

Oggetto: Programma Short-tem mobility – Anno 2011.
Soggiorno di ricerca del Dr. REMI LAZZARI
Protocollo AMMCNT-CNR N. 0050417 del 06/07/2011

RESOCONTO ATTIVITÀ SVOLTA

Il Dott. Lazzari ha svolto il periodo di ricerca previsto di giorni 10 presso il CNR-IC di Bari, dal 21/10/2011 al 04/11/2011 (vedi carte di imbarco allegate alla fine del resoconto), interagendo in maniera diretta e costante con il personale ricercatore, in particolare: la Dott.ssa Cinzia Giannini, il Dott. Davide Altamura, il Dott. Dritan Siliqi, il Dott. Liberato De Caro.

L'attività è stata svolta dal Dott. Lazzari in parte in maniera autonoma, negli uffici dell'IC, utilizzando sia il proprio PC che quelli del gruppo ospitante, sia in laboratorio, coadiuvando il gruppo ospitante nell'attività sperimentale, sia interagendo in maniera approfondita e proficua con il personale dell'IC, permettendo di stabilire una situazione ottimale di collaborazione proseguita anche successivamente alla sua partenza.

L'attività del Dott. Lazzari presso il CNR-IC si può riassumere in :

- 1) Seminario scientifico di presentazione presso il CNR-IC;
- 2) Training del gruppo ospitante su funzionamento e utilizzo del software IsGISAXS, realizzato dal Dott. Lazzari ¹;
- 3) Analisi di dati GISAXS specifici, raccolti presso il laboratorio di sincrotrone ESRF e presso il CNR-IC di Bari, durante la sua permanenza all'IC.

1) Il Dott. Lazzari ha illustrato le sue attuali ricerche, e quelle compiute in passato, con particolare riferimento all'applicazione della tecnica GISAXS (scattering di raggi X a basso angolo, con incidenza radente) per lo studio di nanostrutture ("isole") su superfici, e alla realizzazione di un set-up di misura per la caratterizzazione in-situ mediante scattering di raggi X con incidenza radente (GISAXS e GID) e diffrazione elettronica (RHEED) presso la linea BM32 del sincrotrone ESRF.

2) Il Dott. Lazzari ha svolto un training di tipo teorico/pratico sull'utilizzo del programma IsGISAXS, per la simulazione e il fit di dati GISAXS.

Ha illustrato in modo dettagliato gli aspetti teorici della tecnica GISAXS, e il modo in cui questi sono implementati nel software IsGISAXS, chiarendo i vantaggi ed i limiti del software stesso, ed i margini entro cui questo può essere modificato per rispondere ad esigenze specifiche.

Ha illustrato le procedure di fit possibili con il software IsGISAXS e la formattazione dei dati sperimentali necessaria perché possano essere letti dal programma, includendo le diverse opzioni legate all'elaborazione e selezione di specifici profili lineari all'interno della mappa GISAXS sperimentale.

Ha fornito e illustrato i codici sorgente del programma, permettendo di apportarvi eventuali modifiche.

¹ <http://ln-www.insp.upmc.fr/axe4/Oxydes/IsGISAXS/figures/doc/manual.html>

3) Sono stati sottoposti al Dott. Lazzari dei dati GISAXS acquisiti presso ESRF su campioni di nanoparticelle “octapods”², sintetizzate nei laboratori dell’IIT di Genova, e depositate su substrati di silicio tal quale, di silicio ricoperto con strato di carbonio amorfo, e di grafite. In **Fig. 1** sono riportate la ricostruzione tomografica e lo schema della struttura di un octapod, così come riportati nelle recenti pubblicazioni³ del gruppo che ha preparato i campioni.

