Consiglio Nazionale delle Ricerche

Progetto COORDINATO - AGENZIA2001

codice: CNRC012FF2_001

1. Progetto di ricerca Coordinato

Coordinatore del progetto	*VINCENZO MARINARI*
Titolo del progetto	*Transizioni di fase nella fisica dei sistemi disordinati : un approccio statistico e di ottimizzazione.*

2. Dati registrati

Cognome	*MARINARI*
Nome	*VINCENZO*
Sesso	*M*
Data di nascita	*07/07/1957*
Luogo di nascita	*avellino*
Nazionalità	*ITALY*
Istituzione di appartenenza	*dipartimento di fisica, universita' di roma "la sapienza"*
Qualifica	*Professore ordinario*
Matricola CNR (se dipendente)	
Codice Fiscale	*MRNVCN57L07A509N*

3. TITOLO della ricerca

Testo italiano
Fenomeni critici statici e dinamici in sistemi disordinati e vetrosi:
dai vetri di spin alla fisica biologica di RNA e DNA.

Testo inglese
Statical and Dynamical Critical Phenomena in Disordered and Glassy
Systems: from Spin Glasses to the Biological Physics of RNA and DNA.

4. Descrizione del programma e dei compiti della unita' di ricerca

Testo italiano

Per quel che riguarda sistemi con disordine quenched abbiamo intenzione di chiarire vari aspetti.

In primo luogo ci interessa ottenere maggiori dettagli sulla struttura delle fasi nella regione di bassa temperatura in modelli finito-dimensionali, con particolare riguardo alle relazioni di ultrametricita'. Abbiamo anche intenzione di utilizzare a questo scopo nuove tecniche per trovare lo stato fondamentale di sistemi con un gran numero di gradi di liberta' (qualche migliaio). Questo riguardera' anche e soprattutto lo studio di funzioni di correlazione e l'approfondimento dello studio di sistemi in campo magnetico non nullo.

Pensiamo inoltre di studiare in gran dettaglio, sia dal punto di vista numerico che dal punto di vista analitico, il problema della K soddisfabilita', problema di estremo interesse sia teorico che pratico, ottenendo risultati esatti per la termodinamica e per la transizione di fase, risultati che saranno comfrontati con quelli di simulazioni numeriche.

L'applicazione di idee di rottura spontanea di simmetria allo studio di sistemi vetrosi e' un altro dei punti cruciali del nostro programma. Lo studio dei processi attivati termicamente nella regione di bassa temperatura (vicino alla transizione vetrosa) sara' perseguito sia per mezzo di simulazioni numeriche e del loro confronto il quadro teorico generale, sia dallo sviluppo di metodi analitici basati sulla teoria delle repliche.

Vogliamo inoltre confrontare i risultati ottenuti per vetri fragili con le proprieta' di vetri duri (tipo silica). Un'altro punto sul quale ci aspettiamo di fare progressi sostanziali e' il calcolo dello spettro dei modi normali istantanei e delle funzioni di struttura dinamiche. Intendiamo inoltre continuare lo studio dei processi dinamici, e delle violazioni del teorema di fluttuazione e dissipazione, nei sistemi disordinati cercando di evidenziare le caratteristiche che piu' si prestano ad un possibile confronto con i futuri dati sperimentali.

Un esempio del nostro approccio e dei risultati che vogliamo ottenere e' dato dalle simulazioni numeriche, di tipo dinamica molecolare e tipo Monte Carlo, di sistemi Lennard Jones: l'analisi delle proprieta' fuori dall'equilibrio ed all'equilibrio e' uno dei punti chiave.

Un altro esempio, fra tanti, riguarda lo studio di sistemi tipo

Ising con diluzione di sito o di legame: ci interessa studiare i casi usuali di disordine indipendente e casi in cui il disordine e' correlato.

