

Borsa di studio attivata ai sensi di quanto disposto dal D.M. n. 1061 del 10/08/2021

Titolo del progetto: Sviluppo di modelli di ionizzazione in Geant4-DNA per simulare l'effetto della radiazione cosmica sulle reazioni ione-molecola nell'atmosfera

La borsa sarà attivata sul seguente corso di dottorato accreditato per il XXXVII ciclo:

FISICA

Responsabile scientifico: Carlo Mancini-Terracciano

Area per la quale si presenta la richiesta: GREEN

Numero di mensilità da svolgere in azienda: 6

Numero di mensilità da svolgere all'estero: 6 presso Centre d'études nucléaires de Bordeaux Gradignan (CNRS), 19 chemin du Solarium, Cedex (Francia)

Azienda: CINECA - Via dei Tizi 6/B - 00185 Roma

Il Dipartimento è disponibile a cofinanziare per un importo pari a euro: 3500

Dipartimento finanziatore: DIPARTIMENTO DI FISICA con delibera del 20/9/2021

Progetto di ricerca:

Questo progetto si prefigge di sviluppare ed implementare in Geant4-DNA modelli di interazione elettromagnetica di molecole chimiche presenti in atmosfera e di interesse climatologico, per permettere di simularne la ionizzazione dovuta ai raggi cosmici e stimarne dunque la concentrazione, lo stato di eccitazione e la distribuzione spaziale. L'emissione di molecole inquinanti e gas serra in atmosfera rappresenta una sfida globale associata a questioni scientifiche ancora aperte riguardo il grado di approssimazione dei processi chimico-fisici implementati nei modelli di previsione del riscaldamento globale. Gli attuali modelli climatici sono stati sviluppati principalmente in ambito troposferico, con una delle rare eccezioni riguardante la chimica dell'ozono nella stratosfera.

Rilevanti questioni rimangono aperte sul ruolo nella stratosfera e nella troposfera della chimica di molecole quali SO₂, CO₂, CH₄, NO_x, H₂O. Tali specie chimiche hanno il doppio ruolo di essere coinvolte nella chimica dell'ozono e di alterare positivamente o negativamente il bilanciamento radiativo globale agendo come gas serra o particolato riflettente la radiazione solare.

Un fondamentale aspetto, ancora poco studiato, è il ruolo della radiazione cosmica nel velocizzare e modificare le reazioni chimiche. Infatti la velocità di reazione tra uno ione ed una molecola può essere fino a 10 ordini di grandezza maggiore che fra un neutro e la stessa molecola. Inoltre la distribuzione spaziale degli ioni è fortemente disomogenea, dal momento che aumenta in particolare nell'intorno della zona di passaggio della radiazione ionizzante. La quantità e lo stato di ionizzazione, oltre che la distribuzione spaziale degli ioni prodotti dalla radiazione cosmica, sono uno dei problemi aperti per i modelli atmosferici e questo progetto si propone di sviluppare modelli di interazione elettromagnetica di bassa energia e di aggiungerli a Geant4, proprio per simulare le interazioni che producono ioni nell'atmosfera.

Geant4 è il toolkit più usato per sviluppare simulazioni dell'interazione di radiazione ionizzante con la materia. È open source ed è realizzato e mantenuto da una collaborazione internazionale. Di recente è stata realizzata un'estensione di Geant4 per simulare la ionizzazione delle molecole ad energie fino agli eV, Geant4-DNA. Geant4-DNA è stato sviluppato per simulazioni di radiobiologia ma la sua versatilità permette di utilizzarlo anche per tutti i casi in cui sia importante simulare la ionizzazione a bassa energia e le interazioni chimiche degli ioni prodotti. Infatti, oltre alle interazioni fisiche, permette di simulare anche la diffusione e le interazioni chimiche.

Per poter simulare correttamente la ionizzazione ad energie così basse, è necessario sviluppare un modello di

ionizzazione per ogni molecola di interesse. Allo stato attuale, Geant4-DNA non include i modelli di interazione di nessuna delle molecole di interesse climatologico. Si propone di estendere Geant4-DNA, sviluppando i modelli di ionizzazione delle specie chimiche citate prima per permettere una simulazione delle reazioni chimiche nell'atmosfera, tenendo conto della radiazione cosmica. In particolare, si simulerà l'interazione del fascio di raggi cosmici, la produzione di radiazione secondaria, la propagazione e l'interazione anche di quest'ultima con l'atmosfera.

Il progetto verrà realizzato in collaborazione con l'Istituto Superiore di Sanità (ISS), che usa Geant4-DNA abitualmente per simulazioni di radiobiologia, dove il candidato avrà l'opportunità di collaborare in particolare con la Dr.ssa Barbara Caccia, del Centro Nazionale per la Protezione dalle Radiazioni e Fisica Computazionale dell'ISS.

