloce del plasma prodotto adoperando rivelatori di nuova concezione ed alle applicazioni e ricadute industriali dei plasmi generati e delle particelle accelerate.

Nuovo progetto europeo accettato: Nel 2014 il Prof. Torrisi è Leader del Proposal Internazionale presentato ed accettato da Laser-Lab- Europe ai Laboratori PALS di Praga e da completarsi entro il 2016. Project No.: PALS002081, Project leader: L. Torrisi, Univ. of Messina, Italy, LASERLAB-EUROPE Access, Titled: “Advanced Targets for Enhancement Laser Ion Acceleration (ATELIA)”.

2) Nel 2015 nel campo dei biomateriali il prof. Torrisi ha curato l’attività di ricerca inerente la saldatura laser di materiali polimerici, soprattutto a base di polyethylene e lo studio di nano particelle per applicazioni in campo Bio-Medico.

Le saldature sono studiate e realizzate presso il Laboratorio laser diretto dal Prof. Torrisi del Dipartimento di Fisica. Sono stati adoperati laser a Nd:Yag e laser a diodo con differenti modalità di irraggiamento in polimeri opportunamente preparati per soddisfare le esigenze di trasmissione e di assorbimento per poter localizzare gli strati fusi alle superfici di interfaccia.

Particolare attenzione è stata rivolta alla generazione di nanoparticelle metalliche biocompatibili (Au, Ag, Ti, Fe) in liquidi ed alla loro applicazione in campo biomedico, radioterapeutico, diagnostico e di laser-terapia. Spettroscopie ottiche particolari e microscopie ottiche vengono adoperate per il controllo delle particelle prodotte. La realizzazione di targhette contenenti nanostrutture viene studiata in maniera approfondita soprattutto per particolari applicazioni di high laser absorption in film sottili allo scopo di accelerare ioni ad energia maggiori di 1 MeV per stato di carica. In tal senso targhette idrogenate sono state preparate per accelerare protoni in ambito progetto internazionale ELIMED per scopi di protonterapia.

Un ulteriore campo di interesse riguarda le misure di bagnabilità di superfici biocompatibili e il loro trattamento chimico-fisico per modificarne le proprietà di bagnabilità. Una tesi di dottorato di Ricerca è stata svolta su tale argomento da parte della dottoranda C. Scolaro.

3) Nel 2015 una notevole attività nel campo dei beni culturali è stata portata avanti grazie a delle collaborazioni con il Museo di Lipari “Luigi Bernabò Brea”, diretto dalla Prof.ssa M. Mastelloni, col Prof. Castrizio e Prof.ssa M. Caltabiano del Dipartimento delle Civiltà Antiche e Moderne del Ns. Ateneo e “Numismatica Katane” di Catania.

In quest’ambito analisi di fluorescenza a raggi X- caratteristici, microscopia elettronica a scansione, profilometria superficiale ed analisi LAMQS (Laser Ablation coupled to Mass Quadrupole Spectrometry) sono state condotte presso il Ns. Dipartimento. Particolarmente interessante appare l’analisi degli isotopi stabili del piombo che, grazie alla loro diversità e alle banche dati geologiche, permettono di poter risalire alla localizzazione delle miniere di estrazione. Ciò ha permesso di localizzare i siti di estrazione di minerali per la realizzazione di manufatti in bronzo e la recente pubblicazione di alcuni lavori scientifici su riviste internazionali con alto fattore di impatto.

Nel 2015 il Prof. Torrissi è stato organizzatore del Congresso Nazionale “7th PPLA 2015, Plasma Production and Laser Applications” tenutosi a Frascati il 5-7 Ottobre presso la sede del centro ENEA.

Ha tenuto delle lezioni ad invito presso la Summer School of Kudowa-Zdroj, Poland nel periodo di Giugno 2015 intitolata.

Ha realizzato il V Report sull’attività di Ricerca del Dottorato di Ricerca in Fisica dell’Università di Messina, attualmente in rete.

Ha Coordinato tutte le attività del Dottorato di Ricerca in Fisica del Ns. Ateneo.

Ha partecipato a numerosi convegni nazionali ed internazionali, tra i quali:

- **22nd International Conference on Ion Beam Analysis, June 14 - 19, 2015 - Opatija, Croatia, IBA conference 2015**
- **Nanotech France 2015 Conference & Exhibition, Nanotech France 2015, 15 Jun - 17 Jun 2015 | Paris – France**
- Int. Conf. Plasma2015, 7-11 September 2015, Warsaw, Poland
- Int. Conf. FISMAT2015, 28 sept.-2 Oct. 2015, Palermo, Italy
- Int. Conf. 2nd European Advanced Accelerator Concept (EAAC) Workshop, ID6, 13-19 September 2015, La Biodola, Isola d’Elba, Italy
- Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O1, pg. 5
- 22th Conference on Ion Beam Analysis (IBA), June 14 - 19, 2015 - Opatija, Croatia
- Technart 2015, CNR, Catania, April 27-30
- Conf. La Scuola a Teatro, Museo Archeologico Regionale di Lipari, 29 Giugno 2015, **Lipari (ME), Italy**
- Giornata di Studio del Dottorato di Ricerca in Fisica, Novembre 2015, Università di Messina, 2015

Publicazioni su risite ISI 2015 con Referee

- 1) Lorenzo Torrissi
“Gold Nanoparticles Enhancing Protontherapy Efficiency”
Recent Patents on Nanotechnology, 2015, 9, 1-10, DOI: [10.2174/1872210509999141222224121](https://doi.org/10.2174/1872210509999141222224121)
- 2) L. Torrissi, L. Calcagno, D. Giulietti, M. Cutroneo, M. Zimbone, J. Skala
“**Laser irradiations of advanced targets promoting absorption resonance for ion acceleration in TNSA regime**”
Nucl Instr. and Methods B 355, 221-226, 2015
- 3) L. Torrissi, M. Cutroneo, S. Cavallaro and J. Ullschmied
“D-D nuclear fusion processes induced in polyethylene foams by TW Laser-generated plasma”
European Physical Journal 96, 01032-01037, 2015 (IF=2.421)
- 4) L. Torrissi
“Advanced targets, diagnostics and applications of laser-generated plasmas”
Rad. Eff. and Defects in Solids, Special Issue 170 (4), 355-366, 2015
- 5) L. Torrissi
“Laser-matter interaction and plasma production: methodologies, radiation emission, diagnostics and applications”
Rad. Eff. and Defects in Solids, Special Issue, Preface, 170 (4), 239-240, 2015
- 6) M. Cutroneo, A. Mackova, P. Malinsky, J. Matousek, L. Torrissi and J. Ullschmied
“High-intensity laser for Ta and Ag implantation into different substrates for plasma Diagnostics”
Nucl. Instr. and Methods B 354, 56-59, 2015
- 7) L. Torrissi
“Ion acceleration from intense laser-generated plasma: methods, diagnostics and possible applications”
Nukleonika 2015; 60(2), 207-212
- 8) A.M. Visco, G. Galtieri, L. Torrissi & C. Scolaro
“**Properties of Single and Double Lap Polymeric Joints Welded by a Diode Laser**”
International Journal of Polymer Analysis and Characterization 20 (5), 442-456, 2015

- 9) L. Torrasi, M. Cutroneo, V. Semian, G. Ceccio
 "Characterization of advanced polymethylmethacrylate (pmma) targets for TNSA laser irradiation"
Appl. Surf. Sci. 351,580-587, 2015 (IF=2.534)
- 10) L. Torrasi and C. Scolaro
 "Treatment techniques on aluminum to modify the surface wetting properties"
Acta Physica Polonica A 128 (1), 48-53, 2015
- 11) L. Torrasi, A. Sciuto, L. Calcagno, P. Musumeci, M. Mazzillo G. Ceccio, A. Cannavò
 "Laser-plasma X-ray detection by using fast 4H-SiC interdigit and ion collector detectors"
Journal of Instrumentation 10, 2015 1748-0221 10 P07009
[doi:10.1088/1748-0221/10/07/P07009](https://doi.org/10.1088/1748-0221/10/07/P07009)
- 12) L. Torrasi, M. Cutroneo and J. Ullschmied
 "Hydrogenated targets for high energy proton generation from laser irradiation in the TNSA regime"
Acta Polytechnica 55(3), 2015, 199-202
- 13) L. Torrasi
 "Radiotherapy Improvements by Using Au Nanoparticles"
Recent Patents on Nanotechnology, 2015, 9(2), 000-000 11872-2105/15
 Bentham Science Publishers
- 14) L. Torrasi, M. Cutroneo and G. Ceccio
 "Effect of metallic nanoparticles in thin foils for laser ion acceleration"
Phys. Scripta 9 (2015) 015603 (9 pg)
- 15) M. Cutroneo, P. Malinsky, A. Mackova, J. Matousek, L. Torrasi, P. Slepicka, J. Ullschmied
 "Ta-ion implantation induced by a high-intensity laser for plasma diagnostics and target preparation"
Nucl. Instr. and Methods B 365(A) (2015) 384-388
- 16) M. Cutroneo, L. Torrasi, A. Mackova and A. Velyhan
 "Polymer containing Cu nanoparticles irradiated by laser to enhance the ion acceleration"
Acta polytechnica 55 (3), 150-153, 2015

Publicazioni in proceeding a congressi Internazionali 2015 con Referee

- 1) M. Cutroneo, V. Havranek, A. Mackova, V. Semian, L. Torrasi, L. Calcagno
 "Copper micro-rods fabrication using focused ion beam lithography"
22nd International Conference on Ion Beam Analysis, June 14 - 19, 2015 - Opatija, Croatia, IBA conference 2015
- 2) N. Boukortt, B. Hadri, L. Torrasi, S. Patanè, A. Caddemi and G. Crupi
 "3D Simulation of DG FinFET transistor with different channel materials and gate dielectrics"
Nanotech France 2015 Conference & Exhibition, Nanotech France 2015, 15 Jun - 17 Jun 2015 | Paris – France
- 3) L. Torrasi, L. Calcagno, M. Cutroneo, J. Badziak, M. Rosinski, A. Zaras-Szydłowska and A. Torrasi
 "Nanostructured targets for TNSA laser ion acceleration"
 Int. Conf. Plasma2015, 7-11 September 2015, Warsaw, Poland, P3.02
- 4) A. Torrasi, P. Wachulak, A. Bartnik, J. Kostecki, L. Wegrzynski, R. Jarocki, M. Szczurek, H. Fiedorowicz¹ and L. Torrasi²
"PLASMA CHARACTERIZATION OF THE GAS PUFF TARGET SOURCE DEDICATED FOR SOFT X-RAY MICROSCOPY"
 Int. Conf. Plasma2015, 7-11 September 2015, Warsaw, Poland, P7.04
- 5) M. Cutroneo, L. Torrasi and J. Ullschmied
 "Multi-energy ion implantation from high laser intensity"
 Int. Conf. Plasma2015, 7-11 September 2015, Warsaw, Poland, P7.28
- 6) M. Rosinski, J. Badziak, L. Torrasi, B. Kaczmarczyk, J. Makowski, P. Parys, L. Ryc, A. Torrasi, A. Zaras-Szydłowska
 "Acceleration of protons in plasma produced from a thin plastic or aluminum target by a

