

*Dipartimento di Scienza dei Materiali***RELAZIONE ANNUALE 2004**

Indice	pag.	1
Scienza dei materiali alla Bicocca compie 10 anni	pag.	3
1. Il Dipartimento in breve	pag.	6
2. Organi dipartimentali	pag.	8
3. Personale	pag.	8
4. Indici Bibliometrici	pag.	11
5. Struttura Organizzativa ed Amministrativa	pag.	13
6. Attività didattica	pag.	16
7. Attività seminariale	pag.	26
8. Organismi di ricerca presenti in Dipartimento	pag.	30
9. Progetti internazionali	pag.	33
10. Linee di ricerca attive in Dipartimento	pag.	37
11. Brevetti - Pubblicazioni scientifiche	pag.	58
12. Comunicazioni a Congressi	pag.	72

25 Ottobre 2004

Scienza dei Materiali alla Bicocca compie 10 anni

Un'occasione speciale quella del decennale del Dipartimento per fare il punto sulla ricerca e la tecnologia nell'ambito della Scienza dei Materiali.

In un evento unico come la celebrazione del proprio anniversario il Dipartimento mette insieme ricerca, industria, corpo docente e gli studenti per un incontro sugli argomenti forti delle Nanoscienze e delle Nanotecnologie destinate al più rapido sviluppo nei prossimi anni.

Presso la Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali intervengono il Dr. Albizzati della Pirelli Labs, il Dr. Cappelletti della STMicroelectronics per parlare di come l'esperienza dei nuovi materiali e della microelettronica trovino pratica applicazione.

Significativa è stata la presenza del Prof. Renato Ugo Presidente di Airi – Associazione Italiana per la Ricerca Industriale per definire quali saranno gli scenari nell'ambito dell'Opto-Elettronica e del Prof. Giacinto Scoles da Princeton a testimoniare quanto questi ambiti risultino strategici e di interesse condiviso internazionalmente

Un evento riuscito certamente per la qualità degli interventi e per l'affluenza del pubblico.



Università degli Studi di Milano – Bicocca
P.za della Scienza – Aula U2-07, ore 14.30

Nanomateriali: piccolo è meglio

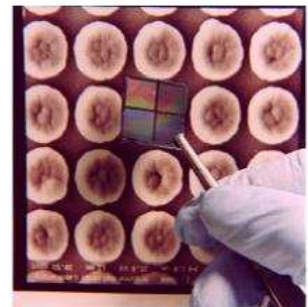
10 anni di ricerca sui nuovi
materiali e sulle nanotecnologie

25 ottobre '04

- | | |
|---------------|---|
| 14.30 - 14.45 | Saluto del Rettore |
| 14.45 - 15.15 | Prof. Dario Narducci
(Milano-Bicocca)
"1994-2004: dai nuovi materiali
alle nanotecnologie" |
| 15.15 - 15.35 | Dr. Enrico Albizzati
(Pirelli Labs)
"I nuovi materiali: l'esperienza in Pirelli" |
| 15.35 - 15.55 | Dr. Paolo Cappelletti
(STMicronics)
"I nuovi materiali: l'esperienza
in STMicronics" |
| 15.55 - 16.15 | <i>Intervallo</i> |
| 16.15 - 16.45 | Prof. Renato Ugo
(INSTM)
"Materiali ibridi per opto-elettronica" |
| 16.45 - 17.30 | Prof. Giacinto Scoles
(Princeton / SISSA & Elettra, Trieste)
"Nanomanipolazione di biomolecole:
nuovi metodi, prospettive, e possibili ricadute" |

INFO E PRENOTAZIONI

Segreteria Didattica
Antonio Violini
tel. 02 64 48 51 44 / 02 64 48 51 02
antonio.violini@unimib.it
<http://www.mater.unimib.it/cdl/10anni/index.html>



1 - IL DIPARTIMENTO IN BREVE

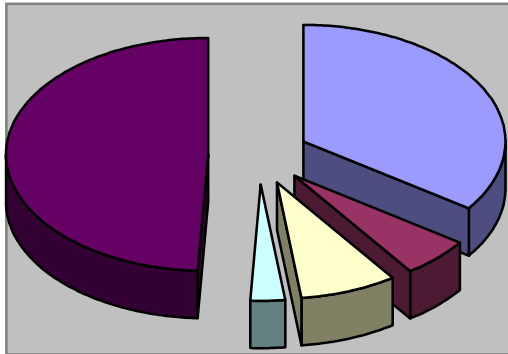
In questa prima pagina della Relazione Annuale di Dipartimento si presenta in maniera sintetica la realtà del Dipartimento di Scienza dei Materiali negli anni più recenti: risorse umane, finanziamenti, risultati scientifici.

Nelle rimanenti pagine verranno date per esteso le informazioni concernenti le attività svolte nell'anno 2004.

	2001	2002	2003	2004
Risorse umane				
Docenti e ricercatori	33	37	36	36
Personale amministrativo	4	5	6	6
Personale tecnico	10	5	8	8
Personale enti esterni	2	2	3	3
Dottorandi, assegnisti, borsisti	20	35	47	51
Finanziamenti per la ricerca	milioni di lire	Euro x 1.000		
Finanziamento FAIR ex 60%	174,4	94,879	97,262	85,881
Finanziamento PRIN ex 40%	336,9	376,238	279,400	524,800
Contributi UE, CARIPLO, ecc.	71,9	92,244	42,311	362,270
Contratti e contributi CNR	292,0	113,218	55,930	29,100
Fondi INFM ¹⁾	400,0	265,000	140,000	96,600
Contratti Conto Terzi	300,0	125,786	150,000	24,360
CORIMAV			300,000	300,000
Totale	1575,2	1.067,365	771,655	1423,011
Altri finanziamenti	milioni di lire	Euro x 1.000		
Dotazione ordinaria	115,5	61,458	63,245	65,052
Finanziamenti per la didattica	179,1	67,500	165,185	59,108
Contributi Dottorato di ricerca	96,5	15,503	21,931	24,520
Contributi Sc. di Specializzazione	3,0	5,160	7,332	7,332
Contributi Camera di Commercio			15,000	
Contributi da Federottica	125,0	51,646	51,646	9,183
Provincia, ecc.				
Assegnazione Straord. sp			223,369	2,500
Totale	519,1	201,267	547,708	167,695
Attività Scientifica				
Pubblicazioni su riviste internazionali	129	126	132	132

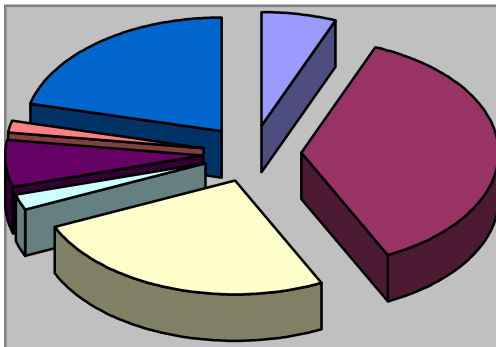
1) Amministrati dall'INFM

Risorse Umane



- **Docenti e ricercatori**
- **Personale amministrativo**
- **Personale tecnico**
- **Personale enti esterni**
- **Dottorandi, assegnisti, borsisti**

Finanziamenti per la ricerca



- **Finanziamento FAIR ex 60%**
- **Finanziamento PRIN ex 40%**
- **Contributi UE, CARIPLO, ecc.**
- **Contratti e contributi CNR**
- **Fondi INFM 1)**
- **Contratti Conto Terzi**
- **CORIMAV**

1) Amministrati dall'INFM

2 - ORGANI DIPARTIMENTALI

Direttore

Prof. Gianfranco Pacchioni

Vice Direttore

Prof. Giorgio Pagani

Giunta

Prof. Marco Bernasconi, Prof. Emanuele Grilli, Prof. Franco Meinardi, Prof. Giorgio Pagani ,
Dott. Roberto Scotti, Prof. Giorgio Spinolo, Dott. Gilberto Desimone, Dott.ssa Carmen Canevali,
Prof. Gianfranco Pacchioni

Segretario Amministrativo

Dott. Gilberto De Simone

3 - PERSONALE

PERSONALE DOCENTE (al 31.12.2004)

Professori Ordinari

Benedek Giorgio	(FIS03)
Borghesi Alessandro	(FIS01)
Brivio Gian Paolo	(FIS03)
Catti Michele	(CHIM02)
Guzzi Mario	(FIS01)
Martini Marco	(FIS07)
Miglio Leonida	(FIS03)
Morazzoni Franca	(CHIM03)
Pacchioni Gianfranco	(CHIM03)
Pagani Giorgio	(CHIM06)
Pizzini Sergio	(CHIM02)
Spinolo Giorgio	(FIS01)
Terzi Nice	(FIS03)
Tubino Riccardo	(FIS03)

Professori Associati

Abbotto Alessandro	(CHIM06)
Bernasconi Marco	(FIS03)
Grilli Emanuele	(FIS03)
Mari Claudio Maria	(CHIM02)
Milani Marziale	(FIS07)
Moret Massimo	(CHIM03)
Narducci Dario	(CHIM02)
Paleari Alberto	(FIS01)
Papagni Antonio	(CHIM06)
Sanguinetti Stefano	(FIS03)
Sassella Adele	(FIS01)
Sozzani Piero	(CHIM04)
Vedda Anna	(FIS01)

Ricercatori

Acciarri Maurizio	(FIS01)
Binetti Simona	(CHIM02)

Comotti Angiolina	(CHIM02)
Di Valentin Cristiana	(CHIM03)
Meinardi Francesco	(FIS01)
Montalenti Francesco	(FIS03)
Simonutti Roberto	(CHIM04)
Scotti Roberto	(CHIM03)
Sibilia Emanuela	(FIS07)

Ricercatori ospiti

Airoldi Graziella	Professore a contratto
Bollani Monica	Ricercatore INFM
Galli Anna	Ricercatore INFM
Spearman Peter	Visiting Researcher
Trioni Mario Italo	Ricercatore INFM

PERSONALE AMMINISTRATIVO

Azimonti Chiara	Area amministrativa – Categoria C1
Danese Alessandra	Area amministrativa – Categoria C2
De Simone Gilberto	Area amministrativa-gestionale - Categoria D3
Erba Angela	Area amministrativa – Categoria C4
Priore Maria Grazia	Area servizi generali e tecnici – Categoria B2
Scicchitano Luca	Area amministrativa – Categoria C1

PERSONALE TECNICO

Boria Enea	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria C1
Canevali Carmen	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria C4
Cascella Massimiliano	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria B3
Ferraro Lorenzo	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria C1
Martino Silvano	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria C3
Pasotti Umberto	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria C2
Sacchetti Francesco	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria C1
Violini Antonio	Area tecnica, tecnico-scientifica ed elaborazione dati – Categoria C2

PERSONALE IN FORMAZIONE (al 31.12.2004)

Assegnisti e borsisti

NOME	Ruolo
Bollani Monica	Assegnista
Bracco Silvia	Assegnista
Cerminara Michele	Assegnista
Chiodini Norberto	Assegnista
Clementi Andrea	Borsista
Di Martino Daniela	Assegnista
Di Piazza Luca	Borsista
Giordano Livia	Assegnista
Kaeszi Manuel	Borsista
Kefer Stefano	Borsista
Mezyk Jakub	Assegnista
Oldani Matteo	Borsista

Roda Elena	Borsista
Ruffo Riccardo	Borsista
Scagnelli Andrea	Borsista
Spanò Eleonora	Borsista
Taffurelli Alberto	Borsista
Tavazzi Silvia	Assegnista
Urbano Silvia	Assegnista

Dottorandi

NOME	Dottorato	Ciclo	Tutore
Archetti Graziano	Chimica	XVII	Abbotto Alessandro
Berlanda Giuseppe	Materiali	XIX	Benedek Giorgio
Brovelli Sergio	Materiali	XIX	Paleari Alberto
Butti Gabriele	Materiali	XVIII	Trioni Mario Italo
Campione Marcello	Nanotecnologie	XVII	Sassella Adele
Caravati Sebastiano	Materiali	XIX	Trioni Mario Italo
Cereda Silvia	Materiali	XX	Montalenti Francesco
Cinquini Fabrizio	Materiali	XX	Pacchioni Gianfranco
Colombo Davide	Materiali	XVIII	Guzzi Mario
Del Vitto Annalisa	Chimica	XVIII	Pacchioni Gianfranco
Delvitto Annalisa	Chimica	XVIII	Pacchioni Gianfranco
Fasoli Mauro	Materiali	XVIII	Martini Marco
Ferretti Lisa	Nanotecnologie	XIX	Sozzani Piero
Franchina Emanuela	Nanotecnologie	XVIII	Paleari Alberto
Fumagalli Luca	Nanotecnologie	XVIII	Pizzini Sergio
Laicini Marco	Materiali	XVIII	Borghesi Alessandro
Le Donne Alessia	Materiali	XVII	Pizzini Sergio
Macchi Giorgio	Materiali	XVIII	Meinardi Franco
Marchionna Stefano	Materiali	XIX	Pizzini Sergio
Marzegalli Anna	Materiali	XVIII	Miglio Leonida
Mattoni Marina	Chimica	XVII	Morazzoni Franca
Mauri Michele	Nanotecnologie	XVIII	Sozzani Piero
Miozzo Luciano	Materiali	XVII	Papagni Antonio
Montanari Cinzia	Materiali	XVIII	Martini Marco
Morone Marika	Chimica	XVIII	Abbotto Alessandro
Nardi Marco	Materiali	XIX	Tubino Riccardo
Pietrucci Fabio	Nanotecnologie	XIX	Bernasconi Marco
Raimondo Luisa	Materiali	XIX	Borghesi Alessandro
Romano Elisabetta	Nanotecnologie	XVIII	Narducci Dario
Sommariva Marco	Nanotecnologie	XIX	Catti Michele
Trabattoni Silvia	Chimica	XIX	Moret Massimo
Valsesia Patrizia	Materiali	XIX	Sozzani Piero
Zipoli Federico	Nanotecnologie	XIX	Bernasconi Marco

INCARICHI ISTITUZIONALI PRESSO L'ATENEO DI MEMBRI DEL DIPARTIMENTO

Prof. Alessandro Borghesi	Preside della Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Prof.ssa Nice Terzi	Presidente del Nucleo di Valutazione
Prof. Sergio Pizzini	Delegato del Rettore per le relazioni internazionali Direttore della Scuola di dottorato della Facoltà di Scienze MM.FF.NN.
Prof. Dario Narducci	Presidente Commissione Orientamento di Facoltà

4 INDICI BIBLIOMETRICI

Le recenti proposte per la definizione di nuovi modelli per la ripartizione del Fondo di Finanziamento Ordinario (FFO) degli Atenei italiani prevede l'assegnazione del 30% dei finanziamenti sulla base dei risultati delle attività di ricerca scientifica. Alcune proposte per la valutazione della attività scientifica degli Atenei sono state formulate dalle Conferenza dei Rettori delle Università Italiane ("La ricerca scientifica nelle Università italiane. Una prima analisi della banca dati ISI", CRUI, Roma, 2002), dal Comitato Nazionale per la valutazione del sistema universitario ("Proposte per la costruzione di un nuovo modello per la ripartizione teorica del FFO alle università statali", gennaio 2004), e dal Comitato di Indirizzo per la Valutazione della Ricerca (CIVR) ("Linee guida per la valutazione della ricerca", Roma, maggio 2003). Tutte le proposte prevedono l'uso di indici bibliometrici (in particolare dell'*impact factor*) per la valutazione della produzione scientifica.

Di seguito si riportano in due grafici la distribuzione delle pubblicazioni del Dipartimento per fattore d'impatto, e la distribuzione dell'indice di impatto raggruppato sul numero di autori in cui si articola il Dipartimento di Scienza dei Materiali.

Ai fini di una corretta valutazione degli *impact factors* rispetto ad altre aree disciplinari, si riportano nella tabella le riviste a più alto *impact factor* nelle aree chimica, fisica e scienza dei materiali (sono escluse le riviste dedicate ad articoli di rassegna):

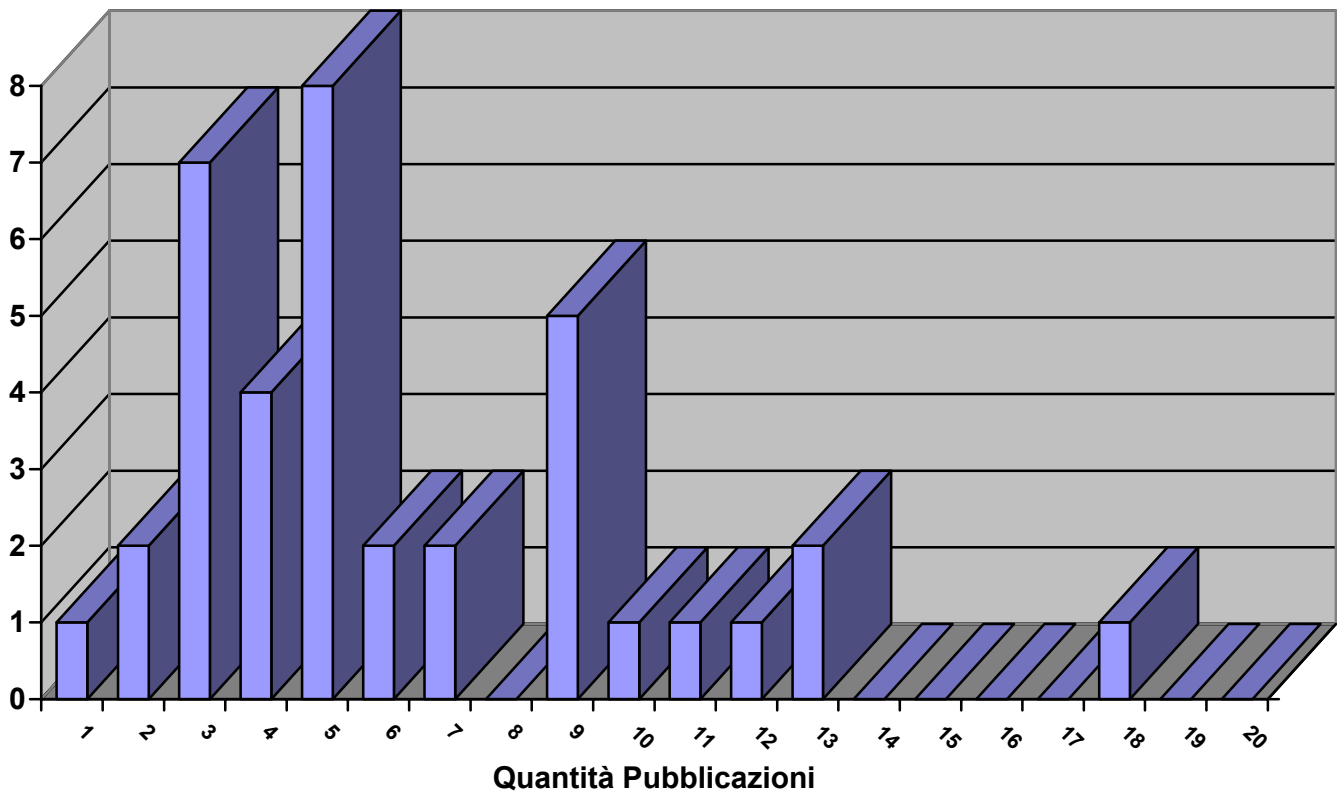
Area	Rivista	I.F.
Chimica	Angew. Chem. Int. Ed.	8,427
Fisica	Phys. Rev. Lett.	7,035
Chimica	J. Am. Chem. Soc.	6,516
Scienza dei materiali	Adv. Funct. Mater.	4,798
Scienza dei materiali	Chem. Mater.	4,374
Fisica	Appl. Phys. Lett.	4,049

Fonte: ISI 2004

Produttività media

- Quanti Autori (ordinate) hanno prodotto tal numero di pubblicazioni (ascisse) -

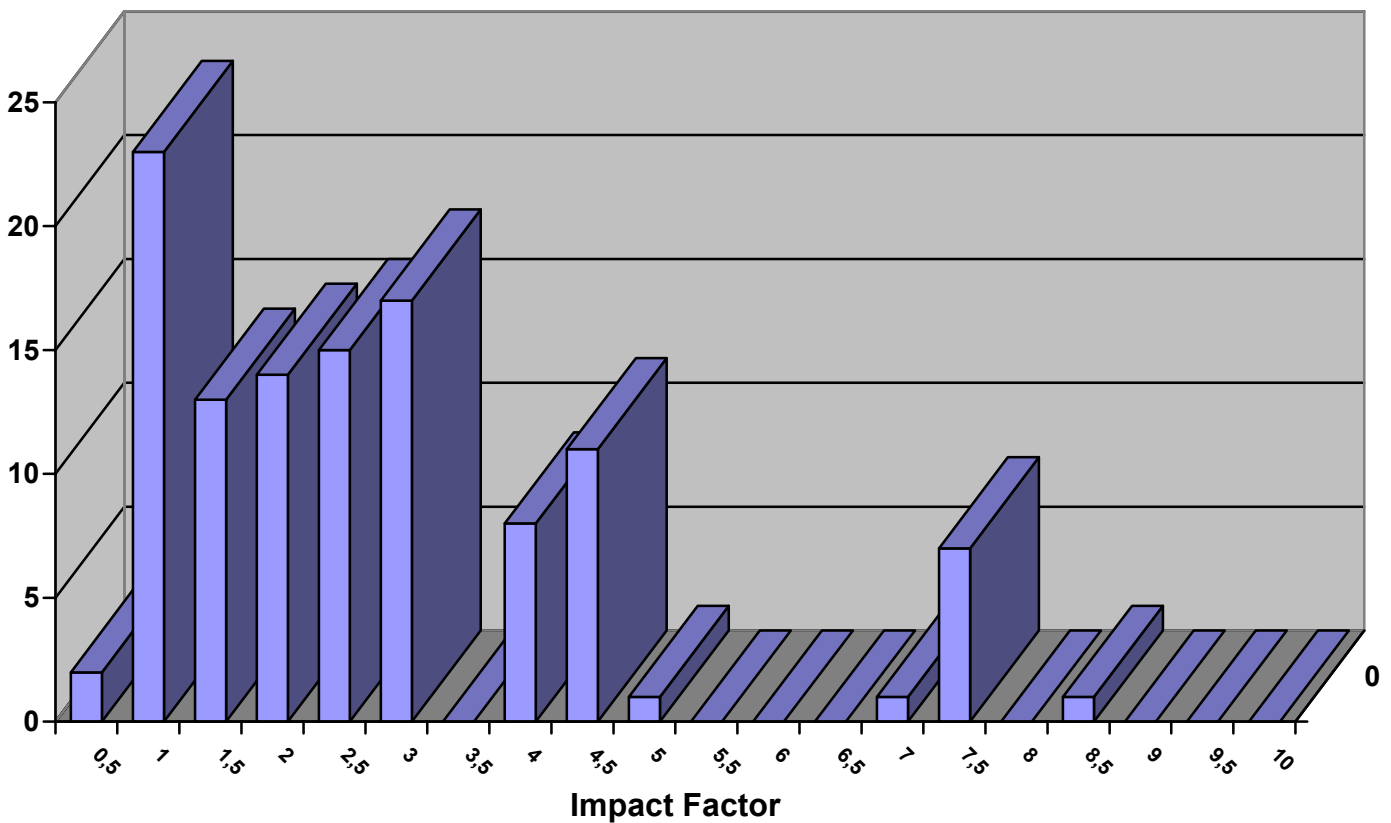
Quantità autori



Distribuzione degli articoli per impact factor (IP)

- Quante Pubblicazioni (ordinate) hanno un certo IP (ascisse) -

Quantità Pubblicazioni



5 – STRUTTURA ORGANIZZATIVA ED AMMINISTRATIVA

Il Dipartimento è organizzato in modo sostanzialmente unitario con l'obiettivo di pervenire ad un impiego razionale ed efficiente delle risorse umane, finanziarie e tecniche disponibili. Tutte le attività di servizio sono gestite in modo centralizzato.

Le attività di servizio del Dipartimento sono organizzate in Unità di Servizio. Le Unità di Servizio operanti nel Dipartimento sono le seguenti:

Segreteria Amministrativa; Segreteria Didattica; Servizi Informatici; Officina; Radioprotezione; Servizi Tecnici relativi ai laboratori; Servizi ausiliari.

A ciascuna Unità di Servizio è preposto il personale tecnico e amministrativo assegnato al Dipartimento.

Segreteria Amministrativa

(Gilberto De Simone, Luca Scicchitano)

L'Unità di Servizio predispone il bilancio di previsione e il conto consuntivo; predispone ed esegue gli atti amministrativi relativi alla gestione del bilancio e della contabilità economico-patrimoniale; gestisce il fondo economale; tiene i rapporti con i fornitori, con l'azienda di credito che gestisce il servizio di cassa e con gli uffici centrali dell'Amministrazione; convoca le riunioni degli organi collegiali della struttura e redige i relativi verbali; rendiconta i fondi di ricerca; cura la contabilità interna dei gruppi di ricerca e della didattica.

La tab.1 sintetizza l'evoluzione dell'attività amministrativa-contabile dal 1999 al 2004.

