

# *Un Campus Scientifico con Infrastrutture di Ricerca di classe Internazionale: Possibilità a Unimi-EXPO*

*Giorgio Rossi, Dip. Fisica*

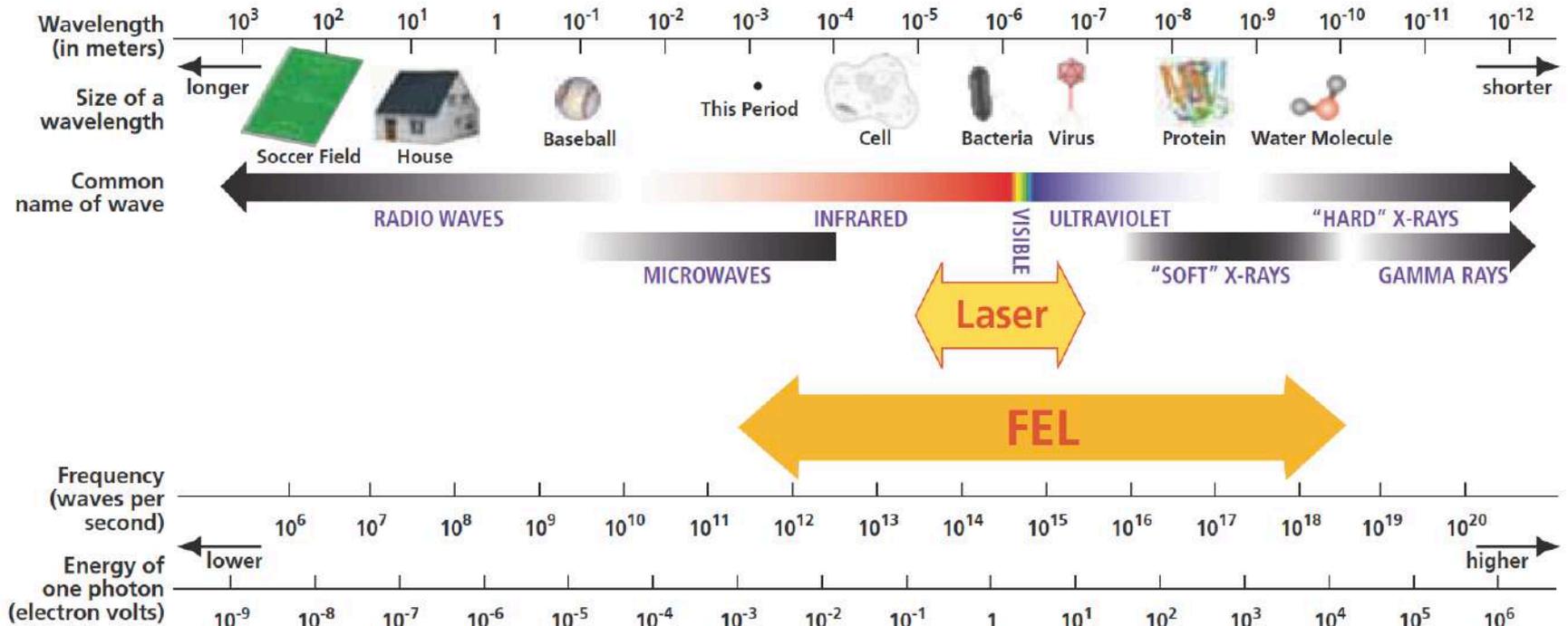
**Realizzare l'INFRASTRUTTURA PER LA RICERCA SCIENTIFICA DI UNIMI tramite una**

**PIASTRA che integri le caratteristiche migliori per l'installazione dei laboratori di ricerca dei Dipartimenti e che sia connessa con i servizi principali (Officina, Centro Dati e Calcolo) e con un' **INFRASTRUTTURA PER L'ANALISI FINE DELLA MATERIA****

**Sarà basata su una sorgente di impulsi EM da UV a X (5KeV) con **1 MHz** di frequenza e dedicata alla **ricerca alla scala nanometrica e alla scala temporale dei 10-100 fs**:**

- Visualizzazione (Imaging bio-medico, archeometria, paleontologia) ad alta risoluzione
- Spettroscopia con risoluzione temporale alla nanoscala
- Catalisi e Chimica in soluzione
- Struttura di nano-oggetti da diffrazione coerente
- Biochimica alla scala atomica e del femtosecondo
- Materia in condizioni estreme (geologia, astrofisica, fisica delle basse temperature)
- Spettroscopia pompa-sonda di materiali fortemente correlati
- Magnetismo, superconduttività, materiali topologici, materiali a forte interazione spin-orbita

# THE ELECTROMAGNETIC SPECTRUM



# Correlazioni e magnetismo nei solidi

## Distanze

Distance over which a diffusing electron maintains its polarization	$\sim 10 \times$ mean free path <b><math>\sim 1 \mu\text{m}</math></b>
Bloch domain wall width	$\sim (J/K)^{1/2}$ <b><math>\sim 20 \text{ nm}</math></b>
Minimum size of a magnetic particle before superparamagnetic fluctuations destroy its ferromagnetism	<b><math>\sim 10 \text{ nm}</math></b>
The exchange length determines the diameter of a vortex core	$\sim (J/2\pi M_s^2)^{1/2}$ <b><math>\sim 1 \text{ nm}</math></b>
Wavelength of the RKKY spin-density oscillations of the conduction electrons near a magnetic ion	$\sim \pi/k_F \sim$ <b><math>0.2 \text{ nm}</math></b>