- femtosecond laser”
 Int. Conf. Plasma2015, 7-11 September 2015, Warsaw, Poland, P3.09
- 7) A. Zaras-Szydłowska, J. Badziak, M. Rosinski, L. Torrasi, B. Kaczmarczyk, J. Makowski, P. Parys, L. Ryc and A. Torrasi
 “A comparison of properties of proton beams produced by a femtosecond laser pulse from thin foils and massive targets”
 Int. Conf. Plasma2015, 7-11 September 2015, Warsaw, Poland, P3.10
- 8) L. Torrasi, G. Ceccio, A. Cannavò and M. Cutroneo
 “Diagnostics for laser plasma generation using SiC detectors and Ion collectors”
 Int. Conf. FISMAT2015, 28 sept.-2 Oct. 2015, Palermo, Italy
- 9) D. Giulietti, A. Bonasera, M. Cipriani, F. Consoli, A. Curcio, R. De Angelis, D. Delle Side, V. Nassisi, L. Torrasi
 “Energetic particles from laser produced plasmas and applications”
 Int. Conf. 2nd European Advanced Accelerator Concept (EAAC) Workshop, ID6, 13-19 September 2015, La Biodola, Isola d’Elba, Italy
- 10) R. De Angelis, P. Andreoli, M. Cipriani, F. Consoli, G. Cristofari, G. Di Giorgio, F. Ingenito, J. Badziak, A. Bonasera, G. Ceccio, G. Claps, A. Curcio, M. Cutroneo, D. Delle Side, D. Giulietti, S. Guskov, M. Kalal, V. Nassisi, L. Torrasi, D. Pacella, A. Rupasov, P. Raczka, M. Rosinsky, A. Szydłowski, C. Verona
 “ICF related studies at ABC facility”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O1, pg. 5
- 11) G. D’Angelo, C. Branca, G. Carini, G. Ceccio, C. Crupi, G. Ruello, S. Rifici, U. Wanderlingh and L. Torrasi
 “Non-equilibrium plasma production by pulsed laser ablation of Silver borate glasses”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O6, pg. 11
- 12) M. Cutroneo, A. Mackova, V. Havranek, P. Malinsky, L. Torrasi, K. Vad, A. Csik, P. Slepicka, B. Svecova, L. Kovacik and J. Ullschmied
 “Applications of Ion beam Analysis methods within the laser-matter interaction research field”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O10, pg. 16
- 13) M. Rosinski, J. Badziak, P. Parys, A. Zaras-Szydłowska, L. Torrasi, L. Ryc, A. Szydłowski, A. Malinowska, B. Kaczmarczyk, J. Makowski and A. Torrasi
 “Acceleration of protons in plasma produced from a thin plastic or aluminum target femtosecond laser”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O11, pg. 17
- 14) L. Torrasi, J. Badziak, M. Rosinski, A. Zaras-Szydłowska and A. Torrasi
 “Resonant absorption effect induced by polarized laser light irradiating thin foils in the TNSA regime of ion acceleration”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O12, pg. 18
- 15) A. Cannavò, L. Torrasi, L. Calcagno
 “SiC detector characterization for radiation emitted by laser-generated plasmas”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O16, pg. 23
- 16) D. Giulietti, R. De Angelis, M. Ferrario, V. Nassisi and L. Torrasi
 “Hot particles and radiation in laser-matter interaction experiments”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O31, pg. 40
- 17) G. Ceccio, L. Torrasi and M. Cutroneo
 “Advanced targets preparation and their characterization before to be submitted to TNSA laser irradiation”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, O34, pg. 43
- 18) M. Cutroneo, V. Havranek, V. Semian and L. Torrasi
 “Ion micro beam, promising methods for interdisciplinary research”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, P4, pg. 48
- 19) G. Galtieri, A.M. Visco, D. Nocita, L. Torrasi, G. Ceccio and C. Scolaro
 “Polyethylene laser welding based on optical absorption variations”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, P9, pg. 53
- 20) A. Zaras-Szydłowska, J. Badziak, M. Rosinski, L. Torrasi, B. Kaczmarczyk, J. Makowski, P.

- Parys, L. Ryc and A. Torrasi
 “Proton beams produced by a high-intensity femtosecond laser pulse from thin foils and massive targets- a comparison”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, P13, pg. 57
- 21) L. Torrasi, R. De Angelis, D. Giulietti, V. Nassisi, P. Andreoli, G. Ceccio, M. Cipriani, F. Consoli, G. Cristofari, A. Curcio, M. Cutroneo, D. Delle Side, G. Di Giorgio, F. Ingenito
 “Aluminium ion acceleration at ABC-laser facility using two counter-propagating beams”
 Int. Conf. PPLA2015, 5-7 October, Enea, Frascati, Rome, Italy, P14, pg. 58
- 22) M. Cutroneo, V. Havranek, A. Mackova, V. Semian, L. Torrasi and L. Calcagno
 “Micro-patterns fabrication using focused proton beam lithography”
 22th Conference on Ion Beam Analysis (IBA), June 14 - 19, 2015 - Opatija, Croatia
- 13) L. Torrasi, M. Cutroneo, A. Italiano and A. Torrasi
 “Analysis of elements, compounds and isotopes in ancient bronze coins of the Mediterranean basin”
 Proc. Technart 2015, Non destructive microanalytical techniques in art and cultural heritage, Catania, April 27-30, Oral pg. 104, 2015

Partecipazioni e comunicazione a congressi Nazionali 2015 senza Referee

- 1) L. Torrasi, A. Italiano, M.A. Mastelloni
 “Analisi XRF preliminari su materiali architettonici di VI sec. A.C.”
 Conf. La Scuola a Teatro, Museo Archeologico Regionale di Lipari, 29 Giugno 2015, Lipari (ME), Italy
- 2) L. Torrasi, A. Italiano M.A. Mastelloni
 “Nuovi e vecchi frammenti di membranature architettoniche di VI sec. A.C.: Analisi XRF preliminari”
 Ed. M.A. Mastelloni, Museo Archeologico Regionale di Lipari, in press 2015
- 3) L. Torrasi
 “Dottorati di Ricerca in Italia, in Europa e nel Mondo”
 Activity Report 2015 - Dottorato di Ricerca in Fisica, Università di Messina, L. Torrasi Ed. ISSN 2038-5889, pg. 1-4, 2015
- 4) C. Scolaro and L. Torrasi
 “Wet ability measurements of human blood on hemocompatible substrates”
 Activity Report 2015 - Dottorato di Ricerca in Fisica, Università di Messina, L. Torrasi Ed. ISSN 2038-5889, pg. 45-48, 2015
- 5) A. Cannavò and L. Torrasi
 “Advanced SiC detectors for laser-generated plasma diagnostic”
 Activity Report 2015 - Dottorato di Ricerca in Fisica, Università di Messina, L. Torrasi Ed. ISSN 2038-5889, pg. 45-48, 2015
- 6) G. Ceccio, L. Torrasi and M. Cutroneo
 “Dependence of atomic number in laser-matter interaction and target preparation for TNSA irradiation”
 Activity Report 2015 - Dottorato di Ricerca in Fisica, Università di Messina, L. Torrasi Ed. ISSN 2038-5889, pg. 45-48, 2015
- 7) N. Restuccia and L. Torrasi
 “Use of Au nanoparticles in radiotherapy and diagnostics”
 Activity Report 2015 - Dottorato di Ricerca in Fisica, Università di Messina, L. Torrasi Ed. ISSN 2038-5889, pg. 45-48, 2015
- 8) R.A. Serway & J.W. Jewett Jr.– Traduzione in Italiano by L. Torrasi
 “Principi di Fisica”, V. I, EDISES, Napoli, ISBN 9788879594196

5.18 Fisica dei sistemi Complessi

Componenti: Prof. Francesco Mallamace (PO, Responsabile), Dr. Sebastiano Vasi (Dottorando)

Attività di Ricerca relativa all'anno 2015

Le attività di ricerca sono state focalizzate nello studio della dinamica di sistemi complessi, fra cui proteine idratate e colloidali in soluzione, al fine di caratterizzare le regioni di confine che separano diversi comportamenti dinamici.

Le metodologie sperimentali utilizzate per tali scopi comprendono soprattutto lo Scattering di Neutroni e le spettroscopie ottiche e di Risonanza Magnetica Nucleare.

Le numerose collaborazioni con strutture di ricerca nazionali e internazionali all'avanguardia in diversi settori scientifici consentono la condivisione di saperi per una attività di ricerca che ben si inserisce all'interno del panorama scientifico nazionale ed internazionale. Fra tali strutture è importante menzionare il Consorzio Interuniversitario per lo Sviluppo dei Sistemi a Grande Interfase di Firenze, l'Istituto per i Processi Chimico-Fisici del CNR, la Boston University di Boston (USA) ed il Massachusetts Institute of Technology di Cambridge (USA).

Fra i risultati scientifici di maggior rilievo spiccano quelli inerenti lo studio delle proprietà dell'acqua di idratazione di sistemi biologici come le proteine. Infatti si è mostrato come siano proprio le proprietà strutturali e soprattutto dinamiche della prima shell di idratazione del lisozima ad influenzare la dinamica dei residui amminoacidici del lisozima stesso, e quindi la corrispondente attività biologica. Nel dettaglio si è mostrato come la stabilità e la durata dei legami idrogeno siano influenzate dalla temperatura al punto di determinare le regioni termiche che determinano i limiti dell'attività biologica del lisozima. Il confine alle basse temperature è determinato dalla temperatura al di sotto della quale il network di legami idrogeno che legano l'acqua ai gruppi idrofilici della proteina e alle altre molecole d'acqua è completamente sviluppato e rigido. Infatti al di sotto di tale temperatura, il cui valore corrisponde a circa 225K, la dinamica del sistema è quasi congelata, o arrestata, e corrisponde a quella di un solido amorfo in cui sono permessi essenzialmente "salti" da una posizione all'altra senza la possibilità per le molecole di esplorare un elevato numero di possibili configurazioni come avviene ad alta temperatura. Tale caratteristica è stata verificata essere propria del sistema acqua e quindi influenza tutti i sistemi con cui l'acqua stessa si trova ad interagire. Il confine ad alta temperatura è determinato invece dalla temperatura di denaturazione irreversibile (~346K per il lisozima) oltre la quale la proteina si sfolda irreversibilmente perché la forza e la stabilità dei legami idrogeno non sono tali da farla rimanere nello stato chiuso caratteristico della fase nativa. Tale processo di unfolding tuttavia comincia ad avviarsi a circa 320K, temperatura che per l'acqua marca la "transizione" tra il comportamento di liquido anomalo, ma di buon solvente ($T < 320K$), e quello di liquido semplice, ma di cattivo solvente ($T > 320K$). È importante sottolineare come all'interno della regione di temperature fra 320 e 346K, il processo di folding/unfolding può essere reversibile dipendendo dalle condizioni del sistema.

Parallelamente il fenomeno delle transizioni dinamiche è stato studiato anche per soluzioni colloidali, non solo in funzione della temperatura ma anche della concentrazione. Il modello teorico che ben si presta alla descrizione di questo tipo di fenomeni è la versione Estesa della ben nota Mode Coupling Theory che prevede come oltre un valore critico o di soglia la dinamica del sistema sia descritta essenzialmente mediante processi di salto da una configurazione molecolare all'altra.

Infine è opportuno menzionare lo studio del cosiddetto Boson Peak per acqua confinata in nanotubi e la sua corrispondente associazione proprio al crossover dinamico dell'acqua a circa 225K legato al completo sviluppo del network di legami idrogeno. La temperatura di tale crossover dinamico corrisponde alla temperatura della "Widom line", linea del massimo delle correlazioni alla base delle funzioni di risposta termodinamiche dell'acqua, all'interno della ipotesi che prevede l'esistenza di un secondo punto critico dell'acqua.

Publicazioni 2015

1. Mallamace F., Corsaro C., Mallamace D., Vasi S., Vasi C., Stanley, H Eugene; Chen, Sow-Hsin. *Some thermodynamical aspects of protein hydration water*. Journal of Chemical Physics 142 (2015) 215103.

