



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PALERMO

DIPARTIMENTO DI FISICA E CHIMICA  
DiFC

**PIANO DELLE RICERCHE  
TRIENNIO 2016-2018  
Dipartimento di Fisica e Chimica**



## Presentazione

Il Dipartimento di Fisica e Chimica (DiFC) è attivo dal 01.01.2013 in seguito alla procedura di riorganizzazione dipartimentale dell'Ateneo di Palermo. Il DiFC si articola nel plesso storico di via Archirafi 36 e negli Edifici 17 e 18 di Viale delle Scienze. Ad essi si aggiunge uno dei fiori all'occhiello del Dipartimento, l'Osservatorio Astronomico di Palermo, sito nel Palazzo dei Normanni, dove si svolgono attività di ricerca in stretta collaborazione con l'Istituto Nazionale di Astrofisica (INAF).

Il DiFC si colloca essenzialmente nell'Area CUN 02 Scienze Fisiche (componente maggioritaria) e nell'Area CUN 03 Scienze Chimiche.

Il DiFC vanta una prestigiosa eredità scientifica nel campo dell'Astrofisica, della Fisica e della Chimica. In particolare, Giuseppe Piazzi (1746-1826), autorizzato dal re Ferdinando I delle Due Sicilie costruì la Specola e, in seguito, divenne il primo Direttore dell'Osservatorio; egli scoprì Cerere, il primo di una nuova categoria di corpi celesti, gli asteroidi. Il fisico Emilio Gino Segrè (1905-1989) negli anni Trenta scoprì a Palermo nella sede di Via Archirafi 36 il *Tecneto* uno degli elementi della tavola periodica artificiale e l'unico elemento della tavola periodica scoperto in Italia; inoltre, nel 1959 fu insignito del premio Nobel della Fisica per le sue scoperte sull'antiprotone. Il chimico Stanislao Cannizzaro (1826-910) fu un illustre scienziato di fama internazionale per avere proposto "*La regola di Cannizzaro*" che è il metodo per calcolare il peso atomico di un elemento. Egli istituì il *Gabinetto di Chimica*, nucleo fondante del Regio Istituto di Chimica Generale; inoltre, egli divenne Rettore dell'Università di Palermo.

Il Museo della Specola e Osservatorio Astronomico (Palazzo dei Normanni), il Museo della Chimica (Edificio 17 di Viale delle Scienze) e la Collezione Storica degli Strumenti di Fisica (Edificio Via Archirafi, 36) raccolgono il patrimonio strumentale che testimonia le importanti attività scientifiche svolte.

Alla data del 01.11.2015, i componenti del DiFC sono:

<b>Professori ordinari: 13</b>
<b>Professori associati: 25</b>
<b>Ricercatori: 22</b>
<b>Ricercatori TD: 3</b>
<b>Assegnisti di ricerca/borsisti: 20</b>
<b>Dottorandi di ricerca/scuola di specializzazione: 40</b>

Dal punto di vista dell'attività didattica, il DiFC è il dipartimento di riferimento del Corso di laurea in *Scienze Fisiche*, Corso di laurea Magistrale in *Fisica*, Corso di laurea Magistrale a ciclo unico in *Conservazione e Restauro dei Beni Culturali (abilitante ai sensi Dlgs 42/2004)*. Per l'offerta formativa 2016/17, il DiFC ha proposto l'istituzione del Corso di laurea magistrale



internazionale in *Nanomateriali e nanotecnologie per uno sviluppo sostenibile* in collaborazione con l'Åbo Academy University (Finlandia), la Saint Peterburgh Institute of Technology (Federazione Russa) e l'École Supérieure de Chimie de Paris (Francia).

Per quanto riguarda la formazione di terzo livello, dalla sua attivazione, il DiFC è riferimento dei Corsi di Dottorato di Ricerca in *Fisica, Fisica Applicata, Scienze Chimiche* (fino al XXVI ciclo) e – a partire dal XXIX ciclo – del corso di dottorato in *Scienze Fisiche*, con un Curriculum Internazionale) nonché della Scuola di Specializzazione in *Fisica Medica*; inoltre, partecipa a un Dottorato in *Scienze dei Materiali e NanoTecnologie* in convenzione con l'Università di Catania e a un Dottorato Interdipartimentale in *Medicina e Biotecnologie*.

Per quanto riguarda l'attività di ricerca, dalla sua attivazione, il DiFC si è distinto per il successo ottenuto nell'approvazione di progetti Europei e Nazionali (a valere sulle azioni del POR, PON, PRIN, FIRB, Horizon 2020) con il conseguente elevato ammontare di finanziamenti esterni che, insieme alle attività di consulenze e servizi alle imprese (Conto Terzi), hanno reso possibile bandire posizioni (Assegni, Borse di Studio, Tecnologi) per giovani ricercatori.

La produttività scientifica del DiFC è copiosa e di livello considerevole. La risonanza internazionale della ricerca del DiFC è dimostrata dalle innumerevoli collaborazioni con Università e Centri di Ricerca nazionali e internazionali, dalla partecipazione dei suoi componenti (anche su invito) a convegni e congressi internazionali e a comitati scientifici e/o organizzatori di congressi nazionali e internazionali.

La Ricerca Dipartimentale, in accordo con gli obiettivi di ricerca del DiFC della scheda SUA-RD - Anno 2013, si esplica nelle ATTIVITA':

1. NEL CAMPO DELL'ASTROFISICA
2. A PREVALENTE CARATTERE SPERIMENTALE
3. DI FISICA APPLICATA
4. A PREVALENTE CARATTERE COMPUTAZIONALE
5. A PREVALENTE CARATTERE TEORICO
6. NEL CAMPO DELLA DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA E DELLA CHIMICA

Nell'ambito delle suddette attività, si identificano delle macro-aree che si possono suddividere in specifiche linee di ricerca come dettagliato in seguito:

## **1. ATTIVITA' NEL CAMPO DELL'ASTROFISICA**

Macroarea: ASTRONOMIA E ASTROFISICA

Linee di ricerca: 1) *Sistemi astrofisici ad alta energia*

2) *Strumentazione per astrofisica a raggi X*

3) *Studio teorico e osservativo dei sistemi binari di piccola massa contenenti una stella di neutroni e loro evoluzione*



## 2. ATTIVITA' A PREVALENTE CARATTERE SPERIMENTALE

Macroarea: BIOFISICA MOLECOLARE E NANOTECNOLOGIE

Linea di ricerca: *Biofisica molecolare e nanotecnologie*

Macroarea: CHIMICA DEI MATERIALI

Linea di ricerca: *Materiali e metodi per fuel cells ed elettrolizzatori*

Macroarea: FISICA DEI MATERIALI AVANZATI

Linee di ricerca: 1) *Materiali avanzati per applicazioni in optoelettronica, fotonica e sensoristica*  
2) *Proprietà a microonde di superconduttori non convenzionali*

Macroarea: TERMODINAMICA E STRUTTURA DI SISTEMI SUPRAMOLECOLARI

Linee di ricerca: 1) *Caratterizzazione e sviluppo di materiali per la decontaminazione ambientale e la conservazione e il restauro di Beni Culturali*  
2) *Nanomateriali intelligenti sostenibili*

## 3. ATTIVITA' DI FISICA APPLICATA

Macroarea: FISICA APPLICATA ALLA MEDICINA, ALL'AMBIENTE E AI BENI CULTURALI

Linee di ricerca: 1) *Detection of autism's susceptibility genes overlapping the Neandertal's SNP haplotypes present in the human genome*  
2) *Sviluppo di sistemi informatici esperti per il supporto alla diagnosi. Implementazione e gestione di database biomedicali*  
3) *Sviluppo di sistemi di rivelazione a semiconduttore per spettroscopia ed imaging nella banda X e  $\gamma$*   
4) *Tecniche fisiche integrate non invasive o micro invasive per lo studio dei Beni Culturali*  
5) *Tecniche fisiche per dosimetria in radioterapia e la diagnostica tramite imaging di risonanza magnetica*

Macroarea: OSSERVATORIO DEI SISTEMI COMPLESSI

Linea di ricerca: *Osservatorio dei Sistemi Complessi*

## 4. ATTIVITA' A PREVALENTE CARATTERE COMPUTAZIONALE

Macroarea: CHIMICA COMPUTAZIONALE

Linea di ricerca: *Studio computazionale di meccanismi catalitici su cluster e superfici metalliche*



Macroarea: INTERAZIONE RADIAZIONE-MATERIA E TECNICHE COMPUTAZIONALI

Linea di ricerca: *Laser-matter interaction; computational methods and systems in Physics and Society*

## **5. ATTIVITA' A PREVALENTE CARATTERE TEORICO**

Macroarea: FISICA TEORICA INTERDISCIPLINARE

Linea di ricerca: *Fisica teorica interdisciplinare*

Macroarea: MECCANICA E TERMODINAMICA QUANTISTICA

Linea di ricerca: *Meccanica e termodinamica quantistica*

Macroarea: OTTICA ED ELETTRODINAMICA QUANTISTICA

Linee di ricerca: 1) *Elettrodinamica quantistica e forze di Casimir*  
2) *Quantum correlations of identical particles*

Macroarea: TECNOLOGIE E PROCESSI QUANTISTICI

Linea di ricerca: *Tecnologie e processi quantistici*

## **6. ATTIVITA' NEL CAMPO DELLA DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA E DELLA CHIMICA**

Macroarea: DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA E DELLA CHIMICA

Linea di ricerca: *Didattica e storia della fisica e della chimica*

Per lo svolgimento delle attività di ricerca e di didattica il DiFC assolve alle finalità di garantire la gestione e la manutenzione delle strumentazioni e di mettere a disposizione le risorse tecnico-amministrative, i locali e le attrezzature di sostegno.

Informazioni dettagliate sull'organizzazione del DiFC e sulle sue attività di ricerca e di didattica, sono consultabili sul sito web

<http://www.unipa.it/dipartimenti/dipartimentofisicaechimica>



## 1. ATTIVITA' NEL CAMPO DELL'ASTROFISICA

### Macroarea: ASTRONOMIA E ASTROFISICA

Linee di ricerca: 1) *Sistemi astrofisici ad alta energia*

2) *Strumentazione per astrofisica a raggi X*

3) *Studio teorico e osservativo dei sistemi binari di piccola massa contenenti una stella di neutroni e loro evoluzione*



### 1. Titolo della linea di ricerca

SISTEMI ASTROFISICI AD ALTA ENERGIA

### 2. Responsabile Giovanni Peres

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Giovanni Peres
<b>Professori associati</b>	Fabio Reale
<b>Ricercatori</b>	Costanza Argiroffi
<b>Ricercatori TD</b>	Marco Miceli
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Sara Bonito
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Masoud Afshari, Edris Tajfirouzeh, Antonino Petralia, Enrico Barbera

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE	PE2	PE2_5
PE9	PE9_1	PE9_3
PE9_4	PE9_6	PE9_10

### 5. Parole chiave

Physical Sciences and Engineering	Fundamental constituents of matter	Gas and plasma physics
Universe sciences	Solar and interplanetary physics	Interstellar medium
Formation of stars and planets	Stars and stellar systems	High energy and particles astronomy

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

INAF Osservatorio Astronomico di Palermo

Anton Pannekoek Institute/GRAPPA, University of Amsterdam (Olanda)

Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics (USA);

Institute of Space and Astronautical Science e Japan Aerospace Exploration Agency (Giappone),

Instituto Argentino de Radioastronomia (Argentina),

ORAU/NASA Goddard Space Flight Center (USA)

Service d'Astrophysique, CEA Saclay (Francia)

University of Michigan (USA),

University of Tuebingen (Germania)

University of St. Andrews, (UK)

Università di Grenoble Alpes, IPAG, F-38000 Grenoble, (France)





## 7. Riassunto

Ci occupiamo di Astrofisica delle alte energie e della dinamica ed energetica di sistemi quali PLASMI CORONALI ad alta temperatura, Resti di esplosioni di SuperNova (SNR) e STELLE GIOVANI o in formazione.

## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Di seguito sintetizziamo ciascuna delle linee:

### PLASMI CORONALI

Flussi di plasma discontinui, in caduta o in ascesa, nell'atmosfera esterna del Sole e delle stelle, con particolare riguardo a flussi veloci governati dai campi magnetici.

Lo scopo è capire i meccanismi di attivazione (ad es. fronti d'urto) che rendono tali flussi luminosi in UV o X; nel 2016 studieremo un flusso in caduta e uno in ascesa, entrambi osservati con Solar Dynamics Observatory, si prevedono due articoli ISI; successivamente studieremo flussi in campi magnetici complessi.

Accensione di plasma confinato in strutture magnetiche chiuse guidata da moti fotosferici e/o da eventi impulsivi.

Cerchiamo di capire le modalità di conversione dell'energia da magnetica - continuamente accumulata dagli stress dovuti ai moti fotosferici - in riscaldamento del plasma a milioni di gradi; nel 2016 studieremo il riscaldamento per dissipazione di correnti turbolente, o per fasci di elettroni non termici; prevediamo due articoli ISI nel 2016; successivamente affronteremo una casistica fisica più ampia.

In entrambe le tematiche utilizzeremo estesamente modelli magnetoidrodinamici 2D e 3D utilizzando milioni di ore CPU su sistemi di calcolo ad alte prestazioni, quali quelli di CINECA (Bologna) e NASA (USA), nonché dati provenienti da strumenti spaziali come Solar Dynamics Observatory (SDO) e Interface Region Imaging Spectrograph (IRIS).

SNR - Due problematiche principali.

I resti di supernova come acceleratori di particelle. Nel 2016, combinando modelli magnetoidrodinamici ed osservazioni ad alta energia studieremo il processo di accelerazione di particelle negli shock dei SNR SN 1006 e Cassiopeia A; prevediamo 2 articoli ISI. Successivamente affronteremo il problema dell'amplificazione del campo magnetico associata all'accelerazione.

Trasferimento di massa ed energia fra SNR e mezzo interstellare: nel 2016 studieremo i processi di nucleosintesi esplosiva, la dinamica dell'esplosione, l'evoluzione dello shock e la sua interazione con le disomogeneità del mezzo ambiente (previsti 2 articoli ISI). Successivamente investigheremo come la struttura degli SNR contenga tracce e "memoria" della fisica dell'esplosione di supernova

### STELLE GIOVANI: ATTIVITÀ MAGNETICA E ACCRESCIMENTO

Studieremo i fenomeni legati alle fasi iniziali di una stella di piccola massa, in particolare:

l'attività coronale in stelle giovani (prevediamo un articolo ISI nel 2016 sull'attività di stelle a





13 Myr relativamente al fenomeno della supersaturazione); prevediamo negli anni successivi lo studio delle interazioni coronali durante periastro e apastro in una binaria eccentrica, e lo studio dell'attività magnetica in stelle di tipo M tardo;

i fenomeni di accrescimento magnetosferico (prevediamo due articoli ISI nel 2016 sull'osservazione della radiazione X da accrescimento in TW Hya, e sull'emissione in banda X e UV prevista da modelli); per gli anni successivi prevediamo l'estensione dello studio delle osservazioni in banda UV.

Entrambe le linee di ricerca saranno basate su osservazioni X ottenute con i satelliti Chandra e XMM, corredate da altre osservazioni multibanda, e da modelli numerici.

### **9. Fondi acquisiti**

Progetto biennale presentato per il finanziamento MIUR-DAAD Joint mobility program: "The Supernova Remnant IC 443 as a high-energy astrophysical lab: explosive nucleosynthesis processes, shock physics, magnetohydrodynamics and the origin of overionization" (in collaborazione con Dr. M. Sasaki, Università di Tuebingen)

Osservazione XMM (200 ks) "Magnetospheric interaction in the eccentric T Taur binary V1878 Ori", PI C. Argiroffi, XMM AO-14, proposta nr. 76372.

HPC/NASA - "MHD modeling of the dynamics and heating of plasma ejected from moss regions into coronal loops" - 25000 SBUs (300012 processor-hours) on the SGI ICE system "Pleiades" at NASA Advanced Supercomputing (NAS) Facility; period 01 November 2015 through 31 October 2016

HPC/CINECA Classe B - "3D MHD modeling of erupting coronal loop flows", 10.000.000 core hours, Dicembre 2015 - Novembre 2016



### 1. Titolo della linea di ricerca

STRUMENTAZIONE PER ASTROFISICA A RAGGI X

2. **Responsabile** Marco Barbera

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Marco Barbera
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Luisa Sciortino
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Flavio Nuzzo, Gianluca Tumminelli
<b>Collaboratori di enti convenzionati</b>	Alfonso Collura (INAF-OAPA) – Astr. Associato Ugo Lo Cicero (INAF-OAPA) - Tecnologo Salvatore Varisco (INAF-OAPA) - Tecnico Roberto Candia (INAF-OAPA) - Tecnico Gaspere Di Cicca (INAF-OAPA) - Tecnico

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE9_17	PE9_10	PE9_15
--------	--------	--------

### 5. Parole chiave

Strumentazione	Raggi X	Spazio
----------------	---------	--------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Istituto Nazionale di Astrofisica - Osservatorio Astronomico di Palermo, Palermo  
Istituto Nazionale di Astrofisica - Istituto di Astrofisica Spaziale e Fisica Cosmica, Palermo  
Istituto Nazionale di Astrofisica - Istituto di Astrofisica e Planetologia Spaziale, Roma  
Istituto Nazionale di Astrofisica - Osservatorio Astronomico di Brera, Milano  
Istituto Nazionale di Astrofisica - Istituto di Astrofisica Spaziale e Fisica Cosmica, Milano  
Istituto Nazionale di Astrofisica - Istituto di Astrofisica Spaziale e Fisica Cosmica, Bologna  
Università degli studi di Genova - Dipartimento di Fisica, Genova  
Harvard Smithsonian Center for Astrophysics, Cambridge (MA), USA  
Commissariat à l'Énergie Atomique Saclay - Service d'Astrophysique, Gif-sur-Yvette, FR  
Université Paris Sud, Institut d'Electronique Fondamentale, Orsay, FR  
CNRS - Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie (IRAP), Toulouse, FR  
Netherlands Institute for Space Research, Utrecht, NL  
Department of Astronomy, University of Geneva, Versoix, Switzerland  
Max-Planck Institute for Extraterrestrial Physics, Garching, DE  
Space Research Center, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland



## 7. Riassunto

L'attività di ricerca è rivolta principalmente allo sviluppo e calibrazione di strumentazione per missioni spaziali di Astronomia a raggi X e per applicazioni di laboratorio. In particolare, tre sono le linee di ricerca attualmente attive: 1) Sviluppo dei filtri termici e ottici dei rivelatori X-Ray Integral Field Unit (X-IFU) e Wide Field Imager (WFI) a bordo della missione ATHENA approvata dall'Ente Spaziale Europeo (lancio previsto nel 2028); 2) sviluppo di matrici di micro-calorimetri criogenici a sensore di germanio NTD per la rivelazione di raggi X; 3) sviluppo di ottiche leggere e a controllo attivo di forma per la focalizzazione di raggi X.

## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Le attività di seguito descritte sono svolte in stretta collaborazione con il personale dell'INAF-OAPA e facendo ampio uso del laboratorio XACT (X-Ray Astronomy Calibration and Testing facility) dell'INAF-OAPA.