Table I.1: Magnetic length scales

$$\tau \approx 1/\nu = h/E \quad (h = 4.14 \text{ \AA} \sim 10^{-15} \text{ eV s})$$

## Tempo/Energia

Atomic moment reversal due to field- or current-induced domain wall motion, with a velocity of $\sim 100 \text{ m/s}$	$d_{\text{wall}}/v_{\text{wall}} \sim$ <b><math>200 \text{ ps}</math></b>
Magnetization precession and damping, according to the LLG-equation (see Infobox)	<b><math>\sim 50 \text{ ps}</math></b>
Spin-orbit interaction between the electron spin and its orbital motion	1–100 meV $\rightarrow \tau \sim$ <b><math>50\text{--}5000 \text{ fs}</math></b>
Jahn-Teller interaction, which stabilizes an elastic distortion to avoid a degenerate electronic ground-state	$\sim 50 \text{ meV}$ $\rightarrow \tau \sim$ <b><math>100 \text{ fs}</math></b>
Spin-wave energy, at intermediate wave-vector	1–1000 meV, $\rightarrow \tau$ <b><math>5\text{--}5000 \text{ fs}</math></b>
Electrostatic crystal-field interaction of oriented 3d-orbitals with neighboring ions	$\sim 1 \text{ eV}$ $\rightarrow \tau \sim$ <b><math>5 \text{ fs}</math></b>
Inter-electronic exchange energy $J$ arising from the Pauli principle	$\sim 5 \text{ eV}$ $\rightarrow \tau \sim$ <b><math>1 \text{ fs}</math></b>
Correlation energy, responsible within an atom for enforcing Hund's rules	$\sim 5 \text{ eV}$ $\rightarrow \tau \sim$ <b><math>1 \text{ fs}</math></b>

