



Università
degli Studi di
Messina

DIPARTIMENTO DI SCIENZE BIOMEDICHE,
ODONTOIATRICHE E DELLE IMMAGINI
MORFOLOGICHE E FUNZIONALI



Seminari di Dipartimento BIOMORF – Ciclo 2024/1

Questa iniziativa è nata nel 2020 per promuovere la conoscenza delle linee di ricerca e stimolare le collaborazioni tra i molti SSD del Dipartimento. In questo ciclo di seminari si darà spazio sia ai ricercatori del nostro Dipartimento in rappresentanza delle diverse macro-aree, sia a colleghi di altri Dipartimenti e ad ospiti nazionali ed internazionali. Per favorire le interazioni e lo scambio di conoscenze, si è pensato al nuovo format duale, che prevede due interventi incentrati su tematiche interconnesse. Dopo il grande successo dell'anno scorso, si rinnova l'atteso appuntamento con l'evento "I Giovani Ricercatori BIOMORF" interamente dedicato ai giovani ricercatori del Dipartimento.

Mercoledì 22 maggio 2024 - ore 16.00

Aula Marini, piano V-Torre Biologica (Pad. G), A.O.U. "G. Martino"

PRESENTAZIONE DELL'EVENTO

Prof. Sergio Baldari

Direttore Dipartimento BIOMORF, Università degli Studi di Messina

Prof. Giovanni Crupi

Coordinatore Commissione AQ-RDTM, Dipartimento BIOMORF

INTRODUZIONE

Prof. Giuseppe Pellicane

Dipartimento BIOMORF, Università degli Studi di Messina

RELATORE

Prof. Mesfin Tsige

School of Polymer Science and Polymer Engineering, The University of Akron, Akron, OH, USA

ELUCIDATING THE CORRELATION BETWEEN POLYMER STEREOREGULARITY AND SURFACE PHENOMENA THROUGH COMPUTATIONAL ANALYSIS

Understanding the properties of polymers at interfaces holds immense importance across a range of applications, spanning from antifouling coatings to flexible electronic devices. Exploring their structural complexities and thermodynamic behaviors is therefore a subject of significant interest. While significant achievements have been made in experimentally unraveling the molecular makeup of polymers in diverse settings, effectively probing their structure and dynamics at interfaces remains a daunting task. Computer simulations have emerged as a valuable tool to provide details lacking in experimental data.

In this talk, I will discuss how computational modeling methods are used to investigate the structure and dynamics of molecules at buried interfaces in polymer science. Specifically, I will focus on the growing experimental evidence showing the strong dependence of polymer adhesion properties on the dynamics and distribution of functional groups at the interface, an area where the effect of polymer tacticity remains less explored. I will present our recent results from all-atom molecular dynamics simulations on the effect of tacticity on the surface structure of poly(methyl methacrylate) (PMMA) at polymer/vacuum and polymer/water interfaces, highlighting the control of surface composition and tension by polarity and steric constraints.