Numero totale di operazioni amministrative svolte dalla Segreteria

	<u>1999</u>	<u>2000</u>	<u>2001</u>	<u>2002</u>	<u>2003</u>	<u>2004</u>
Mandati	746	987	939	1040	1029	1037
Impegni	746	1006	859	963	997	1019
Riversali	29	71	60	65	64	80
Accertamenti	56	54	59	78	61	73
Missioni	308	350	378	250	454	380
Pagamenti esteri	38	57	56	54	22	58
Reg. mat. inv.	178	224	134	139	92	152
Variazioni bilancio	90	93	96	106	103	114

Segreteria Didattica

(Alessandra Danese, Angela Erba, Chiara Azimonti)

Provvede all'espletamento delle procedure amministrative inerenti l'attività didattica del Corso di Laurea in Scienza dei Materiali, del Dottorato in Scienza dei Materiali e del Dottorato in Nanostrutture e Nanotecnologie. In particolare collabora con il Presidente del CCD, i Coordinatori di Dottorato. Provvede all'informazione e al curriculum degli studenti. Dall'a.a. 2000/2001 si occupa anche dei corsi di laurea in Scienze e Tecnologie Orafe, Ottica e Optometria, Scienze e Tecnologie Chimiche. Aggiorna la pagina web del Dipartimento dedicata all'attività didattica.

Servizi Informatici

(Referente informatico: Lorenzo Ferraro)

Provvede alla gestione dei servizi informatici di Dipartimento, quali il mail server, il web server, il server di calcolo e in generale di tutte le attrezzature in rete interne, quali le stampanti, lo scanner, etc. e l'allacciamento alla rete esterna. Provvede alla gestione della rete locale, assicurando sia l'accesso di tutte le macchine dipartimentali alla rete di ateneo sia al loro armonico funzionamento. Attualmente il parco macchine è composto da circa 5 Cluster Linux, 200 computer, 12 workstation, 5 stampanti laser, 1 scanner.

Officina

(Francesco Sacchetti – Enea Boria)

Quest'anno nell'officina di Dipartimento sono state realizzate piccole attrezzature per la movimentazione co-assiale di apparecchi ottici, camerette da vuoto, mascherine porta campione per criostati. E' migliorata la qualità del manufatto e della conoscenza, nonché dell'utilizzo, dei materiali prevalentemente in uso quali: acciaio, alluminio, rame, ottone e teflon. Si è inoltre svolta opera di manutenzione e ripristino di pompe rotative e si sta predisponendo il locale al fine di utilizzare la saldatrice a T.I.G.

Francesco Sacchetti gestisce inoltre la distribuzione dell'azoto liquido anche ad utenti di altri Dipartimenti.

Servizio sicurezza e radioprotezione

(Emanuela Sibilia)

Il Servizio si occupa della sicurezza nell'impiego delle sorgenti radioattive e delle macchine radiogene di proprietà del Dipartimento.

L'impiego delle macchine radiogene e delle sorgenti avviene secondo le prescrizioni dell'Esperto Qualificato, riportate nelle *Norme Interne di Radioprotezione*, affisse nei luoghi di lavoro.

Il Servizio fornisce, ove necessario, i mezzi di protezione individuale (dosimetri personali). ed affigge la segnaletica di pericolo su indicazione dell'Esperto Qualificato. Provvede inoltre ad organizzare le visite mediche periodiche e straordinarie dei lavoratori esposti di Categoria B ed A, rispettivamente presso il Medico Competente Prof. Scotti ed il Medico Autorizzato dell'Università, Dott. Levizzani, (Ambulatorio: via Mercalli 21, Milano, segreteria tel. 0258352424, fax 0258308579).

La normativa che regola l'impiego di sorgenti radioattive e di apparecchi generatori di radiazioni ionizzanti (D.Lgs. 230/95, D.P.R. 185/64), è a disposizione per consultazione.

Il Servizio inoltre si propone come punto di riferimento per tutti i problemi connessi con la sicurezza negli ambienti di lavoro.

Servizi Tecnici relativi ai laboratori didattici e di ricerca

(Carmen Canevali – Silvano Martino – Umberto Pasotti – Antonio Violini)

Il personale addetto si occupa della produzione e della distribuzione di acqua deionizzata (tutti i giovedì dalle 10.30 alle 11.30), dell'acquisto centralizzato di reagenti e di gas di uso comune (acetone, cloruro di metilene, etanolo, ammoniaca, acido solforico, acido cloridrico, acido nitrico; azoto, argon, elio). Provvede alla gestione dei depositi dei reagenti e, con la collaborazione del tecnico di officina, delle linee dei gas. Si occupa della gestione e dello smaltimento dei rifiuti tossici e nocivi.

Vengono inoltre eseguite analisi elementari mediante ICP e misure EPR (Carmen Canevali), analisi ATR, sia a sostegno della didattica che della ricerca.

Il personale addetto inoltre si occupa dell'inventario e del ripristino della vetreria, della strumentazione, dei reagenti e dei gas in uso nei laboratori didattici; della preparazione dei reagenti, delle soluzioni, delle miscele di analisi e della produzione di acqua deionizzata.

La dotazione strumentale dei nostri laboratori consente inoltre di offrire un servizio di caratterizzazione di materiali. In particolare sono disponibili le prestazioni sotto elencate per le quali il Consiglio d'Amministrazione ha recentemente approvato un tariffario. Altre prestazioni saranno prossimamente disponibili.

Strumento	Personale responsabile	Costo orario
Spettrometro NMR	Dott. R. Simonutti	€ 135,00
Spettroscopia FTIR	Dott.ssa C. Canevali	€ 98,00
Spettroscopia UV-VIS	Dott.ssa C. Canevali	€ 88,00
Spettrometro EPR	Dott. R. Scotti	€ 207,00 € 83,00/campione
Spettrometro ICP	Dott.ssa C. Canevali	€ 134,00 € 31,00/campione
Meticon 2012 Prism Coupler	Prof. A. Paleari	€ 165,00
Microscopio polarimetrico intensità stress vetri	Prof. A. Paleari	€ 165,00
Microscopio polarimetrico microscopia ottica	Prof. A. Paleari	€ 129,00
Spettrometro micro-Raman	Dott. F. Meinardi	€ 191,00
Spettrometro micro-Raman bassa temperatura	Dott. F. Meinardi	€ 217,00
Microscopio a forza atomica	Prof.ssa A. Sassella	€ 181,00
Microscopio a forza atomica alta risoluzione	Prof.ssa A. Sassella	€ 217,00
Spettrofotometro UV-vis-NIR	Prof.ssa A. Sassella	€ 207,00
Spettrofotometro UV-vis-NIR bassa temperatura	Prof.ssa A. Sassella	€ 232,00
Calorimetro differenziale	Prof.ssa G. Airoidi	€ 77,00
Dinamometro per prove meccaniche:	Prof.ssa G. Airoidi	
Misure di trazione		€ 62,00
Misure di pseudoelasticità		€ 93,00
Diffratometro a raggi X per polveri	Prof. Catti	€ 135,00
Microscopio elettronico a scansione	Dott. Acciarri	€ 120,00

Servizi Generali

(Maria Grazia Priore – Massimiliano Cascella)

Servizio di posta interna ed esterna, diffusione di avvisi, servizio fotocopie.

Servizio gas ed azoto liquido.

6 - ATTIVITÀ DIDATTICA

I docenti del Dipartimento hanno tenuto i seguenti insegnamenti ufficiali:

- Prof. ALESSANDRO ABBOTTO
Chimica Organica II – Modulo I (STC)
Elementi di Materiali Organici (SdM)
Caratterizzazione Chimica di Molecole e Macromolecole (LS SdM)
Chimica Supramolecolare – I Modulo (V.O.)
- Prof. MAURIZIO ACCIARRI
Corso Laboratorio di Fisica dei solidi (Fis.)
Esercitazioni Fisica II – (S.d.M.)
- Prof. GRAZIELLA AIROLDI
Fisica dei Metalli (V.O.)
Fisica dei Metalli (STO)
- Prof. GIULIANO BELLODI
Strumenti ottici e loro evoluzione storica (OO)
- Prof. GIORGIO BENEDEK
Fisica dei Materiali I (SdM)
Fisica dello Stato Solido (STO)
Elementi di Struttura della Materia (Fis.)
Complementi di Struttura della Materia (Fis.)
- Prof. MARCO BERNASCONI
Struttura della Materia – Modulo I (SdM,STO)
Struttura della Materia – Modulo II (SdM)
- Dott. SIMONA BINETTI
Chimica dei Materiali I – Modulo II (SdM)
- Prof. ALESSANDRO BORGHESI
Fisica dei Materiali II (SdM)
- Prof. GIANPAOLO BRIVIO
Teoria Quantistica della Materia (V.O.)
Struttura della Materia (Fis.)
Teoria Quantistica Multicorpi – Modulo I II (LS Fis.)
- Prof. MICHELE CATTI
Chimica dei Materiali I – Modulo I (SdM)
Chimica II (STO)
- Dott. ANGIOLINA COMOTTI
Laboratorio di Chimica II (STO)
Esercitazioni di Chimica Fisica (S.d.M.)
- Prof. EMANUELE GRILLI
Spettroscopia Ottica dello stato solido – Modulo I II (LS Fis.)
Laboratorio di Stato solido – Modulo I II (LS Fis.)
Fisica e Laboratorio – Classe 59 A° SILSIS
- Prof. MARIO GUZZI
Fisica II (OO) (SdM) (STO)
Fisica e Tecnologia dei Semiconduttori (V.O.)

- Prof. CLAUDIO MARIA MARI
Laboratorio Integrato - Modulo II (STC)
Chimica Fisica II – Modulo II (STC)
Elettrochimica e Corrosione (LS SdM)
Elettrochimica (STO)
Complementi di Termodinamica Cinetica Chimica (S.d.M.)
- Prof. MARCO MARTINI
Laboratorio di Fisica I (SdM) (STO)
Tecniche Avanzate di Caratterizzazione dei Materiali (V.O.)
- Dott. FRANCESCO MEINARDI
Spettroscopia – Modulo II (SdM)
Spettroscopia I (V.O.)
- Prof. LEONIDA MIGLIO
Fisica dello Stato Solido (I e II Mod) (Spec.SdM)
Fisica delle Superfici – (LS Fis.)
- Prof. MARZIALE MILANI
Fisica e Applicazione dei Laser (OO) (V.O.)
Laboratorio misure (S.B.) (N.O.) (V.O.)
- Dott. FRANCESCO MONTALENTI
Elementi di termodinamica Statistica (SdM)
Termodinamica Statistica dei Materiali (LS SdM)
- Prof.ssa FRANCA MORAZZONI
Chimica generale e Inorganica (I e II Modulo) (SdM)
Complementi di Chimica Inorganica (SdM)
Chimica generale e Inorganica I (STO)
- Prof. MASSIMO MORET
Chimica Inorganica (OO)
Chimica Generale ed Inorganica (L.Scienze e Tecnologie Geologiche)
- Prof. DARIO NARDUCCI
Chimica Fisica II - Modulo I (STC)
Complementi di Termodinamica e Cinetica (SdM)
Laboratorio di Tecnologia dei Materiali II (SdM)
Chimica Fisica dello Stato Solido e delle Superfici (V.O.)
- Prof. GIANFRANCO PACCHIONI
Chimica Generale e Inorganica II – Modulo II (STC)
Chimica dei Materiali II (Mod I-III) (SdM)
Chimica dello Stato Solido (LS SdM Chimica dello Stato Solido)
Elementi di Chimica (Fis.)
- Prof. GIORGIO PAGANI
Chimica Organica II – Modulo II (STC)
Chimica Organica (SdM)
Complementi di Chimica Organica (SdM)
Chimica Supramolecolare (V.O.)
- Prof. ALBERTO PALEARI
Laboratorio di Tecnologia dei Materiali I (SdM)
Fisica (SB)
- Prof. ANTONIO PAPAGNI
Chimica Organica (OO)
Laboratorio di Chimica II (SdM)
Sintesi e tecniche Speciali dei Materiali Organici (V.O.)

- Prof. SERGIO PIZZINI
Chimica Fisica I (STC)
Complementi di Chimica Fisica (SdM)
Laboratorio di Chimica dei Materiali II (LS SdM)
- Dott. STEFANO SANGUINETTI
Fisica del Continuo Dielettrico ed Elastico (SdM)
Laboratorio di Fisica dei Materiali (SdM)
Fisica Nanostrutture (V.O.)
- Prof.ssa ADELE SASSELLA
Laboratorio di Ottica Geometrica (OO)
Laboratorio di Fisica II (SdM) (STO)
Laboratorio di Fisica dei Materiali II (LS SdM)
Principi Fisici di Caratterizzazione dei Materiali (LS SdM)
- Dott. ROBERTO SCOTTI
Laboratorio di Chimica Generale e Inorganica (STC)
Chimica Generale Inorganica II – Modulo I (STC)
Laboratorio di Chimica I (SdM)
Laboratorio di Chimica Inorganica (STO)
- Dott. EMANUELA SIBILIA
Complementi di Fisica (S.d.F.P.)
Esperimentazioni di Fisica I (S.d.M.) – (S.T.O.)
- Dott. ROBERTO SIMONUTTI
Laboratorio di Chimica dei Materiali (SdM)
- Prof. PIERO SOZZANI
Chimica dei Materiali II (Mod.II) (SdM)
Elementi di Materiali Polimerici (SdM)
Chimica e tecnologia dei Polimeri (V.O.)
- Prof. GIORGIO SPINOLO
Fisica I (OO) (SdM) (STO)
Complementi di Fisica (I e II Modulo) (SdM)
- NICE TERZI
Introduzione alla Fisica dello stato solido – (Fis)
Elementi di Fisica dello stato solido – (LS Fis)
Fisica dello stato solido – (LS Fis)
Fisica e sua didattica – Classe 59/A – SILSIS
- Dott. SILVIA TAVAZZI
Proprietà Ottiche dei Materiali (OO)
- Prof. RICCARDO TUBINO
Fotofisica dei processi Visivi (OO)
Complementi di Fisica Atomica e Molecolare (SdM)
Fisica dei Materiali Molecolari (V.O.)
- Dott. ANNA VEDDA
Fisica generale (STC)

SdM=Scienze dei Materiali laurea triennale Nuovo Ordinamento

STC=Scienze e Tecnologie Chimiche

LS SdM=laurea specialistica in Scienza dei Materiali

V.O.=Scienza dei Materiali laurea quinquennale Vecchio Ordinamento

STO=Scienze e Tecnologie Orafe

OO=Ottica e Optometria

LS Fis.= Laurea Specialistica in Fisica

Fis. =Laurea Triennale in Fisica

S.d.F.P=Scienze della Formazione Primaria

S.B.=Scienze Biologiche

TESI IN SCIENZA DEI MATERIALI (V.O.)

1. 8 marzo 2004 – Cristiano BERGAMASCHI
“Deposizione di film sottili a base di silice per applicazioni ottiche e microelettroniche”
2. 8 marzo 2004 – Alice Silvia CATTANEO
“Mesofasi polimeriche studiate con tecniche bidimensionali NMR dello stato solido”
3. 8 marzo 2004 - Alessandro FIGINI
“Struttura e reattività di superfici regolari e difettive di ossido di calcio mediante calcoli ab initio”
4. 8 marzo 2004 – Federico GAMBA
“Studio di processi diffusivi su scala microscopica alla superficie Ge(105)”
5. 8 marzo 2004 – Carlo GIROTTI
“Sintesi e caratterizzazione di complessi metallici per dispositivi elettroluminescenti”
6. 8 marzo 2004 – Nicola GUERINI
“Studio di difetti ricombinati in semiconduttori con tecniche di microspettroscopie e micro LBIC”
7. 8 marzo 2004 – Carla Maria LAZZARI
“Studio di metodologie per la progettazione di sensori chimici integrabili in matrici olfattive”
8. 8 marzo 2004 – Corrado LOCATI
“Misure di basicità superficiale in ossidi inorganici mediante molecole sonda: calcoli da primi principi”
9. 8 marzo 2004 – Andrea MINOIA
“Strutture di cromofori in nanocanali di zeoliti”
10. 8 marzo 2004 – Federico MORETTI
“Radioluminescenza di vetri scintillatori realizzati con tecnica Sol-Gel e drogati con terre rare”
11. 8 marzo 2004 – Daniele MOTTINI
“Spettroscopia NMR dello stato solido applicata allo studio di nuovi materiali nanostrutturati”
12. 8 marzo 2004 – Anna Rita ODORIZZI
“Studio delle proprietà chimico-fisiche di ceramiche lustrate di differente provenienza (maioliche rinascimentali umbre, ceramiche ispano-moresche e ceramiche arabe)”
13. 8 marzo 2004 – Laura PANZERI
“Luminescenza termicamente e otticamente stimolata di tufi archeologici”
14. 8 marzo 2004 – Giorgio PATRIARCA
“Materiali per multifotonica basati su cromofori selettivamente funzionalizzati per prestazioni differenziate”

15. 8 marzo 2004 –Miriam PIANA
“Preparazione e caratterizzazione di materiali per dispositivi elettrochimici”
16. 8 marzo 2004 –Davide TAMBURELLO
“Proprietà ottiche di leghe SiGe e strutture SiGe/Si”
17. 11 maggio 2004 – Luca DI PIAZZA
“Diffusione di vacanze di idrogeno su H/Pd(111)”
18. 11 maggio 2004 – Alessandro LIMONTA
“Reattività superficiali degli ossidi semiconduttori puri e drogati con metalli di transizione. Il caso di SnO_2 e ZnO ”
19. 11 maggio 2004 – Andrea SCAGNELLI
“Teoria della nano-litografia atomica. Uno studio *ab initio* della interazione di atomi di Cs con monostrati autoassemblati di alcantioli sulla superficie Au(111)”
20. 6 luglio 2004 – Irene BALDI
“Controllo delle proprietà morfologiche e strutturali di film sottili molecolari tramite l'impiego di campi magnetici”
21. 6 luglio 2004 – Marina CANCELLIER
“Preparazione e caratterizzazione di fosfati per batterie riciclabili a stato solido”
22. 6 luglio 2004 – Roberto COLOMBO
“Sintesi di monomeri e polimeri a base tetrafluoroacridinica”
23. 6 luglio 2004 – Cinzia DE MARCO
“Attività elettrica di difetti estesi e difetti di punto nei dispositivi per la microelettronica”
24. 6 luglio 2004 – Ottone FAVINI
“Sintesi di politiofene, funzionalizzazione con unità acridiniche e caratterizzazione”
25. 6 luglio 2004 – Alberto TAFFURELLI
“Stabilizzazione di superfici di silicio (100) auto-assemblate con molecole organiche”
26. 12 ottobre 2004 – Sara BORGHI
“Cromofori squarainici a base pirrolica generatori di $^1\text{O}_2$ sintesi e caratterizzazione”
27. 12 ottobre 2004 – Silvia CEREDA
“Analisi Microscopica dei meccanismi di crescita ed evoluzione morfologica delle facce (105) di nanostrutture Ge/Si(001)”
28. 12 ottobre 2004 – Fabrizio CINQUINI
“Struttura elettrica, vacanze di ossigeno e adsorbimento di atomi di Au su superfici (110) di TiO_2 mediante calcoli da primi principi”
29. 12 ottobre 2004 – Giorgio GARBELLA
“Studio di fattibilità di sensori di gusto basati su monostrati organici autoassemblati su silicio”

30. 12 ottobre 2004 – Riccardo RUGGERONE
“Crescita di cristalli molecolari, studio della morfologia e delle proprietà ottiche”
31. 16 novembre 2004 – Francesco CASATI
“Studio mediante spettroscopia ottica di punti quantici per emissione a 1,3 μm ”
32. 16 novembre 2004 – Giorgio BOGLIO
“Studio delle emissioni dell’eterostruttura $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{Ag}_y\text{Sb}_{1-y}$ cresciuta su GaSb tramite catodoluminescenza”
33. 16 novembre 2004 – Andrea BONFANTI
“Dinamiche non lineari in laser a colorante pompato da laser ad azoto”
34. 16 novembre 2004 – Pietro CAMPANELLI
“Studio e realizzazione di un apparato strumentale per misure di luminescenza otticamente stimolata”
35. 16 novembre 2004 – Silvia CHELLINI
“Proprietà elettriche ed ottiche di silicio multicristallino di tipo N per applicazioni fotovoltaiche”
36. 16 novembre 2004 – Francesco FUMAGALLI
“Risposta elettrica di monostrati autoassemblati organici su Si(100) nella regione delle audiofrequenze”
37. 16 novembre 2004 – Edoardo MOLTRASIO
“Studio comparativo di reazioni di autoassemblaggio di molecole organiche su superfici di silicio”
38. 16 novembre 2004 – Alberto TONIZZA
“Proprietà ottiche di aggregati molecolari e composti di inclusione a base porfinica”
39. 16 novembre 2004 – Emanuele UCCELLI
“Crescita e caratterizzazione ottica di punti quantici di InAs autoallineati su superfici di GaAs(110) pre-marcata epitassialmente.

TESI IN SCIENZA DEI MATERIALI (N.O.)

1. 16 marzo 2004 – Luca MAINI
“Processi di diffusione su superfici metalliche”
2. 16 marzo 2004 – Sabrina SICOLO
“Studio teorico della deposizione di atomi metallici su superfici regolari e difettive di ossidi ionici”
3. 18 maggio 2004 – Gianluca GUALTIERI
“Studio, sviluppo e caratterizzazione di contatti in ossido di silicio per la costruzione di circuiti integrati e memorie flash in tecnologia da 90nm”
4. 13 luglio 2004 – Simone JURICH
“Fotoluminescenza infrarossa di complessi dell’ Er^{3+} ”

5. 13 luglio 2004 – Claudio SOMASCHINI
“Preparazione e caratterizzazione di superfici di silicio monocristallino funzionalizzate per autoassemblaggio”
6. 19 ottobre 2004 – Mario BERETTA
“Nanocompositi polimerici”
7. 19 ottobre 2004 – Paolo CAMPIGLIO
“Introduzione di catene perfluoroalchiliche in sistemi polifluoroacridinici”
8. 19 ottobre 2004 – Michele CERIOTTI
“Calcolo ab-initio delle proprietà strutturali e vibrazionali delle fasi cristalline di TeO_2 ”
9. 19 ottobre 2004 – Marco Claudio GIUSSANI
“Preparazione e caratterizzazione difettuale di vetri borofosfosilicati (BPSG) drogati con ioni metallici”
10. 19 ottobre 2004 – Alessandro MITRANO
“Preparazione e caratterizzazione di ossidi monocristallini”
11. 19 ottobre 2004 – Mauro RIVA
“Effetto di contaminazioni sulla qualità del silicio e della sua interfaccia con l’ossido”
12. 19 ottobre 2004 – Patrizio SALICE
“Squaraine idrosolubili: esplorazione di sintesi e caratterizzazione di un sistema a base eterociclica”
13. 19 ottobre 2004 – Alessandro SANGUINETI
“Materiali nanoporosi autoassemblati”
14. 19 ottobre 2004 – Mauro SASSI
“Indagine esplorativa su una porfirina atta a terapia fotochimica”
15. 14 dicembre 2004 – Davide BRAVI
“Sintesi e caratterizzazione di ossidi a struttura perovskitica d’interesse per la conducibilità”
16. 14 dicembre 2004 – Laura ERBIZZONI
“Studio delle emissioni ottiche di fotoluminescenza in materiali compositi nanostrutturati a base di silice e SnO_2 drogati erbio”
17. 14 dicembre 2004 – Riccardo GABARRINI
“Produzione di idrogeno mediante decomposizione fotoelettrochimica dell’acqua”
18. 14 dicembre 2004 – Daniela GATTI
“Proprietà ottiche e vibrazionali di silice drogata con terbio”
19. 14 dicembre 2004 – Roberto LORENZI
“Crescita di cristalli organici non centrosimmetrici per ottica non lineare”
20. 14 dicembre 2004 – Matteo MARTINENGHI
“Confronto tra diverse metodologie di sintesi su superfici di silicio autoassemblate per applicazioni sensoristiche”

TESI IN SCIENZA E TECNOLOGIE CHIMICHE (N.O.)

28 ottobre 2004 – Davide CAPPELLINI

“Conoscenza di tecniche analitiche ambientali. Istruzione e partecipazione alle diverse fasi di analisi di campioni in matrici diverse (acque, terreni, rifiuti. ecc....)”

28 ottobre 2004 – Anika SALANTI

“Sintesi di clusters carbonilici bimetallici per la preparazione di catalizzatori di idrogeno”

TESI IN OTTICA E OPTOMETRIA (N.O.)

20 dicembre 2004 – Luca GIORGETTI

“Lenti a contatto morbide bifocali: applicazione per la compensazione del presbite e caratterizzazione fisica delle lenti”

20 dicembre 2004 – Ivan PIACENTINI

“Comparazione ed integrazione tra la sequenza optometrica analitica ed il metodo MKH”

I NUOVI CORSI DI LAUREA

Nell'anno accademico 2001/2002 sono stati attivati due nuovi corsi di laurea di I livello i cui ambiti sono fortemente legati alle attività del Dipartimento:

- Corso di Laurea in Ottica e Optometria; (Referente Prof. A.Papagni)
- Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Orafe. (Referente Prof. M.Martini)

Questi due curricula nascono dalle richieste delle rispettive Associazioni di Categoria e hanno l'obiettivo di formare delle nuove figure professionali di cui i settori di competenza sentono l'esigenza.

Intorno ad entrambi i corsi si è riscontrato un buon interesse ma è con il loro consolidamento negli anni futuri che si potrà avere un indice della loro reale riuscita.

Grazie anche ai contributi delle Associazioni promotrici durante quest'anno sono iniziati la progettazione e l'allestimento di laboratori dedicati alle specifiche attività formative di questi Corsi.