2. Mallamace F., Corsaro C., Mallamace D., Vasi S., Vasi C., Dugo G. *The role of water in protein's behavior: The two dynamical crossovers studied by NMR and FTIR techniques*. Computational and Structural Biotechnology Journal 13 (2015) 33–37.
3. Mallamace F., Corsaro C., Vasi C., Vasi S., Mallamace D., Chen S.-H. *The dynamical fragile-to-strong crossover in attractive colloidal systems*. Journal of Non-Crystalline Solids 407 (2015) 355–360.
4. Mallamace F., Corsaro C., Mallamace D., Wang Z., Chen S.-H. *The Boson peak in confined water: An experimental investigation of the liquid-liquid phase transition hypothesis*. Front. Phys. 10(5), 106103 (2015)
5. Mallamace F., Corsaro C., Mallamace D., Cicero N., Vasi S., Dugo G., Stanley H.E. *Dynamical changes in hydration water accompanying lysozyme thermal denaturation*. Front. Phys. 10, 108201 (2015)
6. Mallamace F., Corsaro C., Mallamace D., Vasi C., Cicero N., Stanley H.E.. *Water and lysozyme: Some results from the bending and stretching vibrational modes*. Front. Phys. 10(5), 106104 (2015)
7. Mallamace F., Corsaro C., Mallamace D., Chen S.-H. *The fragile-to-strong dynamical crossover and the system viscoelasticity in attractive glass forming colloids*. Colloid and Polymer Science 293(11), 3337-3349 (2015)
8. Corsaro C., Mallamace D., Vasi S., Ferrantelli V., Dugo G., and Cicero N. *¹H HR-MAS NMR Spectroscopy and the Metabolite Determination of Typical Foods in Mediterranean Diet*. Journal of Analytical Methods in Chemistry 2015, Article ID 175696, (2015)
9. Cicero N., Corsaro C., Salvo A., Vasi S., Giofrè S. V., Ferrantelli V., Di Stefano V., Mallamace D., Dugo G. *The metabolic profile of lemon juice by proton HR-MAS NMR: the case of the PGI Interdonato Lemon of Messina*. Natural Product Research 29 (2015) 1894-1902

Organizzazione di eventi

Mallamace F. International Workshop on “The Structure and Dynamics of Supercooled Water and Other Glassy Materials” - in honor of Prof. Sow-Hsin Chen 80th birthday, 10-13 October 2015 Palermo, Italy.

5.19 Gruppo di Ricerca in “Geofisica generale ed applicazioni territoriali” Componenti: Giancarlo Neri, Barbara Orecchio, Debora Presti, Cristina Totaro

L’attività di ricerca svolta ricade nel Settore Geofisica (04/A4), con particolare riferimento ai SSD GEO/10 e GEO/11. Essa è in larga parte riconducibile a due macrolinee di ricerca principali:

1. Geofisica e geodinamica del sistema Tirreno–Ionio-ArcoCalabro
2. Fisica dei fenomeni sismici ed applicazioni territoriali

1. “Geofisica e geodinamica del sistema Tirreno–Ionio-ArcoCalabro” (referente B. Orecchio)

Analogamente a quanto avvenuto nel 2014, l’attività condotta nel 2015 nell’ambito di questa macrolinea è riferibile a varie iniziative di ricerca e progetti, tra questi il Progetto Nazionale PRIN 2010-2011: "Geodinamica attiva e recente dell'Arco Calabro e del complesso di accrezione nel Mar Ionio", nell’ambito del quale B. Orecchio è responsabile dell’Unità di Ricerca dell’Università di Messina, ed il Progetto INGV-DPC S1 2014-2015, “Base-knowledge improvement for assessing the seismogenic potential of Italy”, " (Tema “Sismicità nella regione calabro-lucana”) nel quale Debora Presti coordina il team dell’Università di Messina.

Questa macrolinea di ricerca si fonda in modo particolare sulle collaborazioni con: il Lamont-Doherty Earth Observatory della Columbia University, l’Institute of Petroleum Geology and Geophysics di Novosibirsk, l’Université des Antilles et de la Guyane, l’Università di Malta, l’Università della Calabria, l’Università di Roma Tre, l’Università di Catania, l’Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia, l’ISMAR del CNR di Bologna.

I risultati degli studi condotti nel 2015 rappresentano approfondimenti delle conoscenze disponibili per l’area dell’Arco Calabro-Peloritano. Ciò vale in modo particolare in riferimento alle conoscenze tomografiche a livello crostale ed all’individuazione delle strutture e dei campi di stress e strain tettonico nella regione.

La referente del gruppo ha inoltre proseguito la stretta collaborazione con l'ISMAR del CNR di Bologna per studi di Geofisica Marina nello Ionio e, in tale ambito, ha contribuito alle ricerche in corso sui dati della Campagna Oceanografica del CNR "CALAQUAKE 2012". I principali risultati sono compendati in una nota pubblicata su una rivista internazionale. Lo studio ha consentito di individuare varie faglie attive nel Mar Ionio e di ricostruire lo scenario geodinamico regionale

La macrolinea in argomento ha sostenuto ed in atto sostiene una parte dell'attività didattica del Corso di insegnamento di Elementi di Fisica Terrestre (Corso di Laurea Triennale in Fisica).

2. "Fisica dei fenomeni sismici ed applicazioni territoriali" (referente G. Neri)

L'attività condotta nell'ambito di questa macrolinea è riferibile a varie iniziative di ricerca e progetti, tra questi il Progetto PO-FESR 2007-2013 – Linea di Intervento 4.1.1.1 dal titolo "Attività di sviluppo sperimentale finalizzata alla riduzione del rischio sismico nella Sicilia Orientale", nell'ambito del quale G. Neri è responsabile per l'Università di Messina. Tale Progetto si è concluso il 31 Dicembre 2015.

Questa macrolinea di ricerca si fonda in modo particolare sulle collaborazioni con: la St. Louis University, l'Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia, l'Università della Calabria, l'Università di Malta, l'Università di Bari e l'Università di Milano.

Come nell'anno precedente, le attività hanno riguardato in modo particolare (a) il perfezionamento delle tecniche di localizzazione dei terremoti ai fini del riconoscimento delle strutture sismogenetiche e del loro potenziale sismico, (b) l'adozione di nuove tecniche di inversione delle forme d'onda e di generazione di sismogrammi sintetici utili per una migliore comprensione dei meccanismi sismogenetici e per la stima degli scuotimenti attesi al suolo da sorgenti sismiche prefissate, (c) la valutazione dei livelli di pericolosità sismica sul territorio attraverso l'integrazione di tali metodologie con tecniche di geofisica applicata e geologia.

La macrolinea in argomento, ha contribuito a supportare i corsi di Geofisica (CLM in Fisica) e Fisica dei Fenomeni Sismici ed Applicazioni Territoriali (CLT in Fisica). Contribuisce inoltre a varie attività di studio condotte per esigenze di protezione civile a livello locale e nazionale.

Publicazioni scientifiche su riviste internazionali "ISI Web of Science JCR"

1. Orecchio B., Presti D., Totaro C., D'Amico S., Neri G., Investigating slab edge kinematics through seismological data: the northern boundary of the Ionian subduction system (south Italy), *Journal of Geodynamics*, 88, 23-35, doi: 10.1016/j.jog.2015.04.003, 2015.

2. Palano M., Schiavone D., Loddo M., Neri M., Presti D., Quarto R., Totaro C., Neri G., Shallow structure and dynamics along the southern edge of the Tyrrhenian subduction zone (NE Sicily): new insights from a multidisciplinary approach, *Tectonophysics*, 657, 205-218, doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.tecto.2015.07.005>, 2015.

3. Totaro C., Seeber L., Waldhauser F., Steckler M., Gervasi A., Guerra I., Orecchio B., Presti D., An intense earthquake swarm in the southernmost Apennines: fault architecture from high-resolution hypocenters and focal mechanisms, *Bulletin of the Seismological Society of America*, 105, 6, 3121-3128, doi: 10.1785/0120150074, 2015.

Lavori presentati a Congressi

1. Pino P., Presti D., Neri G., Orecchio B., Puglisi G., Scolaro S., Torre A., Totaro C., Indagini per la modellazione geologico-geofisica dei siti del messinese e del catanese di interesse del Progetto PO FESR 162, Meeting "Attività di sviluppo sperimentale finalizzata alla riduzione del rischio sismico nella Sicilia orientale", Progetto 162 PO FESR Sicilia 2007/2013 (Messina, 10 Aprile 2015).

2. Brozzetti F., Pauselli C., Presti D., Cirillo D., De Nardis R., Lavecchia G., Cardinali M., Ercoli M., Costanzo F., Mazzocca M., Volpe R., Speziali L., Orecchio B., Totaro C., D12: Newly found Quaternary faults in the Calabro-Lucania Region: Detailed mapping and integration with GPR and seismological data aimed at the 3D reconstruction of the active fault system, Convegno finale Progetti Sismologici DPC-INGV 2014-2015 (Bologna 4-5 Giugno 2015).

3. Guerra I., Presti D., Orecchio B., Totaro C., D'Amico S. (2015), D11: Relocated seismicity in the Calabro-Lucania region with 3D velocity structure, and analysis of micro-earthquakes, Convegno finale Progetti Sismologici DPC-INGV 2014-2015 (Bologna 4-5 Giugno 2015).

4. Aloisi M., Cannavò F., Neri G., Orecchio B., Palano M., Presti D., Pulvirenti F., Siligato G., Totaro C., Local extensional effects as possible response to thrusting dynamics: the case of the Southern Tyrrhenian

region, XXXIV Convegno Nazionale del GNGTS - Gruppo Nazionale di Geofisica della Terra Solida (Trieste, 16-19 November 2015).

5. Pino P., D'Amico S., Scolaro S., Orecchio B., Presti D., Totaro C., Farrugia D., Torre A., Puglisi G., Geophysical measurements for site response investigation: preliminary results in the historical centre of Rometta (Messina, South Italy), XXXIV Convegno Nazionale del GNGTS - Gruppo Nazionale di Geofisica della Terra Solida (Trieste, 16-19 November 2015).

Progetti di Ricerca

1- Progetto Nazionale PRIN 2010-2011 (data conclusione 2016) "Geodinamica attiva e recente dell'Arco Calabro e del complesso di accrezione nel Mar Ionio". Il Progetto finanziato dal Ministero dell'Istruzione, dell'Università e della Ricerca (MIUR) nel Febbraio 2013 include 5 Unità di ricerca: Università di Catania (Resp. Scientifico e coordinatore nazionale Carmelo Monaco); Università di Messina (Resp. Scientifico Barbara Orecchio). La quota di finanziamento dell'Università di Messina ammonta a 110 K€.

2- Progetto PO FESR 2007-2013 – Linea 4.1.1.1 – “Attività di sviluppo sperimentale finalizzata alla riduzione del rischio sismico nella Sicilia Orientale” (responsabile per Unime: Giancarlo Neri; finanziamento Unime 257 K€, data conclusione 2015).

3- Progetto INGV-DPC-S1 finanziato dall'Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia in convenzione con il Dipartimento Nazionale della Protezione Civile 2014/2015, “Base-knowledge improvement for assessing the seismogenic potential of Italy”, Responsabile Scientifico per l'Università di Messina Debora Presti, finanziamento Unime 10 K€, data conclusione 2015.

5.20 Gruppo di Ricerca in “Ricerche di geologia ambientale e territoriale”

Componenti: Prof. Giovanni Randazzo, Dott.ssa Stefania Lanza

Il gruppo di ricerca costituito da un PA, da un assegnista e da un borsista ha fornito il proprio contributo all'attività didattica coprendo tutti gli insegnamenti di tipo geografico, geomorfologico e geologico ambientale nonché i laboratori, di vario livello, di cartografia dei corsi di laurea afferenti al DFST.

Dal punto di vista scientifico il gruppo ha continuato a operare nell'ambito della ricerca sul sistema ambientale costiero, evidenziandone le problematiche connesse al pericolo, al rischio e alla gestione.

E' in via di completamento un data base regionale, con informazioni puntuali lungo i diversi tratti di spiaggia, raccogliendo misure e campioni con interdistanza di 1 km. Il data base è in fase di completamento ed implementazione.

Nell'ambito del Gruppo di Lavoro sulle coste dell'AIGEO, è preparazione un atlante delle pocket beaches siciliane che costituiscono ambienti di grande interesse naturalistico, nell'ambito di un più ampio panorama costiero.

In questo contesto è stato implementato il monitoraggio geomorfologico – sedimentologico del territorio costiero messinese, avviato nel 2006 lungo l'intero litorale, lungo circa 60 km.

Sulla base di questi dati il gruppo è stato impegnato nel dibattito cittadino relativo all'erosione costiera di alcune frazioni, alla gestione del porto di Tremestieri e al PUDM.