Table I.2: Magnetic time scales

# Fisica della materia condensata o nano-aggregata : Correlazioni e magnetismo

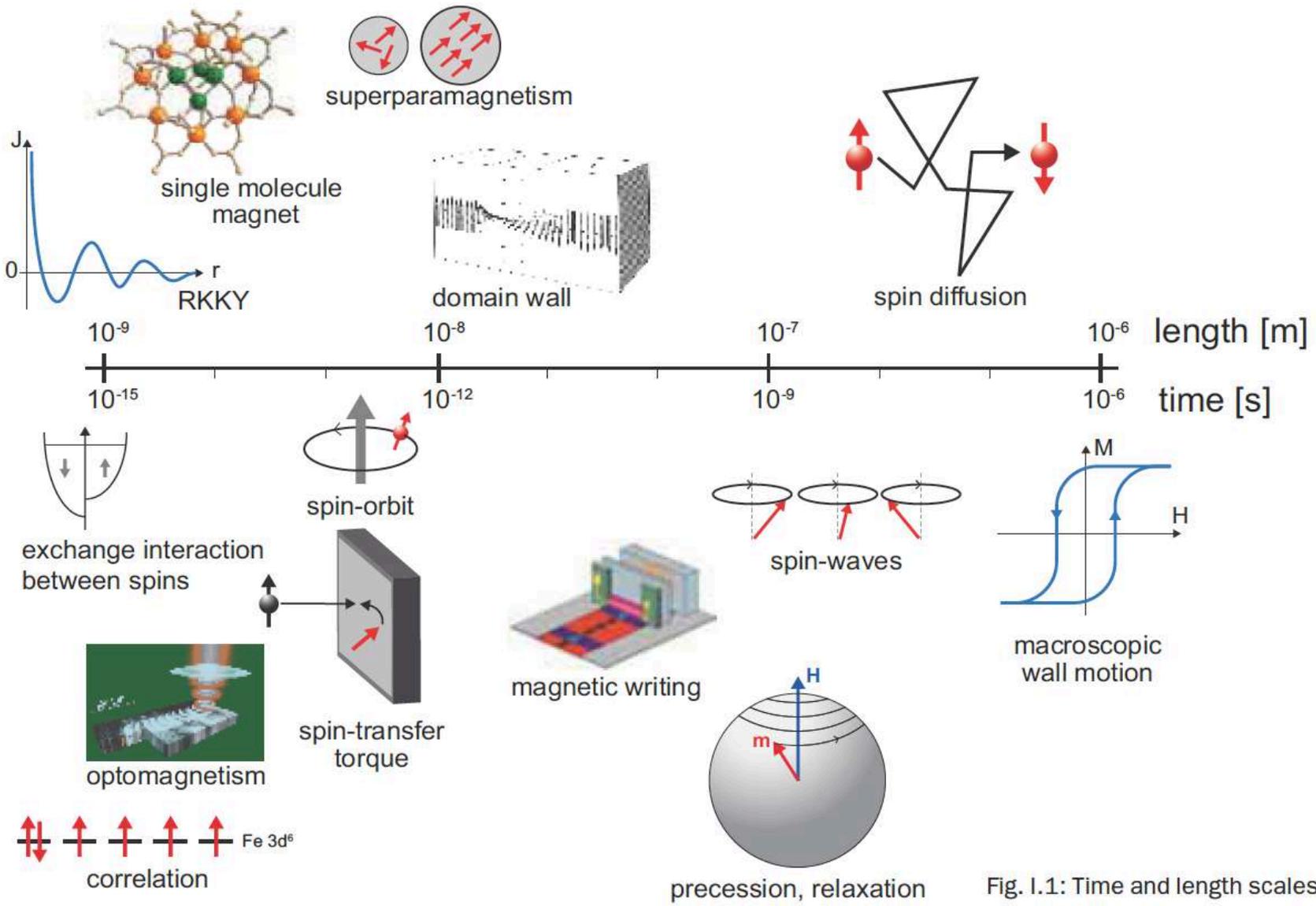
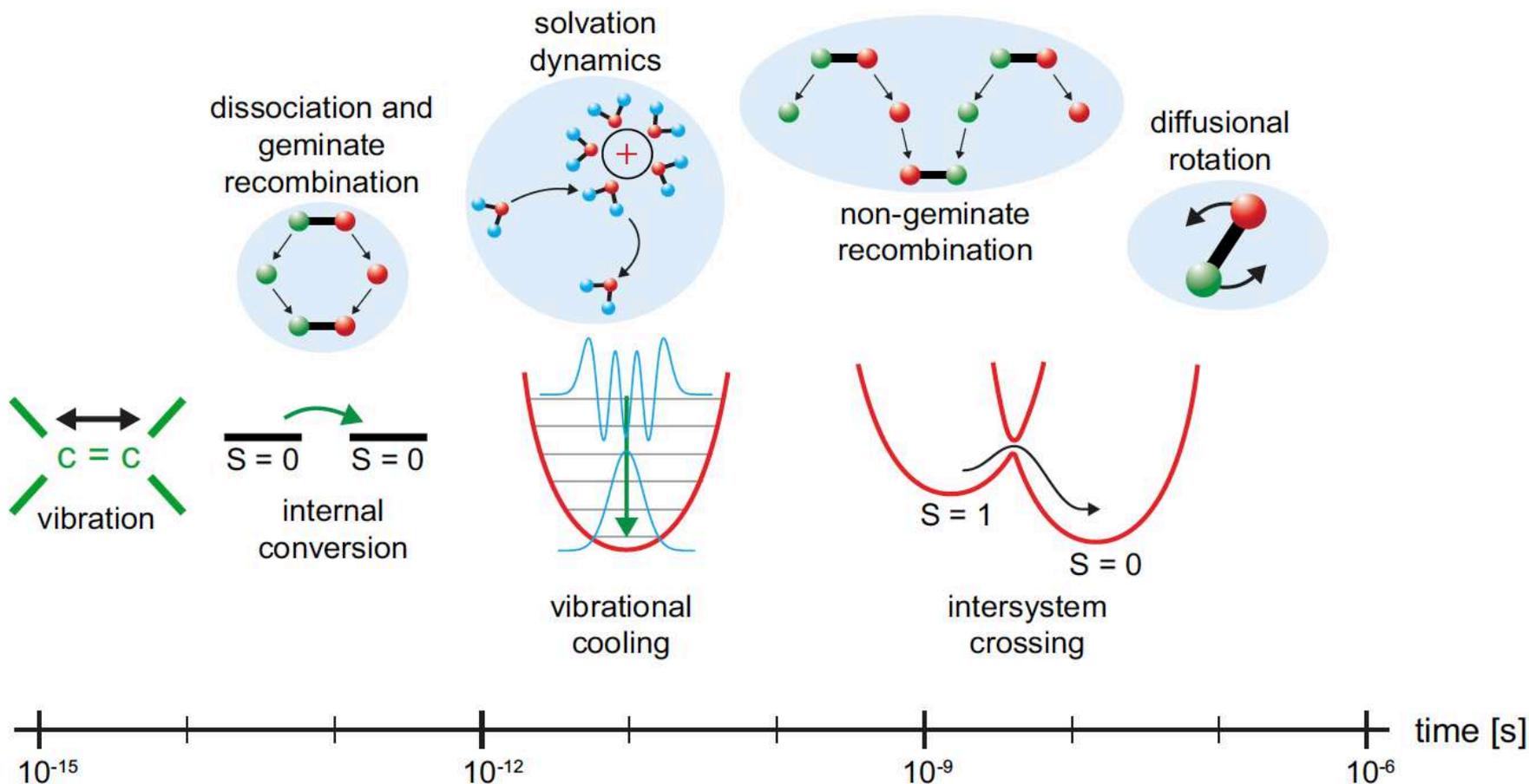


Fig. I.1: Time and length scales in magnetism.

# Dinamica molecolare e reattività in soluzione e nella catalisi eterogenea



Ai tempi lunghi la diffusione rotazionale delle molecole in solvente; alla scala dei ps la ricombinazione di molecole foto-dissociate; ai 1-10 ns i meccanismi di disattivazione “intersystem crossing” con cambiamento di spin; ai 10-100fs (conversione interna - riconfigurazione elettronica con conservazione dello spin totale. Il raffreddamento molecolare e trasferimento di energia vibrazionale 1-100 ps.