Il Dipartimento dà inoltre un forte supporto organizzativo e di Docenza al nuovo Corso di Laurea di I livello in Scienze e Tecnologie Chimiche coordinato dal Prof. Sergio Pizzini.

DOTTORATO DI RICERCA IN SCIENZA DEI MATERIALI

Il Dottorato in Scienza dei Materiali, dà un cospicuo contributo ai programmi di ricerca del Dipartimento e ai suoi rapporti con gli enti di ricerca nazionali e l'industria nei settori dell'alta tecnologia.

Gli argomenti di tesi coprono aree equamente distribuite tra fisica e chimica dei materiali riflettendo il buon bilanciamento della ricerca fra l'area chimica più indirizzata alla preparazione di nuovi materiali ed alla loro caratterizzazione strutturale e quella fisica più indirizzata allo studio dei fenomeni e delle proprietà alla loro base, anche tramite modelli.

Il Coordinatore del corso di Dottorato è il Prof. Gian Paolo Brivio, a partire dal XX ciclo.

DOTTORATO EUROPEO DI RICERCA IN NANOSTRUTTURE E NANOTECNOLOGIE

Il Dottorato europeo in nanostrutture e nanotecnologie è stato istituito nell'ambito del Programma di Internazionalizzazione proposto dal MURST nel 2000, ed è stato cofinanziato per il triennio 2000-2002 al 50% dal MURST. Dall'AA 2001-2002 il Dottorato ha avuto ogni anno l'autorizzazione al suo proseguimento ed è pertanto un Dottorato attivo della Facoltà di Scienze. Caratteristica essenziale di questo dottorato è la sua dimensione internazionale, che prevede fra il resto l'obbligo per i dottorandi di trascorrere presso una delle Università consorziate un periodo di studio e ricerca di almeno 12 mesi e l'ottenimento di un doppio titolo, in analogia al dottorato in cotutela. La discussione della tesi, redatta in lingua inglese, deve essere condotta di fronte ad una giuria internazionale, dopo il vaglio di quattro referee esterni. Anche il Collegio dei Docenti è internazionale, ed include un rappresentante di tutte le Università

europee coinvolte, che sono nell'ordine, l'Università di Barcellona, l'Università di Aix-Marseille III, l'Università di Monaco(Garching) e l'Università di Postdam.

Come attività didattica istituzionale il Dottorato prevede un corso ad hoc in Nanostrutture che viene tenuto annualmente nel secondo semestre del I e del II anno di dottorato: questo corso è aperto agli altri dottorati della Facoltà di Scienze.

Dall' AA 2003-2004 il Dottorato è consorziato con l'Università di Roma Tor Vergata e prevede un collegamento con altri dottorati europei nell'ambito di una Convenzione con la European University Association. Dall' AA 2003-2004 è uno dei dottorati della Scuola di dottorato di ricerca della Facoltà di Scienze.

Il Coordinatore del corso di Dottorato è il Prof. Sergio Pizzini

DOTTORATO IN SCIENZE CHIMICHE

Il Dottorato in Scienze Chimiche, ha sede amministrativa presso il Dipartimento di Scienza dei Materiali ma il relativo collegio dei docenti si avvale della competenza di ricercatori che operano anche presso i Dipartimenti di Scienza dell'Ambiente e del Territorio e di Biotecnologie e Bioscienze. Questo si rispecchia nelle tesi di dottorato in svolgimento di ambito biotecnologico, ambientale, nel settore dei materiali organici e inorganici .

Il Coordinatore del corso di Dottorato è la Prof.ssa Franca Morazzoni.

PROGRAMMA SOCRATES

Il programma Socrates-Erasmus di scambi di studenti e docenti tra le Università dell'Unione Europea, ha offerto anche per quest'anno numerose opportunità di studio per studenti sia del corso di laurea in Scienza dei Materiali sia del Dottorati di Ricerca in Nanotecnologie e di Scienza dei Materiali. Sono state approvate le domande di cinque studenti del III anno nuovo ordinamento e del IV anno del vecchio ordinamento del corso di laurea, relative a soggiorni di studio presso varie Università come l'Ecole Normale Supérieure di Lione, Canterbury e Strasburgo per la durata di uno o due semestri. Gli studenti sostengono mediamente 3 esami per ogni semestre presso quelle Università (circa 18 crediti). Uno studente francese sta frequentando i corsi di Scienza dei Materiali presso la nostra Università per l'intero anno accademico.

Durante il corrente anno accademico 5 studenti del Corso di Laurea in Scienza dei Materiali hanno seguito corsi e sostenuto con successo esami presso altri Atenei Europei, trattenendosi in queste sedi per periodi semestrali.

ALTRE LAUREE

Al dipartimento afferiscono i docenti coinvolti nell'attività didattica della laurea in Fisica, curriculum di Struttura della materia - Stato solido, e della Laurea Specialistica in Fisica, curriculum di Fisica dello Stato Solido; il dipartimento ospita gli studenti di Fisica in tesi, in stage o frequentanti i laboratori didattici di indirizzo.

Parecchi docenti sono coinvolti anche nelle attività formative della Scuola Interuniversitaria Lombarda di Specializzazione per l'Insegnamento Secondario, SILSIS-MI, una compartecipazione di molte università milanesi, Milano-Bicocca compresa.

7 - ATTIVITÀ SEMINARIALE

Seminari del Dipartimento di Scienza dei Materiali

1. **B. Hellsing** – Goteborg University, Sweden
16/3/2004 *“Interface modeling group, solid state physics”*
2. **Marco Fanciulli** – Laboratorio Nazionale MDM –INFM, Agrate Brianza
12/11/2004 *“Solid-state physics and material science on and off the semiconductor road-map”*
3. **Emanuela Franchina**
8/1/2004 *“Optical properties of Silica-based nanostructured glassceramic composites with tin dioxide nanoclusters”*

Seminari Dottorato Europeo in Nanostrutture e Nanotecnologie

4. **Sergio Carrà** – Politecnico di Milano
23/1/2004 *“Multiscale approach to materials syntesis by gas phase deposition”*
5. **Juerg Hulliger** – Università di Berna
16/2/2004 *“Nanostructured Organic Materials: properties of functional molecules in nanochannels”*
6. **Sabina Spiga**
25/03/2004 *“Formazione di nanoaggregati in matrice dielettrica”*
7. **Giuseppe Queirolo**
1/04/2004 *“Delle energie e delle forme”*
8. **Paolo Milani** – Centro Interdisciplinare Materiali e Interfacce Nanostrutturati-Univ.Milano
23/4/2004 *“From nanoparticles to nanomaterials: towards an <<embriology>> of nanostructured systems”*
9. **Emiliano Bonera**
11/5/2004 *“Caratterizzazione ottica di Nanoaggregati”*
10. **Stefan K. Streicher** – Physics Department - Texas Tech University
7/6/2004 *“Vibrational properties of impurities in silicon”*
11. **Albert Romano-Rodríguez** – Departament d’Electronica, Universitat de Barcelona
12/11/2004 *“Focused ion beam (FIB): a tool for nanofabrication”*

Seminari del Corso di laurea in Ottica e Optometria

12. **Anto Rossetti**, docente IPSIA “Mattioni” Cividale del Friuli - **Franco Fanton**, Ottico-optometrista
16/2/2004 *“Acuità e sensibilità al contrasto: test e procedure”*
13. **Pietro D’Agati** - Ottico Optometrista
27/5/2004 *“Manutenzione e trattamento delle lenti a contatto rigide gas-permeabili (RGP)”*
14. **Renzo Colombo** - Ottico Optometrista
27/5/2004 *“Modificazioni corneali da lenti a contatto”*

15. **Pietro D'Agati** – Ottico Optometrista
15/12/2004 *"Materiali di nuova generazione per lenti a contatto morbide"*

Seminari Dottorato in Scienza dei Materiali

16. **Luigi Fabbrizzi** – Dipartimento di Chimica Generale dell'Università di Pavia
19/02/2004 *"Macchine molecolari basate su metalli di transizione"*
17. **Reinhard Scholz** – Institut für Physik, Technische Universität Chemnitz, Germany
27/2/2004 *"Self-trapped excitons in crystalline PTCDA"*
18. **Guido Fratesi** – Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati e INFM DEMOCRITOS National Simulation Center-Trieste
29/3/2004 *"Molecular self-assembly of trimesic acid on copper (110) surfaces"*
19. **Giuseppe Mallia** – Davy Faraday Laboratory of the Royal Institution of Great Britain
19/4/2004 *"Implementation of the high frequency dielectric constant for periodic systems in the CRYSTAL code"*
20. **Salvatore Iannotta** – Director of the Trento Division of the IFN-CNR, Trento
29/4/2004 *"Growth of organic semiconductors by supersonic beams (SuMBE): a kinetic approach to control thin film properties"*
21. **Paolo Giannozzi** – Scuola Normale Superiore, Pisa
5/5/2004 *"First-principle molecular dynamics with ultrasoft pseudopotentials: theory, parallel implementation, applications"*
22. **Martin Nikl** – Institute of Physics of the Academy of Sciences, Prague
17/5/2004 *"Scintillating materials: optical processes and applications"*
23. **Ayyappanpillai Ajayaghosh** – Photosciences and Photonic Division, regional Research Laboratory (CSIR), Trivandrum, India
20/5/2004 *"Squaraine dye based organic semiconductors"*
24. **Jerome Cornil** – Laboratory for Chemistry of novel materials, Center for Research in molecular electronics and Photonics, University of Mons, Belgium
27/5/2004 *"Properties of organic conjugated materials"*
25. **Vittorio Celli** – University of Virginia, Department of Physics, Charlottesville, VA, USA
3/6/2004 *"Optical reflectivity of growth processes"*
26. **Aldo Di Carlo** – INFM – Dip. di Ingegneria Elettronica, Università di Roma "Tor Vergata"
17/6/2004 *"Transport properties of molecular electronic devices: a self-consistent density-functional tight-binding approach"*
27. **Tsuguo Fukuda** – IMRAM Tohoku University – Fukuda Crystal Laboratory, Japan
28/6/2004 *"Growth of oxide and fluoride single crystals for scintillator application"*
28. **Nicola Manini** – Dipartimento di Fisica, Università di Milano
7/7/2004 *"Photoemission from fullerene-based materials: single-molecule experiment and interpretation"*
29. **Seth Marder** – School of Chemistry and Biochemistry, ...Atlanta GA
27/10/2004 *"Design and synthesis of electron and hole transport materials for organic electronic and opto-electronic applications"*

Seminari Dottorato in Scienze Chimiche

- 30. Paolo Fornasiero** – Dip.di Scienze Chimiche e Centro di Eccellenza per la preparazione-sviluppo e caratterizzazione di materiali e superfici nanostrutturate – Univ. di Trieste
24/2/2004 *“Catalisi e autoveicoli ad idrogeno”*
- 31. Adriano Zecchina** – Dipartimento di Chimica IFM, Centro di eccellenza NIS, Nanostructured interfaces and surfaces, Università di Torino
17/12/2004 *“Spettroscopia vibrazionale di H₂ nelle cavità di zeoliti e metal-organic-frameworks (MOF): una importante fonte di informazione sul ruolo delle forze elettrostatiche e chimiche nello storage di idrogeno”*

Seminari del Corso di laurea in Scienze e Tecnologie Orafe

- 32. Fulvio Cervini** – Sovrintendente ai Beni Artistici e Storici di Torino
27/04/2004 *“Tra arte e tecnologia: il candelabro Trivulzio nel Duomo di Milano”*
- 33.** 29/4/2004 **Alessandro Pavese, Università di Milano** *“La gemmologia tra tradizione e innovazione”*
David Ajo, ICIS-CNR, Padova *“Spettroscopia elettronica e gemmologia”*
Loredana Prosperi, Istituto Gemmologico Italiano *“I trattamenti delle gemme”*
Daniela Muzzioli, CISGEM, Camera di Commercio di Milano *“La certificazione al CISGEM”*
- 34.** 7/6/2004 **Monica Fabrizio**, IENI-CNR, Padova *“Le attività del CNR-IENI nel settore orafa”*
Jorg Fischer-Buhner, FEM, Schwabisch Gmund, G *“Hardening Mechanisms of Low-Alloyed Gold Alloys and Applications”*
- 35. Valerio Faccenda** – metallurgista e consulente dello World Gold Council e di varie aziende del settore
12/5/2004 *“Gli orafi raccontano. Il gioiello: che cosa è? Breve storia del gioiello”*

Seminari di fine anno di dottorato in Scienza dei Materiali

- 36.** 2/11/2004 **Berlanda Giuseppe** *“Modificazione e patterning di superfici su scala sub-micrometrica tramite microscopia a forza atomica”*
Butti Gabriele *“Il metodo dell’embedding applicato allo studio degli stati indotti dal potenziale immagine”*
Colombo Davide *“GaAs cresciuto su substrati virtuali: problemi e prospettive”*
Marchiori Chiara “
Marzegalli Anna *“Meccanismi di rilassamento plastico ed elastico in eterostrutture epitassiali di silicio e germanio”*
- 37.** 5/11/2004 **Montanari Cinzia** *“Studio di trasferimenti di carica reversibili in quarzo naturale mediante luminescenza otticamente stimolata”*
Laicini Marco *“Eccitoni di Frenkel nei cristalli molecolari: calcolo del tensore dielettrico in regime di accoppiamento vibronico.”*
Raimondo Luisa *“Eccitazione trasversale e longitudinale nei cristalli molecolari: studio sperimentale tramite riflessione totale attenuata (ATR) nell’UV/Visibile”*
Caravati Sebastiano *“Eccitazioni elettroniche da stati di core in sistemi adsorbiti”*

- 38.** 15/11/2004 **Valsesia Patrizia** *“Polimerizzazioni in sistemi mesoporosi a base di silice”*
Brovelli Sergio *“Studio delle transizioni ottiche in vetroceramici nanostrutturati drogati erbio”*
Fasoli Mauro *“Proprietà ottiche di silice preparata per via sol gel e drogata con attivatori”*
Macchi Giorgio *“Fotofisica di sistemi coniugati confinati in nanocanali”*
Nardi Marco *“Crescita di materiali organici per applicazioni optoelettroniche mediante epitassi da molecolari supersonici”*
- 39.** 13/12/2004 **Le Donne Alessia** *“Defects in silicon carbide: effect on electrical and optical properties”*
Miozzo Luciano *“Synthesis of fluorinated acridines as new fluorescent electron-poor system: fundamental properties and applications in material science”*
Virtuani Alessandro *“Optimisation of Cu(In, Ga)Se₂ solar cells and modules for low-irradiance conditions”*

Seminari di fine anno di dottorato europeo in nanostrutture e nanotecnologie

- 40.** 9/12/2004 **Campione Marcello** *“Growth processes of molecular organic thin films”*

8 - ORGANISMI DI RICERCA PRESENTI IN DIPARTIMENTO

ISTITUTO NAZIONALE PER LA FISICA DELLA MATERIA
Unità di Ricerca di Milano Bicocca

Presso il Dipartimento di Scienza dei Materiali ha sede l'Unità di Ricerca di Milano Bicocca dell'Istituto Nazionale per la Fisica della Materia (INFM). L'Unità è presente, oltre che nel Dipartimento di Scienza dei Materiali, anche nei Dipartimenti di Fisica G. Occhialini, di Biotecnologie e Bioscienze e di Scienza dell'Ambiente e del Territorio dell'Università degli Studi di Milano Bicocca. I rapporti tra INFM e Ateneo sono regolati da una apposita convenzione.

Afferiscono all'Unità di Ricerca INFM oltre venti docenti, ricercatori e tecnici universitari e oltre venti borsisti e dottorandi del Dipartimento; qui svolgono la propria attività anche tre ricercatori INFM. Inoltre, in uno dei locali del Dipartimento è ospitato il servizio di sportello per l'amministrazione e la segreteria dell'Unità di Ricerca.

Nel Dipartimento di Scienza dei Materiali INFM supporta attività di ricerca teoriche e sperimentali nelle aree della fisica dei semiconduttori e degli isolanti e della fisica delle superfici attraverso sia il contributo alla ricerca diffusa che il finanziamento di progetti mirati.

Nell'area della **fisica dei semiconduttori e isolanti** INFM sostiene attività di ricerca riguardanti:

- proprietà ottiche e dielettriche di ossidi e isolanti;
- spettroscopia ottica di semiconduttori;
- film sottili per fotonica e microelettronica;
- proprietà elettriche, ottiche e superficiali di silicio;
- crescita struttura e proprietà di materiali epitassiali per elettronica;
- datazione e caratterizzazione con tecniche ottiche di materiali nel campo dei beni culturali.

Nell'area della **fisica delle superfici** INFM sostiene attività di ricerca riguardanti:

- proprietà dinamiche, elettroniche e di trasporto di sistemi a bassa dimensionalità;
- interazione molecola – superficie metallica,
- funzionalizzazione superficiale del silicio;
- studio quantomeccanico con modelli a cluster di superfici e interfacce.

Nel corso dell'anno 2004 è stata messa a disposizione da INFM la cifra di 96.600 € per il finanziamento del progetto STREP dell'Unione Europea "Growth and Supra-Organization of Transition and Nobel Metal Nanostructures" (Prof. G. Pacchioni).

L'Unità INFM gestisce inoltre un Marie Curie Trainig Site che finanzia la permanenza in Italia di studenti di dottorato di paesi membri e associati dell'Unione Europea..

CONSORZIO INTERUNIVERSITARIO NAZIONALE PER LA SCIENZA E LA TECNOLOGIA DEI MATERIALI

L'Ateneo di Milano Bicocca è membro del Consorzio Interuniversitario per la Scienza e la Tecnologia dei Materiali (INSTM) e l'Unità di Ricerca del Consorzio ha sede presso il Dipartimento di Scienza dei Materiali. I rapporti tra INSTM e l'Ateneo di Milano Bicocca sono regolati dal relativo Statuto.

Nell'ambito del Consorzio sono attivi vari progetti di ricerca di base e applicata così come di formazione del personale da impiegare nella ricerca scientifica ed applicata sinora sviluppate. In particolare sono perseguite attività di ricerca e formazione nei settori di: materiali ceramici a funzionalità differente (semiconduttori, superconduttori), materiali polimerici e compositi a funzionalità meccanica differenziata, materiali micro e meso porosi a base organico-inorganica,

materiali organici per la fotonica e ottica non lineare, studio spettroscopico e modellistico delle superfici di materiali inorganici da impiegarsi nei dispositivi elettronici ed elettrochimici a stato solido, materiali per dispositivi per l'accumulo di energia. Nei settori pertinenti alle tematiche indicate sono state sviluppate collaborazioni con le industrie del territorio pervenendo alla stipulazione di contratti di collaborazione scientifica che hanno portato al Consorzio diversi finanziamenti.

CONSORZIO PER LA RICERCA SUI MATERIALI AVANZATI (CORIMAV)

Nella primavera 2001 è stato creato a seguito di un accordo tra l'Ateneo di Milano Bicocca e la Pirelli Spa un Consorzio per la Ricerca sui Materiali Avanzati. Sono stati individuati i temi della collaborazione:

a) Celle fotovoltaiche in silicio	Responsabile	Prof. S.Pizzini
b) Modellistica molecolare	“	Prof. M.Bernasconi
c) Celle a combustibile	“	Prof. C.M.Mari
d) Materiali ottici organici	“	Prof. G.Pagani
e) Materiali polimerici nanocompositi	“	Prof. P.Sozzani
f) Materiali superconduttori	“	Prof. M.Catti
g) Materiali fotosensibili	“	Prof. G.Spinolo

Per ciascuno di essi è stato individuato un responsabile, membro del Dipartimento, e una “interfaccia” Pirelli. Sono state bandite circa 15 borse di studio annuali sui veri temi su cui si basa la collaborazione.

CENTRO INTERUNIVERSITARIO PER LO STUDIO E L'APPLICAZIONE INDUSTRIALE DI NANOSTRUTTURE EPITASSIALI SU SILICIO E PER LA SPINTRONICA (L-NESS)

L-NESS nasce nel 2002 dalla collaborazione tra Polo Regionale di Como del Politecnico di Milano, Dipartimento di Scienza dei Materiali dell'Università di Milano Bicocca e Dipartimento di Fisica del Politecnico di Milano.

Nel 2003 l'attività scientifica del Centro si è articolata su otto Unità di Ricerca, distribuite sulle tre sedi, per le quali sono indicati anche i docenti responsabili:

1. Applicazioni fotovoltaiche (Prof. Sergio Pizzini)
2. Caratterizzazione fisica (Prof. Sandro De Silvestri)
3. Deposizione epitassiale di materiali per elettronica e optoelettronica (Prof. Hans von Kaenel)
4. Deposizione epitassiale di materiali per spintronica (Prof. Franco Ciccacci, Direttore di L-NESS)
5. Sensoristica e trattamenti superficiali (Prof. Dario Narducci)
6. Spettroscopia ottica (Prof. Mario Guzzi)
7. Spettroscopia positronica (Prof. Alfredo Dupasquier)
8. Teoria e simulazione di materiali (Prof. Leo Miglio, Vicedirettore di L-NESS)

L-NESS dispone di un ampio parco di strumentazione scientifica di alto livello, soggetta ad ulteriore crescita nei prossimi anni. Tra la strumentazione e le *facility* correntemente disponibili a Como vanno menzionate una *clean room* di classe 100/1000, un sistema per fotolitografia,

numerosa camere di deposizione per film sottili (MBE, Sputtering, LE-PECVD, Laser Ablation) e sistemi di analisi fisica e chimica di rilievo nella caratterizzazione di materiali. Sono stati inoltre acquisiti un SEM attrezzato con tecniche di litografia a scrittura diretta con fascio elettronico e un sistema di calibrazione per apparecchiature atte al monitoraggio di gas (sensori, gas-cromatografi, etc.)

Una delle sfide di L-NESS consiste nel riuscire ad armonizzare ed integrare ricerca scientifica di punta e supporto al tessuto produttivo locale. In questa direzione, L-NESS individua due canali privilegiati di interazione con il mondo della ricerca, con le PMI e con gli enti locali: i servizi attraverso la strumentazione disponibile e la consulenza di personale altamente qualificato.

Nel 2004 L-NESS ha ottenuto dalla Fondazione CARIPLO due progetti di ricerca pluriennale: il primo, proposto parallelamente sulle due sedi del Polo di Como e del Dipartimento di Scienza dei Materiali di Milano, dal titolo “Tecnologie Epitassiali per l’Elettronica e l’Optoelettronica” (TESEO), il secondo, dal titolo “Tecnologie Adattive di Rilevamento di Gas e di Emissioni Tossiche” (TARGET), proposto parallelamente sulle sedi del Polo di Varese del Politecnico e del Dipartimento di Scienza dei Materiali di Milano. Nel 2004 ha anche ottenuto dalla Fondazione Cariplo il finanziamento di un progetto per la Nanolitografia con fasci elettronici.

9 – PROGETTI INTERNAZIONALI

Il dipartimento di Scienze dei Materiali partecipa in qualità di coordinatore o partner in numerosi progetti di ricerca nel campo dei materiali funzionali.

In particolare partecipa ai seguenti Programmi nell'ambito del V e VI programma quadro dell'Unione Europea

NANOCHANNELS

Il progetto è indirizzato all'ottenimento di fili quantici con l'inserimento di cromofori organici nei nanocanali di guest inorganici (zeoliti, silice mesoporosa) e organici (PHTP, TPP)

Durata del progetto: 4anni (2002-2005)

Partners: Università di Milano-Bicocca-Dipartimento di Scienza dei Materiali (prof. Tubino), Univ. Tuebingen (Germania), Univ. Mons (Belgio), CNR (Italia), Univ. Cagliari (Italia), CNRS (Francia), Univ. Berna (Svizzera), Centro Ricerche Fiat (Italia)

NoE (Nework of Excellence Europeo) NANOFUN-POLY Nanofunctional Polymeric Materials

P. Sozzani, R. Simonutti

Nanostructured and Functional Polymer-Based Materials and Nanocomposites

EUROFET “Organic FET based on conjugated molecules”

Il progetto è centrato sulla fabbricazione e studio di transistor ad effetto di campo a base organica. Vengono studiati i fattori che influenzano la mobilità dei portatori di carica nei semiconduttori organici .

Durata del progetto: 4 anni (2002-2005)

Partners: Università di Milano-Bicocca-Dipartimento di Scienza dei Materiali (prof. Tubino), Potsdam University, CNRS Strasburg, , Bayreuth University, Sheffield University, Politecnico di Milano, Graz University, IBM Zurigo.

FAST-IQ “fast In line Characterisation Tools for Crystalline Silicon Material and Cell Process Quality Control in the PV-industry”

Questo progetto è dedicato alla messa a punto di un processo di produzione di celle fotovoltaiche in configurazione “Qualità totale” mediante l'uso di sistemi di controllo in linea dedicati all'analisi delle proprietà meccaniche, elettriche ed ottiche a partire dai materiali fino al prodotto finito.

Partners: Università di Costanza, Dipartimento di Fisica, Università di Milano-Bicocca-Dipartimento di Scienza dei Materiali (prof. Pizzini), Università di Bologna-Dipartimento di Fisica, ASSING (Roma), Joint research Centre, Ispra (Varese), IMEC (Louvain-Belgio), ECN (Petten, Olanda), Photowatt (Francia), ASE (Germania).

Durata del progetto: quattro anni 2000-2003.