Sempre nell'ottica della gestione dei litorali è stato proseguito il monitoraggio geomorfologico – sedimentologico dell'area protetta dei laghetti di Marinello. In questo caso con rilievi topografici e analisi sedimentologiche si è studiato il sistema dinamico della lingua di sabbia.

Sempre in questo ambito (spit) con i colleghi Cooper e Johnson della Ulster University è stato pubblicato un volume tematico su diversi aspetti tecnici che riguardano gli spit costieri (Springer Editor).

Inoltre dal 2014 il Prof Randazzo è il Responsabile scientifico dello SPIN OFF accademico GeoloGIS s.r.l.

PUBBLICAZIONI

1. . Crisà, S. Lanza, G. Randazzo. The historical evolution of the Tindari – Marinello spit (Patti, Messina, Italy) (2015). In Coastal Research Library, Sand and gravel spit, 103-121.G, Randazzo, D.W.T.Jackson and J.A.G.Cooper Editors, Springer.

2. G. Randazzo, A. Crupi e S. Lanza , Improving coastal management plan, moving towards territorial integration, using existing legislation tools: a possible example in Sicily. Sottomesso Ocean & Coastal Management (OCMA-D-15-00340).

3. Randazzo G., Lanza S., Crupi A., Per un sistema di smaltimento dei rifiuti territorialmente compatibile e ambientalmente sostenibile: il caso della Sicilia, una regione insulare poco industrializzata e vocata al turismo. Sottomesso Rivista di Geografia

PARTECIPAZIONE A PROGETTI

- Gruppo di studio Geomorfologia costiera, istituito nell'ambito dell'Associazione AIGEO
- Progetto Centro di Eccellenza Ricerca e Innovazione Strutture e Infrastrutture di grandi dimensioni
- Costituzione del Centro Studi Geomorfologici dei Nebrodi con ORGS, CNG, UNIPA e Parco dei Nebrodi

ALTRI PRODOTTI DELLA RICERCA

Contributo alle linee guide "Struttura di missione contro il dissesto idrogeologico e per lo sviluppo delle infrastrutture idriche" per la parte "Indirizzi per la progettazione degli interventi di mitigazione del rischio idrogeologico" ITALIA SICURA

ATTIVITÀ "Conto Terzi"

Nell'ambito dei contratti Conto Terzi acquisiti dal Dipartimento sotto la responsabilità scientifica del Prof. Giovanni Randazzo:

- Analisi tessiturali e sedimentologiche a supporto di una "Proposta tecnico gestionale del sistema porto spiaggia di San Vito lo Capo (Trapani)". Committente STUDIO FC & RR ASSOCIATI S.r.l.
- Consulenza geologico – geomorfologica – sedimentologica e studio di impatto ambientale propedeutici alla messa in sicurezza del porto di Donnalucata in Scicli (Rg). Committente Dipartimento della Protezione civile della Regione siciliana.

5.21 Gruppo di Ricerca in "Caratterizzazione strutturale di sistemi zeolitici e Studi archeometrici di Beni Culturali"

Componenti: Prof. ssa Simona Quartieri (P.O.), Dr. Giuseppe Sabatino (tecnico laureato).

L'attività di Ricerca svolta nel 2015 ha riguardato i seguenti argomenti:

- 1) *Penetrazione di molecole ospiti indotta dalla pressione in materiali microporosi idrofobi*
- 2) *Confinamento di molecole di coloranti organici nella zeolite L*
- 3) *Confinamento di molecole di coloranti organici nell'AIPO₄₋₅*
- 4) *Studio del comportamento elastico di cavansite e pentagonite*
- 5) *Studio del comportamento termico della Si-faujasite*
- 6) *Studio strutturale dell'assorbimento di CO₂ in sistemi zeolitici tipo faujasite*
- 7) *Studi archeometrici su Beni Culturali*

1) *Penetrazione di molecole ospiti indotta dalla pressione in materiali microporosi idrofobi*

E' proseguito lo studio della penetrazione indotta dalla pressione di molecole organiche in materiali porosi ricchi in silice. Sono stati effettuati esperimenti in alta pressione - tramite diffrazione a raggi X in luce di sincrotrone - adottando mezzi di trasmissione della pressione penetranti, al fine di verificare l'ingresso di molecole addizionali (acqua e/o solvente e/o elettrolita) all'interno dei canali zeolitici e se la eventuale intrusione viene mantenuta anche una volta che la pressione viene rilasciata.

Sono stati studiati materiali con topologia FER e MOR, in presenza di diversi mezzi di trasmissione penetranti (quali methanol:ethanol:water 16:3:1 (m.e.w.), etanolo/acqua (e.w.), glicole etilenico, resorcinolo, formaldeide,

soluzioni acquose di $MgCl_2$, etc.) e uno non penetrante (silicone oil, s.o.). I dati sono stati raccolti, sia in diffrazione da polveri che a cristallo singolo, presso linee di luce di sincrotrone a ESRF. Si è avuta evidenza di ingresso di molecole addizionali durante la compressione in mew, e.w., glicole etilenico, formaldeide e soluzione acquosa di $MgCl_2$.

Arletti, R., Leardini, L., Vezzalini, G., Quartieri, S., Gigli, L., Santoro, M., Haines, J., Rouquette, J., Konczewicz, L. (2015) Pressure-induced penetration of guest molecules in high-silica zeolites: The case of mordenite. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17 (37), pp. 24262-24274.

Lotti, P., Arletti, R., Gatta, G.D., Quartieri, S., Vezzalini, G., Merlini, M., Dmitriev, V., Hanfland, M. (2015) Compressibility and crystal-fluid interactions in all-silica ferrierite at high Pressure. *Microporous and Mesoporous Materials*, 218, pp. 42-54.

Quartieri, S. (2015) Synchrotron radiation in the Earth Sciences. In “Synchrotron Radiation: Basics, Methods and Applications”, pp. 641-660.

2) Confinamento di molecole di coloranti organici nella zeolite L

I sistemi ibridi zeolite-coloranti fungono da mattoni base per una vasta gamma di materiali funzionali caratterizzati da una organizzazione supra-molecolare, gerarchicamente estesa fino alla scala macroscopica, adatti ad essere utilizzati in dispositivi di interesse tecnologico. Infatti il confinamento spaziale all'interno di zeoliti può portare alla formazione di sistemi che hanno grande rilevanza per le nanotecnologie, poiché la struttura porosa delle zeoliti può essere usata come uno stampo per creare “array” regolari. Le loro applicazioni spaziano dalle energie sostenibili, come sistemi antenna per la cattura di luce solare per la produzione di nuovi materiali luminescenti, alle bio-nanotecnologie, come materiali multifunzionali in grado di legare, etichettare e uccidere cellule e batteri.

Nel 2015, l'attenzione si è rivolta allo studio strutturale del materiale composito costituito da zeolite L e il colorante organico denominato tb-DXP [N,N-bis (4-tert-butyl-2,6-dimethylphenyl)-3,4,9,10-perylenetetracarboxylic diimide], appartenente alla famiglia dei perileni. Per questo sistema manca un'approfondita caratterizzazione cristallografica che metta in evidenza quale tipo di interazione si verifica tra l'host zeolitico e il guest cromoforo, in grado di giustificare la sua stabilità e le sue interessanti proprietà ottiche. Il sistema ibrido, ottenuto per sintesi su polveri, è stato caratterizzato tramite XRPD con sorgente convenzionale di laboratorio e luce di sincrotrone, analisi termogravimetriche, spettroscopia UV-Vis, IR, fluorimetria e BET. L'incapsulamento del colorante all'interno della zeolite è stato confermato.

3) Confinamento di molecole di coloranti organici nell'AlPO₄-5

L'allumino-fosfato AlPO₄-5 ha topologia tipo AFI, caratterizzata dalla presenza di canali paralleli tra loro, orientati lungo la direzione [001], delimitati da anelli di 12 tetraedri, con un diametro interno libero di circa 7.3 Å. La zeolite è stata sintetizzata in condizioni idrotermali seguendo protocolli riportati in letteratura e opportunamente modificati per consentire l'inserimento del colorante nei canali. Sono stati incapsulati i seguenti coloranti: azobenzene e oxazina-1, rispettivamente un colorante neutro ed uno cationico interessanti nel campo della fotoelettronica.

Nel caso dell'azobenzene, il caricamento è avvenuto tramite gas-phase adsorption; i campioni di AlPO₄-5 e di azobenzene sono stati lasciati in un'autoclave a 150° C affinché il colorante volatilizzasse ed entrasse come fase vapore all'interno della zeolite in sostituzione dell'acqua. Per l'oxazina-1 è invece stato eseguito l'inserimento diretto durante la cristallizzazione.

I compositi così sintetizzati sono stati caratterizzati chimicamente tramite SEM/EDS ed analisi termogravimetrica (TG) e cristallograficamente tramite diffrazione a raggi X su polveri (XRPD). Gli spettri di diffrazione sono stati raccolti sia con sorgenti convenzionali sia con luce di sincrotrone. Grazie ai dati ottenuti da esperimenti effettuati su due diverse linee di luce di sincrotrone (ID22 a ESRF e X-PRESS a Elettra) è stato possibile effettuare un affinamento strutturale con il metodo Rietveld. Ciò ha permesso, per quanto riguarda la fase AlPO₄-5 + azobenzene, la localizzazione di parte della molecola di colorante all'interno dei canali zeolitici. La zeolite con oxazina-1 è stata invece caratterizzata solo da un punto di vista chimico con analisi termogravimetriche. Dal affinamento strutturale del composito con azobenzene risulta che:

- a) l'incapsulamento della molecola di colorante ha deformato leggermente il framework inducendo un arrotondamento dei canali;
- b) la molecola planare dell'azobenzene è inclinata di circa 36° rispetto all'asse cristallografico c (asse dei canali).

Questo risultato, in accordo con altri lavori riportati in letteratura su sistemi analoghi, indica che può esserci un'influenza da parte dell'host sulla disposizione della molecola ospite. Ulteriori studi di tipo spettroscopico potranno rivelare la natura di questa interazione.

4) *Comportamento elastico di cavansite e pentagonite*

Si è concluso lo studio del comportamento elastico delle fasi naturali cavansite e pentagonite (dimorfi ortorombici di $\text{Ca}(\text{VO})(\text{Si}_4\text{O}_{10})\cdot 4\text{H}_2\text{O}$). L'indagine è stata effettuata in diffrazione di raggi X su polveri in luce di sincrotrone e su cristallo singolo, usando come mezzi di trasmissione della pressione un mezzo penetrante (m.e.w.) e uno non penetrante (silicone oil, s.o.). I raffinamenti strutturali eseguiti sui dati raccolti alle varie pressioni hanno evidenziato deformazioni del framework, transizioni di fase e iper-idratazione indotta dalla pressione.

Danisi, R.M., Armbruster, T., Arletti, R., Gatta, G.D., Vezzalini, G., Quartieri, S., Dmitriev, V. (2015) Elastic behavior and pressure-induced structural modifications of the microporous $\text{Ca}(\text{VO})(\text{Si}_4\text{O}_{10})\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ dimorphs cavansite and pentagonite

Microporous and Mesoporous Materials, 204 (C), pp. 257-268.

5) *Studio del comportamento termico della Si-faujasite*

E' stato studiato il comportamento termico della zeolite faujasite di puro silicio (Si-Y) da T_{amb} a 1123 K, attraverso XRPD in luce di sincrotrone. Le misure sono state eseguite sulla linea MCX di Elettra.

La Si-Y risulta estremamente stabile sotto riscaldamento, non subisce transizioni di fase e mostra un interessante comportamento NTE (Negative Thermal Expansion) tra T_{amb} e 973K. Sopra questa temperatura si osserva invece un'espansione termica positiva. Il comportamento termico complessivo della Si-Y è stato interpretato strutturalmente sulla base delle vibrazioni termiche trasversali degli ossigeni coinvolti nei legami Si-O-Si e di una serie di altre caratteristiche strutturali, quali le distanze Si-Sin tra tetraedri adiacenti, lo spessore dei doppi anelli a 6 e l'indice di di-trigonalizzazione dei doppi anelli a 6.

