Anno 2013

**Università degli Studi dell'AQUILA >> Sua-Rd di Struttura: "Scienze fisiche e chimiche"**

**B.1.b Gruppi di Ricerca**

**1. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Fisica dell' Atmosfera - CETEMPS |
| **Descrizione** | Gruppo di ricerca per lo studio di processi fisici e chimici rilevanti per la composizione e la dinamica dellatmosfera terrestre, finalizzati allo studio di variabilità climatica, meteorologica e del campo di radiazione, con strumenti modellistici e sperimentali.<br>- (a) Composizione atmosferica, radiazione, telerilevamento.<br>Membri: Guido Visconti (PO), Giovanni Pitari (PA), Vincenzo Rizi (RU), Gabriele Curci (RTDa), Natalia De Luca (AR), Daniela Iachetti (AR), Cecilia Tirelli (AR), Marco Iarlori (TL), Eva Mancini (TL), Cristiana Bassani (Ric. IIA-CNR), Irene Cionni (Ric. ENEA-ROMA), Paolo Tuccella (UPMC-LATMOS/IPSL, Francia).David Lee (MMU-Manchester, UK), Amund Sovde (CICERO, Norvegia), Valentina Aquila (GSFC, USA); Simone Tilmes (NCAR, USA).<br><br>- (b) Meteorologia, Idrologia, Clima.<br>Membri: Guido Visconti (PO), Rossella Ferretti (PA), Gianluca Redaelli (RU), Marco Verdecchia (RU), Barbara Grassi (RTDa), Sabrina Gentile (AR), Emanuela Pichelli (AR), Ida Maiello (AR), Adelaide Memmo (TL), Barbara Tomassetti (TL), Frank S. Marzano (Univ. Roma La Sapienza), Domenico Cimini (Ric. IMMA-CNR), Giulia Panegrossi (Ric. ISAC-CNR), Richard Rotunno (NCAR, USA), Ernani De Lima Nascimento (Università di Santa Maria, Brasile), Mario Montopoli (IEF-Cambridge, UK), Stephen Leroy (Harvard University, USA), Roberto Buizza (ECMWF, UK), Richard Goody (Harvard University, USA) , Pablo Canziani (UCA, Argentina).<br><br>- (c) Osservazioni e studi di gas in traccia ed aerosol a bordo di aerei strumentati e monitoraggio al suolo.<br>Membri: Piero Di Carlo (RU), Eleonora Aruffo (AR), Fabio Biancofiore (Borsista), Marcella Busilacchio (Borsista), Roderic Jones (Cambridge University, UK), Paul Palmer (University of Edinburgh, UK), James Lee (University of York, UK).<br><br>Strumenti e Metodologie:<br><br>Gruppo a- Modelli numerici globali di chimica, trasporto, radiazione e clima; modelli numerici a scala regionale di meteorologia, chimica, trasporto e radiazione; modelli a scatola per la fotochimica e le emissioni nel PBL; LIDAR Raman; fotometro solare (UV, VIS, IR); nefoipsometro; apparato di radiosondaggio e stazione lancio palloni meteorologici; piranometri UV; analizzatori di gas ed aerosol nello strato limite atmosferico. Per la ricerca sono utilizzati i seguenti laboratori: Laboratorio di Geofisica e Qualità dellAria; Laboratorio di Ottica Atmosferica; Laboratorio Radiosondaggi da Pallone; Stazione LIDAR Osservatorio Pierre Auger (Malargue, Argentina).<br><br>Gruppo b- Modello Meteorologico WRF-ARW utilizzato sia a scopo di ricerca che operativo. Il modello e le osservazioni da satellite, da radar etc permettono di capire processi la dinamica dellatmosfera umida migliorando la previsione meteorologica. Modello idrologico CHyM accoppiato con modelli climatici regionali. Modelli numerici climatici a scala globale e regionale. Ricevitore Satellitare; Radar Meteorologico di Monte Midia & Radar in Banda x dellAquila. Per la ricerca sono utilizzati i seguenti laboratori: Laboratorio di Meteorologia ed Idrologia - Sala Previsione Eventi Severi (SPES, sito web: http://cetemps.aquila.infn.it; http://skynet.phys.uniroma1.it/Main_index.htm ); Laboratorio di Modellistica climatica e Telerilevamento da satellite.<br><br>Gruppo c- Sistema a fluorescenza indotta da laser (LIF), a chemiluminescenza, assorbimento e diffusione della radiazione da diodo e laser per misure di gas atmosferici in traccia e del particolato. Stazioni meteorologiche, sistemi di misura di composti in traccia ultra-compatti (capacitivi, resistivi ed elettrochimici). Modelli statistici: regressivi e ricorrenti. Per la ricerca sono utilizzati i seguenti laboratori: Laboratorio per osservazioni atmosferiche a bordo di aerei strumentati (http://www.aquila.infn.it/lif/); Osservatorio Portella del Gran Sasso (http://cetemps.aquila.infn.it/index.php?option=com_wrapper&view=wrapper&Itemid=232).<br><br>Obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni<br><br>Gruppo a- Lobiettivo generale della ricerca è lavanzamento nella conoscenza della composizione atmosferica e la riduzione delle incertezze legate al suo impatto sul sistema atmosfera-radiazione-clima, mediante studi condotti nellambito di collaborazioni internazionali. Gli obiettivi specifici del periodo sono: (1) sensibilità radiativo-climatica a tecniche di geo-ingegneria; (2) fotochimica e trasporto dellozono atmosferico e dei suoi precursori e radiosondaggio da palloni sonda; (3) impatto radiativo diretto e indiretto degli aerosol atmosferici; (4) impatto delle emissioni da flotte aeree sulla composizione atmosferica ed il trasferimento radiativo; (5) processi fisico-chimici e trasporto a larga scala di composti naturali ed antropici nella bassa atmosfera e qualità dellaria; (6) telerilevamento dei profili verticali delle proprietà ottiche degli aerosol atmosferici e impatto degli eventi di trasporto a larga scala.<br><br>Gruppo b- Tra gli obiettivi primari di rilevanza internazionale cè quello di illustrare alla comunità scientifica le motivazioni e lorganizzazione della campagna internazionale HyMeX tenutasi sul bacino del Mediterraneo. Così come le potenzialità del data set costruito con le osservazioni ed i modelli meteorologici ed idrologici al fine di capire i processi fisici e migliorare i modelli stessi. Il gruppo che ha partecipato come referente Meteorologico italiano si sta dedicando allo studio di alcuni eventi meteorologici significativi che sono stati osservati durante la campagna, tra gli altri obiettivi cè la previsione Meteorologica operativa. Inoltre, verrà affrontato lo studio dei possibili effetti dei cambiamenti climatici sul |

| | |
|---|---|
| | ciclo idrologico con particolare riferimento a possibili aumenti dei fenomeni critici in grado di provocare esondazioni e danni al territorio. Verrà utilizzata lanalisi statistica bayesiana di dati climatici per il miglioramento delle capacità previsionali dei modelli climatici. Si continuerà lanalisi delle variazioni dei ghiacci alle alte latitudini sui regimi meteorologici a medie latitudini. Verrà sviluppato un sistema operativo per la realizzazione di previsioni climatiche stagionali sul bacino del Mediterraneo.<br><br>Gruppo c- Gli obiettivi principali riguardano lo studio degli effetti delle attività umane e dei fenomeni naturali sul degrado della qualità dellaria attraverso diverse campagne internazionali intensive e la realizzazione di nuovi sistemi osservativi per misure di parametri chimico-fisici dellatmosfera. In dettaglio gli obiettivi possono essere così sintetizzati: Osservazione di composti in traccia a bordo di aerei strumentati in campagne di misura intensive; monitoraggio al suolo di parametri chimico-fisici dellatmosfera. Studio dellevoluzione dellozono e dei suoi precursori in aree metropolitane. Monitoraggio dei parametri chimico-fisici dellatmosfera e studio, mediante modelli statistici, dei loro effetti sulla produzione dei tartufi. Sviluppo di sistemi osservativi compatti per network osservativi a basso costo ed a bordo di aeromobili telecomandati. Studio dei radicali atmosferici che controllano la chimica notturna troposferica e confronto tra modelli a box ed osservazioni a bordo di aerei. Modelli statistici per lo studio degli effetti di terremoti sulla biodiversità<br><br>Collaborazioni internazionali attive:<br>a) Paolo Tuccella (UPMC-LATMOS/IPSL, Francia), David Lee (MMU-Manchester, UK), Amund Sovde (CICERO, Norvegia), Valentina Aquila (GSFC, USA); Simone Tilmes (NCAR, USA);<br>b) Richard Rotunno (NCAR, USA), Ernani De Lima Nascimento (Università di Santa Maria, Brasile), Stephen Leroy (Harvard University, USA), Roberto Buizza (ECMWF, UK), Richard Goody (Harvard University, USA), Mario Montopoli (IEF-Cambridge, UK), Pablo Canziani (UCA, Argentina);<br>c) Roderic Jones (Cambridge University, UK), Paul Palmer (University of Edinburgh, UK), James Lee (University of York, UK).<br><br>Collaborazioni nazionali attive:<br>Cristiana Bassani (IIA-CNR), Irene Cionni (Ric. ENEA, Roma), Frank S. Marzano (Univ. Roma La Sapienza), Domenico Cimini (Ric. IMAA-CNR, Potenza), Giulia Panegrossi (Ric. ISAC-CNR, Roma). |
| **Sito web** | www.dsfc.univaq.it; cetemps.aquila.infn.it; http://cetemps.aquila.infn.it/osservatorio |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | VISCONTI Guido (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE10 - Earth System Science: Physical geography, geology, geophysics, atmospheric sciences, oceanography, climatology, ecology, global environmental change, biogeochemical cycles, natural resources management |
| PE10_1 - Atmospheric chemistry, atmospheric composition, air pollution |
| PE10_14 - Earth observations from space/remote sensing |
| PE10_16 - Ozone, upper atmosphere, ionosphere |
| PE10_3 - Climatology and climate change |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| IACHETTI | Daniela | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | GEO/12 |
| DI CARLO | Piero | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/06 |
| FERRETTI | Rossella | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/06 |
| GENTILE | Sabrina | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | GEO/12 |
| MAIELLO | Ida | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | GEO/12 |
| PICHELLI | Emanuela | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | GEO/12 |
| PITARI | Giovanni | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | GEO/12 |
| REDAELLI | Gianluca | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | GEO/12 |
| ARUFFO | Eleonora | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | FIS/06 |
| RIZI | Vincenzo | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/01 |
| VERDECCHIA | Marco | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/06 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Cristiana Bassani (IIA-CNR), Irene Cionni (Ric. ENEA, Roma), Frank S. Marzano (Univ. Roma La Sapienza), Domenico Cimini (Ric. IMAA-CNR, Potenza), Giulia Panegrossi (Ric. ISAC-CNR, Roma), Barbara Grassi (RTDA), Natalia De Luca (AR), Gabriele Curci (RTDa), Cecilia Tirelli (AR), Fabio Biancofiore (Borsista), Marcella Busilacchio (Borsista), Marco Iarlori (TL), Eva Mancini (TL), Adelaide Memmo (TL), Barbara Tomassetti (TL). |