### 1) Supporto alle attività della missione ATHENA

La missione di classe "Large" ATHENA è stata selezionata dall'Agenzia Spaziale Europea per rispondere al tema scientifico "The Hot and Energetic Universe" (lancio previsto nel 2028). Si tratta di un osservatorio per raggi X dotato di un telescopio a grande area (circa 2 m<sup>2</sup>) e elevata risoluzione angolare (< 5" HEW) che avrà al piano focale due rivelatori: lo X-Ray Integral Field Unit (X-IFU) e il Wide Field Imager (WFI). Il primo è basato su una matrice di micro-calorimetri Transition Edge Sensors (TES), che operano a temperatura di circa 50 mK, con risoluzione spettrale  $\Delta E_{FWHM} = 2.5$  eV a 6 keV e campo di vista di 5' x 5'. Il secondo è basato su una matrice di DEPFET ed è dotato di elevata risoluzione spaziale su un grande campo di vista di circa 40' x 40'. Nell'ambito del contributo italiano alla missione, il sottoscritto è responsabile della progettazione e sviluppo dei filtri termici del rivelatore X-IFU e del filtro ottico di grande area del WFI. Il programma di lavoro prevede per il 2016 il consolidamento del disegno concettuale dei filtri sia dello X-IFU che del WFI e lo sviluppo e caratterizzazione di uno o due filtri da montare sull'Engineering Model del rivelatore X-IFU. Nel corso del 2017 e 2018 si inizieranno i primi test di qualifica su filtri campione per consolidare il disegno e iniziare il processo di raggiungimento del livello 5/6 di Technical Readiness Level (standard ESA) per la fine del 2019.

### 2) Tecnologie planari per la realizzazione di matrici di micro-calorimetri

I micro-calorimetri per la rivelazione di raggi X sono dotati di una risoluzione energetica almeno 30 volte migliore di un rivelatore a semiconduttore (e.g. CCD), inoltre, essi possono essere realizzati in matrici con risoluzione spaziale. La tecnologia delle matrici è abbastanza avanzata per i micro-calorimetri basati su TES o sensori magnetici, che richiedono una sofisticata elettronica di lettura basata su SQUID, diversamente, la tecnologia delle matrici non è ancora stata ben sviluppata per micro-calorimetri con sensori a semiconduttore drogato che utilizzano un'elettronica di lettura più semplice ed economica basata su transistor di tipo J-FET. L'obiettivo della ricerca è mettere a punto una tecnologia interamente planare per la realizzazione di matrici di micro-calorimetri con sensore di germanio drogato con la tecnica



della trasmutazione di neutroni (NTD). Nel corso del 2016 si cercherà di consolidare tutte le fasi del processo planare per poi avviare nel 2017 e 2018 la fase di realizzazione e caratterizzazione di matrici.

### 3) Ottiche per raggi X leggere e a correzione attiva della forma

Il grande telescopio della missione ATHENA (circa 3 m di diametro con una focale di 12 m) sarà costruito integrando molte centinaia di moduli ottici realizzati impilando wafer di silicio o fogli di vetro deformati secondo la geometria Wolter I. Questa tecnologia presenta un rapporto vantaggioso area efficace/massa ma non consente di ottenere una risoluzione angolare migliore di 5" HEW. Per le missioni successive ad ATHENA si ritiene necessario ottenere una risoluzione angolare inferiore a 1" pur mantenendo lo stesso rapporto area efficace/massa. Tra le soluzioni maggiormente interessanti per raggiungere questi obiettivi vi è quella di applicare una correzione di forma attiva ai vari fogli sottili. In questo contesto, negli ultimi due anni abbiamo avviato in collaborazione con INAF-OAB e INAF-OAPA un progetto per realizzare dei campioni di vetro sottile con attuatori piezo-ceramici tangenziali applicati sul retro degli specchi. Nei primi mesi del 2016 effettueremo i primi test in raggi X di due specchi con qualche decina di attuatori. Il progetto attualmente finanziato si chiuderà nel 2016. Lo sviluppo futuro, subordinato al reperimento di nuovi fondi, prevede la messa a punto di una tecnica di deposizione di piezo a film sottile e lo sviluppo dell'elettronica di pilotaggio dei piezo passando dagli attuali 32 canali a un'elettronica, possibilmente multiplexata, per pilotare migliaia di attuatori.

## 9. Fondi acquisiti

"Cryogenic Electronics for Space Applications and Research" (CESAR) (FP7-SPACE-2010-1). Il progetto si è concluso nel 2014, tuttavia, parte dei fondi non rendicontabili residui (circa 30.000 Euro) sono dedicati alle attività di cui sopra. La quota totale finanziata dalla EU per l'UdR UNIPA-DiFC ammontava a 152.000 €.

"Integrated Activities for the High Energy Astrophysics Domain" (AHEAD) (H2020-INFRAIA-1-2014-2015). Il progetto della durata di 42 mesi è partito a settembre 2015. Il finanziamento per l'UdR UNIPA-DiFC ammonta a circa 100.000 €.

"Improvement of the angular resolution of glass/plastic thin-foil mirrors for large area X-ray telescopes via active control"(AXYOM) (TECNO INAF 2012); Il progetto si concluderà formalmente alla fine di Aprile 2016; Il finanziamento dell'UdR UNIPA-DiFC è 62.000 €.

"Rivelatori criogenici superconduttivi per Astrofisica Spaziale" (Progetto Premiale MIUR 2012); Il progetto si chiuderà a marzo 2016. Il finanziamento per l'UdR UNIPA-DiFC ammonta a 30.000 €.

"Tecnologie innovative per rivelatori per Astronomia in raggi X" (Progetto Premiale MIUR 2015); Il progetto è in fase di valutazione. Il budget allocato all'UdR UNIPA-DiFC è 177.000 €.

"Sviluppo di fase A della missione ATHENA" (Fondi dell'Agenzia Spaziale Italiana per il biennio 2016-2017). Il budget allocato all'Udr UNIPA-DiFC è di 67.000 €.



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PALERMO

DIPARTIMENTO DI FISICA E CHIMICA  
DiFC

“Attività di supporto allo sviluppo della missione spaziale ATHENA” (fondi INAF). I fondi allocati all’UdR UNIPA.DiFC ammontano a 15.000 €.



### 1. Titolo della linea di ricerca

STUDIO TEORICO E OSSERVATIVO DEI SISTEMI BINARI DI PICCOLA MASSA CONTENENTI UNA STELLA DI NEUTRONI E LORO EVOLUZIONE

2. **Responsabili:** Tiziana Di Salvo, Rosario Iaria

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Tiziana Di Salvo Rosario Iaria
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Carmela Gioele Galiano Angelo Francesco Gambino Marco Matranga

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE9_10	PE9_11	PE9_13
--------	--------	--------

### 5. Parole chiave

Astrofisica delle Alte Energie	Stelle di Neutroni	Relatività Generale
--------------------------------	--------------------	---------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Dipartimento di Fisica, Università di Cagliari

Osservatorio Astronomico di Monteporzio (Roma)

IASF-INAF Palermo

Osservatorio Astronomico di Cagliari

Osservatorio Astronomico di Brera

IAAT Astronomisches Institut Tuebingen

Department of Astronomy, University of Michigan

Department of Physics & Astronomy, Wayne State University

ISDC - Science Data Centre for Astrophysics of Geneva

### 7. Riassunto

Il nostro obiettivo principale è lo studio delle Stelle di Neutroni in tutte le loro manifestazioni, con l'obiettivo di tracciare percorsi di evoluzione tra le diverse classi, come quello tra AMP e MSP. La scoperta recente, da parte del nostro gruppo, dell'anello di congiunzione tra queste due classi di pulsar, PSR J1824-2452I (Papitto et al. 2013, Nature), indica l'urgenza di proseguire l'attività di ricerca su queste sorgenti. Studi teorico-osservativi sulle pulsar al millisecondo e sui loro progenitori in Low Mass X-ray Binaries sono il nostro obiettivo primario, al fine di affrontare le questioni chiave sulle proprietà fondamentali della materia ultra-densa.

### 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi





Lo scopo della ricerca è l'indagine delle leggi fondamentali della fisica attraverso lo studio delle Stelle di Neutroni (NS) in sistemi binari. La nostra ricerca si propone di incrementare la conoscenza del comportamento della materia in condizioni fisiche estreme a causa degli enormi campi gravitazionali (dove gli effetti relativistici diventano rilevanti) e magnetici. Lo studio osservativo del flusso di materia nelle immediate vicinanze dell'oggetto compatto può fornire importanti informazioni sul raggio dell'oggetto stesso, e quindi sull'equazione di stato della materia ultra-densa. Si noti che questo è attualmente uno degli obiettivi principali della ricerca di base in Fisica, in quanto potrebbe dare informazioni sullo stato della materia in condizioni estreme (non riproducibili sulla Terra) e sulle teorie fisiche proposte per spiegare il comportamento della materia in campi gravitazionali e magnetici estremamente intensi. Questi obiettivi verranno raggiunti tramite lo studio di osservazioni effettuate in ampie bande dello spettro elettromagnetico (radio, ottico, raggi X e Gamma) di oggetti che per la fenomenologia mostrata risultano essere particolarmente interessanti e prevedono il nostro impegno per il triennio 2016-2018.

In particolare, per il 2016, effettueremo studi spettrali e temporali nella banda X di sistemi Low Mass X-ray Binaries (LMXB), contenenti NS debolmente magnetizzate, e pulsar al millisecondo in accrescimento (AMP), ritenute essere i progenitori delle Radio Pulsar al millisecondo (MSP). Nel caso delle NS LMXB, aventi campi magnetici relativamente deboli, ci si aspetta che il disco di accrescimento sia troncato alla superficie della NS. Per interpretare gli spettri delle NS LMXB svilupperemo modelli spettrali relativistici auto-consistenti per descrivere l'emissione dai dischi irradiati e confronteremo i modelli con dati di alta qualità del campione di NS LMXB che mostrano righe del ferro larghe e altri segni della "riflessione" Compton (Di Salvo et al. 2009, MNRAS, 398, 2022). Verranno determinati i parametri fisici per la regione di emissione che saranno confrontati con le informazioni ottenute dalle caratteristiche della rapida variabilità temporale. Effettueremo una analisi temporale orbitale e di spin delle AMP che permetterà lo studio della loro enigmatica evoluzione, sul breve e lungo periodo. Osservazioni ottiche di AMSPs durante la quiescenza X permetteranno di misurare la potenza emessa dal dipolo magnetico rotante, che viene riprocessata nella banda ottica dalla stella compagna (Burderi et al. 2003, A&A, 404, L43). Le osservazioni radio e Gamma di AMP in quiescenza ci daranno la possibilità di trovare pulsazioni coerenti in queste bande. Abbiamo, di recente, scoperto una AMP che appare come una pulsar radio non appena l'accrescimento si ferma e l'emissione X si indebolisce (Papitto et al. 2013). Riteniamo che questo comportamento possa essere causato dalla pressione della radiazione emessa dal dipolo magnetico rotante (Burderi et al. 2001, ApJ, 560, L71), che può essere in grado di spazzare via la materia alla fine dell'outburst X direttamente dal punto Lagrangiano interno. Riteniamo che questo ingrediente sia fondamentale quando la NS raggiunge periodi di rotazione dell'ordine del millisecondo e può essere in grado di espellere dal sistema la maggior parte della massa trasferita, fino ad evaporare completamente la stella compagna.





UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PALERMO

DIPARTIMENTO DI FISICA E CHIMICA  
DiFC

### **9. Fondi acquisiti**

PRIN-INAF 2014 in collaborazione con INAF-OA-Brera

NuSTAR 2014/2015 (Fondi ASI-INAF) 5600 €

### **Fondi acquisibili**

Fondi ASI-progetto HERMES

PRIN MIUR 2015, in fase di sottomissione



## 2. ATTIVITA' A PREVALENTE CARATTERE SPERIMENTALE

Macroarea: BIOFISICA MOLECOLARE E NANOTECNOLOGIE

Linea di ricerca: *Biofisica molecolare e nanotecnologie*

Macroarea: CHIMICA DEI MATERIALI

Linea di ricerca: *Materiali e metodi per fuel cells ed elettrolizzatori*

Macroarea: FISICA DEI MATERIALI AVANZATI

Linee di ricerca: 1) *Materiali avanzati per applicazioni in optoelettronica, fotonica e sensoristica*  
2) *Proprietà a microonde di superconduttori non convenzionali*

Macroarea: TERMODINAMICA E STRUTTURA DI SISTEMI SUPRAMOLECOLARI

Linee di ricerca: 1) *Caratterizzazione e sviluppo di materiali per la decontaminazione ambientale e la conservazione e il restauro di Beni Culturali*  
2) *Nanomateriali intelligenti sostenibili*



### 1. Titolo della linea di ricerca

BIOFISICA MOLECOLARE E NANOTECNOLOGIE

### 2. Responsabile: Maurizio Leone

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Antonio Cupane, Maurizio Leone
<b>Professori associati</b>	Antonio Emanuele, Valeria Militello, Bruno Pignataro Valeria Vetri
<b>Ricercatori</b>	Grazia Cottone, Tiziana Fiore, Matteo Levantino, Claudia Pellerito, Fabio Principato, Michelangelo Scopelliti
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Yana Aleeva, Giuseppe Arrabito, Sebastiano Cataldo, Margarita Fomina, Maria Grazia Santangelo, Camillo Sartorio
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Felicia Cavalieri, Clara Chiappara, Irina Piazza, Estella Rao, Dario Spigolon
<b>Collaboratori a Contratto</b>	Giovanni Maira

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_16 - Physics of biological systems	LS1_8 - Biophysics	PE5_6 - New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles
--	--------------------	---

### 5. Parole chiave

Biofisica	Dinamica delle proteine	Patologie conformazionali
Nanomateriali	Biosensori	Fotovoltaico

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Department of Biomedical Engineering, University of California Irvine (USA)

Department of Chemistry, Northwestern University, Chicago (USA)

Department of Pharmacy, Università di Copenhagen (Danimarca)

Department of Drug Design and Pharmacology, Università di Copenhagen (Danimarca)

Novo Nordisk A/S (Danimarca)

Department of Structural Biology and Chemistry, Institut Pasteur (Francia)

Institut de Biologie Structurale (Francia)

Institut Laue-Langevin (Francia)

European Synchrotron Radiation Facility (Francia)

Institute of Physics, Université de Rennes 1 (Francia)

INSERM, Université de La Réunion (Francia)

Department of Physics & Center for Free-Electron Laser Science, Università di Amburgo



(Germania)

Department of Chemistry and Chemical Biology, Università di Dortmund (Germania)

Zernike Institute for Advanced Materials, Università di Groningen (Olanda)

Department of Medical Biochemistry and Biophysics, Umeå University (Svezia)

Department of Clinical Neurosciences, University of Cambridge (UK)

Department of Physics and Astronomy, University College of London (UK)

Wolfson Institute for Biomedical Research, University College of London (UK)

Department of Chemistry, Università di Glasgow (UK)

Center for Synaptic Neuroscience, Istituto Italiano di Tecnologia

Center for Life Nano Science, Istituto Italiano di Tecnologia

Dipartimento di Ingegneria dell'Informazione, Università di Brescia

Istituto di Biostrutture e Bioimmagini (IBB), CNR-Catania

Istituto di Biofisica (IBF), CNR-Palermo e CNR-Napoli

Istituto di Biomedicina ed Immunologia Molecolare (IBIM), CNR-Palermo

Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati (ISMN), CNR-Palermo

Dipartimento di Chimica, Università di Bari

Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Padova

Dipartimento di Scienze Biochimiche, Università di Roma La Sapienza

Dipartimento di Ingegneria, Università Campus Bio-Medico, Roma

Dipartimento di Medicina e Chirurgia, Università di Salerno

## 7. Riassunto

Il Gruppo di BIOFISICA MOLECOLARE E NANOTECNOLOGIE vede coinvolti diversi membri del DiFC provenienti da differenti settori scientifici disciplinari della Fisica e della Chimica con competenze e capacità sotto molti aspetti complementari, a prevalente carattere sperimentale. Il denominatore comune è l'approccio molecolare, biomolecolare e nanotecnologico rivolto allo studio di sistemi biologici che possono essere rilevanti anche per applicazioni nel campo della medicina e delle scienze farmaceutiche, ma non solo. Sono di interesse anche gli ambiti dell'Elettronica, dei Beni Culturali, della Sensoristica e del Fotovoltaico. Lo studio di tali argomenti ricade fra gli obiettivi del Societal Challenge 1 di Horizon 2020 (HEALTH, DEMOGRAPHIC CHANGE AND WELLBEING) che ha fra i suoi scopi dichiarati quello di migliorare la salute ed il benessere dell'uomo nel corso della vita. Nell'ambito di tali ricerche si prevede di sviluppare e diffondere il know-how nell'ambito delle bio e nanotecnologie con un conseguente impatto (anche economico) nell'area di interesse.

## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Nell'ambito delle attività di Ricerca Fondamentale, il gruppo è interessato ai seguenti temi:

- Dinamica delle proteine (studio delle proprietà dinamiche e conformazionali delle



- proteine tramite tecniche biofisiche convenzionali, tecniche spettroscopiche e strutturali risolte in tempo e tecniche computazionali di dinamica molecolare);
- Studio delle proprietà dinamiche dell'acqua in cellule e tessuti normali e patologici tramite d-MRI e scattering di neutroni;
  - Studio delle patologie conformazionali (studio dei meccanismi molecolari di patologie legate al malfunzionamento di proteine che, inizialmente sintetizzate correttamente, vanno incontro ad aggregazione patologica in seguito a specifici cambiamenti conformazionali);
  - Effetti della glicazione sulla struttura-dinamica-funzione di proteine e peptidi amiloidi;
  - Correlazione struttura-proprietà (chimiche, meccaniche, biologiche, ottiche, elettriche) di nanomateriali;
  - Metodologie avanzate di indagine e di patterning su scala nano-metrica di sistemi organici e biologici;
  - Fenomeni di auto-organizzazione su scala nano-metrica di sistemi molecolari e biomolecolari (fibrillogenesi);
  - Interazioni di metalli e composti organometallici con biomolecole;
  - Sviluppo di nuovi strumenti teorici e tecnici per dispositivi di light scattering.

Nell'ambito delle attività di Ricerca Applicata, il gruppo è interessato ai seguenti temi:

- Nanotecnologie per l'elettronica e l'elettronica su plastica (celle fotovoltaiche, transistori, dispositivi di potenza);
- Nanotecnologie per la Medicina e la Salute dell'Uomo (biosensori, sistemi per drug-screening, drug-delivery e tissue engineering);
- Nanotecnologie per i Beni Culturali;
- Elettronica ed Elettronica su Plastica (celle fotovoltaiche, biosensori, transistori, dispositivi di potenza);
- Sviluppo di protocolli sperimentali per il controllo di qualità nel settore agro-alimentare (es. olio extravergine di oliva, caffè).
- Sviluppo di nuovi strumenti teorici e tecnici per dispositivi di light scattering, con l'attenzione rivolta al trasferimento tecnologico.

Gli obiettivi delle attività di Ricerca Fondamentale sono:

- mettere in luce la transizione dinamica delle proteine e la sua dipendenza dalle proprietà dell'acqua di idratazione, con particolare riferimento alle anomalie termodinamiche dell'acqua confinata/sottoraffreddata (2016-2017);
- caratterizzare le proprietà diffusionali dell'acqua nelle cellule e nei tessuti biologici tramite l'uso complementare della risonanza magnetica in diffusione e dello scattering quasi-elastico di neutroni (2016-2017);
- misurare la dinamica dei cambiamenti conformazionali di proteine funzionalmente rilevanti (nell'ambito di questa linea il gruppo partecipa ad un Progetto Europeo COST



- dal titolo "Understanding Movement and Mechanism in Molecular Machines", 2014-2018);
- mettere in luce le basi molecolari di patologie conformazionali (2016-2017);
  - investigare l'interazione proteina-membrana sia dal punto di vista sperimentale che computazionale. In particolare:
    - 1) determinare forme strutturali stabili per lo stato attivo, non attivo e desensitizzato del recettore nicotinico umano, a livello atomistico (2016-2017);
    - 2) stimare barriere di energia libera e costanti cinetiche per il processo di permeazione ionica in recettori complessati con agonisti e antagonisti (2017-2018);
    - 3) investigare i meccanismi di interazione di aggregati proteici con membrane biologiche (2016-2018);
    - 4) chiarire il ruolo delle membrane biologiche nei processi di aggregazione proteica (2016-2018);
  - mettere in luce gli effetti della glicazione sia a livello molecolare (struttura e dinamica di peptidi glicati studiati attraverso simulazioni di dinamica molecolare e scattering di neutroni), che a livello supramolecolare (effetto sulla aggregazione/fibrillazione) (2016-2018);
  - Investigare le interazioni proteina-DNA e proteina-RNA;
  - Investigare la dinamica di biomolecole in ambienti spazialmente confinati.