Lear dini, L., Quartieri, S., Vezzalini, G., Arletti, R. (2015) Thermal behaviour of siliceous faujasite: Further structural interpretation of negative thermal expansion. Microporous and Mesoporous Materials, 202 (C), pp. 226-233.

6) *Studio strutturale dell'assorbimento di CO₂ in sistemi zeolitici tipo faujasite*

E' proseguita l'indagine sull'incapsulamento di molecole di CO₂ in zeoliti sintetiche con topologia FAU. Il problema della separazione della CO₂ da altri gas leggeri è stato largamente affrontato in passato. In particolare, la maggior parte del lavoro ha riguardato la separazione di CO₂ da gas naturali per ottenerne la purificazione. Più recentemente grande enfasi è stata data allo storage di CO₂ per mitigare gli effetti di questo gas sui cambiamenti climatici. Tra i vari approcci utilizzati per questi studi manca tuttavia una accurata indagine strutturale per determinare i meccanismi di incapsulamento a livello atomistico e le interazioni tra le molecole di CO₂ e gli atomi del framework e delle specie extra-framework della zeolite.

Sono stati eseguiti esperimenti in diffrazione da polveri in luce di sincrotrone presso la linea MCX di ELETTRA (Trieste) e ID22 (ESRF) su diversi campioni di zeoliti X, Y e LSX operando prima in condizioni di assorbimento di CO₂ fino a saturazione e poi in condizioni di desorbimento in alta temperatura. I risultati evidenziano la penetrazione di CO₂ in tutti i campioni, con diverse localizzazioni e interazioni delle molecole a seconda del catione extra-framework e del rapporto Si/Al del framework. In un caso è stata osservata una parziale irreversibilità del processo di assorbimento.

R. Arletti, L. Gigli, F. Di Renzo, S. Quartieri (2016) Evidence for the formation of stable CO₂ hydrates in zeolite Na-Y: Structural characterization by synchrotron X-ray powder diffraction. Microporous and Mesoporous Materials, 228, 248-255

7) *Studi archeometrici di Beni Culturali*

Le ricerche archeometriche svolte nel 2015 hanno riguardato lo studio di:

- a) vetri trasparenti di epoca proto-Bizantina provenienti dagli scavi dell'Anfiteatro di Catania. L'indagine chimica, svolta con microsonda elettronica e laser ablation, ha riguardato sia gli elementi maggiori che i minori e le tracce e ha fornito informazioni sulle diverse tipologie di reperti, sulle materie prime utilizzate e sulle probabili zone di provenienza.
- b) Vetri dell'età del Bronzo provenienti dagli scavi di Punta Zambrone.
E' stato inoltre curato un fascicolo della rivista internazionale ELEMENTS, dedicato alle applicazioni delle Scienze della Terra allo studio dei Beni Culturali, e pubblicata una review sulle applicazioni della luce di sincrotrone agli studi di materiali di interesse archeologico e artistico.

M. Di Bella, C. Giacobbe, S. Quartieri, G. Sabatino, U. Spigo (2015) Archaeometric characterization of Proto-Byzantine glass workshop from the Roman amphitheatre of Catania (Sicily, Italy). *Eur. J. Mineral.* 27 (3), 353 - 363

S. Conte, I. Matarese, S. Quartieri, R. Arletti, R. Jung, M. Pacciarelli, B. Gratuze (2016) Bronze Age vitreous materials from Punta di Zambrone (Southern Italy). *Eur. J. Mineral.* 28, (2), 409-433

Quartieri, S. (2015) Synchrotron radiation in art, archaeology and cultural heritage. In "Synchrotron Radiation: Basics, Methods and Applications", pp. 677-695.

Artioli, G., Quartieri, S. (2016) The contribution of geoscience to cultural heritage studies. *Elements*, 12 (1), pp. 13-18.

Elenco delle Pubblicazioni su riviste internazionali

1. Arletti, R., Leardini, L., Vezzalini, G., Quartieri, S., Gigli, L., Santoro, M., Haines, J., Rouquette, J., Konczewicz, L. (2015) Pressure-induced penetration of guest molecules in high-silica zeolites: The case of mordenite. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17 (37), pp. 24262-24274.
2. Lotti, P., Arletti, R., Gatta, G.D., Quartieri, S., Vezzalini, G., Merlini, M., Dmitriev, V., Hanfland, M. (2015) Compressibility and crystal-fluid interactions in all-silica ferrierite at high Pressure. *Microporous and Mesoporous Materials*, 218, pp. 42-54.
3. Danisi, R.M., Armbruster, T., Arletti, R., Gatta, G.D., Vezzalini, G., Quartieri, S., Dmitriev, V. (2015) Elastic behavior and pressure-induced structural modifications of the microporous $\text{Ca}(\text{VO})(\text{Si}_4\text{O}_{10})\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ dimorphs cavansite and pentagonite. *Microporous and Mesoporous Materials*, 204 (C), pp. 257-268.
4. Leardini, L., Quartieri, S., Vezzalini, G., Arletti, R. (2015) Thermal behaviour of siliceous faujasite: Further structural interpretation of negative thermal expansion. *Microporous and Mesoporous Materials*, 202 (C), pp. 226-233.
5. Quartieri, S. (2015) Synchrotron radiation in the Earth Sciences. In "Synchrotron Radiation: Basics, Methods and Applications", pp. 641-660.
6. M. Di Bella, C. Giacobbe, S. Quartieri, G. Sabatino, U. Spigo (2015) Archaeometric characterization of Proto-Byzantine glass workshop from the Roman amphitheatre of Catania (Sicily, Italy). *Eur. J. Mineral.* 27 (3), 353 -363
7. S. Conte, I. Matarese, S. Quartieri, R. Arletti, R. Jung, M. Pacciarelli, B. Gratuze (2016) Bronze Age vitreous materials from Punta di Zambrone (Southern Italy). *Eur. J. Mineral.* 28, (2), 409-433
8. Quartieri, S. (2015) Synchrotron radiation in art, archaeology and cultural heritage. In "Synchrotron Radiation: Basics, Methods and Applications", pp. 677-695.
9. Artioli, G., Quartieri, S. (2016) The contribution of geoscience to cultural heritage studies. *Elements*, 12 (1), pp.13-18.
10. R. Arletti, L. Gigli, F. Di Renzo, S. Quartieri (2016) Evidence for the formation of stable CO_2 hydrates in zeolite Na-Y: Structural characterization by synchrotron X-ray powder diffraction. *Microporous and Mesoporous Materials*, 228, 248-255

Elenco delle Comunicazioni a Congressi Nazionali e Internazionali del 2015

1. R. Arletti, L. Gigli, F. Di Renzo, S. Quartieri (2015) How do zeolite capture CO_2 ? In-situ synchrotron XRPD investigation of gas adsorption in FAU systems. European Crystallographic Meeting, 23rd-28th August 2015, Rovinj, Croatia.

2. S. Quartieri, R. Arletti, P. Lotti, D. G. Gatta, G. Vezzalini (2015) Pressure-Induced Penetration of Organic Molecules in Si-Ferrierite. European Crystallographic Meeting, 23rd-28th August 2015, Rovinj, Croatia.
3. P. Lotti, D. G. Gatta, R. Arletti, G. Vezzalini, S. Quartieri (2015) Compressibility and Pressure-Induced Deformation Mechanisms in Si-Ferrierite. European Crystallographic Meeting, 23rd-28th August 2015, Rovinj, Croatia.
4. L. Gigli, R. Arletti, J. G. Vitillo, G. Martra, G. Alberto, G. Tabacchi, E. Fois, S. Quartieri, G. Vezzalini (2015) Effective transport of electronic excitation energy through zeolite channels: a structural study. European Crystallographic Meeting, 23rd-28th August 2015, Rovinj, Croatia.
5. L. Gigli, R. Arletti, J. G. Vitillo, G. Martra, G. Alberto, G. Tabacchi, E. Fois, S. Quartieri, G. Vezzalini (2015) Spectroscopic and diffractometric study of dye molecules confined in zeolite L channels: towards an effective transport of electronic excitation energy. *Periodico di Mineralogia* (2015), 84, 2. European Conference on Mineralogy and Spectroscopy. September 9-11, Rome
6. S. Quartieri, R. Arletti, L. Gigli, F. Di Renzo (2015) In-situ synchrotron XRPD study of CO₂ adsorption in faujasite systems. SILS Meeting, July 2015, Trento
7. S. Quartieri, R. Arletti, P. Lotti, G. D. Gatta, M. Merlini, V. Dmitriev, G. Vezzalini (2015) Pressure-Induced Intrusion and Crystal-fluid Interactions in Porous Materials: the case of Si-Ferrierite. SILS Meeting, July 2015, Trento
8. R. Arletti, L. Gigli, F. Di Renzo, S. Quartieri (2015) Structural Investigation of CO₂ adsorption in FAU systems. 6° Czech-Italian-Spanish Conference on Molecular Sieves and catalysis. Amantea, June 14-17 2015.
9. L. Gigli, R. Arletti, J. G. Vitillo, G. Martra, G. Alberto, G. Tabacchi, E. Fois, S. Quartieri, G. Vezzalini (2015) Toward molecular wires confined in zeolite channels for an effective transport of electronic excitation energy. 6° Czech-Italian-Spanish Conference on Molecular Sieves and catalysis. Amantea, June 14-17 2015.
10. P. Lotti, R. Arletti, G. D. Gatta, G. Vezzalini, S. Quartieri, M. Merlini (2015) Compressibility and crystal-fluid interactions in Si-ferrierite. 6° Czech-Italian-Spanish Conference on Molecular Sieves and catalysis. Amantea, June 14-17 2015.

Collaborazioni

Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche, UNIMORE

Dipartimento di Scienze della Terra, UNITO

Dipartimento di Scienze della Terra, UNIMI

Dipartimento di Scienze ed Alta Tecnologia, UNINSUBRIA, Como

Institut Charles Gerhardt Montpellier, UMR 5253 CNRS-UM-ENSCM, Montpellier, France

Université de Strasbourg (UDS), Université de Haute Alsace (UHA), Equipe Matériaux à Porosité Contrôlée (MPC), Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M) Mulhouse, France.

European Laboratory for Non Linear Spectroscopy (LENS), Sesto Fiorentino, Italy

Elettra Sincrotrone Trieste, Beamline MCX

ESRF (Grenoble), Beamlines BM01 e ID22

Partecipazione ad esperimenti in luce di sincrotrone

ID22 (ESRF) - WHY AND HOW ZEOLITES CAPTURE GREENHOUSE GASES? October 2015

Finanziamenti

PRIN 2010-2011, responsabile unità di ricerca locale: Simona Quartieri

FIRB Futuro in ricerca: Collaborazione al progetto "ImPACT"

Attività didattica

Mineralogia (AGRINA, triennale)

Mineralogia con esercitazioni (SCIENZE DELL'AMBIENTE E DELLA NATURA, triennale)

Mineralogia Ambientale (TUTELA E GESTIONE DEL TERRITORIO E DELL'AMBIENTE NATURALE, magistrale)

5.22-Gruppo di Ricerca in “Petrologia e Geochimica”

Componente: Maria Rosaria Renna

Tematica scientifica

Origine e accrezione della crosta oceanica profonda attraverso lo studio di sequenze gabbriche presenti nelle ofioliti Giurassiche ed esposte lungo la catena Alpina-Appenninica, le quali mostrano caratteristiche strutturali e composizionali simili a quelle delle sequenze gabbriche delle moderne dorsali oceaniche a bassa velocità di espansione.

Questa tematica è stata sviluppata attraverso le ricerche di seguito elencate, le quali hanno portato alla preparazione di 3 articoli sottomessi a riviste scientifiche a diffusione internazionale, di cui uno pubblicato, un altro accettato e in stampa ed un altro in fase di revisione.

