

Allegato 7

NANOFABER – NANO-FABbricazione Emilia-Romagna

Target Settoriale: Nanofabbricazione

Indice

Strutture	3
Struttura 1: ISMN (CNR) - Sezione di Bologna	4
Struttura 2: ISOF (CNR) - Istituto per lo Sintesi Organica e Fotochimica.....	11
Struttura 3: IMM (CNR) - Sezione di Bologna.....	23
Struttura 4: DCFI - Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica (UNIBO).....	30
Struttura 5: Dipartimento di Chimica "G. Ciamician" (UNIBO)	37
Struttura 6: INFM - National Research Center nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S ³) ...	47
Struttura 7: SACMI Imola S.p.A	53
Struttura 8: UHV - Comparto UHV Parma	55
Struttura 9: Organic Spintronics Srl.....	56

Strutture

CNR Area di Ricerca di Bologna

ISMN - Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati - Sezione di Bologna

ISOF - Istituto per lo Sintesi Organica e Fotochimica

IMM - Istituto per la Microelettronica e i Microsistemi - Sezione di Bologna

Università di Bologna

DCFI - Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica

CIAM - Dipartimento di Chimica "G. Ciamician"

INFM - National Research Center nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S³)

SACMI IMOLA

UHV - Comparto UHV Parma

OS - Organic Spintronics Srl

Struttura 1: ISMN (CNR) - Sezione di Bologna

CNR Area di Ricerca di Bologna

ISMN - Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati - Sezione di Bologna

Indirizzo: Via P. Gobetti, 101 – 40129 Bologna

Responsabile di Sezione: Ing. Carlo Taliani

Attività

L'Istituto è un centro di eccellenza europeo per le nanotecnologie. E' parte dell'ISMN con sede a Roma, del quale coordina due linee tematiche di ricerca:

- ◆ Nanotecnologie di Materiali Multifunzionali
- ◆ Nanostrutture Organiche per l'Elettronica, l'Optoelettronica e la Fotonica

Gli specifici temi di ricerca in cui l'istituto è impegnato sono i seguenti:

- ◆ **TEMA 1** - Crescita di film sottili e nanostrutture di materiali multifunzionali
- ◆ **TEMA 2** - Funzionalizzazione chimica di superfici ed interfacce
- ◆ **TEMA 3** - Patterning e nanofabbricazione bottom-up
- ◆ **TEMA 4** - Dispositivi organici ed ibridi, ed integrazione in materiali di interesse tecnologico
- ◆ **TEMA 5** - Sintesi di nanotubi e film sottili di ossidi misti
- ◆ **TEMA 6** - Metrologia su scala nanometrica
- ◆ **TEMA 7** - Sviluppo di prototipi di macchine per fabbricazione e strumenti per nanoscala

Laboratori/strumentazioni già disponibili presso la struttura

- ◆ Microscopi a scansione di sonda con tutte le tecniche in ambiente ed UHV per la nanofabbricazione, manipolazione e metrologia
- ◆ Laboratorio per la litografia 2D e 3D con risoluzione 100 nm su materiali fotoresistivi e sonde ottiche nanoscopiche confocali per la nanofabbricazione confocale multifotonica
- ◆ Laboratorio di crescita per la sublimazione in ultra-alto vuoto in regime di deposizione per fasci molecolari organici (OMBD) e *channel spark ablation* di film inorganici e nanotubi
- ◆ Laboratorio di prototyping: replica molding e fabbricazione di matrici per deposizione metalli ed ossidi su maschere fatte da terzi
- ◆ Laboratorio di nanoimprinting, nanolitografia. Sono disponibili: tecniche di stampa a contatto, auto-organizzazione anche assistita da stampi, crescita su template, presse per stampa a contatto e pressione fino a 2" di diametro, posizionatori di stampi con accuratezza di nanometro
- ◆ Laboratorio sorgenti fotoniche e luminose nanometriche. Sono disponibili matrici 2D di sorgenti OLED, strutture OLET, dispositivi ibridi/spintronici e sistema spettroscopico confocale
- ◆ Laboratorio ibridi/organici spintronica dove si possono produrre giunzioni ibride organico/inorganico, memorie non volatili, transistor spin-polarizzati. Nel laboratorio sono disponibili sistemi di deposizione ibrido/organico e di caratterizzazione magneto-ottica
- ◆ Laboratorio spettroscopia vibrazionale con micro-Raman interferometri

Le principali pubblicazioni scientifiche inerenti tutte le tematiche

- ◆ M. Muccini, M. Murgia, F. Biscarini, C. Taliani "Energy Transfer Tailoring in Conjugated Thin Films", *Adv. Mat.*, 13 ,p. 355, 2001
- ◆ M. Cavallini, R. Lazzaroni, R. Zamboni, F. Biscarini, D. Timpel, F. Zerbetto, G. J. Clarkson, D. A. Leigh "Conformational Self-Recognition as the Origin of Dewetting in Bistable Molecular Surfaces", *J. Phys. Chem. B* 105, pp. 10826 –10830, 2001
- ◆ M. Cavallini, M. Murgia, F. Biscarini "Patterning a Conjugated Molecular thin film at submicron scale by modified micro-transfer molding", *Nano Letters* 1, 193, 2001
- ◆ F. Biscarini, M. Cavallini, D. A. Leigh, S. León, S. J. Teat, J. K. Y. Wong, F. Zerbetto "The Effect of Mechanical Interlocking on Crystal Packing: Predictions and Testing", *Journal of the American Chemical Society* 124, pp. 225-233, 2002

- ◆ M. Cavallini, M. Murgia, F. Biscarini "Direct Patterning of Tris-(8-Hydroxyquinoline)-Aluminum (III) Thin Film at Submicron Scale by Modified Microtransfer Molding", *Mater. Sci. and Eng. C* 19, pp. 275-278, 2002
- ◆ C. Clavijo Cedeño, J. Seekamp, A. P Kam, T. Hoffmann, S. Zankovych, C.M. Sotomayor Torres, C. Menozzi, M. Cavallini, M. Murgia, G. Ruani, F. Biscarini, M. Behl, R. Zentel e J. Ahopelto "Nanoimprint Lithography For Organic Electronics", *Microelectronic Engineering* 61-62, pp. 25-31, 2002
- ◆ M. Cavallini, F. Biscarini, R. Zamboni, F. Zerbetto, A. F. Morales, D. A. Leigh "Spontaneous Fabrication of Microscopic Arrays of Rotaxane Structures with Sub-Micrometer Lengthscales", *Nano Letters* 2, pp. 635-639, Maggio 2002
- ◆ M. Brinkmann, S. Graaf e F. Biscarini "The mechanism of non-random pattern formation of polar conjugated molecules in a partial wetting regime", *Phys. Rev. B*, Novembre 2002
- ◆ F. Biscarini, C. Taliani, J. Chen, R. Komanduri "Nanomanufacturing and Processing-Research, Education, Infrastructure, Security, Resource", *Journal of Manufacturing Science and Engineering* 124, pp. 489-490, 2002
- ◆ M. Cavallini, F. Biscarini, S. Léon, F. Zerbetto, G. Bottari, D. A. Leigh "Information storage using supramolecular surface patterns", *Science* 299, p. 531, 2003
- ◆ D. Maspoch, D. Ruiz-Molina, N. Dominguez, K. Wurst, M. Cavallini, F. Biscarini, J. Tejada, C. Rovira e J. Veciana, "A Sponge-like Magnetic Nanoporous Molecular Material Exhibiting Selective Solvent-Induced Magneto-Mechanical Properties", *Nature Materials* 2, p.190, 2003
- ◆ R. Buzio, C. Boragno, F. Buatier de Mongeot, F. Biscarini, U. Valbusa "The contact mechanics of fractal surfaces, *Nature Materials* 2, pp. 233-236, 2003
- ◆ M. Cavallini, F. Biscarini "Nanostructuring Organic Materials by Lithographically Controlled Wetting", *Nano Letters*, June 2003
- ◆ M. Melucci, M. Cavallini, M. Gazzano, G. Barbarella, F. Biscarini, P. Maccagnani, P. Ostoja "Solid-State supramolecular organization of semiconductor a-quinquethiophene", *J. Amer. Chem. Soc.*, June 2003
- ◆ F. Biscarini "Nanolitografia: un nuovo approccio al controllo delle proprietà dei materiali", *La Chimica e l'Industria* 82, pp. 307-311, 2000
- ◆ F. Biscarini "I pionieri dell'optoelettronica plastica" Articolo Speciale su Premio Italgas per la Ricerca e l'Innovazione Tecnologica 2001, *La Chimica e l'Industria*, Febbraio 2002
- ◆ F. Biscarini, "Nanotecnologie per il transistor 'verde', PROTECTA: ambiente, innovazione sviluppo sostenibile (Rivista del Ministero per L'Ambiente), pp. 1-2, Settembre 2002
- ◆ E. Arisi, I Bergenti, V. Dediu, M. A. Loi, M. Muccini, M. Murgia, G. Ruani, C. Taliani, R. Zamboni "Organic light emitting diodes with spin polarized electrodes", *Journal Applied Physics*, 93, pp.76-82, 2003
- ◆ R. Capelli, M. A. Loi, C. Taliani, H. B. Hansen, M. Murgia, G. Ruani, M. Muccini, P.W. Lovenich, W.J. Feast "A potential J aggregate molecular system: crystal packing and optical properties of 4,4'-bis (2,3,4,5,6pentafluorostyryl)stilbene", *Synthetic Metals* 139, 909, 2003
- ◆ R. Capelli, C. Taliani, M. Muccini, "Modeling of the photophysical properties of alpha-sexithiophene thin films", *Synthetic Metals* 139, 691, 2003

- ◆ P. Melpignano, S. Sinesi, G. Rotaris, M. Antonipieri, F. Cicoira, M. A. Loi, M. Muccini, R. Zamboni, M. T. Gale, S. Westenhofer "Optical coupling of flexible microstructured organic light sources for automotive applications", *Synthetic Metals* 139, 913, 2003
- ◆ M. A. Loi, E. Da Como, R. Zamboni, M. Muccini "Nanoscale femtosecond spectroscopy for materials science and nanotechnology", *Synthetic Metals*, 139, 687, 2003
- ◆ L. Cademartiri, A. Sutti, G. Calestani, C. Dionigi, P. Nozar, A. Migliori "Flux-Assisted Self-Assembly of Monodisperse Colloids", *Langmuir*, 19, 7944, 2003
- ◆ C. Taliani "Nano-structured organic thin films: electronic structure, processing and electronic devices", *Proceedings of the international School of physics "Enrico Fermi"*, Course CXLII, ed. by V. M. Agranovich and G. C. La Rocca, IOS Press, Amsterdam, 2002
- ◆ P. Nozar, D. Di Domenico, C. Dionigi, M. Losurdo, M. Muccini, and C. Taliani, "Observation of multiple stop-bands in Photonic Band Gap structures doped by organic dyes", *Adv. Mat.* 14, 1023, 2002
- ◆ C. Taliani, V. Dediu, F. Biscarini, M. Cavallini, M. Murgia, G. Ruani, P. Nozar "Organic/Inorganic Hybrid Spin Valve: a Novel Approach to Spintronics", *Phase Transitions*, 75, No. 7-8, 1049-1058, 2002
- ◆ V. Dediu, M. Murgia, F.C. Maticotta, C. Taliani, S. Barbanera "Room temperature spin polarized injection in organic semiconductor", *Solid State Communications* 122, pp.181-184, 2002
- ◆ V. Dediu, M. Murgia, S. Barbanera, C. Taliani "Spin Valve Effect in Hybrid Organic-Inorganic Device", in "Electronic Properties of Molecular Nanostructures" Eds. H. Kuzmany, J. Fink, M. Mehring and S. Roth, AIP Conference, New York, 591, 548, 2001
- ◆ C. Taliani, F. Biscarini, E. Lunedei, P. Mei, M. Muccini, M. Murgia, M. Schneider, G. Lanzani "Nanostructured Organic Thin Films: Electronic Energetics and Devices", *Int. J. Mod. Phys. B* 15, 3722, 2001

In aggiunta, si vuole sottolineare che ISMN-BO ha pubblicato su riviste internazionali negli ultimi 5 anni oltre 300 lavori. Questa vivace attività di divulgazione è anche testimoniata dai seguenti numeri: circa 50 articoli su quotidiani nazionali e periodici, 6 interviste radiofoniche, 1 televisiva su RAI3, 10 articoli su riviste su web USA, UK, Germania; 5 articoli su riviste tecniche.

Brevetti

ISMN BO possiede un portafoglio di oltre 15 brevetti nell'ambito delle nanotecnologie, di cui cinque prodotti nell'ultimo anno. Questi ultimi sono elencati a seguire:

- ◆ "Procedimento per il conferimento e controllo su scale micro- e nanometriche dell'anisotropia di proprietà strutturali, elettriche, ottiche, ed optoelettroniche, in film sottili di materiali coniugati", domanda di brevetto MI2001A 002075, 8/10/2001
- ◆ "Procedimento per la fabbricazione ed il controllo mediante stampaggio su scale micro- e nanometriche di strutture e motivi di sostanze solubili e colloidali con riduzione delle dimensioni dei motivi dello stampo", domanda di brevetto MI2002A001961, 16/9/2002

- ◆ Domanda di estensione del brevetto al punto 1, depositata in data 8/10/2002
- ◆ "Control a escala nanométrica de la distribución espacial, forma y tamaño de películas delgadas de moléculas orgánicas conjugadas mediante la fabricación de nano-estructuras de óxido de silicio", brevetto congiunto con CSIC, depositato presso Oficina Española de Patentes y Marcas, numero de solicitud 200300565, 7/03/2003
- ◆ "Procedimento per lo stoccaggio di informazione ad ultra-alta densità su film sottili di molecole bistabili" domanda di brevetto BO2002/12/4, 4/12/2002

I principali progetti passati e presenti inerenti tutte le tematiche

Nella tabella seguente sono elencati i progetti sviluppati dall'Istituto riguardo la tematica. In particolare per ogni progetto sono descritti il ruolo ricoperto dal centro nell'attività di ricerca, l'oggetto della ricerca e le collaborazioni nazionali ed internazionali attivate tramite detto progetto.