È previsto un anno di formazione presso il Centre d'Études Nucléaires di Bordeaux-Gradignan del CNRS, dove lavorano i principali sviluppatori di Geant4-DNA, fra i quali Sebastien Incerti, responsabile della collaborazione che sviluppa Geant4-DNA.

Il candidato avrà, infine, l'opportunità di lavorare per 6 mesi presso il sincrotrone Elettra dove studierà le reazioni ione molecola sperimentalmente e seguirà un percorso formativo.

Il progetto verrà sviluppato in stretta collaborazione con il Dipartimento di Chimica della Sapienza, in particolare con la Dr.ssa Antonella Cartoni ed il Dr. Mauro Satta, che da anni studiano i processi sia ionici che neutri in fase gassosa.

Titolo del progetto (inglese): Development of ionization models in Geant4-DNA to simulate cosmic rays effects on ion-molecules reaction in the atmosphere

Progetto di ricerca (inglese):

This project aims at developing and implementing in Geant4-DNA models to simulate the electromagnetic interactions of molecules which are present in the atmosphere and are of interest for climatology. Thus to allow the simulation of the ionisation of the atmosphere molecules by cosmic rays and estimate then the concentration, the ionisation state, and the spatial distribution of such ions.

The emission of polluting molecules and greenhouse gases in the atmosphere represents a global challenge with open scientific questions, mainly related to the approximation grade of chemical-physical processes used in the prevision models of global warming.

The models presently used have been developed mainly for the troposphere, with one of the rare exceptions being the chemistry of Ozone in the stratosphere. Relevant questions remain open on the role in the stratosphere and troposphere of the chemical reactions of molecules such as SO₂, CO₂, CH₄, NO_x, H₂O. These chemical species have the double role to be involved in the Ozone chemical reactions and to alterate positively or negatively the global radiative balance acting as greenhouse gases or particulate matter reflecting the solar radiation.

A fundamental aspect, still poorly studied, is the role of cosmic radiation in increasing the reaction rate and modifying the type of chemical reactions. Indeed, the reaction rate between an ion and a molecule can be up to 10 orders of magnitudes higher than a neutral and the same molecule. Moreover, the spatial distribution of the ions is extremely inhomogeneous, since it increases in particular in the neighbourhood of the passage area of the ionising radiation. The amount and the ionisation state, besides the spatial distribution of such ions, are one of the open questions for the atmosphere models and this projects is intended to develop the electromagnetic interaction models in the low energy regime and to implement them in Geant4, exactly to simulate the interactions that produce ions in the atmosphere. Geant4 is the most used toolkit to develop radiation matter interactions. It is open source and it is developed and maintained by an international collaboration. Recently, it has been developed a Geant4 extension to simulate the ionisation of molecules down to eV, Geant4-DNA. Geant4-DNA has been developed for radiobiology simulation, however its versatility allows to use it in all the cases where it is important to simulate low energy ionisation and chemical reactions of the ions produced. Indeed, besides physical interactions, it also allows to simulate diffusion and chemical reactions.

To correctly simulate ionisation in such a low energy domain, it is necessary to develop a model for the ionisation of each of the molecules of interest. As it stands, Geant4-DNA does not include the interaction models of any of the molecules of climatological interest. We are proposing to extend Geant4-DNA, developing ionisation models for the

chemical species aforementioned to allow the simulation of the chemical reactions in the atmosphere, taking into account the effects of cosmic radiation. In particular, we will simulate the interaction of cosmic rays, the production of secondary radiation, its propagation and also the interaction of the latter with the atmosphere.

The project will be carried out in collaboration with the Istituto Superiore di Sanità (Italian National Institute of Health, ISS), where Geant4-DNA is widely used for radiobiology simulations, where the PhD candidate will have the opportunity to work in particular with Dr.ssa Barba Caccia, of the ISS National Center for Radiation Protection and Computational Physics.

It is also planned one year of formation at the Centre d'Études Nucléaires of Bordeaux-Grandignan of CNRS, where the main Geant4-DNA developers work, among them Sebastien Incerti, principal investigator of the Geant4-DNA collaboration.

Finally, the PhD candidate will have the opportunity to work for 6 months at the synchrotron Elettra, where he/she will study the ion-molecule reactions experimentally and will attend a dedicated training.

The project will be accomplished in close collaboration with the Sapienza University Chemistry Department, in particular with Dr.ssa Antonella Cartoni and Dr. Mauro Satta, as they study chemical interaction of both ions and neutrals, in the gaseous phase.