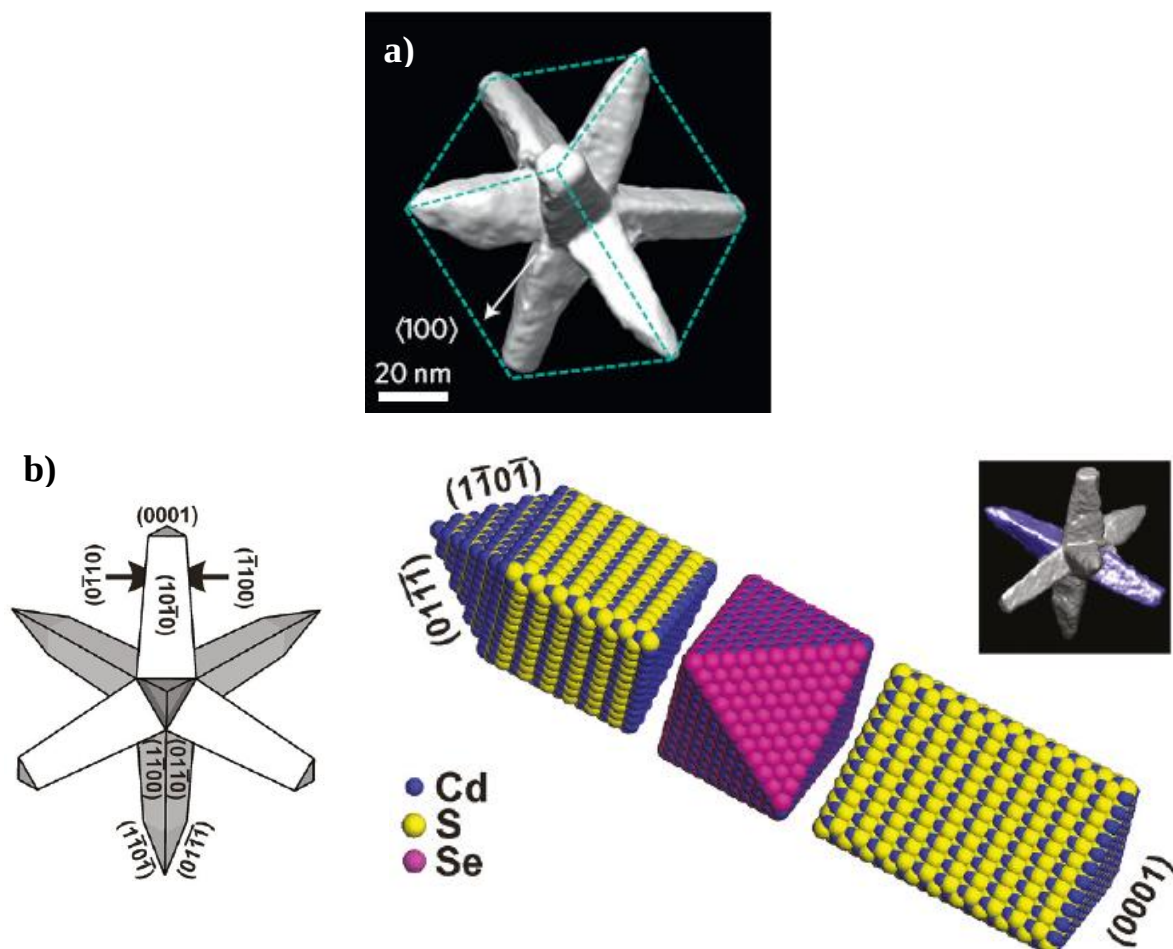


Fig. 1 Ricostruzione tomografica di un octapod (a) ; rappresentazione schematica della struttura 3D dell’octapod, con l’indicazione delle direzioni cristallografiche e dei materiali del core centrale e dei bracci (b)^{2,3}

² *Hierarchical self-assembly of suspended branched colloidal nanocrystals into superlattice structures*; Karol Miszt, Joost de Graaf, Giovanni Bertoni, Dirk Dorfs, Rosaria Brescia, Sergio Marras, Luca Ceseracciu, Roberto Cingolani, René van Roij, Marjolein Dijkstra & Liberato Manna *Nature Materials* **10**, 872-876 (2011).

³ *Birth and Growth of Octapod-Shaped Colloidal Nanocrystals Studied by Electron Tomography* Rosaria Brescia, Karol Miszt, Dirk Dorfs, Liberato Manna & Giovanni Bertoni *J. Phys. Chem. C* **115**, 20128–20133 (2011).