DEDALES “Dislocation and extended defects as light emitters in silicon”nell'ambito del programma INTAS 2001.

Partners: Dipartimento di Scienza dei Materiali-Università di Milano-Bicocca (coordinamento, prof. Pizzini) , Università di Bologna-Dipartimento di Fisica, Università di Aix-Marseille-Facoltà di Scienze St. Jerome (Francia), Exeter University-Physics Department (UK), Joffe Institute (St. Petersburg, Russia), Russian Academy of Science, Chernogolowkat (Moscow District, Russia)

Questo progetto è dedicato allo studio delle potenzialità dei difetti estesi in silicio come centri emettitori di luce, in vista dello sviluppo di dispositivi emettitori di luce a base silicio.

Durata del progetto: tre anni (2002-2004).

NESSI “ N-type solar grade silicon for Efficient p+n Solar cells”

Partners: ECN-Petten (Nederland), Deutsche solar, University Konstanz, Isophoton (Spain), Dipartimento di Scienza dei Materiali-Università di Milano-Bicocca (prof. Pizzini)

Questo progetto è dedicato alla messa a punto di un processo per la purificazione e successiva utilizzazione di silicio di scarto di tipo n+ come substrato di celle solari ad alta efficienza

Durata del progetto: tre anni (2002-2004).

BIOCOMPAC "Bioprocessed wood fibres for composite and food packaging materials".

Contract no. G5RD-CT-2002-00751.

Obiettivo del progetto è quello di sviluppare tecnologie innovative e materiali compositi ad alto valore aggiunto per il "food packaging" da fibre di lignina modificate con metodi enzimatici e chemo-enzimatici e combinando le fibre modificate e biopolimeri. Partners: Technical Research Centre of Finland (VTT), Finland, University of Milano-Bicocca (UNIMIB), Italy (dr. Carnevali); Royal Institute of Technology (KTH), Sweden, SICOMP AB, Sweden;

Genencor Intl B.V., The Netherlands; Biomer, Germany; Tetra Pak Research & Development, Sweden; Ahlstrom Research and Competence Center, France; Stora Enso Oyj., Finland.

Progetto Europeo STREP GSOMEN “Growth and supra-organization of transition and noble metal nanoclusters” (Prof. G. Pacchioni)

In cooperazione con Università di Marisiglia, Ulm, Berlino, Graz, Parigi, Grenoble, Padova, Torino.

Durata: tre anni (2004-2006).

Progetto Europeo COST-D19 “Chemical reactivity of metal oxide nanostructures” nell’ambito dell’azione “Chemical functionality specific to the nanometer scale” (Prof. G. Pacchioni, rappresentante italiano nel Management Committee); in collaborazione con oltre 20 Università europee.

Durata del progetto: quattro anni (2002-2005)

Partecipazione del Gruppo del Prof. G.P. Brivio al NETWORK OF EXCELLENCE NANOQUANTA, Nanoscale Quantum Simulations for nanostructures and Advanced Materials nell’ambito del VI programma quadro dell’Unione Europea

Durata del progetto: 4 anni (2004-2007)

Il progetto ha lo scopo di sviluppare metodi di teoria a molti corpi per la descrizione realistica di materiali.

Partners: Univ. York (GB), Fritz Haber Institut e Freie Universitat, (Berlino-Germania), Univ. Jena (Germania), Univ. Louvain (Belgio), Univ. Lunds (Svezia), Laboratoire des Solids-CNRS (Meudon, Francia), Univ. Milano, Univ. Milano-Bicocca, INFN-Genova, Univ. Paesi Baschi (Leioa, Spagna).

Progetto Europeo INTAS Contract nr. 01-0194**Dislocations , extended defects and interfaces at nanoparticles as effective sources of room temperature photo- and -electroluminescence in silicon and silicon-germanium**

Il progetto ha lo scopo di dimostrare la fattibilità di dispositivi emettitori di luce basati sulle dislocazioni in silicio: Partecipano al progetto i seguenti 7 gruppi di ricerca

UniMiB- University of Milano-Bicocca, Department of Materials Science, Milano (Italy), UniExe- AIMPRO Group, School of Physics, University of Exeter (UK), IFTT- Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow distr., 142432 (Russia)

TECSEN – Laboratoire TECSEN, Case 151, Faculté des Sciences et Techniques, St Jerome 13397 Marseille cedex 20 (France), IMT- Institute of Microelectronics Technology and High Purity Materials, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Moscow distr. 142432 (Russia)

UniBo- University of Bologna, Department of Physics, Bologna (Italy), TIPTI – Ioffe Physico-Technical Institute, Russian Academy of Sciences, St. Petersburg (Russia)

Il Dipartimento partecipa inoltre a progetti di ricerca su base internazionale, promossi dalla NATO, dal MIUR o dal Ministero degli esteri di tipo bilaterale o multilaterale.

In particolare, partecipa alle seguenti azioni:

Azione integrata Italia-Spagna : “Simulazione quanto-meccanica di reazioni catalitiche su superfici di materiali metallici e ceramici “ (prof. Pacchioni)

in cooperazione con l’Università di Barcellona, Dipartimento di Chimica Fisica.

Durata del progetto: due anni (2002-2003).

Progetto di ricerca nell’ambito della Convenzione fra Italia e Repubblica Popolare cinese relativa alla cooperazione scientifica e tecnologica: Silicio EG per applicazioni in microelettronica

Partecipano al progetto il Dipartimento di Scienza dei materiali dell’Università di Milano-Bicocca in qualità di coordinatore (prof. Pizzini), l’Università di Bologna-Dipartimento di Fisica e l’Università di Zhejiang (Cina).

Il progetto è dedicato allo studio degli effetti dei difetti sulle proprietà elettroniche del silicio.

Durata del progetto: due anni (2003-2004).

Rete europea PHANTOMS Network of Excellence on Nanoelectronics (prof. Tubino)

A questa rete afferiscono già 217 gruppi europei di varie Università e l’adesione del Dipartimento potrebbe essere interessante nell’ambito dei costituenti Networks of Excellence del VI programma quadro dell’Unione Europea.

NATO Collaborative Linkage Grant "Electron-Phonon Interactions at Surfaces and Metallic Overlayers"

Project Coordinators: Prof. P. M. Echenique, Departamento de Física de Materiales, Universidad del País Vasco, San Sebastian (Spagna), Dr. G. Roussina, Institute of Strength Physics and Materials Science, Tomsk (Russia), Prof. G. Benedek, Dipartimento di scienza dei Materiali, Università di Milano-Bicocca.

In questo progetto sono studiati gli effetti dell’interazione elettrone fonone nel trasporto in film sottili e nanostrutture metalliche.

Durata del progetto: 2 anni (2003-2004)

MPI-SF Goettingen - Abteilung: "Molecular Interactions and Its Research"

Project Partners: Prof. Dr. J. P. Toennies, Max-Planck Institut fuer Stroemungsforschung, Goettingen (D); Prof. G. Benedek, Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università di Milano-Bicocca.

Questo progetto, iniziato nell’ambito del Max-Planck-Forschungpreis 1992, è stato rifinanziato più volte dalla MPG e dalla DFG tedesca fino al 2005. Sono stati effettuati studi sperimentali e teorici sui fasci supersonici di elio per la spettroscopia vibrazionale delle superfici, lo studio della dinamica rotonica dei cluster di elio e dei processi dinamici in elio solido.

Durata del progetto: 1992-2005.

Progetto di ricerca nell’ambito della Convenzione fra Italia e Repubblica Ceca relativa alla cooperazione scientifica e tecnologica: New scintillation materials. Role of defects in material performance.

Partecipano al progetto il Dipartimento di Scienza dei materiali dell’Università di Milano-Bicocca (responsabile: prof. M. Martini), e l’Accademia delle Scienze di Praga (responsabile Prof. M. Nikl)

Il progetto è dedicato allo studio dei difetti sulle proprietà fisiche di materiali scintillatori.

Durata del progetto: tre anni (2002-2004).

Progetto di ricerca nell'ambito della Convenzione fra Italia e Repubblica del Vietnam relativa alla cooperazione scientifica e tecnologica: Thermo luminescence dating of ceramic materials, baked clays and ancient buildings.

Partecipano al progetto il Dipartimento di Scienza dei materiali dell'Università di Milano-Bicocca (responsabile: prof. M. Martini), e l'Institute of Material Sciences, National Center for Natural Science and Technology (NCST) (responsabile Prof. Vu Xuan Quang)

Il progetto riguarda lo studio della luminescenza e la datazione di edifici e ceramiche. Verrà realizzato un Laboratorio a Hanoi.

Durata del progetto: tre anni (2003-2005).

Progetto di cooperazione scientifica Italia-Austria – Ministero degli Esteri (prof.ssa Sassella)

“GROWTH OF MOLECULAR THIN FILMS AND OPTICAL ACTIVE NANOSTRUCTURES DEPOSITED BY OMBD AND HWE: A COMPARATIVE STUDY” in collaborazione con l'Università Tecnica di Graz, Istituto di Fisica dello stato solido (prof. Resel).

Durata del progetto: due anni (2004-2005).

10 - LINEE DI RICERCA ATTIVE IN DIPARTIMENTO

L'attività di ricerca del Dipartimento è rivolta allo studio di materiali per diverse applicazioni. Le linee di ricerca che verranno nel seguito descritte sono riferibili a:

- Materiali nei Beni Culturali;
- Materiali Dielettrici;
- Materiali per Energetica. Elettrochimica, Sensoristica;
- Materiali Metallici e Leghe;
- Materiali Organici e Polimerici;
- Materiali Semiconduttori;
- Teoria, modelli e simulazione di proprietà dei materiali.

1. **Materials science and cultural heritage. Luminescence dating**
Marco Martini, Emanuela Sibilìa
2. **Oxide Nanostructures and Silica-based Materials for Optical Technology**
Alberto Paleari, Giorgio Spinolo, Anna Vedda
3. **Energy storage materials. Chemical synthesis, crystal structure, theoretical models**
Michele Catti, Angiolina Comotti
4. **Electrochemical activities**
Claudio Maria Mari
5. **Chemistry of inorganic and organometallic materials**
Franca Morazzoni, Roberto Scotti
6. **Surface chemical reactions: crystal growth and sorption processes**
Massimo Moret
7. **Physics and applications of lasers**
Marziale Milani
8. **Shape memory alloys**
Graziella Airoidi
9. **Organic materials for applications in photonics: from supramolecular synthesis to characterization**
Alessandro Abboto, Giorgio Pagani
10. **Organic molecular systems for II order non-linear materials and low energy emitters**
Antonio Papagni
11. **Nanostructured materials and magic angle spinning nuclear magnetic resonance**
Roberto Simonutti, Piero Sozzani
12. **Chemical physics of semiconductors: defects, impurities and surfaces**
Maurizio Acciarri, Simona Binetti, Dario Narducci, Sergio Pizzini

13. **Optical spectroscopy of semiconductors and semiconductor quantum structures**
Emanuele Grilli, Mario Guzzi, Stefano Sanguinetti
14. **Organic molecular semiconductors**
Alessandro Borghesi, Adele Sassella
15. **Photophysics of molecular semiconductors**
Francesco Meinardi, Riccardo Tubino
16. **Growth kinetics, morphology, and electronic properties of epitaxial Si-Ge nanostructures and films**
Leo Miglio, Francesco Montalenti
17. **Theoretical modeling and ab-initio simulation of material properties**
Giorgio Benedek, Marco Bernasconi
18. **Theory of surface science and of catalysis**
Gian Paolo Brivio, Mario Italo Trioni
19. **Theory of surfaces, interfaces and bulk inorganic materials**
Cristiana Di Valentin, Gianfranco Pacchioni

1. Materials Science and Cultural Heritage. Luminescence Dating

Marco Martini, Emanuela Sibilia

Since 1980 our activity has been devoted to Archaeological Dating by the use of the thermoluminescence (TL) of crystalline inclusions that are present in most ceramic materials. In principle, all the materials containing quartz or feldspars and submitted to heating to several hundreds of degrees centigrade can be dated by this way. Another important application of luminescence is the dating of geological and geoarchaeological sediments, for which the Optically Stimulated Luminescence (OSL) is used. In such case, the time of the deposition of the sediment can be obtained, in a range of time spanning from a few hundreds years from several thousands years before present.

The laboratory is member of the CUDaM (Centro Universitario Datazioni Università di Milano Bicocca), directed by Prof. M. Martini, which coordinates the activities in the field of dating by luminescence, dendrochronology and radiocarbon. (<http://cudam.mater.unimib.it>).

Luminescence dating

The main application of TL is to ceramics from archaeological excavations, but most accurate datings can be obtained with bricks from historical building. Beyond ceramics, good results can also be reached with hearths, kilns, flints and clay-cores of bronzes. An extended review of the results achieved by the Laboratory can be found at the web page <http://dating.mater.unimib.it>

The activity of the laboratory has been recently oriented to the study of non ceramic materials, in particular archaeological glasses, metallurgical slags, concrete and volcanic tufa.

The present main activities are:

- Fundamental study of the 210 °C TL peak in quartz, whose presence should be an indicator of the temperature reached by clay in kiln.
- Study of the optical properties of mosaic glasses as a function of the concentration of colouring ions.

- Study of charge transfer phenomena in quartz and feldspars OSL.
- TL dating of the Vietnamese archaeological site of MySon, belonging the che CHAM culture, that spanned from VI to XIV century AD.
- TL dating of the cotto ornamentations of the cloisters of Certosa di Pavia, in the frame of its restoration project...
- TL dating of the building phases of the S.Lorenzo church in Milano
- OSL dating of alpine geological sediments
- TL and OSL characterisation of volcanic tuff from Monti Cimini (Vt)

Thermoluminescence dosimetry

- Study and characterisation of natural and commercially available dosimetric materials, mainly SiO₂, CaF₂ and Al₂O₃
- Accident dosimetry: evaluation of the external radiation doses accrued as a consequence of the nuclear accident of Chernobyl using quartz and porcelains samples from sanitary fittings.

Experimental facilities:

Risoe automatic TL and OSL system.
 Home-made systems for conventional TL measurements, using photon counting technique;
 Home-made system for OSL measurements;
 High sensitivity home-made system for wavelength-resolved TL measurements;
 Total alpha counting systems with ZnS (Ag) scintillators;
 Th/U ratio measuring system based on pairs counting method;
 Direct beta dosimetry system with CaF₂ dosimeters
 Direct gamma dosimetry system for in situ evaluation with CaF₂ dosimeters;
 Irradiation facilities: 1400 MBq ⁹⁰Sr-⁹⁰Y beta source, 18.5 MBq ⁹⁰Sr-⁹⁰Y beta source, 37 MBq ²⁴¹Am alpha source, X-ray tube

Alberto Paleari, Giorgio Spinolo, Anna Vedda

Our research is focused on the physical properties of silica-based glass and glass-ceramics for applications in photonics and microelectronics. Bulk and film materials are synthesized and investigated looking at the particular optical properties one can obtain and control by doping with active ions and crystalline nano-phase with non-linear and photosensitive features. Doped silica glass and glass-ceramics are technologically interesting for their signal amplification properties in the telecom windows, nonlinear optical properties induced by crystalline nano-phases, and good optical transmission and compatibility with existent glassy-silica based devices. Fundamental aspects of the study regard the physics of point defects in the amorphous silica network, the spectroscopy of rare earth ions and the study of excitation confinement effects in wide-energy-gap nanostructured materials. However, synthesis techniques have to be optimised to obtain, in amorphous silica, good dispersion of active ions and homogeneous dispersion of crystalline nano-clusters with specific non-linear optical properties and narrow size-distribution. Therefore our activity also regards the design and optimization of synthesis processes based on sol-gel methods. Main investigated items are:

- i) optical properties of point defects in pure and doped silica, studying the role of the amorphous environment and of the doping on defect configurations;
- ii) optical properties of rare earth ions such as Ce, Gd, Tb in silica, studying the interaction with the host matrix, to obtain materials suitable to be used as scintillators in the detection of low-energy ionizing radiations for industrial and medical applications. Crystalline scintillators, such as tungstates and complex fluorides are also investigated.
- iii) optical properties of rare earth ions such as Er, Pr and Tm in silica-based glassceramics with crystalline nano-phases (SnO_2 or other matrices with low phonon energy), analyzing the interactions of active ions with the glass

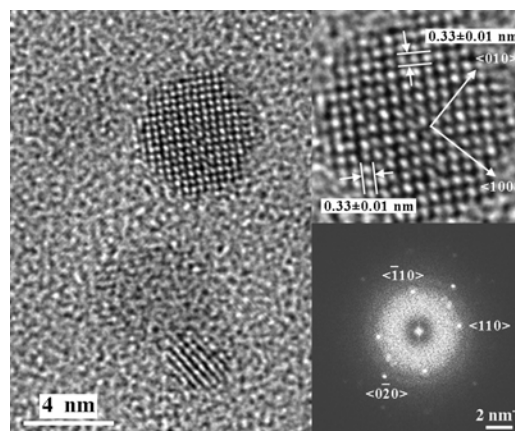
matrix and the nanocrystalline phase, looking at the optical properties useful in photonics;

- iv) linear and non-linear optical properties of nanosized crystalline dispersions of SnO_2 in silica, analyzing the possible applicability as photosensitive and cubic non-linear material.
- v) defect-related properties of thin SiO_2 films for microelectronics, whose performances are severely limited by the presence of defects acting as charge traps.

The available experimental facilities devoted to this activity are the following:

Synthesis laboratory: inorganic chemistry laboratory for sol-gel preparations in controlled conditions, comprising hoods and dry-boxes for the synthesis of bulk samples and films. Film deposition by spin-coating. Samples from aerogel can also be obtained by hypercritical drying process. Furnaces for densification processes in controlled temperature and atmosphere, as well as instrumentation for optical finishing.

Physical characterization laboratory: optical absorption, photo- thermo- and radio-luminescence spectroscopy, micro-Raman scattering, refractive index and film thickness measurements, thermostimulated currents and complex impedance spectroscopy. Excimer and Nd-YAG lasers with second and fourth harmonic generation are also available to study photo-induced effects and nonlinearity.



TEM image and diffraction pattern of SnO_2 nanoclusters in nanostructured silica glassceramics

3. Energy storage materials. Chemical synthesis, crystal structure, theoretical models

Michele Catti, Angiolina Comotti

This research activity deals with oxide materials of interest for energy storage, ionic conduction, and superconductivity. The main concern is investigating the relationships between structural properties, ionic mobility and intercalation processes, both by experimental and computational methods. A close collaboration with Prof. C.M. Mari makes results of electrical conductivity and e.m.f. behaviour available.

• EXPERIMENTAL

The experimental methods used are, first, the chemical synthesis by conventional, sol-gel and solid-state reactions, with subsequent high-temperature treatments in controlled atmosphere. A thorough structural characterization is then carried out by X-ray powder diffractometry, using also a high-temperature attachment (with vacuum and gas flux facilities) to monitor "in situ" phase and structure changes, parallelly to DTA measurements. Neutron diffraction data are often collected in several european centres (e.g., the ISIS facility at the neutron spallation source of the Rutherford Appleton Laboratory, U.K.). Results are related to measurements of electrical (complex impedance spectroscopy) and electrochemical properties carried out in the laboratory of Prof. C.M. Mari.

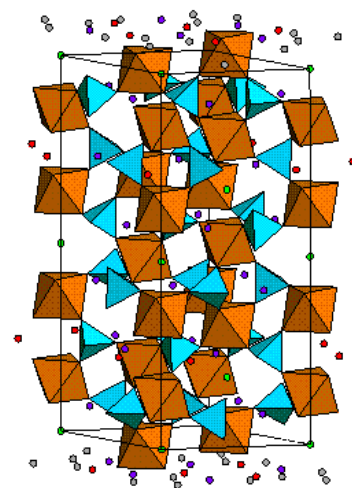
• COMPUTATIONAL

The theoretical investigations are based on both quantum-chemical (Hartree-Fock and DFT) and semiclassical (quasi-harmonic) periodic-type methods, with the aim of modelling chemical bonding, electronic properties, thermodynamic stability and ionic transport of crystalline phases. In particular, maps of potential energy of lithium in the host structure are computed by ab initio methods.

• RESULTS

Recently studied materials are the Mn-analogues of BSCCO high- T_c superconductors, and the HTaWO₆ proton conductors with pyrochlore, perovskite and

trirutile structures. Electric conductivity measurements have also been performed (C.M. Mari), and the results have been related to phase relations determined by diffractometry and thermal analysis. Researches of this kind are under way on proton conductors of the ZrH(PO₄)₃ series with Nasicon structure (cf. figure), for which neutron diffraction measurements at the Rutherford Laboratory (Chilton, U.K.) have been carried out. Other Nasicon-type materials of interest for electrodes of reversible lithium batteries are being presently investigated. Also theoretical and computer simulation studies are under way on Li-intercalated electrode materials. Periodic Hartree-Fock and DFT calculations are being applied to simulate mobility paths and activation energies of Li⁺ ions in the structure of LiCoO₂. Further, such computations are used to study magnetic, electronic and stability properties of MeMe'O₃ transition metal oxides with corundum and ilmenite



structures.

. Crystal structure of Nasicon-type ionic conductors, emphasizing the disordered sites of mobile alkali ions.

4. Electrochemical activities

Claudio Maria Mari

Since more than 20 years researches in the field of solid state electrochemistry are in progress. Electrode and electrolytic materials have been investigated; devices (gas sensors and fuel cells) have been assembled and tested.

• ELECTROLYTES

Crystalline and polymeric materials have been electrically characterised, in particular oxygen ions (stabilised zirconia and its composites with alumina) and proton conductors (Nafion and $\text{HTaWO}_6 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ with different structures). The behaviour of the conductivity as a function of temperature, humidity and equilibrium gas phase composition has been investigated. The important role that water molecules play in the proton conductors has been evidenced. Some models to outline the proton conduction in solids have been proposed.

• ELECTRODE MATERIALS

Particular attention has been devoted to the reduction of gaseous molecules, at the solid electrolyte (YSZ)/ electrode interface. Different cathodic materials (metals, non-stoichiometric and mixed oxides as well as cermets) have been tested.

In the case of water vapour, it was observed that all materials present a good performance at high density currents, where the reduction process takes place with a mechanism which apparently occurs without any overvoltage. This behaviour was explained with the formation of large amount of defects, at the surface of the solid electrolyte, acting as exchange sites for the water reduction.

A parameter for defining the energetic efficiency of the cathodic process at high temperature and high current density for electrolysis of steam was designated.

• DEVICES

Gas sensors either potentiometric or amperometric have been investigated and realised.

Using Ytria Stabilised Zirconia as electrolyte, nernstian and non-nernstian devices have been studied: the former for determining O_2 , CO/CO_2 and $\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}$, the latter for CO in air.

Non-stoichiometric oxides were demonstrated to operate as oxygen reversible electrode materials. Potentiometric sensors were also developed to measure Cl_2 in nitrogen or air, using AgCl, SrCl_2 doped BaCl_2 and Ag -alumina as electrolytes.

The determination of SO_3 in air was studied by a sensor having a two-phase sulphate electrolyte: $(\text{Ag}_2\text{SO}_4)_{25} - (\text{Li}_2\text{SO}_4)_{75}$.

Voltammetric sensors, with ZrO_2 -based electrolyte, have been investigated for determining O_2 or CO_2 in nitrogen and H_2O in air.

Prototypes of SOFC (Solid Oxide Fuel Cell) and PEMFC (Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cell) have been assembled and tested.

The activities are and were supported by National and European Communities grants and sponsored by National and International Private Companies.

5. Chemistry of inorganic and organometallic materials

Franca Morazzoni, Roberto Scotti

Since about 10 years the research activity concerns both the synthesis of new solid organometallic compounds and of metal oxide based inorganic materials, both the spectromagnetic characterization of them in relation to their functionality. Research lines active at the present time are:

Sol-gel chemistry of non transition/transition metal oxides for semiconductor sensor devices

Pure semiconductor metal oxides (ZnO , SnO_2 , WO_3), solid solutions of the same with transition metals are prepared by sol-gel technique, with hydrolysis and condensation of alcoxide metal precursors. Suitable strategies are performed to control the kinetic of gelation and the concentration of doped metals. Materials display semiconductor properties varying with the surrounding atmosphere and are used as base materials for gas (CO , NO_x , NH_3) sensor devices. All spectroscopic and magnetic techniques are used to recognise centres and defects responsible for the material functionality and to suggest new ways for improving the efficiency. Thin films of the same materials, prepared by spin and dip coating are investigated.

ESR application for characterization of alteration in ligninocellulosic matrix structure

The study of radicals present in ligninocellulosic materials allows to propose suitable chemical procedures for obtaining fine chemicals from the waste lignin; nowadays it seems also important to undergo residual from wood treatment to adhesion procedures, aimed at producing wood fibers from amorphous materials. Ligninocellulosic materials were catalytically oxidized, in order to enhance the adhesion properties, and the

mechanism was optimised by means of ESR results.

Sol-gel chemistry of non transition/transition metal oxides for optical and electronic devices.

Sol-gel synthesis of Sn-doped, Ge-doped SiO_2 and of ternary metal oxides was performed to obtain glasses suitable for optical fibers. By the same procedure borophosphosilicate glasses to be used as insulating film in step coverage and gap filling of electronic devices were obtained. High purity samples with a number of optically active defects and tunable optical and electrical properties were studied. Densification of gels was monitored by EPR, UV and Raman spectroscopies, allowing a more accurate investigation of defects in silica as it was in the literature. The large number of samples easily obtained at specific doping contents and in moderate thermal stress conditions, was very helpful to propose definitive structural models of the defects and of their role in determining photorefractive or dielectric behaviour.