Gli obiettivi delle attività di Ricerca Applicata sono:

Avviare le Microscopy and Spectroscopy facilities nell'ambito del centro CHAB. Sviluppare nanotecnologie, trasferire know-how nel campo delle biotecnologie. Sviluppare dispositivi di biosensori wireless per l'assistenza a distanza di pazienti e anziani. Sviluppare dispositivi fotovoltaici su plastica per l'energia alternativa integrabile e trasportabile. Sviluppare nuovi nanomateriali per la conservazione e il restauro dei Beni Culturali. Sviluppare piattaforme tecnologiche a basso costo di sistemi di array per lo screening chimico e farmacologico

## **9. Fondi acquisiti**

Le attività di ricerca si sono ad oggi basate su una serie di progetti di ricerca sotto la responsabilità di differenti membri del gruppo. Di seguito l'elenco dei progetti attivi:

- PO FESR 2007-2013 Linea d'intervento 4.1.1bis: "CAFIS - Controllo della qualità e della salubrità nella filiera del caffè con tecniche chimico-fisiche innovative tipiche della scienza dei materiali" - Resp. Scientifico: Prof. M. Leone (circa 350.000 €);
- PRIN 2012: "Ricerca di nuovi orizzonti nella cura del tumore integrando tecnologie innovative di "drug-screening" e progettazione razionale dei farmaci" - Coordinatore locale: Prof. B. Pignataro (circa 160.000 €);
- PON Linea Distretti e Laboratori Pubblico-Privati: "Elettronica su Plastica per Sistemi Smart Disposable", Distretto Tecnologico Micro e Nanosistemi - Coordinatore locale: Prof. B. Pignataro (circa 550.000 €);



- PON Linea Distretti e Laboratori Pubblico-Privati: "TESEO", Distretto Tecnologico Trasporti e Pesca - Coordinatore locale: Prof. B. Pignataro (circa 360.000 €);
- PON Linea Distretti Titolo III: "nanoTechnology and nanomatERials for Cultural heritAges - TECLA", Coordinatore locale: Prof. B. Pignataro (circa 500.000 €);
- COST Action CA15126: "Between Atom and Cell: Integrating Molecular Biophysics Approaches for Biology and Healthcare" - Prof. M. Leone;
- COST Action CM1306: "Understanding Movement and Mechanism in Molecular Machines" - Membro del Comitato Direttivo: Dr. M. Levantino.

Il gruppo è inoltre coinvolto nei seguenti progetti:

- PON Ricerca e Competitività 2007-2013, Asse I, Interventi di Sostegno della Ricerca Industriale: "SIB: Soluzioni avanzate basate su biomateriali a matrici composite complesse per la riparazione e la rigenerazione della cartilagine articolare mediante tecniche mininvasive";
- PON Ricerca e Competitività 2007-2013, Asse I, Distretti e Laboratori: "Biomedico";
- PON Ricerca e Competitività 2007-2013, Asse I, Potenziamento Strutturale: "Mediterranean Center for Human Health Advanced Biotechnologies (Med-CHHAB)".

Il gruppo si avvale inoltre di fondi proventi da una convenzione di ricerca e servizi tra il DiFC e la Merck Serono SPA (circa 90.000 € per anno).

### **10.Fondi acquisibili**

- PRIN 2015: "The role of post-translational modifications in protein aggregation", Coordinatore locale: Prof. M. Leone, Coordinatore nazionale: Prof. A. Pastore;
- PRIN 2015: "How do amyloidogenic proteins interact with membranes? From in vitro models to in cell studies", Coordinatore nazionale: Prof. V. Vetri;
- PRIN 2015: "Organic bioelectronics probing supramolecular binding events – eONE", Coordinatore locale: Prof. Bruno Pignataro, Coordinatore nazionale: Prof. Luisa Torsi.

Altri progetti su bandi Horizon2020 e relativi alla nuova Programmazione PON sono in fase di stesura.





### 1. Titolo della linea di ricerca

MATERIALI E METODI PER FUEL CELLS E ELETTROLIZZATORI

2. **Responsabile** Antonino Martorana

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Antonino Martorana
<b>Ricercatori TD</b>	Francesco Giannici
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Chiara Aliotta, Stefania Di Tommaso, Adriana Mossuto Marculescu
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Marianna Gambino
<b>Collaboratori di enti convenzionati (ISMN-CNR)</b>	Alessandro Longo, Leonarda Liotta, Francesca Deganello

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE5 Synthetic Chemistry and Materials: Materials synthesis, structure-properties relations, functional and advanced materials, molecular architecture, organic chemistry	PE5_2 Solid state materials	PE5_6 New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles
--	-----------------------------	---

### 5. Parole chiave

SOFC	SOEC	Caratterizzazione strutturale
------	------	-------------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

ENSCP-ParisTech

Max Planck Institut für Festkörperforschung, Stuttgart

ISMN-CNR

IENI-CNR

Università di Pavia

### 7. Riassunto

Sintesi, assemblaggio di componenti e caratterizzazione strutturale-funzionale di materiali per fuel cells ed elettrolizzatori. Sviluppo di nuovi materiali ibridi inorganici-organici per elettroliti a conduzione protonica in cui la fase organica sia ancorata su ossidi mesoporosi della classe MCM o su perovskiti layered della serie Dion-Jacobson. Struttura locale e interazione drogante-



matrice in conduttori anionici a matrice perovskitica  $\text{LaGaO}_3$  drogata sul sito A e sul sito B con specie bivalenti. Studio della struttura locale e dello stato di ossidazione di materiali elettrodi mediante X-ray absorption spectroscopy *in operando*. Analisi di interfacce elettrolita-elettrodo mediante X-ray microspectroscopy e X-ray photoelectron microspectroscopy.

### **8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

La tematica dello sviluppo sostenibile viene implementata attraverso la sintesi e caratterizzazione strutturale-funzionale di materiali per celle a combustibile ad ossidi solidi. La linea di ricerca si articola lungo tre direttrici:

i. La possibilità di costruire dispositivi che operino reversibilmente come celle a combustibile ed elettrolizzatori viene proposta nel progetto PRIN 2015 "New Materials and catalysts for power to fuel processes". La co-elettrolisi  $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$  realizzata con dispositivi reversibili è un obiettivo primario per giungere ad una razionale distribuzione su larga scala di fonti di energia rinnovabile; si aprono tuttavia questioni, a tutt'oggi irrisolte, principalmente per quanto riguarda il deterioramento di materiali che, ottimizzati per una sola delle due funzioni, portano ad un rapido decadimento nelle performance degli attuali dispositivi.

ii. La realizzazione di fuel cells che operino a temperature intermedie tra le basse temperature delle celle ad elettrolita polimerico (circa 100 °C) e le alte temperature dei dispositivi ad elettrolita YSZ comporta lo studio e l'ottimizzazione di una nuova classe di materiali elettrolitici. L'attività di ricerca si focalizza sullo sviluppo di conduttori protonici ibridi inorganici-organici che presentano uno scaffold inorganico (solidi mesoporosi MCM, perovskiti layered Dion-Jacobson) su cui vengono ancorate funzioni organiche donatrici di protoni; la ricerca sui conduttori anionici è invece focalizzata su ossidi a base di  $\text{LaGaO}_3$ , a struttura perovskitica, drogati con specie bivalenti. Tali composti presentano proprietà di conduzione molto interessanti nell'intervallo di temperature 500-700 °C e una conducibilità esclusivamente ionica. Tuttavia, sono difficilmente ottenibili in fase pura e quindi richiedono studi specifici per ottimizzare le tecniche di sintesi e una accurata analisi strutturale per individuare i dettagli fini dell'interazione drogante-matrice.

iii. Un necessario supporto per lo sviluppo delle linee di ricerca citate ai punti i. e ii. è la messa a punto di tecniche di opportune tecniche di caratterizzazione strutturale. In quest'ambito di attività sono particolarmente importanti le tecniche di luce di sincrotrone. Il gruppo di ricerca sta sviluppando procedure che applicano la spettroscopia di assorbimento dei raggi X (XAS) allo studio *in operando* (temperatura, ambiente di reazione, potenziale applicato) di materiali elettrodi. Lo studio delle interfacce elettrolita-elettrolita è fondamentale per stabilire i meccanismi (interdiffusione, formazione di fasi interfacciali) che portano al degrado dei dispositivi. Sono quindi in fase di messa a punto procedure che utilizzano la X-ray microspectroscopy, che permette di analizzare interfacce per composizione elementare e struttura locale. Verrà anche applicata una tecnica analoga, la SPEM (Scanning Photoelectron Microspectroscopy), che si presta anche ad effettuare esperimenti "*quasi in-situ*".



Scansione temporale delle attività 2016-2018:

2016. a. Ottimizzazione delle tecniche descritte al punto iii.; b. Analisi della struttura e delle proprietà di conduzione dei conduttori ibridi inorganici-organici (punto ii.) già sintetizzati su perovskiti Dion-Jacobson; c. Sintesi di lantanio gallati in fase pura e studio dell'interazione drogante-matrice in questi composti.

2017. Sintesi di conduttori ibridi inorganici-organici supportati su MCM; studio in operando di materiali elettrodi; analisi di interfacce elettrolita-elettrodo mediante X-ray microspectroscopy; assemblaggio di celle reversibili FC-elettrolizzatore.

2018. Proprietà funzionali di dispositivi reversibili; studio dei processi di decadimento delle proprietà di dispositivi reversibili mediante XAS in operando, X-ray spectromicroscopy, SPEM.

### **9. Fondi acquisiti**

PRIN 2010-2011 "Solid oxide Fuel Cells at Intermediate Temperatures Fuelled with Biofuels (BIOITSOFC) 175.426 €

PON02\_00153\_2939517 "High Efficiency Technologies for On-board Environmental and Sustainable Energy Use" 121.200 €

FIRB-Futuro in ricerca "INCYPIT - INnovative Ceramic and hYbrid materials for Proton conducting fuel cells at Intermediate Temperature" 234.447 €

### **Fondi acquisibili**

PRIN 2015 "New Materials and catalysts for power to fuel processes"



### 1. Titolo della linea di ricerca

MATERIALI AVANZATI PER APPLICAZIONI IN OPTOELETTRONICA, FOTONICA E SONSORISTICA

2. **Responsabile** Franco Mario Gelardi

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Franco Mario Gelardi
<b>Professori associati</b>	Simonpietro Agnello, Marco Cannas
<b>Ricercatori</b>	Gianpiero Buscarino, Fabrizio Messina
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Chiara Cangialosi, Pietro Camarda, Aurora Piazza. Serena Rizzolo, Alice Sciortino, Michela Todaro

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_1, PE3_13	PE4_2, PE4_4	PE5_2, PE5_6
---------------	--------------	--------------

### 5. Parole chiave

Carbon related nano-materials	Nano ossidi	Metal Organic Frameworks
Nanomateriali per il fotovoltaico	Fibre ottiche	Materiali mesoporosi
Proprietà e stabilità strutturale dei materiali	Dinamica degli stati elettronici eccitati e dei difetti di punto	Scienze dei materiali

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

CNR-IMM Catania

Università di Cagliari

Università di Milano-Bicocca

Université Jean-Monnet (Saint-Etienne, Francia)

University of Koblenz-Landau (Koblenz, Germania)

Ecole Polytechnique (Palaiseau, Francia)

Universität Bern (Berna, Svizzera)

Karlsruhe Institute of Technology (Karlsruhe, Germania)

Paul Scherrer Institute (Villigen, Svizzera)

Ural Federal University (Yekaterinburg, Russia)

National Institute for Laser, Plasma and Radiation Physics (Magurele, Romania)



## 7. Riassunto

L'attività di ricerca sperimentale, basata principalmente su tecniche spettroscopiche e morfologiche, è centrata sullo studio delle proprietà fisiche di materiali nanodimensionali, nanostrutturati e bulk di interesse sia per la ricerca di base della scienza dei materiali che per aspetti applicativi. Gli studi svolti mirano alla comprensione delle caratteristiche ottiche, magnetiche e strutturali dei materiali, della loro stabilità e delle modifiche indotte da trattamenti fisici, come l'esposizione a radiazioni laser e ionizzanti, o chimico/fisici come trattamenti termici in ambiente controllato. Le ricerche sono indirizzate all'impiego di tali materiali nel fotovoltaico, la sensoristica, la micro e l'optoelettronica.

## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

L'attività svolta è proiettata sul triennio e coinvolge le seguenti linee

- **Nano ossidi.** L'attività svolta riguarda la preparazione di ossidi metallici (Zn, Ti) o di semiconduttori (Si) con tecniche fisiche di ablazione laser in liquido e la comprensione delle loro proprietà morfologiche, ottiche, strutturali e paramagnetiche. In particolare, la rilevanza dei fenomeni di confinamento quantico sulla emissione è studiata attraverso l'indagine delle proprietà di emissione in relazione alla dimensione delle nanoparticelle. Inoltre, la interazione tra processi di ricombinazione di eccitoni e difetti di punto presenti sulle superfici delle nanoparticelle è studiata per chiarire i processi di emissione, la loro tunabilità ed efficienza. Inoltre, tra i nano ossidi è anche ampiamente studiata la famiglia di nanoparticelle di SiO<sub>2</sub> sia per comprenderne le proprietà ottiche intrinseche o collegate a difetti di punto, sia per indagare i processi di diffusione di piccole molecole nel materiale amorfo nanodimensionale. Tali attività coinvolgono dottorandi per il 2016.

- **Carbon related materials.** La ricerca coinvolge i carbon nanodots (CND) e mira a determinare procedure ripetibili di preparazione per via fisica (microonde, ablazione laser), ed a chiarire le loro proprietà strutturali, la tunabilità delle proprietà di emissione in funzione delle caratteristiche nanometriche, l'efficienza ottica per sensoristica di molecole estranee al CND. È oggetto di studio anche il Grafene (Gr) ed, in particolare, le sue proprietà elettroniche e di drogaggio attraverso trattamenti in atmosfera controllata, insieme ad altri materiali 2D (MoS<sub>2</sub>) per la realizzazione di dispositivi nanostrutturati. Infine, sono in avvio delle ricerche sui Diamond Like Carbon (DLC) e delle loro caratteristiche strutturali in fase di deposizione su polimeri. Tali attività coinvolgono dottorandi negli anni 2016, 2017, 2018.

- **Metal organic Framework, mesoporosi.** Le proprietà strutturali e la loro stabilità in materiali commerciali o da laboratorio ad alta superficie specifica sono investigate con tecniche spettroscopiche al fine di valutare l'effetto dell'ambiente atmosferico. Inoltre, sono studiate le proprietà magnetiche, ottiche e di emissione dovute a cromofori del materiale o alla sua funzionalizzazione per l'applicazione in emettitori ad alta efficienza e come sensori per la presenza di specifiche molecole. Tali attività coinvolgono dottorandi per gli anni 2016, 2017.

- **Fibre ottiche.** Le proprietà ottiche e la resistenza alla radiazione di fibre ottiche di ultima



generazione a base di  $\text{SiO}_2$  di alta purezza o drogate (Ge, F, P, N,...), anche con inibitori di radiazione ( $\text{O}_2$ ,  $\text{H}_2$ ) o con terre rare (Er, Yb), sono studiate nell'ambito di una collaborazione internazionale al fine di sviluppare sensori di radiazione/temperatura/stress e dispositivi ottici per ambienti radioattivi. I meccanismi di formazione dei difetti di punto e le modifiche strutturali dei materiali sono studiati per comprendere i processi a livello atomico e strutturale. Tali attività coinvolgono dottorandi per il 2016.

- **Materiali per il fotovoltaico.** Gli studi hanno l'obiettivo di individuare nanomateriali e materiali bulk, tra i quali ossidi ad ampio gap, ad alta efficienza di conversione ottica per l'impiego nelle tecnologie del fotovoltaico a concentrazione. Questa attività è inquadrata sia in progetti di ricerca applicata in fase di conclusione sia in progetti in via di attivazione.

### **9. Fondi acquisiti**

PON – linea Distretti Titolo III, progetto “nanoTechnology and nanomaterials for Cultural heritages - TECLA” (PON 03PE\_00214\_1) 500.000 € .

Progetto FAE (POFESR Regione Siciliana 2007/13 - CUP:G63F11000510004) 110.000 €

Progetto DISAM

### **Fondi acquisibili**

Progetto PRIN 2015

Progetto DAAD/MIUR



### 1. Titolo della linea di ricerca

PROPRIETÀ A MICROONDE DI SUPERCONDUTTORI NON CONVENZIONALI

2. **Responsabile** Aurelio Agliolo Gallitto

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Aurelio Agliolo Gallitto, Maria Li Vigni
-----------------------------	--

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3	PE3_8	
-----	-------	--

### 5. Parole chiave

Superconduttività	Microwave Response	Microwave Harmonic Emission
-------------------	--------------------	-----------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Department of Applied Physics (GAP)

Department of Condensed Matter Physics (DPMC), University of Geneva, Switzerland

Dipartimento di Fisica "E. Caianiello", Università di Salerno

TUBITAK-UME, National Metrology Institute, PK 54, Gebze-Kocaeli, Turkey

Department of Physics, Faculty of Science and Arts, Gaziosmanpasa University, Tokat, Turkey

Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow, Russia

### 7. Riassunto

Il programma di ricerca riguarderà lo studio delle proprietà a microonde di superconduttori non convenzionali sia ad alta temperatura critica (cuprati) sia a media e bassa temperatura critica (ossipnictidi). Tali proprietà saranno investigate a basse potenze incidenti tramite misure di impedenza superficiale e ad alte potenze con la tecnica di generazione di armoniche. Le misure, sia dell'impedenza superficiale sia dell'intensità dei segnali armonici, saranno effettuate in funzione del campo magnetico esterno e della potenza incidente, con l'obiettivo principale di mettere in evidenza gli effetti della barriera superficiale.

### 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Dallo studio della risposta di seconda armonica (SH) a frequenza di microonde (mw) in vari campioni superconduttori, è stato accertato che gli effetti di isteresi magnetica, così come l'evoluzione temporale del segnale di SH a tempi dell'ordine dei minuti, sono legati a scavalcamiento da parte dei flussoni della barriera superficiale. Ciò è stato messo in evidenza da studi effettuati su campioni, di Nb ed  $MgB_2$ , caratterizzati da superfici aventi differente rugosità. Resta tuttavia da comprendere se l'effetto della barriera superficiale sia solo quello di provocare il decadimento del segnale di SH, o se la barriera stessa possa dare origine a generazione di SH a frequenza di microonde. Questo problema risulta particolarmente





interessante se si considera che nessuno dei modelli riportati in letteratura per la generazione di armoniche riesce a spiegare appieno le caratteristiche dei segnali di SH, quali per esempio la dipendenza meno che quadratica dell'intensità del segnale dalla potenza incidente e l'andamento del segnale in funzione del campo magnetico statico applicato quanto l'ampiezza del campo magnetico a mw è dello stesso ordine del campo magnetico statico.

È stato dimostrato da vari autori che gli effetti di barriera superficiale sono particolarmente accentuati nei cristalli di superconduttori ad alta  $T_c$  a causa della loro anisotropia. Molti studi sono stati effettuati in cristalli di BISCCO che sono fortemente anisotropi. Recentemente è stato mostrato, per mezzo di tecniche magneto-ottiche, che "stacks" di vortici Josephson creati da un campo magnetico parallelo ai piani del cristallo riduce drasticamente la barriera superficiale permettendo la penetrazione di catene di vortici "pancake" in regioni del cristallo in cui non dovrebbero essere presenti vortici.