Le nanostrutture di **Fig. 1** depositate su substrati formano assemblati ordinati: in **Fig. 2a** è riportata come esempio una immagine al microscopio elettronico a scansione (SEM) di un assemblato di octapods su substrato di Si. L'assemblato bi-dimensionale chiaramente visibile in **Fig. 2a** si presta particolarmente all'analisi mediante il software IsGISAXS, essendo questo basato sull'assunzione che il campione in esame sia costituito da nanostrutture disposte su un piano. In **Fig. 2** è riportata la mappa GISAXS dello stesso campione, acquisita presso la linea ID01 di ESRF.

L'analisi di tali dati mediante IsGISAXS, ha implicato la modellizzazione delle particelle octapods, secondo lo schema di **Fig. 1b** (non essendo forme esotiche di questo tipo incluse nel database del software IsGISAXS).

Il Dott. Lazzari ha pertanto calcolato l'equazione analitica della particella octapod, descrivendola mediante un core centrale ottaedrico e otto bracci con sezione triangolare di dimensione costante o variabile (come da **Fig. 1b**); ne ha quindi calcolato il fattore di forma (ossia la trasformata di Fourier) e l'ha inserito nel database del software.

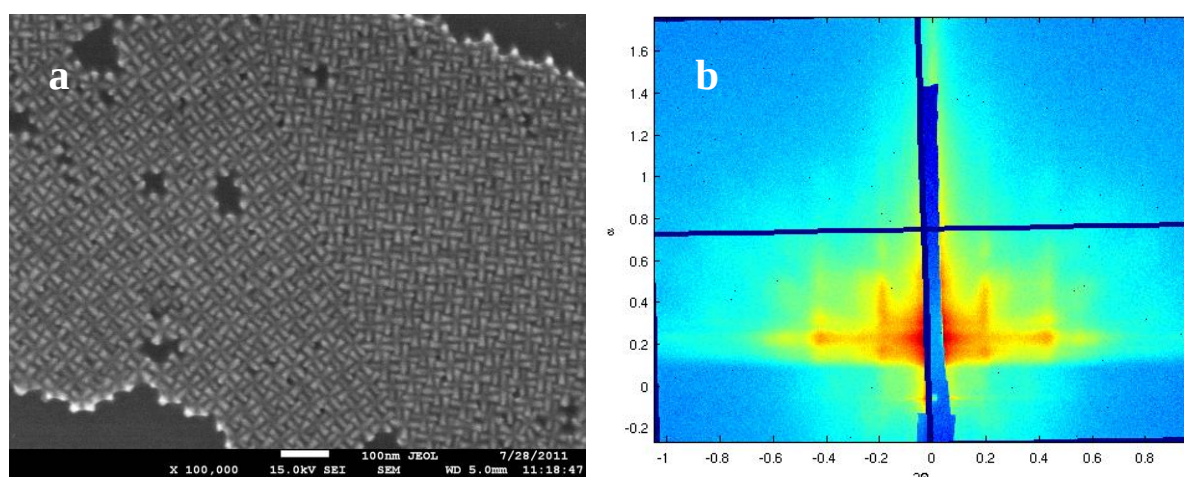


Fig. 2 Assemblato 2D di octapods su substrato di Si (**a**); mappa GISAXS acquisita presso la linea ID01 di ESRF (**b**).

Il calcolo del fattore di forma di una struttura da analizzare, rappresenta la prima e più impegnativa fase dell'analisi di dati di scattering di raggi X a basso angolo, poiché rappresenta il pattern di diffrazione (a basso angolo) prodotto dalla singola struttura in esame. Una volta calcolato il fattore di forma, è possibile calcolare il pattern prodotto dall'insieme di nanostrutture e procedere all'analisi della mappa GISAXS sperimentale.

In **Fig. 3a** è riportato come esempio il fattore di forma, calcolato con IsGISAXS, di un octapod avente un core di raggio 8.6nm e bracci lunghi 33.5nm con sezione triangolare costante. In **Fig. 3b** è riportato il pattern GISAXS calcolato per un insieme ordinato 2D di octapods (come quello di **Fig. 2a**), con cella unitaria quadrata di parametro $a = 46$ nm.