In questo campo le simulazioni numeriche giocano, per alcuni versi, anche un ruolo integrativo e qualche volta sostitutivo degli esperimenti, che possono esser molto difficili a realizzare. L'aspetto che ci preme sottolineare e' quello guida, in cui simulazioni numeriche anticipano ed strutturano la preparazione e la realizzazione di veri esperimenti. Questo e' gia' avvenuto di recente, ad esempio, con la misura di lunghezze di correlazione in cui una divergenza come funzione del tempo e' stata notata prima numericamente e poi misurata in esperimenti. Una possibilita' auspicabile e' che lo stesso meccanismo si verifichi per le misure delle violazioni del teorema di fluttuazione e dissipazione che possono esser messe sotto un ottimo controllo teorico e numerico e per le quali sono in corso di preparazione raffinati esperimenti.

Intendiamo anche dare un'enfasi particolare allo studio di fenomeni connessi a problemi biofisici. E' di enorme interesse, secondo noi, il fatto che la meccanica statistica e la complessita' giochino un ruolo tanto importante nella comprensione di sistemi biologici fondamentali. Abbiamo in programma di continuare la nostra ricerca suul'RNA (esistenza di una fase vetrosa, sue caratteristiche e possibili rilevanze biologiche) con metodi che abbiamo gia' sperimentato con successo nello studio di sistemi vetrosi piu' classici. Abbiamo anche intenzione di continuare nello studio di problemi come l'analisi di esperimenti di "unzipping" del DNA e di riconoscimento di sequenze: in questi problemi le dinamiche lente giocano un ruolo cruciale, e l'identificazione di comportamenti vetrosi e' di grande importanza.

Testo inglese

As far as disordered systems with quenched disorder are concerned we plan to clarify in the next two years a large number of issues.

First we are interested to clarify more details on the phase structure in the low temperature region in finite dimensional models. Among other things we are very interested to ultrametricity relations. We also want to use in this respect new techniques that allow to determine the ground state of systems with a large number of degrees of freedom (a few thousands).
This will also and mainly concern the study of correlation functions and of systems in a non-zero magnetic field.

We also plan to study in
good detail, both from a numerical and an analytical point of view,

the problem of K-satisfability. This problem has large interest, both from the theoretical and the practical point of view. We hope to get exact results for the thermodynamical behavior of the system and for the features of the phase transition, and to compare them to the results of numerical simulations.

Applying ideas of spontaneous replica symmetry breaking to the study of glassy systems is one other of the crucial points of our program. We will study numerically activated processes in the low T region (close to the glassy transition), and we will compare to the general theoretical framework: we will also develop analytical computations based on replica theory methods.

We also want to compare results obtained for fragile glasses with the properties of strong glasses (silica like). One more point on which we hope to obtain substantial progresses is the computation of the spectrum of instantaneous normal modes and of the dynamical structure functions. we also want to continue the study of dynamical processes, and of violations of the fluctuation-dissipation theorem in disordered systems, trying to make clear the features that could be more useful to compare the theoretical resulta with experimental data.

A typical example of our approach and of the results we want to obtain is given by the numerical simulations (molecular dynamics and optimized Monte Carlo) of Lennard-Jones systems. The analysis of out of equilibrium properties is one of the key points.

One more example, among many, concerns the study of Ising like systems with site or link dilution: we are interested in the study of then usual cases of indipendent disorder, and of cases with correlated disorder.

In this field numerical simulations play, in some sense, also a role of integration and sometimes even of replacement for experiments that are very difficult to realize. We want to stress the driving role of numerical simulations, where they anticipate and organize the preparation and the realization of different experiments. This has happened recently, for example, with measurements of correlation lengths where a divergence as a function of time has been noticed first numerically and then in experiments. A possibility that we would like is that the same mechanism will be at work for measurements of the violations of the fluctuation-dissipation theorem, that can be put under very good numerical and theoretical control, and for which are already under preparation very sophisticated experiments.

We will also want to give a strong emphasis to the study of phenomena connected to biophysical problems. We believe that the fact that Statistical Mechanics and Complexity play such an important role in the understanding of fundamental biological problems is of very large interest. We plan to continue our research on the behavior of RNA like systems (existence of a glassy phase, its features and possible biological relevance) with methods that we have already used succesfully during the study of more classical glassy systems. We also want to continue ih the study of problems like the analysis of DNA unzipping experiments and the sequence recognition and alignment: in these problems slow dynamics play a crucial role, and indentifying glassy behvior is of great importance.