Equipments

Conventional chemistry laboratories, equipped for synthesis of the precursor compounds, thermal treatments under controlled atmosphere, preparation of samples for spectroscopic measurements, high pressure treatments and reactions. Sophisticated spectroscopic laboratories containing: electron spin resonance (EPR) spectrometer Bruker EMX, equipped with a 4 -500 K temperature control, magnetic susceptibility measurement system (Faraday method) equipped with a 4 -500 K temperature control, conventional electronic, vibrational (IR, Raman micro-Raman) absorption equipment.

6. Surface chemical reactions: crystal growth and sorption processes

Massimo Moret

The study of surface chemical reactivity is mandatory to understand crystal growth and the interaction of crystals with natural and artificial chemical environments; its characterisation with high temporal and spatial resolution is the key to correctly investigate these processes.

The research activity is devoted to the application of state-of-the-art surface characterization techniques to investigate in situ the kinetics of chemical reactions on crystal surfaces. Two major areas of study have been selected: (1) crystal growth from solution and (2) sorption processes at the solid/solution interface. The first subject involves the synthesis of microporous crystalline materials, i.e. zeolites and polymeric coordination compounds with zeolite-like frameworks (Fig. 1). The second topic, which is intimately related to (1), is of particular relevance to phenomena occurring in natural environments and in laboratory or industrial processes.

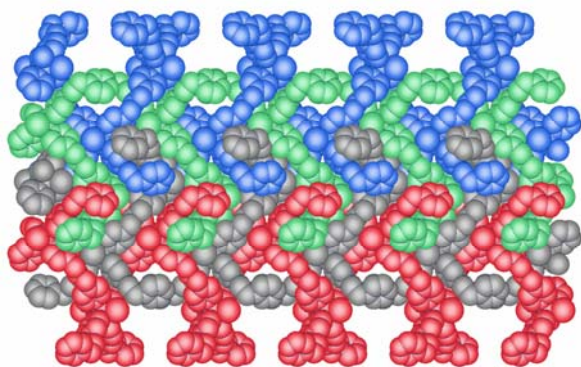


Fig. 1

The activity develops according to the following steps: a) recognition of significant natural and synthetic systems to be studied; b) synthesis and characterization of the selected crystalline materials; c) selection of interesting ionic or molecular species involved in sorption processes. The crystallochemical properties are subsequently studied in situ by means of advanced diffraction, spectroscopic and microscopic techniques (Grazing Incidence Small (or Wide) Angle Diffraction; Surface Enhanced X-ray Absorption Fine Structure; Time Resolved Synchrotron Radiation

Diffraction; Time Resolved X-ray Absorption Spectroscopy; Hot Stage Optical Microscopy). In situ characterisation of the “reacting” crystal surfaces includes imaging with scanning probe microscopy (SPM). By using a dedicated fluid cell, SPM makes it possible to image crystal surfaces under controlled environments (temperature, atmosphere, chemistry) down to the molecular level. The study of the crystal/solution interface with in situ SPM allows extraction of dynamic topographic data, comprising measurement of reaction rates and evolution of surface microtopography with time (Fig. 2). Comparison of in situ SPM data with complementary diffraction and spectroscopic data allows a detailed crystallochemical characterisation of our systems and to study the host-guest interactions occurring during crystal growth.

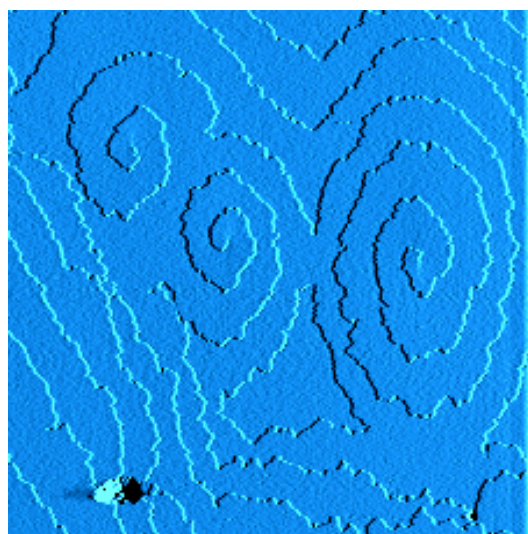


Fig. 2

In collaboration with: F. Abbona, D. Aquilano, L. Pastero, M. Rubbo (University of Torino), G. Artioli, G. Ciani, S. Rizzato (University of Milano); P. Scardi (University of Trento); G. Sgualdino (University of Ferrara); J. M. Garcia-Ruiz (University of Granada).

7. Physics and applications of lasers

Marziale Milani

The research activity covers the area of optical radiation interaction with matter and of synergetics. Major interest is devoted to cooperative effects arising in lasers and nonlinear dynamics of semiconductor lasers, both from a theoretical and an experimental point of view. Since one essential property of a laser is, of course, its coherence, investigation of coherent processes, their appearance and their requirements is a major research line.

THEORETICAL INVESTIGATIONS

- Semiconductor laser nonlinear dynamics and spatio-temporal processes. Symmetry breakdown induced by mirrors with different reflectivities can seriously affect the coherence properties of devices, thus resulting in critical bias for operating devices.
- The role of optical feedback in controlling the typical output parameters of semiconductor devices and in complex systems with more optical elements.
- The microscopic description of VCSELs and the possible cooperative (polarization sustained) effects in arrays of vertical cavity lasers.
- A bottom-up analysis of laser performances and characteristics in the framework of parallel computations by the development of a cellular automata approach for collective behaviour in optoelectronic devices with attention to degradation and reliability.
- A radiation-matter integrated description of third order nonlinear processes: self-focusing and ponderomotive forces in nonlinear media (semiconductor and molecule solutions) to provide an insight into the field of optoelectronics by organic materials.
- Modelling of a high-power Nitrogen laser to select the optimal parameters to achieve four-wave-mixing, efficient dye laser pumping and to provide a description of intracavity gain and loss

performances. Moreover attention is paid to non conventional pumping techniques pointing to the use of concentrated solar radiation.

EXPERIMENTAL INVESTIGATIONS

- Feedback effects and cross-talk in semiconductor laser arrays.
- Optical characterization of materials of interest for doped glass lasers and amplifiers and for semiconductor lasers microlithography.
- Soft X ray generation by laser-plasma interaction and application to material analysis and microlithography.
- Nitrogen and dye laser build up and applications to optical diagnostics of nonlinear materials.

APPLIED RESEARCH

- Sensitivity enhancement of NMR techniques by laser irradiation (hyperpolarization of Xe spin for medical imaging and material analysis).
- Low cost, general purpose broad band sensitive radiation detector based on thermoelectric devices.

BIOOPTOELECTRONICS

Order and nonlinearities are essential features of biological systems. Interaction of weak electromagnetic radiation (mm band, visible, UV-A and soft-X-ray) with biological matter, at the cellular level, is of interest for very small, high densely packed electronic systems where optical radiation interaction can exploit features otherwise out of reach in current laboratories. The aim of the research is to unveil some of the peculiar control functions active at the cell level, metabolism and recognition processes

- physical probes for cell suspensions dynamics
- soft X-ray controlled dose deposition in yeast cells: techniques, model and biological assessment
- visible and UV-A radiation control of cell metabolism, citotoxic effects and apoptosis induction.

Research on Shape Memory Alloys (SMA) is nowadays directed to investigate:

1. new ferromagnetic alloy systems derived from Ni_2MnGa
2. 18 carat gold martensitic alloys $\text{Au}_7\text{Cu}_5\text{Al}_4$

1. The interest in Ni_2MnGa ferromagnetic SMA is related to the magneto-elastic effect : high deformation, up to 10%, can be obtained consequent to an applied magnetic field. This feature can profitably be exploited in applications if the transformation temperatures lead to a concomitant ferromagnetic and martensitic state at room temperature.

With the aim to find out new alloy compositions with the above cited properties, $\text{Ni}_{52}\text{Mn}_{24-x}\text{Fe}_x\text{Ga}_{24}$ and $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{30-y}\text{Fe}_y\text{Ga}_{20}$ were examined to investigate the effect of the substitution of Mn with a 3d element, Fe, on the transformation temperatures, either structural or ferromagnetic.

Investigations performed through Differential Scanning Calorimetry (DSC) and a Stereo Optical Microscope(OM) have put into evidence:

- a. in $\text{Ni}_{52}\text{Mn}_{24-x}\text{Fe}_x\text{Ga}_{24}$ the martensitic transformation is always lower than room temperature and Curie temperatures smoothly increase with increasing Fe content
- b. $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{30-y}\text{Fe}_y\text{Ga}_{20}$ with $y = 5$ or 10 comply with a martensitic and ferromagnetic state at room temperature.

2. In recent years attention has been given to the Al–Au–Cu system and specifically to the shape memory $\text{Au}_7\text{Cu}_5\text{Al}_4$ alloy (Spangold) for its attractive glittering surface in martensite.

$\text{Au}_7\text{Cu}_5\text{Al}_4$ undergoes a martensitic transformation on cooling from a predominantly B2 parent phase (P) to a nominally body-centred tetragonal martensite with $c/a < 1$.

Martensite ageing effects have been found in several shape memory alloys, AuCd , CuAlZn , NiTiHf [1], undergoing a displacive transformation into either an ordered state or

disordered state , effects currently indicated as martensite stabilization since the martensite phase becomes more stable with ageing. Recently it has been proposed [2] that martensite ageing effects can be explained by a “Symmetry-Conforming Short Range Order” (SCSRO) principle. According to this view, fresh martensite inherits the stable SRO configuration from the parent during martensite transformation: atomic rearrangement occurs during ageing in martensite, by way of diffusion of point defects, and conforms to the martensite symmetry. A parameter that critically dominates the possibility of diffusion in martensite is the M_s/T_m ratio, where M_s is the martensite starting temperature and T_m is the melting temperature: the higher this reduced temperature is, the faster the diffusion proceeds in martensite. In contrast, if the ratio is too low, ageing phenomena can be hindered by the overly long time range required for detection. The effects of ageing in the parent phase on the thermoelastic martensitic transformation and their relevance to the effect of martensite stabilization in $\text{Au}_7\text{Cu}_5\text{Al}_4$ were investigated.

The results here obtained [3] appear understandable within the framework of a diffusion process such as that involved in the “Symmetry-Conforming Short Range Order” (SC-SRO) scheme. Indeed, the small shift of the reverse-transformation temperature consequent to martensite stabilization complies with a safe practical use of the alloy.

Attention is now devoted to investigate Spangold alloys doped with Co or Ir with the aim to overcome the drawbacks of their brittleness.

[1] Manca A, Shelyakov AV, Airoidi G.
Mater Trans 44 (2003) 1219-1224

[2] Ren X, Otsuka K.
Nature 389 (1997) 579 - 582

[3] S. Urbano, .., S. Besseghini, G. Airoidi
Scripta Materialia 52 (2005) 317–321

9. Organic materials for applications in photonics: from supramolecular synthesis to characterization

Alessandro Abbotto, Giorgio Pagani

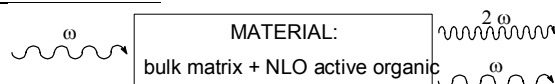
SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY

We actively carry on three research lines in functional organic materials. The first two involve the design and synthesis of heterocycle-based polyconjugated systems that are useful for the preparation both of non-linear optical and electronically conductive materials. The third line covers the design and synthesis of luminescent materials. The activity is planned in the subsequent steps:

1. Computational modeling of the molecule(s) endowed with the special function.
2. Synthesis and characterization of molecular systems.
3. Supramolecular synthesis of the most promising systems.

Preparation of the device, often in collaboration with groups of known expertise.

Organic Non-Linear Optical Materials

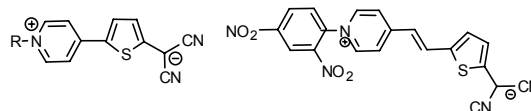


At present we are focussing our interests along two lines:

a) optimization of NLO properties at molecular level through molecular design: we are working at the moment on several classes of chromophores, with main focus on enhancement of first and second hyperpolarizability, stability and investigation of property/structure relationships.

We have synthesized conjugated zwitterionic molecules that are endowed with extremely powerful non-linear optical activity ($\beta\mu > 26.000 \times 10^{-48}$ esu), higher than the best values so far reported in the literature, (see below) and high two-photon absorption activity, for advanced laser applications (solid-state Vis lasers).

b) optimization of materials based on the best performing chromophores, with focus on enhancement of stability and solubility.

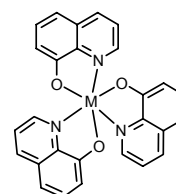


We are engaged in functionalizing sol-gel and polymeric matrices, and various surfaces with these NLO-fores. Functionalized polymers and sol-gels need to be simultaneously or subsequently poled in order to obtain the NLO-active material. Functionalised surfaces are obtained either by the Langmuir-Blodgett technique or by the steady construction of chemically bonded layers with a predetermined orientation of the molecule dipole.

Related research lines include investigation of new organic materials with improved *photorefractive and emitting properties*.

LANTHANIDE CHELATES

We are investigating synthesis and properties of heterocycle-based ligands able to bind rare earth elements (M) to obtain luminescent materials.



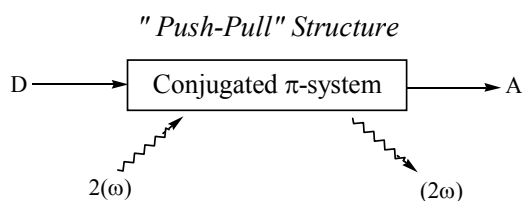
CONDUCTING POLYMERS

We are involved in low-bandgap conducting polymers for electroactive applications in collaboration with Dr. A. Berlin, CNR Milano and Dr. G. Zotti, CNR, Padova).

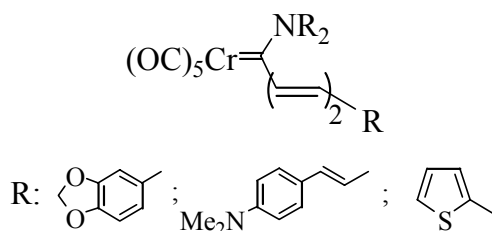
10. Organic molecular systems for II order non-linear materials and low energy emitters

Antonio Papagni

The current research interests are essentially focused on two lines in the field of functional organic materials and energy transfer organic systems. The first line involves the planning and synthesis of new molecular systems with potential applications in developing of II order non-linear organic materials. At present, experimental work is addressed to the synthesis of "Push-Pull" structures, i.e. conjugated π -systems terminated by electron accepting (A) and donating (D) groups. These systems are able to combine two photons of ω energy (supplied by a laser beam) emitting one of 2ω energy.

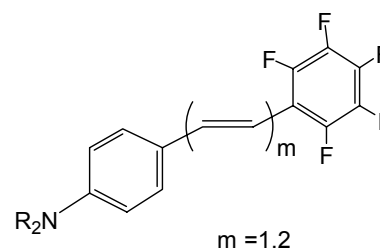


Good second order non-linear responses (β values up to 540×10^{-30} esu) have been observed in a series of organometallic "Push-Pull" bearing Fischer-Type carbene complex acceptors and electron rich aromatic or heteroaromatic donors.

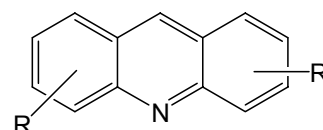


Fluorinated acceptors have been, more recently, utilised in the synthesis of a new series of "Push-Pull" structures. These molecules show a good trade-off between non-linear responses ($\mu\beta$ values up to

200×10^{-48} esu at 1907nm) and transparency ($\lambda_{\text{cut-off}} > 420\text{nm}$). In some molecules, excellent thermal stability (no decomposition up to 300 °C) are observed.



The second line, in collaboration with Borghesi, Tubino, Sassella and Meinardi research group, involves the synthesis and spectroscopic characterisation of molecular organic systems that can be used in energy conversion realised through optical absorption by a molecular system (donor), excitation transfer to another system (acceptor) and light emission from this latter. Acridine-based structures have already been individuated as suitable candidates for this aim.



Acting on the electronic properties of the R and R' groups it is possible to tune the absorption and emission energy of the molecule realising a good match between donor emission and acceptor absorption. Recent interest has been also focused on the synthesis, purification, thin film grown and optical characterisation of oligothiophene-based organic semiconductors.

11. Nanostructured materials and magic angle spinning nuclear magnetic resonance

Roberto Simonutti, Piero Sozzani

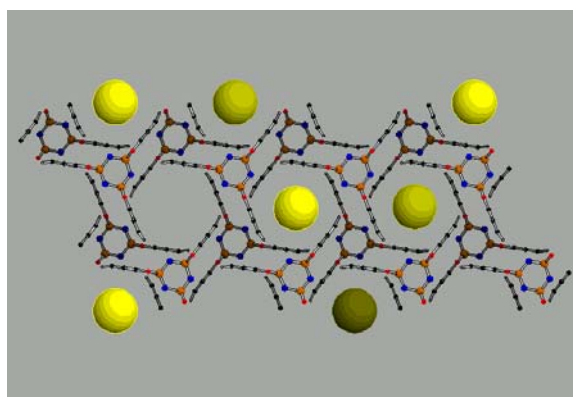
The preparation and characterization of novel composite and nanocomposite materials is the target of our research group. Reinforcing agents for polymers and polymers as binders for reactive inorganic materials are mainly addressed.

The effort for optimizing the interfaces lead to the preparation of highly porous and shape controlled silica-based materials and nanostructures which confine a second component. In the latter case the *nanocomposites* show unusual mechanical and optical properties. Electrooptical properties can be also modulated in the composite and compared to the bulk. The link between structure and properties is provided by a detailed characterization by magic angle spinning nuclear magnetic resonance (MAS NMR), wide-line NMR and by other solid-state techniques (atomic force microscopy, DSC and dynamic-mechanical analyzer). An NMR laboratory dedicated to solids is available.

Current research projects are the following:

- Composite materials based on ceramics and polymers and characterization of heterogeneous interfaces (elastomeric materials reinforced with silica, MDF cements, in-situ formation of silica by gelification in polymer matrices).
- Confinement of molecules and macromolecules to cylindrical nano- and mesotubes (cross section of 0.5, 1 and over 30 nm). Some matrices, showing extended interactive areas ($>1300 \text{ m}^2/\text{g}$), form supramolecular adducts endowed with unusual properties (liquid-crystalline behavior, anomalous glass-transition, conformational solitons propagating along the chains even at very low temperature). The study of reactivity and interactions among included species in *molecular vessels* is also addressed (γ ray initiated polymerization).

- Preparation of end-functionalized polymers to be reactive onto heterogeneous materials.
- Crystal morphology, defects and mesomorphysm of polymeric materials (polyphosphazenes, ethylene-propylene copolymers).
- Diffusion processes of gases into materials and exploitation of spin-active gases (^{129}Xe) diffusing into solids, for microphases determination.



Diffusion of gas atoms into a new zeolite-like material synthesized by us.

EQUIPMENTS AND INSTRUMENTATION

- NMR Bruker MSL with wide bore 7.05 Tesla superconduction magnet, fully equipped for high power output. 7kHz magic angle spinning probe and several heads for wide-line spectroscopy, including deuterium.
- High vacuum (10^{-9} torr) pump and equipment for hyperpolarized Xenon spectroscopy (laser excited NMR).
- Dynamic Mechanical Analyzer, Differential Scanning Calorimetry and access to Atom Force Microscopy.

12. Chemical physics of semiconductors: defects, impurities and surfaces

Maurizio Acciarri, Simona Binetti, Dario Narducci, Sergio Pizzini

SILICON AND SILICON CARBIDE research focuses on the characterization of defect centers in silicon and SiC through the study of radiative and non-radiative recombination of carriers at impurity centers and at extended defects. This task brought to the development of non-destructive techniques for the analysis of defects and impurities at silicon surfaces, including LBIC and EBIC methods, as well as the implementation of photoluminescence spectroscopy. Over the years this research line has aimed at the study of a large number of chemical impurities of major technological interest, including carbon, oxygen, nitrogen, transition metals and rare earth luminescence centres. More recently, a study on the luminescence of dislocations and oxide precipitates has been commenced for optoelectronic applications, aimed at a better understanding of the nature of parasitic processes which limit the quantum yield of light emission. Fabrication of efficient all silicon-based optoelectronic devices is the ultimate technological aim of this research.

In parallel to these investigations, a study on the electrical and optical properties of extended defects in SiC and on the optical properties of thin film of nanocrystalline Si has been started. The research concerning nanocrystalline silicon is carried out in collaboration with the Interuniversity L-Ness Laboratory at the Politecnico di Milano-Polo di Como.

- **SILICON SURFACE MODIFICATION AND GAS SENSING.** Extended use of silicon in frameworks where its properties are insufficient or unsuitable is of obvious relevance, due to the role this material plays and will play in microelectronics and micromechanics. This research group has developed over the years techniques capable of modifying silicon surface properties by grafting organic moieties. The methods developed make use of solution chemistry reactions to bind organic fragments through the formation of direct Si—C bonds. Such surfaces have been therefore engineered, leading to the development of gas sensors that can be used as sensing elements in gas sensor arrays. This class of devices has proven advantages over traditional, oxide-based gas sensors as they can be immediately integrated into standard microelectronic boards, show enhanced stability

and their selectivity can be controlled and improved by an appropriate design of the organic moiety, which acts as gas receptor. Applications of this technology range from environmental control to security, from food analysis to anti-fraud. Furthermore, from a fundamental point of view it opens pathways to the analysis of supramolecular interactions and offers a convenient laboratory for the simulation of the mechanisms of olfaction.

FACILITIES. A number of facilities for the preparation and the characterization of semiconductors are currently available in this laboratory, including:

- an improved μ -luminescence+LBIC apparatus for the determination of both the minority carrier recombination rate and radiative recombination at defects in Si
- an improved SPV system
- a specialized ATR-FTIR setup
- a fully automated Hall effect system operating down to 12 K
- a fully automated setup for current-voltage characteristics measurement of gas sensors under controlled atmosphere
- a system for resistance measurements operating from 300 K to 20 K
- a Scanning Electron Microscope
- Two photoluminescence systems, one for the IR and the other one for the Vis-UV
- furnaces operating up to 2,000 K
- an Aerosol-Assisted CVD system
- two Plasma-RF system for surface conditioning and cleaning
- a direct-write, laser-assisted photolithography apparatus

FRAMES of R&D Development

- Two R&D Projects granted by the European Communities in the frame of the 5th Framework Program
- One INTAS Project in cooperation with three Russian and two European Institutions
- Two PRIN Projects
- One privately-funded research project on gas sensing

13. Optical spectroscopy of semiconductors and

Emanuele Grilli, Mario Guzzi, Stefano Sanguinetti

Our research is mainly devoted to the study of optical properties of semiconductor materials and quantum structures of interest for micro- and opto-electronic applications. We are studying systems based on both group IV and III-V semiconductors.

- **QUANTUM STRUCTURES BASED ON III-V SEMICONDUCTORS**

The electronic properties of heterostructures of interest for opto-electronic devices, and in particular for laser sources, namely Quantum Wells (QW), Quantum Wires (QWr) and Quantum Dots (QD), are studied, from both fundamental and applicative point of views. In particular we address the problem of the understanding of the electronic structure, of the study of the carrier thermalization and relaxation processes and, finally, of the characterization of the non radiative recombination mechanisms.

Several topics related to the basic aspects of InGaAs/AlGaAs self-aggregated QD grown by MBE are currently under investigation. We have obtained interesting results on the carrier localization induced by disorder in stacked QD. Self aggregation process of QD grown on high index surfaces has been investigated, evidencing strong piezoelectric quantum Stark confinement effects. The optical properties and carrier dynamics of QD grown by Modified Droplet Epitaxy have been studied, as well. We demonstrated the multiexcitonic nature of the single QD emission and the relevance of internal Auger-like effects in the QD carrier relaxation.

- **OPTICAL PROPERTIES OF Si AND SiGe HETEROSTRUCTURES**

The optical properties of Si, SiGe and of structures based on these materials are studied. These systems are of relevant interest for applications in micro- and opto-electronics. We are currently working on:

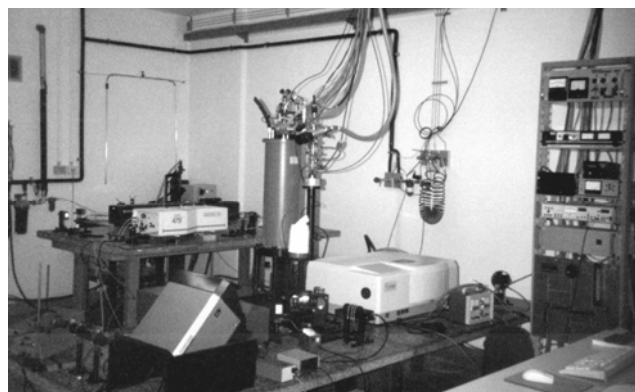
- SiGe epilayers and strained or relaxed SiGe structures grown on Si substrates in

order to study their electronic and vibrational properties;

- III-V epitaxial layers grown on Ge and SiGe substrates in view of their photovoltaic and opto-electronic applications.