**2. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Fisica dello Spazio e delle Relazioni Sole-Terra |
| **Descrizione** | Gruppo di ricerca per lo studio di: a) effetti della variabilità del vento solare e del campo magnetico interplanetario sulla dinamica magnetosferica, b) propagazione di onde magnetoidrodinamiche in magnetosfera, c) relative implicazioni nellambito dello Space Weather. Tali studi vengono condotti principalmente mediante misure delle variazioni del campo geomagnetico in un ampio range di frequenze acquisite con continuità da stazioni magnetometriche (realizzate e gestite dal gruppo) a bassa latitudine (rete SEGMA) e in Antartide. Tramite consolidate collaborazioni scientifiche viene fatto uso anche di misure da altre reti di stazioni magnetometriche, misure ionosferiche e misure da satelliti magnetosferici e interplanetari. Il gruppo partecipa al Consorzio Interuniversitario per la Fisica Spaziale ed al Consorzio di Ricerca in Astrogeofisica. Ha la responsabilità dellInternational Space Science School (http://www.cifs-isss.org/) che opera stabilmente a LAquila sotto la direzione del Prof. U. Villante organizzando con cadenza semestrale/annuale corsi internazionali inerenti tematiche di Scienze e Tecnologie dello Spazio di norma legati ai principali programmi spaziali.<br><br>Linee di ricerca:<br><br>- Onde ULF nella magnetosfera (U. Villante, P. Francia, M. De Lauretis, M. Vellante, M. Regi). Lo studio delle oscillazioni del campo geomagnetico nella banda ULF, in particolare nellintervallo di frequenza 2-100 mHz, viene condotto principalmente mediante lutilizzo delle misure presso le stazioni magnetometriche della rete SEGMA e presso le stazioni antartiche Mario Zucchelli a Baia Terra Nova e Concordia a Dome C. In particolare vengono studiate le onde che traggono la loro origine dallinterazione della magnetosfera con il vento solare. Per questo motivo, si utilizzano anche i dati di satelliti magnetosferici e nel vento solare disponibili presso il database della NASA. Vengono esaminati i meccanismi con cui onde già presenti nel vento solare si trasmettono nella magnetosfera e i processi tramite i quali le onde si generano alla magnetopausa. Viene studiata inoltre limportanza di tali processi in corrispondenza della variabile attività del Sole e della conseguenti variazioni della struttura del vento solare.<br><br>- Monitoraggio remoto della densità del plasma magnetosferico (M. Vellante, E. Pietropaolo, M. Piersanti, A. Del Corpo). Questa tecnica si basa sulla rilevazione di oscillazioni stazionarie delle linee del campo geomagnetico mediante confronto spettrale dei segnali magnetici nella banda ULF (1 mHz-1Hz) acquisiti da una densa rete di stazioni a terra estesa in latitudine. Tale studio viene effettuato mediante una rete di 25 stazioni magnetometriche (inclusa SEGMA) che si estende dallItalia alla Finlandia e che è stata realizzata nellambito del progetto FP7 PLASMON (2011-2014). Mediante tali misure si intendono esaminare aspetti quali: distribuzione spaziale ed evoluzione temporale della concentrazione del plasma magnetosferico durante le tempeste geomagnetiche, processi di interazione tra plasmasfera e ionosfera, valutazione della composizione ionica del plasma magnetosferico mediante confronto con corrispondenti misure della concentrazione elettronica ottenute dallanalisi di segnali whistlers e/o da misure in situ.<br><br>- Determinazione dei sistemi di correnti magnetosferici e ionosferici (U. Villante, M. Piersanti). La determinazione e la discriminazione dei sistemi di correnti magnetosferici e ionosferici durante i periodi di magnetosfera attiva rappresenta un importante settore scientifico che riveste anche applicazioni pratiche nellambito dello Space Weather. Le variazioni impulsive di pressione dinamica del vento solare, che spesso anticipano le tempeste geomagnetiche, determinano rapidi incrementi del campo geomagnetico e magnetosferico (SI, Sudden Impulses) dovuti all'impatto sulla magnetopausa di discontinuità del vento solare. Le osservazioni congiunte di reti magnetiche a Terra, di sonde magnetosferiche ed interplanetarie ed il confronto con modelli di rappresentazione del campo magnetosferico consentono di identificare, con crescente approssimazione, il contributo delle correnti magnetosferiche (magnetopausa, coda, corrente anulare, etc) e di quelle ionosferiche sulle perturbazioni del campo geomagnetico.<br><br>- Effetti della variabilità del vento solare sul clima (P. Francia, M. De Lauretis, M. Regi). Studio dei possibili effetti dellattività geomagnetica, risultanti dallinterazione dinamica della magnetosfera con il vento solare, sullatmosfera in particolare ad alte latitudini. Vengono effettuati studi di confronto tra le variazioni della potenza delle onde ULF e della temperatura superficiale in Antartide durante la fase declinante del ciclo solare, caratterizzata da fasci di vento solare veloce. Tali studi vengono condotti anche nellambito dellazione EU COST ES1005 Towards a more complete assessment of the impact of solar variability on the Earths climate del cui Management Committee fa parte la dr.ssa Patrizia Francia.<br><br>- Precursori geomagnetici dellattività sismica (U. Villante, M. De Lauretis, P.Francia, M. Vellante). Studio di anomalie nellattività di pulsazioni ULF eventualmente collegabili con lattività sismica tramite lanalisi delle misure della rete SEGMA.<br><br>Obiettivi di ricerca per il triennio 2014-2016:<br><br>Studio (mediante collaborazione con altri gruppi nazionali partecipanti al progetto PRIN Il sole attivo ed i suoi effetti sul clima dello spazio e della terra, 2012P2HRCR_004) di eventi importanti per lo Space Weather sullintera catena dallorigine solare alle perturbazioni geomagnetiche.<br>Studi sulla generazione e trasmissione di onde ULF nella magnetosfera terrestre.<br>Collaborazione con IIAPS-INAF per lo studio di oscillazioni del campo geomagnetico generate dallinterazione con strutture di vento solare (progetto PNRA 2013/AC3.08 Studio bipolare di fenomeni magnetosferici con SuperDARN ed osservazioni ottiche e magnetiche); verranno utilizzate le misure del radar SuperDARN sito a Dome C e le misure geomagnetiche di Terra Nova Bay per lo studio di eventi selezionati.<br>Studio degli effetti dellattività geomagnetica sulla dinamica atmosferica ad alta latitudine (progetto PNRA 2013/B2.09 Linfluenza della variabilità solare e geomagnetica sullatmosfera polare). Il progetto, in collaborazione con il gruppo di Fisica dellAtmosfera del DSFC, prevede di individuare modi di variabilità atmosferici che risultino accoppiati con le variazioni dell'intensità dell'attività geomagnetica e di analizzare le correlazioni tra le serie temporali dei dati atmosferici provenienti dalle re-analisi e dei parametri del campo geomagnetico in Antartide.<br>Realizzazione, presso un server dedicato sito nel DSFC, di un sistema di monitoraggio remoto in tempo quasi reale della concentrazione del plasma magnetosferico lungo un profilo radiale tra 1.6 e 6 raggi terrestri dalle misure della rete magnetometrica EMMA (progetto FP7 PLASMON, 263218).<br>Sviluppo di collaborazioni scientifiche con altri gruppi internazionali che gestiscono reti di magnetometri (quali ad esempio le reti MacMAC e CARISMA in USA) per una analisi congiunta di queste misure e quella della rete EMMA con |

| | |
|---|---|
| | lo scopo di ottenere una descrizione più completa della dinamica plasmasferica ad esempio durante una tempesta geomagnetica. La collaborazione potrà essere sviluppata anche mediante temporanee permanenze allestero di dottorandi/assegnisti del gruppo.<br>Approfondimento delle ricerche inerenti la determinazione dei sistemi di correnti magnetosferici e ionosferici mediante le analisi di osservazioni congiunte di reti magnetiche a Terra, di sonde magnetosferiche ed interplanetarie ed il loro confronto con modelli di rappresentazione del campo magnetosferico.<br>Studi sulla contaminazione antropica nella banda ULF.<br>Mantenimento della rete magnetometrica SEGMA e delle stazioni magnetiche in Antartide.<br>Partecipazione allorganizzazione a LAquila nel 2014 dello Science Working Team della missione Solar Orbiter il cui lancio è previsto per il 2017.<br>FORMAZIONE AVANZATA: Organizzazione da parte dell International School of Space Science di corsi dedicati ad aspetti dello Space Weather ed alle principali missioni spaziali in programma.<br>Promozione della costituzione di un Gruppo Nazionale per lo sviluppo della ricerca scientifica nel settore dello Space Weather.<br>Partecipazione al gruppo di lavoro relativo allesperimento di plasma su Solar Orbiter.<br><br>Collaborazioni internazionali attive:<br>B. Heilig (Geological and Geophysical Institute of Hungary), J. Lichtenberger (Eötvös University, Hungary), J. Reda (Institute of Geophysics Polish Academy of Sciences), E. Tanskanen (Finnish Metereological Institute), P. Sutcliffe (South African Space Agency), A.M. Jørgensen (New Mexico Institute of Mining and Technology, USA), W. Magnes (Institut für Weltraumforschung, Graz, Austria), P. Nenovski (University Center for Space Research and Technologies, Sofia, Bulgaria), K.H. Glassmeier (Institut für geophysik und extraterrestrische, Technische Universität Braunschweig, Germany), N. Tsyganenko (St. Petersburg State University, Russia). |
| **Sito web** | http://sole-terra.aquila.infn.it |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | VILLANTE Umberto (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE9_1 - Solar and interplanetary physics |
| PE9_15 - Space Sciences |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| DE LAURETIS | Marcello | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/06 |
| FRANCIA | Patrizia | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/05 |
| PIERSANTI | Mirko | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | FIS/06 |
| PIETROPAOLO | Ermanno | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/05 |
| VELLANTE | Massimo | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/06 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Mauro Regi (Borsista), Alfredo Del Corpo (Borsista) Andrea Piancatelli (TL). |

---

**3. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Fisica della Materia Sperimentale |
| | Lattività di ricerca è focalizzata allo studio sperimentale delle proprietà fisiche (strutturali, elettroniche, magnetiche, ottiche) della materia in fase liquida e/o solida, sia per ricerca di base che applicata, mediante strumentazione presente nei laboratori del Dipartimento ma anche presso grandi facilities internazionali (luce di sincrotrone, sorgente di neutroni). Una notevole importanza<br><br>Strumenti e Metodologie<br><br>a. Proprietà elettroniche e strutturali di nanomateriali<br>Membri del sottogruppo: Maurizio Passacantando (RU), Sandro Santucci (PO), Valentina Grossi (AR)<br>Sono state messe a punto differenti tecniche di crescita, quali chemical vapor deposition, vapour-liquid-solid deposition ed electrospinning deposition, per la realizzazioni di nanostrutture quali nanotubi di carbonio (CNT), nanofili di Ge, nanofibre di WO3 e nanofibre di materiali organici. Di questi materiali sono state studiate le proprietà fondamentali, mediante lutilizzo di microscopia a forza atomica, microscopia a scansione di elettroni, spettroscopia di fotoemissione X. In particolare: per i CNT sono state studiate le proprietà strutturali e morfologiche, inoltre è stato effettuato un interessante studio di nanomanipolazione di MWCNTs e studio delle proprietà di trasporto di un singolo MWCNT e la possibilità di ottenere emissione di campo, la realizzazione di un dispositivo rivelatore di radiazione è stato ottenuto sfruttando le proprietà di MWCNTs. Lemissione di campo da un singolo foglio di grafene è stata osservata e studiata. Nellambito dei materiali nanostrutturati a base di carbonio interessanti sono stati gli studi effettuati su spugne di |

| | |
|---|---|
| **Descrizione** | nanofibre di carbonio, dalle quali si sono verificate le proprietà elastiche e di conduzione di tali sistemi, e la sua peculiare proprietà di assorbimento di oli dispersi in acqua.<br>Infine, sono state cresciute e studiate le proprietà morfologiche, strutturali ed elettroniche di nanoparticelle di ossido di cerio e loro applicazioni in campo bio-medico.<br><br>b. Materiali bidimensionali e molecole organiche<br>Membri del sottogruppo: Luca Ottaviano (RU), Stefano Prezioso (Borsista INFN), Federico Bisti (AR), Francesco Perrozzi ( Studente di Dottorato in Fisica), Maurizio Donarelli (studente di Dottorato in Fisica)<br>La ricerca del sottogruppo nel triennio 2011-2013 si è concentrata sullo studio di proprietà fondamentali e applicazioni di materiali bidimensionali (Graphene, Grafene Ossido e Molibdenite) nonché sullo studio di proprietà elettroniche di molecole organiche (AlQ3, ErQ3, e Acido Croconico). Tutti I risultati prodotti sono stati ottenuti nellambito di collaborazioni di ateneo, nazionali, e Internazionali. Si sono, ad esempio, determinate le proprietà di gas Sensing di Ossido di grafene, nonché le sue proprietà di internalizzazione in cellule. Dei suddetti materiali si sono determinate le proprietà fondamentali mediante microscopia a forza atomica, microscopia a scansione di elettroni, spettroscopia di fotoemissione X, spettroscopia Raman, e spettroscopie avanzate mediante uso di luce di sincrotrone.<br><br>c. Materiali nanostrutturati<br>Membri del sottogruppo: Sandro Santucci (PO), Luca Lozzi (RU), Fabrizio Ruggieri (AR) Daniela Di Camillo (Borsista), Roberta Totani (studentessa PhD)<br>Lattività scientifica si è indirizzata verso la crescita e caratterizzazione di materiali nanostrutturati, quali film ultrasottili di molecole organiche su substrati di interesse tecnologico, nanofibre depositate mediante elettrospinning e near-field elettrospinning per la realizzazione di dispositivi ottici, sensori di gas e fotocatalizzatori per la degradazione, sotto luce visibile, di composti inquinanti presenti nellacqua. I campioni sono stati analizzati mediante microscopia a scansione elettronica (SEM), la spettroscopia di fotoemissione X (XPS) e UV (UPS), e diffrazione X (XRD) per lanalisi della struttura cristallina. Le nanofibre per applicazioni in ottica sono state realizzate utilizzando polimeri coniugati, mentre per la realizzazione di sensori di gas e fotocatalizzatori si sono usate fibre di TiO2 drogate con metalli (Cu, Fe, W) e con azoto. Nellambito dellattività di ricerca sui fotocatalizzatori sono stati realizzati anche film sottili di TiO2 drogato con azoto, mediante tecnica sol-gel, composti da nanocristalli caratterizzati mediante spettroscopia XPS e diffrazione X.<br><br>d. Proprietà magnetiche dei materiali<br>Membri del sottogruppo: Franco DOrazio (RU)<br>Studio delle proprietà di film e nanostrutture magnetiche. Lambito riguarda le caratterizzazione di film, multistrati, nano particelle, e nanostrutture di natura magnetica. Particolare interesse è rivolto alla relazione tra proprietà strutturali e magnetiche dei sistemi studiati. Parte dei film e multistrati studiati è realizzata in sede.<br>Il sottogruppo si avvale delle attrezzature presenti nel Laboratorio di Magnetismo costituite da: un impianto di deposizione di magnetron sputtering a radiofrequenza in geometria verticale per la fabbricazione di film e multistrati; di un magnetometro a gradiente alternato per misure di cicli di isteresi, curve di rimanenza, curve di inversione magnetica del primo ordine, rilassamento della magnetizzazione; di un apparato di magnetoottica per misure di effetti Kerr, Faraday e di dicroismi magnetici.<br>Lanalisi delle risposte magnetiche è indirizzata a comprendere i processi che sono alla base dei meccanismi di magnetizzazione interessanti per le possibili applicazioni nellambito della registrazione magnetica e nella sensoristica.<br><br>e. Spettroscopia al THz<br>Membri del sottogruppo: Pasquale Carelli (PO)<br>La spettroscopia al THz con strumentazione veloce ed economica ha assunto un grande interesse negli ultimi anni. I problemi in questo campo sono rappresentati dalle sorgenti, dal cammino del fascio prodotto, dalla filtrazione dei segnali spuri e della rivelazione. In questo primo anno si è concentrata le ricerca nella focalizzazione di sorgenti termiche (globar) ed iniziato luso di Laser a Cascata Quantica di due gruppi di diversi uno di 2.2 THz forniti da Stefano Barbieri (Univ. Di Parigi 7) che è stato ben caratterizzato e focalizzato, e abbiamo iniziato ad usare 4 QCL a 4 frequenze diverse (tra 2.2 e 4.7THz) sullo stesso supporto dell ETH di Zurigo. I laser vengono focalizzati mediante degli specchi speciali in alluminio di forma ellissoidale fabbricati ad hoc. Per quanto riguarda la filtrazione usiamo delle metasuperfici di Alluminio fabbricate da noi con tecniche di nanolitografia mediante Litografia a fasci di elettroni. Il rivelatore in questa fase è sia un piroelettrico di medie prestazioni commerciali che un bolometro superconduttore (fabbricato nello stesso gruppo) immerso in dewar ad elio liquido con prestazioni di circa 4 ordini di grandezza migliori di rivelatori a temperature ambiente.<br><br>f. Fotonica e nanotecnologie<br>Membri del sottogruppo: Elia Palange (PA),<br>1. Studio della ottimizzazione della risposta spettroscopica derivante dallapplicazione delleffetto SEIRA (Surface Enhanced Infra-Red Absorption Spectroscopy) in sistemi molecolari a singolo strato adsorbito su metasuperfici composte da nanostrutture metalliche. Mediante la soluzione propagativa delle equazioni di Maxwell ottenuta con le tecniche numeriche alle differenti finite, si sono studiate una serie di geometrie di metasuperfici formate da nanostrutture metalliche di varia forma geometrica depositate su un substrato di silicio con il fine di aumentare la sensibilità di misura delleffetto SEIRA. 2. Caratterizzazione del funzionamento di fotodiodi di Si utilizzati come detector per la misura di variazioni dellintensità luminosa in sistemi spettroscopici. E stata studiata la variazione della capacità interna della giunzione pn del fotodiodo in funzione della intensità della luce su di esso incidente. E stato dimostrato che il sistema di detection proposto non ha i limiti imposti dalla scelta della sensibilità dello strumento di misura utilizzato per la misura delle fotocorrenti e che ha la sensibilità di misura superiore fino a due ordini di grandezza rispetto a quelle ottenibili con le tecniche tradizionali<br><br>g. Fisica dei sistemi disordinati e della materia in condizioni estreme<br>Membri del sottogruppo: Michele Nardone (PO), Adriano Filipponi (PO). Paola Benassi (RU), Batignani (Studente PhD)<br>Si indagano, con varie tecniche, spettroscopiche e non, le proprieta strutturali e dinamiche di sistemi disordinati in fase densa, quali fluidi, vetri e amorfi, e sistemi molecolari complessi, con particolare interesse per il loro comportamento in stati termodinamici esotici ottenibili in condizioni estreme di temperatura e pressione.<br>Le tecniche spettroscopiche comprendono la spettroscopia Brillouin, eccitata con radiazione sia visibile che ultravioletta, lo scattering di raggi X e di neutroni e la spettroscopia XAFS. Queste tecniche vengono usate per lo studio delle eccitazioni collettive longitudinali e trasversali ad alto momento trasferito in liquidi e solidi disordinati e leffetto dei processi di rilassamento strutturale sulla loro propagazione in liquidi, tipicamente glass formers e nei loro vetri corrispondenti. Per la spettrosopia di Brillouin si usa sostanzialmente lo spettrometro HIRESUV, totalmente progettato e costruito presso il Dipartimento di Fisica dellAquila per spettroscopia ad alta risoluzione e contrasto nell Ultravioletto.<br>La spettroscopia Raman e invece utilizzata prevalentemente per la caratterizzazione spettroscopica di materiali complessi. In particolare per la caratterizzazione spettroscopica di strati singoli e multipli di grafene, ossido di graferne e |