Progetti Attivi	Oggetto della Ricerca	RUOLO	Collaborazioni
EU-RTD Growth MONA LISA	Crescita, fabbricazione e studio di transistor organici su scala nanometrica	Coordinatore	Philips Research Labs Universität Würzburg (D) CSIC di Madrid - Consejo Superior De Investigaciones Científicas - (E) Universität Wuppertal (D) University of Faro (P) University of Lodz (Nova Gorica)
EU-FET- IST – "ILO"	Iniezione laser in sistemi organici	Coordinatore	IMEC-Interuniversity Microelectronics Center(B) IBM ZRL - Zurich Research Laboratory (CH) Université Luis Pasteur (F) Universität Darmstadt (D)
EU-RTD-Growth "STEPLD"	Display a OLED con altissima efficienza	Partner	CDT - Cable Design Technologies (UK) University of Cambridge (UK) Philips (NL) Covion - Organic Semiconductors GmbH (D) Materia Nova - Research centre (B)

Progetti Attivi	Oggetto della Ricerca	RUOLO	Collaborazioni
EU-IST-FET- "PHOENIX"	Ingegnerizzazione fotonica di materiali non lineari ibridi/organici nanostrutturati per interruttori ottici ultraveloci	Partner	RWTH- Aachen University (NL) CEA - Commissariat à l'Energie Atomique (F) Saclay Scientipôle (F) AMO GmbH (D) IBM ZRL - Zurich Research Laboratory (CH)
EU SPINOSA	Iniezione di spin polarizzati in nanostrutture e dispositivi	Partner	Universität Würzburg (D) University of Nijmegen (NL) University of Warsaw (P)
EU - Eureka 2541- "FOLIA"	Illuminatori organici flessibili per il mercato automotive	Core Partner	Seima Italiana spa (I) CSEM Swiss Center for Electronics and Microtechnology, Inc. (CH) 3D AG (CH) Exitech Ltd. (UK) CRP
EU-RTN-EMMMA	Moti molecolari elettromeccanici in architetture di rotassani	Partner	University of Edinburgh (SC) Università di Bologna (I) Universiteit van Amsterdam (NL) Groingen University
EU-RTN-LAMINATE	Materiali coniugati	Partner	University of Cambridge (UK) University of Mons (B) Eindhoven University (NL) Linköping University (S) Philipps-Universität Marburg (D)
ESF SONS FUNSMARTS	Patterning di magneti molecolari	Partner	CSIC di Barcellona - Consejo Superior De Investigaciones Científicas (E) Università di Trieste (I) Universität Karlsruhe (D) University of Stuttgart (D) EPFL - Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (CH)
FIRB NOMADE	Processi di fabbricazione bottom-up ed auto-organizzazione	Responsabile di Unità	INFN-NNL di Lecce (National Nanotechnology Laboratory) NEST-SNS di Pisa INFN S3 Modena
FIRB	Nanotecnologie e nanodispositivi per la società dell'informazione	Responsabile di Unità	NEST Parma IMEM-CNR (Istituto Materiali per Elettronica e Magnetismo) INFN-NNL di Lecce (National Nanotechnology Laboratory) INFN-CNR IESS-CNR (Roma) ISMN-CNR (Roma)

Progetti Attivi	Oggetto della Ricerca	RUOLO	Collaborazioni
FIRB	Microsistemi basati su materiali innovativi strutturati su scala nanoscopica	Responsabile di Unita'	Università di Parma Università di Genova IMEM-CNR (Parma) ICMAT-CNR (Roma)
Progetto FISR	Materiali e processi per i sistemi nanostrutturati	Partner	ISMN-CNR (Roma) ISMN-CNR (Palermo) Università di Torino - Dipartimento di Chimica IFM
Progetto FISR	Nanostrutture ibride organico-inorganico per la spintronica	Partner	Università di Parma FAM-CNR (Pisa) LENS-FI
Legge 95/95 Nanotecnologie SCRIBA	Sviluppo e costruzione di strumentazione per manipolazione su scala nanometrica in ambiente controllato	Coordinatore	Comparto HVP Parma APE Research (Trieste)
STRP 505483-1 SPANG	Spark Ablation for Nanotube Growth	Partner	MPI-FKF Max-Planck-Institute Stuttgart (D) SIN (Stuttgart) Organic Spintronics (Bologna) AT&S (Laoben) SNPC - Shanghai Nanotechnology Promotion Center YAN (Shanghai)
NANOSPARK	Sviluppo di nuove attrezzature per la produzione di nano tubi basata sull'ablazione elettronica mediante tecnica channel spark	Partner	Tecna Srl SVT Sineurop Nanotech GmbH (D) IIBE Konarka Technologies, Inc. Shanghai Yangtze Nanomaterials CNR Comparto HVP Parma
Contratto Industriale	Materiali ossianionici innovativi per l'abbattimento di sostanze inquinanti	Partner	Süd Chemie MT S.r.l. IMM-CNR (Bologna) Università di Parma CSSRCC-CNR (Padova) Università di Bologna - Dip. di Chimica Industriale e dei Materiali Consorzio Catania Ricerche Automobili Lamborghini ENEL ITALCEMENTI CIRC

Possibili link per informazioni

◆ <http://www.ism.bo.cnr.it/>

Struttura 2: ISOF (CNR) - Istituto per lo Sintesi Organica e Fotochimica

CNR Area di Ricerca di Bologna

ISOF - Istituto per lo Sintesi Organica e Fotochimica

Indirizzo: Via P. Gobetti, 101 – 40129 Bologna

Direttore: Dr. Giancarlo Seconi

Attività

L'Istituto ISOF è impegnato nelle seguenti attività di ricerca:

- ◆ sviluppo di nuovi prodotti e processi con particolare riguardo a metodologie innovative nella sintesi organica, nella caratterizzazione spettroscopica, nell'elaborazione di modelli teorici e nello studio della reattività;
- ◆ studio del comportamento dei sistemi molecolari complessi (sistemi supramolecolari e nuovi materiali) e processi bio-organici.

Le tematiche di ricerca attive all'interno dell'Istituto, coerenti con il focus tematico del net-lab NANOFABER, possono essere riassunte nei seguenti punti:

- ◆ **TEMA 1** - Sintesi di molecole e polimeri multifunzionali da molecular design e loro organizzazione in nanostrutture funzionali
- ◆ **TEMA 2** - Manipolazione di singole molecole e nanostrutture
- ◆ **TEMA 3** – Fabbricazione di dispositivi organici optoelettronici (LED e celle solari organiche)

Tematica 1: Sintesi di molecole e polimeri multifunzionali da molecular design e loro organizzazione in nanostrutture funzionali

Questi studi verranno sviluppati dalla Sezione RISOLINO (Ricerche e Iniziative industriali basate sulla Sintesi di nuove molecole organiche fotoluminescenti e sul loro assemblaggio in nanostrutture funzionali) la cui attività consiste nella sintesi di materiali a base tiofenica per applicazioni nel campo dell'optoelettronica e della bio-diagnostica. In particolare, è stata sviluppata la sintesi di oligomeri del tiofene con alto grado di purezza mediante un originale metodo a basso impatto ambientale in quanto privo di solventi e basato su di un processo assistito da micro-onde. Gli oligomeri del tiofene sono materiali semiconduttori che possono presentare alte efficienze di fotoemissione sia nella fase liquida che in quella solida. L'emissione di fotoluminescenza può essere controllata in frequenza ottenendo colori di luce emessa nell'intero campo visibile. Tale proprietà è ottenuta mediante il controllo della dimensione dell' oligomero impiegato e del tipo di funzionalizzazione. In base al gruppo funzionale inserito nello scheletro aromatico si possono ottenere oligomeri tiofenici adatti per la fabbricazione di transistor a film sottile, diodi elettroluminescenti, lasers, oppure marcatori per biopolimeri. Attualmente, la sezione è impegnata nella preparazione di polimeri di oligomeri. Di tali sistemi si possono controllare le proprietà ottiche ed elettriche, morfologiche e di self-assembling su lunghezze di scala multiple mediante la progettazione specifica delle componenti. La sezione ha una varietà di collaborazioni nazionali ed internazionali attive con chimici, fisici, ingegneri e biochimici.

Principali pubblicazioni scientifiche

- ◆ M. Melucci, M. Cavallini, M. Gazzano, G. Barbarella, F. Biscarini, P. Maccagnani, P. Ostoja "Multiscale self-organization of organic semiconductor a-quinquethiophene", J. Am. Chem. Soc., 125, pp.10266-10274, 2003
- ◆ M. Anni, S. Lattante, R. Cingolani, G. Gigli, G. Barbarella, L. Favaretto. "Far-field emission and feedback origin of random lasing in oligothiophene dioxide neat films", Appl. Phys. Lett. 83, pp.2754-2756, 2003
- ◆ M. Melucci, G. Barbarella, G. Sotgiu "Solvent-free, microwave assisted synthesis of thiophene oligomers via Suzuki coupling", J. Org. Chem., 67, pp.8877-8884, 2002
- ◆ D. Pisignano, M. Anni, G. Gigli, R. Cingolani, M. Zavelani-Rossi, G. Lanzani, G. Barbarella, L. Favaretto. "Amplified spontaneous emission and efficient tunable laser emission from a substituted thiophene-based oligomer", Appl. Phys. Lett., 81, pp.3534-36, 2002
- ◆ G. Barbarella "Oligothiophene Isothiocyanates as Fluorescent Markers", Chem. Eur. J., 8, pp.5072-5077, 2002
- ◆ G. Barbarella, L. Favaretto, G. Sotgiu, L. Antolini, G. Gigli, R.Cingolani, A. Bongini "Rigid-Core Oligothiophene-S, S-dioxides with High Photoluminescence Efficiencies Both in Solution and in the Solid State", Chem.Mater., 13, pp.4112-4122, 2001

- ◆ G. Barbarella, L. Favaretto, G. Sotgiu, M. Zambianchi, A. Bongini, C. Arbizzani, M. Mastragostino, M. Anni, G. Gigli, R. Cingolani "Tuning solid-state photoluminescence frequencies and efficiencies of oligomers containing one central thiophene-S, S-dioxide unit", J. Am. Chem. Soc., 122, pp.11971-11978, 2000
- ◆ G. Barbarella, M. Zambianchi, L. Antolini, P. Ostoja, P. Maccagnani, A. Bongini, E. A. Marseglia, E. Tedesco, G. Gigli, R. Cingolani "SoLid-state conformation, molecular packing and electrical and optical properties of processable b-methylated sexithiophenes", J. Am. Chem. Soc., 121, pp. 8920-8926, 1999

Tipologia di imprese destinatarie

- ◆ Industria elettronica
- ◆ Industria fotonica
- ◆ Industria optoelettronica
- ◆ Industria per illuminazione di interni
- ◆ Industria per diagnostica medica

Tematica 2: Manipolazione di singole molecole e nanostrutture

L'attività è incentrata sull'uso delle microscopie a scansione di effetto tunnel (STM) e a scansione di forza (SFM) per studiare processi di self-assembly di sistemi macromolecolari e supramolecolari su superfici solide piatte metalliche o inorganiche. Ciò permette di esplorare differenti proprietà chimico fisiche, incluse le proprietà strutturali, meccaniche ed elettriche, di tali film organici ultrasottili su un range di lunghezze spaziali che si estendono dalle frazioni di nanometri alle centinaia di micrometri.

In tali sistemi ibridi organici-inorganici, particolare enfasi viene fornita ad aspetti quali la chiralità sulle superfici come elemento di ulteriore controllo dell'ordine di singole molecole in due dimensioni e il suo possibile utilizzo quale metodologia per pilotare una sintesi asimmetrica assoluta. Lo studio delle proprietà di singole molecole inserite in un ensemble supramolecolare permette di poter modulare le proprietà delle stesse, nanomanipolando le molecole con la punta del microscopio SPM (microscopio a scansione di sonda), e osservando come una variazione dello "stato" della singola molecola si rifletta sull'ensemble supramolecolare.

L'ottimizzazione delle proprietà di trasporto di carica in singole molecole e il confronto con quelle dei relativi aggregati supramolecolari sarà oggetto di studio nell'ottica della fabbricazione e ottimizzazione di nanofili molecolari (molecular nanowires). Ciò permetterà di acquisire maggiore comprensione di fenomeni quali "interchain hopping". Infine la ricerca sarà pure rivolta verso la progettazione, lo sviluppo e il controllo in tempo reale su scala molecolare mediante microscopie SPM di switches strutturali che agiscono in maniera controllata su superfici sotto effetto di stimoli chimici, elettrici, ottici e inclusi il pH, la polarità del solvente, l'applicazione di un potenziale redox, la luce e una azione indotta dalla stessa punta del SPM. Questo sarà di importanza per la costruzione di motori molecolari operanti su superfici. I progetti che caratterizzano questa linea di ricerca sono svolti all'interno di numerose collaborazioni regionali, nazionali ed internazionali.

Principali pubblicazioni scientifiche

- ◆ P. Samorí, N. Severin, K. Müllen, J. P. Rabe, " Macromolecular fractionation of rod-like polymers at atomically flat solid-liquid interfaces ", *Advanced Materials*, Vol. 12, pp. 579-582, 2000
- ◆ G. Gottarelli, S. Masiero, E. Mezzina, S. Pieraccini, J. P. Rabe, P. Samorí, G. P. Spada " The Self-assembly of Lipophilic Guanosine Derivatives in Solution and on Solid Surfaces ", *Chemistry - a European Journal*, Vol. 6 , pp. 3242-3248, 2000.
- ◆ P. Samorí, H. Engelkamp, P. de Witte, A.E. Rowan, R.J.M. Nolte, J.P Rabe, "Self-assembly and manipulation of crown ether phthalocyanines at the gel-graphite interface ", *Angew. Chem. Int. Ed.*, Vol. 40, pp. 2348-2350, 2001
- ◆ P. Samorí, A. Fechtenkötter, T. Böhme, F. Jäckel, K. Müllen, J.P. Rabe, "Supramolecular staircase via self-assembly of disc-like molecules at the solid-liquid interface", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 123, pp. 11462-11467, 2001.