L'attività di ricerca che ci proponiamo di portare avanti si inserisce in questo contesto. Nell'immediato futuro ci proponiamo di studiare dettagliatamente il segnale di SH in cristalli di BISCCO, con differenti orientazioni dei campi magnetici (DC e a mw) rispetto ai piani del cristallo, in funzione del campo magnetico DC e della potenza a mw. Poiché l'andamento dell'impedenza superficiale a mw dal campo magnetico statico dà preziose informazioni sulla dinamica dei vortici nei superconduttori nello stato misto, programiamo di effettuare anche tali misure che saranno di supporto per l'individuazione dei vari regimi di moto che si possono instaurare. Successivamente, ci proponiamo di sviluppare un modello che tenga conto autoconsistentemente dei vari contributi alla magnetizzazione a frequenza di SH del campo guida, sia di bulk sia superficiale. Ciò allo scopo di comprendere meglio quale sia il ruolo degli effetti di barriera. Infine estenderemo lo studio in altri in altri campioni superconduttivi, quali per esempio altri cristalli di superconduttori cuprati e campioni di ossipnictidi per testare la generalità del modello.

### **9. Fondi acquisibili**

Materiali naturali nanostrutturati (PRIN 2015, in fase di sottomissione) 100.000 €



### 1. Titolo della linea di ricerca

CARATTERIZZAZIONE E SVILUPPO DI MATERIALI PER LA DECONTAMINAZIONE AMBIENTALE E LA CONSERVAZIONE E IL RESTAURO DI BENI CULTURALI

**2. Responsabili:** Alberto Pettignano, Nicola Muratore

### 3. Partecipanti

<b>Ricercatori</b>	Alberto Pettignano, Nicola Muratore
--------------------	-------------------------------------

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE4_5	PE4_1	PE4_18
-------	-------	--------

### 5. Parole chiave

biomateriali	nanomateriali	decontaminazione ambientale
conservazione e restauro		

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Messina

Departament d'Enginyeria Química, Agrària i Tecnologia Agroalimentària, Universitat de Girona (Spain)

DICAM, Università di Palermo

STEBICEF, Università di Palermo

Centro Regionale per la Progettazione e il Restauro, Assessorato Regionale dei Beni Culturali e dell'Identità Siciliana

Restauratori, Corso di Laurea Magistrale a ciclo unico in Conservazione e Restauro dei Beni Culturali - Università di Palermo

### 7. Riassunto

La linea di ricerca che sarà sviluppata nel triennio 2016-2018 prevede la caratterizzazione e lo sviluppo di materiali innovativi (biopolimeri, nano materiali, etc.) da utilizzare nell'ambito della conservazione ed il restauro dei beni culturali e nella decontaminazione ambientale. La fase applicativa sarà preceduta da un'adeguata caratterizzazione dei materiali mediante l'utilizzo di opportune tecniche strumentali (voltammetria, potenziometria, HPLC-MS/MS, ICP-OES, TOC, viscosimetria, spettroscopia FT-IR, etc.)

### 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

La ricerca che si intende sviluppare nel triennio può essere così articolata:

Fase n°1: messa a punto di metodiche per la preparazione di materiali innovativi di diversa origine da utilizzare nell'ambito della conservazione ed il restauro dei beni culturali e nella decontaminazione ambientale: i) gel biopolimerici (alginato, chitina, pectine, etc.), ii) nano



argille (allosite, laponite, ecc.) e nanomateriali in genere (nanoparticelle di carbonio, nanocalci, nanosilici, ecc.); materiali compositi (3 mesi nel 2016; 3 mesi nel 2017; 3 mesi nel 2018).

Fase n°2: caratterizzazione dei materiali preparati mediante diverse tecniche analitiche strumentali: spettroscopia di emissione atomica con plasma ad accoppiamento induttivo, voltammetria di ridissoluzione anodica differenziale a impulsi, voltammetria ciclica, potenziometria con elettrodi ione-selettivi a membrana, cromatografia HPLC con rivelatori spettrofluorimetrico, spettrofotometrico a serie di diodi e a spettrometria di massa, viscosimetria, fotografia della fluorescenza da UV, scotch tape test, microscopia ottica, colorimetria, spettroscopia  $\mu$ -raman, spettroscopia FT-IR, test di solubilità di Wolbers-Cremonesi (3 mesi nel 2016; 3 mesi nel 2017; 3 mesi nel 2018).

Fase n°3: utilizzo dei materiali innovativi nell'ambito della decontaminazione ambientale quali adsorbenti di inquinanti organici e/o inorganici, con particolare riguardo ai metalli pesanti. In questo caso, caratteristiche fondamentali dei materiali selezionati dovranno essere: i) il basso costo, ii) la larga disponibilità, iii) il basso impatto ambientale e iv) l'elevata capacità sequestrante. La capacità adsorbente dei materiali nei confronti dell'inquinante sarà studiata sia dal punto di vista cinetico sia termodinamico tenendo in considerazione l'effetto di importanti variabili del sistema quali la granulometria dell'adsorbente, il mezzo ionico, la forza ionica, il pH e la temperatura della soluzione esaminata (3 mesi nel 2016; 3 mesi nel 2017; 3 mesi nel 2018).

Fase n°4: applicazione dei materiali innovativi nell'ambito della conservazione e il restauro di beni culturali quali (i) supportanti per la pulitura di superfici lapidee o (ii) per il consolidamento di superfici carbonatiche affrescate.

In particolare, saranno studiate le capacità supportanti di polimeri tradizionali (poliacrilati, polisaccaridi, ecc.) e di nano-argille (laponite) nei confronti di soluzioni acquose desolfatanti di carbonato d'ammonio o tamponanti di acetato d'ammonio.

Il consolidamento di superfici carbonatiche affrescate sarà effettuato testando nanomateriali compatibili nei confronti di pellicole pittoriche affrescate su supporti carbonatici in condizione di decoesione intergranulare e di deadesione al supporto. In particolare, verrà analizzata la capacità consolidante e la stabilità all'invecchiamento sia di nanomateriali inorganici commerciali (nanocalci e nanosilici) sia di ibridi nanoinorganici/polimerici di nuova formulazione su substrati modello in leggero stato di degrado realizzati in laboratorio (3 mesi nel 2016; 3 mesi nel 2017; 3 mesi nel 2018).

Le quattro fasi progettuali sono strettamente connesse tra loro. Qualora il materiale sviluppato dovesse dare gli esiti attesi (come adsorbente di inquinanti nell'ambito della decontaminazione ambientale o come supportante o consolidante nell'ambito della conservazione ed il restauro dei beni culturali), si procederà con una sua opportuna caratterizzazione.

## 9. Fondi acquisiti

Sostenibilità nei beni culturali: dalla diagnostica allo sviluppo di sistemi innovativi di



consolidamento, pulitura e protezione (PRIN 2011, protocollo: 2010329WPF\_003) 128.687 €  
Nanotubi di argilla per la progettazione di materiali intelligenti ecosostenibili (FIRB 2012, protocollo: RBFR12ETL5) 279.326 €

PON – linea Distretti Titolo III, progetto “nanoTechnology and nanomatErials for Cultural heritAges - TECLA” (PON 03PE\_00214\_1) 500.000 €

**Fondi acquisibili**

Materiali Naturali Nanostrutturati (PRIN 2015) 100.000 €

Multiple equilibria in natural and biological fluids: from speciation to selective sequestering PRIN2015 (100.000 €)



### 1. Titolo della linea di ricerca

NANOMATERIALI INTELLIGENTI SOSTENIBILI

2. Responsabili Giuseppe Lazzara, Stefana Milioto

### 3. Partecipanti

Professori ordinari	Stefana Milioto
Professori associati	Giuseppe Lazzara
Ricercatori	Francesco Ferrante
Assegnisti di ricerca	Nerina Armata, Giuseppe Cavallaro, Marina Massaro, Filippo Parisi,
Dottorandi di ricerca	Vanessa Rita Bertolino

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE4_1	PE5_10	PE5_8
-------	--------	-------

### 5. Parole chiave

Nanocompositi	Nanoargille	Materiali self-healing
---------------	-------------	------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale - Università di Pisa

Dipartimento STEBICEF - Università di Palermo

Dipartimento di Chimica - Università di Messina

Department of Chemistry, University of Craiova (Craiova, Romania)

Institute for Micromanufacturing, Louisiana Tech University (Ruston, US)

School of Engineering Monash University (Malesia)

Department of Microbiology, Kazan Federal University (Kazan, Republic of Tatarstan)

Institut für Chemie, Technische Universität Berlin (Germania)

ILL Grenoble (Francia)

### 7. Riassunto

La ricerca si propone lo studio di nanotubi di allosite per la preparazione di *green materials* intelligenti. Saranno investigati i meccanismi di rilascio di specie attive dalla cavità dell'allosite, per ottimizzare l'efficacia dell'applicazione. Inoltre, saranno sviluppati sistemi di rilascio intelligenti per consentire il rilascio dal lumen del nanotubo per effetto di uno stimolo chimico/fisico specifico. Gli obiettivi sono sintetizzabili in due tematiche: sviluppo di materiali biodegradabili come alternative sostenibili per la produzione di plastiche da combustibili fossili; preparazione e caratterizzazione di sistemi nanostrutturati funzionali al consolidamento e la protezione a lungo termine dei Beni Culturali.



## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

1. La ricerca si propone lo studio di nanoargille per la preparazione di *green materials* intelligenti. In particolare, sarà studiata l'allosite che è un minerale disponibile in natura in quantità elevate, a basso costo e atossico e presenta dimensioni nanoscopiche, con una struttura cilindrica cava di dimensioni nanometriche. La bassa tossicità e l'ottima resistenza meccanica pongono l'allosite competitiva nei confronti dei nanotubi di carbonio che nonostante il largo interesse applicativo presentano svantaggi quali scarsa solubilità in acqua, tossicità, elevato costo e disponibilità in piccole quantità. Saranno investigati i meccanismi di rilascio di specie attive dalla cavità dell'allosite, per ottimizzare l'efficacia dell'applicazione. Inoltre, saranno sviluppati sistemi di rilascio intelligenti per consentire il rilascio dal lumen del nanotubo su introduzione di un trigger chimico/fisico specifico. Dal punto di vista computazionale, verrà studiato l'adsorbimento di piccole molecole sulle superfici di un modello di sistema allositico. In particolare, dopo una caratterizzazione dell'energetica e della geometria di adsorbimento di molecole semplici come l'acqua, l'etanolo e il cloroetano, si passerà allo studio delle medesime proprietà per quanto riguarda molecole di interesse più specifico, quali l'acido salicico e il benzotriazolo. Si estenderà la ricerca valutando l'influenza sulle caratteristiche dell'adsorbimento di difetti sostituzionali Si/Al e Al/Mg.

La tempistica prevista è schematizzabile come segue:

- Caricamento e rilascio di specie attive da nanoargille (6 mesi, 2016)
- Caratterizzazione di bionanocompositi allosite/biopolimeri (6 mesi, 2016)
- Studio di strategie per il conseguimento del rilascio indotto da stimoli esterni (9 mesi, 2016-2017)
- Compatibilizzazione del sistema nanotubo caricato con sostanze attive in matrici polimeriche (6 mesi, 2017)
- Controllo delle proprietà self-healing dei materiali nanocompositi (9 mesi, 2017-2018)
- Valutazione delle applicazioni specifiche su provini (6 mesi, 2018)

In termini di applicazioni, gli obiettivi sono sintetizzabili in due tematiche di seguito specificate.

### 8.1. Bionanocompositi

Il gruppo si occuperà dello sviluppo di materiali biodegradabili come alternative sostenibili per la produzione di plastiche da combustibili fossili. In particolare l'attenzione sarà posta a compositi ottenuti da biopolimeri e nanoargille entrambi provenienti da risorse rinnovabili. Il problema generale legato allo sviluppo delle bioplastiche è la scarsa resistenza meccanica e performance tecnologiche oltre che una bassa resistenza a stress esterni. L'aggiunta di nanoargille può migliorare la stabilità termica e le proprietà meccaniche.

Saranno preparati e studiati films compositi di biopolimeri con nanotubi di allosite opportunamente caricati con agenti attivi quali antiossidanti, fungicidi e battericidi con proprietà self-healing. Questi materiali saranno studiati al fine di valutarne proprietà di interesse scientifico e tecnologico quali: 1) le proprietà tensili e reologiche mediante analisi





dinamico-meccanica (DMA); 2) proprietà di bagnabilità mediante misure di angolo di contatto statico e dinamico; 3) trasparenza ottica. Tali studi saranno affiancati da una caratterizzazione morfologica-strutturale (SEM, TEM, SANS, SAXS), spettroscopica e termodinamica (DSC, TGA). Le proprietà self-healing saranno verificate sottoponendo i materiali allo stress opportuno.

### *8.2. Nanomateriali per i Beni Culturali*

L'obiettivo è di progettare, preparare e caratterizzare dal punto di vista chimico-fisico nuovi sistemi nanostrutturati funzionali al consolidamento e la protezione a lungo termine dei Beni Culturali. Saranno prese in considerazione metodologie reversibili e materiali compatibili a basso impatto per un approccio sostenibile. L'efficacia di materiali e protocolli saranno valutati per la conservazione di reperti lignei archeologici bagnati e carta. I primi, presentano importanti problematiche di consolidamento. Infatti, i legni fortemente degradati, sono principalmente costituiti da lignina, dando al legno una consistenza spugnosa e elevata porosità con perdita di consistenza meccanica. Tali peculiarità richiedono certamente consolidanti con elevato potere penetrante, impregnante e capacità di recuperare la consistenza meccanica del manufatto. Per quanto riguarda la carta, l'aspetto più importante è la deacidificazione e la protezione a lungo termine. Anche in questo caso la struttura cava dell'allosite può essere impiegata come rinforzante e nanocontenitore per specie attive.

### **9. Fondi acquisiti**

Sostenibilità nei beni culturali: dalla diagnostica allo sviluppo di sistemi innovativi di consolidamento, pulitura e protezione (PRIN 2011, protocollo: 2010329WPF\_003) 128.687 €  
Nanotubi di argilla per la progettazione di materiali intelligenti ecosostenibili (FIRB 2012, protocollo: RBFR12ETL5) 279.326 €

PON – linea Distretti Titolo III, progetto “nanoTechnology and nanomatErials for Cultural heritAges - TECLA” (PON 03PE\_00214\_1) 500.000 €.

### **Fondi acquisibili**

Materiali naturali nanostrutturati (PRIN 2015, in fase di sottomissione) 100.000 €

- H2020-DRS-2015 (Topic: DRS-11-2015), Proposal acronym: Safe4Corium (250.000 €)





### 3. ATTIVITA' DI FISICA APPLICATA

Macroarea: FISICA APPLICATA ALLA MEDICINA, ALL'AMBIENTE E AI BENI CULTURALI

Linee di ricerca: 1) *Detection of autism's susceptibility genes overlapping the Neandertal's SNP haplotypes present in the human genome*

2) *Sviluppo di sistemi informatici esperti per il supporto alla diagnosi. Implementazione e gestione di database biomedicali*

3) *Sviluppo di sistemi di rivelazione a semiconduttore per spettroscopia ed imaging nella banda X e  $\gamma$*

4) *Tecniche fisiche integrate non invasive o micro invasive per lo studio dei Beni Culturali*

5) *Tecniche fisiche per dosimetria in radioterapia e la diagnostica tramite imaging di risonanza magnetica*

Macroarea: OSSERVATORIO DEI SISTEMI COMPLESSI

Linea di ricerca: *Osservatorio dei Sistemi Complessi*



### 1. Titolo delle linea di ricerca

DETECTION OF AUTISM'S SUSCEPTIBILITY GENES OVERLAPPING THE NEANDERTAL'S SNP HAPLOTYPES PRESENT IN THE HUMAN GENOME

2. **Responsabile:** Valentino ROMANO

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Valentino ROMANO
<b>Ricercatori</b>	Maurizio Marrale
<b>Collaboratori di enti convenzionati</b>	Francesco Calì (Associazione Oasi Maria SS., Troina)

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

LS2_10 Bioinformatics	LS2_11 Computational biology	LS2_1 Genomics, comparative genomics, functional genomics
-----------------------	------------------------------	---

### 5. Parole chiave

SNP haplotypes	Neandertal genome	autism
----------------	-------------------	--------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Department of Genetics, Harvard Medical School, Boston, MA, U.S.A.

### 7. Riassunto

Utilizzando un metodo Monte Carlo verranno ricercati nei 24 cromosomi umani tutte le istanze di sovrapposizione - statisticamente significative - tra geni di suscettibilità dell'autismo e le sequenze di DNA di Neandertal presenti nel genoma umano

### 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

L'ipotesi progettuale si basa su 2 presupposti: (a) che le sequenze di DNA di Neandertal presenti nel genoma umano (1%-4%) possano sovrapporsi con i geni di suscettibilità dell'autismo con una frequenza superiore a quella attesa sulla base di una distribuzione casuale, (b) che le mutazioni (Single Nucleotide Polymorphisms) che differenziano il DNA umano da quello di Neandertal alterino la funzione dei geni di suscettibilità dell'autismo. La conferma sperimentale di uno o entrambi i presupposti sarebbe a favore dell'idea avanzata da studi di psico-archeologia secondo i quali *Homo neandertalensis* avesse un fenotipo autistico e almeno una quota dell'autismo oggi presente nell'*Homo sapiens* derivi da Neandertal

Anno 2016

- Costruzione di una database dei geni dell'autismo dai dati presenti in letteratura
- Costruzione del programma per le simulazioni al computer

Anno 2017



Analisi Monte Carlo e identificazione dei cromosomi in cui sono state identificate le sovrapposizioni tra geni dell'autismo e aplotipi Single Nucleotide Polymorphisms (SNPs)  
Analisi funzionale *in silico* dell'effetto degli SNPs sull'espressione genica dei geni dell'autismo.

**9. Fondi acquisiti e/o acquisibili**



### 1. Titolo della linea di ricerca

SVILUPPO DI SISTEMI INFORMATICI ESPERTI PER IL SUPPORTO ALLA DIAGNOSI.  
IMPLEMENTAZIONE E GESTIONE DI DATABASE BIOMEDICALI

### 2. Responsabile

Giuseppe Raso

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Giuseppe Raso
<b>Tecnologi</b>	Donato Cascio
<b>Borsisti</b>	Salvatore Bruno, Vincenzo Taormina, Alessandro Fauci
<b>Collaboratori di aziende convenzionate</b>	Francesco Fauci, Maria Vasile

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE6_7	PE6_8	PE6_10
-------	-------	--------

### 5. Parole chiave

Medical imaging	Computer Aided Detection	Database biomedicali
-----------------	--------------------------	----------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Università EL Manar, Tunisi  
Istituto Pasteur, Tunisi  
Ospedale Charles Nicolle, Tunisi  
Ministero Sanità, Tunisia  
Ospedale Ariana, Tunisi  
Tecnopolo Sidi Thabet, Tunisi  
Tecnopolo EL Gazela, Tunisi  
Assessorato Salute Regione Sicilia  
ASP di Trapani  
Provincia di Agrigento  
Ospedale Buccheri La Ferla, Palermo  
ASP di Agrigento  
Università di Messina

### 7. Riassunto

L'accresciuta complessità dei sistemi di *medical imaging* ha reso sempre più necessario il ricorso a sistemi informatici per l'analisi delle immagini e per la gestione dei database. I Computer Aided Detection (CAD) sono sistemi di sofisticati algoritmi in grado di rilevare lesioni e patologie in immagini biomediche, con lo scopo di aiutare il medico nella diagnosi.



L'implementazione e la gestione di database di immagini biomedicali permettono l'archiviazione, la refertazione e la consultazione di metadati, l'integrazione con altri sistemi, la possibilità di effettuare studi epidemiologici e statistici anche a scopo didattico.