materiali analoghi di interesse per la microelettronica e studio e caratterizzazione di nanotubi di carbonio. In questo ambito si è applicata principalmente la micro-spettroscopia Raman, utilizzando lo strumento LABRAM dell Horiba-J.Y. con eccitazione a 632 nm dotato di diverse ottiche e di porta campioni criostatici fino a 10 K.
Tra le tecniche non spettroscopiche sono incluse metodologie per la produzione e caratterizzazione di fluidi metastabili. La strumentazione a disposizione del laboratorio viene anche utilizzata, soprattutto come tecnica di caratterizzazione dei campioni, nellambito di numerose collaborazioni intra e inter dipartimentali.

h.
i. hoòk

Obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni

a. Ci si propone di proseguire nelle stesse linee di ricerca rafforzando il risultato in termini di pubblicazioni e collaborazioni internazionali. Verranno presentati progetti, sia nazionali che internazionali, per lutilizzazione dei materiali nanostrutturati in diversi ambiti, quali biotecnologico ed elettronico/meccanico.
b. Negli obiettivi di ricerca del sottogruppo ci sono: i) obiettivi di ricerca: studio delle proprietà elettroniche fondamentali del grafene con intercalazione di Litio e per sostituzione isotopica con C13, studio delle proprietà indotte da difetti degli effetti di nanolitografia su MOS2, studio delle proprietà del GO come materiale avanzato nella interazione con materiale biologico, studio delle proprietà fondamentali e applicazioni del fosforene, ii) obiettivi di disseminazione: per il 2015 verrà organizzata una conferenza internazionale sul grafene (in collaborazione con il CNR di Bologna) dal titolo GraphITA 2015 con pubblicazione degli atti su un volume di Springer, iii) obiettivi di training: alta formazione di ricerca mediante erogazione e rinnovo di uno o due assegni di ricerca sui temi sopra indicati, formazione di almeno 4 studenti di laurea magistrale e triennale.
c. Continuerà lattività sulle interfacce tra film organici ultrasottili e substrati di interesse tecnologico, principalmente per applicazioni sensoristiche e fotovoltaiche. Per le nanofibre polimeriche si svilupperà lo studio per la deposizione di fibre allineate con caratteristiche particolari quali conduzione elettrica, per la realizzazione di dispositivi su scala nanometrica. Continuerà lo studio di ossidi di titanio drogati per la realizzazione di sistemi per la depurazione delle acque. Verranno presentati progetti, si in ambito nazionale che internazionale, per attività di ricerca in questi settori, sia per quanto riguarda la ricerca di base che per applicazioni in campo microelettronico, anche in stretta collaborazione con imprese.
d. Approfondimento dello studio di strutture multistrato con interazioni di scambio. Effetti di exchange-bias, magnetoelasticità. Caratterizzazione dei sistemi fabbricati con luso di large facilities. Si cercherà di consolidare le collaborazioni, attualmente in fase preliminare, con ricercatori di istituzioni estere dotate di tali facilities. Inoltre, si favorirà la ricerca di argomenti comuni con gli altri membri del (macro)gruppo e del dipartimento.
e. Nel futuro vi è il completamento delle misure con 4 QCL, lutilizzazione di nuove sorgenti compatte (commerciali), la fabbricazione e progettazione di nuovi filtri selettivi, luso di piroelettrici di migliori prestazioni (commerciali). Questa ricerca vuole affrontare nel prossimo triennio tutte le problematiche al THz avendo come scopo finale la fabbricazione di un strumento per spettroscopia al THZ in trasmissione e riflessione: compatto, veloce, in aria e possibilmente economico.
f.
g. Verra proseguito lo studio delle eccitazioni collettive in fase densa usando principalmente scattering inelastico di raggi-X (a causa della temporanea indisponibilita dello spettrometro HIRESUV).
Al fine di incrementare le collaborazione interdisciplinari allinterno del Dipartimento, si intende affrontare lo studio mediante spettroscopia Raman, delle proprieta vibrazionali di Sali fusi di interesse per la Green Chemistry sfruttando le competenze del gruppo di Chimica teorica e computazionale.
Sara` ulteriormente sviluppata l'indagine delle proprieta` macro e microscopiche della gomma vulcanizzata. Inoltre sara` affrontata la problematica di sistemi ionici o molecolari in soluzione utilizzando anche informazioni ottenibili da tecniche spettroscopiche nel dominio ottico (Femtosecond broadband Stimulated Raman Scattering) e dei raggi-X.

Collaborazioni internazionali attive

a. T. Schroeder and G. Lupina (IHP, D), D. K. Basa(Utkal University, India), C. Bittencourt (University of Mons, BE), A. Di Giuseppe (Universidad de Zaragoza, ES)
b. dr. Olga Kazakova e Cristina Giusca (National Physical Laboratory London UK ), dr. Mirko Rocci, prof. J Santamaria (Universidad Complutense de Madrid, ES), dr. Miguel Borras (Cerotox Parco Scientifico di Barcellona, ES), dr. Carla Bittencourt (Universitè de Mons, BE), dr. Biplab Sanyal, dr.ssa Suparna Sanjal (Università di Uppsala, Svezia), prof. Alexander Gerber (Università di Tel Aviv, IL), dr. Alberto Bianco (Università di Strasburgo, FR), dr. Alex Grueneis (Università di Koln, DE), dr. Monika Kwoka, prof. J. Szuber (Università Politecnica della Slesia, PL), dr. Otakar Frank (Università di Praga, CZ).
c. Dror Avisar (Università di Tel Aviv, IL), Mark Baker (Università del Sussex, UK), Gerald Heinicke (DHI Group, DK), Alison Crossley (Universitàà di Oxford, UK), Brad A. Racette (Washington University School of Medicine, USA)
d. Demetrio Roberto Cavicchia (Institute of Applied Physics, University of Hamburg, Germany), Erika Jimenez (ESRF, Grenoble, France), Nikolai Mikuszeit (CEA (INAC/SP2M/NM), Grenoble, France)
e. Giacomo Scalari (ETH, Zurigo CH)
f.

Sito web:
http://www.dsfc.univaq.it/it/

Coordinatore:
Santucci Sandro

Settori ERC del Gruppo:
PE3 Condensed matter physics [PE3_1 Structure, PE3_5 Electronic properties of materials and transport, PE3_11 Magnetism, PE3_12 Nanophysics: nanoelectronics, nanophotonics, nanomagnetism, PE3_15 Soft condensed matter (liquid crystals) of solids and liquids]
PE4 Physical and Analytical Chemical sciences [PE4_1 Physical chemistry, PE4_5 Surface science]
PE5 Materials and Synthesis [PE5_1 Structural properties of materials, PE5_2 Solid state materials, PE5_3 Surface modification, PE5_4 Thin films, PE5_8 New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, superconductors, PE5_9 Materials for sensors, PE5_10 Nanomaterials : nanoparticles, nanotubes]

Componenti interni allateneo

| | |
|---|---|
| | Sandro Santucci (PO), Paquale Carelli (PO), Adriano Filipponi (PO), Michele Nardone (PO), Elia Palange (PA), Paola Benassi (RU), Franco DOrazio (RU), Luca Lozzi (RU), Luca Ottaviano (RU), Maurizio Passacantando (RU), Fabbrizio Ruggieri (AR), Valentina Grossi (AR), Federico Bisti (AR), Daniela Di Camillo (Borsista), Batignani (PhD student), Roberta Totani (PhD student), Francesco Perrozzi (PhD student), Maurizio Donarelli (PhD student), Lorella Rossi (TD, 50%), Angelo Gaudieri (TD),<br><br>Settori Concorsuali coinvolti: 02/B1, 02/B2 (FIS/01, FIS/03) |
| **Sito web** | http://www.dsfc.univaq.it/it/ |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | NARDONE Michele (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE3 - Condensed Matter Physics: Structure, electronic properties, fluids, nanosciences, biophysics |
| PE3_10 - Nanophysics: nanoelectronics, nanophotonics, nanomagnetism, nanoelectromechanics |
| PE3_4 - Electronic properties of materials surfaces, interfaces, nanostructures |
| PE3_8 - Magnetism and strongly correlated systems |
| PE4 - Physical and Analytical Chemical Sciences: Analytical chemistry, chemical theory, physical chemistry/chemical physics |
| PE4_1 - Physical chemistry |
| PE4_4 - Surface science and nanostructures |
| PE5 - Synthetic Chemistry and Materials: Materials synthesis, structure-properties relations, functional and advanced materials, molecular architecture, organic chemistry |
| PE5_1 - Structural properties of materials |
| PE5_2 - Solid state materials |
| PE5_3 - Surface modification |
| PE5_4 - Thin films |
| PE5_6 - New materials: oxides, alloys, composite, organic-inorganic hybrid, nanoparticles |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| BENASSI | Paola | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |
| CARELLI | Pasquale | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | FIS/01 |
| CASIERI | Cinzia | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/07 |
| D'ORAZIO | Franco | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |
| FILIPPONI | Adriano | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | FIS/01 |
| GROSSI | Valentina | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | FIS/03 |
| LOZZI | Luca | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |
| PALANGE | Elia | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/01 |
| PASSACANTANDO | Maurizio | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |
| RUGGIERI | Fabrizio | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/01 |
| SANTUCCI | Sandro | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | FIS/01 |
| TOTANI | Roberta | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | FIS/03 |
| OTTAVIANO | Luca | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Federico Bisti (AR), Daniela Di Camillo (Borsista), Roberta Totani (PhD student), Francesco Perrozzi (PhD student), Maurizio Donarelli (PhD student), Lorella Rossi (TD), Angelo Gaudieri (TD),Franco Giammaria (TD) Stefano Prezioso (Borsista INFN), Fabio Chiarello (IFN-CNR), Guido Torrioli (IFN-CNR), Maria Gabriella Castellano (IFN-CNR), Roberto Leoni (IFN-CNR), Sara Cibella (IFN-CNR) |