- ◆ P. Samorí, C. Simpson, K. Müllen, J.P. Rabe, "Ordered monolayers of graphene sheets processed from solutions via oxidative cyclodehydrogenation", *Langmuir*, Vol. 18, pp. 4183-4185, 2002
- ◆ P. Samorí, C. Ecker, I. Gössl, P.A.J. de Witte, J.J.L.M. Cornelissen, G.A. Metselaar, M.B.J. Otten, A.E. Rowan, R.J.M. Nolte, J.P. Rabe, "High shape persistence in single polymer chains rigidified with lateral hydrogen bonding networks", *Macromolecules*, Vol. 35, pp. 5290-5294, 2002
- ◆ P. Samorí, N. Severin, C. Simpson, K. Müllen, J.P. Rabe, "Epitaxial composite layers of electron donors and acceptors from very large polycyclic aromatic hydrocarbons", *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 124, pp. 9454-9457, 2002
- ◆ P. Samorí, J.P. Rabe "Scanning Probe Microscopies insights into conjugated (macro)molecular architectures" (review article) *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 14, pp. 9955-9973, 2002
- ◆ F. Cacialli, J. S. Wilson, J. J. Michels, C. Daniel, C. Silva, R. H. Friend, N. Severin, P. Samorí, J. P. Rabe, M. J. O'Connell, P. N. Taylor, H. L. Anderson, "Cyclodextrin-threaded conjugated polyrotaxanes as insulated molecular wires with reduced interstrand interactions" *Nature Materials* Vol. 1, pp. 160–164, 2002
- ◆ P. Samorí, V. Francke, V. Enkelmann, K. Müllen, J.P. Rabe, "Synthesis and solid state structures of functionalized phenyleneethynylene trimers in 2D and 3D", *Chemistry of Materials*, Vol. 15, pp. 1032-1039, 2003
- ◆ L. Pirondini, A. G. Stendardo, S. Geremia, M. Campagnolo, P. Samorí, J.P. Rabe, R. Fokkens, E. Dalcanale, "Dynamic materials through metal-directed and solvent-driven self-assembly cavitations", *Angew. Chem. Int. Ed.*, Vol. 42, pp. 1384-1387, 2003
- ◆ C. Grave, D. Lenz, A. Schäfer, P. Samorí, J.P. Rabe, P. Franke, A.-D. Schlüter, "Shape-Persistent Macrocycles with Terpyridine Units: Synthesis, characterization, and structure in the crystal", *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 125, pp. 6907-6918, 2003
- ◆ N. Tchebotareva, X. Yin, M.D. Watson, P. Samorí, J.P. Rabe, K. Müllen, "Ordered architectures of a soluble hexabenzocoronene-pyrene dyad: thermotropic bulk properties and nanoscale phase-segregation at surfaces" *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 125, pp. 9734-9739, 2003
- ◆ M.B.J. Otten, C. Ecker, G.A. Metselaar, A.E. Rowan, R.J.M. Nolte, P. Samorí, J.P. Rabe, "Alignment of extremely long single polymer chains exploiting hydrodynamic flow" in corso di stampa in *ChemPhysChem* 2003
- ◆ T. Giorgi, S. Lena, P. Mariani, S. Masiero, S. Pieraccini, J.P. Rabe, P. Samorí, G.P. Spada, G. Gottarelli, "Supramolecular helices via self-assembly of 8-oxoguanosines" in corso di stampa *J. Am. Chem. Soc.*, 2003

Le principali collaborazioni in ambito regionale, nazionale ed internazionale inerenti la tipologia/tematica

Ambito Regionale

- ◆ Università di Bologna - Generazione di nanofili molecolari e nanoswitches basati su strutture supramolecolari di nucleobasi
- ◆ Università di Parma - Studio di strutture complesse basate su cavitandi e loro processi controllati di assemblaggio/diassemblaggio su superfici

Ambito Nazionale

- ◆ Università di Catania - Studio di segregazione di fase su scala nanometrica e micrometrica mediante ARXPS e TOF-SIMS

Ambito Internazionale

- ◆ MPI for Polymer Research - Mainz (Germania) sullo studio di sistemi sintetici grafici per la costruzione di nanofili molecolari e come scheletro per la generazione di strutture ibride bio-organiche quali unità di base per la costruzione di dispositivi elettronici
- ◆ Università di Strasburgo (Francia) sulla costruzione di nanoswitches e nanomotori supramolecolari operanti sulle superfici
- ◆ Università di Strasburgo (Francia) sulla costruzione di nanoelettrodi di oro con metodologie litografiche per la costruzione di nanofili molecolari
- ◆ Free University Berlin - Berlino (Germania): sull'auto assemblaggio di macrocicli rigidi e il loro impacchettamento in strutture colonnari per la costruzione di nanofili molecolari
- ◆ Università di Nijmegen (Olanda) per lo studio del trasferimento dell'informazione chirale in assemblati ad elica, per lo studio di proprietà meccaniche di singole catene polimeriche estremamente rigide ed il loro utilizzo come scheletro per fabbricare architetture otticamente ed elettricamente attive con un alto grado di complessità
- ◆ Università di Oxford (Inghilterra) e Dr. F. Cacialli, Univ. College London (Inghilterra) per lo studio delle proprietà chimico-fisiche di strutture supramolecolari basati su poli-rotassani ed il loro utilizzo per generare dispositivi elettroluminescenti
- ◆ Eindhoven University of Technology (Olanda) nell'ambito della biomineralizzazione

I principali progetti passati e presenti inerenti la tipologia/tematica

- ◆ Progetto ESF-Eurocores - BIONICS (BIO-Organics NanostructurIng for molecular electronICS) Settembre 2003 – Settembre 2005 (ISOF, MPI Mainz, Uni Nijmegen, Uni Lueven, UniBologna, Uni Cambridge). Ruolo: Principal Investigator

- ◆ Collaborazione italo-britannica CRUI - British Council – “Guanosines self-assembled architectures for bio-nanotechnology” – Anno 2003. Ruolo: Principal Investigator

Sfruttamento dei risultati

L'attività, anche se incentrata su una ricerca di base, è mirata a fornire importanti informazioni che possono essere di notevole interesse per la generazione di superfici intelligenti, ed in particolare per aumentare la densità d'immagazzinamento di dati (di interesse in ambito di nuove tecnologie) e per la costruzione di nanofili molecolari. Questi ultimi, quali componenti di base nell'elettronica organica, possono essere di grande importanza per il miglioramento delle performances di dispositivi per l'elettronica molecolare (LEDs, FETs, celle fotovoltaiche).

Tipologia di imprese destinatarie

- ◆ Industria elettronica, fotonica ed optoelettronica

I principali rapporti realmente operativi con aziende della regione ed inerenti la tipologia/tematica

Questa linea di ricerca è basata sulla attività passata svolta in Germania, quindi estremamente nuova a livello locale, essendo stata intrapresa presso l'Istituto ISOF all'inizio del 2002. Per questo motivo collaborazioni con aziende in regione non sono ancora decollate.

Laboratori/strumentazioni già disponibili presso la struttura inerenti la tematica

- ◆ Laboratorio Manipolazione SPM. Esistono due microscopi a scansione di sonda (SFM, STM, Kelvin Probe, EFM, Magnetic Force Microscopy) operanti in aria, soluzione e flussi di gas, per la visualizzazione di singole molecole e per la loro manipolazione, come per nanofabbricazione e metrologia
- ◆ Evaporatori in ambiente di alto-vuoto
- ◆ Camera pulita classe 10000
- ◆ Differenti strumenti per la processamento di film (macro)molecolari estremamente sottili da soluzioni quali spin coating, dipping, ecc.

Tematica 3: Dispositivi organici optoelettronici (LED e celle solari organiche)

Il funzionamento dei dispositivi optoelettronici è governato sia da segnali luminosi che da segnali elettrici. I dispositivi emettitori di luce (LED) forniscono un segnale luminoso sollecitato da un segnale elettrico, mentre i rivelatori di luce (celle solari e fotodiodi), complementari ai primi, generano un segnale elettrico quando vengono illuminati.

L'attività di ricerca si svolge in due direzioni:

- ◆ *LED organici (OLED)* - Determinazione delle proprietà elettriche (conducibilità, mobilità e tipo dei portatori di carica) ed ottiche (spettri di assorbimento e fotoluminescenza, rese di fotoluminescenza, generazione di stati di tripletto e loro diffusione) di materiali organici elettroattivi organizzati in film nanometrici, sia in ambiente sia in atmosfera controllata, per applicazioni in dispositivi elettroluminescenti organici. Queste proprietà vengono indagate in correlazione anche con la morfologia e le caratteristiche elettriche a livello atomico e/o molecolare (funzione lavoro, affinità elettronica, potenziale di ionizzazione) determinate mediante microscopia a forza atomica e Kelvin probe. Il lavoro di ricerca comprende lo studio di nuove strutture molecolari adatte a rendere più efficienti i vari processi coinvolti nella generazione di elettroluminescenza, l'individuazione di opportune combinazioni di strati nanometrici ad uno o più componenti sulla cui base costruire dispositivi mono o multistrato e la valutazione dei loro parametri di elettroluminescenza e lo studio degli effetti di degradazione di tali dispositivi. Vengono infine progettate e sintetizzate sostanze elettroattive non reperibili in commercio.
- ◆ *Celle solari* - L'assorbimento della luce genera nei materiali organici principalmente eccitoni che decadono (radiativamente o no) prima che possano dissociarsi originando cariche libere. Conseguentemente le prestazioni dei dispositivi organici rivelatori di luce (celle solari e fotorivelatori) sono limitate dai fenomeni fotofisici che governano l'assorbimento della radiazione luminosa. Un significativo miglioramento delle prestazioni dei dispositivi è stato ottenuto con la scoperta del velocissimo electron-transfer fotoindotto tra due materiali a differente affinità elettronica (uno elettrone-donatore D e uno elettrone-accettore A). È stato dimostrato che con sistemi D/A si ha un enorme guadagno nella fotogenerazione di cariche libere grazie all'efficace effetto di ionizzazione degli eccitoni all'interfaccia dei due materiali. L'attività dell'Istituto ISOF sul fotovoltaico organico è orientata allo studio di celle solari e fotorivelatori a base di blende chimiche tra politiofeni (elettrone-donatori) e fullereni (elettrone-accettori). La morfologia dei film fotoattivi è di fondamentale importanza ai fini delle prestazioni dei dispositivi, in particolare la segregazione di fase tra i due componenti può essere nociva. I fullereni impiegati sono funzionalizzati con gruppi che favoriscono la solubilità nei comuni solventi organici, al fine di ottenere blende finemente miscelate (su scala nanometrica). Oltre ai sistemi blendati D/A, vengono studiate le cosiddette strutture "a doppio cavo". In questo caso non è previsto l'utilizzo di due diversi materiali, bensì di un'unica struttura molecolare costituita da due parti chimicamente legate e caratterizzate da differenti proprietà elettroniche: una parte avente proprietà di elettrone-donatore e l'altra con proprietà di elettrone-accettore. Le prestazioni ottenute con celle solari a base di una diade fullerene-azotiofene costituiscono l'attuale stato dell'arte per i dispositivi a base di un solo componente.

Le principali pubblicazioni scientifiche inerenti la tipologia/tematica

- ◆ Kalinowski J, Cocchi M, Virgili D, Di Marco P, Fattori V "Magnetic field effect on emission and current in Alq3-based electroluminescent diodes", Chem. Phys. Lett., 2003
- ◆ Berlin A, Zotti G, Zecchin S, Schiavon G, Cocchi M, Virgili D, Sabatini C "3,4-Ethylenedioxy-substituted bithiophene-alt-thiophene-S,S-dioxide regular copolymers. Synthesis and conductive, magnetic and luminescence properties", J. Mater.Chem. 13 (1). pp. 27-33, 2003
- ◆ Kalinowski J, Stampor W, Mezyk J, Cocchi M, Virgili D, Fattori V, Di Marco P "Quenching effects in organic electrophosphorescence", Phys. Rev. B 66, 235321, 2002
- ◆ Kalinowski J, Giro G, Cocchi M, Fattori V, Zamboni R "The nature of emitting states in electroluminescence of polymeric films doped with anthracene and anthracene-based supramolecules", Chem. Phys. 277 (3): pp. 387-396 2002
- ◆ Cocchi M, Virgili D, Giro G, Fattori V, Di Marco P, Kalinowski J, Shirota Y "Efficient exciplex emitting organic electroluminescent devices" Appl. Phys. Lett. 80 (13):pp. 2401-2403 2002
- ◆ Kalinowski J, Cocchi M, Fattori V, Di Marco P, Giro G "Thomson-Like electron-hole recombination in organic light-emitting diodes" Jpn. J. Appl. Phys. Part 1 40 :L282-L285, 2001
- ◆ Kalinowski J, Cocchi M, Giro G, Fattori V, Di Marco P "Injection-controlled electroluminescence in organic light-emitting diodes based on molecularly-doped polymers: I. Single-layer devices", J. Phys. D 34 (15): pp. 2274-2281, 2001
- ◆ Kalinowski J, Cocchi M, Giro G, Fattori V, Di Marco P "Injection-controlled electroluminescence in organic light-emitting diodes based on molecularly-doped polymers: II. Double-layer devices", J. Phys. D 34 (15): pp.2282-2295, 2001
- ◆ N. Camaioni, G. Casalbore-Miceli, A. Martelli "Slow transient photoresponse in Schottky-type junctions based on poly(4,4'-dipenthoxy-3'-octyl-2,2':5',2''-terthiophene)", J. Appl. Phys., Vol. 89, pp. 5488-5490, 2001
- ◆ N. Camaioni, M. Catellani, S. Luzzati, A. Migliori "Morphological characterization of poly(3-octylthiophene):plasticizer:C₆₀ blends", Thin Solid Films, Vol. 403-404, pp. 489-494, 2002
- ◆ N. Camaioni, L. Garlaschelli, A. Geri, M. Maggini, G. Possamai, G. Ridolfi "Solar cells based on poly(3-alkyl)thiophenes and [60]fullerene: a comparative study", J. Mater. Chem., Vol. 12, pp. 2065-2070, 2002
- ◆ M. Maggini, G. Possamai, E. Menna, G. Scorrano, N. Camaioni, G. Ridolfi, G. Casalbore-Miceli, L. Franco, M. Ruzzi, C. Corvaja "Solar cells based on a fullerene-azothiophene dyad", Chem. Commun., pp. 2028-2029, 2002
- ◆ N. Camaioni, G. Ridolfi, G. Casalbore-Miceli, G. Possamai, M. Maggini "The effect of a mild thermal treatment on the performance of poly(3-alkylthiophene)/fullerene solar cells", Adv. Mater., Vol. 14, pp. 1735-1738, 2002
- ◆ N. Camaioni, G. Ridolfi, G. Casalbore-Miceli, G. Possamai, L. Garlaschelli, M. Maggini "A stabilization effect of [60]fullerene in donor-acceptor organic solar cells", Sol. Energy Mater. Sol. Cells, Vol. 76, pp. 107-113, 2003

- ◆ G. Casalbore-Miceli, M.C. Gallazzi, S. Zecchin, N. Camaioni, A. Geri, C. Bertarelli "A donor-acceptor polymer with a peculiar negative-charge-"trapping" characteristic", Adv. Funct. Mater., Vol. 13, pp. 307-312, 2003
- ◆ G. Possamai, N. Camaioni, G. Ridolfi, L. Franco, M. Ruzzi, E. Menna, G. Casalbore-Miceli, A.M. Fichera, G. Scorrano, C. Corvaja, M. Maggini "A fullerene-azothiophene dyad for photovoltaics", Synth. Met., Vol. 139, pp. 585-588, 2003

Brevetti

- ◆ "Incapsulamento protettivo per dispositivi elettroluminescenti organici" richiesta n. BO2001A000066 depositata il 7/2/2001. Inventori: G. Giro, M. Cocchi, P. Di Marco, V. Fattori - Estensione estero No 02719758.1-2203-EP0201134 del 12/09/2003
- ◆ "Dispositivo elettroluminescente organico basato sull'emissione di ecciplessi od elettroplessi e sua realizzazione" richiesta n. TO2001A000692 depositata il 13/07/2001. Inventori: M. Cocchi, G. Giro, V. Fattori, P. Di Marco, J. Kalinowski
- ◆ "Dispositivo elettroluminescente organico con droganti cromofori" richiesta n. BO2002000165 depositata il 29/03/2002. Inventori: V. Fattori, G. Giro, M. Cocchi, P. Di Marco, D. Virgili, J. Kalinowski, W. Stampor
- ◆ "Metodo per la riduzione della rugosità superficiale di uno strato sottile di ossidi conduttori" richiesta n. BO2002000386 depositata il 14/06/2002. Inventori: M. Cocchi, P. Di Marco, V. Fattori, G. Giro, D. Virgili, A. Garulli