Lo scambio di una molecola  $\text{H}_2\text{O}$  nella shell di solvatazione attorno ad uno ione avviene tipicamente in 250 ps

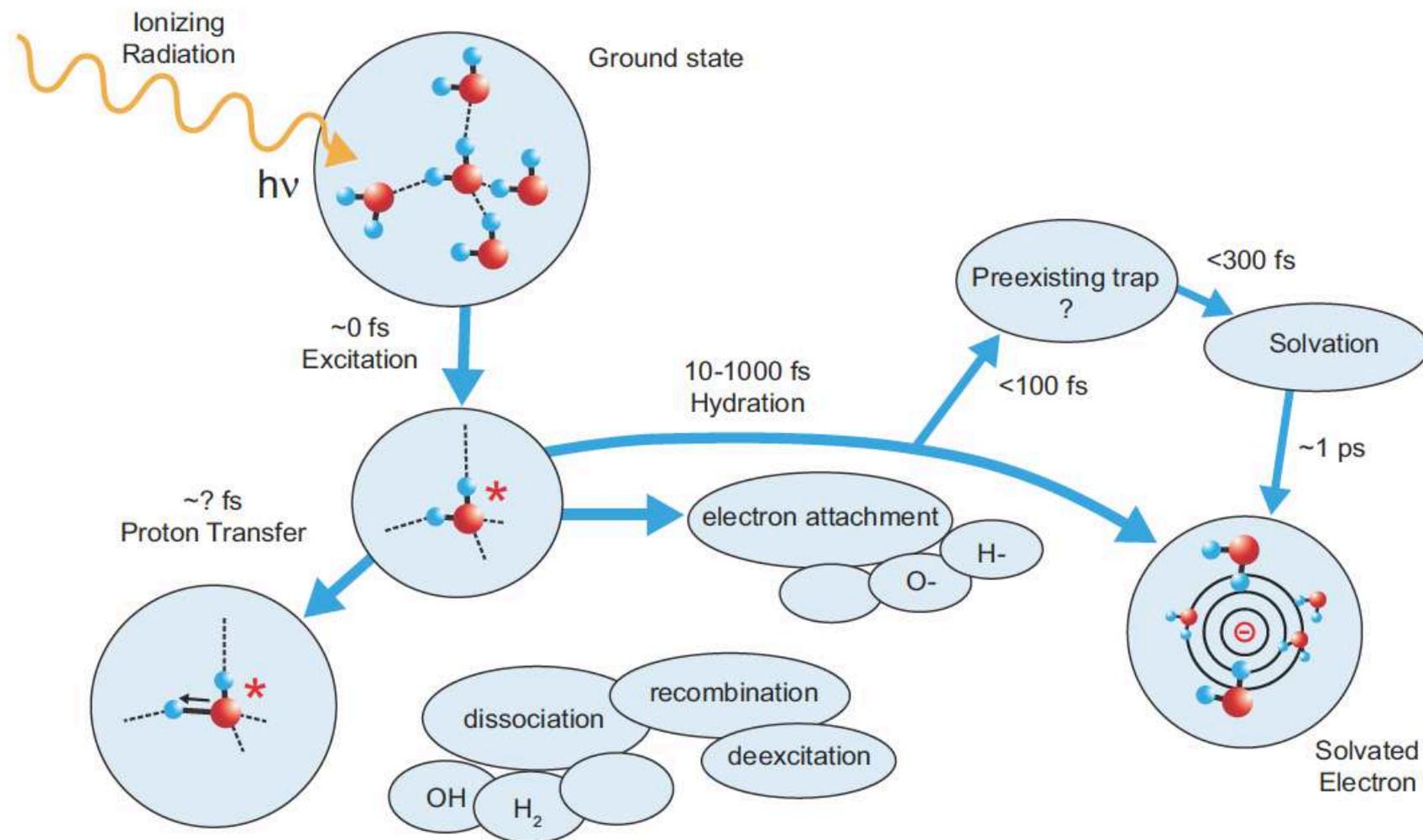
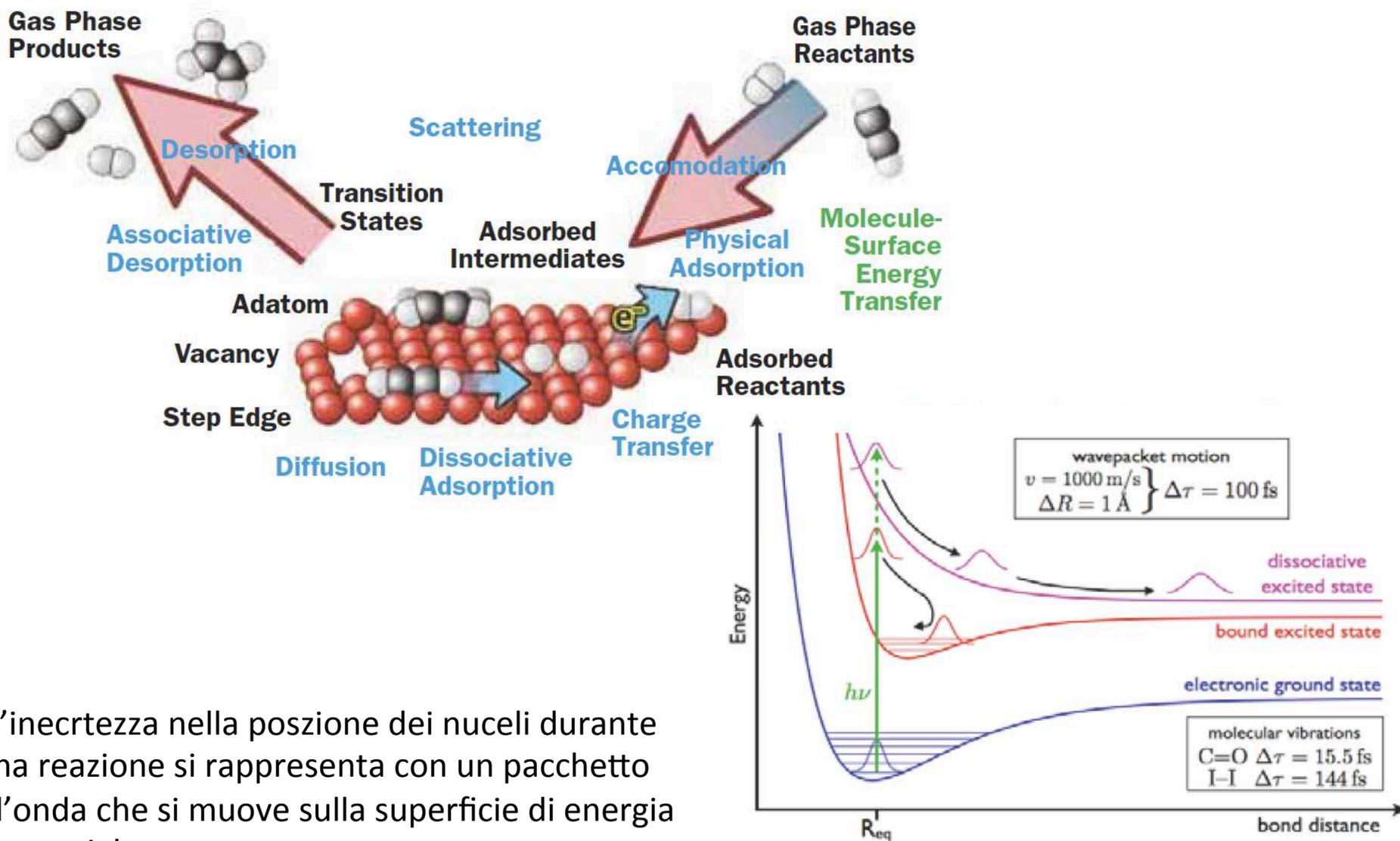