**4. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Fisica teorica della Materia |
| **Descrizione** | Il gruppo di fisica teorica della materia si occupa di studiare fenomeni e apparati ottici per comunicazione in fibra ottica e sistemi di materia condensata. In particolare si studiano gli effetti di propagazione nei collegamenti ottici a lungo raggio e la modellizzazione di dispositivi fotonici. Inoltre si studiano proprietà elettroniche e strutturali di materiali convenzionali e non, anche in condizioni estreme. Infine si sviluppano modelli di meccanica statistica per materia soffice come fluidi polimerici. Il gruppo è organizzato nei seguenti sottogruppi: (a) comunicazioni ottiche e dispositivi a stato solido; (b) struttura elettronica da principi primi di materiali reali di diversa tipologia; (c) modelli e metodi di meccanica statistica per lo studio di proprietà strutturali e di trasporto dei solidi e di sistemi polimerici per materia soffice e vivente.<br><br>Gli obiettivi della ricerca dei sottogruppi sono di seguito elencati:<br><br>(a) le ricerche di questo sottogruppo riguardano le seguenti tematiche: (a1) trasmissioni monomodali: si studiano gli effetti di propagazione lineari e non-lineari in collegamenti ottici monomodali e possibili tecniche di compensazione. Tra questi rientrano la Polarization-Dependent Loss (PDL) ed il rumore da interferenza non-lineare; (a2) trasmissioni multimodali: Si studiano gli effetti di propagazione lineare e non-lineare in sistemi Space Division Multiplexing (SDM) ad alta capacità. Tra i principali sviluppi rientrano: lestensione multimodale del formalismo di Jones e di Stokes, lo studio della dispersione modale, la derivazione dellequazione di Manakov e delle equazioni che descrivono lo scattering Raman stimolato in fibre multimodali con modi spaziali fortemente accoppiati; (a3) reflective semicondutor optical amplifier (RSOA): Nellambito del progetto PRIN2011 ROAD-NGN si è sviluppato un modello ridotto semi-analitico per gli amplificatori a semiconduttore ottici (SOA) utilizzati in configurazione riflettente (RSOA). (a4) limiti fondamentali al consumo energetico dei sistemi ottici: Si studia il consumo energetico di sistemi ottici coerenti con amplificatori laser che raggiungono la capacità trasmissiva secondo la generalizzazione quantistica della teoria di Shannon.<br><br>(b) le ricerche di questo sottogruppo si articolano nelle seguenti tematiche: (b1) studio di proprietà elettroniche, magnetiche e ottiche di composti a carattere prevalentemente metallico e di superfici metalliche nanostrutturate. Vengono studiate la relazione tra momento magnetico e volume di equilibrio nei nitruri di ferro bulk Fe4N con sostituzione di altri metalli di transizione (M= Ni, Co, Mn) al Fe, e le proprietà elettroniche e di legame di semplici molecole depositate su substrati metallici di Cu e Al; (b2) Si studiano le proprietà di materiali superconduttori, in particolare la dipendenza della superconduttività dalle proprietà strutturali, elettroniche, magnetiche e dinamiche dei diversi materiali in presenza di droganti e disordine. (b3) Studio delle proprietà strutturali ed elettroniche di materiali bidimensionali a base di carbonio. Questa attività di ricerca è focalizzata sullo studio del grafene cresciuto su vari substrati metallici ed isolanti per comprendere i meccanismi alla base delle modifiche delle sue proprietà fisiche. Lo studio è anche esteso a vari altri materiali attualmente sintetizzati come il fosforene, MoS2, monolayer di calcogenuri. (b4) Studio ab-initio della transizione metallo-isolante e di dissociazione molecolare nellidrogeno in condizioni estreme. A tal fine è necessario luso di metodi di elettroni correlati come il Monte Carlo Quantistico. Lattività del gruppo è incentrata sullo sviluppo metodologico, in particolare il metodo Coupled Electron-Ion Monte Carlo (CEIMC).<br><br>(c) in questo sottogruppo si collocano ricerche basate su modelli di meccanica statistica per lo studio di proprietà termodinamiche e di trasporto di sistemi con forte correlazione elettronica e disordine, e per lo studio di fluidi polimerici complessi. Le ricerche si articolano nelle seguenti tematiche: (c1) trasporto e proprietà spettrali (fotoemissione risolta in angolo) in sistemi a bassa dimensionalità con applicazione a semiconduttori cristallini costituiti da molecole organiche (rubrene, pentacene, etc.); (c2) sistemi elettronici fortemente correlati con particolare riguardo alla transizione metallo-isolante studiata con tecniche di tipo DMFT (Dynamical Mean Field Theory).; (c3) trattamento non-perturbativo delleffetto combinato del disordine e dell'interazione elettrone-fonone in materiali realistici. (c4) sviluppo di strategie di coarse-graining per fluidi complessi con applicazione a fluidi polimerici.<br><br>Strumenti e Metodologie<br>Le ricerche sopra descritte sono basate su metodi di simulazione numerica come Dinamica Molecolare e Monte Carlo. La struttura elettronica viene risolta principalmente con metodi basati sulla Teoria del Funzionale della Densità, con metodi di Monte Carlo Quantistico e di Teoria di Campo Medio dinamica. I modelli teorici sono analizzati con tecniche della teoria di campo applicata alla materia condensata.<br>Il gruppo si avvale delluso di risorse di calcolo ad alte prestazioni (High Performance Computing (HPC)). Le assegnazioni di risorse vengono ottenute a seguito di selezioni competitive internazionali (progetti PRACE, INCITE e ISCRA) presso centri di calcolo in Europa e negli USA. Una importante risorsa di calcolo locale è il cluster CALIBAN annoverabile tra le grandi attrezzature del DSFC.<br><br>Obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni<br><br>- Studio delle proprietà del rumore nonlineare (NLIN) nei sistemi WDM non compensati, estensione al caso di multiplazione di polarizzazione ed individuazione di tecniche di mitigazione.<br>- Studio della Mode-Dependent Loss (MDL) dei sistemi SDM ed impatto sulla capacità di sistema. Modello analitico per le misure sperimentali di risposta impulsiva. Effetto della dispersione modale sulla interazione nonlineare.<br>- Studio della banda di modulazione di un RSOA ed effetti di intermodulazione in schemi per reti di accesso.<br>- Studio di schemi di trasmissione non convenzionali ad elevata efficienza energetica.<br>- Studio del comportamento dei momenti magnetici localizzati in varie interfacce Fe(4-x)Nx. Calcolo delle proprietà ottiche della superficie (dicroismo).<br>- Studio di interfacce nanostrutturate di sistemi metallo-organici anche complessi con lutilizzo di dinamica molecolare per la determinazione delle configurazioni di equilibrio dellinterfaccia.<br>- Studio ab-initio di materiali superconduttori a base di Fe (Progetto PRIN2012 RIDEIRON): individuazione dei meccanismi fondamentali che ne determinano le proprietà elettroniche di stato normale e superconduttore con particolare riguardo agli effetti del drogaggio e del disordine sulle proprietà elettroniche e di trasporto.<br>- Studio a principi primi di materiali di interesse per lelettronica e la sensoristica: grafene e materiali a bassa dimensionalità di interesse per applicazioni<br>- Predizione di nuovi materiali superconduttivi mediante machine-learning e metodi ab-initio<br>- Studio della dinamica di non equilibrio per il trasferimento di carica nei semiconduttori organici (applicazione alle celle fotovoltaiche)<br>- Studio delle proprietà di coerenza ed entanglement quantistico di sistemi quantistici disordinati<br>- Inclusione delle correlazioni elettroniche e/o della struttura a bande ab-initio nei modelli di solidi disordinati |

| | |
|---|---|
| | - Studio delle fasi cristalline dellidrogeno molecolare e della dissociazione molecolare in fase solida<br>- Studio della transizione di fusione nellidrogeno e interplay con la transizione liquido-liquido<br>- Studio sistematico della qualità di funzionali DFT per lidrogeno intorno alla transizione metalloisolante<br>- Studio della linea di Huogoniot principale del deuterio con il CEIMC<br>- Strategia coarse-graining per dispersioni colloidali<br>- Modellizzazione coarse-grained di fasci di actina nella filopodia (progetto PRIN-2012NNRKAF_001 (coordinatore A. Maritan)<br><br>Collaborazioni nazionali e internazionali attive<br>Mark Shtaif (Tel Aviv University, Israel), Peter Winzer (Alcatel-Lucent Bell Labs USA), Marco Santagiustina (Università di Padova), Michael Vasilyev (University of Texas at Arlington USA), Larry Coldren (UCSB, USA), C. Franchini (University of Vienna, AT), J. Redinger (TU. Vienna, AT), E.K.U Gross e A. Sanna (MPI Halle, DE), M. Calandra e F. Mauri (CNRS, UPMC, FR), O. Eriksson (Uppsala University, SE),T. P. Gasche (Universidade de Lisboa, PT), T. Bjorkman (Aalto University, Helsinki, FI), F. Finocchi (CNRS, FR), S. Fratini, D. Mayou, X. Blaise, V. Olevano (Insitut Neél, CNRS FR), G. Sangiovanni (Wurzburg University, DE), A. Toschi (TU Wien, AT), A. Morpurgo (Université de Genève, CH), Kyle M. Shen e D.G. Schlom (Cornell University USA), H. Okamoto (University of Tokyo JP), D.M. Ceperley (UIUC USA), B Bernu (CNRS, LPTMC FR), M. Holzmann (CNRS, LPMMC FR), M.A. Morales (LLNL, USA), A. Pelissetto and G. Ciccotti (Sapienza, Roma IT), J.P. Ryckaert (ULB, Belgium), L Delle Site (Frei Universitat, Berlin DE), E. Cappelluti (CNR-ISC, Rome IT).<br><br>Settori Concorsuali coinvolti: 02/B2 |
| **Sito web** | www.dsfc.aquila.infn.it |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | MECOZZI Antonio (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE3 - Condensed Matter Physics: Structure, electronic properties, fluids, nanosciences, biophysics |
| PE7 - Systems and Communication Engineering: Electronic, communication, optical and systems engineering |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| CIUCHI | Sergio | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/03 |
| CONTINENZA | Alessandra | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/03 |
| DI SANTE | Domenico | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | FIS/03 |
| MONACHESI | Patrizia | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/01 |
| PROFETA | Gianni | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |
| PIERLEONI | Carlo | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/03 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | S. Picozzi e A. Ciattoni (CNR-Spin, L'Aquila, IT), Cristian Antonelli (Borsista), Fabio Ricci (CNR-SPIN); |

---

**5. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Fisica Teorica delle Particelle Elementari |
| | Fisica Teorica Particellare e Astroparticellare, con i seguenti principali filoni di ricerca:<br><br>Fisica Teorico-Particellare: Modello Standard delle interazioni fondamentali e sue estensioni, supersimmetria e grande unificazione, origine di masse e mescolamento di quarks e leptoni e problema del flavor, violazione CP, violazione di numero barionico e leptonico, masse e mixing di neutrini, fisica dell'assione ed altri pseudoscalari leggeri.<br><br>Fisica del neutrino: masse e oscillazioni dei neutrini, neutrini solari, atmosferici, da Supenovae, da resti di Supernovae, geoneutrini, neutrini astrofisici di alta energia, flusso di neutrini cosmogenici, neutrino sterile.<br><br>Cosmologia dell'universo primordiale: bariogenesi e leptogenesi, modelli di cogenesi di materia barionica e oscura, analisi dei processi di nucleosintesi primordiale (BBN) e implicazioni su proprietà non standard delle particelle. Problema del Litio cosmologico.<br><br>Materia oscura cosmologica e candidati particellari, modi di rivelazione diretta e indiretta di materia oscura, neutrino sterile come materia oscura, evoluzione cosmologica, fondo CMB e struttura dell'universo su larga scala.<br><br>Astrofisica particellare: raggi cosmici di altissima energia e cutoff GZK, limiti astrofisici su assione ed altre particelle leggere, stelle di neutroni ed altri oggetti compatti. |

| | |
|---|---|
| **Descrizione** | Modificazione della gravita', costruzione di modelli generali di gravita' massiva e bigravita', soluzioni a simmetria sferica in teoria di bigravità, cosmologia FRW in teorie di massive gravity, dark energy o modificazione di gravita'.<br><br>Attività prettamente teorica con l'ausilio dei mezzi di calcolo.<br><br>Obiettivi della ricerca dei prossimi 3 anni<br><br>- Grande unificazione supersimmetrica, modelli delle masse e mescolamento dei quarks e leptoni, problema del flavor, simmetria SU(3) tra le famiglie fermioniche e sue implicazioni.<br><br>- Violazione di numero barionico; oscillazione di neutrone in antineutrone e in neutrone mirror (n-n'), violazione spontanea di numero barionico, analisi dei dati sperimentali sulla ricerca di oscillazione n-n' e sue implicazioni per la propagazione di raggi cosmici ad altissima energia e per la nucleosintesi primordiale.<br><br>- Materia oscura atomica dai settori gauge nascosti, modelli di cogenesi di materia barionica e oscura, implicazioni per la nucleosintesi primordiale, materia oscura con mini-carica elettrica, materia oscura mirror, conseguenze cosmologiche e rivelazione diretta e indiretta alla luce degli esperimenti recenti.<br><br>- Studio dei neutrini solari, delle prospettive di rivelazione delle componenti secondarie del flusso (neutrini CNO) e del problema della composizione solare. Limiti sulla produzione di assioni, dark-photons ed accumulazione di materia oscura nel Sole.<br><br>- Studio dei neutrini astrofisici di alta energia: analisi dei risultati dellesperimento IceCube. Identificazione dei meccanismi di produzione e delle possibili sorgenti astrofisiche e cosmologiche.<br><br>- Neutrini sterili come possibili candidati per la materia oscura: analisi delle implicazioni cosmologiche ed astrofisiche. Neutrini sterili come neutrini mirror.<br><br>- Modelli di energia oscura e gravità modificata: deformazioni della relatività generale in modo che il gravitone acquisti la massa (massive gravity). Costruzione generale di modelli di massive gravity e le loro conseguenze cosmologiche.<br><br>- Sistemi auto-gravitanti compatti: le conseguenze fisiche della presenza di quark deconfinati in sistemi compatti in cui la gravità è forte. In particolare, le proprietà<br>dei modi torsionali di questi sistemi dominati dallo shear modulus.<br><br>Collaborazioni internazionali attive:<br>A. D. Dolgov e O.V. Kancheli (ITEP, Moscow, Russia), I. I. Tkachev (INR, Moscow, Russia), A. Gazizov (DESY Zeutchen, Germany), A. Serenelli (CSIC-IEEC, Spain), M. Pinsonneault (Univ. Ohio, USA), Y. Kamyshkov (Univ. Tennessee, USA), G. Tasinato (Swansea Univ., UK), F. Nesti (Boskovic Inst., Croazia).<br><br>Collaborazioni nazionali attive:<br>A. Ianni, M. Mannareli, G. Pagliaroli, F. Vissani (INFN, Laboratori Nazionali del Gran Sasso), C. Broggini e L. Canton (INFN Sezione di Padova), D. Comelli (INFN Sezione di Ferrara), G. Fiorentini (Univ. Ferrara).<br><br>Settori Concorsuali coinvolti: 02/A2  FIS/02, FIS/04 |
| **Sito web** | www.dsfc.aquila.infn.it |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | BEREJIANI Zourab (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE2_1 - Fundamental interactions and fields |
| PE2_13 - Relativity |
| PE2_2 - Particle physics |
| PE2_4 - Nuclear astrophysics |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| BIONDI | Riccardo | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | FIS/02 |
| DI PANFILO | Gianfranco | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | FIS/02 |
| PILO | Luigi | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/02 |
| PARISI | Alessandro | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | FIS/04 |
| ROSSI | Nicola | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | FIS/04 |
| VILLANTE | Francesco Lorenzo | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/04 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Fabrizio Nesti (assegnista Univ. L'Aquila 01/10/201131/09/2012, Boskovic Inst., adesso), Marco Crisostomi (Dottorato fino 30/10/2013, Univ. Portsmouth, adesso), Aldo Ianni, Massimo Mannareli, Giulia Pagliaroli, Francesco Vissani (INFN, Laboratori Nazionali del Gran Sasso), Denis Comelli (INFN, Sezione di Ferrara) |