Principali ricerche eseguite

9. Ricerca 1

Studio della transizione da rottura continentale ad apertura di un fondale marino a bassa velocità di espansione. Per questo scopo, sono stati prodotti nuovi dati geocronologici su corpi gabbri affioranti nelle ofioliti Liguri utilizzando il metodo di datazione U-Pb su zirconi. Gli zirconi sono stati separati da sette campioni di rocce provenienti da domini ofiolitici prossimali e distali e sono stati studiati per determinarne morfologia, struttura interna, inclusioni e composizione chimica. Le età U-Pb sono state ottenute mediante analisi *in situ* con microsonda ad ablazione laser (LA-ICPMS) e mediante analisi su singoli zirconi con TIMS. L'approccio metodologico adottato ha fornito dei robusti vincoli geocronologici che documentano un magmatismo di breve durata per le ofioliti Liguri, evidenziando l'assenza di un sostanziale gap di età tra le intrusioni gabbriche nelle sequenze di mantello sottocontinentale e impoverito. I risultati sono stati presentati in un lavoro pubblicato su una rivista scientifica internazionale (Tectonophysics).

10. Ricerca 2

Studio dell'origine di un'associazione di rocce melatroctolitiche con rocce di tipo harrisitico esposte nelle ofioliti delle Liguridi Interne. Sono state effettuate microanalisi mediante microsonda ionica (SIMS) e LA-ICPMS per determinare le composizioni in elementi in tracce degli anfiboli presenti come (1) inclusioni nello spinello delle melatroctoliti e (2) fasi accessorie nelle harrisiti. Inoltre sono stati analizzati i clinopirosseni inclusi nelle olivine dendritiche delle harrisiti. I nuovi dati hanno permesso di re-interpretare le precedenti ipotesi petrogenetiche proposte per queste rocce. In questo nuovo studio è stato proposto che le melatroctoliti e le associate harrisiti si sono formate attraverso un processo di cristallizzazione magmatica a sistema aperto, in seguito alle iniezioni di fuso primitivo nella crosta oceanica in via di formazione. In questo lavoro si è concluso che le melatroctoliti delle ofioliti e della moderna crosta oceanica possono formarsi sia per cristallizzazione magmatica intra-crosta che in seguito a reazioni fuso-mantello. I risultati sono stati presentati in un lavoro accettato e in stampa su una rivista scientifica internazionale (Journal of the Geological Society).

11. Ricerca 3

Studio delle ofioliti della Balagne (Corsica centro-settentrionale), le quali sono caratterizzate da una peculiare associazione Giurassica primaria di basalti a pillow e massivi con sedimenti pelagici, sedimenti clastici quarzoso-feldspatici di origine continentale e breccie contenenti clasti di basalto e gabbro. Principale scopo di questo studio è stato quello di eseguire delle nuove determinazioni geocronologiche per meglio stabilire (i) l'età di messa in posto della crosta oceanica profonda delle ofioliti della Balagne durante la formazione del bacino Ligure-Piemontese, e (ii) la sorgente dei depositi

quarzoso-feldspatici intercalati ai basalti a pillow. Per questo scopo sono state condotte nuove indagini di terreno e geocronologiche su rocce gabbriiche e sedimenti quarzoso-feldspatici. Le età U-Pb sono state ottenute mediante analisi *in situ* con LA-ICPMS. I nuovi dati hanno permesso di fornire nuove informazioni circa la formazione del segmento Corso del bacino Giurassico. I risultati sono stati presentati in un lavoro sottomesso ad una rivista scientifica internazionale (Swiss Journal of Geosciences) attualmente in fase di revisione.

Pubblicazioni

Articoli su riviste ISI/Scopus con comitato di redazione internazionale

Tribuzio R., Garzetti F., Corfu F., Tiepolo M., Renna M.R. *U-Pb zircon geochronology of the Ligurian ophiolites (Northern Apennine, Italy): Implications for continental breakup to slow seafloor spreading.* Tectonophysics

Contributi in Atti di Convegni nazionali in rivista

Langone A., Zanetti A., Renna M.R., Tiepolo M., Mazzucchelli M. & Giovanardi T. *New insights into the evolution of the Finero Mafic Complex, north-eastern Ivrea-Verbano Zone.* Rendiconti Online della Società Geologica Italiana, Suppl. n. 2 al Vol. 35, 46, ISSN 2035-8008, Congresso SIMP-SGI-So.Ge.I-AIV 2015

Collaborazioni

- Dipartimento di Scienze della Terra e dell'Ambiente dell'Università di Pavia
- C.N.R. – Istituto di Geoscienze e Georisorse, Unità di Pavia, grazie a questa collaborazione è stato possibile frequentare il laboratorio di laser ablation (LA)-ICPMS e il laboratorio di microsonda ionica (SIMS) presenti presso la sede del C.N.R.-IGG dell'Unità di Pavia

5.23 Gruppo di Ricerca in “Mineralogia”

Componenti: Saccà Domenica, Saccà Carmelo; Preziosa Nucera; Anna De Fazio.

Tematiche scientifiche

1. Tematica 1

Caratterizzazione e genesi di mineralizzazioni metallifere.

Un primo campo di ricerca è incentrato sullo studio delle mineralizzazioni metallifere affioranti nell'Arco Calabro Peloritano. Tale ricerca fa parte di un programma finalizzato all'acquisizione di dati sulle caratteristiche giaciture, mineralogiche, chimiche e genetiche, delle mineralizzazioni, nell'intento di fornire una ricostruzione dettagliata degli eventi che le hanno interessate e di contribuire alla ricostruzione del quadro minerogenetico in cui le stesse si inseriscono

2. Tematica 2

Mineralogia, granulometria e chimica delle argille affioranti nell'Italia meridionale e dei sedimenti marini del Mediterraneo.

Un secondo filone di ricerca, che ha come obiettivo una migliore utilizzazione delle risorse del territorio, è incentrato sullo studio delle argille. Lo studio dei sedimenti argillosi è fortemente raccomandato da numerose Associazioni a livello Nazionale e Internazionale (A.I.P.E.A, Association Internationale pour l'Etude des Argiles; ECGA, European Clay Group Association) che hanno il compito di valorizzare e coordinare gli studi e le ricerche nel campo scientifico, tecnologico e applicato, riguardanti il settore.

Pubblicazioni

Saccà Carmelo, Saccà Domenica, Preziosa Nucera, Anna De Fazio, (In stampa) Le mineralizzazioni Calabresi - Aracne editrice.

5.24 Gruppo di Ricerca: Vulcanologia, Petrologia, Geochimica ed applicazioni in campo Archeometrico

Componenti: Dott. Alessandro Tripodo, Dott. Giuseppe Sabatino, Dott.ssa Marcella Di Bella

L'attività di ricerca svolta ricade nel Macro-Settore Concorsuale 04/A1, con particolare riferimento ai SSD GEO/07, GEO/08 e GEO/09.

L'attività di Ricerca svolta nel 2015 ha riguardato i seguenti argomenti:

1. È stato completato il rilevamento geologico di dettaglio (scala 1:2000) di livelli vulcanoclastici individuati dallo scrivente nel settore tirrenico dei M.ti Peloritani Nord-Orientali. Ciò ha permesso di ricostruire almeno 8 livelli piroclastici, con spessori variabili da pochi centimetri fino a due metri, ognuno dei quali rappresenta quasi certamente un singolo episodio esplosivo. Gli studi granulometrici, sedimentologici, petrologici e geochimici eseguiti sui campioni prelevati insieme alle indagini stratigrafiche in pieno campo, hanno permesso di affermare che *i)* tutti i livelli piroclastici identificati hanno un'età compresa tra 980 e 589 ka, e si sono sedimentati in ambiente marino ad una profondità di circa 500/700 metri, come suggerito dalla costante presenza di associazioni fossilifere bentoniche nei depositi argillosi in cui i livelli sono intercalati. In più, la presenza di specie fossilifere costiere permettono di affermare che tali livelli hanno subito anche un rimaneggiamento in ambiente costiero; *ii)* le analisi sulla morfologia dei frammenti di pomice presenti in tutti i livelli campionati, effettuate al microscopio elettronico a scansione, hanno evidenziato come il loro trasporto sia attribuibile a meccanismi di flusso piroclastico. Il tipo di attività esplosiva che li ha prodotti è certamente subaerea, ma i flussi si sono sicuramente propagati in mare. Ciò è testimoniato dal fatto che i depositi sono ben classati, stratificati e a gradazione diretta. Poiché questo tipo di messa in posto non è compatibile con un flusso di particelle ad alta velocità (quindi turbolento), l'unica spiegazione è che i flussi piroclastici, scorrendo sul mare e perdendo progressivamente energia, si siano messi in posto per decantazione in ambiente sottomarino. Ad ulteriore conferma di quanto su esposto, l'analisi al microscopio elettronico ha evidenziato tra i frammenti di vetro la presenza di tachylite, un vetro che si forma per il brusco raffreddamento di materiale molto caldo (i frammenti pomice derivanti dalla frammentazione esplosiva del magma) quando viene a contatto con l'acqua; *iii)* gli studi geochimici condotti hanno inoltre permesso di vincolare l'origine dei magmi che hanno prodotto questi depositi al vulcanismo di Arco del Tirreno meridionale, escludendo una possibile genesi Etna o proveniente dall'attività eruttiva del Sud Italia (Campania, Lazio, Toscana) caratterizzate entrambe da impronte geochimiche differenti. Poiché questi livelli piroclastici sono intercalati a depositi argillosi il cui contenuto fossilifero indica un'età di messa in posto compresa tra 980 e 589 ka, è probabile che questi prodotti siano il risultato delle fasi iniziali dell'attività eruttiva dell'Arco Eoliano che aveva generato apparati eruttivi subaerei ormai totalmente dismessi. I dati sono stati attualmente pubblicati per la stampa (*Geologica Carpathica*) e saranno a breve pubblicati (2016).
2. Sono stati condotti studi archeometrici per l'attribuzione di provenienza di alcuni resti di macine di età Romana di origine vulcanica ritrovate in siti archeologici nell'Hinterland messinese in collaborazione con la Soprintendenza Regionale dei BB.CC.AA. di Messina. Tali studi, condotti su basi petrologiche e geochimiche, hanno permesso di attribuire la provenienza dei vari campioni analizzati da diverse aree del Mediterraneo (Etna, Pantelleria, Linosa, Arcipegago Eoliano), testimoniando l'esistenza, storicamente documentata, di diverse cave di estrazione di materiale vulcanico in epoca Romana, e come questi venivano ampiamente usati anche per scambi commerciali. I risultati di questo studio sono stati pubblicati sulla rivista *Periodico di Mineralogia* nel 2016.
3. Sulla scorta della collaborazione in corso dal 2014 con l'INGV di Palermo (Dott. Franco Italiano) nell'ambito del progetto intitolato "*Determination of fault activity and geothermal origin by soil and groundwater degassing: the extension of Dead Sea Fault Zone (DSFZ) in the Amik Basin (Hatay) and its relation with Karasu Fault Zone (KFZ) and origin of thermal waters in Amik Basin*" finanziato dal TUBITAK e svolto in collaborazione tra Hacettepe University (Ankara, Turchia), INGV (Italia), NTU (National Taiwan University, Taiwan), Osmangazi University (Eskisehir, Turchia), MTU (Middle Technical University, Ankara, Turchia), sono proseguiti gli studi sui prodotti vulcanici che ricadono in quest'area tettonicamente molto complessa, che si trova in prossimità del punto di margine fra ben tre placche tettoniche: l'Arabica, l'Eurasiatica e l'Africana. I risultati preliminari sono stati oggetto di una comunicazione a Congresso Internazionale ed oggetto di due tesi di laurea, mentre il lavoro è stato sottoposto per la pubblicazione sulla Rivista *Chemical Geology*.

Partecipazioni e comunicazione a congressi

Italiano F., Yuce G., Di Bella M., Martelli M., Misseri M., Rizzo A., Sabatino G., Tripodo A. - Mantle Degassing and Volcanites from the Hatay Basin (SE Turkey): Geodynamic Constraints from Helium Isotopes and Petrological Data. 13th International Conference on Gas Geochemistry Chengdu, China, August 24-31, 2015.