E' evidente la grande somiglianza fra i pattern GISAXS misurato e calcolato (**Fig. 2b** e **3b** rispettivamente). I due pattern sono confrontati in **Fig. 4**, dove le linee tratteggiate indicano la posizione dei massimi di intensità principali, da cui risulta che il pattern calcolato riproduce praticamente tutte le caratteristiche della distribuzione di intensità della misura sperimentale (ciò supporta la correttezza del calcolo del fattore di forma).

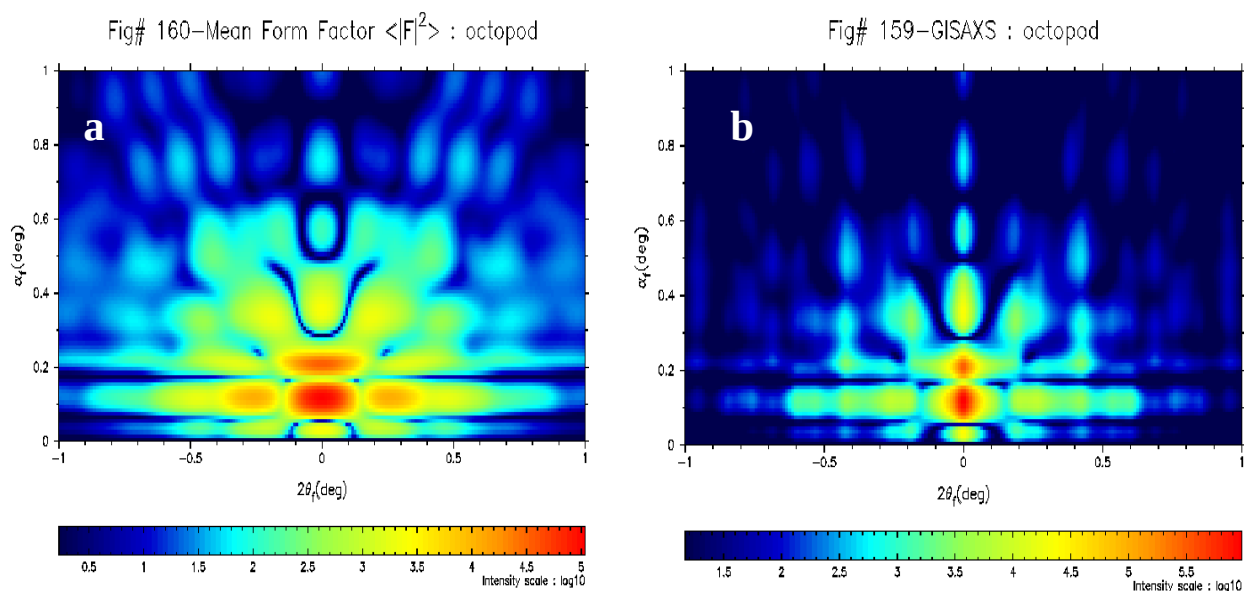


Fig. 3 Fattore di forma di un octopod (a) e pattern GISAXS da un assemblato 2D di octopods (b), calcolati con IsGISAXS.