**6. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Fisica Sperimentale delle Particelle Elementari |
| **Descrizione** | Fisica Sperimentale Particellare e Astroparticellare, con i seguenti principali filoni di ricerca:<br><br>Osservazione dei Raggi Cosmici di energia ultra elevata (UHE): la ricerca viene effettuata presso l'Osservatorio Pierre Auger a Malargüe in Argentina. Il gruppo del Dipartimento ha contribuito alla costruzione dellOsservatorio fin dal 2001, e l'INFN, tramite il Gruppo Collegato del Dipartimento, ha fornito i fondi necessari. L'Osservatorio è il più esteso al mondo sviluppandosi su un'area di 3000 km quadri. La Collaborazione Pierre Auger comprende 17 Nazioni, la componente italiana 10 tra istituti universitari e di ricerca e circa 500 ricercatori.<br>I temi di ricerca riguardano la misura dello spettro e della composizione dei Raggi Cosmici e l'interpretazione di queste osservabili in termini delle sorgenti astrofisiche che li originano.<br>Il gruppo aquilano comprende collaboratori associati ai Laboratori Nazionali del Gran Sasso e del Gran Sasso Science Institute.<br>Nell'ambito di questa attività è iniziata un'intensa collaborazione tra afferenti a due diversi SSD attivi in Dipartimento, quello particellare (FIS/01-04) e quello atmosferica (FIS/06), attività che continua ed è stata estesa a nuovi temi di ricerca (di seguito riportati) e rappresenta uno dei migliori esempi di ricerca interdisciplinare del Dipartimento.<br><br>Studio dell'emissione di radiazione UV e MW da particelle cariche in atmosfera: la ricerca viene effettuata nell'ambito degli esperimenti AirFly e AMY, condotti presso laboratori italiani e esteri (Frascati - IT, Argonne e FermiLab USA). Entrambe le collaborazioni hanno carattere internazionale. La ricerca è indirizzata allo sviluppo di tecniche di rivelazione delle cascate di particelle indotte dal passaggio dei Raggi Cosmici nell'atmosfera terrestre. Anche questa attività viene svolta da un gruppo interdisciplinare del Dipartimento comprendente fisici delle particelle e atmosferici.<br><br>Studio della radiazione cosmica (fotoni e raggi cosmici carichi) e sviluppo di rivelatori dalle caratteristiche estremamente avanzate. Esperimenti LISA-Pathfinder e GAMMA-400. Studio del caricamento delle masse di test ed analisi dei dati dei radiation monitors di LISA-PF (il lancio della missione è previsto nel 2015) ed attività sperimentale sul doppio pendolo PETER (laboratorio INFN di Napoli). Attività nellambito del progetto GAMMA-400 che prevede la realizzazione di un apparato per la rivelazione di fotoni e di raggi cosmici carichi (elettroni fino a 10 TeV, nuclei fino al ginocchio) con elevate sensibilità e risoluzioni angolare ed energetica. Parti essenziali di questo apparato sono:<br>1. un tracciatore-convertitore al silicio-tungsteno dalle caratteristiche estremamente avanzate;<br>2. un calorimetro omogeneo ad alta granularità per la separazione tra sciami elettromagnetici e sciami adronici.<br><br>Fisica delle Oscillazioni di Neutrini, con particolare riferimento ad oscillazioni su short-baseline di neutrini sterili nel range di masse intorno 1 eV presso il FERMILAB in USA. Il programma sperimentale (SBN, Short Baseline Neutrino Program) recentemente approvato, condiviso e finanziato da FERMILAB, CERN e INFN, prevede la realizzazione di 3 rivelatori a diverse distanze dalla sorgente di neutrini presso il Booster Neutrino Beam a FERMILAB. I tre rivelatori condividono la stessa tecnologia ad Argon Liquido.<br><br>Il programma sperimentale SBN con rivelatori LArTPC al FERMILAB e sostenuto da un programma parallelo di sviluppo e caratterizzazione della tecnica sperimentale mediante esposizione a fasci di particelle cariche (test-beams).<br><br>Strumenti e metodologie<br><br>Gli esperimenti cui partecipa il gruppo sono principalmente eseguiti in laboratori esterni (osservatori, satelliti, acceleratori di particelle), per cui lattività in sede si concentra su analisi dei dati, simulazioni e test dei rivelatori. Lanalisi dei dati e le simulazioni sono svolte utilizzando risorse di calcolo locali o esterne (LNGS, CNAF, etc.) e si avvalgono di linguaggi di calcolo avanzati e package di analisi esterni.<br>Il gruppo si avvale di un laboratorio: questo, che ospita anche i servers dipartimentali e il laboratorio magistrale per lindirizzo particellare, viene utilizzato per il test di prototipi di rivelatori per apparati sperimentali e dispone di rivelatori per radiazione cosmica, raggi X, gamma e neutroni.<br>Il laboratorio è attrezzato con elettronica NIM e CAMAC per rivelatori e acquisizione dati, sistemi alta tensione e pompe da alto vuoto.<br><br>Obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni<br><br>La maggioranza degli esperimenti illustrati hanno uno sviluppo pluriennale. Pertanto le attività corrispondenti continueranno nel prossimo triennio.<br><br>Per quanto riguarda le attività esistenti, l'esperimento Pierre Auger ha in programma un upgrade dell'osservatorio con l'inserimento di nuovi rivelatori per la misura della componente muonica per lo studio della composizione chimica oltre le energie attualmente studiate. Proseguiranno le attività di routine che riguardano il monitoraggio dell'apparato e dell'atmosfera. In quest'ultimo campo proseguirà la collaborazione con il gruppo di fisica dell'atmosfera per la presa dati e l'analisi del lidar Raman costruito a L'Aquila e installato all'osservatorio.<br><br>Il Short Baseline Neutrino program prevede la realizzazione di 3 rivelatori a LArTPC. Uno di questi, MicroBooNE nella stazione intermedia, e già completato e sta per entrare in funzione. Lattività sperimentale pertanto sarà inizialmente concentrata nelle misure di sezioni durto esclusive di neutrini (su nuclei Ar) nel range del GeV di energia incidente, con particolare enfasi allo studio di effetti nucleari recentemente evidenziati dalle misure dellesperimento ArgoNeuT (Short Range Correlated Structure in Nuclei), grazie alla stessa tecnica sperimentale ad alta definizione. |

| | |
|---|---|
| | Lesperimento Lar1-ND e invece il primo sulla linea di fascio quale Near Detector, e rappresenta la stazione di riferimento senza oscillazioni. Lesperimento (circa 100 t LArTPC) e in fase di progettazione, linizio della costruzione si prevede entro il corrente anno. Di particolare interesse la realizzazione del sistema di raccolta e lettura della luce di scintillazione in Argon, segnale che si puo combinare con il segnale in carica fornito dalla TPC. Questa e la linea di sviluppo della tecnologia LAr di maggior interesse.<br><br>Lesperimento LArIAT proposto nel 2011 e entrato in funzione con un run tecnico nel 2014 e sta per iniziare il primo run di Fisica (Marzo 2015) con lobiettivo di misurare le sezioni durto nei canali esclusivi di interazione di pioni e kaoni in Ar nel range di energia 0.2 - 2.0 GeV, di specifico interesse per la fisica dei neutrini per i programmi di Short- e Long-Baseline. Si prevede un secondo run di Fisica nel 2016 per lo studio delle interazioni di antiprotoni su Ar e lo studio della separazione elettrone/gamma in LArTPC.<br><br>Collaborazioni internazionali attive:<br><br>Gli esperimenti cui partecipa il gruppo sono condotti da collaborazioni che comprendono numerose istituzioni universitarie e di ricerca, nazionali e internazionali. Queste collaborazioni vengono istituite al momento della formulazione delle proposte scientifiche alle competenti agenzie di ricerca e rimangono generalmente attive per tutta la durata degli experimenti. Nel caso della più estesa fra queste collaborazioni (Pierre Auger) le istituzioni interessate sono oltre 80. Per questo non vengono riportate in questo documento.<br><br>Le collaborazioni MicroBooNE, LAr1-ND e LArIAT contano numerose istituzioni americane (tra le maggiori Universita e Laboratori di Ricerca) ed alcune europee e giapponesi. Solo di recente IINFN e entrato a far parte del programma SBN. Si auspica un progressivo allargamento ad altre istituzioni italiane ora che il programma SBN e giunto alla sua approvazione finale.<br><br>Settori Concorsuali coinvolti: 02/A1 FIS/01, FIS/04, FIS/06, FIS/07 |
| **Sito web** | www.dsfc.aquila.infn.it |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | PETRERA Sergio (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE2_1 - Fundamental interactions and fields |
| PE2_2 - Particle physics |
| PE2_4 - Nuclear astrophysics |
| PE9_10 - High energy and particles astronomy - X-rays, cosmic rays, gamma rays, neutrinos |
| PE9_17 - Instrumentation - telescopes, detectors and techniques |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| CAVANNA | Flavio | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | FIS/04 |
| FINETTI | Noemi | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/07 |
| PIANO MORTARI | Giovanni Battista | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | FIS/01 |
| RIZI | Vincenzo | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/01 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Aurelio Grillo (INFN), Ornella Palamara (INFN), Denise Boncioli (assegnista INFN), Armando di Matteo (studente di Dottorato), Marco Iarlori (TL), Stefano Galli (T) |

---

**7. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Metodi Avanzati di Analisi |
| | Lattività di ricerca del gruppo verte sullo studio di sistemi complessi mediante lapplicazione di metodi di analisi cromatografica, di spettroscopia atomica e molecolare e tecniche avanzate di spettrometria di massa, combinate con metodi di separazione cromatografica. Le suddette tecniche sperimentali sono utilizzate nello studio di vari sistemi di interesse chimico o tecnologico. In questo ambito vengono sviluppati e validati metodi di analisi di specie chimiche di interesse biologico, ambientale ed alimentare. Si utilizza inoltre la chemiometria per la progettazione degli esperimenti, per lo sviluppo di modelli statistici multivariati che possano essere di ausilio nellottimizzazione dei metodi, nella previsione di proprietà chimiche e nel trattamento e linterpretazione dei dati analitici. Si utilizza inoltre la spettrometria di massa avanzata del tipo: i) Solid-phase Micro Extraction (SPME) accoppiata alla analisi GC-MS; ii) HPLC-ESI-MS con |