Collaborazioni

1. **Metallogenese da fluidi idrotermali (Panarea) (Progetto RITMARE, collaborazione con Dott. Franco Italiano INGV Palermo, ISPRA Milazzo e CNR-IAMC di Messina)** – Analisi SEM e XRPD di crostoni a ossi-idrossidi metallici provenienti dalla porzione sommersa dell' Isola vulcanica di Panarea (Arco Eoliano). Tale isola presenta il sistema idrotermale più attivo dell' Arco Eoliano. A largo della costa orientale di Panarea, in un' area di circa 4 km, gas e acque calde, con temperature che raggiungono al punto di emissione i 130 °C, fuoriescono a profondità fino a 150 m. La genesi di tali accumuli di ossi-idrossidi metallici correlata all' attività idrotermale, nell'ambito del bacino Mediterraneo, è argomento di interesse dal punto di vista delle georisorse. I risultati preliminari delle analisi SEM indicano trattarsi di ossi-idrossidi di ferro da amorfi a poco cristallini, mentre le analisi diffrattometriche hanno consentito di identificare la goethite come fase prevalente. In campioni di sedimenti sciolti è stata verificata la presenza di morfologie pisolitiche di tali ossi-idrossidi di ferro, che dall' analisi SEM risultano caratterizzati da un nucleo vulcanico solitamente pomiceo rivestito da strati concentrici di ossidi, rappresentanti momenti differenti di deposizione.
2. Collaborazione con l'INGV di Palermo (Dott. Franco Italiano) nell'ambito del progetto intitolato “*Determination of fault activity and geothermal origin by soil and groundwater degassing: the extension of Dead Sea Fault Zone (DSFZ) in the Amik Basin (Hatay) and its relation with Karasu Fault Zone (KFZ) and origin of thermal waters in Amik Basin*” finanziato dal TUBITAK e svolto in collaborazione tra Hacettepe University (Ankara, Turchia), INGV (Italia), NTU (National Taiwan University, Taiwan), Osmangazi University (Eskisehir, Turchia), MTU (Middle Technical University, Ankara, Turchia). Il progetto si sviluppa nell'area di contatto di tre placche tettoniche: placca Arabica, placca Africana e placca Anatolica. La Dead Sea Fault Zone è il contatto tra le placche Arabica e Africana. Il contatto prosegue verso nord (Kurasu Fault) fino all'incrocio con la East Anatolian Fault Zone dove le due placche vanno in contatto con la placca Anatolica. Lungo le linee di faglia sono presenti affioramenti e spandimenti lavici che i pochi dati di letteratura esistenti classificano come “basalti”. Nell'ambito di questa collaborazione si sta affrontando uno studio petrografico-geochimico di alcune lave, in collaborazione con l'Istituto Nazionale di Geofisica e Vulcanologia (INGV) e con la Hacettepe University che hanno fornito i campioni di roccia e le analisi preliminari. I prodotti vulcanici studiati ricadono in un' area tettonicamente molto complessa, che si trova in prossimità del punto di margine fra ben tre placche tettoniche: l' Arabica, l' Eurasiatica e l' Africana. Sebbene attualmente il vulcanismo in Turchia sia quiescente ci sono abbondanti evidenze che esso sia stato associato con tutti gli stadi di evoluzione tettonica della regione.
3. Collaborazione con il Museo Archeologico Regionale “Bernabò Brea” di Lipari per la caratterizzazione archeometrica di materiali lapidei e ceramiche policrome mediante indagini non distruttive.

5.25 Gruppo di Ricerca in Paleontologia

Componenti: Antonella Cinzia Marra

Tematiche scientifiche

1. Tematica 1

I mammiferi tardo Miocenici del sito di Cessaniti (VV).

E' proseguita l'attività di campagna e di ricerca nel Miocene del Monte Poro, con la segnalazione di nuovi rinvenimenti, il cui recupero è in fase di organizzazione. Le nuove ricerche hanno riguardato anche la presenza di cetacei fossili nell'area ed è stato pubblicato un loro censimento.

Sono in corso le ricerche mirate alla filogenesi dei mammiferi terrestri di Cessaniti, in collaborazione con l'Università di Firenze. E' stata accertata la presenza del bovide *Tragoptax*, la cui pubblicazione è in

preparazione. Di recente segnalazione è anche la presenza di un *Anthracotheridae*, il cui studio è in progress.

2. Tematica 2

I mammiferi quaternari di Calabria e Sicilia

Gli studi sui mammiferi fossili della Sicilia sono stati indirizzati già negli anni precedenti alla comprensione dei processi evolutivi, delle interazioni ecologiche ed dei cambiamenti geografici che hanno determinato l'avvicinarsi sull'isola di cinque differenti complessi faunistici negli ultimi due milioni e mezzo di anni. I cinque complessi faunistici sono stati definiti da studi precedenti sulla base di bioeventi (estinzioni e nuovi arrivi) e dell'evoluzione di specie endemiche. Trattandosi di faune insulari, la loro diffusione è stata influenzata dalla capacità di dispersione di ciascuna specie (es.: attitudine al nuoto o al volo) e dalla paleogeografia dell'area. Negli studi precedenti, gli Autori hanno attribuito alla paleogeografia della Sicilia e dello Stretto di Messina un ruolo decisivo nella selezione delle faune che hanno potuto raggiungere l'isola. Alcune incongruenze negli eventi dispersivi, in particolare le differenze tra i bioeventi registrati dai grandi mammiferi rispetto a quelli registrati dai piccoli mammiferi, sono stati attribuiti a filtri operanti in modo selettivo su mammiferi di grande e piccola taglia. L'attività di revisione e reinterpretazione su tempi e modi di popolamento della Sicilia, già avviata, è stata arricchita, nel corso del 2015, da approfondimenti sulla filogenesi degli Artiodattili.

Pubblicazioni

2016 – Carone G., Marra A. C., Mesiano C. - First record of Dugongidae (Mammalia: Sirenia) from the Floresta Calcarenes Formation (Late Burdigalian – Early Langhian, Reggio Calabria, Southern Italy). *Rivista Italiana di Paleontologia e Stratigrafia (Research in Paleontology and Stratigraphy)*, vol. 122(1): 1-6. March 2016

Partecipazioni e comunicazione a congressi

2015 - Marra A.C, Di Maggio C., Masini F., Petruso D., Ruggieri R.- Quaternary vertebrate sites from the San Vito Lo Capo peninsula (Sicily). Meeting “Cave environments: present and past” – Custonaci, 25-26 April 2015 – Abstract Volume

Collaborazioni

- prof. Lorenzo Rook, Università di Firenze
- prof. Massimiliano Ghinassi, Università di Padova
- dr. Oriol Llabet, Universitat Autònoma de Barcelona
- prof. Giuseppe Carone, Gruppo Paleontologico Tropeano

5.26-Gruppo di Ricerca in “Chimica Industriale e Catalisi”

Componenti: Gabriele. Centi, Paola. Lanzafame

Tematiche scientifiche

1. Tematica 1 : Processi catalitici per un'energia sostenibile
2. Tematica 2 : Tecnologie catalitiche per la mitigazione dei cambiamenti climatici

Attività scientifica svolta nel 2015

L'attività di ricerca ricade nel Settore Chimica Industriale (03/C2), con particolare riferimento al SSD CHIM/04. Essa è in larga parte riconducibile a due tematiche di ricerca principali:

1. Processi catalitici per un'energia sostenibile
2. Tecnologie catalitiche per la mitigazione dei cambiamenti climatici

L'attività condotta nel 2015 nell'ambito di queste tematiche è riferibile a vari progetti di ricerca nazionali ed europei.

Nell'ambito del progetto **PRIN 2010 (2010H7PXLC)** “*Processi innovativi di conversione di biomasse algali per la produzione di jet fuel e green diesel*” l'attività di ricerca è stata focalizzata sullo sviluppo di una nuova tecnologia per il recupero della frazione lipidica da soluzioni di microalghe basata sulla sinergia tra l'effetto di cavitazione indotto dagli ultrasuoni e l'effetto di modifica del pH derivante dalla presenza della CO₂ e di un

processo catalitico per la produzione di biocombustibili (green diesel e jet fuel) dalla frazione lipidica delle microalghe mediante idrotrattamento/cracking selettivo. L'attività svolta nell'ambito del progetto **CAPITA-WAVES** "Waste bio-feedstocks hydro-valorization processes", FP7-ERA-NET CAPITA (INSTM) si è incentrata sullo sviluppo di catalizzatori innovativi e selettivi nella conversione di materie prime "bio" (oli vegetali, cere FT, oli algali e bio-oli da pirolisi di biomassa) a biocarburanti. Il progetto **MEME** (*Molten salt heated MEMbrane reactor for propane dehydrogenation – Energy saving new process*) nell'ambito del programma di cooperazione Italia Israele, mira allo sviluppo di un reattore a membrana per la deidrogenazione del propano. Nell'ambito di questo progetto sono state preparate delle membrane dense a base di Pd o sue leghe supportate su tubi di allumina a struttura asimmetrica e caratterizzate tramite microscopia elettronica, AFM, XPS. Nell'ambito del **PON ENERGETIC** (PON02_00355_3391233) sono state sviluppate nuove metodologie per la preparazione di film sottili tipo CIS/CIGS, realizzando il deposito dei film sottili tramite metodologie non operanti sotto vuoto, al fine di preparare celle a basso costo e con fattori di utilizzo dei materiali superiori al 90%, predisponendo dispositivi di tipo CuInGaSe₂ (CIGS) su substrati rigidi e flessibili.

L'attività nel progetto **PON FOTOVOLTAICO** (PON01_01725) si è basata sulla preparazione di film trasparenti o sottili a base di TiO₂ nanostrutturato rispettivamente con metodologie sol-gel o di ossidazione anodica e sulla loro caratterizzazione morfologica e funzionale come componenti di rivestimento per celle solari aventi caratteristiche autopulenti. L'attività nell'ambito del progetto **HELMETH** "Integrate High-Temperature Electrolysis and METHanation for Effective Power to Gas Conversion" (grant agreement n° 621210, ERIC) è stata finalizzata alla conversione di energia elettrica in gas naturale. In particolare l'attività svolta è mirata alla sintesi e caratterizzazione di catalizzatori a base di Ni supportati su ossidi o ossidi misti e idrotalciti, per la reazione metanazione della CO₂ (reazione di Sabatier), condotta in un sistema di 16 reattori (High Throughput Technology).