- **EXPERIMENTAL FACILITIES**

Spectroscopic apparatuses based on dispersive and Fourier Transform spectrometers are used for photoluminescence and transmission measurements in the 0.4 - 4.0 eV spectral range and for photoluminescence excitation spectra in the 1.0 - 5.0 eV spectral range. Working temperatures: 2 K to 450 K. Exciting sources: He-Ne, Ar, Ti-Sapphire, DPSS and Diode lasers, incandescent and high pressure lamps. A low temperature (4 K - 300 K) micro-photoluminescence and micro-Raman apparatus working in the 0.75 - 2.5 eV spectral range has been recently mounted and tested. The system allows also to perform Light Beam Induced Current measurements with high spatial resolution in the same temperature range.



A low temperature photoluminescence apparatus

- RESEARCH SUBJECTS.

1. Thin films. Films of organic molecular semiconductors are grown by organic molecular beam deposition (OMBD) under different conditions, such as substrate type and temperature, absence or presence of a magnetic field, with different directions, for the study of the intrinsic properties of the molecular materials in the solid state and, in particular, in the form of thin layers, suitable for devices. Several molecules, such as oligothiophenes, oligocenes, acridines, and porphyrines are studied. The OMBD growth process can be monitored *in-situ* by reflectance anisotropy spectroscopy (RAS), which also gives insight on the evolution of the electronic properties of the films during growth. The morphology and structural properties of the samples, closely related to the growth mode, are then studied *ex-situ*. The structural, optical, and transport properties of the molecular films are studied, also in comparison with the single crystal properties and with the results of modelling (see 3. & 4.).

2. Nanostructures. Films of different molecules are grown on high quality single crystals of the same or similar molecular organic compounds (see 3.), so as to reach the strict condition of epitaxy, therefore preparing artificial structures with high quality interfaces and controlled properties. Thin films are also stacked in multilayers on different inorganic and organic substrates. The morphology and structure of each layer, the interface quality, the electronic states of the whole structure, and the possible energy transfer between different molecules or layers are studied by scanning probe microscopies and by optical techniques.

3. Single crystals. Single crystals of the same molecular compounds are grown from solution and vapor-phase; new growth techniques are being developed in order to obtain high quality crystals with shape and size suitable for optical and structural studies.

4. Modelling. After the investigation of the single molecule characteristics from *ab-initio* calculations, the results are used as microscopic ingredients for building the Frenkel exciton hamiltonian of single crystals and thin films of the same materials studied experimentally. Thus, the dielectric tensor is calculated in order to simulate the crystal and thin film optical spectra under different experimental configurations, therefore gaining more insight into the relation between microscopic and macroscopic properties.

- FACILITIES

1. The OMBD apparatus consists of the introduction chamber, a second chamber for the sample metallization, the deposition chamber, where six sources are installed for different compounds, a quartz microbalance controls the film thickness, and the RAS apparatus can be installed, and a fourth chamber for some *in-situ* optical characterization. **2. Optical spectroscopy techniques**, i.e. absorption, reflection, and photoluminescence are used for measurements down to few K. **3. Atomic force microscopy** and **scanning tunnel microscopy** are used for the morphology and structure characterization of all the samples and for the study of the film growth process.

- RESEARCH SUBJECTS.

1. **Cooperative effects in organic semiconductors**

We are presently studying cooperative emission effects in molecular semiconductors possessing an herringbone structure (oligothiophenes). These effects arise when all the emitting molecular transition dipoles are in phase and in the case of a suitable molecular symmetry, the bottom of the exciton state, usually considered non emissive, becomes superradiant. We are presently carrying out ultrafast time resolved measurements on oligothiophenes single crystals and on porphyrinic J aggregates in order to establish the decrease in radiative lifetime of the exciton as the temperature is lowered and the number of coherently emitting dipoles increases. Good consistency between the experimental data and the existing theories of the optical response in molecular aggregates has been demonstrated.

2. **Nanochannels and artificial antennae.**

Inclusion of strongly luminescent conjugated molecules in channel-forming compounds allows the formation of highly anisotropic organized arrays of chromophores. The short intermolecular distance, the head to tail molecular orientation, and the spectral properties ensure that an efficient excitation transfer takes place between an excited species and an unexcited neighbour. In this research activity, artificial antennae are prepared by the inclusion of chromophores in a matrix with long nanometric channels, imposing to the chromophore a specific organization in one dimensional arrays, while inhibiting their lateral aggregation. By these systems it is possible to produce a guided propagation of the light along the channel and the conversion of the absorbed energy.

3. **Novel light sources.** Novel emitters based on lanthanide complexes and their incorporation in device structures are developed for use as light-sources, optical amplifiers and light harvesting materials for

photovoltaic applications. The research activity in this field is structured as follows:

- i) Development (design, synthesis, and sample preparation) of new organo-metallic emitters consisting of trivalent lanthanides coordinated to a conjugated organic ligand.

- ii) Investigation of the photophysics relevant to the energy transfer process between the conjugated antenna and the emitting ion. The understanding of the underlying mechanisms will provide a feedback for the design and development of novel materials.

- iii) Encapsulation of commercial solar cells with an active coating containing an Eu organolanthanide can result in a significant increase of the photovoltaic conversion through the light harvesting and conversion of the high energy tail of the solar emission spectrum.

- FACILITIES.

1. **Time resolved photoluminescence.**

The apparatus is based on a mode-locked Ti-sapphire laser, tunable in the spectral range 700-1000 nm, that produces light pulses of about 100 fs. After second or third harmonic generation, light pulses of less than 200 fs excite the sample whose luminescence is collected by a streak-camera detector coupled with a flat-field spectrograph. The overall setup time resolution is 2 ps, with a sensitivity comparable with that of a standard cw system.

2. **Other techniques.** Setups for absorption and reflection (UV-vis and NIR), steady state photoluminescence, and Raman scattering are available for measurements down to few K.

16. Growth kinetics, morphology, and electronic properties of epitaxial Si-Ge nanostructures and films

Leo Miglio, Francesco Montalenti

Our research activity is devoted to the study of epitaxial structures, mostly SiGe-based, via theoretical calculations and computer simulations, exploiting various complementary approaches.

Ge nanostructures grown on Si, Si-Ge alloys and interfaces are of great technological interest, due to possible applications in the field of micro- and nano-high-frequency electronics.

The strong elastic deformation associated with the lattice mismatch (about 4%) between Si and Ge produces a wide variety of physical phenomena, driven by the attempt of relaxing such deformation.

Our work is performed in strict collaboration with different experimental groups, specialized in growth and characterization techniques. Our main research lines are the following.

1) Investigation of the structural, morphological and elastic properties of Ge nanostructures and of Ge-rich heteroepitaxial films on Si(001).

We study the stability and the morphological properties of three-dimensional Ge (or Si-Ge) islands grown on Si(001). In particular, we aim at understanding strain-release processes, and dots ordering driven by the elastic field and by kinetic effects.



Figure: strain field associated with a half-height truncated Ge pyramid buried in Si(001).

To this goal we make use of classical molecular dynamics simulations combined with elastic theory and mesoscopic-scale modeling. We also analyze the interplay

between plastic (i.e. dislocation-induced) and elastic deformation in yielding relaxed films in the presence of not of nanometric dots.

2) Surface kinetics and growth in epitaxial systems by using classical, Tight-Binding and ab initio calculations.

Several novel methodologies are employed in order to unravel the complexity of the microscopic mechanisms driving surface diffusion and growth in semiconductors. Kinetics is described mainly starting from the computation of the activation energies which are then used as input parameters for Kinetic Monte Carlo (KMC) simulations, thus following a multi-scale modeling approach.

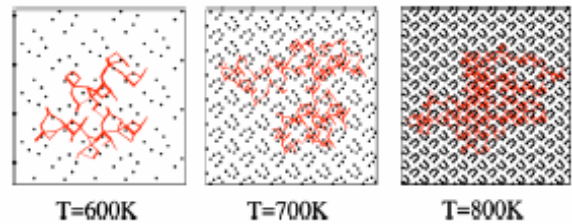


Figure: KMC trajectories for adatom diffusion on the facets of a (105) Ge pyramid grown on Si(001)

Depending on the size of the system under investigation, such barriers can be estimated via ab initio calculations, by using Tight-Binding, and/or by means of classical simulations. Strain-dependent mobility on Si surfaces is investigated, together with the consequences of such mobility on the morphology of thin films. Recently, we have also started to model growth in Plasma-Enhanced Chemical Vapour Deposition Reactors, with the goal to understand the role played by the plasma ions in influencing radical-surface interaction, and surface diffusion.

17. Theoretical modeling and ab-initio simulation of material properties

Giorgio Benedek, Marco Bernasconi

In recent years molecular modeling acquired a position of growing importance in the solution of materials science problems. The activity of the group is devoted to the theoretical modeling and molecular dynamics simulation of several systems of interest in materials science, physics and chemical physics. Ab-initio Car-Parrinello simulations are performed in the following main research lines:

Carbon based materials: Carbon-based thin films have acquired a strategic position in materials science and technology due to the wide spectrum of applications, ranging from cathodes in Li-insertion batteries to field emitters, coating materials and p-n junctions. Their great versatility relies on the strong dependence of their physical properties on the ratio of sp^2 (graphitic-like) to sp^3 (diamond-like) bonds.

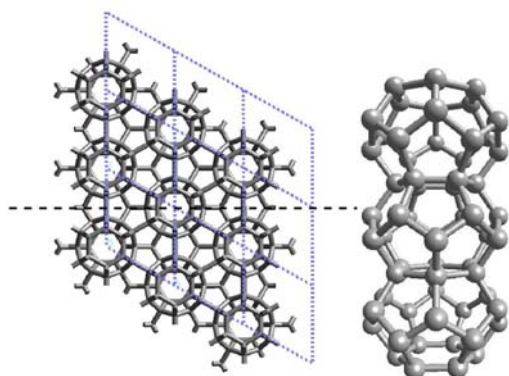


Figure. Structure of the clathrate hex- C_{40} . Top view along the c axis of the crystal (left panel) and side view of one channel formed by C_{24} cages (right panel)

Topological arguments let us predict new carbon nanostructures generated from the assembling of small fullerenes (carbon clathrates, schwarzites, C_{20} -based solids). Ab-initio methods are applied to the study of the structural, electronic and transport properties of these new carbon materials

Simulation of surface chemical reactivity and catalysis: Ab-initio studies of surface chemical reactivity are carried out by making use of the metadynamics technique, a new method for the simulation of rare events within Car-Parrinello molecular dynamics simulations (Iannuzzi, Laio, Parrinello, PRL 90, 238302 (2003)). We are presently studying the grafting of organic molecules on the hydrogenated silicon surfaces under wet chemistry conditions, the synthesis of ammonia on wet pyrite surfaces at the conditions of hydrothermal vents and the role of Ti catalyst in promoting the surface decomposition of aluminates for hydrogen-storage applications.

Oxide materials: Structural and electronic properties of oxide materials of technological interest are studied by ab-initio simulations such as yttria-stabilized zirconia, silicate and tellurite glasses.

Gian Paolo Brivio, Mario Italo Trioni

In the field of solid surfaces the current main interest of the Group is the calculation of electronic properties within an *ab initio* framework to describe the characteristic features of an adsorbate system, and to clarify general features. Our research is focussed both on the development of theory and of the numerical codes. We employ the embedding Green function technique within the Density Functional Theory (DFT) framework, which permits to deal with a really semi-infinite solid. In this way we can easily compute surface state dispersion curves and truly continuous densities of states which are most suitable for comparison with spectroscopic experiments.

Topics of research:

- 1) CHEMISORPTION SYSTEMS
- 2) AUGER SPECTRA OF ADATOMS
- 3) MANY-BODY EFFECTS AT SURFACES

CHEMISORPTION SYSTEMS.

In order to help understanding more thoroughly the behaviour of nanodevices, we have studied the interface properties of oxide films on metal substrates. We have found that ultrathin films of

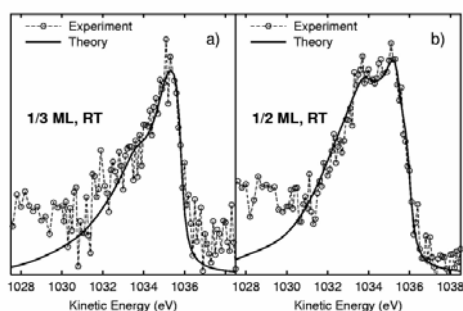


Fig
1:

The embedding geometry. Empty circles denote the atom muffin tins.

MgO on Ag(100) show a weak interaction between the MgO overlayers and the silver substrate and we have identified metal-induced states in the MgO gap, which are relevant for nanocurrents as well surface states. In the latter, by a suitable implementation of the embedding potential in the Kohn-Sham equation, we have elucidated the detailed structures of surface and image states in Cu(111) and Na/Cu(111).

AUGER SPECTRA OF ALKALI ADATOMS

Once a core atomic level of an atom is ionized by an external probe, a likely decay mechanism which proceeds via a non radiative transition, is the Auger effect. In this area we have investigated theoretically the Core Core Valence (CCV) spectra of Na/Al(111), a system with different adsorption sites depending on coverage and temperature. We have demonstrated, by comparison with synchrotron radiation experiments, that the Auger lineshapes are sensitive to the adsorption local structure and allow one to univocally assign the spectral features to the adatom geometry and environment. This opens up new routes for Auger and coincidence spectroscopy. See Fig.1, in which the $KL_{23}V$ spectra are presented for two Na coverages.

Metastable de-excitation spectroscopy of $2S^3$ Helium is also being treated on the same footing. This represents a promising step towards a DFT treatment of dynamical processes at surfaces in which charge exchange occurs between the probe and the target.

MANY-BODY PHENOMENA AT SURFACES

It is well known that DFT is incapable to deal with excited states and wrongly underestimated the semiconductor band gaps. Several material properties such as dielectric and optical response functions, require treatments which go beyond the single-particle one. Here we are developing a many-body description of surfaces in the GW framework. We expect to obtain a realistic picture of excited states, of surface response functions and the correct long-range interaction behaviour of a molecule far enough from a metal surface.

of the nature of the sticking process, which may be activated (H_2 on Cu(111)) or not (H_2 on Pd(100)).

19. Theory of surfaces, interfaces, and bulk inorganic materials

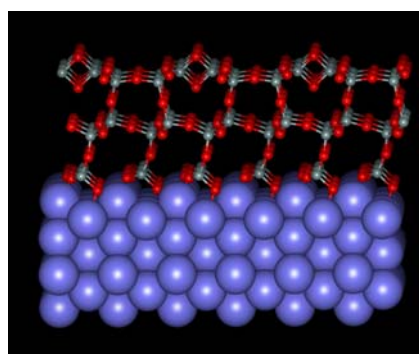
Cristiana Di Valentin, Gianfranco Pacchioni

The understanding of the structure-properties relationship is of fundamental importance for the design of new materials. Various models are employed to study the electronic structure of inorganic and ceramic materials in combination with highly accurate quantum-mechanical techniques. Particularly important is the role of theory in the study of local sites or phenomena like atomic and molecular chemisorption, point defects, impurities in solids, active sites or functional groups on surfaces, light-matter interactions, and for the interpretation of various spectroscopies, IR and Raman, X-ray absorption and photoemission, EPR and NMR, optical transitions, etc.

Various research lines have been developed in this group in the last years:

- **POINT DEFECTS** - Nature of point defects in materials for microelectronics and fiber optics, in particular amorphous and crystalline SiO_2 and Si_3N_4 . The activity is directed toward the determination of stability, structure, and spectral properties of point defects in silica and silicon nitride. Particular attention is devoted to the study of optical absorption and electron spin resonance spectra.
- **OXIDE SURFACES** - Structure and properties of oxide surfaces and of their interaction with adsorbed molecules. Materials of technological interest in catalysis include very ionic solids like MgO and CaO , more covalent oxides like SiO_2 , and intermediate cases like TiO_2 and Al_2O_3 . Several techniques have been developed in collaboration with theoretical groups in Munich, Barcelona and Almaden (USA) to properly account for the different nature of these solids and to analyze the surface chemical bond.

- **METAL/OXIDE INTERFACE** - Growth mechanism of metal clusters and thin metal films on oxides. The scope is to better understand, from a microscopic point of view, the mechanism of adhesion of metals (Ni , Pd , Pt) and oxides (MgO , SiO_2 , Al_2O_3) and the metal/oxide interface. The research is performed in collaboration with a theoretical group in Munich and experimental groups in Berlin and College Station (USA).



- **SURFACE REACTIVITY AND CATALYSIS** - Reactivity of hydrocarbons on metal surfaces. The research, performed in collaboration with an experimental group in Cambridge and in Ulm and a theoretical group in Barcelona, is aimed at the elucidation of the catalytic reaction mechanisms of unsaturated hydrocarbons on transition metals (Cu , Pd).
- **ELECTROCHEMISTRY** - Electric field at surfaces. Objectives of this research line is to provide information on the modifications induced by external electric fields on molecules adsorbed on metal electrodes (Cu , Ag , Pd , Pt), and on other electrochemical phenomena (Stark effect, etc.).

11 – BREVETTI E PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

BREVETTI (1998-2004)

1. Camatini M., Corbetta G., **Ferraro L., Milani M.**, Ambrosio S. ,
“Metodica per la determinazione mediante interferometria infrarossa (FTIR) del contenuto di copolimero stirene-butadiene (SBR) o di altri polimeri a base stirenica in campioni eterogenei.”
 ITMIA2000-07-001946.
2. **Abbotto A., Beverina L.**, Brusatin G., Casalboni M., Innocenzi P., **Pagani G. A.**, Sarcinelli F. ,
“Materiale ibrido organico-inorganico a risposta ottica non-lineare a base di cromofori organici e procedimento di preparazione del medesimo”,
 domanda di brevetto italiano.
3. **Chiodini N., Paleari A., Spinolo G. ,**
"A vitroceramic material with a base of silica and tin dioxide, particularly for optical applications, and the corresponding process of fabrication",
 Patent WO03072524.
4. **Morazzoni F., Scotti R.**, Brambilla G., Taylor E.R., **Chiodini N., Paleari A., Spinolo G. ,**
"Low phonon energy gain medium and related active devices",
 EU Patent N° 01308392.8
5. **Chiodini N., Vedda A., Baraldi A., Martini M., Nikl M., Scotti R., Spinolo G. ,**
“Vetri luminescenti ad alta efficienza, particolarmente per l’impiego come materiali scintillatori per la rivelazione di radiazioni ionizzanti, e relativo procedimento di realizzazione” ,
 n. MI2001A 002555, depositato all’Ufficio Italiano Brevetti e Marchi il 4.12.2001.
 Richiesta di estensione europea affettuata in data 3.12.2001, n. PCT: PCT/IT02/00756.
6. **Abbotto A., Bozio R., Pagani G.A. ,**
“Heteroaromatic Compounds Having Two-Photon Absorption Activity”,
 PCT Int. Appl., WO 0170735, A1 20010927 AN 2001:713344, 2001
7. **Chiodini N., Paleari A., Spinolo G. ,**
”Materiale vetroceramico a base di silice e biossido di stagno, particolarmente per applicazioni ottiche, e relativo procedimento di realizzazione”
 brevetto italiano N° MI2002A000405.
8. **Abbotto A., Beverina L., Bozio R., Pagani G.A.,** Signorini R. ,
“Cromofori eteroaromatici con attività di assorbimento a due fotoni, e composizioni che li comprendono”,
 brevetto italiano N° MI2002A001809 2002
9. Taylor E. , Brambilla G., **Chiodini N., Paleari A., Spinolo G., Morazzoni F., Scotti R. ,**
“Sol-gel preparation of low phonon energy silicate glass-ceramic gain medium with SnO₂ nanoclusters for lasers and optical amplifiers”
 U.S. Pat. Appl. Publ. (2003), US 2003087742 A1 20030508.

10. Chiodini N., Vedda A., Baraldi A., Martini M., Nikl M., Scotti R., Spinolo G. ,
“Sol-gel preparation of high-efficiency luminescent silica-based and germanium silicate-based glasses for optical fibers used as scintillating materials”
PCT Int. Appl. (2003), WO 2003048058 A1 20030612
11. Savoia C., **Milani M.**, Sottocasa E. ,
“Contact macroradiography characterization of doped fibers”,
CN1231727 and EP0927349 and WO9812544
12. Savoia C., **Milani M.**, Sottocasa E., Batani D., Costato M., Conti A. ,
“Caratterizzazione microscopica di fibre ottiche drogate”,
IT1288481 and ITVA960018
13. **Abbotto A.**, **Beverina L.**, Bozio R., **Pagani G. A.**, Signorini R. ,
“Two-photon absorption heteroaromatic chromophores and compositions thereof”
PCT Int. Appl. , WO 2004/018456 A1 20040304, Chem. Abstr. (2004) 182869.
14. Sarcinelli F., **Abbotto A.**, **Beverina L.**, **Pagani G.**, Brusatin G., Innocenzi P., Casalboni M. ,
“Hybrid organic-inorganic material with non-linear optical response based on organic chromophores and process for the preparation thereof”
PCT Int. Appl., WO 2004/092820 A1 20041028, Chem. Abstr. (2004) 906026.

12 – PUBBLICAZIONI 2004 ED INDICE D'IMPATTO (Ordinati per linea di ricerca)
--

Linea 1

1. Fieni L, Galli A., **Martini M.**, Montanari C., **Sibilia E.** ,
"Thermoluminescence and ^{14}C dating of brick structures in S.Lorenzo church in Milano. Late Antique and Medieval phases"
 Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, 2004
2. Galli A., **Martini M.**, Montanari C., **Sibilia E.** ,
"Archeometria del costruito: datazione con termoluminescenza di murature del complesso laurenziano in Milano"
 Biblioteca di Archeologia dell'Architettura, (2004) 2, 237-240
3. Galli A., **Martini M.**, Montanari C., **Sibilia E.** ,
"Thermally and optically stimulated Luminescence of early medieval blue-green glass mosaics"
 Radiation Measurements (2004) 38, 799-803 0.948
4. Galli A., **Martini M.**, Montanari C., **Sibilia E.** ,
"Thermally and optically stimulated Luminescence of glass mosaics tesserae"
 Appl. Phys. A (2004) 79, 253-256 4.049
5. Di Martino D., Galli A., **Martini M.**, **Sibilia E.** ,
"Micro Raman spectroscopy for the study of the technology of production of mosaic glass"
 Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, 2004
6. Galli A., **Martini M.**, **Sibilia E.** ,
"Structural properties of lustred ceramics investigated by luminescence: a signature for provenance studies"
 Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, 2004
7. **Martini M.**, **Sibilia E.** ,
"Dating the cast of bronze statues by thermoluminescence, Proceedings of the International Conference Archaeometallurgy in Europe"
 Proceedings of the International Conference Archaeometallurgy in Europe, Milano, 24-26 Sept. 2003

Linea 2

8. Bensalah A., Nikl M., Mihokova E., Solovieva N., Sato H., Fukuda T., Boulon G., **Vedda A.** ,
"Excited-state dynamics of Yb^{2+} in LiCaAlF_6 single crystals"
 Rad. Meas. 38, 545 (2004) 0.948
9. Clementi A., Chiodini N., **Paleari A.** ,
"Cubic optical nonlinearity in nanostructured $\text{SnO}_2:\text{SiO}_2$ "
 Appl. Phys. Lett. 84, 960, (2004) 4.049
10. Di Martino D., Krasnikov A., Nikl M., Nitsch K., **Vedda A.**, Zazubovich S. ,
"The 3.83 eV luminescence of Gd-enriched phosphate glasses"
 Phys. Stat. Sol. (a) 201, R38 (2004). 0.948
11. Laguta V.V., Slipenyuk A.M., Rosa J., Nikl M., **Vedda A.**, Nejezchleb K., Blazek K. ,
"Electron spin resonance study of Mo^{3+} centers in YAlO_3 "
 Rad. Meas. 38, 735 (2004). 0.948

12. Shim J. B., Yoshikawa A., Nikl M., Pejchal J., **Vedda A.**, Fukuda T. ,
"Scintillation properties of the Y-doped YAlO₃ crystals"
 Rad. Meas. 38, 493 (2004). 0.948
13. **Vedda A.** ,
"Optical properties of sol-gel scintillating glasses and fibres in Scintillating crystals"
 Proc. of the KEK-RCNP International School and Mini-Workshop for Scintillating Crystals and
 their Applications in Particle and Nuclear Physics, November 17-18, 2003 Tsukuba (Japan), M.
 Kobayashi and S. Sugimoto Editors, KEK Proceedings 2004-4 July 2004,
14. Nikl M., Solovieva N., Pejchal J., Shim J.B., Yoshikawa A., Fukuda T., **Vedda A.**, **Martini M.** ,
"Very fast YbxYl-xAlO₃ single-crystal scintillators"
 Appl. Phys. Lett. 84, 882 (2004) 4.049
15. Pazzi G.P., Fabeni P., Susini C., Nikl M., Bohacek P., Mihokova E., **Vedda A.**, **Martini M.**,
 Kobayashi A., Usuki Y.A. ,
"Recombination luminescence in lead tungstate scintillating crystals"
 Rad. Meas. 38, 381 (2004) 0.948
16. Sato H., Bensalah A., Solovieva N., Beitlerova A., **Vedda A.**, **Martini M.**, Nikl M., Fukuda T. ,
"X-ray damage characterization in BaLiF₃, KMgF₃ and LiCaAlF₆ complex fluorides"
 Rad. Meas. 38, 463 (2004). 0.948
17. Vedda A., Chiodini N., Di Martino D., Fasoli M., Keffer S., Lauria A., **Martini M.**, Moretti
 F., **Spinolo G.**, Nikl M., Solovieva N., Brambilla G. ,
"Ce₃₊-doped optical fibers for remote radiation dosimetry"
 Appl. Phys. Lett. 85, 6356 (2004). 4.049
18. **Vedda A.**, Chiodini N., Di Martino D., Fasoli M., **Martini M.**, Moretti F., Rosetta E., **Spinolo**
G., Nikl M., Solovieva N., Baraldi A., Capelletti R. ,
"Luminescence properties of rare-earth ions in SiO₂ glasses prepared by the sol-gel method"
 J. of Non-Cryst. Solids, 345&346, 338 (2004). 1.563
19. **Paleari A.**, Chiodini N., Di Martino D., Franchina E., Lauria A., **Spinolo G.** ,
"Low-temperature radio- and thermo-stimulated luminescence of SnO₂-doped silica"
 J. Non-Cryst. Sol., 345&346, 306-310 (2004) 1.563
20. **Vedda A.**, Di Martino D., **Martini M.**, Mares J., Mihokova E., Nikl M., Solovieva N.,
 Blazek K., Nejezchleb K. ,
"Trap levels in Y-aluminum garnet scintillating crystals"
 Rad. Meas. 38, 673 (2004). 0.948
21. Di Martino D., **Vedda A.**, Angella G., **Catti M.**, Cazzini E., Chiodini N., **Morazzoni F.**, **Scotti**
R., **Spinolo G.** ,
"Evidences of rare earth ion aggregates in a sol-gel silica matrix: the case of cerium and
gadolinium"
 Chem. Mater. 16, 3352 (2004) 4.374