---

5. Area Scientifica/Settore

Area Scientifica *Scienze di base*
Settore *FIS/02 - Fisica teorica, modelli e metodi matematici*

---

6. Codici NABS

Ricerche non orientate *- Scienze fisiche*

---

7. Parole chiave

Testo italiano

Parola chiave 1 *VETRI DI SPIN*

Parola chiave 2 *RNA*

Parola chiave 3 *MECCANICA STATISTICA*

Parola chiave 4 *AMORFI*

Parola chiave 5 *COMPLESSITA'*

Testo inglese

Parola chiave 1 *SPIN GLASSES*

Parola chiave 2 *RNA*

Parola chiave 3 *STATISTICAL MECHANICS*

Parola chiave 4 *AMORPHOUS SYSTEMS*

Parola chiave 5 *COMPLEXITY*

---

8. Curriculum e/o l'elenco delle proprie pubblicazioni

Curriculum Vitae - Enzo Marinari

Data di nascita	7 luglio 1957
Cittadinanza	Italiana
	Dipartimento di Fisica,

Indirizzo Professionale	Dipartimento di Fisica, Universita' di Roma *La Sapienza*, P. A. Moro 2, I-00185 Roma (Italia).
telefono	+39-0649914363
fax	+39-0649914387
e-mail	enzo.marinari@roma1.infn.it
WWW	http://chimera.roma1.infn.it/ENZO

Educazione e Posizioni

Nov. 99 - oggi	Professore Ordinario di *Fisica Teorica*, Dipartimento di Fisica, Universita‘ di Roma *La Sapienza* (Italia).
Nov. 94 - Nov. 99	Professore Ordinario di *Fisica Teorica*, Departmento di Fisica, Universita‘ di Cagliari (Italia).
Nov. 88 - Nov. 94	Professore Associato di *Fisica Teorica*, Departimento di Fisica, Universita‘ di Roma *Tor Vergata* (Italia).
Nov. 92 - Nov. 94	Professore Visitatre e Direttore Associato per la Fisica di NPAC (Northeast Parallel Architecture Center, diretto da G. C. Fox), Syracuse University, NY (USA).
Nov. 84 - Nov. 88	*Ricercatore* in *Fisica Teorica*, Dipartimento di Fisica, Universita‘ di Roma *Tor Vergata* (Italia).
Nov. 82 - Nov. 84	Postdoctoral fellow, CEA, Saclay (France).
Primavera 82	SERC fellow, Physics Department, Edinburgh University (Scotland, UK).
Jan. 81	*Dottore in Fisica (cum laude)*, Universita‘ di Roma

Università di Roma
La Sapienza (Italia).

Premi ed Onori

- *2001-2002: "IUP Visiting Professorship" a Parigi-Orsay (un mese).*
- *1999-2000: "IUP Visiting Professorship" a Parigi-Orsay (un mese).*
- *1989: Premio dell'Accademia dei Lincei per il miglior fisico sotto i 35 anni.prize for the best physicist*

Contratti/Finanziamenti

"Senior Investigator" nel Centro di Eccellenza SMC (Roma, Italia, finanziato dall'INFM nel 2001);

Finanziamenti MURST per progetti di rete su "Sistemi Complessi" (2000, 1996, 1993);

Finanziamenti INFN, ogni anno fino ad oggi;

Borse per tempo su super-computers (Julich e Berlino);

rete EEC (1996).

Insegnamento

Fisica 1 per Informatici;

Elettrodinamica Quantistica;

Teoria Quantistica dei Campi (Laurea e Dottorato);

Teoria Euclidea dei Campi (Dottorato);

Fisica dei Sistemi Disordinati (Laurea e Dottorato).

Argomenti di Ricerca

Fisica Statistica, Sistemi Disordinati, Vetri di Spin, Crescita di Superfici ed Equazione KPZ, Processi Stocastici, Simulazioni Numeriche, Metodi Monte Carlo, Annealing, Ottimizzazione, Gruppo di Rinormalizzazione, Fenomeni Critici, Superfici Aleatorie, Teorie di Gauge Reticolari.

Attivita' di Ricerca

Pubblicazioni: Circa 180 in riviste internazionali con referee ed atti di conferenze internazionali.