Le principali collaborazioni in ambito regionale, nazionale ed internazionale inerenti la tipologia/tematica

Ambito Regionale

- ◆ CNR di Bologna, Istituto per la Microelettronica e i Microsistemi (IMM)
- ◆ CNR di Bologna, Istituto per lo Studio dei Materiali Nanostrutturati (ISMN)
- ◆ Università degli Studi di Bologna, Dipartimento di Chimica "Ciamician"

Ambito Nazionale

- ◆ CNR di Padova, Istituto per l'ENergetica e le Interfasi (IENI)
- ◆ CNR di Milano, Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari (ISTM)
- ◆ CNR di Milano, Istituto per lo Studio delle MACromolecole (ISMAC)
- ◆ Università di Padova, Dipartimento di Chimica Organica
- ◆ Università di Padova, Dipartimento di Chimica Fisica

- ◆ Politecnico di Milano, Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica
- ◆ Università di Pavia, Dipartimento di Chimica Organica
- ◆ Università della Calabria, Dipartimento di Chimica, Arcacavata (Cosenza)

Ambito Internazionale

- ◆ Università di Danzica (Polonia), Dipartimento di Fisica

I principali progetti passati e presenti inerenti la tipologia/tematica

- ◆ Progetto FIRB "Manipolazione molecolare per macchine nanometriche" (RBNE019H9K)
- ◆ Progetto EUREKA "Flexible Organic ILlumInators for Automotive Market" - FOLIA (E!2451)
- ◆ Progetto CNR-MIUR legge 95/95 "Nanotecnologie e dispositivi molecolare per l'elettronica"
- ◆ Progetto Finalizzato "Diodi Elettroluminescenti con Materiali Organici" (DEMO)
- ◆ Progetto ISOF-AUREL "Studio di materiali e metodi per la realizzazione mediante serigrafia di strati organici sottili per la fabbricazione di dispositivi elettroluminescenti organici (OLED)"
- ◆ Agenzia 2000 CNRC0045F9-002 "Sistemi supramolecolari complessi e biostrutturistica"
- ◆ Progetto Finalizzato "Fotorecettori Realizzati con Materiali Organici" (FReMO)
- ◆ COFIN-MIUR 2002032171 "Strutture Molecolari a base di Fullereni e di Nanotubi di Carbonio"

Sfruttamento dei risultati

- ◆ Conversione dell'energia elettrica in energia luminosa
- ◆ Display rigidi o flessibili ultrasottili
- ◆ Illuminatori
- ◆ Cartelli indicatori luminosi
- ◆ Conversione dell'energia solare in energia elettrica
- ◆ Rilevamento di segnali luminosi
- ◆ Telecomunicazioni (trasduttori)

Tipologia di imprese destinatarie

- ◆ Industria micro-nanoelettronica
- ◆ Automotive

- ◆ Industria illuminotecnica
- ◆ Telecomunicazioni
- ◆ Energetica

I principali rapporti realmente operativi con aziende della regione ed inerenti la tipologia/tematica

- ◆ Seima Italiana – Tematica riguardante i dispositivi OLED. Collaborazione inerente illuminatori rigidi e flessibili e display in campo automotive
- ◆ Aurel spa – Tematica riguardante i dispositivi OLED in particolare per la realizzazione di strati organici nanometrici col metodo serigrafico

Laboratori/strumentazioni già disponibili presso la struttura

- ◆ Laboratorio per la preparazione di dispositivi OLED e delle celle solari. Si tratta di una camera pulita (classe 10000) nella quale avvengono le deposizioni di strati metallici o di natura organica di dimensioni nanometriche mediante l'utilizzo di diverse tecniche (evaporazione sotto vuoto, sputtering, spinning, dipping)
- ◆ Laboratorio per la caratterizzazione morfologica dei film. Il laboratorio è dotato in particolare di un profilometro Tencor e di due microscopi a scansione di sonda (AFM SFM, STM, Kelvin Probe, EFM, Magnetic Force Microscopy)
- ◆ Laboratori di caratterizzazione elettrica/fotoelettrica dei dispositivi (source-measure units, sistema per la misura della mobilità delle cariche, sistema per la spettroscopia d'impedenza, sistemi di illuminazione in luce bianca e monocromatica, sistemi di rilevamento di segnali luminosi)
- ◆ Laboratorio di caratterizzazione elettrochimica
- ◆ Laboratori per la determinazione delle principali proprietà ottiche e di luminescenza dei dispositivi, dotato di spettrofotometri, spettrofluorimetri e sorgenti pulsate per la misura dei tempi di vita degli stati eccitati
- ◆ Laboratorio prova, dotato di due glove-box, nel quale i dispositivi vengono sottoposti a test di durata in presenza o in assenza di umidità e di ossigeno
- ◆ Laboratorio di sintesi di materiali organici elettroattivi

Struttura 3: IMM (CNR) - Sezione di Bologna

CNR Area di Ricerca di Bologna

IMM - Istituto per la Microelettronica e i Microsistemi- Sezione di Bologna

Indirizzo: Via P. Gobetti, 101 – 40129 Bologna

Responsabile di Sezione: Ing. Maurizio Severi

Attività

La Sezione di Bologna dell'IMM (precedentemente nota come Istituto CNR-LAMEL) è coinvolta da sempre in attività di ricerca multidisciplinari che spaziano dalla scienza dei materiali alla tecnologia dei dispositivi elettronici. La Sezione è ora parte dell'IMM con sede a Catania. Le principali attività della Sezione di Bologna dell'IMM gravitano attorno alla progettazione, alla realizzazione e caratterizzazione di dispositivi integrati e microsistemi. Si tratta di uno dei pochi centri di ricerca italiani che possieda le capacità di caratterizzare la struttura e le proprietà di materiali e dispositivi con diverse tecniche e metodi (microscopia elettronica, diffrazione a raggi X, analisi in fascio ionico, misure ottiche, elettriche e funzionali) e al contempo la capacità di fabbricare dispositivi impiegando sia processi standard della tecnologia planare del silicio che tecnologie avanzate.

Le tematiche di ricerca che principalmente sviluppate dalla Sezione di Bologna dell'IMM nell'ambito dei materiali nanostrutturati sono raggruppate così come segue:

- ◆ **TEMA 1** - Sviluppo e messa a punto di processi elementari e di tecnologie per la microlavorazione e la nanostrutturazione di materiali
- ◆ **TEMA 2** – Fabbricazione di strutture funzionali elementari miniaturizzate: questa attività si propone di realizzare semplici dispositivi adatti ad essere impiegati in sistemi complessi multifunzionali basati su materiali nanostrutturati
- ◆ **TEMA 3** - Sviluppo di tecniche di assemblaggio e packaging per sistemi complessi multifunzionali
- ◆ **TEMA 4** - Calcoli ab-initio per lo studio di nanostrutture formate da metalli, semiconduttori e molecole
- ◆ **TEMA 5** – Crescita CVD "templata" o su substrati nanolavorati di nanotubi di carbonio per dispositivi nanoelettronici
- ◆ **TEMA 6** – Tecniche strutturali (TEM, STEM) per nanoscala

Le principali pubblicazioni scientifiche inerenti tutte le tematiche

- ◆ A.M. Mazzone, "Quantum mechanical study of the shape and stability of SnO₂ nanocrystalline grains", Phys. Rev. B 68, 045412, 2003 (*lavoro selezionato per il numero di luglio 2003 del Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology*).
- ◆ A.M. Mazzone, "Fragmentation of Sn clusters studied by time-dependent Hartree-Fock calculations", J.Comp-Aided Mat. Design vol. 8, p 59, 2002
- ◆ A.M. Mazzone, "Charge confinement in epitaxial metallic islands: a study at semiempirical level", Surf. Sci. vol.542, p 283, 2003
- ◆ A.M. Mazzone, "LDA and molecular dynamics determination of Ag deposition onto (100) surfaces in silicon", Thin Solid Films vol 428, p. 139, 2003
- ◆ A.M. Mazzone, "Boron impurities on a vicinal Si(100) surface: a study of structural properties and binding energies", Phil.Mag.Lett. vol.82, p. 207, 2002
- ◆ A.M. Mazzone, "Pre-roughening dynamics on Si (100) stepped surfaces: a study by molecular dynamics", EPB J. vol 28, p. 491, 2002
- ◆ A.M. Mazzone, "Clustering of boron into a vicinal Si(100) surface.: A quantum mechanical study at semiempirical level", Comp. Mat. Sci, vol.25, p. 344, 2002
- ◆ A.M. Mazzone, "Cluster beam steering onto silicon surfaces studied by molecular dynamics", NIMB vol. 196, p. 51, 2002
- ◆ A.M. Mazzone, "Calculated electronic structure of metallic multilayers formed by noble and transition metals", EPB J. vol.26, p. 407, 2002
- ◆ A.M. Mazzone and G. Mattei "Shape and stability of heteroepitaxial metallic islands: effects of the electronic configuration", Appl.Surf.Sci vol 166, p.140, 2002
- ◆ A.M. Mazzone "Systematic ab initio study of the electronic properties of different pure and mixed systems formed by Cu and Ag", Comp.Mat. Sci. vol.25, p 353, 2002
- ◆ M. Melucci, M. Cavallini, M. Gazzano, G. Barbarella, F. Biscarini, P. Maccagnani, P. Ostoja, J. Amer "Solid-State supramolecular organization of semiconductor a-quinque thiophene", Chem. Soc., June 2003
- ◆ G. Barbarella, M. Zambianchi, L. Antolini, P. Ostoja, P. Maccagnani, A. Bongini, E. A. Marseglia, E. Tedesco, G. Gigli, R. Cingolani "Solid-state conformation, molecular packing and electrical and optical properties of processable b-methylated sexithiophenes", J. Am. Chem. Soc.,vol. 121, pp.8920-8926, 1999
- ◆ M.P.Casaletto, S.Kaciulis, G.Mattogno, L.Pandolfi, G.Scavia, S.Zampolli, S.Nicoletti, L.Dori, M.Severi, "Surface study of thin film gas sensors on a Si micro-machined substrate", Applied Surface Science vol189, pp. 39-52, 2002
- ◆ G.G.Bentini, M.Bianconi, M.Chiarini, L.Correra, P.Maccagnani, F.Tamarri, R.Guzzi "Theory and design of an integrated optical sensor based on a Mach-Zehnder interferometer", Sensors and Microsystems – Proceedings of 7th italian conference, World Scientific, 2002, p.319 Eds: C.Di Natale, A.D'Amico, L.Dori, G.C.Cardinali, S.Nicoletti

-
- ◆ G. G. Bentini, M. Bianconi, M. Chiarini, L. Correr, C. Sada, P. Mazzoldi, N. Argiolas, M. Bazzan, and R. Guzzi "Effect of low dose high energy O₃⁺ implantation on refractive index and linear electro-optic properties in X-cut LiNbO₃: Planar optical waveguide formation and characterization", JAP vol.92, p.6477, 2002
 - ◆ C. Donolato "Analytical and numerical inversion of the Laplace-Carson transform by a differential method", Comput. Phys. Commun. Vol.145, p.298, 2002
 - ◆ P.G. Merli and V. Morandi "On the spatial resolution and nanoscale feature visibility in Scanning Electron Microscopy", Advances in Imaging and Electron Physics Vol. 123, pp. 375-398, 2002
 - ◆ P.G. Merli, V. Morandi and F. Corticelli "Images of dopant profiles in low-energy scanning transmission electron microscopy", Applied Physics Letters, Vol.81, pp.4535-4537, 2002
 - ◆ A. Armigliato, R. Balboni, A. Benedetti, G.P. Carnevale, A.G. Cullis, S. Frabboni and D. Piccolo "Strain characterisation on a nm scale of deep sub micron devices by convergent beam electron diffraction", Solid State Phenomena Vols. 82-84, pp.727-734, 2002
 - ◆ Taghavinia N., Lerondel G., Makino H., Parisini A., Yamamoto A., Yao T., Kawazoe Y., and Goto T. "Structural and optical properties of oxidized porous silicon layers activated by Zn₂SiO₄: Mn²⁺", Journal of the Electrochemical Society vol.149, p.251, 2002
 - ◆ S. Nicoletti, S. Zampolli, I. Elmi, L. Dori, M. Severi "Use of different sensing materials and deposition techniques for thin film sensors to increase sensitivity and selectivity" IEEE on Sensors (*in fase di pubblicazione*)
 - ◆ M.P. Casaletto, S. Kaciulis, G. Mattogno, L. Pandolfi, G. Scavia, S. Zampolli, S. Nicoletti, L. Dori, M. Severi "Surface study of thin film gas sensors on a Si micro-machined substrate" Applied Surface Science vol 189, p. 39, 2002
 - ◆ R. Angelucci, R. Rizzoli, S. Salvadori, S. Nicoletti, A. Migliori, E. Brugnoli "Amorphous carbon deposited by pulsed laser ablation as a material for cold cathode flat emitter" Applied Surface Science vol 186, p. 423, 2002
 - ◆ A. Lavacchi, B. Cortigiani, G. Roviola, U. Bardi, A. Atrei, R. Angelucci, L. Dori, S. Nicoletti, A. Poggi, "Composition and structure of tin/vanadium oxide surfaces for chemical sensing applications" Sensors and Actuators B 71, p.123, 2000
 - ◆ L. Dori, S. Nicoletti, I. Elmi, A.R. Mastrogiacomo, L. Sampaolo, E. Pierini "A Gas Chromatographic-like System for the Separation and Monitoring of BTX Compounds at the ppb Level Using a Solid State Metal Oxide Gas Sensors" Sensors and Materials vol 12, p. 163 2000 (*Invited Paper*)
 - ◆ G. Faglia, E. Comini, M. Pardo, A. Taroni, G.C. Cardinali, S. Nicoletti, G. Sberveglieri "Micromachined gas sensors for environmental pollutants" Microsystems Technologies vol 6 p. 54, 1999
 - ◆ S. Nicoletti, L. Dori, G.C. Cardinali, A. Parisini "Gas sensors for air quality monitoring: realization and characterization of undoped and noble metal doped SnO₂ thin sensing films deposited by the pulsed laser ablation" Sens. and Act. B 60, p. 90, 1999
 - ◆ L. Sangaletti, L.E. Depero, B. Allieri, F. Pioselli, R. Angelucci, A. Poggi, A. Taliani, S. Nicoletti "Temperature effect on the microstructural properties of pure V-doped SnO₂ nanopowders" Journal of European Ceramic Society, vol 19, p. 2073, 1999