Linea 3

22. Bove L.E., **Catti M.**, Paciaroni A., Sacchetti F. ,
"Neutron scattering study of the dynamics of hydronium ion in (H₃O)Zr₂(PO₄)₃ Nasicon across
the order-disorder transition"
 J. Phys. Chem. B (2004) 108, 8910-8914 3.679

23. **Catti M.** ,
"On the P21/m and Pmmn pathways of the B1-B2 phase transition in NaCl: a quantum-mechanical study"
 J. Phys.: Condens. Matter (2004) 16, 3909-3921 1.757
24. **Catti M., Comotti A.,** Di Blas S., Ibberson R. M. ,
"Extensive Lithium Disorder in $Li_{1.5}Fe_{0.5}Ti_{1.5}(PO_4)_3$ Nasicon by neutron diffraction, and the $Li_{1+x}Fe_xTi_{2-x}(PO_4)_3$ phase diagram"
 J. Mater. Chem. (2004) 14, 835-839 0.789
25. Noel Y., **Catti M.**, Dovesi R. ,
"Ab initio calculation of piezoelectric and ferroelectric properties of $NaNO_2$ "
 Ferroelectrics (2004) 300, 139-145 0.556

Linea 4

26. Dotelli G., Gallazzi M.C., **Mari C.M.**, Greppi F., Montoneri E., Manuelli A. ,
"Polyalkylphosphazenes as solid proton conducting electrolytes"
 J. Mat. Sci. 39 (2004) 6937 0.826
27. Pelosato R., Sora I. N, Ferrari V., Dotelli G., **Mari C.M.** ,
"Preparation and characterisation of supported $La_{0.83}Sr_{0.17}Ga_{0.83}Mg_{0.17}O_{2.83}$ thick film for application in IT-SOFCs"
 Solid State Ionics 175 (2004) 87 (NL) 1.599

Linea 5

28. **Canevali C., Scotti R., Vedda A., Morazzoni F.** ,
"Composition/structure relationships in monolithic borophosphosilicate glasses obtained by the sol-gel route"
 Chem. Mater. 16, 315 (2004). 4.373
29. Armelao L., Barreca D., Bottaro G., **Canevali C., Morazzoni F., Scotti R.**, Tondello E. ,
"Boron and Phosphorus quantification in sol-gel BPSG glasses by XPS"
 Surf.Sci.Spectra, 2004, 10, 40
30. Jimenez I., Centeno M.A., **Scotti R., Morazzoni F.**, Arbiol J., Cornet A., Morante J.R.,
" NH_3 interaction with chromium-catalysed WO_3 nanocrystalline powders for gas sensing applications"
 J. Mater.Chem., 2004, 14, 2412 0.789
31. **Canevali C., Mari C. M.,** Mattoni M., **Morazzoni F.,** Ruffo R., **Scotti R.,** Russo U., Nodali L. ,
"Mechanism of sensing NO in argon by nanocrystalline SnO_2 : Electron Paramagnetic Resonance, Mössbauer and Electrical Study"
 Sens.& Act. B 100 (2004) 228 (NL). 2.391

Linea 7

32. **Milani M.**, Ballerini M., Ferraro L., Marelli E., Mazza F., Zabeo M., Barberis M., Cannone M. ,
 Faraone V. ,
"Contaminant Effect on Cellular Metabolic Differential Pressure Curves"
 Journal Biomedical Optics 9 (2004) 1074-1088 3.541

33. **Milani M.**, Puccillo F., Ballerini M., Camatini M., Gualtieri M., Martino S. ,
"First evidence of tire debris characterization at the nanoscale by Focused Ion Beam (FIB)"
 Materials Characterization 52 (2004) 283-288 0.303
34. **Milani M.**, Drobne D., Ballerini M., Zrimec A., Zrimec M. B., Tatti F., Drašlar K. ,
"Focused ion beam (FIB) for microscopy and for in situ sample manipulation: application on a crustacean digestive system (Porcellio scaber, Isopoda, Crustacea)"
 J. Biomedical Optics 9 (2004) 1238-1243 3.541
35. **Milani M.**, Zabeo M. ,
"Metabolism and photon emission, from basic theory to time resolved biosystem dynamics"
 Suppl. Laser and Technology (2004) Vol.12 pp. _41-48
36. **Milani M.**, Ferraro L. ,
"Optoelectronic in Delayed Luminescence: increasing sensitivity and reliability while downsizing"
 Suppl. Laser and Technology (2004) Vol.12 pp.65-72
37. **Milani M.** ,
"Life Science Applications of Focused Ion Beam (FIB) Tomography"
 Suppl. Laser and Technology (2004) Vol.12 pp.103-108
38. **Milani M.**, Batani D., **Moret M.**, Ballerini M., Pozzi A., Savoia C. ,
"Microscopy characterization of doped fibers"
 Laser and Particle Beams 22 (2004) 351-354 0.646
39. **Milani M.**, Drobne D., Ballerini M., Zrimec A. ,
"Focused ion beam 3-D ultramicroscopy and micromanipulation of Porcellio scaber (Isopoda, crustacea) digestive system"
 Scanning- The Journal of Scanning Microscopies 26 (2004) 61-62 0.733
40. **Milani M.**, Turcu E., Allot R., Lisi N., Batani D., Bortolotto F., Masini A., Ballerini M., Ferraro L., Pozzi A., Previdi F., Rebonato L. ,
"An ensemble of new techniques to study soft -X-ray-induced variations in cellular metabolism"
 Laser and Particle Beams 22 (2004) 323-333 0.646

Linea 8

41. Besseghini S., Stortiero F., Carcano G., Villa E., Mancini L., Tromba G., Zanini F., Montanari F., **Airolidi G.** ,
"Characterisation of phase evolution under load by means of phase contrast imaging using synchrotron radiation"
 Materials Science & Engineering A , A378(2004), no.1-2 : 125-9

Linea 9

42. **Abbotto A.**, Beverina L., **Pagani G. A.** ,
"Poled sol-gel materials doped with heterocycle-based push-pull chromophores with second-order optical non-linearity"
 J. Non-Cryst. Solids, (2004) 345-346, 575-579. 1.563
43. Brusatin G., **Abbotto A.**, Beverina L., **Pagani G. A.**, Casalboni M., Sarcinelli F., Innocenzi P. ,
"Poled sol-gel materials doped with heterocycle-based push-pull chromophores with second-order optical non-linearity"
 Adv. Funct. Mater., (2004) 14, 1160-1166 4.798

44. Brusatin G., Innocenzi P., **Abbotto A.**, Beverina L., **Pagani G. A.**, Casalboni M., Sarcinelli F., Pizzoferrato R. ,
"Novel coordinating motifs for lanthanide (III) ions based on 5-(2-pyridyl)-tetrazole and 5-(2-pyridyl-1-oxide)tetrazole. Potential new contrast agents"
 Chem. Comm., (2004) 1770-1771. 4.031
45. Brusatin G., Innocenzi P., **Abbotto A.**, Beverina L., **Pagani G. A.**, Casalboni, M., Sarcinelli F., Pizzoferrato R. ,
"Hybrid organic-inorganic materials containing poled zwitterionic push-pull chromophores"
 J. Eur. Ceram. Soc., (2004) 24, 1853-1856 1.248

Linea 10

46. Del Buttero P., Molteni G., **Papagni A.**, Miozzo L. ,
"The [2+2] Staudinger cycloadditive route to enantiopure azetidino[4,1-d][1,4]-benzooxazepines"
 Tetrahedron: Asymmetry 2004, 15, 2555-2559 2.461
47. Miozzo L., **Papagni A.**, Cerminara M., **Meinardi F.**, **Tubino R.** and Botta C. ,
"Sensitised green emission in an electrically active polymer doped with a fluorinated acridine"
 Chem. Phys.. Lett. 399 152 (2004) 2,438
48. Trabattoni S., Laera S., Mena R., **Papagni A.**, **Sassella A.** ,
"Preparation of highly pure quaterthiophene and role of impurities on its photoluminescence properties"
 J. Mater. Chem., 2004, 14, 171-178 0.406
49. Tavazzi S., Campione M., Laicini M., **Papagni A.**, **Sassella A.**, Spearman P., Trabattoni S. ,
"Directional Dispersion in Quaterthiophene Single Crystals and Oriented Thin Films"
 J. Lumin., published on line www.sciencedirect.com, December 8, 2004
50. Rizzo F., **Papagni A.**, **Meinardi F.**, **Tubino R.**, Ottonelli M., Musso G. F., Dellepiane G. ,
"Novel lanthanide complexes for visible and IR emission"
 Synht. Metal. 147 143 (2004) 1.303
51. Miozzo L., Campione M., **Moret M.**, **Papagni A.**, **Sassella A.** ,
"Structural and optical study on a single crystal of a novel fluorinated acridine"
 Eur. Phys. J. B (2004) 39, 229. 1.457

Linea 11

52. **Sozzani P.**, Bracco S., Reichenbaeche K., Suess H. I., Stoeckli-Evans H., Weber E., Hulliger J. ,
"Modification of channel structures by fluorination"
 New J. Chem. (2004) 28, 393-397. 2.272
53. **Sozzani P.**, Brustolon M., Barbon A., Bortolus M., Maniero A.L., **Comotti A.**, **Simonutti R.** ,
"Dynamics of alkoxy-oligothiophene ground and excited states in nanochannels"
 J. Am. Chem. Soc. (2004) 126, 15512-15519. 6.516
54. **Sozzani P.**, **Comotti A.**, Bracco S., **Simonutti R.** ,
"A Family of Supramolecular Frameworks of Polyconjugated Molecules Hosted in Aromatic Nanochannels"
 Angew. Chem. Int. Ed. (2004) 43, 2792-2797. 8.427

55. **Sozzani P., Comotti A., Bracco S., Simonutti R. ,**
"Cooperation of multiple CH... π interactions to stabilize polymers in aromatic nanochannels as indicated by 2D solid state NMR"
 Chem. Comm. (2004) 768-769 4.030
56. **Sozzani P., Comotti A., Simonutti R., Bracco S. ,**
"Polymer Mesophases and Nanostructured Materilas Based on Phosphazenes: The NMR Perspective"
 Eds. M. Gleria e R.de Jaeger. Nova Science Publishers Inc, New York (2004) 909-929
57. **Sozzani P., Hertzsch T., Hulliger J., Weber E. ,**
"Organic Zeolites"
 J. Atwood Ed. Dekker, New York, (2004) 996-1002

Linea 12

58. **Acciarri M., Binetti S.,** Feklisova O.V., Steinman E.A., Yakimov E.B. ,
"Electrical and optical properties of dislocations Generated under Pure Conditions"
 Solid State Phenomena Vols. 98-96 453 (2004) 0.687
59. Le Donne A., **Binetti S., Acciarri M.,** Castaldini A., Nava F., Cavallini A., **Pizzini S. ,**
"Electrical and optical characterization of electron irradiated X rays detectors based on 4H-SiC epitaxial layers"
 Material Science Forum 457 ,1503 (2004) 0.602
60. Le Donne A., **Binetti S., Acciarri M., Pizzini S. ,**
"Electrical characterization of electron irradiated X rays detectors based on 4H-SiC epitaxial layers"
 Diamond and related Materials, 13/3 414 (2004) 1.867
61. Leoni E. , Martinelli L., **Binetti S.,** Borionetti G., **Pizzini S. ,**
"About the origin of the PL from oxygen nucleation in silicon"
 J. Electrochemical Society 151, G866 (2004) 2.361
62. Leoni E., **Binetti S.,** Pichaud B., **Pizzini S. ,**
"Dislocation luminescence in plastically deformed silicon crystals: effect of dislocation intersection and oxygen decoration"
 Eur. Phys. J. Appl. Phys. 27, 123-127 (2004) 0.699
63. Libal J., Buck T., Kopecek R., Fath P., Geerligs B., Wambach K., **Acciarri M., Binetti S. ,**
"Properties of n-type multicrystalline silicon: effectiveness of gettering and H-passivation"
 19th Proceedings of European Photovoltaic Solar Energy EPSEC, Palais des Congrès, Paris, France, 7-11 June 2004
64. **Pizzini S.,** Leoni E., **Acciarri M.,** Le Donne A., Pichaud B. ,
"Luminescence of dislocations and oxide precipitates in Si"
 Solid State Phenomena Vols. 98-96 273 (2004) 0.687
65. Leoni E., Bouyadi R.El., Martinelli L., Regula G., Ntsoenzok E., Pichaud. B., **Pizzini S. ,**
Structural and optical characterization of a dispersion of nanocavities in a crystalline silicon matrix
 Eur.Phys.J.Appl.Phys. 27(2004) 89 0.699

Linea 13

66. Alderighi D., Zamfirescu M., Gurioli M., Vinattieri A., Colocci M., **Sanguinetti S.**, Notzel R., Povolotskyi M., Gleize J., Di Carlo A. ,
"Carrier recombination kinetics in (311)A InGaAs sidewall quantum wires"
 Physica E (2004) 23, 449 - 454 0.930
67. Alderighi D., Zamfirescu M., Vinattieri A., Gurioli M., **Sanguinetti S.**, Povolotskyi M., Gleize J., Di Carlo A., Lugli P., Notzel R. ,
"Dynamical non-linearity in strained InGaAs (311)A sidewall quantum wires"
 Appl. Phys. Lett. (2004) 84, 786 - 788 4.049
68. **Guzzi M., Sanguinetti S.**, Gurioli M. ,
"III/V Semiconductor Quantum Dots"
 in Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, vol. 9, p. 735 – 762, ed. H.S. Nalwa (American Scientific Publishers, 2004)
69. Mantovani V., **Sanguinetti S., Guzzi M., Grilli E.**, Gurioli M., Watanabe K., Koguchi N. ,
"Low Density GaAs/AlGaAs Quantum Dots Grown by Modified Droplet Epitaxy"
 J. Appl. Phys. (2004) 96, 4416 - 4420 2.171
70. Mantovani V., **Sanguinetti S., Guzzi M., Grilli E.**, Gurioli M., Watanabe K., Koguchi N.,
"Post-Growth Annealing and Ga Coverage Effects in Low Density GaAs/AlGaAs Quantum Dots Grown by Modified Droplet Epitaxy"
 Physica E (2004) 23, 377 - 383 0.930
71. Povolotskyi M., Gleize J., Di Carlo A., Lugli P., Birner S., Vogl P., Alderighi D., Gurioli M., Vinattieri A., Colocci M., **Sanguinetti S.**, Notzel R. ,
"Non-linear optical properties of InGaAs/AlGaAs nanostructures grown on (N11) surfaces",
 Semic. Sci. and Technol. (2004) 19, S351 – S353 1.603
72. **Sanguinetti S.**, Gurioli M., Watanabe K., Tateno T., Koguchi N. ,
"Dependence of Quantum Dot Auger Carrier Relaxation on Barrier Dimensionality: an Experimental Study"
 Semic. Sci. and Technol. (2004) 19, S293 – S295 1.603

Linea 14

73. Campione M., Cartotti M., Pinotti E., **Sassella A., Borghesi A.** ,
"Thickness measurements by quartz microbalance during thin-film growth by organic-molecular-beam deposition"
 J. Vac. Sci. Techn. A (2004) 22, 482 1.628
74. Goletti C., Bussetti G., Chiaradia P., **Sassella A., Borghesi A.** ,
"The application of reflectance anisotropy spectroscopy to organics deposition"
 Org. Electron. (2004) 5, 73
75. Goletti C., Bussetti G., Chiaradia P., **Sassella A., Borghesi A.** ,
"In situ optical investigation of oligothiophene layers grown by organic molecular beam epitaxy"
 J. Phys.: Condens. Matter (2004) 16, S4393 1.757

76. **Sassella A.**, Th. Wagner C., Herzinger Genbo Su, Youping H., and Chenjia C. ,

- "Anisotropic optical functions of pentaerythritol, an uniaxial organic crystal"*
Thin Solid Films (2004) 455-456, 576 1.598
77. Tavazzi S., **Borghesi A.**, Campione M., Laicini M., Trabattoni S., Spearman P. ,
"Reflectivity and Anisotropic Optical Functions of Quaterthiophene Single Crystals"
J. Chem. Phys. (2004) 120, 7136. 2.950
78. Tavazzi S., **Borghesi A.**, Laicini M., Spearman P. ,
"Polarized Absorption of Quaterthiophene Single Crystals"
J. Chem. Phys. (2004) 121, 8542 2.950
79. Tavazzi S., Laicini M., Lang P., Raimondo L., Spearman P. ,
"Optical Spectra and Dielectric Function of Quinquethiophene Single Crystals"
Org. Electron. (2004) 5, 283
80. Thierry A., Wittmann J.C., Lotz B., Da Costa V., Le Moigne J., Campione M., **Borghesi A.**,
Sassella A., Plank H., Resel R. ,
"Organisation, structure and morphology of organic thin films via electron microscopy"
Org. Electron. (2004) 5, 7
81. Tavazzi S., **Borghesi A.**, Campione M., **Papagni A.**, **Sassella A.**, Spearman P. ,
"Absorption and Propagation of Light in Quaterthiophene Crystals"
J. Lumin. (2004) 110, 212 1.314
82. Berlanda G., Campione M., **Moret M.**, **Sassella A.**, **Borghesi A.** ,
"Evidence of post-deposition nucleation in molecular organic thin films"
Phys. Rev. B (2004) 69, 85409 2.962
83. Campione M., **Borghesi A.**, **Moret M.**, **Sassella A.**, Lotz B., Thierry A. ,
"Structural characterisation of polycrystalline α,ω -dihexyl quaterthiophene thin films by transmission electron microscopy",
Org. Electron. (2004) 5, 141
84. Laicini M., Spearman P., Tavazzi S., Raimondo L., Miozzo L., **Moret M.**, **Borghesi A.** ,
"Microscopic Calculation of Axial Dispersion for Quaterthiophene Crystals"
J. Lumin., published on line www.sciencedirect.com, December 8, 2004
85. **Papagni A.**, Del Buttero P., **Moret M.**, **Sassella A.**, Miozzo L., Casalbore-Miceli G. ,
"Synthesis and properties of polyfluoro-hydroxy-acridines and their Zn_2^+ complexes: new materials for solid state emitting systems"
Chem. Mater., 2004, 16, 5124-5132 4.374
86. Trabattoni S., **Borghesi A.**, Laera S., **Moret M.**, **Papagni A.** ,
"The role of impurities in quaterthiophene film photoluminescence"
Synth. Metal 2004, 145, 7-10 1.303
87. Laicini M., Spearman P., Raimondo L., Trabattoni S., Miozzo L., **Moret M.** ,
"Dielectric tensor and optical spectra of quaterthiophene crystals"
J. Lumin. (2004) 210, 207 1.314

Linea 15

88. Mezik J., Kalinowsky J., **Meinardi F.** and **Tubino R.** ,
"Singlet exciton interaction in solid films of Alq_3 "
Chem. Phys. Lett. 395 321 (2004) 2.438

Linea 16

89. Basham M, Mulheran PA, **Montalenti F.** ,
"Diffusion and stability of small vacancy clusters on Cu(100) - a simulation study"
 Surf. Sci. 565, 289 (2004) 2.063
90. Giordano L, Di Piazza L, **Trioni MI., Montalenti F.** ,
"Theoretical evidence for fast H-divacancy rotation on H/Pd(111)"
 Chem. Phys. Lett. 400, 163 (2004) 2.438
91. Hontinfinde F, Videcoq A, **Montalenti F.**, Ferrando R. ,
"Leapfrog-induced selective faceting in the growth of missing-row (110) surfaces"
 Chem. Phys. Lett. 398, 50 (2004) 2.438
92. Ivanenko LI, Shaposhnikov VL, Filonov AB, Krivosheeva AV, Borisenka VE, Migas DB, **Miglio L.**, Behr G, Schumann J. ,
"Electronic properties of semiconducting silicides: fundamentals and recent predictions"
 Thin Solid Films 461, 141 (2004) 1.598
93. Martinelli L., Marzegalli A., Raiteri P., Bollani M., **Montalenti F., Miglio L.**, Chrastina D., Isella G., von Kanel H. ,
"Formation of strain-induced Si-rich and Ge-rich nanowires at misfit dislocations in SiGe: A model supported by photoluminescence data"
 Appl. Phys. Lett. 84, 2895 (2004) 4.049
94. Marzegalli A., **Montalenti F.**, Bollani A., **Miglio L.**, Isella G., Chrastina D., von Kanel H.
"Relaxed SiGe heteroepitaxy on Si with very thin buffer layers: experimental LEPECVD indications and an interpretation based on strain- dependent dislocation nature"
 Microelectronic Engineering 76, 290 (2004) 1.229
95. Migas DB, Cereda S, **Montalenti F, Miglio L.** ,
"Electronic and elastic contributions in the enhanced stability of Ge(105) under compressive strain"
 Surf. Sci. 556, 121 (2004) 2.063
96. Migas DB, **Miglio L.**, Rebien M, Henrion W, Stauss P, Birdwell AG, Davydov AV, Shaposhnikov VL, Borisenko VE ,
"Structural, electronic, and optical properties of beta-(Fe_{1-x}Cox)Si₂"
 Phys. Rev. B 69, 115204 (2004) 2.962
97. Migas DB, Raiteri P, **Miglio L.**, Rastelli A, von Kanel H. ,
"Evolution of the Ge/Si(001) wetting layer during Si overgrowth and crossover between thermodynamic and kinetic behavior"
 Phys. Rev. B 69, 235318 (2004) 2.962
98. **Montalenti F**, Migas DB, Gamba F, **Miglio L.** ,
"Fast isotropic adatom diffusion on Ge(105) dot facets"
 Phys. Rev. B 70, 245315 (2004) 2.962
99. **Montalenti F.**, Raiteri P., Migas DB, von Kanel H., Rastelli A., Manzano C., Costantini G., Denker U., Schmidt OG, Kern K., **Miglio L.** ,
"Atomic-scale pathway of the pyramid-to-dome transition during Ge growth on Si(001)"
 Phys. Rev. Lett. 93, 216102 (2004) 7.035
100. Shaposhnikov L., Krivosheeva AV., Ivanenko LI., Filonov AB., Borisenko E., Rebien M., Henrion W., Migas DB., **Miglio L.**, Behr G., Schumann J. ,
"Structural, electronic and optical properties of semiconducting rhenium silicide"
 J. Phys.: Condens. Matt. 16, 303 (2004) 1.757
101. Uberuaga BP., Smith R., Cleave AR., **Montalenti F.**, Henkelman G., Grimes RW., Voter AF., Sickafus KE. ,

- "Structure and mobility of defects formed from collision cascades in MgO"*
Phys. Rev. Lett. 92, 115505 (2004) 7.035

Linea 17

102. Ballabio G., **Bernasconi M.**, Pietrucci F., Serra S. ,
"Ab-initio study of the surfaces of yttrium-stabilized cubic zirconia"
Phys. Rev. B (2004) 70, 754171 2.962
103. Zipoli F., **Bernasconi M.**, Martonak R. ,
"Constant pressure reactive molecular dynamics simulation of phase transitions under pressure: the graphite to diamond conversion"
Eur. Phys. J. B (2004) 39, 41. 1.457
104. Graham AP, Toennies JP, **Benedek G.** ,
"Evidence for long-range surface state mediated interaction between sodium atoms on copper (001)"
Surf. Sci., 556, L143-L149 (2004) 2.063
105. **Benedek G., Bernasconi M.** ,
"Fullerenes: topology and structure",
Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, J.A. Schwarz, C. Contescu, and K. Putyera, Eds., (Marcel Dekker, New York, 2004), 1235-1249
106. Donadio D., **Bernasconi M.**, Tassone F. ,
"Photoelasticity of sodium silicate glass from first principles"
Phys. Rev. B (2004) 70, 214205. 2.962
107. Spagnolatti I., **Bernasconi M.**, Mussi A., **Benedek G.** ,
"Vibrational properties of C₂₀-based solids"
Eur. Phys. J. B (2004) 37, 143. 1.457