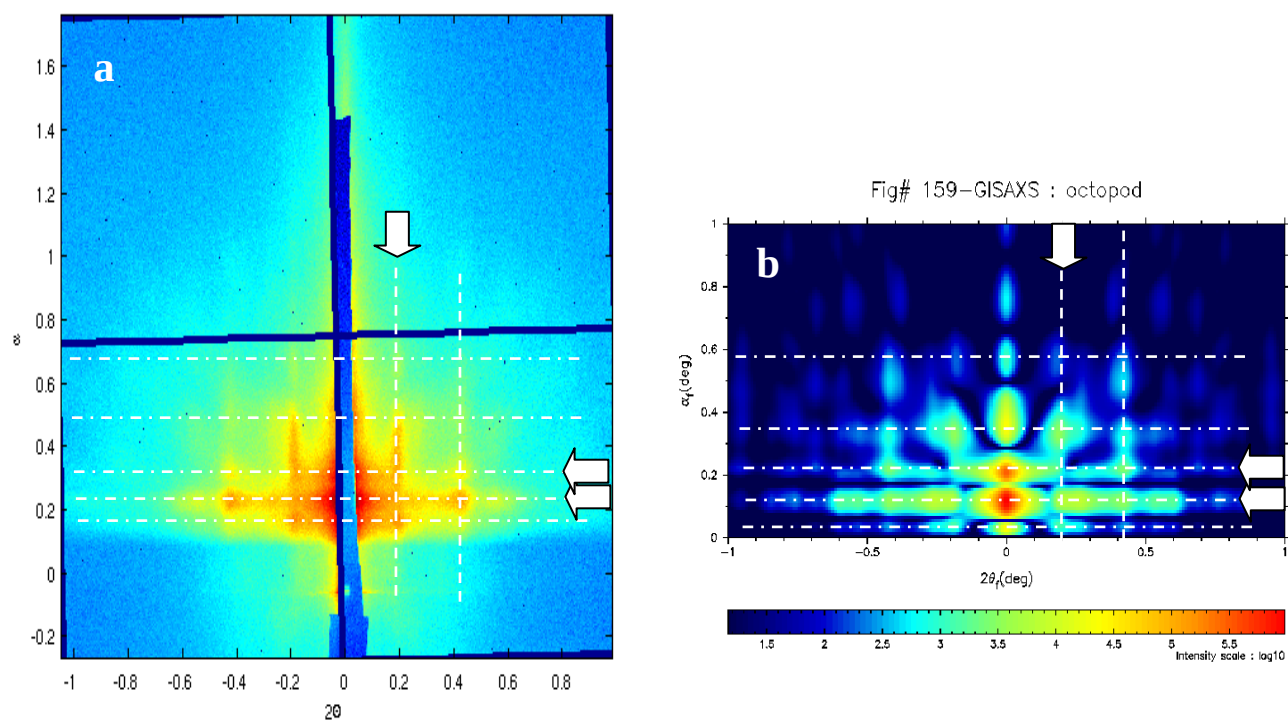


Fig. 4 Confronto fra pattern GISAXS da un assemblato 2D di octapods, misurato (a) e calcolato con IsGISAXS (b). Le linee tratteggiate indicano la posizione dei massimi di intensità; le frecce indicano possibili direzioni per il fit di “tagli” unidimensionali.

L'analisi dettagliata del pattern GISAXS prosegue attraverso il fit di due o più profili lineari ("tagli" uni-dimensionali) nelle direzioni verticale e orizzontale (o eventualmente anche obliqui) della mappa. IsGISAXS consente il fit contemporaneo dei vari profili, di solito scelti nella mappa in corrispondenza delle direzioni in cui vi è un maggior contenuto informativo.

I parametri di fit sono fondamentalmente (una volta identificata la forma della nanostruttura) dimensioni e distribuzione delle dimensioni della singola nanostruttura, la sua orientazione rispetto al fascio di radiazione, la simmetria del reticolo lungo il quale sono assemblate (nel caso di insieme ordinato) le nanostrutture e la dimensione della cella unitaria di tale reticolo (descritte dalla funzione di interferenza), la dimensione e l'orientazione (medie) dei domini ordinati.

Esempi di fit di profili lineari estratti dalle mappe GISAXS dell'assemblato di octapods sono riportati in Fig. 5(b,c,d).

