

Il Centro “Superfici ed Interfasi Nanostrutturate” (NIS dall’acronimo inglese) è un Centro di Eccellenza Nazionale che riunisce un gruppo di ricercatori di area Chimica, Fisica e Biologica dell’Università di Torino, nato nel marzo 2003 in seguito ad un complesso processo progettuale e di valutazione. Si tratta di una associazione di ricercatori finalizzata alla collaborazione interdisciplinare nel campo delle nanotecnologie delle superfici e delle interfasi, attraverso la condivisione di risorse e con progetti di ricerca specifici. A circa due anni dall’inizio dell’attività proponiamo con questa pubblicazione un conciso esame dell’attività svolta e dei programmi di sviluppo del Centro, avviato a trasformarsi in un’istituzione scientifica stabile, inserita in modo sinergico nel contesto della ricerca industriale ed accademica della regione.

ADRIANO ZECCHINA

Il primo motivo di soddisfazione da sottolineare è quello riguardante le collaborazioni e l’interdisciplinarietà. Lo sforzo di unire e valorizzare attività di ricerca frammentate ha caratterizzato l’indirizzo del Centro. La portata di questo sforzo si può verificare non solo dai programmi scientifici, ma anche dalle tipologie di borse di studio finanziate e dagli interventi per l’acquisizione di strumentazione comune.

Il Centro ha una funzione locale ed una collocazione internazionale. La sua produttività scientifica, misurata secondo gli standard bibliometrici internazionali, è un motivo di grande soddisfazione. Il numero di pubblicazioni degli afferenti NIS su riviste internazionali soggette a *peer review* è significativo, e non ha uguali tra le istituzioni locali e nazionali dello stesso tipo. Questa produzione si riflette in un’elevata partecipazione dei lavori dei nostri affiliati alla valutazione nazionale della ricerca realizzata recentemente dal CIVR.

Lo sviluppo di una politica di organizzazione di una fitta rete di workshop (NIS Colloquia) a carattere nazionale ed internazionale è un secondo elemento di merito da evidenziare. Con modeste risorse economiche ed un formato organizzativo originale, l’attività entusiasta di molti afferenti al Centro ha permesso di organizzare una serie di workshop di alto livello scientifico che ha attratto almeno 800 ricercatori, di cui molti stranieri, di altre università italiane e dell’industria. Tale programma continuerà nel futuro con uguale intensità.

L’attività locale del Centro si realizza attraverso progetti propri, ma anche con collaborazioni con gli altri centri di ricerca e con le aziende del territorio. L’accresciuta visibilità dei laboratori accademici coinvolti ed una linea di lavoro dedicata al trasferimento tecnologico, hanno portato un forte impulso alle collaborazioni industriali, testimoniato dal numero rilevante di contratti per lo svolgimento di ricerche e servizi scientifici per le aziende. Nella direzione del potenziamento di questa attività si colloca inoltre l’apertura imminente di un laboratorio distaccato di ricerca applicata presso il Tecnoparco del Lago Maggiore a Verbania.

L'integrazione nel sistema regionale della ricerca è un nostro obiettivo primario, ed ha trovato attuazione soprattutto attraverso i progetti di Ricerca Applicata finanziati dalla Regione Piemonte. In quell'ambito, il NIS è il principale soggetto finanziato, attraverso progetti di collaborazione cui partecipano i tre atenei del Piemonte e numerosi laboratori industriali. Parimenti, il Centro è parte attiva nella fase di avvio delle associazioni di coordinamento piemontese nel campo delle nanotecnologie e delle tecnologie dell'idrogeno.

Infine è da sottolineare il buon rapporto stabilito con la Compagnia S. Paolo che ha concesso al NIS un finanziamento rilevante che permetterà al Centro di proseguire la sua azione nei mesi a venire. È intendimento di tutti gli aderenti di mostrare che questa fiducia della Compagnia è ben riposta.

Molti aspetti dell'attività del centro non sono ancora soddisfacenti. Tra questi, cito solamente l'inadeguatezza degli spazi, il ritardo nella realizzazione di nuovi laboratori comuni, ed i limiti intrinseci imposti dalla nostra natura giuridica ed organizzativa. A tutti questi problemi si sta cercando di porre rimedio, con fatica ma anche con entusiasmo.

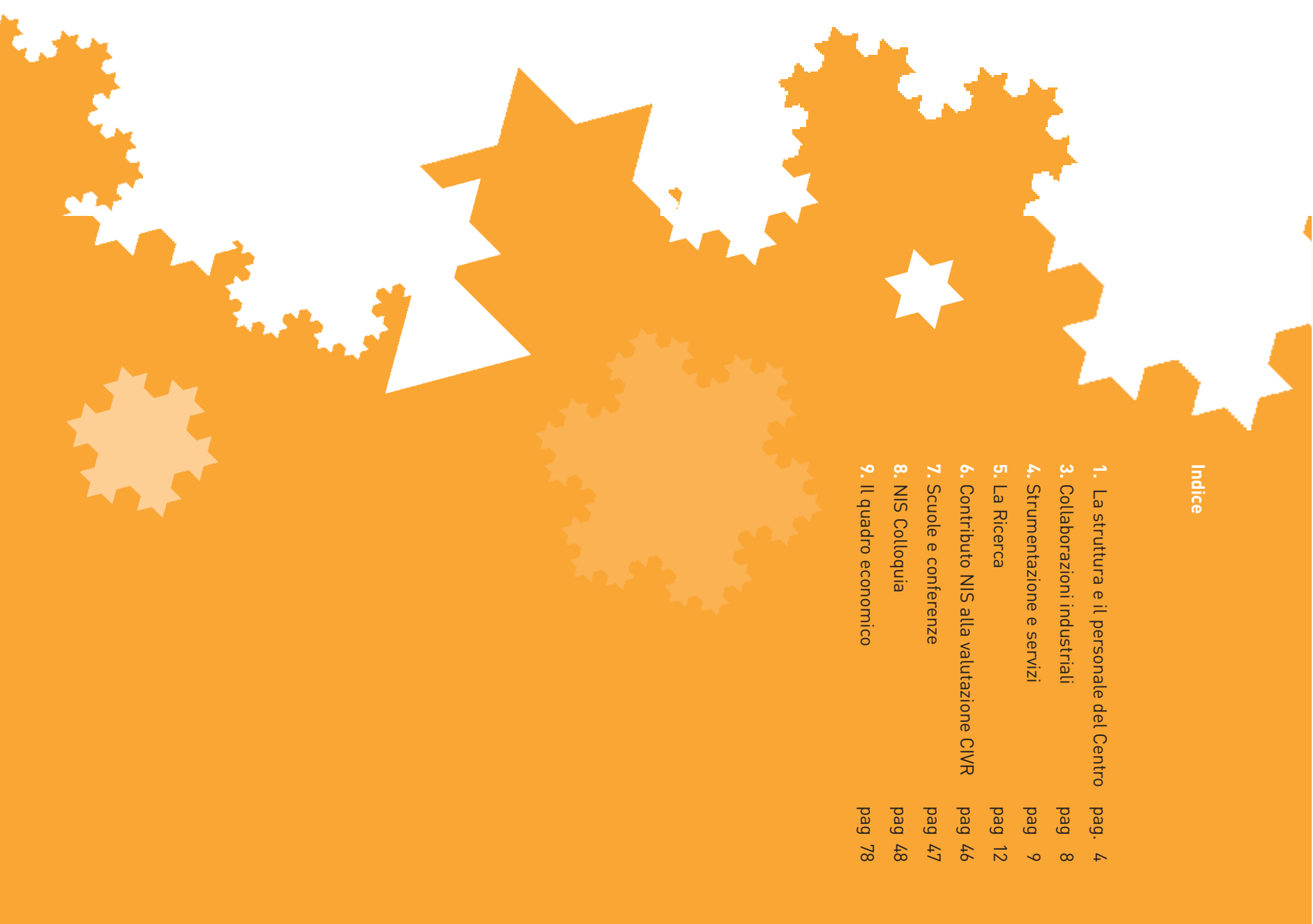
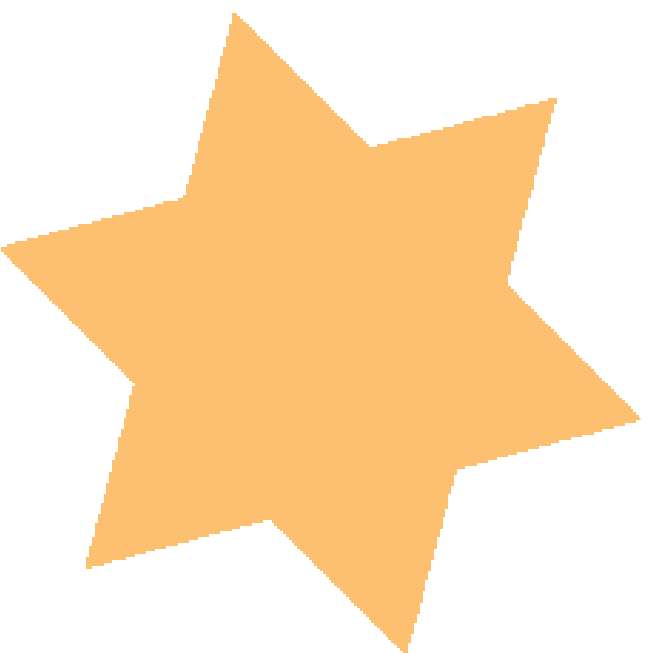
Pertanto noi tutti riteniamo che questa esperienza debba continuare con forza perché essa ha veramente rappresentato un salto di qualità, ancorché modesto e perfezionabile, nell'ambito di un certo gruppo di discipline della nostra Università. Con la documentazione che segue mi propongo di argomentare queste conclusioni fornendo ai lettori un resoconto accurato e stimolante della nostra attività.



Adriano Zecchina

Indice

1. La struttura e il personale del Centro	pag. 4
3. Collaborazioni industriali	pag 8
4. Strumentazione e servizi	pag 9
5. La Ricerca	pag 12
6. Contributo NIS alla valutazione CIVR	pag 46
7. Scuole e conferenze	pag 47
8. NIS Colloquia	pag 48
9. Il quadro economico	pag 78



LA STRUTTURA E IL PERSONALE di Elio Giamello

Una analisi anche sommaria del personale afferente al Centro di Eccellenza NIS fa emergere la natura composita e interdisciplinare di questa struttura. Dai vari Dipartimenti scientifici coinvolti hanno aderito al NIS una settantina di unità di personale universitario strutturato e sono al momento attivi nell'orbita del Centro di Eccellenza altrettanti non strutturati suddivisi tra Borsisti, Assegnisti (praticamente tutti Dottori di Ricerca) e studenti di Dottorato.

Il personale strutturato ha il suo nucleo quantitativamente più esteso nei Dipartimenti chimici dell'Ateneo ma la partecipazione dei dipartimenti fisici, biologici e di neuroscienze è ben più di una presenza occasionale. Il contatto e lo scambio di esperienze in seno al NIS sono stati il punto di partenza di una serie di azioni in collaborazione che sono l'elemento caratterizzante e la cifra più originale del Centro di Eccellenza torinese.