- ◆ S.Nicoletti, L.Dori, F.Corticelli, M.Leoni, P.Scardi "Tin Oxide Thin-Film Sensors for Aromatic Hydrocarbons Detection: Effect of Aging Time on Film Microstructure", J. Am. Ceram. Soc. vol.82, p. 1201, 1999
- ◆ M. Baroncini, P. Placidi, A. Scorzoni, G.C. Cardinali, L. Dori, S. Nicoletti "Characterization of an embedded micro-heater for gas sensors applications", VLSI Technology, Systems, and Applications, 2001 Proceedings of Technical Papers of 2001 International Symposium pp. 164 –167, 2001
- ◆ M. Baroncini, P. Placidi, A. Scorzoni, G.C. Cardinali, L. Dori, S. Nicoletti, "Accurate extraction of temperature of the heating element in micromachined gas sensors" 2001 IEEE International Symposium on Circuits and Systems - Sydney, Australia May 6 - 9, 2001
- ◆ I.Elmi, L.Dori, G.C.Cardinali, S.Nicoletti, S.Guerri, S.Zampolli, A.R.Mastrogiacomo, E.Lanzi, V.Poluzzi "Trace benzene monitoring in the outdoor air: comparative results between measurements carried out with an innovative approach and a std. GC tool" 11th International Conference on Solid-State Sensors and Actuators, Transducers '01/Eurosensors XV – Munich, June 10 - 14, 2001
- ◆ I.Elmi, S.Nicoletti, G.C.Cardinali, L.Dori, L.Masini, S.Zampolli, E.Gandolfi "Fast Pulsed Temperature Mode operation: a viable way to improve the sensitivity and the selectivity in metal oxide gas sensors" Proceeding of 13th European Conference on Solid-State Transducers – EuroSensors XIV, Copenhagen - Denmark, August 27-30, 2000
- ◆ I.Elmi, S. Nicoletti, L. Dori, L. Masini "Doped and undoped SnO₂ sensing layer operated under fast pulsed temperature mode: operating conditions to selectively monitor different air pollutants" 8th International Meeting on Chemical Sensors, Basel – Switzerland, 2-5 July
- ◆ L. Dori, S. Nicoletti, R. Sharma, L. Masini I. Elmi, G.C. Cardinali, C. Di Pasquale "Fast Pulsed Temperature Mode of the Sensor Operation to Reduce *the Power Consumption and to Improve the Metal Oxide Semiconducting Sensing Layer Selectivity*" Proceeding of 10th International Workshop on the Physics of the Semiconducting Devices – IWPSD, December 14-18, 1999, Allied Publisher Limited Delhi - India 1999, 675
- ◆ L. Dori, S.Nicoletti, G.C.Cardinali, S.Guerri, R.Sharma, A.R.Mastrogiacomo, L.Sampaolo, E.Pierini, E. Comini "A Gas Chromatographic-like System for the Separation and Monitoring of BTX Compounds at the ppb Level Using a Solid State Metal Oxide Gas Sensors" Proceeding of 13th European Conference on Solid-State Transducers – EuroSensors XIII, , The Hague - The Netherlands, September 12-15, 1999
- ◆ A.Poggi, L.Dori, G.C.Cardinali, R.Angelucci, S.Nicoletti "Silicon micromachining and nanotechnology for sensor applications" Proceedings of 1st International Conference and General Meeting of the European Society for Precision Engineering and Nanotechnology - Euspen p.191
- ◆ R. Angelucci, F. Corticelli, G.M. Dallavalle, L. Malferrari, A. Montanari, C. Montanari, F. Odorici, R. Rizzoli and C. Summonte, "Nanotechnologies applied to High Energy Physics detectors", invited talk at "Incontri sulla Fisica delle Alte Energie XIV - IFAE", Parma, 3-5 Aprile 2002, in press as Conference Proceedings, Ed.s Societa' Italiana di Fisica.
- ◆ R. Angelucci, F. Corticelli, G.M. Dallavalle, L. Malferrari, A. Montanari, C. Montanari, F. Odorici, R. Rizzoli and C. Summonte, "Nanochannel array in anodic porous alumina for the template synthesis of carbon nanotubes" presentato al "International Conference on the Science and Application of Nanotubes", Boston, Massachusetts, July 6-11, 2002.

- ◆ R. Angelucci, F. Corticelli, G.M. Dallavalle, L. Malferrari, A. Montanari, C. Montanari, F. Odorici, R. Rizzoli and C. Summonte, "Fabrication of highly ordered nanochannel array in porous alumina as template for controlled growth of carbon nanotubes", talk presented at the "Nanotubes & Nanostructures 2002" - LNF Frascati, September 23-28, 2002.
- ◆ R. Angelucci, F. Corticelli, M. Cuffiani, G.M. Dallavalle, L. Malferrari, A. Montanari, C. Montanari, F. Odorici, R. Rizzoli and C. Summonte, "Application of Nanotechnologies in High Energy Physics", invited talk at the "8th Topical Seminar on Innovative Particle and Radiation Detectors", Siena, 21-24 October 2002 - Nuclear Physics B (Proc. Suppl.) vol 125, pp. 164-168, 2003

I principali progetti passati e presenti inerenti tutte le tematiche

Nella tabella seguente sono elencati i progetti sviluppati dal gruppo di ricerca, specificando il ruolo ricoperto nell'attività, l'oggetto della ricerca e le collaborazioni nazionali ed internazionali attivate tramite il relativo progetto.

Progetti Attivi	Oggetto della Ricerca	RUOLO	Collaborazioni
FIRB	Sviluppo di microsistemi multisensoriali per applicazioni ambientali e agroalimentari	Coordinatore	INFM Brescia Università di Roma "Tor Vergata" - Dip. Ingegneria Elettronica Consorzio CREO
FIRB	Analisi morfologica e strutturale di film di C	Partner	CNR-IMIP Sez. Montelibretti Roma, CNR-IMIP Sez. Potenza UniRomaTRE Dip.Ingegneria Elettronica
FISR	Nanotecnologie per dispositivi di memoria ad altissima densità: sviluppo emettitori planari di elettroni	Partner	STMicroelectronics (MI) CNR-IMIP - sezione Roma, UniRomaTRE - Dip.Ingegneria elettronica

Progetti Attivi	Oggetto della Ricerca	RUOLO	Collaborazioni
FISR	Microsistemi per applicazioni ambientali e agroalimentari	Coordinatore	Università di Parma - Dip. Chimica Organica e Industriale Università di Perugia - DIEI Università di Udine - Dip. Scienze degli alimenti Università di Brescia - Dip. Chimica e Fisica dei Materiali ARPA Bologna AES Terni Technobiochip Livorno
FIRB	Tecniche avanzate di Microscopia e olografia elettronica applicate allo studio di nanoparticelle	Partner	Università Bologna - Dip. Fisica
FP5-IST Clean Air	Monitoraggio della qualità dell'aria indoor con sensori di gas a stato solido	Coordinatore Scientifico	Aermec – Verona Alpha Mos – Toulouse Imzas - Bremen
FP5-IST NetGas	Sensori di gas basati su principio fotoacustico	Partner	EADS – Munich Sintef – Oslo Auxitrol – Paris Farside Tech. – London Sensoror - Oslo
FP6-IST – GoodFood	Monitoraggio di salubrità e qualità del cibo con microsistemi	Partner	Circa 40 partner tra industrie ed istituti di ricerca europei
Nanochant - progetto INFN	Studio di matrici di nanotubi di carbonio per la fabbricazione di rivelatori di radiazione ad alta risoluzione	Partner	INFN - Sezione di Bologna Università di Bologna – Dip. di Fisica

E' inoltre attiva una convenzione triennale tra Regione Emilia-Romagna Assessorato Territorio, Programmazione e Ambiente — Servizio Analisi e Pianificazione Ambientale e CNR – IMM Sezione di Bologna relativa al monitoraggio della qualità dell'aria in ambienti confinati mediante array di sensori di gas a stato solido.

Laboratori/strumentazioni già disponibili presso la struttura

- ◆ **Linea completa in area pulita per la realizzazione di dispositivi integrati:** forni per trattamenti termici, reattori LPCVD, sistema PECVD multicamera, sistema CVD per deposizione di nanotubi di carbonio a bassa, media ed alta pressione, evaporatori e sputtering RF, impiantatori ionici ad alta e media energia, sistema laser a eccimeri per trattamenti termici e deposizione di film sottili, RIE, sistemi per fotolitografia
- ◆ **Sistemi di misura per la caratterizzazione elettrica di materiali e dispositivi:** sistema di misura automatico per misure elettriche di dispositivi a livello wafer, sistemi per la caratterizzazione funzionale di sensori di gas, sistema per misura dell'elettromigrazione in dispositivi di prova incapsulati, sistema di misura DLTS, caratterizzazione di celle solari, sistemi per caratterizzazione elettro/ottica, sistema di misura della emissione di elettroni per effetto di campo in UHV
- ◆ **Laboratorio di caratterizzazione strutturale:** microscopia elettronica a scansione (SEM), in trasmissione (TEM) e a scansione in trasmissione (STEM). L'alta coerenza spaziale della sorgente di elettroni del TEM permette di ottenere risoluzioni spaziali per indagini analitiche sul campione di circa 0.2 nm. La risoluzione punto a punto dello strumento è di 0,24 nm. Il TEM è inoltre corredato da rivelatori per contrasto Z e per spettrometria a perdita d'energia di elettroni, biprisma elettronico per olografia off-axis, mentre entrambi i microscopi elettronici (SEM e TEM) sono dotati di rivelatori per microanalisi a raggi X. Il laboratorio è inoltre dotato di sistemi di diffrazione X convenzionale, per analisi di film sottili e ad alta risoluzione, acceleratore ionico Tandetron per analisi di materiali con tecnica RBS-channeling e con reazioni nucleari

I possibili link per informazioni

- ◆ <http://www.imm.cnr.it>

Struttura 4: DCFI - Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica (UNIBO)

Università di Bologna

DCFI - Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica

Indirizzo: Viale Risorgimento, 4

Tel: 051-2093691

Fax: 051-2093690

Direttore: Prof. Giuliano Longoni

Attività

- ◆ **TEMA 1** - Simulazioni Monte Carlo e Molecular Dynamics di sistemi molecolari complessi e nanostrutture, organizzazione molecolare e dinamica
- ◆ **TEMA 2** - Precursori metallici per stampa a contatto da composti di coordinazione

Tematica 1: Simulazioni Monte Carlo e Molecular Dynamics di sistemi molecolari complessi e nanostrutture, organizzazione molecolare e dinamica

Il gruppo Cristalli Liquidi del DCFI ha maturato particolare esperienza nel campo dei materiali dotati di strutture ordinate: cristalli liquidi, membrane, polimeri anche nanoconfinati e in film sottili. In questo settore il know how sviluppato comprende tutto il ciclo di progettazione molecolare dai calcoli quantomeccanici su singola molecola, allo sviluppo di modelli e alla previsione di proprietà dei materiali mediante simulazioni atomistiche e a grana molecolare e alla caratterizzazione con ESR e Fluorescenza. Si sono inoltre sviluppati metodi di "reverse molecular engineering", per il design di nuove molecole in grado di fornire particolari proprietà.

Oltre al settore dei display elettro-ottici, queste competenze sono applicabili nella realizzazione di dispositivi micro e nanomeccanici e fluidici, importanti per sviluppare nuove applicazioni tecnologiche industriali, mediche e domestiche. In questo contesto gli elastomeri liquido cristallini (LCEs) sono particolarmente interessanti. La combinazione dell'elasticità di origine entropica tipica dei polimeri, con l'ordine orientazionale e le proprietà anisotrope dei sistemi liquido cristallini offre nuovi materiali con proprietà originali e controllabili dall'esterno. Tra le caratteristiche più interessanti di questi sistemi figurano il cambiamento di forma a seguito di una transizione di fase, il cambiamento di morfologia indotto da stiramento o per esposizione a luce o campi elettromagnetici e la cosiddetta "elasticità soffice" (soft elasticity). In questi materiali, costituiti da struttura reticolata in cui sono presenti molecole di tipo liquido cristallino, collegate tra loro da spaziatori flessibili è possibile modificare in maniera controllata il modulo e la rigidità. Sistemi molecolari in grado di rispondere all'applicazione di campi esterni o alla luce possono essere utilizzati per sviluppare nuovi micro- e nano- motori, attuatori, valvole e pompe su scala microscopica e trovare applicazioni in campo biologico e medico (muscoli artificiali). Si intende sviluppare questa tematica su cui si è già impegnati a livello europeo.

Le principali pubblicazioni scientifiche inerenti la tipologia/tematica

- ◆ P. Pasini, C. Zannoni eds. "Advances in the Computer Simulations of Liquid Crystals", Kluwer 2000
- ◆ C. Zannoni "Molecular design and computer simulations of novel mesophases", Journal of Mater. Chemistry, Vol. 11, pp. 2637-2646, 2001
- ◆ R. Berardi, M. Ricci, C. Zannoni "Ferroelectric Nematic and Smectic Liquid Crystals from Tapered Molecules", Journal Phys. Chem., Vol. 2 pp. 443-447, 2001
- ◆ T. Bellini, M. Buscaglia, C. Chiccoli, F. Mantegazza, P. Pasini, C. Zannoni "Nematics with quenched disorder: how long will it take to heal?" Physical Review Letters, Vol. 88 pp. 245506.1 -245506.4, 2002
- ◆ A. Arcioni, C. Bacchiocchi, L. Grossi, A. Nicolini, C. Zannoni, "ESR studies of order and dynamics in a nematic liquid crystal containing a dispersed hydrophobic aerosil" J. Phys. Chem. B, vol 106, pp. 9245-9251, 2002

- ◆ C. Chiccoli, P. Pasini, A. Sarlah, C. Zannoni, S. Zumer, Structures and transitions in thin hybrid nematic films: A Monte Carlo study, Phys. Rev. E, Rapid Comm , vol. 67, pp. 059703.1-4, 2003
- ◆ R. Berardi, S. Orlandi, C. Zannoni "molecular dipoles and tilted smectic formation. A Monte Carlo study", Physical Review, Vol 67 pp. 41708.1—14, 2003
- ◆ C. Chiccoli, P. Pasini, G. Skacej, C. Zannoni, S. Zumer, Nematics with dispersed polymer fibrils: A Monte Carlo study of the external field-induced switching, Phys. Rev. E Rapid Comm., vol. 67, pp. 010701.1-4 , 2003
- ◆ C. Zannoni, "Cristalli Liquidi" Enciclopedia del Novecento, Istituto dell' Enciclopedia, Treccani, in bozze, 2003
- ◆ R. Berardi, L. Muccioli, C. Zannoni "Can nematic transitions be predicted by atomistic simulations? A computational study of the odd-even effect" ChemPhysChem, 2003 (in stampa)

I principali progetti passati e presenti inerenti la tipologia/tematica e le relative collaborazioni nazionali e internazionali

- ◆ EU TMR Network: Functional Liquid Crystalline Elastomers FULCE (HPRN-CT-2002-00169) (collaborazioni: Freiburg, Strasburg, Exeter, Ilmenau, Barcelona, Ljubljana) 2002-2005
- ◆ MIUR-PRIN: Cristalli liquidi per la progettazione, la realizzazione e la caratterizzazione di nuove organizzazioni molecolari, (collaborazioni: Università di Padova, di Pisa, di Cosenza, di Catania) 2002-2003
- ◆ Progetto FIRB: Piattaforme abilitanti per griglie computazionali ad elevate prestazioni orientate a organizzazioni virtuali scalabili, (collaborazioni: Università di Pisa, di Perugia, di Napoli) 2003-2005
- ◆ EU TMR Network: Molecular Design of Functional Liquid Crystals (FMRX-CT97 - 0121) (collaborazioni: Università di Padova, University of Southampton, University of Lisbon, University of Patras, University of Hull, University of Strasburg) 1997-2002
- ◆ NEDO (Japan) Network: New Dipolar Liquid Crystals : Synthesis, Simulation and Switching (collaborazione: University of Tokyo, University of Exeter, University of Strasburg, MIT), 1998-2001
- ◆ MURST PRIN: Struttura, Ordine, Dinamica e Applicazioni di Sistemi Liquido Cristallini, (collaborazioni: Università di Padova, di Pisa, di Cosenza, di Catania), 2000-2001
- ◆ MURST-M40 Cristalli liquidi: Struttura, Simulazioni al Calcolatore, Proprietà ed Applicazioni (collaborazioni: Università di Padova, di Pisa, di Cosenza, di Catania), 1997-1999
- ◆ EU HCM Network: Organization and Dynamics of Molecules in Ordered Phases: Integration of Experiments, Theoretical Models and Simulations, (CHRX-CT93-0282) (collaborazioni: Università di Padova, University of Southampton, University of Lisbon, University of Bristol, University of Utrecht, University of Siviglia), 1993-1997
- ◆ EU HCM Network: Molecular Organisation in Liquid Crystals Resulting from Particular Intermolecular Interactions, (CHRX-CT93-0161) (collaborazioni: University of Sheffield,

University of Southampton, University of Zaragoza, University of Patras, University of Bilbao, Università di Pisa, University of Berlin), 1993-1997

Sfruttamento dei risultati:

Alcune possibili applicazioni

- ◆ Elettronica molecolare
- ◆ Micromeccanica
- ◆ Microfluidica
- ◆ Biomedicale
- ◆ Fotonica
- ◆ Rivestimenti speciali

Tipologia di imprese destinatarie

- ◆ Industria elettronica
- ◆ Meccanica di precisione
- ◆ Materiali speciali

I principali rapporti realmente operativi con aziende della regione ed inerenti la tipologia/tematica

Attualmente non esistono rapporti con aziende della Emilia-Romagna inerenti la presente tematica di ricerca.