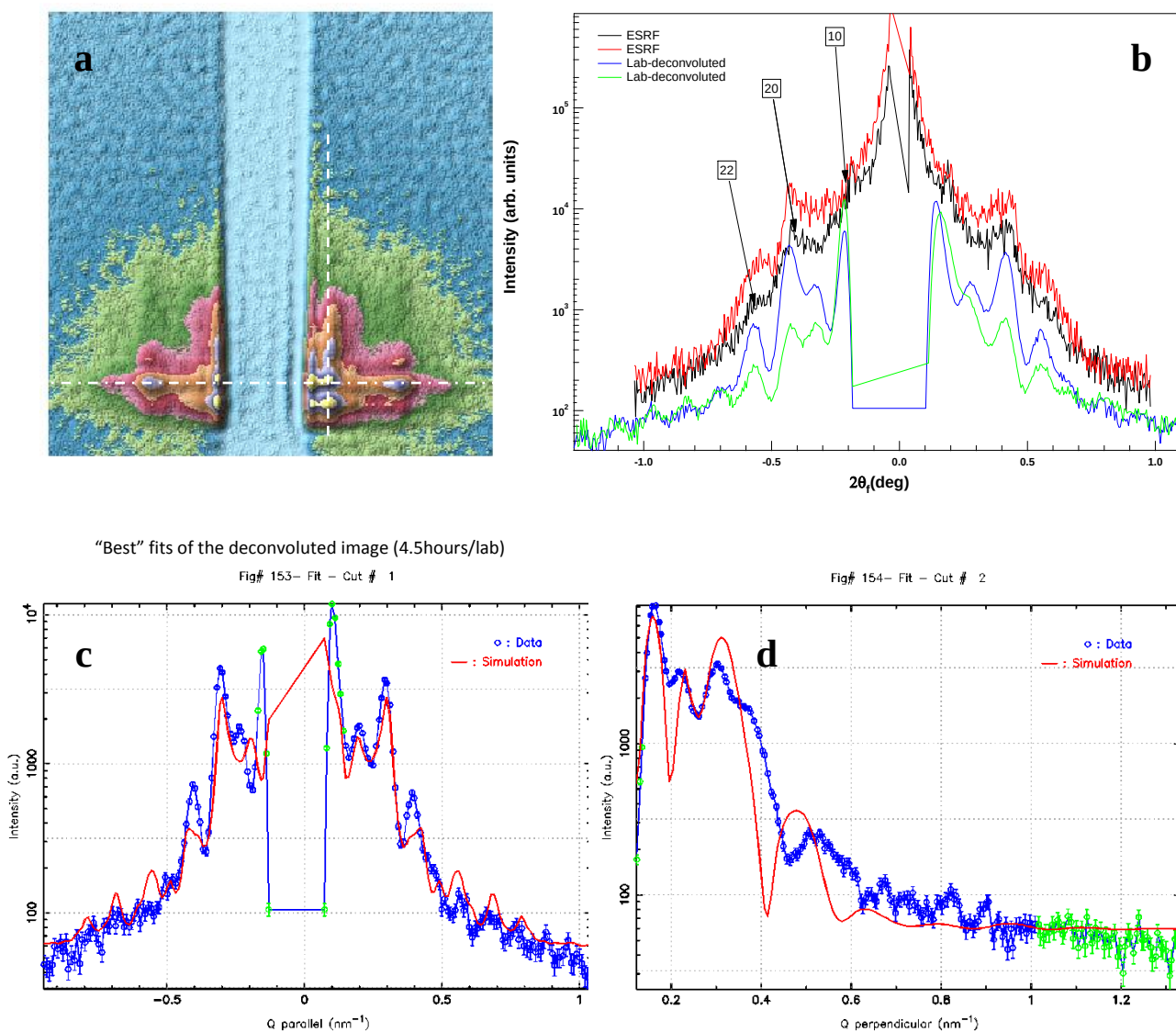


Fig. 5 Pattern GISAXS ottenuto da misura al CNR-IC, dopo deconvoluzione (a); profili orizzontali estratti dalle mappe di Fig. 4a e 5a (b); fit di profili orizzontale e verticale estratti dalla mappa di Fig. 5a (c,d rispettivamente).

In **Fig. 5a** è riportata la mappa GISAXS ottenuta ripetendo la misura dello stesso campione sul sistema FRE+ SMAX3000 del CNR-IC di Bari, ed effettuando un trattamento dei dati che consente di deconvolvere il contributo della sorgente di raggi X dal pattern prodotto dal campione. E' stato verificato che tale procedura consente di ottenere anche impiegando una sorgente di laboratorio una misura con un alto contenuto di dettagli informativi, paragonabile a quella ottenuta presso una linea di sincrotrone. In **Fig. 5b** sono confrontati i profili orizzontali estratti dalle immagini di **Fig. 4a** e **5a** (raccolte rispettivamente a ESRF e al CNR-IC di Bari), lungo le direzioni indicate dalle frecce in **Fig. 4a**. La misura raccolta a ESRF ha un tempo di conteggio di 30 minuti, quella raccolta all'IC di circa 4 ore. E' stato però verificato che anche raccogliendo i dati per un tempo di circa 1 ora nel laboratorio dell'IC, non vi sono perdite significative di dettagli informativi. E' evidente da **Fig. 5b** che la misura raccolta e trattata presso l'IC è caratterizzata non solo da un maggiore rapporto segnale/rumore, ma anche da un maggior contenuto di dettagli informativi. Il Dott. Lazzari ha quindi operato la sua analisi dati anche sulle misure raccolte all'IC: in **Fig. 5c, d** sono riportati i profili sperimentali e calcolati, estratti lungo le direzioni indicate dalle linee tratteggiate di **Fig. 5a** (il profilo sperimentale "orizzontale" corrisponde anche alla curva blu in **Fig. 5b**).