La settantina di persone con contratti a tempo determinato costituisce un insieme a composizione variabile ma la cui forza numerica tende a rimanere costante nel tempo poiché le persone in uscita sono quasi sempre sostituite da forze fresche in ingresso. La presenza di studenti di dottorato (o "dottorandi") è prevalente in questo insieme (circa il 65%) e in questo il NIS ricalca la struttura e le prassi dei laboratori di ricerca dei paesi dell'Europa più sviluppata dove il dottorato è la fase cruciale della formazione di un futuro ricercatore e, al contempo, il momento primario della produzione di nuova conoscenza. Questo insieme di ricercatori giovani (dottorandi e "post-doc") con diversa formazione è la vera struttura portante della ricerca scientifica in seno al NIS e ne costituisce la linfa vitale.

LA STRUTTURA DEL CENTRO

Denominazione:

Centro di Eccellenza "Superfici ed Interfasi Nanostrutturate - Centre of Excellence "Nanostructured Interfaces and Interfaces" (NIS)

Natura giuridica:

Centro di Eccellenza ai sensi del D.M. n. 193 del 17/10/2003. La funzione legale ed amministrativa è esercitata dal Dipartimento di Chimica IFM dell'Università degli Studi di Torino. Il finanziamento ministeriale di avvio termina nel Marzo 2007. A partire da quella data, il Centro prenderà natura giuridica propria, ora in fase di definizione.

Istituzioni Affiliate:

Università di Torino: Dipartimenti di Chimica I.F.M., Chimica Generale e Organica applicata, Neuroscienze, Biologia Animale e dell'Uomo, Fisica Sperimentale, Chimica Analitica. Università del Piemonte Orientale: Dipartimenti Di.S.C.A.F.F. e Di.S.T.A.

Organi e Incarichi:

Direttore (con funzioni di indirizzo), Consiglio Scientifico (funzione decisionale), Segretario, Coordinatori delle Linee di Ricerca.

Direttore: Adriano Zecchina

Consiglio Scientifico: Ermanno Barni, Livio Battezzati*, Silvia Bordiga, Emilio Carbone*, Salvatore Coluccia*, Elio Giamello*, Claudio Manfredotti*, Claudio Morterra*, Claudio Minero, Cesare Pisani (con * sono indicati i coordinatori delle linee di ricerca).

Segretario: Gabriele Ricchiardi

Personale (Aprile 2006):

circa 65 docenti (Professori ordinari, associati e ricercatori), 8 Tecnici e circa 80 giovani ricercatori in formazione (Dottorandi, titolari di Borse di Studio, Assegnisti di Ricerca).

PERSONALE DIPENDENTE DELL'UNIVERSITÀ

(i Dipartimenti di appartenenza ed i recapiti sono disponibili all'indirizzo <http://www.unico.it>)

Professori Ordinari:

Marcello BARRICCO
Ermanno BARNI
Flora BOCCUZZI
Livo BATTEZZATI
Emilio CARBONE
LUIGI CATTEL
Oscar CHIANTORE
Salvatore COLUCCIA
Luigi COSTA
Giuseppe DELLA GATTA
Roberto DOVESI
Bice FUBINI
Giovanna GHIOTTI
Elio GIAMELLO
Davide LOVISOLO
Claudio MANFREDOTTI
Leonardo MARCHESE
Claudio MINERO
Claudio MORTERRA
Lorenza OPERTI
Ezio PELIZZETTI
Cristiana PERONI
Cesare PISANI

Professori Associati:

Daniela ALLASIA
Vera BOLIS
Silvia BORDIGA
Valentina CARABELLI
Anna CHIORINO
Carla DISTASI
Renzo LEVI
Maria Paola LUDA
Gianmario MARTRA
Valter MAURINO
Luca Maria MUNARON
Giuseppe RIONTINO
Carla ROETTI
Domenica SCARANNO
Giuseppe SPOTO
Piero UGLIENGO
Guido VISCARDI
Ettore VITTONI
Paolo VOLPE

Personale Tecnico e Assistenti:

Angelo AGOSTINO
Susanna ANTONIOTTI
Claudia BAROLO
Elena BOTTIZZO
Alessandro DAMIN
Ivana FENOGLIO
Maela MANZOLI
Giuseppe MARELLA

Ricercatori:

Pierangiola BRACCO
Valentina BRUNELLA
Paola CALZA
Silvia CASASSA
Giuseppina CERRATO
Anna Maria FERRARI
Enrica GIANOTTI
Carlo LAMBERTI
Massimo LAZZARI
Giuliana MAGNACCA
Maria Cristina PAGANINI
Pierluigi QUAGLIOTTO
Gabriele RICCHIARDI
Paola RIZZI
Dominique SCALARONE

Adriano ZECCHINA

Paolo VENTURELLO

Gian Angelo VAGLIO

Claudio SANTORO

Giuseppina RINAUDO

Cesare PISANI

Cristiana PERONI

Ezio PELIZZETTI

Lorenza OPERTI

Claudio MORTERRA

Claudio MINERO

Leonardo MARCHESE

Claudio MANFREDOTTI

Davide LOVISOLO

Elio GIAMELLO

Giovanna GHIOTTI

Bice FUBINI

Roberto DOVESI

Giuseppe DELLA GATTA

Luigi COSTA

Salvatore COLUCCIA

Oscar CHIANTORE

LUIGI CATTEL

Emilio CARBONE

Livo BATTEZZATI

Flora BOCCUZZI

Ermanno BARNI

Marcello BARRICCO

Professori Ordinari:

(i Dipartimenti di appartenenza ed i recapiti sono disponibili all'indirizzo <http://www.unico.it>)

Personale non strutturato

Elenchiamo il personale assunto a vario titolo a tempo determinato. Include i beneficiari di Borse di Studio, Assegni di Ricerca, e vari altri tipi di contratto.

NOME	COGNOME	RUOLO	SEDE
Valentina	AINA	DR	Chimica IFM
Paolo	ARIANO	PD	Biol. animale e dell'uomo
Daniele	BALDISSIN	DR	Chimica IFM
Alessia	BARBAGLIA	DR	Discaff - Unipmn
Nadia	BARBERO	DR	Chimica GOA
Tanya	BASER	DR	Chimica IFM
Gloria	BERLIER	A	Chimica IFM
Daniele	BERTAGGIA	DR	Chimica IFM
Serena	BERTARIONE R. R.	AR	Chimica IFM
Luca	BERTINETTI	DR	Chimica IFM
Chiara	BERTOLINO	PD	Chimica IFM
Chiara	BISIO	A	Dista- Unipmn
Francesca	BONINO	AR	Chimica IFM
Claudia	BUSCO	AR	Discaff - Unipmn
Stefano	CAGLIERO	DR	Fisica sperimentale
Gabriella	CAPECCHI	AR	Chimica IFM
Giuseppe	CAPUTO	A	Chimica IFM
Ilenia	CARPENTIERI	DR	Chimica IFM
Micaela	CASTELLINO	DR	Fisica sperimentale
Federico	CESANO	AR	Chimica IFM
Patrizia	CESARO	DR	Scienze mediche - Unipmn
Raffaella	CESCHINO	DR	Chimica IFM
Mario	CHIESA	AR	Chimica IFM
Donato	COCINA	DR	Chimica IFM
Elisabetta	COLOMBO	DR	Fisica sperimentale
Marta	CORNO	DR	Chimica IFM
Roberto	COSSIO	DR	Fisicasperimentale
Katuscia	COSTABELLO	DR	Chimica IFM
Stefano	CURIOTTO	DR	Chimica IFM
Simona	DALMAZZO	DR	Biol. animale e dell'uomo
Domenico	D'ANGELO	AR	Chimica GOA
Chiara	DE MARIA	A	Chimica GOA
Marco	DI CHIO	DR	Chimica IFM
Massimo	DI MARTINO	DR	Chimica IFM
Jane	ESTEPHANE	DR	Chimica IFM
Diego	FANTINI	DR	Neuroscienze
Mauro	FERRERO	DR	Chimica IFM
Lucia	FASSONE	DR	Scienze mediche - Unipmn

DR Dottorando di Ricerca
PD Borsa di Studio Post Doc
AR Assegnista di Ricerca
A altro

Personale interamente a carico del Centro NIS
Personale con stipendi cofinanziati dal Centro NIS
Personale con stipendi di altre amministrazioni
Personale a Carico di ASP (Associazione Sviluppo Piemonte)

Ugo	FINARDI	AR	Chimica IFM
Gianluca	IORE	DR	Chimica IFM
Alessandra	FIORIO PLA	PD	Biologia animale e dell'uomo
Francesca	FROLA	DR	Chimica IFM
Yuri	GARINO	DR	Fisica sperimentale
Giorgio	GATTI	A	Dista- Unipmn
Anna	GIANCIPPOLI	AR	Neuroscienze
Alessandra	GILARDINO	AR	Biologia animale e dell'uomo
Elena	GROPPPO	AR	Chimica IFM
Daniela	GUIDO	A	Neuroscienze
Alessandro	LO GIUDICE	A	Fisica sperimentale
Danilo	LUSSANA	DR	Chimica IFM
Chiara	MANFREDOTTI	AR	Fisica sperimentale
Andrea	MARCANTONI	AR	Neuroscienze
Lorenzo	MASCHIO	DR	Chimica IFM
Admir	MASIC	A	Chimica IFM
Marco	MASSAZZA	A	Chimica IFM
Sara	MORANDI	AR	Chimica IFM
Monica	NOVARA	PD	Neuroscienze
Mauro	PALUMBO	AR	Chimica IFM
Marco	PANETTA	DR	Chimica GOA
Claudia	PAPANDREA	DR	Chimica IFM
Alessandra	PERARDI	AR	Chimica IFM
Rafael	PICCIN	DR	Chimica IFM
Gianbartolo	PICOTTO	A	Imgc "G. Colonnetti"
Rebecca	PLOEGER	DR	Chimica IFM
Carmelo	PRESTIPINO	AR	Chimica IFM
Federica	PRINETTO	A	Chimica IFM
Laura	REGLI	DR	Chimica IFM
Mickaël	RIVALLAN	DR	Chimica IFM
Montserrat	RODRIGUEZ D.	PD	Chimica IFM
Marta	SATTA	DR	Chimica IFM
Paola	SECCO	DR	Scienze mediche - Unipmn
Jennifer	TATA	DR	Chimica IFM
Cristiana	TOMATIS	DR	Biologia animale e dell'uomo
Maura	TOMATIS	AR	Chimica IFM
Sergio	TOSONI	DR	Chimica IFM
Simonetta	TUMBIOLO	AR	Chimica IFM
Jasim	UDDIN	DR	Chimica IFM
Jacopo	URGNANI	DR	Chimica IFM
Sandro	USSEGLIO NANOT	DR	Chimica IFM
Loredana	VALENZANO	A	Chimica IFM
Floriana	VINDIGNI	DR	Chimica IFM
Jenny	VITILLO	PD	Chimica IFM
Polyanna	ZAMBURLIN	PD	Biologia animale e dell'uomo
Marco	ZANETTI	AR	Chimica IFM
Alessandro	ZIGGIOTTI	DR	Chimica IFM

LE COLLABORAZIONI INDUSTRIALI di Ugo Finardi

L'impegno per il trasferimento tecnologico delle conoscenze scientifiche di base dal mondo della ricerca a quello della produzione industriale è fondamentale per il Centro di eccellenza NIS. Le nanotecnologie delle superfici trovano infatti applicazioni in svariati settori dell'industria manifatturiera. Ciò è vero non solo nei settori ad alta tecnologia ma anche in settori tradizionalmente considerati maturi o a bassa tecnologia, quali la produzione e la trasformazione dei materiali metallici e polimerici, o dei materiali da costruzione.