Fig. II.2. Ultrafast processes in water, following a photoionization event [1]. The formation and stabilization of a solvated electron is fundamental in photocatalysis and radiation chemistry.

La catalisi eterogenea ha una fenomenologia complessa alla nanoscala e a tempi da sub ps



L'incertezza nella posizione dei nuclei durante una reazione si rappresenta con un pacchetto d'onda che si muove sulla superficie di energia potenziale.

## IMAGING di nanocristalli e macromolecole

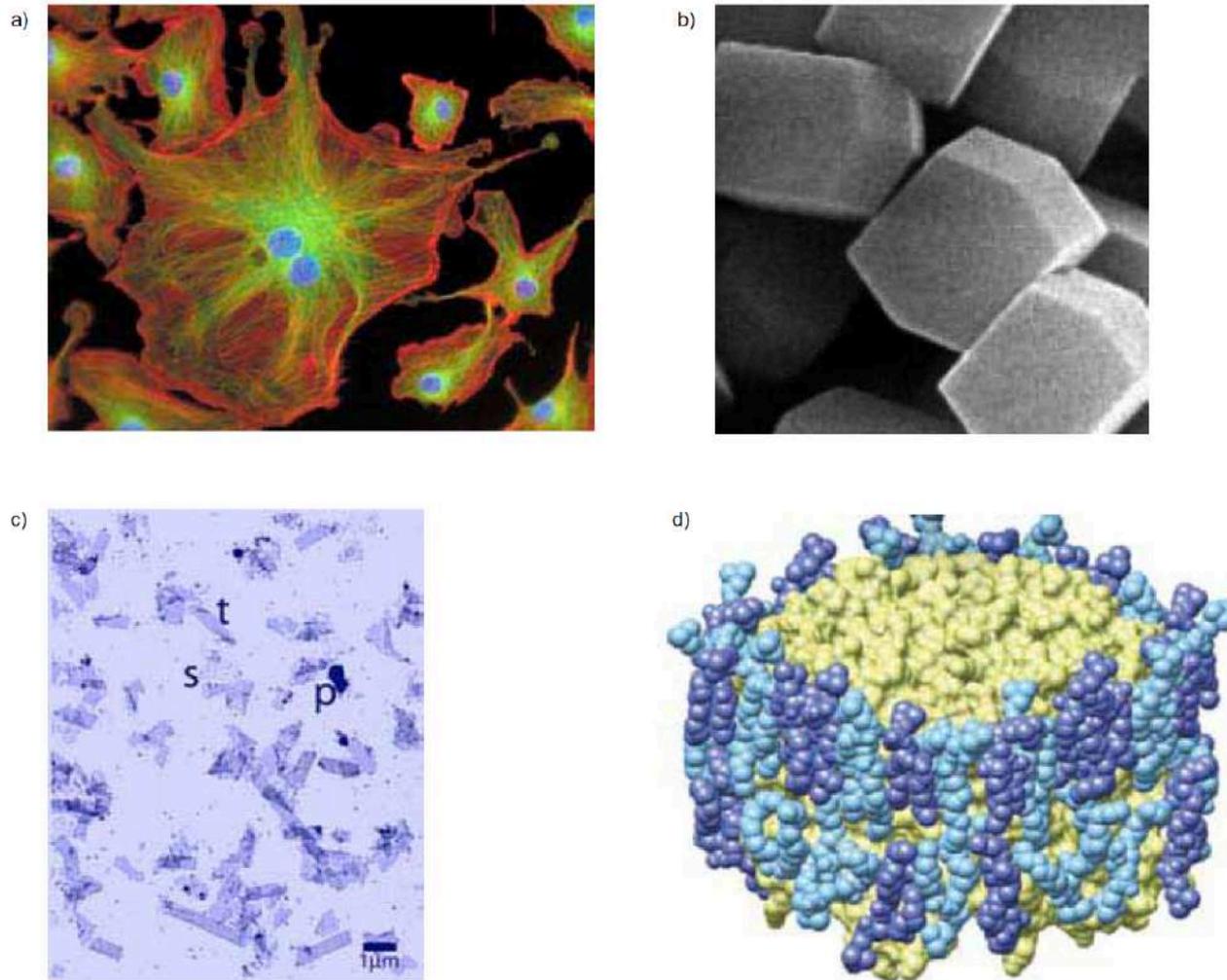