E' uno dei 1000 fisici con piu' citazioni nel periodo 1981-1997 (da riviste catalogate ISI, lista preparata da H. Small e D. Pendlebury del "Institute for Scientific Information").

Ha diretto 8 tesi di dottorato e circa 25 tesi di laurea.

Organizzazione di Conferenze:

LAT 89 Capri (con Cabibbo et al.)

Lincei 93 su "String Theory" (con Bianchi, Fucito e Sagnotti)

Cargese 90 (con Alvarez e Windey)

LAT 99 Pisa (con Di Giacomo et al.)

"Editor" del "Journal of Physics A"

E' regolarmente referee scientifico per le seguenti *riviste:*

Phys. Rev., Phys. Rev. Lett.,
Europhysics Letters,
European Physical Journal, Journal of Physics A.

Membro del Comitato per il Supercalcolo Scientifico
PQE2000.

Membro del comitato direttivo del "Consorzio Gran Sasso".

Recenti conferenze ad invito:

Madrid 2001;
Parma 2001; Ciocco 2001; Aachen "CCP 2001" 2001.

Alcune pubblicazioni recenti

(Per una lista completa delle pubblicazioni si veda

`http://chimera.roma1.infn.it/ENZO/`
):

1. *MARINARI E., PARISI G. (2001).* ***On the Effects of a Bulk Perturbation on the Ground State of 3D Ising Spin Glasse****. PHYSICAL REVIEW LETTERS. vol. 86, pp. 3887-3890 cond-mat/0007493.*

2. *BILLOIRE A., MARINARI E. (2000).* ***Evidence Against Temperature Chaos in Mean Field and Realistic Spin Glasses****. JOURNAL OF PHYSICS A-MATHEMATICAL AND GENERAL. vol. 33, pp. L265-L272 cond-may/9910352.*

3. *COLUZZI B., MARINARI E., PARISI G., RIEGER H. (2000).* ***On the Energy Minima of the SK Model*** *. JOURNAL OF PHYSICS A-MATHEMATICAL AND GENERAL. vol. 33, pp. 2851 cond-mat/0003287.*

4. *MARINARI E., MARTIN-MAYOR V., PAGNANI A. (2000).* ***SG Ordering in Diluted Magnetic Semiconductors: a MC Study.*** *PHYSICAL REVIEW B. vol. 62, pp. 4999 cond-mat/0002327.*

5.

MARINARI E., PAGNANI A., PARISI G. (2000). ***Critical Exponents of the KPZ Equation via Multi-Surface Coding Numerical Simulations****. JOURNAL OF PHYSICS A-MATHEMATICAL AND GENERAL. vol. 33, pp. 8181-8192 cond-mat/0005105.*

6.
MARINARI E., PARISI G. (2000). ***Comment on Triviality of the Ground State Structure in Ising Spin Glasses****. PHYSICAL REVIEW LETTERS. vol. 85, pp. 3332 cond-mat/0002457.*

7.
MARINARI E., PARISI G. (2000). ***On the Effects of Changing the Boundary Conditions on the Ground State of Ising Spin Glasses*** *. PHYSICAL REVIEW B. vol. 62, pp. 11677 cond-mat/0005047.*

8.
MARINARI E., PARISI G., RICCI-TERSENGHI F., RUIZ-LORENZO J. J. (2000). ***Off-Equilibrium Dynamics at Very Low T in 3D SG*** *. JOURNAL OF PHYSICS A-MATHEMATICAL AND GENERAL. vol. 33, pp. 2373 cond-mat/9910023.*

9.
MARINARI E., PARISI G., RICCI-TERSENGHI F., RUIZ-LORENZO J. J., ZULIANI F. (2000). ***RSB in Short Range SG: a Review of the Theoretical Foundations and the Numerical Evidence****. JOURNAL OF STATISTICAL PHYSICS. vol. 98, pp. 973 cond-mat/9906076.*

10.
MARINARI E., PARISI G., RICCI-TERSENGHI F., ZULIANI F. (2000). ***On the Use of Optimized Monte Carlo Methods for Studying Spin Glasses****. JOURNAL OF PHYSICS A-MATHEMATICAL AND GENERAL. vol. 34, pp. 383 cond-mat/0011039.*