Come si vede dalle **Fig. 5c** e **5d** vi è già un ottimo accordo fra curve sperimentale e calcolata, almeno per quanto riguarda il profilo "orizzontale" (**Fig. 5c**). Per quanto riguarda invece il profilo "verticale" (**Fig. 5d**) vi è un discreto accordo, ma ancora non perfetto. Si noti che i profili verticali presentano certamente maggiori criticità, essendo influenzati significativamente dall'angolo di incidenza della radiazione sul substrato, che deve essere conosciuto con grande precisione (dell'ordine di 0.01°), ed eventualmente deve essere incluso nei parametri di fit. Inoltre per angoli di incidenza piccoli come quello di **Fig. 4a** e **5a**, ossia 0.13° (nominale), gli effetti di assorbimento, che la radiazione subisce nell'attraversare lo strato di particelle, sono significativi e devono essere tenuti in conto. Il problema viene accentuato in presenza di particelle di grandi dimensioni (come nel caso qui trattato), che danno luogo nel pattern GISAXS a massimi di intensità anche ad angoli inferiori all'angolo critico del substrato.

Per tenere conto anche di tali effetti e migliorare le possibilità di fitting offerte da IsGISAXS, il Dott. Lazzari ha apportato delle modifiche al programma, che includono il contributo di assorbimento nello strato di particelle. Tali modifiche, insieme al fattore di forma calcolato per queste particolari particelle "octapods", sono incluse nella versione di IsGISAXS scaricabile da <ftp://ftp.insp.jussieu.fr/pub/users/lazzari> (la denominazione esatta di tali particelle implementata nel software è "octopod"). Le ultime modifiche apportate al programma IsGISAXS sono tuttora in fase di test da parte del gruppo ospitante del CNR-IC, nell'ambito della collaborazione stabilita con il Dott. Lazzari grazie al programma di short term mobility.

I risultati fin qui raggiunti consentono tuttavia già di distinguere per la prima volta la presenza di particelle complesse tipo "octapods" rispetto a forme più convenzionali, e di individuarne il tipo di organizzazione sul substrato mediante analisi GISAXS. Tale studio verrà esteso a dati già raccolti da campioni di octapods assemblati 2D su diversi substrati, nonché a dati di nuova acquisizione, misurati su campioni organizzati secondo un ordine tridimensionale.

Dott.ssa Cinzia Giannini



EU/EEA



OTHER Q

REMI
LAZZARINATIONALITY
FRANCE

- BAG1 - 1ST CHECKED BAG (15KG)

FR 8709
20 OCT 2011

PARIS BEAUVAIS - BARI

REFERENCE NO. NIT7SH

GATE CLOSES 12:25

DEPT TIME 12:55

SEQ NO.

90

WARNING

1 CABIN BAG ONLY - 55 X 40 X 20 CM (MAX 10 KG)



HANDBAG, BRIEFCASE, LAPTOP, SHOP PURCHASES, CAMERAS ETC. MUST BE CARRIED WITHIN YOUR 1 CABIN BAG.

Extra/oversized cabin baggage will be **refused** at the boarding gate, or where available, placed in the hold of the aircraft for a fee of £/€40. If you are unsure, check at the **Bag Drop desk** before going through security. N.B. There is no baggage allowance (cabin or checked) associated with the purchase of an extra seat.

CHECK THE AIRPORT MONITORS FOR BAG DROP DESK + BOARDING GATE INFORMATION

IMPORTANT REMINDERS! - Please read

- Each passenger must present their valid photo ID (as specified as accepted in our General Conditions). Driving licences are not accepted.
- Passengers with pre-booked special assistance must present this boarding pass at the airport special assistance desk and again to assistance staff at the arrival airport.
- Bag Drop desks close strictly 40 minutes before the scheduled flight departure time.
- EU Reg 261–Article 14.1–If you are denied boarding or if your flight is cancelled or delayed for at least two hours, ask at the Ryanair desk or view online the text stating your rights, particularly with regard to compensation and assistance.