Fig. III.1. Bio-imaging challenges that the SwissFEL will meet: resolving intracellular features at nm resolution, such as the cytoskeleton (a), allowing the use of very small 3d-nanocrystals (b) or of 2d-membrane protein crystals (c) to avoid the crystal growth problem in protein crystallography, and sequentially injecting into the beam individual biomolecules (d), for high-resolution structure determination.

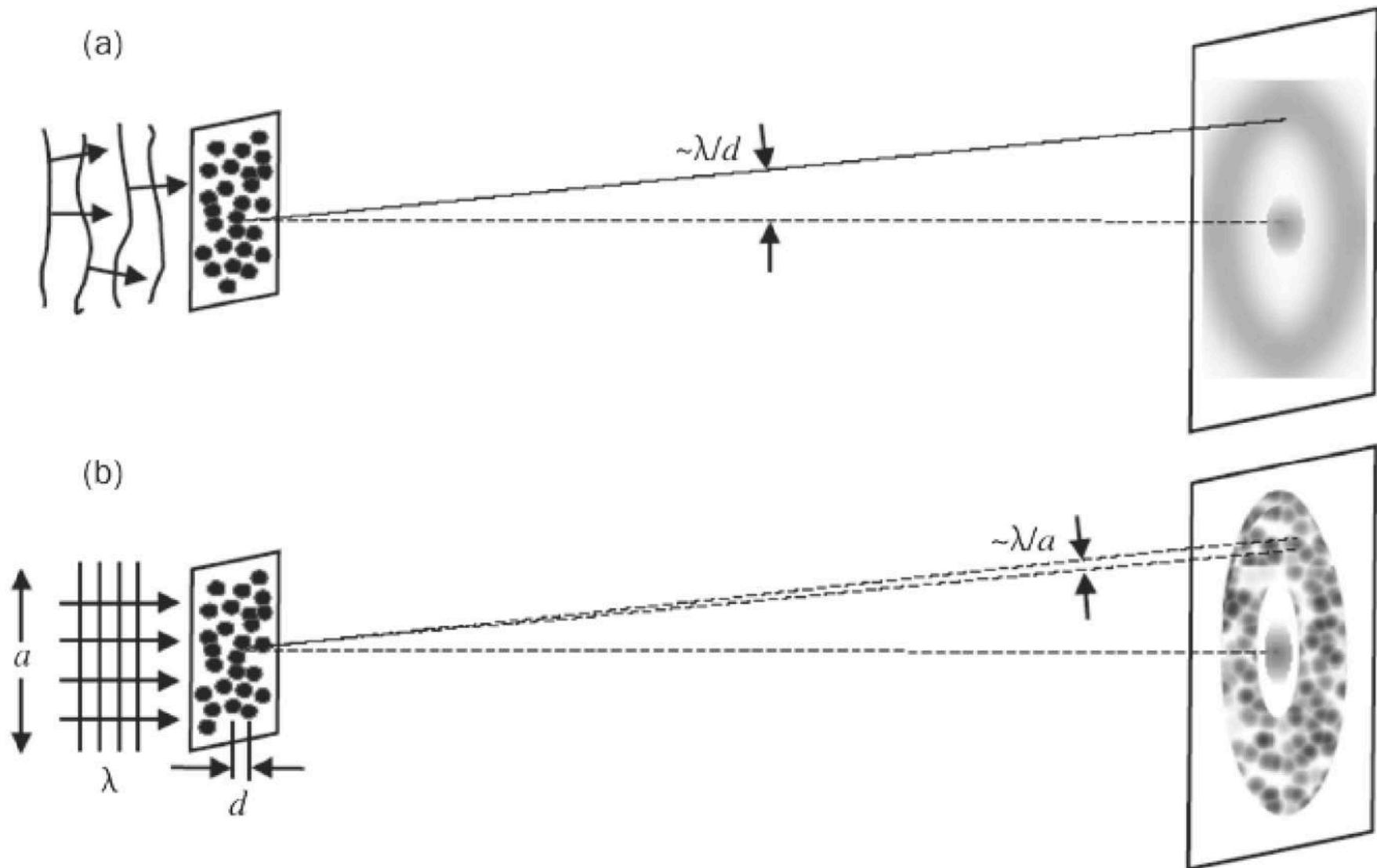
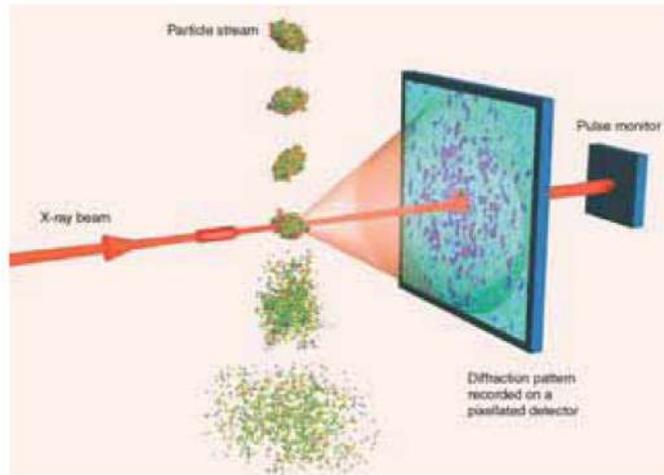