Fin dalla fondazione, il Centro persegue l'intensificazione delle collaborazioni di ricerca tra i propri affiliati e le aziende. Gli strumenti principali di questa attività sono la partecipazione a bandi di finanziamento per la ricerca industriale, la realizzazione di iniziative di sensibilizzazione in collaborazione con Associazioni di Categoria e Camere di Commercio ed una capillare attività di coinvolgimento di laboratori industriali nelle iniziative scientifiche di carattere pubblico (ad esempio i seminari NIS Colloquia). Al trasferimento Tecnologico è dedicata una delle sei Linee di Ricerca del Centro, coordinata dal Prof. Salvatore Coluccia.

LE PRINCIPALI COLLABORAZIONI INDUSTRIALI IN ATTO:

BUZZI UNICEM SPA

multinazionale nel campo del cemento e dei materiali da costruzione, collabora con il NIS allo scopo di sviluppare materiali innovativi basati su funzionalità catalitiche: materiali cementizi autopulenti e con proprietà di fotodegradazione di inquinanti.

OZELLA SPA

multinazionale leader nel settore del tessile avanzato, prodotto a partire da fibre di carbonio; collaborazione intesa a sviluppare metodi di sintesi e caratterizzazione di due principali categorie di compositi: carbonio/carbonio e para-aramide/carbonio. Tali materiali compositi, realizzati mediante crescita catalitica di nanofibre costituiscono le tematiche sviluppate nell'ambito del finanziamento di un dottorato di ricerca e di una borsa di studio annuale.

ASSOCIAZIONE TESSILE E SALUTE

ente non-profit, nato da un progetto di Città Studi, Asl 12 e CNR, che si propone come punto di incontro tecnico scientifico tra mondo della ricerca, produzione, sanità e associazioni di consumatori nel campo del distretto tessile biellese. Finanzia una borsa di Dottorato di ricerca finalizzata allo studio di materiali innovativi nel settore tessile che permettano la realizzazione di prodotti tessili con funzionalità non tradizionali ("smart textiles").

ACETATI ITALPET SPA

collaborazione mirata allo studi di stabilizzanti per applicazioni avanzate dell'acetato di cellulosa, ed al miglioramento dei processi produttivi. La collaborazione si avvale della sede distaccata del NIS presso il Tecnoparco di Verbania (NISLabVCO)

BIALETTI SPA

collaborazione mirata alla comprensione degli aspetti metallurgici dei processi produttivi, ed allo studio di fenomeni di corrosione.

IL CENTRO COLLABORA INOLTRE CON:

- **Centro Ricerche Fiat**, Orbassano (TO): collaborazione per un dottorato
- **Zimmer Inc.**, Warsaw, IN, USA su "Abrasion di UHMWPE" per impianti ortopedici
- **Ahlstrom Turin Spa** su "Produzione e caratterizzazione di nanofibre"
- **ITT Industries, Galter Srl**, Barge (CN) su "Caratteristiche dei materiali per attrito del settore automotive in relazione a fenomeni di disc-scoring"
- **Wolfрамcarb Spa**, Castellamonte (TO), su "Alligazione meccanica nel sistema Fe-W"
- **Fonderia artistica De Carli**, Rivalta (TO), su "Messa a punto di un sistema di colata sotto vuoto per manufatti artistici"

STRUMENTAZIONI E SERVIZI

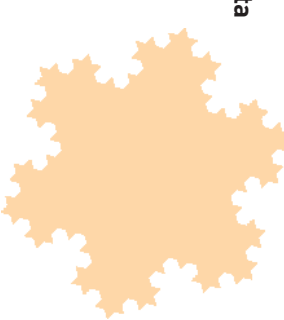
Il Centro NIS opera sia supportando laboratori esistenti che gestendo laboratori propri, comuni a tutti gli afferenti. Questa modalità ha permesso al Centro di operare con efficacia e costi ridotti, valorizzando il parco delle strumentazioni pre-esistenti e consentendo significative nuove acquisizioni.

La maggior parte dei laboratori associati sono collocati nell'area delle Facoltà scientifiche sull'asse di Corso Massimo d'Azeglio a Torino. Anche i nuovi laboratori comuni sono stati allestiti in quest'area, (Via Michelangelo 32), che rappresenta un vero e proprio "campus urbano". Alcune strumentazioni del Centro sono inoltre ospitate presso l'Incubatore dell'Università di Torino in Via Quareello (Microscopio elettronico TEM). E' inoltre in corso di realizzazione l'apertura di un laboratorio presso il Tecnoparco del Lago Maggiore a Verbania (Loc. Fondotoce).

I Laboratori

I Laboratori afferenti al NIS sono ospitati presso i seguenti Dipartimenti:

- 1 **Dipartimento di Chimica IFM**
 - 2 **Dipartimento di Chimica Generale ed Organica Applicata**
 - 3 **Dipartimento di Chimica Analitica**
 - 4 **Dipartimento di Fisica Sperimentale**
 - 5 **Dipartimento di Neuroscienze**
 - 6 **Dipartimento di Biologia Animale e dell'Uomo**
 - 7 **DISTA, Università del Piemonte Orientale**
 - 8 **DISCAFF, Università del Piemonte Orientale**
- Cui si aggiungono i laboratori comuni di Via Michelangelo 32 (Lab. NIS).



Sintesi e reattività

- Laboratorio di sintesi organica avanzata (Dip. 2, Lab. NIS)
- Laboratorio di sintesi sol-gel di materiali (Dip. 8, Lab. NIS)
- Laboratori di sintesi di film sottili e coating: CVD;
- Dip-coating; evaporazione sottovuoto (Dip. 1,2,3,4, Lab. NIS)

- Laboratorio di metallurgia e preparazione di vetri metallici (Dip. 1, Lab. NIS)
- Laboratori di catalisi e fotocatalisi (Dip. 1,3, Lab. NIS)
- Laboratorio di trattamenti radiativi dei materiali (Dip. 2,4)
- Laboratorio di biologia molecolare e cellulare con dispositivi per PCR e amplificazione mRNA e cDNA (Dip. 5,6)

Analisi strutturali

- Diffratometri da polveri e da cristallo singolo (Dip. 1)
- Microscopia elettronica (HRTM e SEM) (Dip. 1)
- Microscopia a forza atomica (AFM) (Dip. 1,4, Lab. NIS)

Spettroscopie

- Infrarossa: spettrofotometri FTIR che coprono l'intero campo spettrale da 15000 a 100 cm⁻¹. Possibilità di misura in atmosfera controllata ed a temperatura variabile (12 K-300 K). Modalità di acquisizione in trasmissione, riflettanza e HATR. (Dip. 1,2,3,8 Lab. NIS)
- Raman: spettrofotometri con sorgenti LASER nel vicino infrarosso (FTIR-Raman), nel visibile e nell'Ultravioletto (Dip. 1,4,8 Lab. NIS)
- UV-vis e NIR in assorbimento e in emissione (luminescenza): spettrometri in trasmissione, in riflettanza ed in emissione (Dip. 1,2,3)
- EPR (Dip. 1)
- XPS (Dip. 4)

- Raman: spettrofotometri con sorgenti LASER nel vicino infrarosso (FTIR-Raman), nel visibile e nell'Ultravioletto (Dip. 1,4,8 Lab. NIS)
- UV-vis e NIR in assorbimento e in emissione (luminescenza): spettrometri in trasmissione, in riflettanza ed in emissione (Dip. 1,2,3)
- EPR (Dip. 1)
- XPS (Dip. 4)

Analisi termica-calorimetria

- Microcalorimetria (Dip. 1,7: microcalorimetri Calvet)
- Analisi termica (TG, DTA, DSC a bassa ed alta temperatura) (Dip. 1,2)

Modellistica

- Sviluppo di codici per la simulazione quantomeccanica dei solidi (Dip. 1)
- Chimica computazionale e grafica molecolare (Dip. 1, Lab. NIS)
- Termodinamica di diagrammi di fase (Dip. 1)

Altre tecniche di caratterizzazione

- Tensiommetria (Dip. 2, 3)
- Cromatografie analitiche e preparative (Dip. 1, 2, 3, Lab. NIS)
- Spettrometrie di massa (Dip. 2,3, Lab. NIS)
- Analisi dinamico-meccanica dei materiali (Dip. 1)
- Conduttività e fotoconduttività (Dip. 2)
- LASER light scattering (Dip. 3)
- Unità di patch clamp per misure di corrente e voltaggio da singole cellule (Dip. 5,6)

LE COLLABORAZIONI INDUSTRIALI STRUMENTAZIONI E SERVIZI

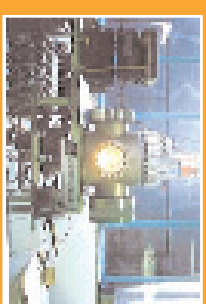
I Servizi

I laboratori del NIS offrono non solo servizi di ricerca ma anche di sintesi, analisi e misura. In particolare, mettono strumentazioni avanzate a disposizione sia delle aziende che non possiedono laboratori propri sia di altri centri di ricerca. La fornitura di servizi è regolata da apposite convenzioni con i Dipartimenti interessati.

Il NIS fornisce inoltre un servizio di analisi bibliografica e brevettale preliminare, e di reperimento delle competenze necessarie allo svolgimento di studi e misure, sia all'interno del Centro che presso altri laboratori italiani ed esteri associati (ad esempio altri laboratori INSTM, o laboratori europei del Network IDECAT). Alcuni laboratori appartenenti al NIS hanno ottenuto la qualifica di Centro Nazionale di Riferimento INSTM, ricevendo supporto anche finalizzato al *pooling* delle attrezzature e delle competenze.

Servizi di sintesi

- Sintesi Organica di composti a richiesta
- Separazione di composti organici per cromatografia liquida su colonna.
- Sintesi di materiali inorganici
- Sintesi di materiali carboniosi
- Preparazione di catalizzatori eterogenei
- Preparazione di leghe metalliche cristalline ed amorfe
- Sintesi di Coatings CVD, idrottermali o a base polimerica.