11.
MARINARI E., PARISI G., ZULIANI F. (2000). ***Comment on Ising Spin Glasses in a Magnetic Field****. PHYSICAL REVIEW LETTERS. vol. 84, pp. 1056 cond-mat/9812401.*

12.
MARINARI E. (1999). ***Numerical Evidence for Continuity of Mean Field and Finite Dimensional Spin Glasses****. PHYSICAL REVIEW LETTERS. vol. 82, pp. 5175 cond-mat/9807261.*

---

9. Mesi persona

INDICARE l'impegno del Responsabile dell' Unita' di ricerca *12*

10. Sede Ricerca

Denominazione	*Dipartimento di Fisica, Universita' di Roma "La Sapienza"*
Via/piazza	*P. A. Moro 2*
Cap	*00185*
Città	*ROMA*
Provincia	*RM*
Nazione	*ITALIA*
Telefono	*+390649914363*
Fax	*+390649914387*
Posta elettronica	*enzo.marinari@roma1.infn.it*

---

11. Collaboratori

nº	Nome Cognome	Sesso	Data di nascita Luogo di nascita Provincia Codice Fiscale	Qualifica Istituzione di appartenenza matricola CNR	Funzioni Mesi persona
1.	*CRISANTI ANDREA*	*M*	*16/10/1960 roma RM CRSNDR60R16H501A*	*Professore associato universita' di roma la sapienza -*	*Senior researcher - 4*
2.	*PARISI GIORGIO*	*M*	*04/08/1948 roma RM PRSGRG48M04H501M*	*Professore ordinario universita' di roma la sapienza -*	*Senior researcher - 12*

---

12. Ripartizione finanziaria

Titolo	Quota 1 anno	Quota cofinanziamento	Quota 2 anno	Quota cofinanziamento
Personale: dipendente e non dipendente	*40* *(20658 Euro)*	*40* *(20658 Euro)*	*40* *(20658 Euro)*	*40* *(20658 Euro)*
Spese generali	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*
Attrezzature	*20* *(10329 Euro)*	*20* *(10329 Euro)*	*20* *(10329 Euro)*	*20* *(10329 Euro)*
Viaggi e missioni	*15* *(7747 Euro)*	*15* *(7747 Euro)*	*15* *(7747 Euro)*	*15* *(7747 Euro)*
Prestazioni di terzi	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*	*10* *(5165 Euro)*
Materiali	*5* *(2582 Euro)*	*5* *(2582 Euro)*	*5* *(2582 Euro)*	*5* *(2582 Euro)*
TOTALE	**100** ***(51646 Euro)***	**100** ***(51646 Euro)***	**100** ***(51646 Euro)***	**100** ***(51646 Euro)***

---

13. Note Ripartizione finanziaria

I 40 milioni per anno saranno usati per pagare per un periodo di due anni un borsista "post-doctoral". I 20 milioni di attrezzatura per anno serviranno nel primo anno ad acquistare una computer tipo Pentium per il borsista, ed un computer (da crate) per calcoli numerici. Nel secondo anno i 20 milioni per attrezzature consentiranno di aggiungere due ulteriori unita' all'attrezzatura di calcolo. I 15 milioni per anno di missioni consentiranno collaborazioni, partecipazioni e comunicazioni a conferenze, partecipazioni a meeting e scuole. I 5 milioni di materiale serviranno all'acquisto di carta, toner, ed in genere materiale di consumo, software, manuali. Le spese generali (10 milioni per anno) e di personale (10 milioni per anno) sono principalmente legate alle esigenze di gestione e coordinamento del progetto (il nostro gruppo coordina il progetto nazionale).

---

14. Durata

Durata progetto 2 anni

Firma ____ Data 10/09/2001 12:48

Per la copia da depositare presso il Rappresentante legale dell'Ente di appartenenza. - Se istituto del Cnr, presso il Direttore - per l'assenso alla diffusione via internet dei dati e la loro elaborazione necessaria al processo di Valutazione CL. 675/96 "Tutela dei dati personali" e per la veridicita' delle informazioni fornite.

.