Fig. III.2. Whereas the scattering of incoherent radiation, e.g. from a synchrotron, yields only the average spacing  $d$  of a collection of scatterers (a), the scattering of coherent radiation (with beam diameter  $a$ ) from the SwissFEL produces a rich speckle pattern (b), which can be inverted to obtain the exact distribution of scatterers (from [1]).

Diffrazione coerente in modalità “flash and destroy” : rispetto a cryo-TEM permette lo studio di stati eccitati della proteina, p.es. durante il processo di ripiegamento (esperimenti di pompa e sonda)



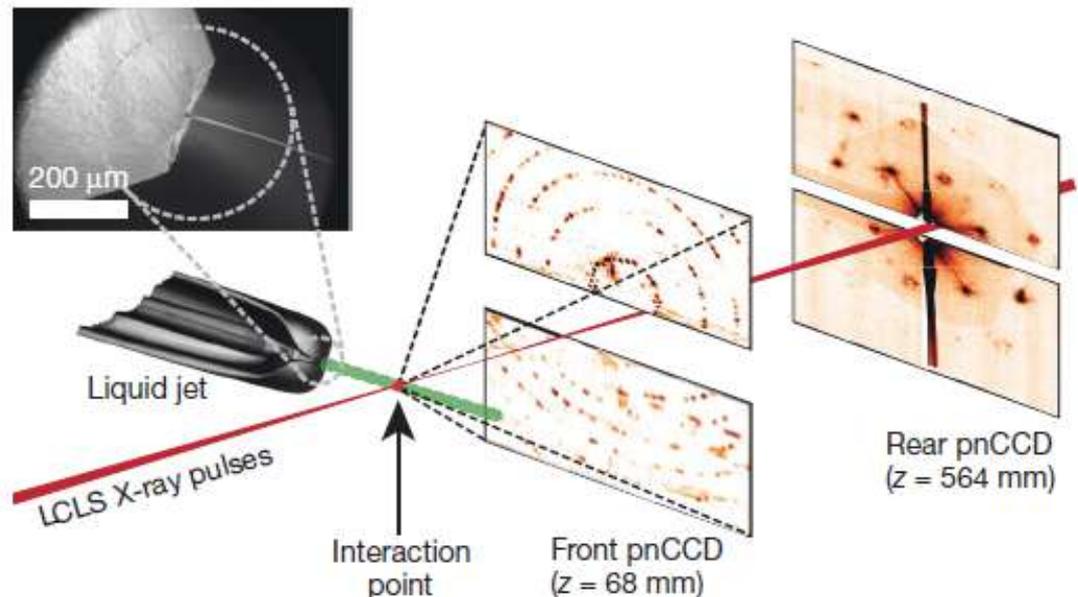
## LETTER

doi:10.1038/nature09750

### Femtosecond X-ray protein nanocrystallography

Chapman et al. Nature **470**, 73 (2011)