Servizi di analisi

- Misure di Tensione Superficiale di tensioattivi: determinazione attività superficiale, della concentrazione critica micellare
- Misure di conducibilità di soluzioni acquose, ad esempio: conc. critica micellare di Tensioattivi
- Misure di Tensione Interfaciale tra olio ed acqua.
- Analisi Gascromatografica con Spettrometria di Massa, per identificazione di composti organici
- Spettrometria di Massa con introduzione diretta del campione, per identificazione di composti organici.
- Raccolta di spettri infrarossi in modalità ATR (Attenuated Total Reflectance) per l'identificazione di composti organici da soli e adsorbiti su matrice solida.
- Misure di fluorescenza di composti organici da soli e in formulato.
- Spettroscopia Micro-Infrarossa con possibilità di registrazione di mappe
- Caratterizzazione delle proprietà acide, basiche, redox di materiali ad alta area superficiale: studio spettroscopico dell' interazione superficiale/molecole sonda in condizioni di temperatura (12 - 500 K) e pressione (10^{-3} - 10^2 mbar) controllate.



alta area superficiale: studio spettroscopico dell' interazione superficiale/molecole sonda in condizioni di temperatura (12 - 500 K) e pressione (10^{-3} - 10^2 mbar) controllate.

- Misura di spettri Raman con sorgenti eccitatrici multiple nell'infrarosso, visibile ed ultravioletto. Spettroscopia Raman Risonante e SERS.
- Caratterizzazione di materiali ad alta area superficiale per stoccaggio di idrogeno.
- Misure "in situ" di reattività superficiale con identificazione degli intermedi e dei prodotti di reazione: abbinamento di tecniche spettroscopiche a misure di spettrometria di massa
- Caratterizzazione di pigmenti e di proprietà ottiche di materiali
- Caratterizzazione gemmologica tramite misure spettroscopiche
- Caratterizzazione delle proprietà vibrazionali di specie in soluzione acquosa
- Identificazione di specie radicaliche tramite spettroscopia EPR,
- Studio di reattività di specie superficiali paramagnetiche
- Studio di specie difettive nei solidi ed in superficie
- Misure di spin-trap
- Caratterizzazione atomicamente selettiva di specie superficiali, di bulk, e in film: misure XAFS con luce di Sincrotrone in assorbimento ed in fluorescenza in condizioni di pressione temperatura controllate.



- Determinazioni strutturali da polveri e da cristallo singolo con tecniche diffrattometriche convenzionali e con Luce di Sincrotrone.
- Determinazione diffrattometrica di: tessiture, orientazioni preferenziali, dimensioni di particelle ,

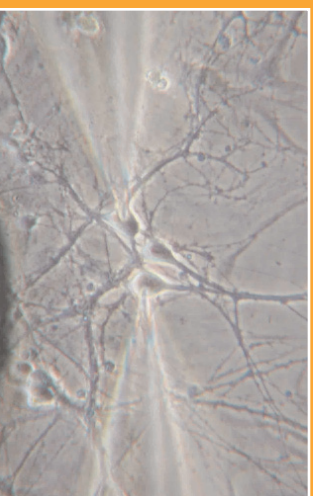


frazione di cristallinità in materiali vetrosi.

- Analisi diffrattometrica di film sottili
- Affinamento di strutture
- Microscopie elettroniche SEMe TEM: analisi morfologica e strutturale di materiali ossidici, metallici, molimerici, materiali compositi
- Caratterizzazione delle proprietà di adsorbimento e di idrofilità/idrofobicità di materiali e polveri; tramite: Misure volumetriche, microcalorimetriche e termogravimetriche
- Calorimetrie di adsorbimento, TGA, TPD, TPR/TPD
- Testing di reazioni catalizzate in reattore a letto fisso
- Analisi della frattura dei materiali



- Studio di strati di cementazione di leghe
- Analisi delle porosità nei getti di colata
- Definizione di trattamenti termici di leghe metalliche
- Misure di resistenza alla trazione e compressione
- Misure di termostabilità di materiali polimerici
- Set-up di patch-clamp per misure elettrofisiologiche
- Analisi delle proprietà cellulari a livello di singola proteina
- Test di effetti biologici di farmaci, tossine, etc.
- Misure su singole cellule mediante Patch-Clamp: correnti ioniche, attività di singoli canali, segnali pre- e post-sinaptici
- Studio di modelli di "Lab on-a-chip": interfaccia neurone-FET di silicio
- Analisi di immagine statica: caratterizzazione cellulare con anticorpi fluorescenti.
- Analisi di immagine dinamica: uso di sonde fluorescenti per caratterizzazione dell'evoluzione temporale di singoli parametri biochimici e biofisici.
- Analisi chimiche superficiali (ESCA-XPS)
- Analisi composizionali e di elementi in traccia mediante spettroscopia gamma
- Caratterizzazione elettronica (IV-CV in temperatura, fotoconducibilità) di materiali e dispositivi a semiconduttore

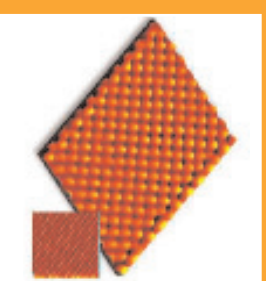
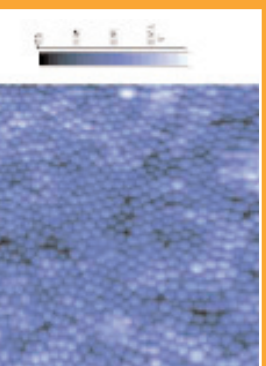
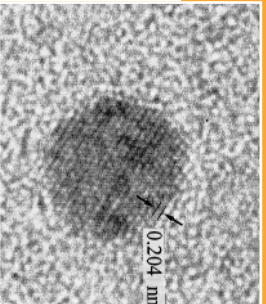
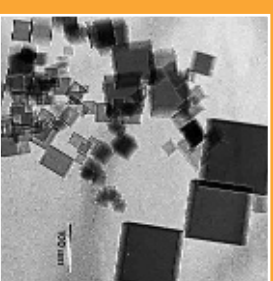
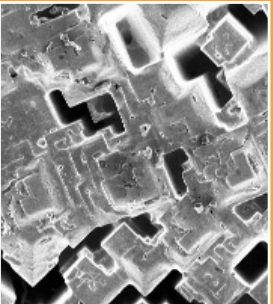


Servizi di Calcolo

- Simulazione dell'interazione materiali-adsorbati con tecniche di molecular modelling
- Simulazione di diagrammi di fase
- Simulazione ad elementi finiti di proprietà meccaniche e termo/fluidodinamiche.

Servizi di Documentazione

- Accesso full-text ai principali database bibliografici in campo scientifico.
- Scouting tecnologico e analisi della letteratura scientifica, tecnica e brevettale.
- Analisi e valutazioni bibliometriche della produzione scientifica.



La Ricerca

Le sezioni seguenti propongono una panoramica ragionata della produzione scientifica del Centro NIS, suddivisa per aree tematiche e corredata della bibliografia prodotta fino al mese di Maggio 2006.

La bibliografia è limitata alle pubblicazioni su riviste classificate ISI (cioè soggette a peer review), che portino esplicitamente l'affiliazione NIS. La banca dati dei prodotti della ricerca del NIS, costantemente aggiornata e contenente anche i prodotti qui omessi, è disponibile all'indirizzo:

<http://www.nis.unito.it/research.html>

Sezioni:

Prodotti della Ricerca

1. Innovazione nei Materiali Metallici
2. Metodi per la modellizzazione di Materiali e Superfici
3. Fisica dello Stato Solido: Semiconduttori, Superconduttori
4. Chimica delle Superfici
5. H₂: adsorbimento, dissociazione e stoccaggio
6. Catalizzatori nanostrutturati
7. Materiali e Molecole Fotoattive
8. Chimica Macro e Supra-molecolare
9. Biocompatibilità e tossicità dei Materiali
10. Biofisica e neurochip
11. Accesso alle grandi Infrastrutture
12. Nuove linee di lavoro
13. Progetti internazionali

Il sistema regionale della Ricerca

14. Progetti Ricerca Applicata
15. Piemonte Nanotech
16. Piemonte Idrogeno
17. NISLabVCO

INNOVAZIONE NEI MATERIALI METALLICI

Il termine nanoscienza non si riferisce solo a materiali o strutture che sono estesi a dimensione 0 (*dots*, singole molecole), dimensione 1 (*wires*, filari), dimensione 2 (*superfici*) ma si applica anche a materiali estesi in 3 dimensioni cioè materiali massivi, come i metalli, al fine di sviluppare nuovi materiali e tecnologie di produzione. Si tratta di contribuire all'innovazione di settori industriali, quale quello metallurgico, che attualmente possono essere definiti "a tecnologia matura", con prodotti ad elevato valore aggiunto, per renderli più competitivi.

Nell'ambito del NIS è stato sviluppato un piano di ricerca su materiali metallici massivi nanostrutturati e sui relativi processi di produzione. Sono state messe a punto tecniche di solidificazione rapida per ottenere l'affinamento delle microstrutture fino alla formazione di leghe

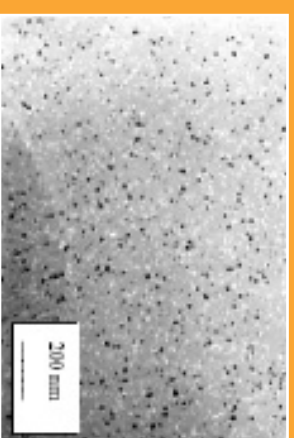
vetrose, elaborate nuove leghe e messi a punto trattamenti termici con controllo della microstruttura a livello nanometrico. Vengono prese in esame diverse tipologie di leghe circa le quali sono presentati alcuni risultati nelle figure seguenti. Dettagli possono essere reperiti nella bibliografia allegata o prendendo contatto con i ricercatori del NIS.

Le proprietà di magnete dolce delle leghe ferrose possono essere ottimizzate producendo fogli amorfi di opportuna composizione ed inducendo la precipitazione di nanocristalli di Fe nella matrice vetrosa. Sono ormai ben avanzati studi sulla chimica delle leghe e sul controllo della reazione di precipitazione.

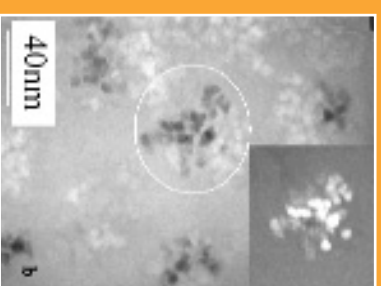
Applicando questa tecnologia a leghe di Al, si possono produrre fogli sottili o ricoprimenti aventi proprietà meccaniche del tutto inusuali per le leghe di Al: carichi di snervamento fino a 800 MPa nel materiale vetroso e fino a 1500 MPa dopo parziale cristallizzazione. Le durezze sono parimenti elevate e comportano buona resistenza all'usura.