| | |
|---|---|
| **Descrizione** | analizzatore triplo quadrupolare; iii) UPLC-ESI-MS con analizzatore del tipo Q-ToF; iv) MALDI-MS con analizzatore del tipo HR-ToF. Il gruppo si articola in due sottogruppi di ricerca: Spettrometria di Massa e Chimica Analitica<br><br>Sottogruppo Spettrometria di Massa (De Angelis Francesco, Crucianelli Marcello, Aschi Massimiliano, Reale Samantha).<br>Il sottogruppo in questione svolge la propria attività di ricerca nei seguenti ambiti:<br>- analisi, caratterizzazione e studi biosintetici di biopolimeri quali lignine e melanine;<br>- studi di vie sintetiche per polimeri del tipo eumelanin-bioinspired;<br>- caratterizzazione di miscele complesse derivanti dalla liquefazione idrotermica di biomasse (in particolare la frazione organica dei rifiuti solidi urbani) per ottenere bio-oli;<br>- studi delle reazioni di liquefazione idrotermica attraverso limpiego di modelli molecolari semplici (amminoacidi, monosaccaridi, trigliceridi);<br>- struttura e caratterizzazione funzionale di estratti di piante/molecole bioattive (anti- e pro-ossidanti, polifenoli, feromoni, isoprenoidi );<br>- studio e caratterizzazione di complessi organometallici;<br>- studio di meccanismi di reazione di reazioni organiche complesse-multistadio;<br>- studio di aspetti teorici-computazionali di reazioni organiche complesse-multistadio;<br><br>Strumenti e metodologie<br>Oltre le tecniche analitiche classiche (in particolare HPLC/UPLC, GC-MS e SPME-GC-MS), vengono impiegate tecniche di ionizzazione spettrometrica di massa soft (ESI, APPI e APCI) accoppiate ad analizzatori ad alta (q-ToF) ed altissima risoluzione (FT-ICR in tal caso in collaborazione con IIstituto Donegani delleni-ricerche - Novara) permettendo, in questultimo caso, un approccio analitico di tipo petroleomico. In aggiunta, tutte le tecniche su esposte permettono un approccio del tipo tandem-MS per una più avanzata affidabilità degli studi di caratterizzazione strutturale. Gli spettrometri dotati di sorgente ESI sono anche accoppiati a sistemi separativi del tipo HPLC/UPLC. Il tutto si avvale dellutilizzo di software avanzati per la gestione del dato analitico, oltre che ovviamente per il funzionamento delle apparecchiature.<br><br>Gli obiettivi di ricerca per i prossimi 3 anni del sottogruppo sono:<br>- determinazione di vie sintetiche per la formazione di polimeri bioispirati con caratteristiche di semiconduttori;<br>- caratterizzazione di biomasse e bio-oli ottenute da idroliquefazione di residui urbani solidi, nella prospettiva del loro impiego per la produzione di bicarburanti di terza generazione;<br>- caratterizzazione di prodotti ottenute per idroliquefazione di bio-molecole modello;<br>- caratterizzazione e quantificazione di carotenoidi in matrici di origine agroindustriale;<br>- caratterizzazione e quantificazione di terpeni di interesse farmacologico in specie di Artemisia;<br>- caratterizzazione di complessi organometallici;<br>- studio degli step di reazione e caratterizzazione degli intermedi di reazioni organiche multistadio catalizzate da complessi organometallici;<br>- pubblicazioni scientifiche sulle più importanti riviste internazionali nel settore (alti IF);<br>- partecipazione attiva a congressi di settore nazionali ed internazionali.<br><br>Sottogruppo Chimica analitica (DArchivio Angelo Antonio, Ruggieri Fabrizio)<br>Il sottogruppo di Chimica Analitica svolge attività di ricerca nei seguenti ambiti:<br>-applicazione della cromatografia liquida ad alta prestazione (HPLC), della cromatografia ionica e di tecniche di spettroscopia atomica e molecolare per la caratterizzazione di sistemi di interesse ambientale, biologico, alimentare o tecnologico. A tal fine, vengono sviluppati e validati metodi analitici e idonei procedimenti di trattamento del campione. Tra i casi oggetto di studio si possono citare lestrazione, la quantificazione e la stabilità dei principi attivi dello zafferano, della curcuma e del te; ladsorbimento di inquinanti su materiali polimerici; la determinazione di xenobiotici in tracce nelle acque.<br>- applicazioni della chemiometria per lottimizzazione della separazione cromatografica o per linterpretazione dei dati. In particolare, vengono sviluppati modelli statistici multivariati per lo studio delle relazioni quantitative struttura-ritenzione o struttura-proprietà di classi di molecole di interesse analitico. Prendendo spunto da questi, sono stati proposti modelli predittivi in grado di descrivere leffetto combinato della struttura molecolare e delle condizioni di separazione sul comportamento cromatografico degli analiti.<br>- studio di materiali nanostrutturati per applicazioni nellambito dei processi di trattamento delle acque. Tali studi sono condotti in collaborazione con il laboratorio di Fisica della Materia diretto dal Prof. Santucci e sono indirizzati alla messa a punto di materiali innovativi per la decontaminazione delle acque da parte di sostanze xenobiotiche. In particolare vengono studiati i fenomeni di adsorbimento e le cinetiche di degradazione catalizzate da materiali nanostrutturati foto-reattivi.<br><br>Strumenti e Metodologie<br>Oltre alle già citate tecniche sperimentali (cromatografia, spettroscopia atomica e molecolare), lanalisi chemiometrica dei dati si avvale di software dedicati, in particolare per il calcolo di proprietà molecolari, per la selezione delle variabili e la regressione multivariata lineare e non-lineare.<br><br>Gli obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni del sottogruppo di chimica analitica sono i seguenti:<br>-sviluppare ulteriormente gli approcci chemiometrici precedentemente delineati in ambito cromatografico. In particolare, si intende applicare lo studio delle relazioni struttura-proprietà a nuove classi di molecole di interesse analitico e in sistemi di separazione innovativi, e proporre modelli predittivi per la ritenzione cromatografica sotto lapplicazione di gradienti di composizione o di pH.<br>-effettuare lo studio mediante la combinazione di tecniche cromatografiche e spettroscopiche e approcci chemiometrici di sistemi di interesse agro-alimentare con la finalità di sviluppare metodi di analisi e separazione per specie chimiche di interesse nutrizionale e modelli statistici di classificazione per il controllo di qualità e la tracciabilità degli alimenti.<br>- la preparazione, la caratterizzazione e lo studio delle prestazioni di materiali innovativi potenzialmente utili nella separazione di specie chimiche di interesse analitico, nel pre-trattamento dei campioni o nella decontaminazione delle acque da inquinanti ambientali attraverso processi di adsorbimento e/o fotodegradazione.<br>Componenti interni allateneo<br>Settori Concorsuali coinvolti: 03/A1; 03/B1; 03/C1;<br>- Centro Ricerche per le Energie Non Convenzionali Istituto Eni Donegani, Novara, Italy<br>- Institut de Chimie de Nice, Université Nice Sophia Antipolis, NICE, France - Prof. Jean-Francois Gal<br>- Université Montpellier II, Montpellier, France<br>- Dipartimento di Chimica Organica e Biochimica, Università di Napoli Federico II, Napoli, Italy<br>Collaborazioni attive: |

| | |
|---|---|
| | sottogruppo Chimica Analitica (D'Archivio etc)<br>- Società srl Hortus Novus<br>- Società Innovation in Sciences & Technologies - Is TECH<br>- Laboratori Nazionali del Gran Sasso-INFN |
| **Sito web** | http://www.dsfc.univaq.it/it/ |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | D'ARCHIVIO Angelo Antonio (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE4_12 - Chemical reactions: mechanisms, dynamics, kinetics and catalytic reactions |
| PE4_18 - Environment chemistry |
| PE4_2 - Spectroscopic and spectrometric techniques |
| PE4_5 - Analytical chemistry |
| PE4_7 - Chemical instrumentation |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| IACOBUCCI | Claudio | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/06 |
| CRUCIANELLI | Marcello | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/03 |
| CROCE | Annamaria | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/06 |
| DE ANGELIS | Francesco | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | CHIM/06 |
| LEONARDIS | Irene | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | CHIM/06 |
| PIACENTE | Giovanni | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/03 |
| ROCCHI | Silvia | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/01 |
| RUGGIERI | Fabrizio | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/01 |
| ASCHI | Massimiliano | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/03 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Samantha Reale (TL),Maria Anna Maggi (Laureata- Azienda in colaborazione: Società s.r.l. Hortus Novus) |

---

**8. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Chimica Teorica e Computazionale |
| | Il gruppo svolge attività di ricerca in diversi ambiti della Chimica Fisica, della Chimica dei Sistemi Biologici e della Chimica dei Materiali utilizzando un ampio spettro di metodi teorici e tecniche computazionali che comprendono sia la Chimica Quantistica che la Meccanica Molecolare. Lutilizzo di queste tecniche permette di comprendere su scala atomica le proprietà strutturali, elettroniche, spettroscopiche e catalitiche dei sistemi studiati al fine di aiutare la comprensione e linterpretazione dei dati sperimentali. Membri del gruppo sono inoltre coordinatori di due progetti europei FP7: Il progetto multidisciplinare finanziato dallERC MultiscaleChemBio (2009-2014) ed il progetto Fortissimo (2014-2016).<br>Il gruppo svolge la sua attività nei seguenti ambiti di ricerca:<br><br>- Chimica computazionale dei Sistemi Biologici<br>Un filone di ricerca riguarda lo studio di processi di folding-misfolding e della dinamica conformazionale di peptidi e proteine attraverso l'utilizzo di metodi computazionali, in particolare simulazioni di dinamica molecolare classica, e in alcuni casi con il supporto di tecniche sperimentali, quali la spettroscopia di fluorescenza tempo-risolta e lo scattering di neutroni. Unaltra tematica affrontata recentemente riguarda il campo della fotosintesi al fine di comprendere su base atomica i meccanismi di funzionamento della reazioni che regolano la trasformazione dellenergia solare in energia chimica. In particolare è in corso lo studio delle proprietà catalitiche ed elettroniche del complesso proteine-cofattori denominato Fotosistema II, responsabile della reazione di ossidazione dellacqua indotta dalla luce solare. Attraverso un utilizzo combinato di tecniche quantistiche, classiche e miste quanto/classiche è inoltre oggetto di studio il meccanismo di trasferimento elettronico in biomolecole ed in sistemi modello. Alcuni esempi sono la riproduzione teorica di spettri UV-visibile ed IR di proteine in soluzione o lo studio di meccanismi di trasferimento elettronico (ET) in piccole molecole bioinorganiche. Lutilizzo delle simulazioni permette inoltre di calcolare in silico proprietà spettroscopiche (spettro UV-vis, IR, Raman) al fine di aiutare a comprendere ed interpretare dati sperimentali di spettroscopia<br><br>- Chimica computazionale dei Materiali |

| | |
|---|---|
| **Descrizione** | Ispirata a processi della fotosintesi naturale, la fotosintesi artificiale ha lobiettivo di sviluppare materiali e dispositivi che possano servire per la (foto)produzione di idrogeno a partire dallacqua. In questambito, in collaborazione con il CNR e la Freie Universitaet di Berlino si stanno studiando con dinamica da principi primi modelli di promettenti materiali inorganici nanostrutturati di recente scoperta per la costruzione delle cosiddette foglie artificiali. Tali studi sono finalizzati a identificare le analogie e le differenze tra le strategie catalitiche dei diversi materiali. In parallelo con lo studio delle analoghe reazioni svolte dal Fotosistema II potrebbero in futuro suggerire possibili strategie per sviluppare catalizzatori efficienti ed a basso impatto ambientale.<br>(spazio)<br>- Chimica computazionale dei liquidi e delle soluzioni<br>Studio delle relazioni tra la natura delle interazioni intermolecolari e le proprietà chimico fisiche di liquidi puri e soluzioni. Geometrie molecolari ed effetto dellintorno chimico. Importanti aspetti strutturali di liquidi molecolari e liquidi ionici quali leterogeneità dinamica, la nanosegregazione spaziale e la complessità delle interazioni, da modelli di meccanica classica e meccanica quantistica.<br><br>Strumenti e Metodologie<br>Per meglio studiare sistemi biologici nei quali le proprietà chimico-spettroscopiche dinteresse sono circoscritte ad una specifica regione di un sito attivo, sono state sviluppate ed utilizzate tecniche miste Quanto / Classiche come il metodo PMM e la dinamica da principi primi QM/MM. Recentemente, grazie al progetto europeo MultiscaleChemBio queste metodologie saranno estese anche a metodi di struttura elettronica che includono una trattazione di alto livello della correlazione elettronica come il Monte Carlo Quantistico.<br>Il Gruppo di Ricerca svolge la sua attività presso il Laboratorio di Chimica Computazionale e la grande attrezzatura Cluster di Calcolo ad alte prestazioni con rete Myrinet per la Chimica Computazionale. Attraverso la partecipazione a bandi competitivi nazionali ed internazionali basati su meccanismi di peer-review il Gruppo di Ricerca ha inoltre potuto utilizzare sia le strutture High-Performance-Computing del Cineca (grazie a bandi nazionali) che quelle di Julich in Germania e Saclay in Francia (grazie ai bandi PRACE  Parternship for Advanced Computing in Europe).<br><br>Obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni<br>- Sviluppo ulteriormente i modelli simulativi per permettere la caratterizzazione di processi di trasferimento elettronico in sistemi più complessi di quelli già studiati, quali gli enzimi e i sistemi fotosintetici.<br>- Estendere il campo di ricerca sui liquidi e soluzioni ai liquidi ionici costituiti da biomateriali interessanti per la loro scarsa tossicità ed elevata biodegradabilità.<br>- Applicare le n uove metodologie basate sul Monte Carlo Quantistico a diversi sistemi biologici.<br>- Aumentare le collaborazioni e limpatto scientifico del gruppo nella comunità internazionale che si occupa di fotosintesi naturale ed artificiale.<br><br>Collaborazioni internazionali attive<br>Jeremy Smith (ORNL, TN-USA), Holger Dau (Freie Univ. Berlin), Thomas Kuhne (Univ. of Mainz, Germania), Massimo Olivucci (Bowling Green State Univ. OH-USA), Alberto Mezzetti (CNRS, France), Riccardo Spezia (CNRS, France), Dr. Chao Zhang (Univ. di Cambridge, Regno Unito), |
| **Sito web** | http://dsfc.aquila.infn.it/ |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | RAMONDO Fabio (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE4_1 - Physical chemistry |
| PE4_11 - Physical chemistry of biological systems |
| PE4_13 - Theoretical and computational chemistry |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| BARBORINI | Matteo | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | CHIM/07 |
| COCCIA | Emanuele | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | CHIM/07 |
| DAIDONE | Isabella | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/03 |
| D'ALESSANDRO | Maira | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/03 |
| GUIDONI | Leonardo | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/07 |
| PIACENTE | Giovanni | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/03 |
| PITARI | Fabio | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/07 |
| ASCHI | Massimiliano | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/03 |
| TANZI | Luana | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/02 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Daniele Bovi (AR Sapienza, Univ. di Roma), Daniele Narzi (AR Sapienza, Univ. di Roma), Barbara Gregori (dottoranda Sapienza, Univ. di Roma), Giuseppe Mattioli (CNR-Montelibretti) |