Link per informazioni

- ◆ <http://www.fci.unibo.it/~bebo/z/index.html>

Tematica 2: Precursori metallici per stampa a contatto da composti di coordinazione

La tematica di ricerca affronta due aspetti principali:

1) ottenimento di composti di coordinazione mono- e poli-nucleari dei metalli di transizione, funzionalizzati allo scopo di consentire la preparazione di monostrati molecolari su superfici di isolanti, semiconduttori e conduttori;

2) ottenimento di cluster mono- e bi-metallici di dimensioni nanometriche con caratteristiche di nanocondensatori e nanomagnetici molecolari e funzionalizzazione delle superfici di cui sopra con funzionalità adatte all'immobilizzazione di monostrati molecolari di detti composti.

Queste ricerche si pongono l'obiettivo di individuare, progettare, caratterizzare, sperimentare e trasferire all'industria, soprattutto elettronica, nuovi materiali ibridi per applicazioni in nanoelettronica e nanolitografia.

Le principali pubblicazioni scientifiche inerenti la tipologia/tematica

- ◆ D. Collini, C. Femoni, M. C. Iapalucci, G. Longoni and P. Zanello. Modulation of Electronic Behaviour of Metal Carbonyl Clusters. In "Perspectives in Organometallic Chemistry", Eds. C. G. Screttas and B. R. Steele, RS•C Books, vol 287, pp.183-195, 2003
- ◆ D. Collini, C. Femoni, M. C. Iapalucci, G. Longoni, P. H. Svensson, P. Zanello "Tuning Electronic Behaviour of Carbonyl Metal Clusters by Substitution of Interstitial and Capping Atoms: Synthesis and Structure of $[\text{Rh}_{14-x}\text{Ni}_x(\text{CO})_{25}]^n$ ($x = 1, n = 5; x = 2, n = 4; x = 5, n = 2, 3$) Bimetallic Clusters" *Angew. Chem.*, vol 41, pp. 3685-3688, 2002
- ◆ C. Femoni, M. C. Iapalucci, G. Longoni, P. H. Svensson, J. Wolowska "Homoleptic Carbonyl Ni-Pd Clusters: Synthesis of $[\text{Ni}_{16}\text{Pd}_{16}(\text{CO})_{40}]^{4+}$ and $[\text{Ni}_{26}\text{Pd}_{20}(\text{CO})_{54}]^{6-}$ and Structural Characterization of $[\text{NBu}^n_4]_4[\text{Ni}_{16}\text{Pd}_{16}(\text{CO})_{40}]^m$ " *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, vol 39, pp. 1635-1637, 2000
- ◆ Palazzi A., Stagni S, Bordoni S; Monari M., Selva S. "Interannular Conjugation in New Iron(II) 5-Aryl Tetrazolate Complexes." *Organometallics* 21(18), pp. 3774-3781, 2002
- ◆ Busetto, Luigi; Cassani, M. Cristina; Mazzoni, Rita; Albano, Vincenzo G.; Sabatino, Piera; Frediani, Piero; Rivalta, Eleonora. "Coordination Chemistry of Ester-Functionalized Cp Ligands. A Versatile Approach to the Chiral Hydroxyalkoxycarbonylcyclopentadienide $[\text{C}_5\text{H}_4\text{CO}_2(\text{CHMe})_2\text{OH}]^-$. Synthesis, Structure, and Catalytic Activity of Rhodium(I) and Iron(II) Complexes" *Organometallics* 21(23), pp. 4993-4999, 2002
- ◆ Albano, Vincenzo G.; Busetto, Luigi; Marchetti, Fabio; Monari, Magda; Zacchini, Stefano; Zanotti, Valerio. "Diiron η -Vinyliminium Complexes from Acetylene Insertion into a Metal-Aminocarbyne Bond" *Organometallics* 22(6), pp. 1326-1331, 2003

Le principali collaborazioni in ambito regionale, nazionale ed internazionale inerenti la tipologia/tematica

- ◆ Università degli Studi di Parma, Dipartimento di Fisica: tematiche riguardanti i nanomagneti molecolari e misure di magnetismo
- ◆ Università degli Studi di Siena, Dipartimento di Chimica: tematiche riguardanti le proprietà elettrochimiche dei composti mono- e poli-nucleari
- ◆ KTH di Stoccolma (Svezia): tematica riguardante lo studio delle proprietà elettroniche

I principali progetti passati e presenti inerenti la tipologia/tematica

- ◆ Partecipazione a FIRB negoziale dell' INFM, 2003 su: "Microsistemi e Nanomateriali"
- ◆ COFIN 1998 e 2000 su: " Cluster metallici: Aspetti di base e funzionali"
- ◆ Progetto Europeo ERBCHRXCT 940532 su: "Physics and Chemistry of Metal Cluster Compounds"
- ◆ Progetto Europeo CHRX-CT93-0277 su: "Structural Property Relationships in Main Group and Transition Metal Molecular Clusters"

Sfruttamento dei risultati:

Alcune possibili applicazioni

- ◆ Nanolitografia
- ◆ Nanoelettronica
- ◆ Elettronica molecolare
- ◆ Litografia molecolare

Tipologia di imprese destinatarie

- ◆ Industria elettronica
- ◆ Industria di packaging

I principali rapporti realmente operativi con aziende della regione ed inerenti la tipologia/tematica

Attualmente non esistono rapporti con aziende della Regione inerenti la presente tematica di ricerca.

Laboratori/strumentazioni già disponibili presso la struttura inerenti la tipologia/tematica

- ◆ Laboratori di sintesi e caratterizzazione spettroscopica
- ◆ Diffrattometro Raggi X per cristallo singolo e polveri

I possibili link per informazioni

- ◆ <http://www2.fci.unibo.it/~dcfi/groups/tmcc.htm>

Struttura 5: Dipartimento di Chimica "G. Ciamician" (UNIBO)

Università di Bologna

CIAM - Dipartimento di Chimica "G. Ciamician"

Indirizzo: via F. Selmi n.2, Bologna

Tel: 051-2099545

Fax: 051-2099545

Direttore: Prof. Norberto Roveri

Attività

L'attività di ricerca del Dipartimento di Chimica "G. Ciamician" è organizzata per gruppi di lavoro, specializzati nello sviluppo delle seguenti tematiche:

- ◆ **TEMA 1** - Simulazioni molecolari
- ◆ **TEMA 2** - Fotochimica e Chimica Supramolecolare

Tematica 1: Simulazioni Molecolari

Il gruppo di Simulazioni e Modellistica Molecolare indirizza la sua attività allo studio di sistemi complessi che vanno da nanotubi di carbonio, di cui sono ben note le proprietà elettroniche e meccaniche a sistemi supramolecolari, di cui vengono studiate le possibilità di utilizzo in campo nanotecnologico.

Le principali pubblicazioni scientifiche

Negli ultimi 5 anni il Gruppo Simulazioni Molecolari ha pubblicato oltre 60 articoli nelle più importanti riviste scientifiche tra cui vanno ricordati, tra gli altri, quelli riportati su riviste di interesse generale come Nature (2 articoli), Science (1 articolo) e Proceedings of the National Academy of Sciences (3 articoli).

Qui di seguito vengono elencate alcune delle principali pubblicazioni scientifiche del gruppo di ricerca.

- ◆ D.A. Leigh, A. Troisi, F. Zerbetto "A Quantum Mechanical Description of Macrocyclic Ring Rotation in Benzylic Amide [2]Catenanes", Chem. Eur. J., Vol. 7, pp.1450-1454, 2001
- ◆ D.M. Guldi, C. Luo, M. Prato, A. Troisi, F. Zerbetto, M. Scheloske, E. Dietel, W. Bauer, A. Hirsch "Parallel (Face-to-Face) Versus Perpendicular (Edge-to-Face) Alignment of Electron Donors and Acceptors in Fullerene Porphyrin Dyads: The Importance of Orientation in Electron Transfer", Journal Am. Chem. Soc., Vol. 123, pp. 9166-9167, 2001
- ◆ J.M. Zwier, A.M. Brouwer, W.J. Buma, A. Troisi, F. Zerbetto "Structure and photophysics of an old, new molecule: 1,3,6,8-tetraazatricyclo[4.4.1.1^{3,8}]dodecane", J. Am. Chem. Soc., Vol. 124, pp. 149-158, 2002
- ◆ F. Biscarini, M. Cavallini, D.A. Leigh, S. León, S.J. Teat, J.K.Y. Wong, F. Zerbetto "The Effect of Mechanical Interlocking on Crystal Packing: Predictions and Testing", J. Am. Chem. Soc., Vol. 124(2), pp.225-233, 2002
- ◆ M. Asakawa, G. Brancato, M. Fanti, D.A. Leigh, T. Shimizu, F. Zerbetto, S. Zhang "Switching 'On' and 'Off' the expression of Chirality in Peptide Rotaxanes", J. Am. Chem. Soc., Vol. 124(12), pp. 2939-2950, 2002
- ◆ V. Georgakilas, F. Pellarini, M. Prato, D.M. Guldi, M. Melle-Franco, F. Zerbetto "Supramolecular Self-Assembled Fullerene Nanostructures", Proc. Natl. Acad. Sci. US, Vol. 99, pp. 5075-5080, 2002
- ◆ G. Brancato, F. Coutrot, D.A. Leigh, A. Murphy, J.K.Y. Wong, F. Zerbetto "From reactants to products via simple hydrogen-bonding networks: Information transmission in chemical reactions", Proc. Natl. Acad. Sci. US, Vol. 99, pp. 4967-4971, 2002
- ◆ M. Cavallini, F. Biscarini, M. Massi, A. Farran-Morales, D.A. Leigh, F. Zerbetto "Spontaneous fabrication of microscopic arrays of supramolecular structures with submicron lengthscales", NanoLetters, Vol. 2, pp. 635-639, 2002

- ◆ S. León, D.A. Leigh, F. Zerbetto "The effect of guest inclusion on the crystal packing of p-tert-butylcalix[4]arenes", *Chemistry, A Eur. J.*, Vol. 8, pp. 4854-4866, 2002
- ◆ F.G. Gatti, S. León, J.K.Y. Wong, A.M. Farran Morales, S.J. Teat, C. Frochot, D.A. Leigh, A.M. Brouwer, F. Zerbetto "Light-induced Acceleration of a Large Amplitude Rotational Motion", *Proc. Natl. Acad. Sci. US*, Vol. 100, pp. 10-14, 2003
- ◆ S. Höfner, F. Zerbetto "On the cavitation energy of water", *Chemistry, A Eur. J.*, Vol. 9, pp. 566-569, 2003
- ◆ M. Cavallini, F. Biscarini, Salvador León, F. Zerbetto, G. Bottari, D.A. Leigh "Information storage using supramolecular surface patterns", *Science (BREVIA)*, 2003
- ◆ L. Bellarosa, F. Zerbetto "Enantiomeric excesses and chirality measure", *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 125, pp. 1975-1979, 2003
- ◆ E. Koudoumas, M. Konstantaki, M. Mavromanolakis, S. Couris, M. Fanti, F. Zerbetto, K. Kordatos, M. Prato "Large enhancement of the nonlinear optical response of reduced fullerene derivatives", *Chem., A Eur. J.*, Vol. 9, pp. 1529-1534, 2003
- ◆ A. Altieri, G. Bottari, F. Dehez, D.A. Leigh, J.K.Y. Wong, F. Zerbetto "Remarkable Positional Discrimination in Bistable, Light and Heat-Switchable, Hydrogen Bonded Molecular Shuttles", *A Angew. Chem. (Int. Ed. Engl.)*, Vol. 42, pp. 2296-2300, 2003
- ◆ M. Carano, T. Da Ros, M. Fanti, K. Kordatos, M. Marcaccio, F. Paolucci, M. Prato, S. Roffia, F. Zerbetto "Modulation of the Electrochemical Properties of Fullerene Derivatives", *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 125, pp. 7139-7144, 2003
- ◆ G. Teobaldi, F. Zerbetto "Molecular dynamics and implications for the photophysics of a dendrimer-dye guest-host system", *J. Am. Chem. Soc.*, Vol. 125, pp. 7388-7393, 2003
- ◆ D. A. Leigh, J. K. Y. Wong, F. Dehez, F. Zerbetto "Unidirectional Rotation in a Mechanically Interlocked Hydrogen Bonded Molecular Motor", *Nature*, Vol. 424, pp. 174-179, 2003

Brevetti

- ◆ "Procedimento per lo stoccaggio di informazione ad ultra-alta densità su film sottili di molecole bistabili" domanda di brevetto del 4/12/2002

I principali progetti passati e presenti

Nella tabella seguente sono elencati i progetti sviluppati dal gruppo di ricerca, specificando il ruolo ricoperto nell'attività, l'oggetto della ricerca e le collaborazioni nazionali ed internazionali attivate tramite il relativo progetto.