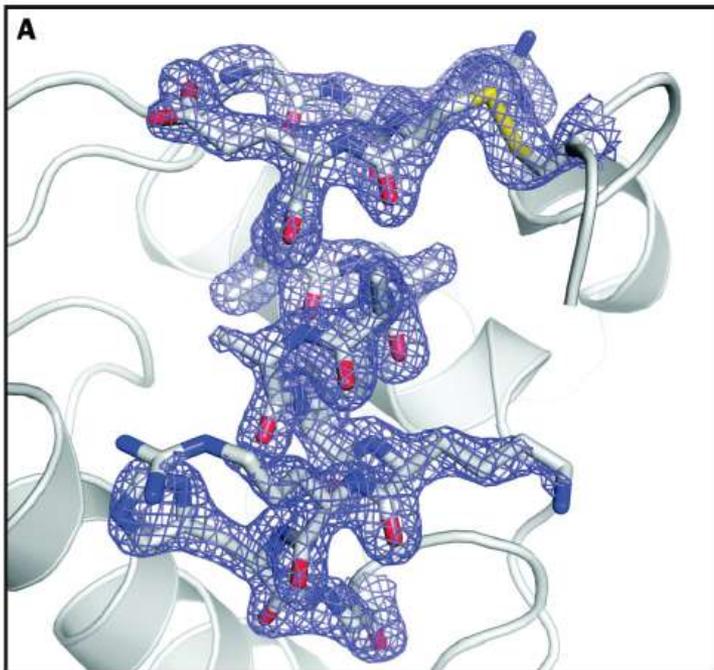
- Photon energy 1.8 KeV
- $\approx 10^{12}$  photon/pulse
- Pulse duration 10, 70 and 200 fs
- Crystal hit rate of about 20%



## High-Resolution Protein Structure Determination by Serial Femtosecond Crystallography

S. Boutet et al. Science **337**, 362 (2012)

Hen egg lysozyme



- 9.4 KeV
- $4 \cdot 10^{11}$  photons/pulse
- Pulse duration 40 fs
- $> 10^6$  diffracted images

Resolution 1.9 Angs.

La scala sub-nanometrica (piccole molecole), la scala 1-10 nm (proteine e complessi), la scala 10-100 nm (organelle, virus), la scala micrometrica (cellule) sono suscettibili di imaging con la diffrazione coerente con  $\lambda=0.2$  nm)

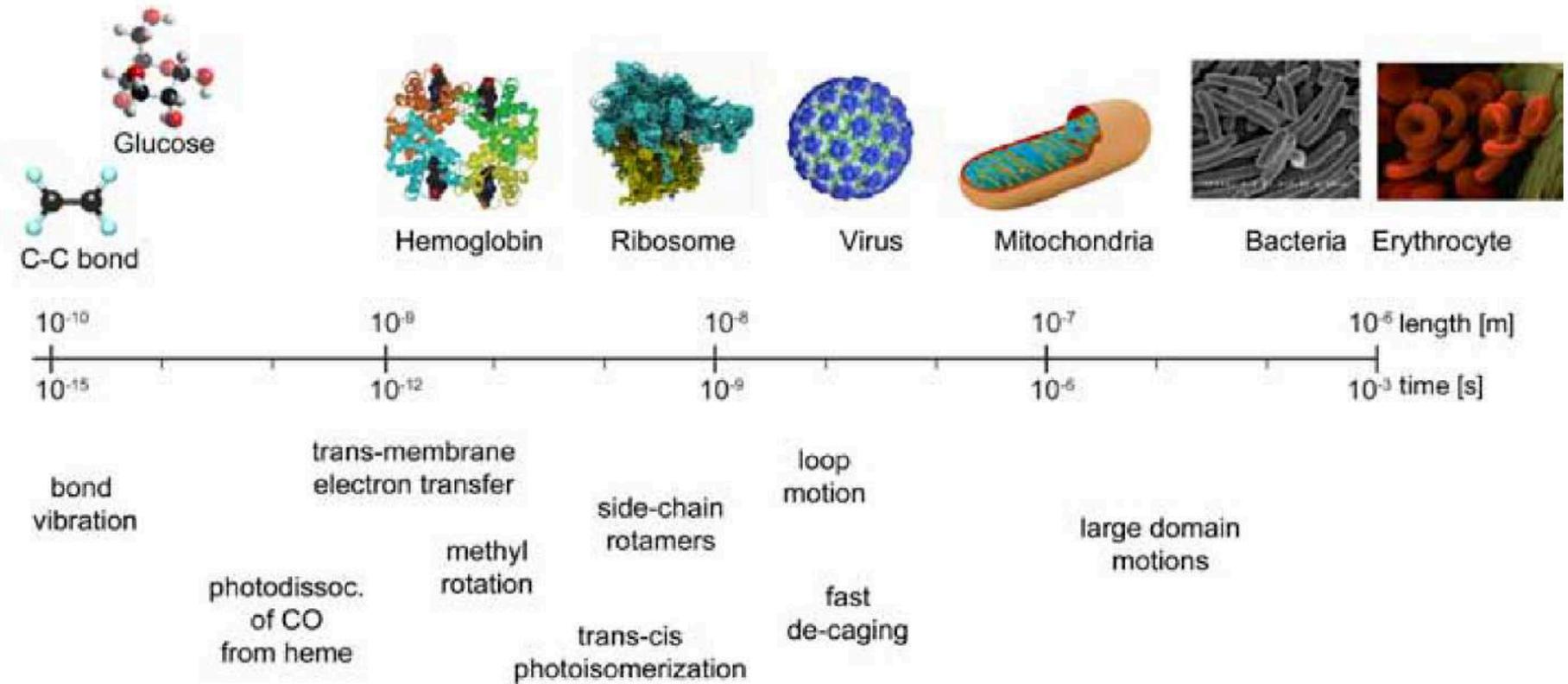


Fig. IV.1. The time and length scales for biochemical processes match well to the capabilities of the SwissFEL.

LE  
RU