Linea 18

108. Butti G., **Trioni M.I.**, Ishida H. ,
"Electronic properties calculation of MgO thin-films adsorbed on semiinfinite Ag(001)"
Phys. Rev. B, 70, 195425 (2004) 2.962
109. Fratesi G., **Brivio G.P.**, Molinarie L.G. ,
"Many-body method for infinite non-periodic systems"
Phys. Rev. B 69, 245113 (1-8) (2004) 2.962
110. Jean N. ,**Trioni M.I., Brivio G.P.**, Bortolani V. ,
"Corrugating and Anticorrugating Static Interactions in Helium-Atom Scattering from Metal Surfaces"
Phys. Rev. Lett. 92. 013201-(1-4) (2004) 7.035
111. **Trioni M.I.**, Butti G., Bonini N. ,
"Approximate approach to metastable He deexcitation on metal surfaces"
J. Phys.: Condens. Matter, 16, S2923 (2004) 1.757
112. **Trioni M.I.**, Caravati S., **Brivio G.P.**, Floreano L., Bruno F., Morgante A. ,
"Selectivity of Auger decays to the surface local environment"
Phys. Rev. Lett. 93, 206802 (1-4) (2004) 7.035

Linea 19

113. Beck TJ, Klust A., Batzill M., Diebold U., **Di Valentin C.**, Selloni A. ,
"Surface structure of $\text{TiO}_2(011)-(2 \times 1)$ "
 Phys. Rev. Lett. 93, 036104 (2004) 7.035
114. Branda M. M., **Di Valentin C.**, **Pacchioni G.** ,
"NO and NO₂ adsorption on terrace, step, and corner sites of the BaO surface from DFT calculations"
 J. Phys. Chem. B, 108, 4752-4758 (2004) 3.679
115. Brazzelli S., **Di Valentin C.**, **Pacchioni G.** ,
"Comparative ab initio study of the structure and stability of H- and Li- anions in silica networks", "
 Physical Review B, 69, 024101-7 (2004) 2.962
116. Bredow T., Giordano L., Cinquini F., **Pacchioni G.** ,
"Electronic properties of rutile TiO_2 ultra-thin films: odd-even oscillations with number of layers"
 Physical Review B, 70, 035419 (2004) 2.962
117. Chiesa M., Martino P., Giamello E., **Di Valentin C.**, del Vitto A., **Pacchioni G.** ,
"Local environment of electrons trapped at the MgO surface: spin density on the oxygen ions from ^{17}O hyperfine coupling constants",
 J. Phys. Chem. B, 108, 11529-11534 (2004) 3.679
118. Del Vitto A., Sousa C., Illas F., **Pacchioni G.** ,
"Optical properties of Cu nano-clusters supported on $\text{MgO}(100)$ "
 J. of Chemical Physics, 121, 7457-7466 (2004) 2.950
119. **Di Valentin C.**, Figini A., **Pacchioni G.** ,
"Adsorption of NO and NO₂ on terrace and step sites and oxygen vacancies of the $\text{CaO}(100)$ surface"
 Surface Science, 556, 145-158 (2004) 2.063
120. **Di Valentin C.**, Locati C., **Pacchioni G.** ,
"Probing the surface basicity of regular and defect sites of alkaline-earth oxides by BF_3 adsorption. A theoretical analysis"
 ChemPhysChem, 5, 642-651 (2004)
121. **Di Valentin C.**, **Pacchioni G.**, Selloni A. ,
"Origin of the different photoactivity of N-doped anatase and rutile TiO_2 "
 Physical Review B, 70, 085116-4 (2004) 2.962
122. Dominguez-Ariza D., Lopez N., Illas F., **Pacchioni G.**, Madey T. E. ,
"Theoretical modeling of photon- and electron-stimulated Na and K desorption from SiO_2 "
 Physical Review B, 69, 075405-7 (2004) 2.962
123. Fanizzi F. P., Margiotto N., Lanfranchi M., Tiripicchio A., **Pacchioni G.**, Natile G. ,
"A molecular tool for measuring the electron-acceptor ability of ligands from crystallographic data",
 European Journal of Inorganic Chemistry, 1705-1713 (2004) 2.482
124. Giordano L., **Di Valentin C.**, Goniakowski J., **Pacchioni G.** ,
"Nucleation of Pd dimers at defect sites of the $\text{MgO}(100)$ surface"
 Phys. Rev. Lett. 92, 096105/1-4 (2004) 7.035
125. Goniakowski J, Noguera C, Giordano L. ,
"Using polarity for engineering oxide nanostructures: Structural phase diagram in free and supported $\text{MgO}(111)$ ultrathin films"

- Phys. Rev. Lett. 93, 215702 (2004) 7.035
126. Ménétrey M., Markovits A., Minot C., **Pacchioni G.** ,
"Formation of Schottky defects at the surface of MgO, TiO₂, and SnO₂: a comparative DFT study"
 J. Phys. Chem. B, 108, 12858-12864 (2004). 3.679
 127. Ménétrey M., Markovits A., Minot C., Del Vitto A., **Pacchioni G.** ,
"FS+ and FS+(OH-) defect centers at the MgO(100) surface: cluster and periodic calculations"
 Surface Science, 549, 294-304 (2004) 2.063
 128. **Pacchioni G.** ,
"Metal nanoclusters on oxide surfaces"
 in: Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, H. S. Nalwa (Ed.), American Scientific Publishers, Stevenson Ranch (CA), 2004, Vol. 5, pp. 399-409
 129. **Pacchioni G., Di Valentin C.,** Dominguez-Ariza D., Illas F., Bredow T., Klüner T., Staemmler V. ,
"Bonding of NH₃, CO and NO to NiO and Ni-doped MgO: a problem for density functional theory"
 J. Phys.: Condensed Matter, 16, S2497-S2507 (2004) 1.757
 130. Ricci D., **Pacchioni G.** ,
"Structure of ultra-thin crystalline SiO₂ films on Mo(112)"
 Physical Review B, 69, 161307-4 (2004) 2.962
 131. Rösch N. , Nasluzov V. A., Neyman K. M., **Pacchioni G.**, Vayssilov G. ,
"Supported metal species and adsorption complexes on metal oxides and in zeolites: Density functional cluster model studies"
 in: Theoretical and Computational Series (J. Leszczynski Ed.), Elsevier, Amsterdam, 2004, p. 367-450.
 132. Wörz A., Judai K., Abbet S., Heiz U., Del Vitto A., Giordano L., **Pacchioni G.** ,
"Chemistry on single atoms: Key factors for the acetylene trimerization on MgO supported Rh, Pd, and Ag atoms"
 Chem. Phys. Lett., 399, 266-270 (2004) 2.438

12 – COMUNICAZIONI A CONGRESSI (ordinate per linea di ricerca)

Linea 1

1. Di Martino D., Galli A., **Martini M., Sibilia E.** ,
Micro Raman spectroscopy por the study of the technology of production of mosaic glass
Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, 2004
2. Galli A., **Martini M., Sibilia E.** ,
Structural properties of lustred ceramics investigated by luminescence: a signature for provenance studies
Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, 2004.
3. Fieni L, Galli A., **Martini M., Montanari C., Sibilia E.** ,
Thermoluminescence and 14C dating of brick structures in S.Lorenzo church in Milano. Late Antique and Medieval phases
Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, Proceedings of the 34th Int. Symposium of Archaeometry, Zaragoza, May 3-7, 2004.

Linea 2

4. **Vedda A.,** Chiodini N., Di Martino D., Fasoli M., **Martini M., Spinolo G., Nikl M., Solovieva N., Baraldi A., Capelletti R.** (presentazione poster):
Rare-earth ion aggregates in sol-gel silica and their influence on optical properties
15th International Conference on Defects in Insulating Materials (ICDIM 2004), July 11-16, 2004, Riga (Latvia).
5. Di Martino D., Krasnikov A., Nikl M., **Vedda A.,** Zazubovich S. (presentazione poster):
Luminescence and vibrational properties of Gd-enriched phosphate glasses
15th International Conference on Defects in Insulating Materials (ICDIM 2004), July 11-16, 2004, Riga (Latvia).
6. Fasoli M., **Vedda A.,** Chiodini N., Di Martino D., **Martini M., Spinolo G.** (presentazione orale):
Structural and optical properties of zn-doped sol-gel silica
5th Symposium "SiO₂, Advanced dielectrics and devices", June 21-23, Chamonix (Francia).

Linea 3

7. Sommariva M., **Catti M., Comotti A.** ,
Alkali Ion Disorder in NASICON Phases by Neutron Diffraction
22nd European Crystallographic Meeting, Budapest, 26-31 August 2004
8. Cazzini E., **Catti M., Ferraris G.** ,
Synthesis, crystallographic and thermal study of the microporous titanosilicate ETS10
22nd European Crystallographic Meeting, Budapest, Hungary, 26-31 August 2004
9. **Comotti A.** (invited oral presentation)
Cooperation of multiple CH...p and p...p interactions to build new supramolecular architectures
Erice, 9-20 giugno 2004, The 35th Course of Crystallography, EuroSummerSchool and NATO School

10. **Comotti A.** (invited oral presentation)
Structure, Dynamics and Diffusion Properties of Molecules confined to Nanochannels
 Gordon Conference GRC on Organic Structures and Properties,
 Les Diableret, Switzerland 10-15 ottobre 2004
11. Sommariva M., Catti M., Comotti A. ,
Alkali Ion Disorder in (Na,Li)₂FeTi(PO₄)₃ and (Na,Li)₂FeZr(PO₄)₃ NASICON Phases by Neutron Diffraction
 Micro- and Mesoporous Mineral Phases, Roma, Accademia dei Lincei, 6-7 December 2004

Linea 5

12. **Scotti R., Canevali C., Mattoni M., Morazzoni F., Krsmanovic R., Polizzi S. ,**
Ce³⁺-doped borophosphosilicate glasses obtained by sol-gel procedure
 IV Workshop Italiano Sol-Gel – Iglesias (Ca), 17 –18/6/2004
13. **Scotti R., Canevali C., Mari C.M., Mattoni M., Morazzoni F., Nodari L., Ruffo R., Russo U. ,**
Sensing mechanism of NO on nanocrystalline Ru, Pd, Pt -doped SnO₂: Electron Paramagnetic Resonance, Mössbauer and electrical study
 Material Research Society 2004 Fall Meeting - Boston (USA), 29/11 - 3/12/2004
14. **Scotti R., Canevali C., Mattoni M., Morazzoni F., Polizzi, S. Krsmanovic R., Bettinelli M., Speghini A. ,**
Ce³⁺-doped borophosphosilicate glasses obtained by sol-gel procedure
 Material Research Society 2004 Fall Meeting - Boston (USA), 29/11 - 3/12/2004

Linea 6

15. **Moret M. ,**
Scanning probe microscopy: a new stimulating tools for crystal growers
 conferenza ad invito, Milan Research Centre for Industrial and Applied Mathematics,
 Dipartimento di Matematica "F. Enriques", Università degli Studi di Milano, 3 maggio 2004,
 Milano.
16. **Moret M., Campione M., Ruggerone R., Tavazzi S. ,**
Crescita di Cristalli Singoli di materiali organici sulla superficie dell'acqua
 XXXIV Congresso Nazionale Associazione di Cristallografia, Roma, September, 26-29, 2004

Linea 9

17. Collini M., D'Alfonso L., Chirico G., Nardo L., Baldini G., Diaspro A., Magrassi R., Ramoino P., **Abbotto A., Beverina L., Pagani G. ,**
Dimethyl-pepep: a new DNA stainer for Two-Photon Excitation Cellular Imaging
 Biophysical Society 48th Annual Meeting, Febbraio 2004, Baltimore (MD).
18. **Abbotto A. ,**
Processi Ottici Non-Lineari e Multifotonici: Verso le Tecnologie Molecolari e la Nanochimica
 conferenza ad invito, Dipartimento di Chimica Inorganica, Metallorganica e Analitica, Unità di Ricerca di Milano dell'INSTM e Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari del CNR, Giugno 2004, Milano.

19. **Abbotto A. ,**
Processi Ottici Non-Lineari e Multifotonici: Verso le Tecnologie Molecolari e la Nanochimica
 conferenza ad invito, Scuola Normale Superiore di Pisa, Giugno 2004, Pisa.
20. **Abbotto A., Archetti G., Bradamante S., Pagani G. A., Wortmann R. ,**
Pyridoneimines and pyridonemethides systems as organic photorefractive materials
 Nano.org – La Chimica Organica e le Nanotecnologie, Aprile 2004, Venezia-Marghera
21. **Abbotto A., Bradamante S., Morone M., Pagani G. A. ,**
Purine based quadrupolar NLO-phores
 Nano.org – La Chimica Organica e le Nanotecnologie, Aprile 2004, Venezia-Marghera.
22. **Abbotto, A. ,**
Towards nanochemistry and molecular technologies: nonlinear optical transmission and multiphoton processes
 Nano.org – La Chimica Organica e le Nanotecnologie, Aprile 2004, Venezia-Marghera.
23. **Abbotto A., Archetti G., Bradamante S., Pagani G. A, Wortmann R.**
Pyridoneimines and pyridonemethides systems as organic photorefractive materials

Linea 10

24. **Rizzo F., Papagni A. , Meinardi F., Tubino R., Ottonelli M., Musso G.F. e Dellepiane G. ,**
Novel lanthanide complexes for visible and IR emission
 21st E-MRS Spring Meeting (Symposium F) - Strasbourg (France), 24-28 Maggio 2004
25. **Papagni A. ,**
Novel lanthanide complexes for visible and IR emission
 I“Nano.org” meeting - Venezia, 1-4 Aprile 2004
26. **Miozzo L., Del Buttero P., Girotti C., Moret M., Papagni A., Sassella A.**
Synthesis of Complexes of Tetrafluoro Hydroxy-Acridine for Solid State Emitting Systems
 Nano.org – La Chimica Organica e le Nanotecnologie, Aprile 2004, Venezia-Marghera.

Linea 11

27. **Sozzani P. ,**
High Melting Adducts of Macromolecules in Aromatic Nanochannels
 56th Southeast Regional Meeting of the American Chemical Society, United States, NC
 November 10-13 (2004).
28. **Sozzani P., Simonutti R. ,**
Nanostructured and Functional Polymer-Based Materials and Nanocomposites
 NoE (Network of Excellence Europeo) NANOFUN-POLY
29. **Sozzani P., Bracco S., Comotti A., Simonutti R. ,**
Polymorphs of Magnesium Dichloride with Ethanol: Multidimensional MAS NMR study
 Erice, 9-20 giugno 2004, The 35th Course of Crystallography, EuroSummerSchool and NATO School.
30. **Sozzani P., Simonutti R., Bracco S. ,**
Structure and Dynamics of New Supramolecular Architectures
 GIDRM Alghero (Sardegna), 21 –24 settembre 2004

31. **Sozzani P. ,**
Gordon Research Conference on Organic Structures and Properties
Les Diableret, Switzerland 10-15 ottobre 2004
32. **Sozzani P. ,**
Solid State NMR of Polymers
MASTEM, Ferrara 2 marzo 2004
33. **Sozzani P., Mauri M., Simonutti R. ,**
Continuos flow Xe-OPSE NMR applied to the characterization of porous materials
Micro- and Mesoporous Mineral Phases, Rome 6-7 dicembre 2004.
34. **Sozzani P., Simonutti R. ,**
Nanostructured and Functional Polymer-Based Materials and Nanocomposites
NoE (Network of Excellence Europeo) NANOFUN-POLY
35. **Bracco S. ,**
Solid state NMR applied to Polymeric Materials
Scuola di Risonanza Magnetica Nucleare allo Stato Solido Torino 30 agosto – 3 settembre 2004
36. **Simonutti R. ,**
HPPD Cross Polarization
Scuola di Risonanza Magnetica Nucleare allo Stato Solido Torino 30 agosto – 3 settembre 2004
37. **Sozzani P. ,**
Regimes of motion by Solid State NMR
Scuola di Risonanza Magnetica Nucleare allo Stato Solido Torino 30 agosto – 3 settembre 2004
38. **Sozzani P., Ferretti L., Simonutti R., Bracco S., Comotti A.**
CH $\cdots$ p Interactions to Stabiize Polymers in Aromatic Nanochannels
X Scuola Nazionale di Scienza dei Materiali, Setri Levante 8 ottobre 2004.

Linea 12

39. **Pizzini S. ,**
Rod-like defects in CZ-Si investigated by spin resonance and photoluminescence spectroscopies
EDS 2004 Mosca
40. **Acciarri M. ,**
Properties of nanocrystalline silicon films grown by LEPECVD for photovoltaic applications
SCCELL2004 International Conference May 13-13-15 may , 2004, Badajoz, SPAIN
41. **Binetti S. ,**
(invited) “Nanocrystalline silicon films grown by Low Energy Plasma Enhanced Chemical Deposition for optoelectronic application “
Polyse 2004 International Conference on Polycrystalline Semiconductors September 5 to 10 , 2004 University of Postdam Germany
42. **Le Donne A. ,**
Electrical and optical characterization of electron irradiated X rays detectors based on 4H-SiC epitaxial layers
Presentazione orale all'INFM Si Workshop 2004 (Genova)

Linea 14

43. **Tavazzi S.**, Campione M., Laicini M., **Papagni A.**, **Sassella A.**, Spearman P., Trabattoni S. ,
Directional dispersion in quaterthiophene single crystals and oriented thin films
6th International Conference on Excitonic Processes in Condensed Matter, Cracow (Poland), 6-9 July, 2004
44. Campione M., **Sassella A.**, **Moret M.**, Raos G., Marcon V. ,
The role of desorption on the surface dynamics of molecular organic thin films
8th European Conference on Surface Crystallography and Dynamics, Segovia (Spain), 18-21 July 2004.
45. Laicini M., Spearman P., Tavazzi S., Raimondo L., Miozzo L., **Moret M.**, **Borghesi A.** ,
Microscopic Calculation of Axial Dispersion for Quaterthiophene Crystals
EXCON'04, Cracow (Poland), July 6-9, 2004
46. Tavazzi S., Campione M., Laicini M., **Papagni A.**, **Sassella A.**, Spearman P., Trabattoni S. ,
Directional Dispersion in Quaterthiophene Single Crystals and Oriented Thin Films
EXCON'04, Cracow (Poland), July 6-9, 2004
47. **Sassella A.**, Campione M., **Borghesi A.**, Goletti C., Bussetti G., Chiaradia P. ,
New insights on the growth process of molecular thin film by organic molecular beam epitaxy
INFMeeting, Genova, Giugno 8-10, 2004
48. Tavazzi S., **Borghesi A.**, Campione M., **Papagni A.**, **Sassella A.**, Spearman P. ,
Absorption and propagation of light in quaterthiophene crystals
International Workshop on Organic molecular solids: excited electronic states and optical properties, Bad Honnef (Germany), May 17-19, 2004. Symposium EE: Organic/Inorganic Hybrid materials
49. Goletti C., Bussetti G., Chiaradia P., **Sassella A.**, **Borghesi A.** ,
In situ optical monitoring of organic film growth by Organic Molecular Beam Deposition
IVC16/ICSS12/NANO8, Venezia, Giugno 2004
50. Laicini M., Spearman P., Raimondo L., Tavazzi S. ,
Microscopic Calculation of Dielectric Tensor of Quaterthiophene Crystal
WE-Heraeus Seminar, Bad Honnef (Germany), May 17-19, 2004
51. Tavazzi S., Spearman P., **Borghesi A.**, Campione M., Laicini M., Miozzo L., **Moret M.**,
Papagni A., Raimondo L., **Sassella A.**, Trabattoni S. ,
Positive and Negative Refraction, Forward and Backward Travelling Waves in Anisotropic Organic Crystals
WE-Heraeus Seminar, Bad Honnef (Germany), May 17-19, 2004

Linea 16

52. **Montalenti F.** ,
Three-dimensional Ge islands on Si(001): interplay between kinetics and thermodynamics in the pyramid-to-dome transition
American Physical Society (APS) March Meeting, Montreal (CA) 22-26 March 2004
53. **Montalenti F.** ,
Simple systems, complex kinetics: Accurate, long time-scale dynamics at metal surfaces
American Physical Society (APS) March Meeting, Montreal (CA) 22-26 March 2004

54. **Miglio L. ,**
Kinetics and thermodynamics at the Ge(105) surface: theory and consequences on Ge-dot growth on Si(001)
Materials Reserach Society (MRS) Fall Meeting, Boston (MA, USA), Novembre 29th-December 3rd 2004
55. **Miglio L. ,**
Atomistic modeling and experimental observations of simultaneous plastic and elastic relaxation in 3D-dislocated Ge islands on Si(001)
Materials Reserach Society (MRS) Fall Meeting, Boston (MA, USA), Novembre 29th-December 3rd 2004

Linea 17

56. **Bernasconi M. ,**
Electron-Phonon interaction in new forms of carbon
(Invited)“205th Meeting of The Electrochemical Society”, San Antonio (USA) maggio 2004.
57. **Bernasconi M. ,**
Ab-initio simulation of complex chemical reactions at surfaces
(Invited)12th International Vacuum Conference, Venezia, giugno 2004.

Linea 18

58. **Brivio G.P. ,**
An ab initio treatment of adatom Auger decays,
NANOEXC2004CONFERENCE Acquaafredda di Maratea (PZ) (19/23-09-2004).
59. **Trioni M.I., Caravati S., Brivio G.P., Floreano L., Bruno F. e Morgante A. ,**
Selectivity of Auger decays to the surface environment,
Twelfth Users' Meeting of ELETTRA, ICTP Miramare-Trieste (26/28-10-2004).
60. **Trioni M.I., Butti G., Bonini N. e Brivio G.P. ,**
Metastable helium spectroscopy on simple metals: comparison between low and high work function substrates,
INFMeeting, Genova, (8-10 giugno 2004).
61. **Caravati S., Trioni M.I. e Brivio G.P. ,**
Selectivity of Auger decays to the local environment
INFMeeting, Genova, (8-10 giugno 2004).
62. **Caravati S., Trioni M.I. e Brivio G.P. ,**
Selectivity of Auger decays to the local environment
International Conference on Surface Science (ICSS)", Venezia, 28 giugno-2 luglio 2004
63. **Trioni M.I e Butti G. ,**
Theory of metastable deexcitation spectroscopy on simple metals: ab-initio versus phenomenological approach
Conference on Atomic Collisions on Surfaces (ICACS)", Genova, 2-9 luglio 2004

Linea 19

64. **Pacchioni G. ,**
Nanoclusters on oxide thin films: well defined model systems of complex supported metal catalysts(invited), Département de Chimie Physique, Université de Geneve, Ginevra (Svizzera), 26 Aprile 2004.

65. **Pacchioni G. ,**
CO on MgO: an hystorical perspective of 20 years of interplay between theory and experiment
(invited), Département de Chimie, Université de Fribourg, Friburgo (Svizzera), 27 Aprile 2004.

66. **Pacchioni G. ,**
SiO₂, TiO₂ and MgO thin films: model oxides of supported metal atoms and clusters
(invited), X International Conference of Theoretical Aspects of Catalysis, Tropea, 28 Giugno 2004.

67. **Pacchioni G. ,**
Ground and excited state properties of point defects in insulators: problems, results, and some general lessons
(invited) Département de Chimie et Biochimie, Université de Bern, Berna (Svizzera), 29 Aprile 2004.

68. **Pacchioni G. ,**
Metal atoms and clusters on oxide thin films: models of supported catalysts
(invited), 11th Conference on Vibrations at Surfaces, Bar Harbor, Maine (USA), 6-10 Giugno 2004.

69. **Pacchioni G. ,**
Metal atoms and clusters on oxide surfaces in UHV: model systems of supported catalysts
(invited), 16th International Vacuum Congress, Venezia, 1 Luglio 2004.

70. **Pacchioni G. ,**
Ground and excited state properties of intrinsic and extrinsic point defects in silica and boron-phosphorous silicate glasses from cluster model calculations
(invited), CECAM Workshop on Atomic processes at semiconductor-oxide interfaces in microelectronic devices, Lione (Francia), 14 Settembre 2004.

71. **Pacchioni G. ,**
Metal atoms and clusters on MgO thin films: tunig reactivity atom by atom
(invited), Département de Chimie Physique, Université de Geneve, Ginevra (Svizzera), 30 Aprile 2004.

72. **Pacchioni G. ,**
Supported metal atoms and clusters on MgO, SiO₂, and TiO₂ thin films
(invited), Ecole Polytechnique Federale del Lausanne, Losanna (Svizzera), 28 Aprile 2004.

73. **Pacchioni G. ,**
Metal atoms and clusters on oxide thin films: model systems of supported catalysts
(invited), Workshop on Computational Electrochemistry, Santorini (Grecia), 27 Settembre 2004.

74. **Di Valentin C. ,****Electron rich surfaces: from solvated electrons in ionic oxides to inorganic electrides**

(selected), International Congress on Electronic Structure Simulations of Nanostructures-Jyväskylä (Finlandia), 18-21 Giugno 2004

75. **Pacchioni G. ,****Supported metal atoms and clusters on MgO, SiO₂ and TiO₂ thin films**

(invited), International Congress on Electronic Structure Simulations of Nanostructures, Jyväskylä (Finlandia), 18-21 Giugno 2004.

76. **Pacchioni G. ,****Supported metal atoms and clusters on MgO, SiO₂ and TiO₂ thin films**

(invited), International Workshop on Transition metal oxides – clusters, surfaces, solids – structures, dynamics, reactivity, Berlino (Germania), 22 Marzo 2004.