Progetti Attivi	Oggetto della Ricerca	Ruolo	Collaborazioni
EU-RTN-EMMA	Moti molecolari elettro-meccanici in architetture di rotassani	Partner	Università di Edinburgh Università di Bologna Università di Amsterdam, Università di Groeningen CEA ¹ Parigi Università di St. Andrews Università di Trieste CNR, Bologna
EU-RTN-MIPA	Architetture molecolari complesse in polimeri	Partner	Università di Warwick Università di Bologna Università di Leuven Università di Catania ICI (azienda inglese) Philips (azienda olandese)
EU-RTN-CassiusClays	Compositi a base di polimeri e argille	Partner	Università di Groningen Università di Edinburgh DSM (azienda olandese) Università di Bologna Università di Trieste Università di Vienna Università di Ioannina
EU-RTN-WONDERFULL	Materiali a base di carbonio	Partner	Università di Exeter Università di Trieste Università di Erlangen Università di Patras Università di Bologna Università di Paris
EU-FET-MechMol	Moti molecolari per trasformare proprietà di superfici	Partner	Università di Edinburgh Università di Groningen Università di CEA Università di Amsterdam Università di Bologna
FIRB-Carbonio	Studio di nanotubi di carbonio	Partner	Università di Milano Università di Trieste Università di Roma Università di Firenze Università di Bologna

¹ "Commissariat à l'Energie Atomique"

Sfruttamento dei risultati

Alcune applicazioni possibili

Le simulazioni permettono di predire le proprietà di molti materiali, riducendo i tempi di laboratorio. Tre esempi tipici di applicazione sono:

- ◆ miglioramento di proprietà meccaniche di materiali - aumento della resistenza meccanica in intercalati polimero-argilla;
- ◆ miglioramento delle proprietà di packaging alimentare per mezzo dell'aggiunta di scavengers all'interno del packaging;
- ◆ miglioramento delle performance ad alte temperature per mezzo dello studio di substrati con migliori proprietà di dispersione del calore.

Tipologia di imprese destinatarie

- ◆ Industria alimentare (packaging)
- ◆ Industria chimica e tessile (nuovi polimeri)
- ◆ Automotive (nuove plastiche)
- ◆ Industria farmaceutica (predizione attività biologica)

I principali rapporti realmente operativi con aziende della regione ed inerenti la tipologia/tematica

Non esistono attualmente rapporti specifici inerenti la tematica con le imprese della Emilia-Romagna.

Laboratori/strumentazioni già disponibili

- ◆ Sistema Beowulf di processori AMD
- ◆ "Farm" di stazioni Linux

Tematica 2: Fotochimica e Chimica Supramolecolare

Il gruppo di Fotochimica e Chimica Supramolecolare indirizza la sua attività allo studio di progettazione e costruzione di macchine molecolari fotochimiche. Tali sistemi sono strutturalmente organizzati e funzionalmente integrati ed in grado di elaborare un segnale luminoso per attuare funzioni complesse.

I sistemi supramolecolari attualmente in studio sono:

- ◆ fiili molecolari, interruttori, spine/prese e sistemi correlati: si tratta di sistemi molecolari che espletano a funzioni equivalenti a quelle tipiche delle componenti elettroniche macroscopiche;
- ◆ dendrimeri funzionali: si tratta di dendrimeri in grado di attuare funzioni quali la raccolta di luce (sistemi antenna) l'immagazzinamento di grandi quantità di carica elettrica, la risposta sensoriale, l'amplificazione di un segnale, il rilascio/complessazione di molecole mediante il controllo chimico o il controllo luminoso;
- ◆ macchine e motori molecolari: sono prototipi basati su pseudorotassani, rotassani, catenani e specie correlate nelle quali le parti componenti possono essere messe in movimento mediante un appropriato stimolo esterno;
- ◆ sistemi per l'elaborazione dell'informazione: ovvero prototipi di porte logiche molecolari, memorie, interruttori multi polari etc.;
- ◆ sensori e marcatori luminescenti: si tratta di sistemi del tipo host-guest contenenti specie luminescenti la cui emissione luminosa possa essere chimicamente controllata. I sistemi studiati sono costituiti da un numero discreto di componenti molecolari sia organici che inorganici, interconnessi mediante legami covalenti o di altro genere d'interazione quali il legame idrogeno, il legame a trasferimento di carica etc.. Tali sistemi sono ideati e realizzati per generare energia fotoindotta da spostamento di elettroni lungo di direttrici predeterminate o per funzioni tipo acceso/spento di segnali fotochimici (ad esempio luminescenza) come conseguenza di un input esterno come fotoni, elettroni, protoni, anioni, ioni metallici etc..

Le proprietà dei sistemi sopra descritti vengono studiate per mezzo di una varietà di strumentazione e di tecniche, quali:

- ◆ spettroscopie di emissione e di assorbimento
- ◆ metodi fotochimici
- ◆ tecniche di emissione ed assorbimento transiente
- ◆ metodi elettrochimici

Tali sistemi sono interessanti sia per aumentare le conoscenze di base (teorie del trasferimento elettronico e di energia) che per le potenziali applicazioni (conversione di energia, sensori e marcatori analitici, macchine e dispositivi molecolari).

Le principali pubblicazioni scientifiche

- ◆ R. Ballardini, V. Balzani, A. Credi, M. T. Gandolfi, M. Venturi, "Artificial Molecular-level Machines: Which Energy to Make Them Work?", *Acc. Chem. Res.*, Vol. 34, pp. 445 – 455, 2001
- ◆ F. Vögtle, M. Gorka, V. Vicinelli, P. Ceroni, M. Maestri, V. Balzani, "A Dendritic Antenna for Near-Infrared Emission of Nd³⁺ Ions", *ChemPhysChem*, vol. 1, pp. 769 – 773, 2001
- ◆ R. Ballardini, V. Balzani, A. Credi, M.T. Gandolfi, M. Venturi "Molecular-Level Machines Based on Photoinduced Electron Transfer Processes", *Structure and Bonding*, Vol. 99, pp. 163 – 188, 2001
- ◆ P. R. Ashton, V. Balzani, M. Clemente-Leon, B. Colonna, A. Credi, N. Jayaraman, F. M. Raymo, J. F. Stoddart, M. Venturi "Ferrocene-Containing Carbohydrate Dendrimers", *Chem. Eur. J.*, Vol. 8, pp. 673 – 684, 2002
- ◆ V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, "Le nanomacchine", *Le Scienze*, 2002
- ◆ R. Ballardini, V. Balzani, M. Clemente-Léon, A. Credi, M. T. Gandolfi, E. Ishow, J. Perkins, J. F. Stoddart, H.-R. Tseng, S. Wenger, "Photoinduced Electron Transfer in a Triad That Can Be Assembled/Disassembled by Two Different External Inputs. Toward Molecular-Level Electrical Extension Cables", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 124, pp. 12786 – 12795, 2002
- ◆ V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, "Controlled Disassembling of Self-Assembling Systems: Toward Artificial Molecular-Level Devices and Machines", *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, vol. 99, pp. 4814 – 4817, 2002
- ◆ V. Vicinelli, P. Ceroni, M. Maestri, V. Balzani, M. Gorka, F. Vögtle, "Luminescent Lanthanide Ions Hosted in a Fluorescent Polylysine Dendrimer. Antenna-like Sensitization of Visible and Near-infrared Emission", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 124, pp. 6461 – 6468, 2002
- ◆ U. Hahn, M. Gorka, F. Vögtle, V. Vicinelli, P. Ceroni, M. Maestri, V. Balzani, "Light Harvesting Dendrimers. Efficient Intra- and Inter-Molecular Energy-Transfer Processes in a Species containing Sixtyfive Chromophoric Groups of Four Different Types", *Angew. Chem. Int. Ed.*, vol. 41, pp. 3595 – 3598, 2002
- ◆ V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, "The Bottom-up Approach to Molecular-level Devices and Machines", *Chem. Eur. J.*, Vol. 8, pp. 5524 – 5532, 2002
- ◆ V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, "Molecular Devices and Machines – A Journey into the Nano World" Wiley-VCH, Weinheim, 2003
- ◆ V. Balzani, A. Credi, M. Venturi, "Molecular Logic Circuits", *Chem. Phys. Chem*, vol. 3, pp. 49 – 59, 2003

I principali progetti passati e presenti

Nella tabella seguente sono elencati i progetti sviluppati dal gruppo di ricerca, specificando il ruolo ricoperto nell'attività, l'oggetto della ricerca e le collaborazioni nazionali ed internazionali attivate tramite il relativo progetto.

Progetti Attivi	Oggetto della Ricerca	Ruolo	Collaborazioni
EU-RTN-MLDM "Molecular-Level Devices and Machines"	Progettazione e caratterizzazione di sistemi supramolecolari capaci di compiere funzioni predeterminate (ad es. movimenti meccanici)	Partner	Università di Pavia – Dip. di Chimica Generale School of Chemistry, Queen's University of Belfast Department of Organic Chemistry, Rijksuniversiteit Groeningen Departamento de Quimica, Universidade Nova de Lisboa Laboratoire de Chimie Organo-minerale, Université L. Pasteur, Strasbourg Department of Organic Chemistry, Weizmann Institute of Science, Israel
EU-STREP-BIOMACH "Molecular machines – Design and Nanoscale Handling of Biological Antetypes and Artificial Mimics"	Individuazione e studio di componenti molecolari fotoattivi per l'alimentazione ed il controllo di nanomotori	Partner	Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Ecole Polytechnique Federale, Lausanne Molecular Biophysics Group, Technical University Delft Nanoscale Science Department, Max Planck Institute of Solid State Research, Stuttgart Laboratory of Macromolecular and Organic Chemistry, Eindhoven University of Technology ETH, Zurich Institute Marie Curie, Paris Laboratoire de Chimie Organo-minerale, Université L. Pasteur, Strasbourg FOM-Institute for Atomic and Molecular Physics, Amsterdam
FIRB-Manipolazione molecolare per macchine nanometriche	Organizzazione e interfacciamento col mondo macroscopico dei congegni per l'elettronica molecolare e delle macchine molecolari	Partner	Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari del CNR, Milano Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali Istituto per la Sintesi Organica e la Fotoreattività del CNR, Bologna Istituto di Chimica e Tecnologie Inorganiche e dei Materiali Avanzati del CNR, Padova

Sfruttamento dei risultati

Alcune applicazioni possibili

- ◆ Controllo delle proprietà ottiche (colore, luminescenza) e fotochimiche (fotosensibilizzazione, fotostabilizzazione) di molecole e di materiali
- ◆ Realizzazione di motori e macchine nanoscopiche da incorporare in dispositivi ultraminiaturizzati
- ◆ Costruzione di un "computer chimico"
- ◆ Conversione fotochimica dell'energia solare in combustibili (fotosintesi artificiale)

Tipologia di imprese destinatarie

- ◆ Industria farmaceutica
- ◆ Industria alimentare
- ◆ Industria chimica e cosmetica
- ◆ Industria biomedica e biotech
- ◆ Industria micro-nanoelettronica
- ◆ Industria tessile
- ◆ Automotive
- ◆ Industria illuminotecnica
- ◆ Telecomunicazioni

I principali rapporti realmente operativi con aziende della regione ed inerenti la tipologia/tematica

Non esistono attualmente rapporti specifici inerenti la tematica con le imprese della Emilia-Romagna.

Laboratori/strumentazioni già disponibili

- ◆ Sorgenti luminose (lampade convenzionali e laser) per eccitazione continua e pulsata
- ◆ Spettrofotometri e spettrofluorimetri di ultima generazione, con possibilità di effettuare misurazioni di anisotropia della fluorescenza sia in stato stazionario che risolte nel tempo

- ◆ Apparecchiature per misure di luminescenza risolte nel tempo (tecniche time-correlated single-photon counting e a modulazione di fase; risoluzione temporale 100 ps)
- ◆ Apparecchiature per misure di assorbimento e di luminescenza risolte nel tempo, mediante eccitazione laser (intervallo temporale ps-ms)
- ◆ Strumentazione per lo studio spettroscopico di reazioni chimiche (tecnica a flusso interrotto) con risoluzione temporale nel campo dei ms

Struttura 6: INFAM - National Research Center nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S³)

INFAM - National Research Center nanoStructures and bioSystems at Surfaces (S³)

Indirizzo: via Campi 213/a - 41100-Modena

Telefono : 059 2055282

Direttore: Prof. Elisa Molinari

secretary e-mail: montauto.stefania@s3.infm.it

Attività

Il centro S3 è un centro di eccellenza di INFAM. Nello specifico, INFAM-S3 è particolarmente impegnato nello sviluppo delle seguenti tematiche di ricerca:

- ◆ **TEMA 1** - Nanofabbricazione top-down mediante focussed ion beam lithography
- ◆ **TEMA 2** - Calcoli ab initio e molecular design
- ◆ **TEMA 3** - Struttura di interfacce e superfici funzionalizzate

In riferimento a tali attività, le competenze che il centro è in grado di offrire sono le seguenti:

- ◆ simulazioni atomistiche basate sulla trattazione quantistica –(da principi primi o semi empirica) di nanostrutture di materiali prevalentemente molecolari di interesse sia nel campo della meccanica che in quello dell'optoelettronica;
- ◆ interpretazione delle proprietà macroscopiche per mezzo di modelli continui di natura elettrostatica, costruiti o utilizzando i risultati delle simulazioni atomistiche, o implementando i modelli stessi nelle simulazioni atomistiche (e.g., *polarizable continuum model* per la descrizione del solvente in nanostrutture organiche e biologiche, *nudged elastic band* per la ricerca di minimi globali di nanostrutture depositate su superfici inorganiche);
- ◆ simulazione dell'auto-aggregazione molecolare sulla base della soluzione della equazione di Poisson per le densità di carica delle singole molecole;
- ◆ determinazione attraverso la descrizione quantistica dello stato fondamentale della forma e dimensionalità (starti o isole) di nanostrutture depositate su supporti solidi;
- ◆ deposizione di molecole organiche su superfici di semiconduttore per realizzare le condizioni ottimali per la crescita di film bi-dimensionali di semiconduttori ad alto grado di perfezione strutturale;

- ◆ stati elettronici di polimeri organici isolati e in forma cristallina per la realizzazione di nanostrutture a emissione di luce coerente;
- ◆ studio delle geometrie e della struttura elettronica di bio molecole isolate quali DNA e proteine del rame;
- ◆ proprietà ottiche ed elettroniche di punti e fili quantici di semiconduttori;
- ◆ nanofabbricazione di sonde speciali per microscopie a scansione di sonda;
- ◆ fabbricazione di sistemi di elettrodi per la nanoelettronica;
- ◆ produzione di master per soft lithography.