My
CEWE PHOTOBOOK
Your photos printed as a book!

Your coupon code 4354

*Applies to all CEWE PHOTOBOOKS, except CEWE PHOTOBOOK small booklet.
No cash alternative. Only one coupon redeemable per order. Valid until 31.01.2012

www.cele-photobook.co.uk

PART TEAR TO HERE

AIRLINE COPY – TO BE RETAINED BY BOARDING GATE PERSONNEL

PASSENGER NAME REMI LAZZARI

SEQ NO.

DATE 20 OCT 2011

FLIGHT NO. FR 8709

DEPT TIME 12:55

90

OTHER Q

M1LAZZARI/REMI NIT7SH BVABRIFR 8709 293Y000 90 10C B



UE/EEE



AUTRE Q

REMI
LAZZARINATIONALITÉ
FRANCE

- BAG1 - 1ER BAGAGE A ENREGISTRER (15KG)

FR 8708
05 NOV. 2011

BARI - PARIS BEAUVAIS

N° DE RÉFÉRENCE AYZYVC

LA PORTE FERME 09:50

HEURE DE DÉPART 10:20

SEQ NO.

77

ATTENTION

1 BAGAGE À MAIN UNIQUEMENT - 55 X 40 X 20 CM (MAX 10 KG)



SACS À MAIN, PORTE-DOCUMENTS, ORDINATEURS PORTABLES, SACS D'ACHAT, APPAREILS PHOTOS ETC. DOIVENT ÊTRE TRANSPORTÉS DANS L'UNIQUE BAGAGE À MAIN AUTORISÉ.

Les bagages à main surdimensionnés ou supplémentaires seront **refusés** en porte d'embarquement, ou lorsque possible, placés en soute de l'appareil contre des frais de £/€40. Si vous n'êtes pas sûrs, vérifiez au comptoir de dépôt bagage avant de vous rendre en contrôle de sécurité. N.B. Il n'y a pas d'autorisation bagage à main/enregistré associée avec l'achat d'un siège supplémentaire.

Consultez les écrans d'affichage de l'aéroport pour les informations sur l'espace dépôt bagage et la porte d'embarquement.

RAPPELS IMPORTANTS ! - À lire

- Chaque passager doit présenter une carte d'identité valable (Comme spécifié et accepté dans les conditions générales). Les permis de conduire ne sont pas acceptés.
- Les passagers ayant pré-réservé une assistance particulière doivent impérativement présenter cette carte d'embarquement au comptoir d'assistance particulière compétent de l'aéroport et également au personnel chargé de l'assistance à l'aéroport d'arrivée.
- Les comptoirs de dépôt de bagages ferment 40 minutes avant l'heure de départ prévue du vol.
- Directive européenne 261, article 14.1 → Si l'embarquement vous est refusé ou si votre vol est annulé ou retardé pendant au moins deux heures, adressez-vous au comptoir, ou consulter en ligne le texte définissant vos droits plus particulièrement en matière d'indemnisation et d'assistance.

5€⁺
Coupon

Mon LIVRE PHOTO CEWE
Une adresse internet de qualité dans un seul livre

5€ utilisables Votre code coupon 4395

*Valable sur tous les LIVRES PHOTOS CEWE hors LIVRE PHOTO CEWE Petit. Un seul coupon utilisable par commande. Valable jusqu'au 31/01/2012

www.livrephoto-cewe.fr

PARTIE À DÉCOUPER JUSQU'ICI

COPIE COMPAGNIE AÉRIENNE - À CONSERVER PAR LE PERSONNEL DE PORTE D'EMBARQUEMENT

NOM DU
PASSAGERREMI
LAZZARI

SEQ NO.

DATE

05 NOV. 2011

N° DE VOL

FR 8708

HEURE DE DÉPART

10:20

77

AUTRE Q

M1LAZZARI/REMI AYZYVC BRIBVAFR 8708 309Y000 77 10C B