**9. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Chimica Organica e Inorganica |
| **Descrizione** | Il gruppo svolge attività di ricerca in diversi ambiti della Chimica Organica, dei Fondamenti delle Scienze Chimiche e Sistemi Inorganici e dei Fondamenti Chimici delle Tecnologie, utilizzando un ampio spettro di metodologie sperimentali e tecniche spettroscopiche di identificazione dei composti che comprendono la Risonanza Magnetica Nucleare (RNM), la spettrometria di Massa, IR e UV. Lutilizzo di queste tecniche permette di comprendere le proprietà strutturali, elettroniche, spettroscopiche e catalitiche dei sistemi studiati al fine di aiutare la comprensione e linterpretazione dei dati sperimentali.<br>Il gruppo svolge la sua attività nei seguenti sottogruppi:<br><br>Sottogruppo CHIMICA SUPRAMOLECOLARE E NANOTECNOLOGIE<br>(Giorgio Cerichelli (PO), Nicoletta Spreti (PA), Giulia Fioravanti (RU), Luisa Giansante (RUTD), Virginia DAiuto (AR), Barbara Altieri (dottoranda), Manuela Petaccia (dottoranda), Silvia Rocchi (Dottoranda).<br><br>In questo sottogruppo si inserisce lattività di un progetto FIRB triennale iniziato nel 2013.<br>Una Tematica di ricerca riguarda lo "Studio di nuovi sistemi nanostrutturati per applicazioni nel campo delle bioconversioni." Lutilizzo di additivi idrosolubili (tensioattivi di sintesi, liquidi ionici, polimeri naturali, etc.) possono modificare in modo significativo le proprietà catalitiche di un enzima e gli effetti risultanti dipendono profondamente dalla struttura fine delladditivo selezionato. Laumento dellattività e/o stabilità, oltre a rivestire una rilevanza scientifica, può anche aprire la possibilità di sviluppi applicativi. Un metodo alternativo e promettente per la stabilizzazione enzimatica consiste nellimmobilizzazione su un supporto solido, permettendo un facile recupero sia dei prodotti della reazione che del catalizzatore. Lefficienza del biocatalizzatore è strettamente dipendente dalle caratteristiche del supporto solido e dal metodo di immobilizzazione. La tecnologia sol-gel è comunemente utilizzata per la produzione di materiali nanostrutturati grazie alla semplicità del processo e alla sua versatilità. Inoltre le proprietà chimico-fisiche dei materiali ottenuti possono essere facilmente modulate tramite laggiunta di opportuni additivi durante la sintesi della matrice stessa.<br>Un'altra tematica riguarda la "Sintesi e caratterizzazione chimico-fisica di tensioattivi e studio di aggregati supramolecolari." In particolare l'investigazione è centrata sullo studio di micelle e liposomi attraverso misure di NMR, spettroscopia UV-vis., fluorescenza, DLLS, calorimetria a scansione differenziale. La ricerca è focalizzata sulla formulazione e caratterizzazione di liposomi costituiti da fosfolipidi naturali e tensioattivi sintetici per la veicolazione di fotosensibilizzatori in terapie tumorali ed antibatteriche e per lo sviluppo di sensori a base lipidica: questultima applicazione è loggetto del progetto di ricerca FIRB volto a sviluppare un sensore per rilevare lattività di tre enzimi coinvolti nel metabolismo delle pirimidine bersaglio di un potente chemioterapico, il 5-fluorouracile (5-FU). Il rilevamento e dosaggio di questi enzimi è critico poiché il farmaco ha una finestra terapeutica molto ristretta, se non dosato correttamente può avere scarsa efficacia o addirittura essere letale. I liposomi progettati per questa applicazione sono funzionalizzati e formulati in modo tale che l'interazione degli enzimi bersaglio con il corrispondente substrato ancorato al doppio strato lipidico possa indurre una risposta di tipo ottico.<br>Inoltre, parte delle attività di ricerca sono state indirizzate allo a) "Sviluppo di sistemi di veicolazione di farmaci" basato su liposomi cationici finalizzato ad aumentare la specificità del farmaco verso le cellule target, minimizzando gli effetti collaterali. b) Funzionalizzazione di vetrini con coloranti (Congo Red) in presenza di tensioattivi per ottenere sensori per la rivelazione di analiti (metalli pesanti, poliammine). c) Calcoli teorici per la predizione di spettri UV-vis, verifica sperimentale della previsione teorica in vari mezzi. Sono state studiate le transizioni UV-Vis a bassa energia della p-nitroanilina: in acqua, metanolo e in presenza di micelle zwitterioniche. d) E stato seguito il profilo metabolico mediante NMR per la ricerca di nuovi biomarker diagnostici del tumore alla prostata (PCa) e come tale profilo può evidenziare linfluenza dellobesità sulla fisiologia cellulare cancerogena. d) E' stata valutata la modifica delle proprietà chimico-fisiche delle superfici di sistemi a ridotta dimensionalità (nanostrutturati), tramite funzionalizzazione chimica. e) Sono studiate le proprietà di bagnabilità di alcuni materiali bidimensionali, come il grafene ossido, al fine di modificarne la compatibilità con la materia vivente, tramite lautoassemblamento di monostrati e/o la formazione di derivati biocompatibili.<br><br>Sottogruppo GREEN CHEMISTRY E CATALISI ORGANOMETALLICA<br>Antonio Arcadi(PO), Francesco De Angelis (PO), Fabio Marinelli (PA), Leucio Rossi (PA), Marcello Crucianelli (RU), Vittoria Mucciante (RU), Samantha Reale (Personale Tecnico).<br><br>Questo sottogruppo di ricerca si occupa principalmente dello sviluppo di nuove metodologie alternative di Chimica Sostenibile volte alla preparazione di differenti classi di composti e intermedi di chimica fine di interesse in campo industriale, farmaceutico, biologico, etc. in accordo con i principi della Green Chemistry. Particolare importanza dal punto di vista della sostenibilità è attribuita allo sviluppo di procedure ad alta efficienza atomica. L'impiego di tecnologie elettrochimiche e dei complessi dei metalli di transizione come efficaci tools per lo sviluppo di procedure alternative di composti ad alto valore aggiunto sono molto stimolanti. I complessi dei metalli di transizione, la cui azione catalitica può essere finemente modulata variando le caratteristiche elettroniche e steriche sia del metallo che dei leganti, rappresentano uno strumento molto importante per tale scopo. Inoltre la catalisi dei metalli di transizione consente lo sviluppo di procedure sequenziali e multicomponenti. Tali procedure offrono notevoli vantaggi rispetto alle procedure convenzionali di sintesi lineare consentendo la formazione diretta del target desiderato a partire dagli opportuni precursori senza necessità di isolamento e purificazione di prodotti intermedi. Esse, pertanto, vengono ad assumere un ruolo determinante al fine di una maggiore sostenibilità del processo sintetico. Una linea di ricerca attiva comporta lo sviluppo di metodologie sostenibili per la sintesi di sistemi eterociclici di interesse dell'industria farmaceutica e per la preparazione di materiali innovati per devices optoelettronici mediante lo sviluppo di nuovi sistemi catalitici a base di metalli di conio (Au, Ag, Cu) e della catalisi di complessi di palladio. Risultati incoraggianti si sono ottenuti per la preparazione di indoli, benzofurani e cromeni funzionalizzati mediante processi sequenziali one pot. Un'altra linea è basata sull'applicazione della catalisi orgonametallica alla trasformazione di prodotti di scarto dell'industria vitoolearia tipica del territorio abruzzese in prodotti ad alto valore aggiunto. In particolare si è studiata la conversione del tirosolo in prodotti ad alto valore aggiunto. Verrà dedicata attenzione allo studio e allo sviluppo di nuove procedure per leterogeneizzazione di catalizzatori a base di metalli di transizione o biocatalizzatori, su matrici ibride organiche/inorganiche, per lutilizzo nelle reazioni di ossifunzionalizzazione (catalisi eterogenea), in condizioni selettive ed eco-compatibili. Inoltre una linea di ricerca prevede lo sviluppo di nuove metodologie o la rivisitazione di metodi classici di sintesi attraverso l'applicazione delle tecnologie elettrochimiche alla sintesi organica. Infine viene studiata la |

| | |
|---|---|
| | possibilità di recuperare l'anidride carbonica direttamente o indirettamente attraverso lo sviluppo di reazioni di carbossilazione (chimica o elettrochimica) oppure attraverso lo sviluppo di nuovi sistemi adsorbenti di interesse industriale.<br><br>Strumenti e Metodologie<br>- Uso di tecniche strumentali GC, GC-MS, ESI-MS, HPLC, FT-IR, UV-Vis, NMR, ICP-MS, EPR, SEM, TEM, XPS e misure di suscettività magnetica per la caratterizzazione chimica e fisica dei catalizzatori e dei composti di chimica fine sintetizzati.<br>- Utilizzo di metodologie di eterogeneizzazione di complessi organometallici basati sulle tecniche più comuni del tipo sol-gel o layer-by-layer.<br>Obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni<br>- Veicolazione selettiva di agenti terapeutici in organi bersaglio.<br>- Impiego di metodologie innovative nella realizzazione di nuovi sistemi eterociclici con potenziali applicazioni nel settore farmaceutico o quali materiali organici molecolari oligomerici per OLED.<br>- Studio e sviluppo di nuovi sistemi catalitici omogenei di metalli di conio.<br>- Studio e sviluppo di nuovi sistemi catalitici eterogenei, su scala nanometrica, ad elevata selettività e riciclabilità grazie alle loro proprietà magnetiche, basati sul principio della single-site catalysis.<br><br>Convenzioni con enti di ricerca: (Da mettere nella parte generale)<br>CONVENZIONE OPERATIVA TRA LISTITUTO DI METODOLOGIE CHIMICHE DEL CNR E IL DIPARTIMENTO DI SCIENZE FISICHE E CHIMICHE DELLUNIVERSITA DEGLI STUDI DELLAQUILA<br><br>Obiettivi di ricerca dei prossimi 3 anni<br>Veicolazione selettiva di agenti terapeutici in organi bersaglio.<br>Impiego di metodologie innovative nella realizzazione di nuovi sistemi eterociclici con potenziali applicazioni nel settore farmaceutico o quali materiali organici molecolari oligomerici per OLED.<br>Studio e sviluppo di nuovi sistemi catalitici omogenei di metalli di conio.<br>Studio e sviluppo di nuovi sistemi catalitici eterogenei, su scala nanometrica, ad elevata selettività e riciclabilità grazie alle loro proprietà magnetiche, basati sul principio della single-site catalysis.<br>Promuovere le collaborazioni nazionali e con le industrie sui temi della Chimica Verde e della Chimica Farmaceutica<br><br>Collaborazioni internazionali attive<br>Michelet Véronique (Institut de Recherche de Chimie Paris (UMR8247); Prof. L. A. Oro, Dott. R. Castarlenas, Dott. A. Di Giuseppe, Università di Saragozza (Spagna).<br><br>Componenti interni allateneo:<br>Antonio Arcadi(PO), Giorgio Cerichelli (PO), Francesco De Angelis (PO), Fabio Marinelli (PA), Leucio Rossi (PA), Nicoletta Spreti (PA), Marcello Crucianelli (RU), Giulia Fioravanti (RU), Luisa Giansante (RUTD), Vittoria Mucciante (RU), Samantha Reale (Personale Tecnico), Virginia DAiuto (AR), Barbara Altieri (dottoranda), Manuela Petaccia (dottoranda).<br>Settori Concorsuali coinvolti: 03/B1, 03/B2, 03/C1<br>Altro personale:<br>Giovanna Mancini CNR-IMC, Raimondo Germani UNIPG, Marco Chiarini UNITE, Prof. Giancarlo Fabrizi (Università Roma "Sapienza"), Prof. Elisabetta Rossi e Giorgio Abbiati (Università di Milano),Prof. Raffaele Saladino (Università di Viterbo), Prof. Fabio Marchetti e Prof. Claudio Pettinari (Università di Camerino), Prof. Italo Ferino, Dott. E. Rombi e Dott. G. Cutrufello (Università di Cagliari). |
| **Sito web** | http://dsfc.aquila.infn.it/ |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | ARCADI Antonio (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE4_10 - Heterogeneous catalysis |
| PE4_18 - Environment chemistry |
| PE4_6 - Chemical physics |
| PE4_8 - Electrochemistry, electrodialysis, microfluidics, sensors |
| PE5_1 - Structural properties of materials |
| PE5_10 - Colloid chemistry |
| PE5_16 - Supramolecular chemistry |
| PE5_17 - Organic chemistry |
| PE5_3 - Surface modification |
| PE5_8 - Intelligent materials - self assembled materials |

Componenti:

| | | | | |
|---|---|---|---|---|

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| CERICHELLI | Giorgio | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | CHIM/06 |
| CRUCIANELLI | Marcello | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/03 |
| DE ANGELIS | Francesco | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | CHIM/06 |
| D' AIUTO | Virginia | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | CHIM/06 |
| FIORAVANTI | Giulia | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/07 |
| GIANSANTI | Luisa | Scienze fisiche e chimiche | Ric. a tempo determ. | CHIM/06 |
| ALTIERI | Barbara | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/06 |
| MUCCIANTE | Vittoria | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/07 |
| MARINELLI | Fabio | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/06 |
| PETACCIA | Manuela | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | CHIM/09 |
| ROSSI | Leucio | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/07 |
| SANTUCCI | Sandro | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | FIS/01 |
| SPRETI | Nicoletta | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/06 |
| OTTAVIANO | Luca | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | Giovanna Mancini CNR-IMC, Raimondo Germani UNIPG, Marco Chiarini UNITE, Prof. Giancarlo Fabrizi (Università Roma "Sapienza"), Prof. Elisabetta Rossi e Giorgio Abbiati (Università di Milano),Prof. Raffaele Saladino (Università di Viterbo), Prof. Fabio Marchetti e Prof. Claudio Pettinari (Università di Camerino), Prof. Italo Ferino, Dott. E. Rombi e Dott. G. Cutrufello (Università di Cagliari). |