Gli articoli di gioielleria devono presentare una elevata finitura superficiale per il loro intrinseco uso e valore commerciale e per ottemperare ai requisiti di design. E' in corso di studio una lega di Au a 18 carati la cui composizione permette di effettuare una trasformazione di fase di tipo martensitico. La lega è classificabile tra le leghe a memoria di forma. Mediante la trasformazione si producono sfaccettature superficiali che conferiscono al materiale un effetto di luccichio non ottenibile con metodi di finitura superficiale tradizionali.

Lo studio della solidificazione delle leghe implica la descrizione delle interfacce solido-liquido in funzione della composizione della lega, delle sue proprietà (temperatura e calore di fusione) e dei parametri di processo (velocità di raffreddamento, temperatura del fusol). Il problema viene affrontato con esperimenti su leghe modello e con l'elaborazione di un software di simulazione.



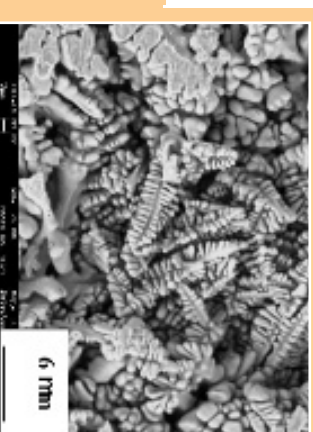
Distribuzione omogenea di nanocristalli di Fe in matrice vetrosa.



Gruppi di nanocristalli di Al in matrice vetrosa a seguito di nucleazione controllata della fase cristallina

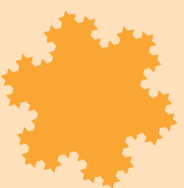


Sfaccettature superficiali in una lega di Au dopo trasformazione martensitica



Dendriti di Co sviluppatasi nel corso della solidificazione in una lega Co-Cu. La morfologia è messa in evidenza mediante attacco elettrolitico selettivo del Cu.

1. L. Battezzati, M. Baricco, M. Kusy', M. Palumbo, P. Rizzi, V. Ronto', **Amorphisation and Devitrification of Al-Transition Metal - Rare Earth Alloys**, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 806 (2004) 21-32
2. L. Battezzati, M. Kusy', P. Rizzi, V. Ronto', **Devitrification of Al-Ni-Rare Earth Amorphous Alloys**, *Journal of Materials Science*, 39 (2004) 3927
3. M. Kusy', P. Riello, L. Battezzati, **A comparative study of primary Al precipitation in amorphous $Al_{87}Ni_7La_6Zr$ by means of WAXS, SAXS, TEM and DSC techniques**, *Acta Materialia*, 52 (2004) 5031
4. P. Rizzi, L. Battezzati, **Mechanical properties of Al based amorphous and devitrified alloys containing different rare earth elements**, *Journal of non-Crystalline Solids*, 344 (2004) 94
5. L. Battezzati, M. Baricco, C.A. Goria, G. Serramoglia, **Selezione delle fasi e delle microstrutture nella solidificazione della ghisa**, *La Metallurgia Italiana*, 1 (2004), 31-36
6. M. Baricco, M. Palumbo, **Thermodynamic and Kinetic Modelling of Primary Crystallisation in Amorphous Alloys**, *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials* 20-21 (2004) 415-424
7. I. Bergenti, A. Deriu, E. Bosco, M. Baricco, E. Angeli, D. Bisero, A. Da Re, F. Ronconi, F. Spizzo, P. Vavassori, **Small angle neutron investigation of Au-Fe alloys with GMR behaviour**, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 272-276 (2004) 1554-1556
8. G. Albanese, A. Deriu, J. Moya, E. Angeli, D. Bisero, A. Da Re, F. Ronconi, F. Spizzo, P. Vavassori, M. Baricco, E. Bosco, Mössbauer **Investigation of Au/Fe alloys with giant magnetoresistance properties**, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 272-276 (2004) 1545-1546
9. M. Baricco, E. Bosco, E. Olivetti, M. Palumbo, P. Rizzi, A. Startero, L. Battezzati, **Rapid solidification of alloys**, *Int. J. of Materials and Product Technology* 20 (2004) 358-376
10. E. Bosco, P. Rizzi, M. Baricco, **Phase transformations in Au-Fe melt spun alloys**, *Mat. Sci. Eng. A* 375-377 (2004) 468-472
11. M. Baricco, E. Bosco, G. Accionciaico, P. Rizzi, M. Coisson, **Rapid solidification of Cu-Fe-Ni alloys**, *Mat. Sci. Eng. A* 375-377 (2004) 1019-1023
12. Castellero, M., Motyka, A. L. Greer, M. Baricco, **Synthesis and crystallization of $Fe_{61}Co_7Zr_{10}Mo_5W_2B_{15}$ bulk metallic glasses**, *Mat. Sci. Eng. A* 375-377 (2004) 250-254
13. E. Olivetti, E. Ferrara, P. Tiberto, M. Baricco, **Magnetic and structural characterisation of partially amorphous $Nd_{70}Fe_{20}Al_{10}$** , *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 272-276 (2004) e1949-e1951.
14. Bergenti, A. Deriu, F. Spizzo, F. Ronconi, E. Bosco, M. Baricco, **Small angle scattering investigation of nanostructured binary Au-Fe alloys**, *Physica B* 350 (2004) E91-E94
15. M. Palumbo, G. Borzone, S. Delsante, N. Parodi, G. Cacciamani, R. Ferro, L. Battezzati, M. Baricco, **Thermodynamic analysis and assessment of the Ce-Ni system**, *Intermetallics* 12 (2004) 1367-1372
16. Zs. Kovács, A. Castellero, A.L. Greer, J. Lendvai, M. Baricco, **Thermal stability and instrumented indentation in a $Mg_{60}Cu_{30}Y_{10}$ bulk metallic glass**, *Mat. Sci. Eng. A* 387-389 (2004) 1012-1017
17. E.M. Brach del Prevert, L. Costa, M. Baricco, C. Picconi, A. Massé, **Biomaterials for Total Joint Replacements**, in "Biomechanics and Biomaterials on Orthopedics", D. Pitout ed, Elsevier (2004) ISBN 1-85233-481-9
18. M. Baricco, M. Palumbo, D. Baldissin, E. Bosco, L. Battezzati, **Metastable Phases and Phase Diagrams**, *La Metallurgia Italiana* 11-12 (2004) 49-56
19. L. Battezzati, M. Baricco, S. Curriotto, **Non-stoichiometric cementite by rapid solidification of cast iron**, *Acta Materialia* 53 (2005) 1849.
20. M. Palumbo, M. Baricco, **Modelling of primary bcc-Fe crystal growth in a $Fe_{88}B_{15}$ amorphous alloy**, *Acta Materialia* 53 (2005) 2231.
21. E. Olivetti, M. Baricco, E. Ferrara, P. Tiberto, L. Martino, **Effect of annealing on the magnetic properties of $Nd_{70}Fe_{20}Al_{10}$ bulk metallic glasses**, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 290 (2005) 1214.
22. M. Palumbo, C. Papandrea, L. Battezzati, **Nucleation of crystals in deeply undercooled alloy melts**, *Journal of Materials Science* 40 (2005) 2431.
23. L. Battezzati, **Is there a link between melt fragility and elastic properties of metallic glasses?**, *Materials Transactions* 46 (2005) 2915.
24. L. Battezzati, **Thermodynamics of nanocrystalline materials**, Chapter 1 of "Novel nanocrystalline alloys and magnetic nanomaterials", IoP Series in Materials Science and Engineering, B. Cantor ed., The Institute of Physics, London, 2005, pp. 3-15.
25. L. Battezzati, M. Kusy', M. Palumbo, V. Ronto', **Al-rare earth-transition metal alloys: fragility of melts and resistance to crystallisation**, in "Properties and Applications of Nanocrystalline Alloys from Amorphous Precursors", B. Idrzkowski, Peter Svec and M. Miglierini Eds, Kluwer Academic Pub., Dordrecht, The Netherlands, 2005, pp. 267-278.
26. L. Battezzati, V. Ronto', M. Kusy', **On different mechanisms of primary crystallisation in Al-Ni-La-Zr amorphous alloys**, in "Properties and Applications of Nanocrystalline Alloys from Amorphous Precursors", B. Idrzkowski, Peter Svec and M. Miglierini Eds, Kluwer Academic Pub., Dordrecht, The Netherlands, 2005, pp. 279-288.
27. M. Baricco, **Alloys: Overview**, in "Encyclopedia of Condensed Matter Physics" - Elsevier Ltd., Oxford (2005), page 57
28. L. Battezzati, G. Fiore, M. Massazza, **Rapid Solidification of Au Alloys**, J. Metastable and Nanocrystalline Materials, 24-25 (2005) 37-42.
29. H.-J. Fecht, S. Schneider, R. K. Wunderlich, L. Battezzati, C. Papandrea, M. Palumbo, I. Egrý, K. Mills, P. Quested, R. Brooks, D. Giuranno, R. Novakovic, A. Passerone, E. Ricci, S. Seetharaman, R. Aune, KTH, B. Vinet, J.-P. Garandet, **Measurement of thermophysical properties of liquid metallic alloys in a ground- and micro-gravity based research program. The Thermolab project**, *La Metallurgia Italiana*, 2005, 3, 47-51.
30. R. Aune, L. Battezzati, R. Brooks, I. Egrý, H.-J. Fecht, J.-P. Garandet, K.C. Mills, A. Passerone, P.N. Quested, E. Ricci, S. Schneider, S. Seetharaman, R.K. Wunderlich, B. Vinet, **Measurement of thermophysical properties of liquid metallic alloys in a ground- and microgravity based research programme - The Thermolab project**, *Microgravity Science and Technology* 15 (1), (2005), 7
31. R. Aune, L. Battezzati, R. Brooks, I. Egrý, H.-J. Fecht, J.-P. Garandet, K.C. Mills, A. Passerone, P.N. Quested, E. Ricci, S. Schneider, S. Seetharaman, R.K. Wunderlich, B. Vinet, **Surface tension and viscosity of industrial alloys from parabolic flight experiments**
32. **Results of the Thermolab project**, *Microgravity Science and Technology*/ 15 (1), (2005) 11
33. M. Palumbo, D. Baldissin, L. Battezzati, O. Tassa, R. Wunderlich, H.-J. Fecht, R. Brooks, K. Mills, **Thermodynamic properties of CMSX-4 Superalloy: Results from the Thermolab Project**, *Mat. Sci. Forum*, 508 (2006) 591-596.
34. **M. Palumbo, S. Curriotto, L. Battezzati. Thermodynamic analysis of the stable and metastable Co-Cu and Co-Cu-Fe phase diagrams**, CALPHAD-Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry 30 (2006) 171-178.
35. M. Baricco, **Tecniche di Analisi Termica**, in "Tecniche sperimentali per la caratterizzazione dei materiali: dal laboratorio alla produzione" a cura di R. Montanari - AIM, Milano (2005), page 31
36. G. Riontino, D. Lussana, M. Massazza, **A calorimetric study of phase evolution in a WE43 Mg alloy**, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 83 (2006) 643.
37. M. Palumbo, D. Baldissin, L. Battezzati, O. Tassa, R. Wunderlich, H.J. Fecht, R. Brooks, K. Mills, (Eds.), **Solidification and Gravity**, TRANS TECH PUBLICATIONS LTD, Zurich-Uetikon, 2006, p. 591.