### **8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Il gruppo è capofila del progetto strategico A.I.D.A. finanziato dal programma ENPI IT-TU e il prof. Raso è il Coordinatore Scientifico del progetto. Il progetto ha realizzato tra l'altro il più grande database del mondo di immagini IFI per la diagnosi delle Malattie Autoimmuni e l'applicazione di Sistemi Esperti per il supporto alla diagnosi.

La tematica di ricerca del gruppo è finalizzata alle ICT applicate alla salute.

In tale ambito il problema della diagnosi delle malattie autoimmuni (MAI) presenta una rilevanza e incidenza di primaria importanza poiché correlano a Dati di incidenza malattie autoimmuni, Dati sui costi, Impatto invalidante, etc.

Per quanto riguarda il bisogno è noto che:

- molti dei test elettivi per la diagnosi delle MAI soffrono di soggettività di interpretazione, accuratezza analitica variabile, riscontro non infrequente di risultati discordanti;
- altri test sono tuttavia costosi ed in via di sviluppo e spesso non vengono inseriti nelle linee guida di riferimento;
- le linee guida diagnostiche, che cercano di massimizzare il rapporto beneficio/costo, richiederebbero delle conferme sperimentali su larga scala;
- esiste una forte esigenza di dati digitali correlati (clinici e di laboratorio) per la diagnosi delle MAI;
- esiste una forte esigenza di monitoraggio della terapia o di marcatori che individuino percorsi sempre più personalizzati.

La soluzione proposta prevede:

- l'implementazione di database, strutturati e completi, di metadati digitali per ciascun paziente (clinici e di laboratorio) sulle MAI per standardizzazione di linee guida e studio di correlazioni per nuovi protocolli;
- la validazione di sistemi Decision Support System (DSS) di ausilio diagnostico per le MAI che facciano uso di dati eterogenei (clinici e di laboratorio);
- la standardizzazione e la validazione di sistemi Computer Aided Detection performanti su tutti i substrati per IFI così da aumentarne l'efficacia in termini di sensibilità e specificità del test;
- identificazione di indicatori predittivi di danno tissutale e disfunzione di organo.

Sempre in ambito ICT applicate alla salute, il gruppo di ricerca ha presentato e presenterà progetti legati alla **Salute della donna**.

La diagnosi precoce gioca un ruolo fondamentale nella prevenzione e nella cura tempestiva dei tumori alla mammella e al collo dell'utero. La mammografia rappresenta a tutt'oggi l'esame più sicuro per ottenere una buona diagnosi del tumore al seno mentre il PAPtest è



uno strumento utile per lo screening del cancro al collo dell'utero.

È noto che, nonostante i continui progressi tecnologici relativi alla mammografia, una percentuale tra il 10-30% di tumori maligni viene diagnosticato in modo errato.

L'individuazione delle lesioni precancerose al collo dell'utero ha permesso alle donne di ricevere cure adeguate, portando a una diminuzione significativa dei tassi di incidenza e di mortalità da cancro cervicale invasivo nella popolazione sottoposta a screening. Per quanto complessivamente il PAPtest si sia dimostrato estremamente efficace nel ridurre la frequenza del cancro invasivo del collo dell'utero, come tutte le tecniche di screening presenta alcuni limiti intrinseci alla metodica.

Tutto ciò ha indirizzato la ricerca e il mercato verso l'uso di tecniche automatiche (CAD) da affiancare al medico come "secondo lettore", con il compito di fornire un supporto per una corretta diagnosi.

Il progetto intende applicare e/o sviluppare sistemi CAD per la diagnosi assistita del tumore al seno e del tumore al collo dell'utero.

In particolare, la funzionalità dei CAD sarà duplice:

- aumentare la *sensibilità*, fornendo ai software automatici di scannerizzazione delle immagini le informazioni necessarie per selezionare con alta efficienza le zone di interesse;
- aumentare la *specificità*, fornendo al medico il supporto adeguato per diminuire il tasso di falsi positivi.

## 9. Fondi acquisiti

E' in corso il progetto strategico A.I.D.A. (1.700.000 €) finanziato dal programma ENPI IT-TU (scadenza 31-12-2015) che sarà rendicontato nei primi mesi del 2016.

### Fondi acquisibili

**SC1-HCO-02-2016: Standardisation of pre-analytical and analytical procedures for in vitro diagnostics in personalised medicine. (H2020)**

Progetto da presentare in ambito ENPI IT-TU 2016-2020, sul bando per progetti strategici, sul tema: **Salute della donna.**



### 1. Titolo della linea di ricerca

SVILUPPO DI SISTEMI DI RIVELAZIONE A SEMICONDUTTORE PER SPETTROSCOPIA ED IMAGING NELLA BANDA X E  $\gamma$

### 2. Responsabile

Leonardo Abbene

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Giuseppe Raso
<b>Ricercatori</b>	Leonardo Abbene, Fabio Principato
<b>Collaboratori a Contratto</b>	Accursio Antonio Turturici

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_5	PE7_11	LS7_1
-------	--------	-------

### 5. Parole chiave

Rivelatori a semiconduttore	Spettroscopia X e $\gamma$	Imaging nella banda X e $\gamma$
-----------------------------	----------------------------	----------------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Science and Technology Facilities Council Rutherford Appleton Laboratory  
Harwell Campus Didcot, (UK)

Institute of Physics of Charles University, Prague, (Czech Republic)

Dep. de Física, Universidade de Coimbra, P-3004-516 Coimbra, Portugal

DTU Space, DK-2800 Kgs. Lyngby, Denmark

CEA Saclay, France

IMEM/CNR, Parma

Università di Parma

IASF/INAF, Bologna

IASF/INAF, Palermo

### 7. Riassunto

Nel quadro dell'X e gamma ray imaging, la comunità scientifica è in cerca di nuova strumentazione in grado di effettuare il conteggio e la discriminazione in energia di ogni singolo fotone, anche in condizioni di flusso elevato. La linea di ricerca ha come obiettivo lo sviluppo sistemi di rivelazione, in grado di fare imaging e spettroscopia ad elevata risoluzione in un'ampia gamma di energie (1-600 keV) ed in condizioni di flusso proibitive ( $> 10^6$  fotoni/mm<sup>2</sup>/s). Si proporranno elementi innovativi sia dal punto di vista dei rivelatori (semiconduttori innovativi) che dell'elettronica (digital pulse processing) per diverse applicazioni dall'imaging medicale, controlli di sicurezza, all'Astrofisica.





## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Il gruppo è capofila del progetto PRIN2012 (2014-2017) finanziato dal MIUR e il Dr. Leonardo Abbene è il Coordinatore Nazionale del progetto. Scopo della ricerca è quello di sviluppare sistemi di rivelazione avanzati, in grado di fare imaging e spettroscopia ad elevata risoluzione in un'ampia gamma di energie (1-600 keV) e soprattutto anche in condizioni di flusso proibitive ( $> 10^6$  fotoni/mm<sup>2</sup>/sec). Le attività di ricerca riguarderanno la realizzazione di un certo numero di prototipi per valutare le prestazioni (spettroscopiche e di imaging) e le possibilità di utilizzo di questa tipologia di sensore come elemento base di rivelatori per applicazioni nell'imaging medico (mammografia, tomografia computerizzata), nei controlli di sicurezza (ispezioni dei bagagli negli aeroporti), nel monitoraggio ambientale (radiazione di fondo) ed in astrofisica (rivelatore da piano focale per telescopi X). Al fine di raggiungere tale obiettivo, si proporranno elementi innovativi sia dal punto di vista dei rivelatori che dell'elettronica. I nuovi sistemi si baseranno su rivelatori a semiconduttore in CdTe e CdZnTe accoppiati ad elettronica di front-end veloce e di basso rumore e seguita da elettronica di back-end basata su nuove tecniche di digital pulse processing (DPP).

Nell'ambito delle attività di ricerca il gruppo si occuperà:

- 1) Sviluppo e caratterizzazione (elettrica e spettroscopica) di rivelatori CdTe/CdZnTe con diversi layout geometrici (planari, pixel, strip, drift) (2016-2018);
- 2) Sviluppo di elettronica di front-end in tecnologia ibrida ed ASIC (2016-2018);
- 3) Sviluppo di elettronica digitale (pulse mode) basata su tecniche di digital pulse processing (DPP) (2016-2018).

Risultati attesi

### RIVELATORI

- a) Cristalli CdTe/CdZnTe di buon grado spettroscopico, elevati valori delle proprietà di trasporto dei portatori di carica, elevata uniformità.
- b) Risoluzione energetica a temperatura ambiente: energetica  $<5\%$  a 60 keV,  $<3\%$  a 122 keV,  $<3\%$  a 500 keV.
- c) Assenza di fenomeni di polarizzazione.
- d) Buona risposta a flussi elevati ( $>10^6$  fotoni/mm<sup>2</sup> s).

### ELETTRONICA

- a) Elettronica di basso rumore ENC  $< 100$  elettroni, veloce (rise time  $< 20$  ns) e dinamica: 1-600 keV.
- b) Elettronica digitale veloce, basata su tecniche DPP, in grado di fare imaging e spettroscopia ad elevata risoluzione a rate elevati.

### PROTOTIPI

- a) Sistema per imaging spettroscopico per un range di bassa energia (1-40 keV), tipico della mammografia. Si richiede un sistema di rivelazione in grado di garantire prestazioni importanti



anche a temperatura ambiente: risoluzione energetica (FWHM)  $<10\%$  a 22.1 keV e risoluzione spaziale ( $<0.1$  mm).

b) Sistema per imaging spettroscopico per un range di energia (40-140 keV), tipico della tomografia computerizzata, di screening di sicurezza e alimentari. Si richiede un sistema di rivelazione in grado di garantire prestazioni importanti anche a temperatura ambiente: risoluzione energetica  $<5\%$  a 60 keV,  $<3\%$  a 122 keV e risoluzione spaziale  $<0.5$  mm.

c) Sistema per imaging spettroscopico per un range di energia elevato (20-600 keV), tipico delle applicazioni astrofisiche. Si richiede un sistema di rivelazione in grado di garantire prestazioni importanti anche a temperatura ambiente: risoluzione energetica  $<3\%$  a 500 keV e risoluzione spaziale  $<1$  mm.

### **9. Fondi acquisiti**

E' in corso il progetto PRIN2012 (192.222 €) finanziato dal MIUR (scadenza 07-03-2017)

P.I. Dr. Leonardo Abbene

Progetto ATE - EX60% (2012-ATE-0153), P.I. Prof. Giuseppe Raso.

### **Fondi acquisibili**

Realizzazione di un rivelatore spettroscopico di raggi gamma operante nel range 20-600 keV, con risoluzione spaziale 3D sub millimetrica, per applicazione in medicina nucleare e astrofisica. Coordinazione Nazionale: Università di Pavia (PRIN2015).



### 1. Titolo della linea di ricerca

TECNICHE FISICHE INTEGRATE NON INVASIVE O MICRO INVASIVE PER LO STUDIO DEI BENI CULTURALI

2. **Responsabile** Maria Brai

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Maria Brai
<b>Ricercatori</b>	Maurizio Marrale
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Anna Longo
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Salvatore Gallo
<b>Collaboratori di enti convenzionati</b>	Francesca Alberghina, Dorotea Fontana

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE4_3	PE5_19	SH6_12
-------	--------	--------

### Parole chiave

Beni Culturali	Analisi composizionali dei materiali	Analisi diagnostiche di
----------------	--------------------------------------	-------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Parco Archeologico Villa Romana del Casale Parco Archeologico della Villa Romana del Casale e delle aree archeologiche di Piazza Armerina e dei Comuni limitrofi, Piazza Armerina (Enna), Laboratoire du Centre de Recherche et de Restauration des Musées de France (LC2RMF), Paris - France

University of Antwerp, Department of Chemistry, Antwerp - Belgium

Centro Regionale per la Progettazione ed il Restauro – Laboratorio di Fisica – Palermo.

Galleria Regionale della Sicilia di Palazzo Abatellis – Palermo.

Dipartimento di Progettazione e Costruzione Edilizia - Università degli Studi di Palermo.

Sezione di Scienze Radiologiche, Dipartimento di Biotecnologie Mediche e Medicina Legale, Università degli Studi di Palermo.

Soprintendenza del Mare – Regione Siciliana - Assessorato Regionale BB.CC. e P.I.

Laboratorio di Micromorfologia del suolo ed analisi d'immagine, del CNR ISAFOM, Ercolano

PH3DRA Laboratory (PHysics for Dating Diagnostic Dosimetry Research and Applications),

Dipartimento di Fisica e Astronomia, Università di Catania & INFN Sezione di Catania

### 7. Riassunto

Le attività di ricerca sono focalizzate su applicazioni di tecniche spettroscopiche integrate, di tipo non o micro invasivo (XRF-LIBS) per l'analisi composizionale, e tecniche per l'analisi della porosità (NMR) finalizzate alla caratterizzazione *in situ* o in laboratorio di materiali di interesse



nel campo dei beni culturali, per lo studio archeometrico, degli aspetti relativi alla conservazione e alla comprensione dei fenomeni di degrado. Tali tematiche sono state affrontate, grazie alla collaborazione con istituti e musei, attraverso casi studio di notevole importanza storica come ad esempio i reperti delle collezioni dell'apparato musivo della Sala di Ruggero e della Cappella Palatina (Palazzo d'Orleans).

### **8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Per il prossimo triennio si intende condurre attività di ricerca in situ e in laboratorio nell'ambito della caratterizzazione tramite tecniche portatili e di tipo non o micro invasivo per l'analisi composizionale (XRF e LIBS) e strutturale (NMR, termografia e prove di risalita capillare) su materiali di interesse nel settore storico artistico con particolare riferimento a matrici vetrose, fotografiche, cartacee o pergamenee, e lapidee.

In particolare, nel 2016 verranno studiati materiali fotografici, cartacei e pergamenei. Tale linea di ricerca avrà lo scopo di ottimizzare le metodologie di analisi non invasiva per la caratterizzazione sia dei supporti di vario tipo (carta, pergamena, ecc.) e degli inchiostri, acquisendo dati su una notevole casistica riconducibili a diversi periodi e provenienze. Tale campagna analitica fornirà la possibilità di creare un *database* della produzione siciliana che definisca l'evoluzione nella produzione locale, importazione e nell'impiego dei differenti supporti, come anche della variazione delle ricette di inchiostri o pigmenti impiegati nelle iscrizioni o parti decorate, precedenti e successive alla produzione industriale. Per quanto riguarda i materiali fotografici, partendo da precedenti esperienze acquisite dal Laboratorio in tale settore, ulteriori casi saranno affrontati allo scopo di ottimizzare le procedure analitiche per la caratterizzazione dei metodi di preparazione delle carte fotografiche e delle metodiche di fissaggio, con particolare riferimento alle tecniche diffuse tra la fine dell'Ottocento e i primi decenni del Novecento.

Nel 2017 si intendono analizzare e caratterizzare materiali vetrosi. Partendo dall'analisi ed elaborazione statistica dei dati ottenuti nel corso delle estese campagne di acquisizione *in situ* sugli apparati musivi della Sala di Ruggero e della Cappella Palatina (Palazzo d'Orleans), il focus della ricerca sarà rivolto all'analisi dei cromofori di tessere vitree musive delle maestranze siciliane attive in epoca arabo-normanna e al confronto con dati scientifici ottenuti dallo studio della produzione musiva siciliana e non nel corso dei secoli, al fine di ottenere dati fondamentali per una datazione indiretta delle fasi originali, di rifacimento o restauro.

Nel 2018 verranno analizzati nel dettaglio i materiali lapidei naturali e artificiali di interesse monumentale e archeologico. In tale campo di applicazione, le attività del laboratorio saranno rivolte a massimizzare l'*iter* metodologico basato su tecniche non invasive per il controllo *in situ* dell'efficacia di trattamenti consolidanti o protettivi di tipo innovativo (basati su prodotti nanostrutturati o tecniche di bioconsolidamento), confrontando i risultati con tecniche tradizionali basate su campionamento da condurre in laboratorio. Ad esempio notevole importanza sarà rivolta al confronto tra i dati ottenuti dalla tradizionale porosimetria a



mercurio su campione e l'analisi NMR da condurre direttamente sulla superficie da indagare per la valutazione delle variazioni della porosità pre e post trattamento consolidante e/o protettivo. A tale scopo, diverse tipologie di supporto lapideo verranno prese in considerazione tra quelle riconducibili a cave storicamente utilizzate. Un aspetto significativo sarà quello della valutazione dello stato di conservazione di opere esposte all'aperto, con particolare riferimento agli stucchi o opere polimateriche.

#### **9. Fondi acquisiti**

2011/2012 commessa AMAP 15.000 €

2013 commesse: ARPA-Sicilia; TAF srl; Kriteiron snc 135.000 €

2015 commesse: Università della Tuscia; Tecno art srl 5.000 €

#### **Fondi acquisibili**

Progetto PON "DELIAS" 300.000 €

Progetto tra le Call di Horizon2020



### 1. Titolo della linea di ricerca

TECNICHE FISICHE PER DOSIMETRIA IN RADIOTERAPIA E LA DIAGNOSTICA TRAMITE IMAGING DI RISONANZA MAGNETICA

2. Responsabile Maria Brai

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Maria Brai, Antonio Bartolotta
<b>Ricercatori</b>	Maurizio Marrale, Cristina D'Oca
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Anna Longo
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Salvatore Gallo
<b>Collaboratori di enti convenzionati</b>	Giorgio Collura, Stefania Nici, Salvatore Panzeca

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE5_2	PE4_3	LS5_10
-------	-------	--------

### 5. Parole chiave

Dosimetria	Imaging di risonanza magnetica	Neuroimaging
------------	--------------------------------	--------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Dipartimento Tecnologie e Salute, Istituto Superiore di Sanità

Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Padova

Dipartimento di Chimica, Università di Pavia

Dipartimento di Energia, Università di Palermo

Dipartimento di Ingegneria Meccanica, Nucleare e della Produzione, Università di Pisa, Radiology & Biomedical Imaging Department, Yale School of Medicine, Yale University

Dipartimento di Energia, Politecnico di Milano

Dipartimento di Fisica, Università di Cagliari

Istituto Nazionale di Ricerca Metrologica

Dipartimento di Biopatologia e Diagnostica per Immagini, Università degli Studi "Tor Vergata"

Dipartimento di Biopatologia e Biotecnologie Mediche e Forensi, Università di Palermo

Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Sezioni di Catania, Genova, l'Aquila, Lecce, Laboratori Nazionale del Sud (Catania)

Istituto Bioimmagini e Fisiologia Molecolare, CNR,

Institute for Radiological Protection and Nuclear Safety, Francia

Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Germania

Helmholtz Center Munich, Germania

National Physical Laboratory, Regno Unito

### 7. Riassunto

L'attività di ricerca è finalizzata allo studio delle proprietà dosimetriche di vari sistemi a stato solido tramite risonanza paramagnetica elettronica (EPR) e termoluminescenza (TL) e di matrici gel tramite risonanza magnetica nucleare (NMR) per applicazioni in varie tecniche di radioterapia con differenti fasci di radiazione (fotoni, elettroni, protoni, ioni carbonio e





neutroni). Inoltre, vengono sviluppate tecniche di imaging di risonanza magnetica (MRI) avanzato quali diffusion kurtosis imaging (fMRI) e la risonanza magnetica funzionale (fMRI) per lo studio di patologie neurodegenerative. Questa ricerca mira a implementare nuovi metodi di analisi e di integrazione dei dati di DTI, DKI ed fMRI, al fine di approfondire i meccanismi fisiopatologici alla base del danno tissutale nelle neuropatologie.