**10. Scheda inserita da questa Struttura ("Scienze fisiche e chimiche"):**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Scienza e Tecnologia per i Beni Culturali (G-STBC) |
| | Negli ultimi decenni il patrimonio storico-artistico ha subito un degrado maggiore ed anche diverso rispetto a quello del passato; ciò per motivi essenzialmente legati allinquinamento atmosferico, alla contaminazione biologica e a passate o sorpassate procedure di conservazione e restauro. Lintervento richiede quindi lo sviluppo di strategie innovative e moderne per la diagnostica e il monitoraggio e al contempo la sintesi di nuovi prodotti protettivi, selettivi, efficaci, di lunga durata e a basso impatto ambientale. La complessità degli argomenti impone un approccio multidisciplinare.<br>G-STBC comprende docenti, ricercatori, assegnisti e dottorandi dei Dipartimenti di Scienze Fisiche e Chimiche (DSFC), di Ingegneria Industriale e dell'Informazione e di Economia (DIIIE), di Ingegneria Civile, Edile Architettura, Ambientale (DICEAA).<br>G-STBC collabora con enti pubblici e privati interessati allinnovazione delle attività di conservazione e restauro e alla formazione di personale specializzato operante nel settore e con industrie chimiche interessate allo sviluppo di nuovi prodotti e procedure di applicazione più efficaci.<br>UTTMAT - ENEA Casaccia, I. Beni Archeologici e Monumentali del CNR (IBAM) Lecce, I. Conservazione e Valorizzazione dei Beni Culturali del CNR (ICVBC) - Firenze, Opificio delle Pietre Dure e Laboratori di Restauro (OPD) - Firenze, Dip. di Fisica, Università Sapienza, Università di Verona, IcapLeatherChem Spa - Lainate Milano, Soprintendenza per i Beni Architettonici e Paesaggistici per lAbruzzo, Azienda di restauro Praxis s.n.c., Accademia del restauro - LAquila.<br>G-STBC comprende competenze scientifiche e tecnologiche nel campo della fisica e della chimica, della biologia vegetale e dellingegneria. Partendo da collaudate esperienze anche individuali nel campo dei beni culturali, il gruppo ha sviluppato nel corso degli anni una sempre maggiore consapevolezza delle potenzialità del suo approccio multidisciplinare e perfeziona le sue capacità e il suo grado di collaborazione, anche attraverso tesi congiunte:<br>Attività 1. Stato di conservazione dei materiali, degrado e tecniche diagnostiche tradizionali e in via di sperimentazione<br>- Un sistema NMR per superfici ha permesso di utilizzare la tecnica in situ su opere d'arte e su manufatti dinteresse storico-artistico in modo non invasivo. Le informazioni di rilassometriaNMR sono state ricondotte ad alcune caratteristiche del materiale(pietra, marmo, terracotta, malta, legno o carta): porosità, idratazione e de-idratazione ambientale; azione di protettivi e di consolidanti, interazioni varie con lambiente.<br>- E' stata studiata la superficie di reperti archeologici in bronzo mediante tecniche di spettroscopia di assorbimento X (XAS) e fotoemissione X (XPS) per la determinazione dello stato di ossidazione nei metalli. Si sono ottenete informazioni sui vari trattamenti superficiali effettuati per la protezione o per motivi estetici.<br>- Da un punto di vista chimico-fisica e meccanico, sono stati studiati, in situ e in laboratorio, litotipi, intonaci e malte. Per le murature storiche, si è valutata la qualità muraria e la natura costitutiva delle malte in termini di caratteristiche e durabilità al gelo ed alla presenza di sali. Sono state progettate e realizzate nuove malte sperimentando anche innovative procedure di applicazione.<br>- Nel laboratorio Laser DIIIE si studiano le caratteristiche delle alterazioni chimico-fisiche dei supporti e delle loro interazioni con i prodotti utilizzati nel restauro. Lattenzione si è rivolta a più forme di degradazione, dal normale invecchiamento fino allevento traumatico, con un approccio integrato diagnostico, che prevede l'uso congiunto di diverse tecniche sperimentali: interferometria olografica, speckle, tomografia, correlazione digitale (proposte per la prima volta dal Laboratorio Laser DIIIE che ne custodisce i prototipi). Le applicazioni sono rivolte anche alla risposta dei materiali a stress termici o meccanici in relazione ai trasferimenti di massa e di calore.Particolare attenzione è riservata alla diagnostica del patrimonio monumentale, tramite uso di termografia PT. Ad esempio, è stato effettuato il rilievo |

| | |
|---|---|
| **Descrizione** | termografico di tutti gli affreschi della Cappella di Teodolinda (Duomo di Monza): gli affreschi interessano una superficie di circa 500 m2 e presentano più di 800 figure. In collaborazione con OPD è stata effettuata la diagnostica allinfrarosso (NIR e IRT) del dipinto Madonna con Bambino di Cimabue e Giotto. In collaborazione con Le Gallerie dellAccademia (Venezia) è stata effettuata la diagnostica allinfrarosso (NIR e IRT) del dipinto Madonna dello Zodiaco di Cosmè Tura.<br>Attività 2. Progettazione e sintesi di nuovi prodotti e metodologie innovative di applicazione.<br>- Si sviluppano nuovi metodi per pulizia e protezione di materiali lapidei, basati sull'utilizzo di tensioattivi, nonionici a bassa diffusività, trascurabile tossicità, allo scopo di impedire la penetrazione dell'acqua nella pietra, di sali solubili con i relativi problemi di gelo/disgelo, efflorescenze etc..<br>- E in corso uno studio computazionale delle interazioni tra polimeri e superfici di varia natura e sarà previsto luso di tecniche di superficie per verificare la penetrazione e leffetto di protettivi/consolidanti in vari materiali (lapidei, lignei, carta, tessuto).<br>- E in corso una collaborazione con ENEA-Casaccia, per realizzare la polimerizzazione in situ di prodotti per il consolidamento di campioni lignei di grande dimensione con irraggiamento gamma. Lapplicazione dei monomeri, con minore peso molecolare rispetto a quello del copolimero, dovrebbe garantire maggiore penetrazione nel manufatto con elevato potere consolidante.<br>- Con lesigenza di usare monomeri sempre meno tossici e al contempo ottenere prodotti di polimerizzazione in situ di maggiore efficacia, è stato avviato uno studio di dinamica molecolare per simulare la mobilità di specifici monomeri in matrice cellulosica.<br>- I microrganismi autotrofi (cianobatteri e micro-alghe) giocano un ruolo essenziale nelle alterazioni dei materiali (biodeterioramento): consentono lo sviluppo di organismi eterotrofi (batteri, funghi) e formano complessi biofilms, il cui impatto biodeteriogeno spazia dalla modificazione estetica (colore) ai cambiamento strutturale. Il laboratorio di biologia vegetale del DSFC dispone delle attrezzature necessarie allisolamento, caratterizzazione e coltura in vitro di cianobatteri e microalghe oltre agli strumenti di base per studi biochimico-molecolari.<br>Attività 3. Diagnostica di beni immobili a cura di DSFC e DIIIE in collaborazione con la Soprintendenza per i Beni Architettonici e Paesaggistici per lAbruzzo e lazienda di restauro Praxis.<br>- Dipinto murale nel Monastero di Santo Spirito in Ocre. Il progetto diagnostico mirava alla caratterizzazione compositiva sia degli intonaci sia dei pigmenti, alla determinazione delle cause di degrado, allidentificazione dei prodotti consolidanti e protettivi applicati durante una precedente campagna di restauro. A tal scopo sono state utilizzate tecniche non-distruttive e micro-distruttive: termografia, μ-Raman, FTIR, XRD, NMR.<br>- Affresco del XIII secolo di Fontecchio. La figura laterale del dipinto raffigurante un angelo, oltre ad analisi non distruttive, ESPI, NIR, UV imaging, è stata sottoposta ad un micro-campionamento per la caratterizzazione dei materiali compositivi con FTIR, SEM-EDS, μ-Raman.<br>Strumenti e metodologie<br>NMR, XRD, XAS, XPS, SEM-EDS, FTIR, μ-Raman, Holography, Speckle metrology, NIR, IRT, UV imaging.<br>Obiettivi di ricerca dei prossimi tre anni<br>- Elaborare specifici interventi diagnostici per diversi materiali che siano di supporto ai beni artistici o architettonici, per acquisire una visione quanto più possibile completa del loro stato di conservazione.<br>- Individuare alcuni parametri oggettivi che descrivano la velocità di degrado dei beni per monitorarne lo stato di conservazione e, eventualmente, controllare lefficacia e la durabilità dellintervento di restauro;<br>- Conseguire un salto tecnologico nei prodotti e nelle procedure di applicazione da utilizzare nella fase di restauro, ricercando e sperimentando nuove tipologie di materiali e formulati che rispettino i requisiti di sicurezza degli operatori, pur avendo prestazioni elevate nelle operazioni di risanamento.<br>Collaborazioni internazionali attive<br>GRESPI/ECATHERM - Univ. Reims Champagne-Ardenne (Francia) -NDT Lab, Materials Science and Engineering Department, National Technical University of Athens (Grecia) -Computer Vision and Systems Laboratory, Department of Electrical and Computer Engineering, Laval University (Canada).<br>ALTRO SITO WEB<br>http://www.univaq.it/include/utilities/blob.php?table=laboratorio&id=120&item=scheda |
| **Sito web** | http://dsfc.aquila.infn.it/ |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | CERICHELLI Giorgio (Scienze fisiche e chimiche) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| PE3_11 - Mesoscopic physics |
| PE4_1 - Physical chemistry |
| PE4_13 - Theoretical and computational chemistry |
| PE4_17 - Characterization methods of materials |
| PE4_2 - Spectroscopic and spectrometric techniques |
| PE5_1 - Structural properties of materials |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| BENASSI | Paola | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |
| CASIERI | Cinzia | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/07 |
| D' AIUTO | Virginia | Scienze fisiche e chimiche | Assegnista | CHIM/06 |
| GUIDONI | Leonardo | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/07 |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| GIANSANTI | Luisa | Scienze fisiche e chimiche | Ric. a tempo determ. | CHIM/06 |
| ALTIERI | Barbara | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/06 |
| LOZZI | Luca | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | FIS/03 |
| AMBROSINI | Dario | Ingegneria industriale e dell'informazione e di economia | Prof. Associato | ING-IND/11 |
| NARDONE | Michele | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | FIS/01 |
| PIACENTE | Giovanni | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/03 |
| PAOLETTI | Domenica | Ingegneria industriale e dell'informazione e di economia | Prof. Ordinario | ING-IND/10 |
| PETACCIA | Manuela | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/06 |
| QUARESIMA | Raimondo | Ingegneria civile, edile - architettura, ambientale | Prof. Associato | ING-IND/22 |
| ASCHI | Massimiliano | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/03 |
| SFARRA | Stefano | Ingegneria industriale e dell'informazione e di economia | Assegnista | ING-IND/10 |
| SPANO' | Laura | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Ordinario | BIO/04 |
| SPRETI | Nicoletta | Scienze fisiche e chimiche | Prof. Associato | CHIM/06 |
| TORTORA | Mariagrazia | Scienze fisiche e chimiche | Dottorando | CHIM/12 |

| | |
|---|---|
| **Altro Personale** | S. Perilli (Dottorando DIIIE), T. de Rubeis (Dottorando DIIIE). |

**11. Scheda inserita da altra Struttura ("Ingegneria civile, edile - architettura, ambientale"), tra i componenti risultano persone afferenti a questa Struttura:**

| | |
|---|---|
| **Nome gruppo*** | Materiali per l'edilizia storica e IIngegneria |
| **Descrizione** | Lattività di ricerca occupandosi di caratterizzazione chimico-fisica e meccanica, in situ ed in laboratorio, affronta varie tematiche relative allutilizzo ed al degrado dei materiali nei settori dei Beni Culturali, dellarchitettura e dellingegneria. Le tematiche, sviluppate in modo fortemente interdisciplinare, spaziano dai materiali costitutivi delledilizia storica (litotipi, intonaci e malte) alle applicazioni del titanio (rivestimenti per esterni e applicazioni biomediche).<br>Nel settore delledilizia storica un interesse specifico riguarda le murature con particolare riferimento alla valutazione della qualità muraria ed alla natura costitutiva delle malte in termini di caratteristiche e durabilità (resistenza alla gelività ed alla cristallizzazione salina). Attività di questo tipo, eseguite nellambito dellarea archeologica di Pompei ed in tutta larea aquilana colpita dal sisma del 2009, hanno permesso di mettere a punto malte e tecnologie innovative di applicazione per la conservazione ed il consolidamento delle murature.<br>Importanti collaborazioni sono in atto allinterno del Dipartimento di Ingegneria Civile, Edile-Architettura ed Ambientale, a livello di Ateneo aquilano (Dipartimento di Scienze Chimiche e Fisiche, Dipartimento di Scienze Umane) ed in ambito nazionale (Istituto per Beni Archeologici e Monumentali del C.N.R. (I.B.A.M.) di Lecce, Istituto per la Conservazione e Valorizzazione dei Beni Culturali del C.N.R. (I.C.V.B.C.) di Firenze, Dipartimento di Scienze della Terra di Firenze).<br>Lenorme interesse per le leghe metalliche del titanio e le vaste applicazioni industriali (settore aereospaziale, aereonautico, marino, automobilistico, edilizio, architettonico, medico, etc.) ha portato, negli ultimi anni, a sviluppare la ricerca sulle modificazioni delle proprietà superficiali attraverso trattamenti chimici, fisici o meccanici in due diversi ambiti: a) la messa a punto di nuove tecniche di colorazione superficiale; b) la realizzazione di superfici biomimetiche per losteointegrazione ossea.<br>Nel primo caso mediante trattamenti laser innovativi è stato messo a punto un metodo, in collaborazione con aziende leader nazionali del settore, alternativo a quello elettrochimico per colorare il titanio. I campi di applicazione delle colorazioni realizzate sono numerosi ed interessano il rivestimento in facciata degli edifici, il settore aeeonautico, la marcatura della componentistica, lestetica di componenti mediche o sportive. Nel caso del settore biomedico, si sono realizzate nuove lavorazioni superficiali, caratterizzate da micro e nano rugosità, sulle quali è stata sperimenta la crescita e lattecchimento di cellule staminali ossee ricavate da polpa dentale o tessuti adiposi. La ricerca ha dimostrato lefficacia delle superfici nel favorire i fenomeni rigenerativi in tempi molto più rapidi di quelli attuali. E in corso una fase preindustriale per valutare la brevettabilità di alcune superfici e lavorazioni. La ricerca è svolta in collaborazione a livello di Ateneo con il Dipartimento di Medicina Clinica, Sanità Pubblica, Scienze della vita e dellAmbiente ed il Dipartimento di Scienze Chimiche e Fisiche ed in ambito nazionale con il Dipartimento di Scienze Mediche, Orali e Biotecnologiche dellUniversità G. dAnnunzio di Chieti-Pescara. |
| **Sito web** | http://diceaa.univaq.it/gruppi-di-ricerca/ |
| **Responsabile scientifico/Coordinatore** | QUARESIMA Raimondo (Ingegneria civile, edile - architettura, ambientale) |

| **Settore ERC del gruppo:** |
|---|
| LS7_1 - Medical engineering and technology |
| PE5_3 - Surface modification |
| PE8_9 - Materials engineering (biomaterials, metals, ceramics, polymers, composites...) |
| SH5_11 - Cultural heritage, cultural memory |

Componenti:

| Cognome | Nome | Struttura | Qualifica | Settore |
|---|---|---|---|---|
| FANALE | Lorenzo | Ingegneria civile, edile - architettura, ambientale | Assegnista | ICAR/09 |
| FIORAVANTI | Giulia | Scienze fisiche e chimiche | Ricercatore | CHIM/07 |

| Altro Personale | Redi Fabio, Cerichelli Giorgio, Casieri Cinzia, Antonacci Elena, Felice Fusco |
|---|---|