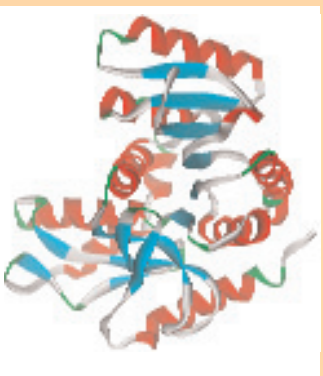


METODI PER LA MODELIZZAZIONE DI MATERIALI E SUPERFICI

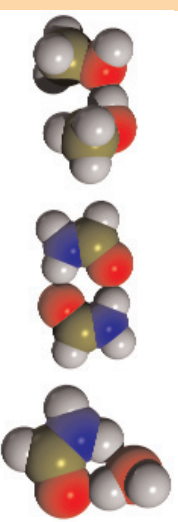
La rapidissima crescita della tecnologia nel settore del *computing* ha permesso uno sviluppo enorme nel campo della simulazione dei sistemi fisici a tutte le scale dimensionali: dalla meteorologia alle nanotecnologie.

La disponibilità di supercalcolatori ha a sua volta dato un impulso allo sviluppo anche di programmi dedicati allo studio delle proprietà strutturali e di reattività di sistemi molecolari sempre più complessi e di solidi, sia cristallini che amorfi.

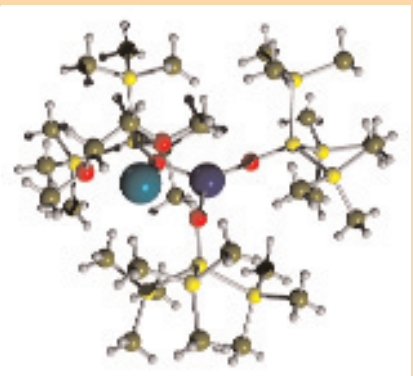
Meccanica Molecolare



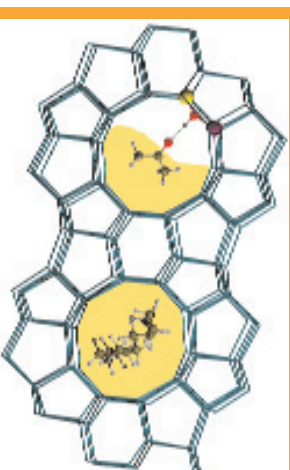
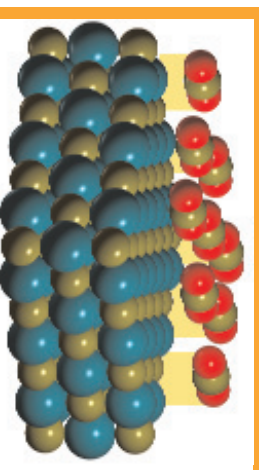
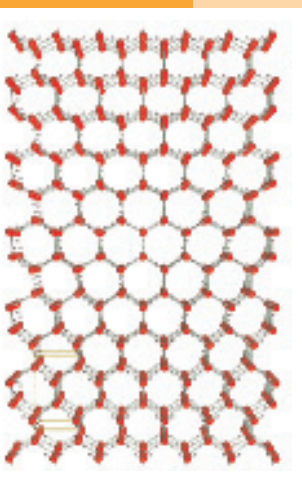
I codici di calcolo attualmente disponibili sono molteplici e specifici per descrivere le proprietà di solidi, superfici, molecole, sistemi molto complessi come gli enzimi.



La ricerca in questo settore si articola su due fronti: da una parte verso lo sviluppo della teoria, degli algoritmi e dei programmi, dall'altra si indirizza verso l'utilizzo di questi programmi per descrivere i materiali di interesse fondamentale o tecnologico al fine di comprenderne o prevederne le proprietà. Studi modellistici possono avere un ruolo fondamentale nella comprensione di una struttura cristallina e delle sue proprietà sia vibrazionali che elettroniche, aiutare a comprendere la reattività di siti specifici nei confronti di molecole, seguire il profilo di una reazione chimica, e molto altro ancora. La possibilità di eseguire un esperimento "virtuale" controllando in maniera precisa le condizioni in cui esso avviene, rappresenta uno strumento sempre più potente e diffuso per supportare la comprensione dei fenomeni naturali e tecnologici.



Metodi Ab-Initio (approccio a cluster o periodico), semiempirici



1. C. Pisani, M. Busso, G. Capecechi, S. Casassa, R. Dovesi, L. Maschio, C. Zicovich-Wilson, M. Schutz, **Local-MP2 electron correlation method for nonconducting crystals**, Journal of Chemical Physics 122 (2005) Art. No. 094113.
2. J.G. Vitillo, A. Damin, A. Zecchina, G. Ricchiardi, **Theoretical characterization of dihydrogen adducts with alkaline cations**, Journal of Chemical Physics 122 (2005) Art. No. 114311.
3. Rimola, S., Tosoni, M., Sodupe, P., Ugliengo, **Peptide bond formation activated by the interplay of Lewis and Bronsted catalysts**, Chemical Physics Letters 408 (2005) 295.
4. S. Agnoli, M. Sambi, G. Granozzi, J. Schwoiswohl, S. Surnev, F.P. Netzer, M. Ferrero, A.M. Ferrari, C. Pisani, **Experimental and theoretical study of a surface stabilized monolayer phase of nickel oxide on Pd(100)**, Journal of Physical Chemistry B 109 (2005) 17197.
5. F. Pascale, S. Tosoni, C. Zicovich-Wilson, P. Ugliengo, R. Orlando, R. Dovesi, **Vibrational spectrum of brucite, Mg(OH)₂: a periodic ab initio quantum mechanical calculation including OH anharmonicity**, Chemical Physics Letters 396 (2004) 308.
6. Di Valentin, G., Pacchioni, A., Selloni, S., Livraghi, E., Giamello, **Characterization of paramagnetic species in N-doped TiO₂ powders by EPR spectroscopy and DFT calculations**, Journal of Physical Chemistry B 109 (2005) 11414.
7. X. Solans-Monfort, M. Sodupe, V. Branchadell, J. Sauer, R. Orlando, P. Ugliengo, **Absorption of NH₃ and H₂O in acidic Chabazite. Comparison of ONIOM approach with periodic calculations**, Journal of Physical Chemistry B 109 (8) 2005, 3539.
8. Pisani, G., Capecechi, S., Casassa, L., Maschio, **Computational aspects of a local-MP2 treatment of electron correlation in periodic systems: SIC vs Bes**, Molecular Physics 103 (2005) 2527.
9. S. Tosoni, F. Pascale, P. Ugliengo, R. Orlando, V.R. Saunders, R. Dovesi, **Quantum mechanical calculation of the OH vibrational frequency in crystalline solids**, Molecular Physics 103 (2005) 2549.
10. M. Merawa, P. Labeguerie, P. Ugliengo, K. Doll, R. Dovesi, **The structural, electronic and vibrational properties of LiOH and NaOH: an ab initio study**, Chemical Physics Letters 387 (2004) 453.
11. P. Ugliengo, C. Busco, B. Civalieri, C.M. Zicovich-Wilson, **Carbon monoxide adsorption on alkali and proton-exchanged chabazite: an ab-initio periodic study using the CRYSTAL code**, Molecular Physics 103 (2005) 2559.
12. P. Ugliengo, F. Pascale, M. Merawa, P. Labeguerie, S. Tosoni, R. Dovesi, **Infrared spectra of hydrogen-bonded ionic crystals: Ab initio study of Mg(OH)₂ and beta-Bel(OH)₂**, Journal of Physical Chemistry B 108 (2004) 13632.
13. A.M. Ferrari, S. Casassa, C. Pisani, **Electronic structure and morphology of MgO submonolayers at the Ag(001) surface: An ab initio model study**, Physical Review B 71 (2005)
14. A. Rimola, S. Tosoni, M. Sodupe, P. Ugliengo, **Does silica surface catalyse peptide bond formation? New insights from first-principles calculations**, ChemPhysChem 7 (2006) 157.
15. A.M. Ferrari, C. Pisani, **An ab initio periodic study of NiO supported at the Pd(100) surface. Part 1: The perfect epitaxial monolayer**, Journal of Physical Chemistry B 110 (2006) 7909.
16. A.M. Ferrari, M. Ferrero, C. Pisani, **An ab initio periodic study of NiO supported at the Pd(100) surface. Part 2: The nonstoichiometric Ni₃O₄ phase**, Journal of Physical Chemistry B 110 (2006) 7918.
17. J. Scaranto, G. Mallia, S. Giorgianni, C.M. Zicovich-Wilson, B. Civalieri, N.M. Harrison, **A quantum-mechanical study of the vinyl fluoride adsorbed on the rutile TiO₂(110) surface**, Surface Science 600 (2006) 305.

FISICA DELLO STATO SOLIDO: SEMICONDUTTORI, SUPERCONDUTTORI

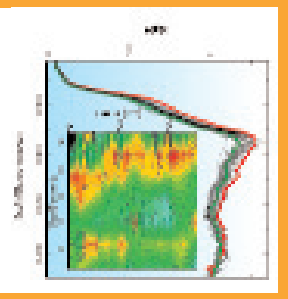
La resistenza elettrica di un materiale è una delle grandezze fisiche che può assumere un intervallo di valori estremamente ampio, passando dagli isolanti (diamante) ai superconduttori (BCCO, BISCO). Nel mezzo della scala vi sono i materiali semiconduttori, importanti nel campo dell'elettronica e dell'optoelettronica.

La funzionalizzazione di materiali come il diamante permette la realizzazione di dispositivi in grado di lavorare come dosimetri nel campo della radioprotezione e capaci di simulare molto bene la dose di radiazione assorbita dal corpo umano.