### **8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Nel 2016 si intende quindi formulare e realizzare dosimetri EPR a stato solido, utilizzando sostanze o composti alternativi alla alanina (quali composti fenolici ed nuovi composti organici e inorganici) per specifiche applicazioni. Verranno studiate le caratteristiche dosimetriche del segnale radioindotto in seguito ad esposizione a fotoni gamma; in particolare si studierà il segnale EPR, la stabilità, la dipendenza dalla dose, la minima dose rivelabile, la riproducibilità e la valutazione delle fonti di incertezza nella valutazione della dose. Per quanto riguarda l'analisi MRI l'attività di ricerca sarà finalizzata allo sviluppo e al testing di un software di preprocessing e di postprocessing per la DKI sfruttando il GPU-computing per ottenere un'accelerazione nella ricostruzione delle immagini.

Per quanto riguarda l'analisi fMRI i principali interessi di ricerca saranno rivolti allo studio fMRI di attivazione con sequenze blood-oxygen-level-dependent (BOLD) e all'analisi delle reti dello stato di riposo (resting state fMRI: rs-fMRI). L'attività di ricerca verrà incentrata sull'ottimizzazione della pipeline di analisi rs-fMRI e sulle tecniche di elaborazione e mapping ad alta risoluzione spaziale e/o temporale.

Nel 2017 verrà studiato l'effetto dell'inclusione di nuclei ad elevata sezione d'urto per la cattura dei neutroni termici quali il gadolinio sulla sensibilità dei suddetti dosimetri EPR per fasci neutronici utilizzati in Neutron Capture Therapy (NCT). Verranno effettuati studi al variare della concentrazione di gadolinio per massimizzare la sensibilità e il rapporto segnale-rumore, pur evitando di eliminare o sensibilmente ridurre la tessuto-equivalenza dei dosimetri a causa dell'elevato numero atomico del gadolinio. I risultati sperimentali verranno confrontati con simulazioni Monte Carlo per ottenere informazioni sulla deposizione di energia dentro il volume dei dosimetri EPR. Nel campo dell'imaging diagnostico le attività del gruppo si concentreranno nell'applicazione estesa della tecnica DKI in ambito clinico per la valutazione di patologie del sistema nervoso centrale quali le ischemie, i tumori e le malattie neurodegenerative.

Nel 2018 verrà studiata la risposta di questi dosimetri EPR per fasci di protoni e di ioni carbonio utilizzati in adroterapia. Inoltre, questi dosimetri verranno caratterizzati anche con fasci di protoni prodotti tramite accelerazione con laser (laser-driven beam). Un altro obiettivo fondamentale della ricerca da svolgere riguarda uno studio accurato del segnale EPR in onda continua ed in regime impulsato per ottenere informazioni sulla struttura e sulle proprietà dei radicali. In particolare, si intende sviluppare tecniche di analisi che permettono di ottenere informazioni sul potere ionizzante e, quindi, sul linear energy transfer (LET) della radiazione





ionizzante. La differente capacità di ionizzazione e quindi il differente LET comportano infatti differenti modalità di rilascio dell'energia nel campione e, di conseguenza, differenti distribuzioni dei radicali liberi nel dosimetro. Dallo studio dei tempi di rilassamento elettronico dei radicali liberi radio-indotti si ottengono importanti informazioni sulla qualità del fascio incidente e quindi sulla distribuzione dei difetti prodotti da radiazioni ionizzanti.

Nel campo dell'imaging diagnostico le attività del gruppo si concentreranno nello studio della variazione di connettività ottenuta tramite analisi fMRI durante il tempo, dopo un particolare stimolo esterno e/o dopo la somministrazione di determinati farmaci in pazienti con patologie neurodegenerative.

### **9. Fondi acquisiti**

PRIN 2010-2011 (2010SNALEM\_003)- 139.000 €

Progetto PON DIMESA (PON02\_00451\_3361785) - 93.000 €

Progetto SOUL Integrated Project FP6-516478 - ~100.000 €

Progetto PON "Smart Health 2.0" (PON04a2\_C) - 36.000 €

Progetto FFR2012/2013 (2012ATE0392) - 5.000 €

Progetti ELIMED, NORMET e DOSSIER (INFN)

### **Fondi acquisibili**

Progetto NADIR (INFN)

Progetto PON Laboratori Pubblico-Privati "LATO" - in fase di finalizzazione

Progetto PON "Telemedicina, ambiente e salute"

Progetto PRIN2015: Titolo provvisorio "Novel 3D dosimetric and calorimetric methods for cancer therapy with ionizing and non-ionizing radiations"

Progetto tra le Call di Horizon2020



### 1. Titolo della linea di ricerca

OSSERVATORIO DEI SISTEMI COMPLESSI

2. **Responsabile** Rosario Nunzio Mantegna

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Rosario Nunzio Mantegna
<b>Professori associati</b>	Salvatore Micciché
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Christian Bongiorno Federico Musciotto
<b>Borsisti</b>	Luca Marotta

### 2. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3\_15 Statistical physics: phase transitions, noise and fluctuations, models of complex systems, etc.

### 5. Parole chiave

Econofisica	Reti complesse	Biostatistica
-------------	----------------	---------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Università Politecnica delle Marche, Ancona

Scuola Normale Superiore, Pisa

Deep Blue Roma

Kyoto University, Kyoto

University of Hyogo, Kobe

City University, London

Boston University, Boston

Niigata University, Niigata

Aalto University, Helsinki

Office of Financial Research, USA

Central European University, Budapest

Queen Mary University, London

Turku University, Turku

Boston University, Boston

East China University, Shanghai, China

### 7. Riassunto

L'Osservatorio dei Sistemi Complessi (OCS) è stata unità di ricerca di numerosi progetti nazionali ed europei. L'attività di ricerca si caratterizza per l'applicazione di metodi e tecniche



della Fisica Statistica allo studio di sistemi complessi di natura economica, sociale, biologica e fisica. Inoltre, l'OCS sviluppa tecniche di analisi statistica multivariata e di analisi e modellizzazione di reti complesse. L'attività di ricerca dell'OCS si caratterizza spesso per lo studio di grandi banche dati.

L'OCS ha una riconosciuta visibilità nell'analisi multivariata di dati finanziari e di sistemi socio-tecnici. L'OCS ha applicato diversi metodi al fine di filtrare informazioni in sistemi complessi.

### **8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Le tematiche di ricerca riguardano l'uso di concetti e metodologie dell'econofisica e delle reti complesse in:

- 1) sistemi socio-tecnici,
- 2) economico-sociali, e
- 3) biologici.

Un tema di ricerca presente in molte delle ricerche affrontate riguarda il processo di filtraggio dell'informazione presente in una rete complessa. Il processo di filtraggio viene effettuato sia su reti tradizionali rappresentabili come reti bipartite che su reti ottenute a partire da una misura di prossimità tra gli elementi considerati. Le reti filtrate si prestano meglio delle reti dense alla ricerca di strutture (gruppi o clusters) presenti nelle reti stesse (indicate come "comunità" in letteratura).

Il nostro Gruppo di ricerca per il triennio 2016-2018 ha come obiettivo quello di mantenere una produttività media di numero di pubblicazioni per anno come nel triennio precedente. Pensiamo inoltre di proseguire la ricerca di finanziamenti nazionali ed internazionali promuovendo la preparazione e sottomissione di nuovi progetti di ricerca.

Il gruppo continuerà a portare avanti un intenso processo di internazionalizzazione continuando a svolgere ricerche in collaborazioni nazionali ed internazionali ed organizzando e partecipando ad attività (congressi e scuole) di respiro internazionale. Nel triennio passato la percentuale di pubblicazioni realizzate con partner stranieri è stata del 57%. Ci proponiamo di raggiungere la stessa percentuale (o aumentarla) nel prossimo triennio. Le collaborazioni sono state instaurate con colleghi Cinesi, Finlandesi, Giapponesi, del Regno Unito, Ungheresi e degli USA. Ci proponiamo di estendere le collaborazioni a colleghi di altri paesi.

Durante l'anno 2016 ci focalizzeremo principalmente su come le procedure di filtraggio delle reti denominate "statistically validated networks" possono essere usate per valutare l'affidabilità di algoritmi di ricerca di clustering (comunità) usate nelle reti ottenute come proiezione di una rete bipartita. Tra i sistemi complessi che saranno indagati con le metodologie citate considereremo mercati azionari con infrastrutture che consentono il trading algoritmico e sistemi socio tecnici come il sistema del traffico aereo.

### **9. Fondi acquisibili**

PRIN 2015, in fase di elaborazione

Call Marie Curie H2020 con il progetto internazionale TRAINET.



#### **4. ATTIVITA' A PREVALENTE CARATTERE COMPUTAZIONALE**

Macroarea: CHIMICA COMPUTAZIONALE

Linea di ricerca: *Studio computazionale di meccanismi catalitici su cluster e superfici metalliche*

Macroarea: INTERAZIONE RADIAZIONE-MATERIA E TECNICHE COMPUTAZIONALI

Linea di ricerca: *Laser-matter interaction; computational methods and systems in Physics and Society*



### 1. Titolo della linea di ricerca

STUDIO COMPUTAZIONALE DI MECCANISMI CATALITICI SU CLUSTER E SUPERFICI METALLICHE

2. **Responsabile** Dario Duca

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Dario Duca
<b>Ricercatori</b>	Francesco Ferrante Fabrizio Lo Celso
<b>Ricercatori TD</b>	Antonio Prestianni
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Remedios Cortese
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Roberto Schimmenti

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE4-13	PE4-12	PE4-1
--------	--------	-------

### 5. Parole chiave

Teoria del funzionale della densità	Meccanismi di reazioni catalizzate	Cluster e superfici metalliche
-------------------------------------	------------------------------------	--------------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Laboratory of Industrial Chemistry and Reaction Engineering, Process Chemistry Centre, Åbo Akademi University, Åbo/Turku, Finland

Department of Biotechnology and Chemistry, Tver Technical University, Russian Federation  
Catalytic Processes and Materials group, Mesa+ Institute for Nanotechnology, University of Twente, Enschede, The Netherlands

Université Catholique de Louvain, Institut de la Matière Condensée et des Nanosciences (IMCN), Place Louis Pasteur 1, B-1348 Louvain-la-Neuve (Belgium)

### 7. Riassunto

La ricerca che il gruppo prevede di effettuare nel triennio 2016/2018 sarà esclusivamente nell'ambito della chimica computazionale, essenzialmente l'applicazione dei metodi della meccanica quantistica allo studio delle proprietà molecolari e dei processi chimici. Sarà principalmente incentrata sullo studio dei meccanismi di processi catalitici che avvengono su cluster e su superfici metalliche, nonché sull'indagine delle proprietà chimiche, chimico-fisiche e catalitiche di cluster metallici accresciuti su specifici supporti. Nell'ambito del progetto SusFuelCat, verranno indagati i meccanismi di reazioni riguardanti l'aqueous phase reforming di composti derivanti dalle biomasse.

### 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi



**1. Progetto SusFuelCat:** indagini a livello della teoria del funzionale della densità sull'energetica e sul meccanismo dei processi catalitici nell'ambito del processo di aqueous phase reforming (APR). Si porteranno a termine:

**a)** entro la fine del 2016: studio completo di tutti i meccanismi competitivi della reazione di trasformazione dell'etilenglicole in monossido di carbonio e idrogeno su un cluster di palladio, al quale si aggiungerà (entro la fine del 2017) lo studio della medesima reazione a partire dal glicerolo, ottenendo così informazioni utili per un ulteriore studio su polioli superiori (2017-2018);

**b)** entro la fine del 2016: indagine del meccanismo relativo alla frammentazione dell'1,2-propandiolo, composto usato come modello sperimentale per lo studio dell'APR, catalizzata dalla superficie (111) del platino;

**c)** entro la fine del 2016: studio dei meccanismi di isomerizzazione e deidrogenazione dell'idrossiacetone, rilevato come composto intermedio nel processo APR, su catalizzatore di platino.

**d)** 2017-2018: I processi **(b)** e **(c)** descritti sopra verranno investigati tramite modelli più dettagliati in cui verranno inclusi gli effetti della microsolvatazione da parte di molecole di acqua.

2. Entro la fine del 2016: Si porterà a termine un'indagine relativa alla nucleazione di cluster metallici omo- ed eteronucleari su un foglio di grafene dotato di un difetto. Questo studio mira alla comprensione delle caratteristiche della nucleazione e dell'accrescimento di cluster  $Ni_n$ ,  $Pd_n$ ,  $Re_n$ ,  $Pt_n$  e  $Ni_xPd_y$  e  $Re_xPt_y$  ( $x+y=n$ ) sul difetto. I cluster metallici verranno caratterizzati tramite la loro energia di nucleazione, la differenza con i corrispondenti cluster nel vuoto o semplicemente adsorbiti, e le loro proprietà magnetiche. 2017-2018: La ricerca in quest'ambito procederà verso indagini delle medesime proprietà su altri tipi di supporto e verso la determinazione della possibilità di utilizzare i cluster bimetallici supportati per processi catalitici.

3. Entro la fine del 2017: Come naturale estensione di una ricerca computazionale inquadrata nell'ambito della catalisi metal-free, si indagherà il meccanismo della riduzione completa del nitrobenzene ad anilina ad opera dell'idrogeno frammentato su un nanotubo di carbonio contenente difetti piridinici.

Saranno altresì investigati

2. 2017-2018: In un ambito prettamente più teorico, si intende valutare la possibilità di applicare metodologie coupled cluster ad alto grado di eccitazione (CCSDT, CCSDTQ, ...) nonché metodi a multiriferimento (MRCCSD) per il calcolo accurato delle proprietà spettroscopiche di molecole di interesse astrochimico. In particolare, si valuteranno le loro prestazioni per la trattazione di sistemi radicalici e anionici, la cui caratterizzazione in termini di struttura elettronica è ancora oggi una sfida. Negli spettri elettronici si cercherà inoltre di introdurre l'accoppiamento spin-orbita



tramite trattazione relativistica a quattro componenti (metodi basati sul formalismo dello spazio di Fock).

### **9. Fondi acquisiti**

Progetto SusFuelCat - "Sustainable fuel production by aqueous phase reforming understanding catalysis and hydrothermal stability of carbon supported noble metals" GA: CP-IP 310490 - 461.315 €





### 1. Titolo della linea di ricerca

LASER-MATTER INTERACTION; COMPUTATIONAL METHODS AND SYSTEMS IN PHYSICS AND SOCIETY

1. **Responsabili:** Pietro Paolo Corso, Emilio Fiordilino

### 2. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Emilio Fiordilino
<b>Ricercatori</b>	Pietro Paolo Corso
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Gianluca Zangara
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Dario Cricchio, Biagio Frusteri

### 3. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_8	PE3_8	PE2_15
-------	-------	--------

### 4. Parole chiave

Strong fields	Nanotechnology	Cloud Computing	Big Data
---------------	----------------	-----------------	----------

### 5. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

DEIM – Università di Palermo

Nano-Bio Spectroscopy Group and ETSF Scientific Development Center, Departamento de Física de Materiales, Universidad del País Vasco UPV/EHU, San Sebastian, Spain  
Ophthalmology and Advanced Laser Medical Center, Saitama Medical University, Saitama 350-0495, Japan

General Physics Institute of Russian Academy of Science

### 6. Riassunto

1) Studieremo l'interazione di forti campi laser con atomi, molecole e materiali nanostrutturati con metodi analitici e numerici. Particolare attenzione è data allo studio della generazione di armoniche di alto ordine. 2) Studieremo lo sviluppo di sistemi computazionali innovativi (tecnologie di Cloud Computing e Sistemi di Big Data Analytics) e la loro applicazione a problemi tratti dalla vita quotidiana, in particolare dal mondo della sanità elettronica e delle Smart Cities

### 7. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

1) Nel triennio 2016-2018 concentreremo il nostro studio sull'interazione di forti campi elettromagnetici con macro molecole quali fullerene, grafene, nanotubi e nanoconi. La motivazione è sia di tipo fondamentale sia di tipo applicativo. Forti campi elettromagnetici interagendo con la materia danno origine a nuovi fenomeni che vanno compresi per poter poi essere applicati nello sviluppo tecnologico; fra questi nuovi fenomeni ha grande importanza la generazione di armoniche di alto ordine, in cui la materia diviene sorgente di radiazione



coerente ad alta frequenza con caratteristiche simili a quelle della luce laser e, quindi, sfruttabile. L'origine della generazione si trova nell'interazione non lineare fra campi e materia. Il processo è dunque la base per la comprensione di processi non lineari; notevole è l'osservazione che tali processi possono costituire il punto di contatto fra fisica quantistica e caos. In particolare nel 2016 intendiamo studiare la generazione di armoniche da parte di anelli quantistici strutturati (SQR) che promettono emissione efficiente di radiazione d'alta frequenza; mettere a punto nuove tecniche numeriche nell'ambito della teoria del funzionale densità (DFT); la ricerca nel biennio successivo vedrà l'applicazione dei metodi a nuovi substrati quali fullerene funzionalizzato, SF<sub>6</sub> e a grafene di dimensione mesoscopica.

2) Il gruppo di ricerca sarà altresì coinvolto in attività che riguardano lo sviluppo di sistemi a supporto della sanità elettronica, quali il Fascicolo Sanitario Elettronico di seconda generazione, e delle Smart Cities, con specifico riferimento al PON Metro Palermo. Si prevede di utilizzare l'expertise maturato negli anni trascorsi per implementare innovative infrastrutture di calcolo basate sul paradigma del Cloud Computing, in particolare investigando lo sviluppo di tecnologie di Cloud Federation. Si prevede altresì di utilizzare le tecnologie di Big Data Analytics come strumenti di supporto alle decisioni in svariati ambiti della vita sociale, in particolare nell'ambito delle Smart Cities.

#### **9. Fondi acquisiti**

Progetto PON Smart Cities "ADAPT" (Unipa: 834.777 €)

#### **Fondi acquisibili**

Progetto PON Laboratori Pubblico-Privati "LATO" – in fase di finalizzazione

Progetto Piano Nazionale di Ricerca Militare – PNRM – "Nuove Tecnologie di Virtualizzazione per la Difesa" – in fase di valutazione



## 5. ATTIVITA' A PREVALENTE CARATTERE TEORICO

Macroarea: FISICA TEORICA INTERDISCIPLINARE

Linea di ricerca: *Fisica teorica interdisciplinare*

Macroarea: MECCANICA E TERMODINAMICA QUANTISTICA

Linea di ricerca: *Meccanica e termodinamica quantistica*

Macroarea: OTTICA ED ELETTRODINAMICA QUANTISTICA

Linee di ricerca: 1) *Elettrodinamica quantistica e forze di Casimir*  
2) *Quantum correlations of identical particles*

Macroarea: TECNOLOGIE E PROCESSI QUANTISTICI

Linea di ricerca: *Tecnologie e processi quantistici*



### 1. Titolo della linea di ricerca

FISICA TEORICA INTERDISCIPLINARE

### 2. Responsabile Bernardo Spagnolo

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Bernardo Spagnolo
<b>Ricercatori</b>	Davide Valenti
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Angelo Carollo – Ekaterina I. Anashkina (Int. PhD in Physical Sciences); Irina A. Balakhnina – Claudio Guarcello – Luca Magazzù (Int. PhD in Applied Physics)
<b>Collaboratori di enti convenzionati</b>	Giovanni Denaro (CNR) – Alexander A. Dubkov (Lobachevsky State University of N. Novgorod)

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE3_15 Fisica Statistica: Transizioni di Fase, Rumore e Fluttuazioni, Modelli di Sistemi Complessi, etc.	PE3_6 Fenomeni Quantistici Macroscopici: Superconduttività, etc.	PE3_16 Fisica di Sistemi Biologici
--	--	------------------------------------

### 5. Parole chiave

Meccanica Statistica fuori dall'equilibrio e Metastabilità in Sistemi Classici e Quantistici	Dinamica di Popolazioni e Effetti indotti dal Rumore in Sistemi Classici e Quantistici	Criticalità Quantistica e Effetti Topologici in Sistemi a Molti Corpi.
--	--	--

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Dipartimento di Fisica, Università di Catania

NEST, Istituto Nanoscienze-CNR and Scuola Normale Superiore, Pisa

CNR – Istituto per l'ambiente marino costiero (IAMC) – Capo Granitola (Mazara del Vallo)

Dipartimento di Scienze Veterinarie, Università di Messina

Physics Department and International Laser Center, Lomonosov State University of Moscow, Russia

Radiophysics Department, Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Russia

Institut für Physik, Universität Augsburg, Augsburg, Germany

Physics Department, Humboldt University, Berlin, Germany

Institute for Theoretical Physics, University of Regensburg, Regensburg, Germany

Institute of Physics, Karlsruhe Institute für Technologie (KIT), Karlsruhe, Germany

Marian Smoluchowski Institute of Physics, Jagellonian University, Mark Kac Complex Systems Research Center, Krakow, Poland



Institut of Environmental Systems Research, School of Mathematics, Universität Osnabrück, Germany

## 7. Riassunto

Meccanica statistica di non equilibrio e fisica dei sistemi complessi in contesti interdisciplinari. Metastabilità e fenomeni di rilassamento non lineare in sistemi fuori dall'equilibrio, in presenza di sorgenti di rumore Gaussiano e non Gaussiano.