Laboratori/strumentazioni già disponibili presso la struttura

- ◆ PC cluster con 48 processori, di cui: 16 nodi biprocessore (32 processori) modello: ibm x330 servers; processori Pentium III 1.4 Ghz MTX; memoria: 1 G reale; 8 nodi biprocessore (16 processori); modello: Xseries 335, processori Intel Xeon 2.6GHz/400MHz ram: 1,5 GB di memoria RAM rete interna: Gb; Disco: 70 gb disco utenti; 200 gb disco scratch; rete interna: fast ethernet
- ◆ Accesso a IBM SP4 e PC cluster CINECA
- ◆ Pacchetti software commerciali e non per simulazioni atomistiche e visualizzazione molecolare
- ◆ Laboratorio FIB. Sistema Focused Ion Beam (FIB). È una macchina a due fasci (FEI StrataTM DB 235) che combina una colonna FIB di alta risoluzione con sorgente di gallio liquido ed una colonna SEM equipaggiata con sorgente di elettroni Schottky Field Emission. FIB offre la possibilità di scolpire o patternare nano-strutture su differenti materiali con risoluzione spaziale fino a 20 nm
- ◆ Laboratori di Scienza delle superfici. Sono disponibili 4 laboratori equipaggiati con varie tecniche fra le quali: XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy), ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis), UPS (Ultra-violet Photoelectron Spectroscopy), AED (Auger Electron Diffraction), XPD (X-ray Photoelectron Diffraction), HREELS (High Resolution Electron Energy Loss Spectroscopy), scanning AES (Auger Electron Spectroscopy), LEED (Low Energy Electron Diffraction), variable temperature STM (Scanning Tunneling Microscopy), AFM (Atomic Force Microscopy)
- ◆ Laboratorio SPM: STM/AFM per misure in aria, atmosfera controllata, celle liquide ed elettrochimiche; AFM accoppiato con microscopio ottico invertito

Le principali pubblicazioni scientifiche inerenti tutte le tematiche

- ◆ A. Ferretti, A. Ruini, E. Molinari, M. J. Caldas "Electronic properties of polymer crystals: the effect of interchain interaction", Phys. Rev. Lett. 90, 086401, 2003
- ◆ A. Ruini, M. J. Caldas, G. Bussi, E. Molinari "Solid state effects on exciton states and optical properties of PPV", Phys. Rev. Lett. 88, 206403, 2002
- ◆ M. Rontani, F. Rossi, F. Manghi, E. Molinari, "Addition energies in semiconductor quantum dots: Role of electron-electron interaction", Appl. Phys. Lett. 72, 957, 1998
- ◆ R. Di Felice, A. Selloni, E. Molinari "A DFT study of cysteine adsorption on Au(111)", J. Phys. Chem B 107, 1151, 2003

-
- ◆ R. Di Felice, C. A. Pignedoli, C. M. Bertoni, A. Catellani, P. L. Silvestrelli, C. Sbraccia, F. Ancilotto, M. Palumbo, O. Pulci "Ab-Initio Investigation of the Adsorption of Organic Molecules at Si(111) and Si(100) Surfaces", Surf. Sci. 532-535, 982, 2003
 - ◆ C. A. Pignedoli, R. Di Felice, C. M. Bertoni "Dissociative chemisorption of NH₃ molecules on GaN(0001) surfaces" Phys. Rev. B 64, 113301, 2001
 - ◆ S. Nakhmanson, A. Calzolari, V. Meunier, J. Bernholc, M. Buongiorno Nardelli "Spontaneous polarization and piezoelectricity in boron nitride nanotubes", Phys. Rev. B 67, 235406, 2003
 - ◆ S. Corni, J. Tomasi "Lifetimes of electronic excited states of a molecule close to a metal surface", J. Chem. Phys. 118, 6481, 2003
 - ◆ S. Corni, C. Cappelli, R. Cammi, J. Tomasi "Theoretical approach to the calculation of vibrational Raman spectra in solution within the Polarizable Continuum Model", J. Phys. Chem. A 105, 8310, 2001
 - ◆ S. Ossicini, C. Arcangeli, O. Bisi, E. Degoli, M. Luppi, R. Magri, L. Dal Negro, L. Pavesi, NATO Science Series Volume: "Towards the First Silicon Laser", ed. L. Pavesi, S. Gaponenko, e L. Dal Negro, Kluwer Academic Publishers (Netherlands) s.l., 2003
 - ◆ R. Rinaldi, A. Biasco, G. Maruccio, R. Cingolani, D. Alliata, L. Andolfi, P. Facci, F. De Rienzo, R. Di Felice, E. Molinari, M. Verbeet, G. Canters "Electronic Rectification in Protein Devices" Appl. Phys. Lett., 82, 472, 2003
 - ◆ R. Rinaldi, A. Biasco, G. Maruccio, R. Cingolani, D. Alliata, L. Andolfi, P. Facci, F. De Rienzo, R. Di Felice, E. Molinari "Solid-State Molecular Rectifier Based on Self-Organized Metalloproteins", Adv. Mater., 14, 1449-1453, 2002
 - ◆ C. Albonetti, A. Alessandrini, R. Berti, U. Valdré "Preliminary results on the implementation of a temperature probe based on a thermistor in an AFM" Proc. Of 5th Multinational Congress on Electron Microscopy Sept. 20-25, 2001, Lecce, pp.551-552

I principali progetti passati e presenti inerenti tutte le tematiche

- ◆ Cofin 2003: Crescita epitassiale e studio di nanostrutture magnetiche confinate lateralmente, modellate mediante fascio ionico focalizzato
- ◆ FIRB 2002 NOMADE
- ◆ STREP FP6 "Prosens" Matrici di MEMS su SOI per rivelazione integrata di reazioni biochimiche
- ◆ PRA INFM SINPROT
- ◆ IST-FET 2003-2005 "DNA-Based Molecular Nanowires". Partecipanti: HUJI, TAU (Israele), UAM, UPV (Spagna), EPFL (Svizzera), U-Regensburg (Germania)
- ◆ EXCITING: "First-Principle Approach to the Calculation of the Optical Properties of Solids". RTN 2002-2005. Partecipanti: KFUG-Graz (Austria), UAA-Aarhus (Danimarca), UCL (Belgio), FUB-Berlin, MPIH (Germania), University of Uppsala (Svezia)

- ◆ SAMBA: "Self-Assembling of copper Metalloproteins at nanoscale for Biodevice Applications". IST-FET 2001-2004. Partecipanti: University of Leiden, DUT-Delft (Olanda), Oxford University (Inghilterra)
- ◆ SQID: "Semiconductor-based Implementation of Quantum Information Devices". IST 2000-2002. Partecipanti: ISI (Italia), University of Southampton (Inghilterra), ENS-Paris (Francia), U-Muenster, FUB-Berlin (Germania), WRO (Polonia), SOLVAY-Brussels (Belgio)
- ◆ NanO-MoleculAr DEvices (NOMADE)". MIUR-FIRB negoziale 2002-2005. Partecipanti: CNR-IMM-Bologna, SNS-Pisa
- ◆ "Quantum Phases of Ultra-low Electron Density Semiconductor Heterostructures". MIUR-FIRB 2002-2005. Partecipanti: INFM-NEST-Pisa, SNS-Pisa
- ◆ "Electronic and Structural Properties of III-V Confined Systems realised for MBE (Molecular Beam Epitaxy)". MURST-COFIN 2000-2002. Partecipanti: INFM-Roma2
- ◆ "Nanostructure Systems at Surfaces". MAE Italy-Russia 2003
- ◆ "Quantum Control of Charge and Spin State: the Next Generation Nanodevices". MAE Italy-Japan 2003.
- ◆ "Optical and Electronic Properties of Organic Materials". MAE Italy-Brazil 2002
- ◆ 1MESS: "First Principles Approach to the Morphological Evolution of Semiconductor Surfaces. Fundamental Aspects Implications for Crystal Growth". PRA 2000-2003
- ◆ "Ab initio Simulation of Electron-Transfer (Bio)Molecules with Potential Applications in Electronic Devices". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Simulation of DNA-based Molecular Nanowires". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "A DFT study of thiol-terminated (bio)molecules on metal surfaces". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Theoretical Simulations of the Early Stages of SiC growth at the Atomic Level over a Broad Range of Time Scales". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Ab-initio Calculation of Excitonic States in Organic Crystals". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Ab Initio Simulation of Optical Properties in Carbon Nanotubes". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Ab-Initio Calculations of Cd Hyperfine Fields in Ni Hosts". SUPERCOMPUTING 2003. Franca Manghi. "First Principles Investigation of Exchange-bias FM/AFM Interfaces". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Few-Particle Strongly Correlated States in Realistic Semiconductor Quantum Dots". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Hydrogen Bubbles in Silicon". SUPERCOMPUTING 2003
- ◆ "Ab-initio Simulation of Molecules Deposition on SiC Surfaces". Supercomputing 2003
- ◆ "Large Scale Atomistic Simulations of SiC Surfaces and Thin Films". Supercomputing 2002
- ◆ "Theoretical Description of Gan Growth". SUPERCOMPUTING 2002
- ◆ "First-Principle Study of the Cu Site of the Electron Transfer Protein Azurin". SUPERCOMPUTING 2002
- ◆ "Electronic Properties of Model Oligonucleotides: G4 and poly(G)-poly(C)". SUPERCOMPUTING 2002

- ◆ "A DFT Study of Self-Assemble Organic Monolayers on Metal Surfaces". Supercomputing 2002
- ◆ "Electronic Properties of the Normal State of High Tc Superconductors". Supercomputing 2002

Possibili link per informazioni

- ◆ <http://www.s3.infm.it>

Struttura 7: SACMI Imola S.p.A

SACMI Imola

Indirizzo: Via Selice Provinciale, 17/A

Tel: 0542-60.71.11

Fax: 0542-64.23.54

Email: sacmi@sacmi.it

Sito internet: <http://www.sacmi.com>

Attività

SACMI IMOLA è una società cooperativa italiana con sede a Imola, a capo di un gruppo internazionale leader mondiale nella progettazione, produzione e commercializzazione di macchinari ed impianti per l'industria ceramica, l'industria della plastica, per il Beverage &Packaging e per il Food Processing.

SACMI investe ingenti risorse economiche ed umane nella ricerca e sviluppo. Infatti, l'azienda dispone di un Centro Ricerche e Sviluppo interno d'avanguardia, costituito da laboratori chimico-fisici, laboratori tecnologici ed impianti pilota. Il Centro Ricerche si estende su una superficie di circa 6000 mq, in cui trovano occupazione 130 ricercatori e tecnici. L'attività di ricerca che si svolge all'interno del Centro coinvolge tematiche inerenti tutte le attività del gruppo (industria ceramica, industria della plastica, Beverage &Packaging e Food Processing).

Per quanto riguarda il settore ceramico il Centro Ricerche comprende:

- ◆ un laboratorio scientifico equipaggiato con strumentazioni per l'analisi chimico-fisica dei materiali, quali ad esempio: microscopio elettronico a scansione, diffrattometro a raggi X, spettrometro al plasma, granulometro laser, porosimetro a mercurio, analizzatori termici, etc.;
- ◆ un ampio e completo impianto pilota che consente di riprodurre le lavorazioni industriali più innovative oggi impiegate nella produzione di piastrelle e sanitari.

Parimenti il laboratorio destinato al Packaging è specializzato nel controllo dei contenitori alimentari con particolare riferimento alle tecniche di formatura dei materiali polimerici. In questo ambito è di primaria importanza lo sviluppo di tecnologie innovative per la realizzazione di preforme in PET, destinate alla produzione per soffiaggio delle più moderne tipologie di bottiglie in materiale plastico. Il Laboratorio Packaging ha inoltre sviluppato un sistema innovativo per il controllo non distruttivo della qualità della frutta, basato sulla tecnologia del vicino infrarosso (NIR), che consente la determinazione del grado zuccherino (°Brix) e di maturazione dei singoli frutti.

Infine nel 2002 è stato inaugurato il nuovo Centro Ricerche Avanzate, indirizzato allo sviluppo di sistemi di controllo di processo (Food Processing), quali i sistemi di visione artificiale ed i sistemi

olfattivi elettronici. Questi ultimi, che trovano applicazione principalmente nei settori alimentare ed ambientale, sono costituiti da sensori per gas a base i film sottili di ossidi metallici semiconduttori che vengono prodotti el centro stesso in camere ad atmosfera controllata.

Ad oggi il gruppo detiene oltre 630 brevetti e 15 PTC (Patent Cooperation Treaty).

In sintesi Sacmi ha come principali linee di attività:

- ◆ **TEMA 1** - La standardizzazione di materiali, manufatti, processi
- ◆ **TEMA 2** - L'integrazione di processi di nanofabbricazione in prodotti per packaging
- ◆ **TEMA 3** - L'upscaling e validazione di processi

Struttura 8: UHV - Comparto UHV Parma

UHV - Comparto UHV Parma

Attività

Le imprese inquadrare nel comparto ultra alto vuoto di Parma sono a forte impatto tecnologico. Le tecniche e la conoscenza maturata da tale comparto tecnologico spaziano dalla meccanica fine alla scienza e tecnologia dei materiali, alla criogenia al design ed ingegnereizzazione di componenti speciali a meccanica complessa (movimentazioni meccaniche di alta precisione in ultra vuoto, connessi problemi tribologici, usura di materiali speciali per alte e basse temperature).

Le principali competenze sviluppate all'interno del Comparto UHV Parma fanno riferimento al seguente tema:

- ◆ **TEMA 1** - Progettazione e costruzione componenti e sistemi per crescita e fabbricazione in ambiente controllato

Struttura 9: Organic Spintronics Srl

OS - Organic Spintronics Srl

Referente: Dr. Carlo Taliani

Attività

Organic Spintronics (OS) è uno spin-off del ISMN-BO del CNR. E' stata fondata nel 2003 con la missione di sviluppare e commercializzare tecnologie e processi di controllo dello spin per l'ottimizzazione della efficienza di display OLED e per lo sviluppo di innovative memorie e dispositivi logici basati su semiconduttori organici.

La società nasce dall'esperienza maturata nel campo delle proprietà elettroniche dei semiconduttori organici, che ha permesso negli anni '90 di verificare come i semiconduttori organici (ad esempio lo sexitiofene) fossero in grado di sostenere lo sviluppo di una nuova elettronica basata sulla materia soffice (soft-matter) per la realizzazione di dispositivi quali i transistor ad effetto di campo (FET) o diodi organici emettitori di luce (OLED) o dispositivi fotovoltaici.

L'attività principale di Organic Spintronics consiste nello sviluppo di nuovi materiali nanostrutturati, tecnologie e processi adeguati al controllo ed alla manipolazione della polarizzazione di spin di portatori di carica. La combinazione di tecnologie dei materiali, dei processi e di fabbricazione costituisce la base del nuovo paradigma per le tecnologie dell'informazione. Il principale obiettivo di Organic Spintronics risiede nello sfruttamento del know-how sull'utilizzo combinato di nuovi materiali ferromagnetici a temperatura ambiente e di semiconduttori organici per il controllo della polarizzazione di spin in dispositivi spintronici.

In sintesi, Organic Spintronics sviluppa le seguenti tematiche, quali principali attività:

- ◆ **TEMA 1** - Sintesi e deposizione di nanotubi
- ◆ **TEMA 2** - Studio e validazione di processi e dispositivi ibridi/organici