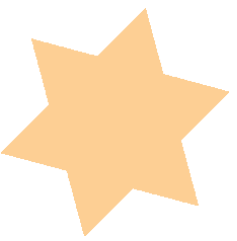
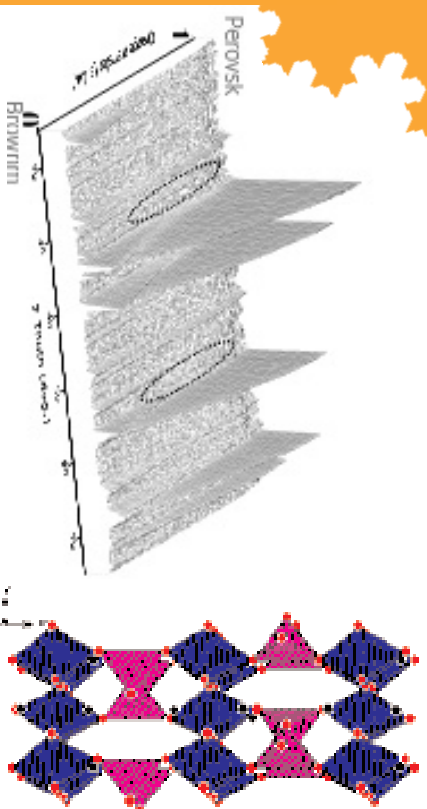
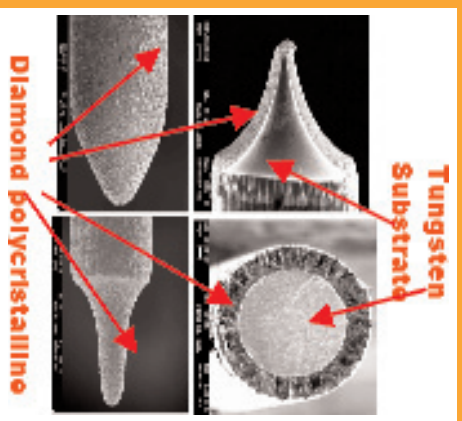
L'adsorbimento/desorbimento di molecole quali l'ammoniaca è in grado di modificare le caratteristiche elettroniche del silicio poroso trasformandolo reversibilmente da semiconduttore drogato p a semiconduttore drogato n .

Esperimenti di assorbimento, diffrazione e fluorescenza di raggi X, con risoluzione spaziale dell'ordine del milionesimo di metro, hanno permesso di mettere in evidenza fenomeni di mobilità ionica nel sistema superconduttore BiSCCO, permettendo di comprendere il fenomeno di invecchiamento del materiale.

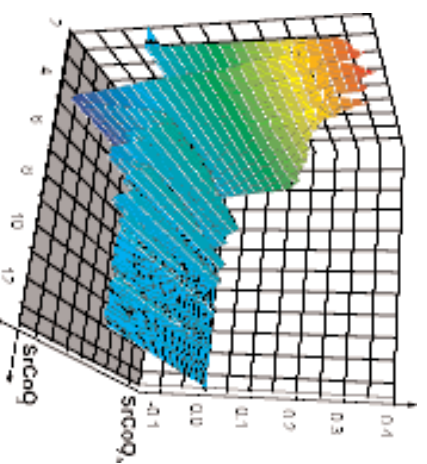
Materiali tipo $\text{SrCoO}_{2.5+x}$ $\text{SrFeO}_{2.5+x}$, in grado di modulare il loro contenuto di ossigeno da $x=0$ a $x=0.5$, sono importanti nel campo delle batterie a stato solido e come serbatoi di ossigeno per le celle a combustibile. Esperimenti di diffrazione di neutroni e di assorbimento a raggi X condotti "in situ" durante la fase di caricamento di ossigeno del materiale ($\text{SrCoO}_{2.5} - \text{SrCoO}_{3.0}$) hanno permesso di comprendere l'evoluzione del sistema.



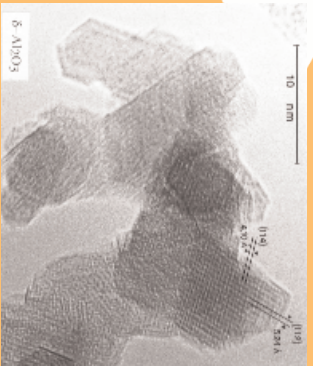
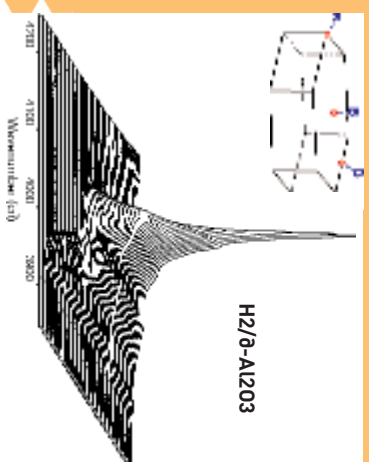
Evidence of Ion Diffusion at Room Temperature in Microcrystals of the $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ Superconductor



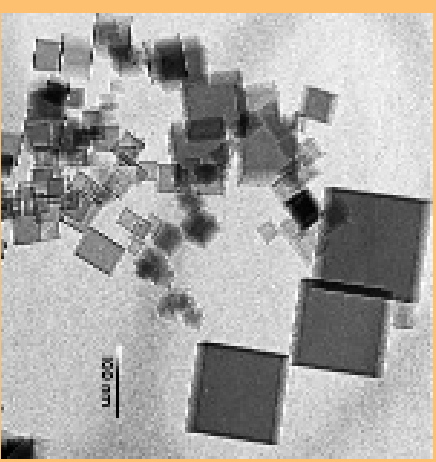
1. E.Vittone, V.Rigato, P.Olivero, F.Nava, C.Manfredotti, A.LoGiudice, Y.Garino, F.Fizzotti, **Temperature dependent IBIC study of 4H-SiC Schottky diodes**, Nuclear instruments & methods in physics Section B - Beam interactions with materials and atoms 231, (2005), 491
2. C. Manfredotti, A. Lo Giudice, C. Paolini, E. Vittone, F. Fizzotti and R. Cossio, **Characterization of impurities in cubic boron nitride crystallites with thermoluminescence and ionoluminescence**, Phys. Stat. Sol. (a) 201, (2004) 2566.
3. F. Geobaldo, P. Rivolo, P. Ugliengo, E. Garrone, **A new route to the surface functionalisation of porous silicon**, Sensors and Actuators B-Chemical 100 (2004) 29.
4. Lo Giudice, F. Fizzotti, C. Manfredotti, E. Vittone, F. Nava, **Average energy dissipated by mega-electron-volt hydrogen and helium ions per electron-hole pair generation in 4H-SiC**, Applied Physics Letters 87 (2005).
5. M. Truccato, C. Lamberti, C. Prestipino, A. Agostino, **Evidence of ion diffusion at room temperature in microcrystals of the $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ superconductor**, Applied Physics Letters 86 (2005).
6. Balducci, M. Jakšić, A. Lo Giudice, C. Manfredotti, M. Marinelli, S. Medunic, G. Pucella, G. Verona-Rinati, **Recent IBIC measurements on epitaxial CVD diamond**, Diamond and Related Materials 14 (2005) 1988.
7. Manfredotti, E. Vittone, A. Lo Giudice, F. Fizzotti, C. Paolini, A. Zanini and F. Fasolo, **SiC detectors for neutron monitoring**, Nucl. Instr. Meth. In Phys. Res. A 552 (2005) 131
8. L. Operti, R. Rabezzana, F. Turco, G.A. Vaglio, **Negative gas-phase ion chemistry of GeH₄: a quadrupole ion trap study**, Rapid Communications in Mass Spectrometry 19 (2005) 1963.
9. Manfredotti, **CVD diamond detectors for nuclear and dosimetric applications**, Invited lecture presented at Diamond 2005 - International Conference on Diamond and Wide Band Gap Materials, Diamond and Related Materials 14 (2005) 531-540
10. Balducci, M. Jakšić, A. Lo Giudice, C. Manfredotti, Marco Marinelli, S. Medunic, G. Pucella and G. Verona-Rinati **Recent IBIC measurements on epitaxial CVD Diamond** Diamond and Related Materials 14 (2005) 1988.
11. Vittone, V. Rigato, P. Olivero, F. Nava, C. Manfredotti, A. LoGiudice, Y. Garino, F. Fizzotti, **Temperature dependent IBIC study of 4H-SiC Schottky diodes**, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 231 (2005) 491.
12. Vittone, P. Olivero, F. Nava, C. Manfredotti, A. Lo Giudice, F. Fizzotti, G. Eggeni, **Lateral IBIC analysis of GaAs Schottky diodes**, Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms 231 (2005) 513.
13. M. Truccato, C. Lamberti, C. Prestipino, A. Agostino, **Evidence of Ion Diffusion at Room Temperature in Microcrystals of the $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ Superconductor**, ESRF Highlights 2005, p.119-120
14. C. Manfredotti, C. Paolini, E. Vittone, A. Lo Giudice and P. Olivero, **Surface patterning and functionalization by Local Anodic Oxidation on CVD diamond**, Proc. Int. Conference ASTRA Advances in Surface Treatment : Research and Applications, Editorsd. T. S. Sudarshan, G. Sundarajan, G. E. Totten and S. V. Joshi, pag. 155, Empec Inc. Canada, oct. 2004
15. Y. Garino, A. Lo Giudice, C. Manfredotti, M. Marinelli, E. Milani, A. Tucciarone, G. Verona-Rinati, **Performances of homoepitaxial single crystal diamond in diagnostic x-ray dosimetry**, Applied Physics Letters 88 (2006).
16. P. Benzi, E. Bottizzo, C. Demaria, **Characterization and properties of Ge1-xC-x : H compounds obtained by X-ray CVD of germane/ethyne systems: Effect of the irradiation dose**, Chemical Vapor Deposition 12 (2006) 25.
17. L. Operti, R. Rabezzana, **Gas-phase ion chemistry in organometallic systems**, Mass Spectrometry Reviews 25 (2006) 483.



CHIMICA DELLE SUPERFICI



Microcristalli di MgO al microscopio HRTEM



In molti casi, le proprietà dei pochi atomi situati sulla superficie dei materiali sono quelle che determinano le caratteristiche macroscopiche di un materiale. È questo il campo dei fenomeni di adesione, corrosione, attrito, catalisi eterogenea e molti altri ancora.

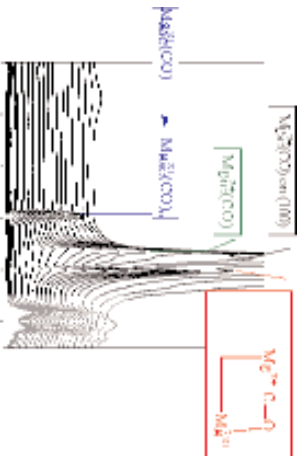
Poiché il numero di atomi collocati sulla superficie rappresenta una frazione irrisoria (fra un milionesimo ed un miliardesimo) del numero totale di atomi, in genere per il loro studio si sono sviluppate tecniche specifiche che richiedono apparecchiature di ultra alto vuoto (un milionesimo di miliardesimo di atmosferal estremamente sofisticate, di grandi dimensioni e costi. Nell'ambito dei gruppi di ricerca del NIS si sono viceversa sviluppate metodologie di analisi in grado di essere specificatamente sensibili agli atomi di superficie ed in grado di operare in condizioni di vuoto più modesto (un milionesimo di atmosferal) e quindi a costi più contenuti. E il campo delle spettroscopie vibrazionali (IR, Raman, UV-VIS, EPR,...) in atmosfera controllata.

Un possibile approccio consiste nel ricorrere all'uso di molecole sonda che interagiscono esclusivamente con gli atomi di superficie e di seguire, tramite tecniche spettroscopiche, la loro reattività. Per questo tipo di esperimenti risulta fondamentale disporre di sistemi di controllo della pressione e della temperatura.