Fenomeni indotti dal rumore e dinamica di rilassamento in sistemi quantistici aperti e in giunzioni Josephson (JJ), anche con grafene. Metastabilità Quantistica. Dinamica di solitoni in presenza di rumore. Trasporto di elettroni in semiconduttori.

Transizioni di fase in Sistemi Quantistici Dissipativi a molti corpi. Modelli teorici per la superconduttività non convenzionale.

Modelli stocastici di ecosistemi, dinamica batterica e neuronale, crescita cancerogena, traslocazione di polimeri e mercati finanziari.

## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

### 2016.

5. Studio della dinamica transiente di una JJ fuori dall'equilibrio, in presenza di sorgenti esterne di rumore non Gaussiano (Lévy o dicotomiche). Analisi delle dinamiche solitoniche all'interno della JJ e statistica dei tempi di transizione dalla fase superconduttiva alla fase resistiva.
6. Sviluppo di un modello deterministico per le dinamiche di crescita delle popolazioni batteriche responsabili del deterioramento di vari prodotti alimentari. L'approccio utilizzato sarà basato su sistemi di equazioni generalizzate di Lotka-Volterra.
7. Sviluppo di un modello deterministico bidimensionale per la dinamica spazio-temporale di più popolazioni di fitoplancton, interagenti in modo indiretto e in competizione per le risorse energetiche. Approccio basato su un "advection-diffusion-reaction model".
8. Studio dell'effetto combinato delle fluttuazioni termiche e quantistiche sul tempo di fuga dallo stato metastabile di un sistema quantistico bistabile asimmetrico in presenza di una forzante esterna periodica. Analisi del fenomeno di "quantum noise enhanced stability".
9. Studio e caratterizzazione di transizioni di fase quantistiche in sistemi stazionari fuori dall'equilibrio, mediante l'uso di tecniche di meccanica quantistica fondamentale, relative alle fasi geometriche e topologiche. Sviluppo di un modello di reticolo fermionico costituito da una catena traslazionalmente invariante, accoppiata con un bagno Markoviano. Si considererà una dinamica puramente dissipativa, in cui l'accoppiamento con il bagno è lineare nell'operatore fermionico.

### 2017.

1. Studio del trasporto di calore tramite solitoni in dispositivi Josephson.
2. Validazione del modello mediante confronto delle curve teoriche con quelle sperimentali



di crescita batterica. Determinazione dei parametri biologici e ambientali.

3. Messa a punto di un modello stocastico bidimensionale, attraverso l'introduzione di sorgenti di rumore moltiplicativo. Analisi degli effetti del rumore Gaussiano bianco e colorato. Confronto dei dati teorici e con quelli sperimentali.
4. Studio delle proprietà di trasporto in regime quantistico e in presenza di dissipazione, mediante l'investigazione della dinamica e termodinamica quantistica in classi di sistemi in cui il trasporto avviene per effetto tunneling, come per esempio *quantum point contacts* in regime normale o superconduttivo e *quantum dots*.
5. Analisi della struttura di "pairing" nei modelli di Hubbard per la superconduttività ad alta temperatura, detta anche non convenzionale, e delle proprietà specifiche di tali modelli mediante nuove prospettive teoriche e nuovi approcci numerici.

## 2018.

1. Studio della creazione e evoluzione di *breathers* in JJ lunghe in presenza di una opportuna eccitazione esterna, anche stocastica. Investigazione dell'effetto del rumore sulla creazione e sul tempo medio di vita dei *breathers*.
2. Sviluppo di un modello stocastico moltiplicativo. Analisi degli effetti del rumore bianco e colorato sulle crescite batteriche. Confronto tra dati teorici e sperimentali.
3. Estensione del modello al caso tridimensionale, dopo previa calibrazione dei parametri biologici e ambientali, per una descrizione ancor più realistica dell'ecosistema marino.
4. Studio delle relazioni di *fluttuazione-dissipazione* in sistemi con trasporto quantistico, in cui le fluttuazioni quantistiche sono date da ambienti elettronici a temperatura finita, accoppiati a sistemi di misura in contatto con ambienti dissipativi e controllati da campi esterni variabili.
5. Investigazione di modelli teorici per isolanti topologici bidimensionali e tridimensionali, ed anche superconduttori topologici. Per questi ultimi, investigazione del ruolo dei fermioni di Majorana.

## 9. Fondi acquisiti

PON 02004513362121: "Sviluppo di una pesca siciliana sostenibile e competitiva attraverso l'innovazione tecnologica - PESCA TEC - 81.416 €

PON 02004513361909: "Utilizzo integrato di approcci tecnologici innovativi per migliorare la shelf-life e preservare le proprietà nutrizionali di prodotti agroalimentari - SHELF-LIFE" - 205.000 €

PON 02003553391233: "Tecnologie per l'ENERGIA e l'Efficienza energetica - ENERGETIC"

### Fondi acquisiti acquisibili

PON - Distretto Tecnologico Agro-Bio-Pesca

PON - Distretto Tecnologico micro- nano- Sistemi

PRIN 2015, in fase di sottomissione



### 1. Titolo della linea di ricerca

MECCANICA E TERMODINAMICA QUANTISTICA

2. **Responsabile** Antonino Messina

### 3. Partecipanti

<b>Professori ordinari</b>	Antonino Messina
<b>Professori associati</b>	Anna Napoli
<b>Ricercatori</b>	Marina Guccione, Benedetto Militello

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_10	PE3_10	PE2_14
--------	--------	--------

### 5. Parole chiave

Sistemi Quantistici Aperti	Circuiti Superconduttori	Termodinamica Quantistica
----------------------------	--------------------------	---------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Department of Physics, Sofia University, Sofia (Bulgaria)

Physical Institute, Moscow (Russia)

Moscow Institute of Physics and Technology

Dipartimento di Fisica, Università di Roma "Tor Vergata"

Institute of Physics, Nicolaus Copernicus University, Torun (Polonia)

Université Bourgogne Franche-Comté, Dijon Cedex, Francia

Department of Physics, Waseda University, Tokyo, Giappone

Università Federale di Brasilia, Brasile

Università Federale di Punta Grossa, Brasile

Université de Franche-Comté, Besançon, Francia

### 7. Riassunto

L'attività di ricerca pianificata approfondisce quella sviluppata negli anni precedenti nei seguenti ambiti: Dinamiche quantistiche generate da Hamiltoniane dipendenti dal tempo; Sistemi Quantistici Aperti; Termodinamica Quantistica. In particolare si investigherà sui seguenti problemi: individuazione e risoluzione di nuovi modelli hamiltoniani dipendenti dal tempo di interesse sperimentale; analisi del comportamento di un dato sistema al confine tra sollecitazione adiabatica e non adiabatica; analisi delle correlazioni quantistiche in specifici sistemi aperti anche nel caso di hamiltoniane dipendenti dal tempo; progettazione di una nuova classe di dispositivi superconduttivi digitali per la realizzazione di computazione quantistica a bassa dissipazione energetica ed alta efficienza.

### 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

L'attività di ricerca che si intende sviluppare nel triennio 2016-2018 riguarda i seguenti ambiti:





1. Dinamiche quantistiche generate da Hamiltoniane dipendenti dal tempo,
2. Sistemi Quantistici Aperti: aspetti generali e specifiche applicazioni,
3. Termodinamica Quantistica,

e si prefigge di arricchire il quadro di risultati sin qui conseguiti dal gruppo anche avvalendosi di varie collaborazioni con gruppi nazionali ed internazionali. La risoluzione analitica esatta della dinamica quantistica generata da Hamiltoniane dipendenti dal tempo riveste un interesse di tipo fondamentale diventando altresì un effettivo arricchimento se la relativa trattazione può essere esportata, sotto il profilo del metodo, alla risoluzione dell'equazione di Schrodinger dipendente dal tempo di classi ben individuate di situazioni fisiche in cui l'energia non si conserva. La spinta a tale tipo di investigazioni nasce anche dalla richiesta del mondo tecnologico, basato su dispositivi quantistici, di una sempre più elevata capacità di controllo sui sistemi, generalmente realizzata mediante l'applicazione di campi esterni dipendenti dal tempo. Nel corso del 2016 saranno approfonditi idee e metodi messi a punto in tale ambito dal gruppo negli anni precedenti. In particolare si cercheranno nuovi modelli hamiltoniani dipendenti dal tempo, di interesse sperimentale, esattamente risolubili. Al tempo stesso si indagherà il comportamento di un dato sistema al confine tra sollecitazione adiabatica e non adiabatica cercando di portare alla luce situazioni fisiche realistiche in cui tale confine potrebbe addirittura essere assente. Per quanto riguarda il secondo tema i risultati conseguiti dal gruppo in tempi recenti riguardano la determinazione e la risoluzione analitica e/o numerica di master equation descriventi sistemi quali catene di spin o modi bosonici accoppiati a bagni markoviani o no, fermionici o bosonici. Infine, in collaborazione col Dr. Pier Paolo Corso, si intende utilizzare metodi e strumenti tipici della meccanica quantistica e della teoria dell'informazione quantistica per lo studio di *Big Data Systems*.

Nel secondo anno ci proponiamo di sviluppare lo studio di specifici problemi in quest'ambito che naturalmente non è disgiunto da quello precedente e offre l'occasione di approfondire le competenze del gruppo sulle idee e sui metodi generali della teoria dei sistemi quantistici aperti anche nel caso di hamiltoniane dipendenti dal tempo. Si prevede infine di raggiungere risultati maturi nell'ambito della terza tematica nel corso dell'ultimo anno. Le investigazioni pianificate mirano ad approfondire il ruolo giocato dalle leggi della termodinamica in ambito microscopico e di conseguenza a contribuire allo sforzo in atto per l'attribuzione del corretto significato a concetti di base quali per esempio quelli di lavoro e calore. La ricerca di una chiave interpretativa universale che consenta di individuare nei comportamenti dinamici caratterizzanti il mondo microscopico inequivocabili impronte riconducibili ad un contesto termodinamico è un tema di grande attrattività concettuale e di indiscutibile interesse anche applicativo nel controllo di dispositivi la cui operatività è basata sulle leggi della meccanica quantistica. L'obiettivo che si intende perseguire nel 2018 consiste in particolare nella progettazione di una nuova classe di dispositivi superconduttivi digitali che traghetti la computazione quantistica verso prestazioni che consentano di coniugare bassa dissipazione



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PALERMO

DIPARTIMENTO DI FISICA E CHIMICA  
DiFC

energetica ad una sempre più alta efficienza.

### **9. Fondi acquisibili**

- Progetto PRIN 2015 su temi legati alla superconduttività, in fase di elaborazione



### 1. Titolo della linea di ricerca

ELETTRODINAMICA QUANTISTICA E FORZE DI CASIMIR

2. **Responsabile** Roberto Passante

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Roberto Passante
<b>Ricercatori</b>	Lucia Rizzuto
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Wenting Zhou (Post-Doc da Gennaio 2016)
<b>Collaboratori esterni</b>	Salvatore Spagnolo, Margherita Lattuca, Antonio Noto

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_1	PE2_7	PE2_10
-------	-------	--------

### 5. Parole chiave

Forze di Casimir e Casimir-Polder.	Optomeccanica quantistica	Assioni e materia oscura
------------------------------------	---------------------------	--------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Center for Quantum Complex Systems, The University of Texas at Austin, USA;  
Department of Physical Science, Osaka Prefecture University, Osaka, Japan;  
Laboratoire Charles Coulomb, Université Montpellier 2, Montpellier, France;  
Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Germany;  
Graduate School of Interdisciplinary Research, University of Yamanashi, Kofu, Japan;  
Max Planck Institute for the Science of Light, Erlangen, Germany;  
Aix-Marseille Université, Centre de Physique Théorique, Luminy, Marsiglia, Francia;  
INFN, Legnaro (Padova), Italy;  
Dipartimento di Fisica, Università di Padova, Italy;  
STMicronics, Catania Italy.

### 7. Riassunto

Obiettivo dell'attività di ricerca che sarà svolta nel triennio 2016/18 è lo studio teorico di vari fenomeni connessi alle proprietà quantistiche del campo elettromagnetico e alla sua interazione con la materia. In particolare, l'attività di ricerca riguarderà lo studio di processi radiativi in ambienti strutturati (cristalli fotonici), forze di Casimir statiche e dinamiche, optomeccanica quantistica. Altra attività di ricerca, in collaborazione con l'INFN, riguarderà lo studio di sistemi atomici e molecolari intrappolati in matrici di neon solido (transizioni magnetiche Zeeman, effetti cooperativi in sistemi atomici intrappolati), e la loro interazione con gli assioni cosmologici.

### 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi



L'attività di ricerca, a carattere teorico, si colloca nell'ambito della elettrodinamica quantistica con rilevanza anche per la fisica della materia condensata e la teoria quantistica dei campi.

Specificatamente, l'attività di ricerca che sarà svolta nel triennio 2016-2018 riguarderà lo studio di alcuni fenomeni connessi alle proprietà quantistiche del campo elettromagnetico, quali le proprietà delle fluttuazioni quantistiche di punto zero del campo elettromagnetico, le forze di Casimir e di Casimir-Polder in situazioni sia statiche che dinamiche, i processi radiativi in ambienti strutturati (quali cristalli fotonici, statici e dinamici, cavità e guide d'onda). Una parte dell'attività di ricerca sarà svolta in collaborazione con l'INFN nell'ambito del progetto AXIOMA riguardante la possibilità di rivelare sperimentalmente assioni cosmologici (materia oscura).

**Nel primo anno**, l'attività di ricerca riguarderà: studio di processi radiativi (ad esempio l'emissione spontanea di atomi o quantum dots, le interazioni interatomiche, l'energy transfer) in ambienti strutturati quali cristalli fotonici statici o dinamici, con l'obiettivo di comprendere come la presenza di un ambiente strutturato (che può anche variare dinamicamente) modifica l'emissione spontanea di un atomo o l'interazione risonante fra atomi; interazione di Casimir-Polder dinamica fra atomi o fra atomi e oggetti macroscopici, quando uno dei parametri fisici del sistema (frequenza di transizione atomica, posizione dell'atomo, etc) cambia nel tempo in modo non adiabatico o quando gli oggetti sono posti in moto; effetto Unruh e effetto Casimir dinamico.

**L'attività di ricerca del secondo anno** riguarderà: studio di sistemi atomici e molecolari intrappolati in matrici di neon solido, le transizioni magnetiche tipo Zeeman e gli effetti cooperativi in sistemi atomici intrappolati e irradiati tramite laser, al fine di rivelare gli assioni, particelle che si ipotizza possano costituire la materia oscura (tale attività di ricerca rientra nell'ambito del progetto AXIOMA con l'INFN); si studieranno inoltre ulteriori aspetti connessi all'interazione di risonanza fra atomi, in particolare il trasferimento coerente di energia (energy transfer) fra atomi immersi in ambienti strutturati, al fine di mostrare se è possibile controllare (inibire o attivare) il trasferimento di energia fra atomi; forze di Casimir e fluttuazioni quantistiche in cavità con pareti mobili.

**Nel terzo anno** di attività si approfondirà ulteriormente lo studio delle proprietà radiative (quali ad esempio il Lamb-shift di atomi) in presenza di ambienti strutturati dinamici. Altri aspetti che si intende investigare riguardano gli effetti Casimir e Casimir-Polder dinamici, per esempio l'interazione dinamica fra atomi ed una parete oscillante e la relazione con sistemi optomeccanici. Si intende anche affrontare lo studio di processi radiativi in regime di forte accoppiamento.

## 9. Fondi acquisiti

Progetto INFN Axioma "Development of Spectroscopy techniques on cold system for the detection of Cosmological Axions" (24000 € per il triennio 2016-2018)

CoRI 2013 con l'Università Montpellier 2, Montpellier, Francia -1400 €



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PALERMO

DIPARTIMENTO DI FISICA E CHIMICA  
DiFC

CoRI 2014 con il Department of Physical Science, Osaka Prefecture University, Osaka, Japan - 2100 €).

**Fondi acquisibili**

Progetto Daad in collaborazione con il Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, Germany.

Controlling and tailoring radiative processes through dynamical structured environments PRIN 2015

Fondazione J. Schwinger (USA)

Fondazione Simons (USA)

Progetti EU.



### 1. Titolo della linea di ricerca

QUANTUM CORRELATIONS OF IDENTICAL PARTICLES

2. **Responsabile:** Giuseppe Compagno

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Giuseppe Compagno
<b>Ricercatori TD</b>	Rosario Lo Franco (DEIM, Università di Palermo)

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_7 Atomic, molecular physics	PE2_10 Quantum optics and quantum information	PE2_16 General physics
---------------------------------	---	------------------------

### 5. Parole chiave

Identical particles	Quantum correlations	Open quantum systems
---------------------	----------------------	----------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Parte della ricerca proposta sarà sviluppata in collaborazione con alcuni gruppi nazionali ed internazionali aventi competenze teoriche e sperimentali attinenti al progetto di ricerca, di seguito elencati:

University of Nottingham, UK

University of Science and Technology of China, Hefei, China

IFSC Universidade de São Paulo, São Carlos, Brazil

Università di Roma La Sapienza, Italy

Università di Messina, Italy

Università di Modena e Reggio Emilia

### 7. Riassunto

In meccanica quantistica esiste un problema aperto sulla relazione tra correlazioni quantistiche di sistemi a molti corpi e la natura delle particelle, bosoni o fermioni, che ostacola la comprensione generale e l'utilizzo di sistemi quantistici composti. Motivato dalla necessità di risolvere questo problema fondamentale, il piano di ricerca si propone di fornire una nuova teoria unificante per la descrizione generale delle proprietà quantistiche dei sistemi di particelle identiche (bosoni e fermioni) e di fornire nuovi sviluppi per la loro applicazione in tecnologie quantistiche.



## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

In un periodo di tre anni, la ricerca verterà su tre obiettivi principali, uno per anno, come segue.

**Obiettivo 1 (2016):** *Creazione di una teoria unificante per quantificare le proprietà quantistiche delle particelle identiche.* Un primo passo sarà la quantificazione completa di proprietà quantistiche per sistemi di particelle identiche (bosoni e fermioni). Nonostante i continui contributi della comunità scientifica nel trovare misure di correlazioni quantistiche per particelle distinguibili, molto lavoro resta da fare per una trattazione completa di risorse quantistiche valida per particelle di qualsiasi natura. Durante il primo anno (2016), sarà fornita una teoria unificata per determinare le correlazioni quantistiche dei sistemi di molte particelle. Basandosi su un primo lavoro presentato da Rosario Lo Franco e Giuseppe Compagno sviluppato per due particelle identiche [[arXiv:1511.03445](https://arxiv.org/abs/1511.03445)], entanglement, discord e disuguaglianze di Bell saranno determinate, tramite nozioni comunemente utilizzate in teoria quantistica, per particelle identiche vicine dove la loro sovrapposizione spaziale deve essere considerata. Questa trattazione aprirà la strada ad una più profonda comprensione e un maggiore sfruttamento delle risorse quantistiche in sistemi composti, secondo gli altri due obiettivi seguenti.