Publicazioni

Articoli su rivista

- 1) S. ABATE, G. GIORGIANNI, G. CENTI, S. PERATHONER
"Enhanced Hydrogen Transport over Palladium Ultrathin Films through Surface Nanostructure Engineering"
CHEMSUSCHEM (2015) Vol. 8, Issue 22, Pag. 3805-381
- 2) P. LANZAFAME, G. CENTI, S. PERATHONER
"Evolving scenarios for biorefineries and the impact on catalysis"
CATALYSIS TODAY (2015) Vol. 234, Pag. 2-12
- 3) C. AMPELLI, S. PERATHONER, G. CENTI
"CO₂ utilization: an enabling element to move to a resource and energy efficient chemical and fuel production"
PHILOSOPHICAL TRANSACTIONS - ROYAL SOCIETY. MATHEMATICAL, PHYSICAL AND ENGINEERING SCIENCES (2015) Vol. 373, Pag. 1-35
- 4) C. AMPELLI, C. GENOVESE, M. ERRHALI, G. GATTI, L. MARCHESI, S. PERATHONER, G. CENTI
"CO₂ capture and reduction to liquid fuels in a novel electrochemical setup by using metal-doped conjugated microporous polymers"
JOURNAL OF APPLIED ELECTROCHEMISTRY (2015) Vol. 45, Issue 7, Pag. 701-713
- 5) C. AMPELLI, S. LEONARDI, C. GENOVESE, P. LANZAFAME, S. PERATHONER, G. CENTI, G. NERI
"Monitoring of glucose in fermentation processes by using Au/TiO₂ composites as novel modified electrodes"
JOURNAL OF APPLIED ELECTROCHEMISTRY (2015) Vol. 45, Issue 9, Pag. 943-951
- 6) C. AMPELLI, C. GENOVESE, B. C. MAREPALLY, G. PAPANIKOLAOU, S. PERATHONER, G. CENTI
"Electrocatalytic conversion of CO₂ to produce solar fuels in electrolyte or electrolyte-less configurations of PEC cell"
FARADAY DISCUSSIONS (2015) Vol. 183, Pag. 125-145
- 7) C. AMPELLI, G. CENTI, R. PASSALACQUA, S. PERATHONER
"Electrolyte-less design of PEC cells for solar fuels: Prospects and open issues in the development of cells and related catalytic electrodes"
CATALYSIS TODAY (2015) Vol. 259, Pag. 246-258
- 8) C. AMPELLI, C. GENOVESE, F. TAVELLA, S. PERATHONER, G. CENTI
"Assembling of TiO₂ nanotube photoelectrodes with enhanced visible properties for a sustainable production of H₂"
CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS (2015) Vol. 43, Pag. 667-672

- 9) C. GENOVESE, C. AMPELLI, B. MAREPALLY, G. PAPANIKOLAOU, S. PERATHONER, G. CENTI
"Electrocatalytic reduction of CO₂ for the production of fuels: a comparison between liquid and gas phase conditions"
 CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS (2015) Vol. 43, Pag. 2281-2286
- 10) C. AMPELLI, S. LEONARDI, A. BONAVIDA, C. GENOVESE, G. PAPANIKOLAOU, S. PERATHONER, G. CENTI, G. NERI
"Electrochemical H₂O₂ sensors based on Au/CeO₂ nanoparticles for industrial applications"
 CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS (2015) Vol. 43 Pag. 733-738
- 11) R. PASSALACQUA, S. PERATHONER, G. CENTI
"Use of modified anodization procedures to prepare advanced TiO₂ nanostructured catalytic electrodes and thin film materials"
 CATALYSIS TODAY (2015) Vol. 251 Pag. 121-131
- 12) M. FRENI, R. PASSALACQUA, S. PERATHONER, G. CENTI, C. CANNILLA, F. FRUSTERI
"Development of low-cost pv devices by using nanocrystal ink of light-absorbing cigs semiconductor layer"
 CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS (2015) Vol. 43 Pag. 697-702
- 13) M. G. SALVAGGIO, R. PASSALACQUA, S. ABATE, S. PERATHONER, G. CENTI
"Transparent nanostructured titania coatings with self cleaning and antireflective properties for photovoltaic glass surfaces"
 CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS (2015) Vol. 43 Pag. 745-750
- 14) R. PASSALACQUA, G. CENTI, S. PERATHONER
"Solar production of fuels from water and CO₂: perspectives and opportunities for a sustainable use of renewable energy"
 OIL & GAS SCIENCE AND TECHNOLOGY (2015) Vol. 70 Pag. 799-815
- 15) G. CENTI
"Enhancement of the intrinsic photocatalytic activity of TiO₂ in the degradation of 1,3,5-triazine herbicides by doping with N,F"
 CHEMICAL ENGINEERING JOURNAL (2015) Vol. 280 Pag. 330-343
- 16) S. ABATE, G. CENTI, S. PERATHONER
"Energy-related catalysis"
 NATIONAL SCIENCE REVIEW (2015) Vol. 2, Issue 2, Pag. 143-145
- 17) P. LANZAFAME, A. PISTONE, S. PERATHONER, G. CENTI
"The role of oxide location in HMF etherification with ethanol over sulfated ZrO₂ supported on SBA-15"
 JOURNAL OF CATALYSIS (2015) Vol. 323 Pag. 19-32
- 18) S. ABATE, P. LANZAFAME, S. PERATHONER, G. CENTI
"New Sustainable Model of Biorefineries: Biofactories and Challenges of Integrating Bio- and Solar Refineries"
 CHEMSUSCHEM (2015) Vol. 8 Issue 17 Pag. 2854-2866
- 19) G. CENTI, K. BARBERA, S. PERATHONER, N. K. GUPTA, E. E. EMBER, J. A. LERCHER
"Onion-Like Graphene Carbon Nanospheres as Stable Catalysts for Carbon Monoxide and Methane Chlorination"
 CHEMCATCHEM (2015) Vol. 7 Issue 18 Pag. 3036-3046
- 20) G. CENTI
"Direct conversion of methane: searching for the "Holy Grail""
 CHEMSUSCHEM (2015) Vol. 8 Issue 2 Pag. 212-216
- 21) G. IAQUANIELLO, A. SALLADINI, E. PALO, G. CENTI
"Catalytic partial oxidation coupled with membrane purification to improve resource and energy efficiency in syngas production"
 CHEMSUSCHEM (2015) Vol. 8 Issue 4 Pag. 717 -725
- 22) P. LANZAFAME, K. BARBERA, S. PERATHONER, G. CENTI, A. ALOISE, M. MIGLIORI, A. MACARIO, J.B. NAGY, G. GIORDANO
"The role of acid sites induced by defects in the etherification of HMF on Silicalite-1 catalysts"
 JOURNAL OF CATALYSIS (2015) Vol. 330 Pag. 558-568
- 23) S. ABATE, G. CENTI, P. LANZAFAME, S. PERATHONER
"The energy-chemistry nexus: A vision of the future from sustainability perspective"
 JOURNAL OF ENERGY CHEMISTRY (2015) Vol. 24 Issue 5 Pag. 535-547
- 24) S. ABATE, G. CENTI, S. PERATHONER
"Chemical Energy Conversion as Enabling Factor to Move to a Renewable Energy Economy"
 GREEN (a systemic approach to energy) (2015) Vol. 5 Issues 1-6 Pag. 43-54

25) R. PIZZI, R. J. VAN PUTTEN, H. BRUST, S. PERATHONER, G. CENTI, J. C. VAN DER WAAL
“High-throughput screening of heterogeneous catalysts for the conversion of furfural to bio-based fuel components”

CATALYSTS (2015) Vol. 5 Issue 4 Pag. 2244-2257

26) G. CENTI

“CO₂ reduction reactions: general discussion”

FARADAY DISCUSSIONS (2015) Vol. 183 Pag. 261-290

Contributo in Volume (Capitolo o saggio)

1) S. ABATE, G. CENTI, S. PERATHONER

“Status of Research and Challenges in Converting Natural Gas”

in Small-Scale Gas to Liquid Fuel

Synthesis, published by CRC Press, ISBN: 9781466599390

2) S. ABATE, G. CENTI

“Membrane-Assisted CPO: A New Sustainable Syngas Process”

in Small-Scale Gas to Liquid Fuel

Synthesis, published by CRC Press, ISBN: 9781466599390

Partecipazioni e comunicazione a congressi

- G. Centi, P. Lanzafame, S. Perathoner, “Integrating bio- and solar refineries: an effective new option”, 3rd International Symposium on Chemistry for Energy Conversion and Storage, 18-21 Gennaio 2015, Berlino (Germania).
- S. Perathoner, P. Lanzafame, G. Centi, “The new sustainable model of biorefineries: biofactories and the challenge of integrating bio- and solar-refineries”, XLVI Polish Annual Conference on Catalysis, 16-21 Marzo 2015, Cracovia (Polonia).
- S. Perathoner, G. Centi, P. Lanzafame, “Integrating bio- and solar-refineries to move to a low-carbon bioeconomy”, EI-JRC European Workshop on “Advanced Biofuels, Biorefinery and Bio-Economy (ABBE 2015): A Challenge for Central and East European Countries”, 25-27 Marzo 2015, Bratislava (Slovacchia).
- B. C. Marepally, C. Ampelli, C. Genovese, G. Papanikolaou, S. Perathoner, G. Centi, “Reduction of CO₂ to liquid fuels using non-noble metal doped carbon catalysts in novel electrochemical devices”. 3rd International Symposium on Green Chemistry, ISGC 2015, May 3-7, 2015, La Rochelle, France.
- C. Ampelli, S. Leonardi, N. Donato, C. Genovese, G. Papanikolaou, S. Perathoner, G. Centi, “Electrochemical H₂O₂ sensors based on Au/CeO₂ nanoparticles for industrial applications”. 12th International Conference on Chemical & Process Engineering, (ICheap 12), 19-22 Maggio 2015, Milano.
- C. Genovese, C. Ampelli, B. C. Marepally, G. Papanikolaou, S. Perathoner, G. Centi, “Electrocatalytic reduction of CO₂ for the production of fuels: a comparison between liquid and gas phase conditions”. 12th International Conference on Chemical & Process Engineering, (ICheap 12), 19-22 Maggio 2015, Milano.
- G. Centi, G. Papanikolaou, C. Genovese and S. Perathoner, “Selective oxidative methylation of furfural to valorize byproducts in biofactories” Irsee VII Symposium - New Insights in Selective Oxidation Catalysis, Electrocatalysis and Catalysis of Biomass, Irsee, Germany, 4 - 7 June 2015
- G. Centi, S. Perathoner, P. Lanzafame, “The new sustainable model of biorefineries: biofactories and the challenge of integrating bio- and solar-refineries” 3rd TMFB June 23-25th, 2015; Aachen (Germany)
- G. Papanikolaou, C. Ampelli, C. Genovese, S. Perathoner, G. Centi, “Gold nanoparticles over ZrO₂ and CeO₂ substrates to enhance the catalytic performance in the oxidative furfural esterification process”. X INSTM CONFERENCE, Favignana (TP), 28 June – 1 July, 2015.
- G. Centi, S. Perathoner, “Conversion of CO₂ to useful compounds: status and challenges” IUPAT 2015, Busan Korea Aug. 6-13, 2015
- G. Papanikolaou, C. Ampelli, C. Genovese, S. Perathoner, G. Centi, “Catalytic Upgrading of Furfural by Oxidative Esterification over Au NPs-based Catalysts” Europacat XII, Kazan Russia, 30 Aug. - 4 Sept. 2015
- G. Centi, S. Perathoner, “Catalysis to produce solar fuels. Status and challenges”, Europacat XII, Kazan Russia, 30 Aug. - 4 Sept. 2015
- B. C. Marepally, C. Ampelli, G. Papanikolaou, C. Genovese, S. Perathoner, G. Centi, “Non-noble metal based Carbon electro-catalysts for CO₂ reduction to fuels in Liquid and Gas phase conditions”. 12th European Congress on Catalysis – EuropaCat – XI, Kazan, Russia, 30 August – 4 September, 2015.
- G. Centi, C. Ampelli, C. Genovese, B. C. Marepally, G. Papanikolaou, S. Perathoner, “Electrocatalytic conversion of CO₂ to produce solar fuels in electrolyte or electrolyte-less configurations of PEC cells”

Faraday Discussion Carbon Dioxide Utilization, 7-9 Sept. 2015 Sheffield, UK

- K. Barbera, P. Lanzafame, S. Perathoner, G. Centi, “Role of acid sites in porous silica catalysts for selective production of biodiesel additives”, XIX Congresso Nazionale Divisione di Chimica Industriale della Società Chimica Italiana, 14-16 Settembre 2015, Salerno (Messina).
- G. Centi, S. Perathoner, P. Lanzafame, “*Catalysis Challenges to Move to New Models of Biorefineries for a Low-Carbon Economy and Society*”, CatBior 2015 (3rd Int. Congress on Catal. for Biorefineries), Sept. 27-30, 2015 Rio de Janeiro - Brasil
- G. Centi, S. Perathoner, “The role of biorefineries in the future of renewable energy”, meeting ERECI, Barcellona (Spagna), 20-22/11/2015

Collaborazioni

- Fritz-Haber-Institut (FHI) der Max-Planck-Gesellschaft, Berlino (Germania)
- Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe (Germania)
- Dalian Institute of Physical Chemistry (DIPC), Dalian (Cina)
- Technische Universität München (TUM), Monaco (Germania)
- Chemical Process & Energy Resources Institute, Centre for Research and Technology Hellas, Thessaloniki, (Grecia)
- Dipartimento di Chimica Industriale, Alma Mater Studiorum Università di Bologna
- Dipartimento di Ingegneria Chimica e Ambientale, Università della Calabria