**Obiettivo 2 (2017):** *Dinamica e controllo di particelle identiche.* I sistemi quantistici realistici sono aperti e interagiscono con l'ambiente circostante, che porta normalmente a decadimento di tutte le proprietà quantistiche. Conoscere la dinamica di un sistema multiparticellare è fondamentale per valutare la robustezza delle risorse quantistiche contro il rumore. La ricerca pianificata apre nuovi scenari di indagine in questo contesto. Saranno studiati ambienti tipici per particelle identiche in diverse situazioni in cui esse possono sovrapporsi, dalla elettrodinamica quantistica circuitale (cQED) allo stato solido e materia condensata. Oltre agli effetti ambientali distruttivi, saranno determinate condizioni in cui il rumore può aiutare a preservare le caratteristiche quantistiche. Questa ricerca indagherà anche l'effetto del rumore classico su sistemi realistici di particelle identiche (e.g., rumori a bassa frequenza e telegrafici a stato solido). Sarà analizzata la possibilità di controllare e proteggere sistemi a molti qubit tramite dispositivi classici, come campi random e campi magnetici. I risultati attesi forniranno nuove informazioni sul comportamento temporale delle correlazioni quantistiche e la loro resistenza al rumore in sistemi realistici.

**Obiettivo 3 (2018):** *Estrazione e schemi di rilevazione.* Conoscere le potenzialità pratiche dei sistemi di particelle identiche nella loro interezza è essenziale per il loro sfruttamento in processi di informatica quantistica. A tale scopo, la sovrapposizione delle funzioni d'onda delle particelle sarà considerata come un parametro supplementare di risorsa quantistica. Procedure di estrazione di entanglement, finora limitate a particelle nello stesso sito, saranno estese alle geometrie più generali di funzioni d'onda per la trasmissione di risorse quantistiche di particelle identiche e consentirne il loro uso in protocolli quantistici. Questi risultati forniranno anche informazioni per raffinare le interpretazioni di recenti esperimenti, per esempio quelli





sul Cooper-pair splitting da quantum dot di grafene. Apparatı sperimentali di ottica quantistica saranno progettati per rilevare la peculiarità della dipendenza dell'entanglement dalla sovrapposizione di funzioni d'onda.

### 9. Fondi acquisibili

Il gruppo di ricerca composto da Giuseppe Compagno e Rosario Lo Franco, del Dipartimento di Energia, Ingegneria dell'Informazione e Modelli Matematici (DEIM), è coinvolto nella proposta di due progetti in attesa di finanziamento, i cui risultati saranno noti entro il prossimo anno (2016). I progetti sono:

- **PRIN 2015**, in fase di sottomissione
- **ERC Starting Grant 2016**. Programma quadro: HORIZON 2020 – Excellence Science (ERC-2016-STG). Il Dr. Rosario Lo Franco ha applicato per un ERC starting grant project di 5 anni come principal investigator con un piano di ricerca collegato a quello qui descritto. Il titolo di questo progetto è: *New developments for the physics of quantum identical particles* (NEWQUID). Il costo totale richiesto è 853.196 €.



**1. Titolo della linea di ricerca** TECNOLOGIE E PROCESSI QUANTISTICI

**2. Responsabile** Gioacchino Massimo Palma

**3. Partecipanti**

<b>Professori associati</b>	Gioacchino Massimo Palma
<b>Ricercatori</b>	Francesco Ciccarello
<b>Assegnisti di ricerca</b>	Tony Goerge John Apollaro (CNR – NANO -NEST)
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Federico Lombardo
<b>Collaboratori esterni</b>	Salvatore Lorenzo

**4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)**

PE2_7 Atomic, molecular physics	PE2_10 Quantum optics and quantum information	PE2_8 Ultra-cold atoms and molecules
---------------------------------	---	--------------------------------------

**5. Parole chiave**

Quantum Technologies	Quantum correlations	Open quantum systems
Bose Einstein Condensates	Optomechanical systems	Quantum Information Theory
Quantum Thermodynamics	Cavity QED	

**6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca**

Queen's University Belfast, UK

Clarendon Laboratory, Oxford, UK

Center for Quantum Technologies, National University of Singapore

Turku University, Finland

Scuola Normale Superiore

Università di Milano

Università di Pisa

ICTP Trieste

Università di Roma La Sapienza

Università della Calabria

**7. Riassunto**

L'attività di ricerca del gruppo di tecnologie e processi quantistici è focalizzata sullo studio di processi e fenomeni quantistici su scala microscopica e mesoscopica con particolare interesse per il loro impatto sui processi di codifica e trasmissione dell'informazione e sulla efficienza di macchine e cicli termodinamici. Più in generale il nostro gruppo si occupa del controllo della dinamica quantistica coerente. La ricerca si articola sia in termini generali – che prescindono



dallo specifico sistema quantistico in esame – che in riferimento a specifici sistemi, quali i gas degeneri ultrafreddi (condensati di Bose Einstein) sistemi optomeccanici, arrays di microcavità.

### **8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi**

Nel primo anno, si indagheranno dinamiche quantistiche non-Markoviane di un atomo accoppiato a una guida d'onda con legge di dispersione lineare in presenza di uno specchio nel regime di non-trascurabili effetti di ritardo della luce. In particolare: si metterà a punto una tecnica per descrivere processi di scattering a singolo fotone in presenza di puro defasamento e si calcoleranno la mappa dinamica atomica, le equazioni che la governano e misure di non-Markovianità in un processo di scattering. Verrà studiata l'ingegnerizzazione di hamiltoniane chirali mediante interazioni a cascata in modelli collisionali in grado di descrivere l'accoppiamento unidirezionale di sistemi atomici con guide d'onda unidirezionali. Particolare attenzione e verrà posta ad effetti di emissione cooperativa ed alla comparsa di correlazioni a lungo range. Verranno inoltre analizzati gli effetti della localizzazione di Anderson sulla markovianità dei processi di emissione di singola eccitazione in arrays di microcavità accoppiate.

Nel secondo e terzo anno, studieremo dinamiche a due fotoni di un atomo accoppiato a una guida d'onda a banda finita. Si analizzeranno in particolare: stati vestiti atomo-fotone bound con lo scopo di dedurre un potenziale effettivo fotone-fotone e stati semi-bound (che danno luogo a fenomeni di scattering con possibilità di intrappolamento di un singolo fotone). Si metterà a punto una tecnica di descrizione basata sull'operatore di Green e un modello bosonizzato effettivo. Verranno utilizzati modelli collisionali per analizzare violazioni della legge di Crook che lega fluttuazioni di grandezze termodinamiche di fuori equilibrio con le proprietà di equilibrio di un sistema termodinamico. Si tenterà di mettere in relazione le potenziali violazioni con la comparsa di correlazioni non locali e possibilmente con la comparsa di una dinamica non markoviana. Inoltre verrà continuato lo studio di sistemi chirali quantificando la comparsa di transizione di fasi dinamiche nella statistica dei jumps della dinamica quantistica irreversibile del sistema.

### **9. Fondi acquisiti**

2014–2016 Seventh Framework Programme Collaborative Project TherMiQ: Thermodynamics of Mesoscopic Quantum Systems (NEST CNR -NANO)

2013–2015 PRIN 2010/11 Fenomeni quantistici collettivi: dai sistemi fortemente correlati ai simulatori quantistici (69.000 €)

### **9. Fondi acquisibili**

2014 -2017 Horizon 2020 EU collaborative project QuProCS Quantum Probes for Complex Systems (nodo Italiano Milano Palermo Unical)

2014 – 2016 COST Action MP1209 “Thermodynamics in the Quantum Regime”

PRIN 2015, progetto in fase di sottomissione



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PALERMO

DIPARTIMENTO DI FISICA E CHIMICA  
DiFC

2016 European Training Network (in fase di sottomissione)

2016 Borsa: Fulbright Research Scholar, durata: 6 mesi, Host Institution: Duke University, Durham, North Carolina, USA. Gruppo ospitante: Prof. H. Baranger. Titolo del progetto: Quantum non-Markovianity in one dimension.



UNIVERSITÀ  
DEGLI STUDI  
DI PALERMO

DIPARTIMENTO DI FISICA E CHIMICA  
DiFC

## **6. ATTIVITA' NEL CAMPO DELLA DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA E DELLA CHIMICA**

Macroarea: DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA E DELLA CHIMICA

Linea di ricerca: *Didattica e storia della fisica e della chimica*



### 1. Titolo della linea di ricerca

DIDATTICA E STORIA DELLA FISICA E DELLA CHIMICA

2. **Responsabile** Claudio Fazio

### 3. Partecipanti

<b>Professori associati</b>	Aurelio Agliolo Gallitto, Claudio Fazio, Roberto Zingales,
<b>Ricercatori</b>	Dominique Persano Adorno
<b>Dottorandi di ricerca</b>	Giuliana Croce
<b>Collaboratori di enti convenzionati</b>	Nicola Pizzolato, Lucia Lupo, Antonia Giangalanti, Giovanni Tarantino, Daniela Bellomonte
<b>Borsisti</b>	Onofrio Rosario Battaglia

### 4. Settori Ricerca ERC (European Research Council)

PE2_16 General physics	PE4_5 Analytical chemistry	SH3_11 Social studies of science and technology
SH4_13 Philosophy of science, epistemology and logic	SH4_14 Teaching and learning	SH5_7 Museums, exhibitions, conservation and restoration

### 5. Parole chiave

Research in Physics and Chemistry Education	Research in History of Physics and Chemistry	Inquiry-Based Science Education
---	--	---------------------------------

### 6. Collaborazioni nazionali e/o internazionali su questa linea di ricerca

Centre for the Advancement of Mathematics and Science Teaching and Learning, Dublin City University, Ireland

Division of Didactics of Physics, Pavol Jozef Šafárik University, Slovak Republic

Physics Education Research Group, Univerzita Karlova V Praza, Czeck Republic

Centre for Microcomputer Applications, Amsterdam, The Netherlands.

Chemical Education Research Group, Jagiellonian University in Kracow, Poland

Mathematics Education Research Group, Constantine the Philosopher, Nitra, Slovak Republik

Groupe International de Recherche sur l'Enseignement de la Physique

European Science Education Research Association

Unità di Ricerca in Didattica della Fisica, Università di Udine

Unità di Ricerca in Didattica della Fisica, Università di Bologna

Unità di Ricerca in Didattica della Fisica, Università di Napoli



Unità di Ricerca in Didattica della Fisica, Università di Milano

Unità di Ricerca in Didattica della Fisica, Università di Pavia

Gruppo di Ricerca in Didattica della Chimica, Dipartimento Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo

Gruppo di Ricerca sull'Insegnamento delle Matematiche, Dipartimento di Matematica e Informatica, Università di Palermo

Associazione per l'Insegnamento della Fisica AIF, c/o Liceo Classico "G. D. Romagnosi, Parma.

## 7. Riassunto

Durante i prossimi tre anni la ricerca del Gruppo si focalizzerà sull'analisi della rilevanza delle metodologie Inquiry-Based nei processi di trasformazione della conoscenza spontanea in conoscenza scientifica, le modalità di costruzione della "Pedagogical Content Knowledge" in docenti in pre-servizio e in servizio, l'uso delle risorse cognitive dei discenti nei processi di apprendimento delle discipline scientifiche. Nell'analisi di tali aspetti si farà uso di strumenti di analisi quantitativa e qualitativa, con riferimento a tecniche di "clustering". In relazione alle attività connesse alla Storia della Chimica, si continuerà con lo studio dello sviluppo della ricerca chimica a Palermo nei secoli XVIII e XIX.

## 8. Descrizione della ricerca, tempistica e risultati attesi

Il Gruppo svolgerà nel triennio 2016-2018 attività di ricerca su tematiche di interesse storico e didattico in Fisica e Chimica, quali:

- studio, sviluppo e sperimentazione di metodologie didattiche basate sull'Indagine Scientifica (Inquiry Based Science Education);
- studio, sviluppo e sperimentazione di modalità di utilizzo della strumentazione di laboratorio e di sistemi di simulazione e ambienti di apprendimento focalizzati alla costruzione di modelli fisici della realtà fenomenologica nella didattica della fisica nei corsi universitari, nelle scuole secondarie e nella formazione in pre-servizio e in servizio dei docenti di scuola;
- analisi dell'influenza delle rappresentazioni mentali e delle risorse cognitive dei discenti sui processi di apprendimento delle discipline scientifiche;
- studio delle modalità tramite le quali una adeguata conoscenza della disciplina può essere trasformata in "Pedagogical Content Knowledge" (PCK) nella formazione in pre-servizio dei docenti di scuola secondaria di primo e secondo grado e dei docenti di scuola primaria.
- sviluppo e uso di strumenti di analisi quantitativa e qualitativa, con particolare riferimento alle tecniche di "clustering", per lo studio della ricaduta di interventi didattici.
- indagine sullo sviluppo della ricerca chimica a Palermo nei secoli XVIII e XIX, con particolare riferimento alle attività di Cannizzaro, Paternò, Peratoner e Oddo.





Per lo svolgimento delle sue attività di ricerca il Gruppo potrà contare su software e strumentazione di laboratorio assistita dal calcolatore (Real Time Laboratory) o tradizionale, di ambienti di simulazione di tipo aperto e chiuso, di software per l'analisi statistica e qualitativa dei dati installati in due laboratori, di cui uno di ricerca e in uno di tipo didattico, siti presso l'Edificio 18 di Viale delle Scienze. Le attività relative alla ricerca in Storia della Chimica saranno svolte anche tramite il Museo di Chimica e la Biblioteca Storica, siti nell'Edificio 17.

Gli obiettivi di ricerca del Gruppo per il 2016 sono orientati allo sviluppo delle tematiche di ricerche del gruppo lungo le seguenti linee guida:

- Messa a punto di strumenti ed attività per l'analisi degli schemi di ragionamento e conoscenze degli insegnanti di scuola secondaria e primaria in relazione ai processi operativi specifici di un approccio Inquiry Based (IB).
- Implementazione di schemi di Intervento Formativo (IF) focalizzati sui processi operativi specifici di un approccio IB;
- Sperimentazione pilota di tali IF per la messa a fuoco di eventuali aspetti critici.
- Analisi dei nodi concettuali relativi all'apprendimento di metodi e contenuti
- Messa a punto e sperimentazione di nuovi strumenti per l'analisi quantitativa e qualitativa dei comportamenti in campo sociometrico.
- Approfondimento sulle attività didattiche e di ricerca in Chimica svolte presso l'Università di Palermo dalla fondazione dell'Accademia fino a Cannizzaro.

## 9. Fondi acquisiti

Progetto "Open Discovery of STEM Laboratories (ODL)" Call Erasmus+, KA2-Cooperation for Innovation and the Exchange of Good Practices – Strategic Partnerships for School Education 2015. Durata 30 mesi. Resp. Unità Palermo: Dott. Dominique Persano Adorno. Budget UNIPA: 48.480 €, Budget totale: 220765 €

Partner del progetto:

1 (Coordinatore)	Fundación de Deusto (FD)	Spain
2	Ellinogermaniki Agogi	Greece
3	Università degli Studi di Palermo	Italy
4	Lithuanian Association of Distance and E. Learning	Lithuania
5	Hariduse Infotehnoloogia Sihtasutus	Estonia

## Fondi acquisibili

Progetto "Integrating Scientific and Engineering Practices into the Classroom" (INTEGRATE), presentato nell'ambito della Call "Making science education and careers attractive for young people and specifically improving STEM skills among young people", HORIZON 2020-SEAC-2014-1.



Tipo di intervento: Research & Innovation Actions (RIA), durata 48 mesi. Resp. Unità Palermo: Prof. Claudio Fazio. Budget UNIPA: 238.250 €, Budget totale: 1.853.321 €

Partner del progetto:

1 (Coordinatore)	Dublin City University	Ireland
2	Stichting Centrum voor Micro-Computer Applicaties	Netherlands
3	Università degli Studi di Palermo	Italy
4	Univerzita Pavla Jozefa Safarika v Kosiciach	Slovakia (Slovak Republic)
5	Leibniz-Institut für die Pädagogik der Naturwissenschaften und Mathematik an der Universität Kiel	Germany
6	Universitat Autònoma de Barcelona	Spain
7	ATiT Audiovisual Technologies, Informatics and Telecommunications	Belgium

Progetto "EUROpean Youth in Science, TecHnology and Engineering - Unofficial Science Education Program" (EURYSTHEUS) presentato nell'ambito della Call HORIZON 2020-SEAC-2015-1: "Making science education and careers attractive for young people", Topic " Innovative ways to make science education and scientific careers attractive to young people". Resp. Unità Palermo: Prof. Claudio Fazio. Budget UNIPA: 70.875 €, Budget totale: 1.800.000 €

Partner del progetto:

1 (CO)	VINČA Institute of Nuclear Sciences, University of Belgrade	Serbia
2	Ruđer Bošković Institute	Croatia
3	National Institute for Laser, Plasma and Radiation Physics, Laser Metrology Laboratory, Center for Science Education and Training	Romania
4	Montenegrin Science Promotion Foundation, PRONA	Montenegro
5	Technical University Ostrava	Czech Republic
6	European University Cyprus	Cyprus
7	University of Bremen, Institute of Didactic	Germany
8	University of Matej Bel in Banská Bystrica	Slovakia
9	Advanced Technology Institute, University of Surrey	UK



10	Bogazici University, Istanbul	Turkey
11	Institute of Educational Research	Poland
12	School of Geography Earth and Environmental Sciences, University of Birmingham	UK
13	Budapest University of Technology and Economics, Optical and Microwave Telecommunication Lab	Hungary
14	Faculty of Sciences and Engineering, University of Madeira	Portugal
15	Department of Electronics, University of Alcalá	Spain
16	Experimenterium de physique de l'Université Libre de Bruxelles	Belgium
17	Department of Physics and Chemistry, University of Palermo	Italy
18	Centre of University of Milan-school for Bioscience	Italy
19	High School Institute of Mathematics and Informatics of the Bulgarian Academy of Sciences, Sofia	Bulgaria
20	Union of Bulgarian Mathematicians	Bulgaria
21	Department of Radiotherapy and Laboratory of Radiobiology, University Hospital, Rostock	Germany
22	Institute of Photonics and Electronics, the Czech Academy of Sciences, Prague	Czech Republic
23	Faculty of Science, Palacky University, Olomouc	Czech Republic
24	Faculty of Science, Technology and Environment, University of the South Pacific	Republic of Fiji
25	Gheorghe Asachi Technical University of Iasi, Faculty of Chemical Engineering and Environmental Protection, Department of Environmental Engineering and Management	Romania

PRIN 2015: "X-PHYS: eXtra-ordinary PHYSicists at work. Scienze fisiche e modernità sociale in una rete di ricerca e azione per costruire nuove vie di didattica, comunicazione, percezione e condivisione dell'indagine sulla natura dell'universo e delle tecnologie derivate". Principal Investigator: Prof. Stefano Oss, Università di Trento. Resp. Unità Palermo: Prof. Claudio Fazio. Budget UNIPA: 129.842 €, Budget totale: 700.000 €



Partner del progetto:

1 (Coordinatore)	Università degli Studi di Trento	
2	Università degli Studi di Udine	Sede coordinata: Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia
3	Università degli Studi di Palermo	Sede coordinata: Università degli Studi di Milano
4	Università degli Studi di Napoli	Sede coordinata: Università degli Studi di Padova
6	Università degli Studi di Bologna	Sede coordinata: Università degli Studi di Pavia