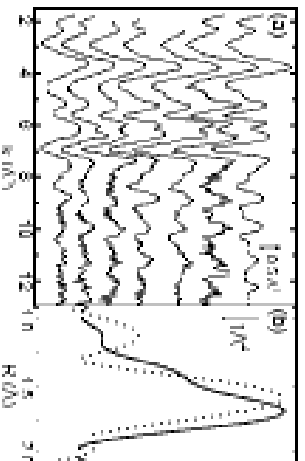
Un'alternativa a questa strategia prevede di "drogare" solo la superficie con specie che siano le uniche misurabili dalla tecnica in uso. Un tipico esempio è rappresentato da specie paramagnetiche misurabili con tecniche di risonanza di spin elettronico (EPR).

Strati sottili (1-10 strati atomici) di MgO o NiO cresciuti epitassialmente su Ag(100) mostrano una struttura a bande modificata rispetto al "bulk", trasformando il materiale da isolante a semiconduttore.

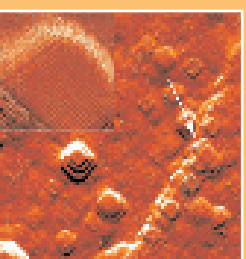
Vibrazioni della molecola CO su siti superficiali di MgO



EXAFS da film sottili di MgO



Topografica di uno strato di MgO su argento su scala nanometrica (10x10nm)



1. M. Chiesa, M.C. Paganini, E. Giamello, **Bidimensional solvation and delocalisation of electrons at the surface of an insulating oxide: The role of surface hydroxyl groups on MgO**, *ChemPhysChem* 5 (2004) 1897.

2. E. Groppo, C. Prestipino, C. Lamberti, R. Carboni, F. Boscherini, P. Luches, S. Valeri, S. D'Addato, **OK-edge x-ray absorption study of ultrathin NiO epilayers deposited in situ on Ag(100)**, *Physical Review B* 70 (2004).

3. G. Spoto, E.N. Gribov, G. Ricchiardi, A. Damini, D. Scavano, S. Bordiga, C. Lamberti, A. Zecchina, **Carbon monoxide MgO from dispersed solids to single crystals: a review and new advances**, *Progress in Surface Science* 76 (2004) 71.

4. S. Casassa, M. Calatayud, K. Doll, C. Minot, C. Pisani, **Proton ordered cubic and hexagonal periodic models of ordinary ice**, *Chemical Physics Letters* 409 (2005) 110.

5. M. Chiesa, E. Giamello, C. Di Valentin, G. Pacchioni, **The O-17 hyperfine structure of trapped holes photo generated at the surface of polycrystalline MgO**, *Chemical Physics Letters* 403 (2005) 124.

6. Manzoli, F. Bocuzzi, **Characterisation of Co-based electrocatalytic materials for O-2 reduction in fuel cells**, *Journal of Power Sources* 145 (2005) 161.

7. M. Chiesa, E. Giamello, C. Di Valentin, G. Pacchioni, Z. Soljka, S. Van Doorslaer, **Nature of the chemical bond between metal atoms and oxide surfaces: New evidences from spin density studies of K atoms on alkaline earth oxides**, *Journal of the American Chemical Society* 127 (2005) 16935.

8. M. Chiesa, G. Amato, L. Boarino, E. Garrone, F. Geobaldo, E. Giamello, **ESR study of conduction electrons in B-doped porous silicon generated by the adsorption of Lewis bases**, *Journal of the Electrochemical Society* 152 (2005) G329.

9. S. Livraghi, A. Votta, M. C. Paganini and E. Giamello,

Preparation and spectroscopic characterisation of nitrogen doped titanium dioxide, in: Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications,

ELSEVIER SCIENCE BV: Amsterdam, 2005; Vol. 155, p. 375.

10. M. C. Paganini, M. Chiesa, P. Martino, S. Livraghi and E. Giamello,

An EPR study of the surface reactivity of CaO and a comparison with that of MgO, in: Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications,

ELSEVIER SCIENCE BV: Amsterdam, 2005; Vol. 155, p. 441.

G. Ghiotti, S. Morandi, A. Chiorino, F. Prinetto, A. Gervasini and M. C. Carotta,

Preparation and characterization of MoOx-SnO2 nano-sized materials for catalytic and gas sensing applications, in: Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications;

ELSEVIER SCIENCE BV: Amsterdam, 2005; Vol. 155, p. 291.

13. A.M. Ferrari, S. Casassa, C. Pisani, S. Altieri, A. Rota, S. Valeri,

Polar and non-polar domain borders in MgO ultrathin films on Ag(100), *Surface Science* 588 (2005) 160.

L. Giordano, D. Ricci, G. Pacchioni, P. Ugliengo,

Structure and vibrational spectra of crystalline SiO2 ultra-thin films on Mo(112), *Surface Science* 584 (2005) 225.

15. M. Chiesa, E. Giamello, C. Di Valentin, G. Pacchioni,

The O-17 hyperfine structure of trapped holes photo generated at the surface of polycrystalline MgO, *Chemical Physics Letters* 403 (2005) 124.

M. Cerruti, C. Morterra, P. Ugliengo,

Surface features of P-doped silica explored with CD3CN adsorption: Can Si atoms act as Lewis centers?, *Chemistry of Materials* 17 (2005) 1416.

18. M.C. Paganini, M. Chiesa, P. Martino, S. Livraghi, E. Giamello, (Eds.),

Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications, ELSEVIER SCIENCE BV, Amsterdam, 2005, p. 441.

19. G. Spoto, S. Bordiga, J.G. Vitillo, G. Ricchiardi, A. Zecchina, (Eds.),

Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications, ELSEVIER SCIENCE BV, Amsterdam, 2005, p. 481.

20. G. Spoto, S. Bordiga, A. Zecchina, D. Cocina, E.N. Gribov, L. Regli, E. Groppo, C. Lamberti,

New frontier in transmission IR spectroscopy of molecules adsorbed on high surface area solids: Experiments below liquid nitrogen temperature, *Catalysis Today* 113 (2006) 65.

21. M. Chiesa, M.C. Paganini, E. Giamello, C. Di Valentin, G. Pacchioni,

Electron traps on oxide surfaces: (H+|e(-)) pairs stabilized on the surface of O-17 enriched CaO, *Chemphyschem* 7 (2006) 728.

22. L. Bertineti, A. Tampieri, E. Landi, G. Martra, S. Coluccia,

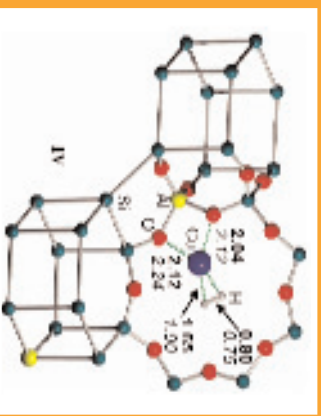
Punctual investigation of surface sites of HA and magnesium-HA, *Journal of the European Ceramic Society* 26 (2006) 987.



Adesione di MgO all'argento metallico

H₂: ADSORBIMENTO DISSOCIAZIONE E STOCCAGGIO

L'idrogeno viene spesso citato come il combustibile del futuro. Può essere prodotto dall'acqua, e in acqua si trasforma bruciando. Quando sapremo produrlo efficacemente da fonti rinnovabili, sarà un vettore energetico ideale: neutro da un punto di vista ambientale. Purtroppo però a causa della sua leggerezza e bassa reattività, l'idrogeno è assai difficile da immagazzinare. Infatti, volendo fare un pieno di idrogeno sufficiente a percorrere qualche centinaio di chilometri, saremmo costretti a montare nostre automobili serbatoi grandi quanto una mongolfiera, perché l'idrogeno è un gas assai rarefatto a temperatura ambiente. Le due strategie più immediate per aumentarne la densità, comprimerlo o liquefarlo, presentano o grossi svantaggi dal punto di vista della sicurezza o dal punto di vista economico. Sono quindi attualmente in studio vie alternative che consentano di immagazzinare l'idrogeno sulle macchine del futuro sfruttandone l'assorbimento in materiali in grado di legarlo in modo stabile ma reversibile.

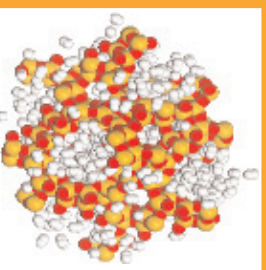
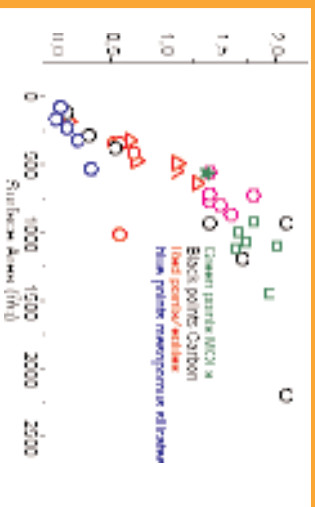


Visione locale della struttura del complesso H₂/Cu⁺ nel reticolo chabazitico

Lo studio dell'interazione dell'idrogeno con tali materiali è al centro di un fervido lavoro al NIS, come documentato dalla bibliografia allegata. Materiali microporosi e cristallini quali zeoliti e MOF (strutture metallo-organiche), materiali polimerici e idruri metallici (alanati, leghe leggere a base Mg, ...) sono attualmente al vaglio mediante l'utilizzo di diverse tecniche sperimentali e teoriche. È importante ricordare come sia necessaria una comprensione dei meccanismi alla base dell'immagazzinamento non essendovi al momento un materiale in grado di soddisfare tutte le richieste per un suo utilizzo pratico quale serbatoio di idrogeno.

Ogni materiale viene quindi sottoposto non solo a misure volumetriche e gravimetriche per determinarne la capacità ma anche di tipo spettroscopico. Di grande aiuto sono anche le tecniche di tipo computazionale, non solo nella comprensione dei risultati sperimentali ma anche nel fornire linee guida nel design di nuovi materiali con caratteristiche migliorate.

Una ulteriore linea di lavoro si rivolge alla problematica della purificazione dell'idrogeno, aspetto estremamente importante nel caso in cui l'idrogeno sia usato nelle fuel cell per le quali anche solo tracce di CO devono essere eliminate. In questo senso estremamente attivi si stanno rivelando catalizzatori a base di nanoparticelle di oro.



Simulazione della capacità massima di immagazzinamento in una zeolite FAU

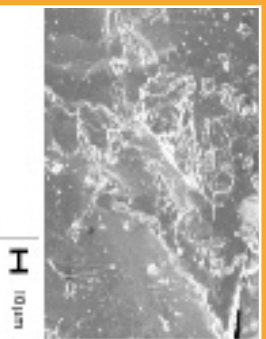


Immagine in microscopia a scansione in cui si notano le fratture provocate dall'assorbimento e dal desorbimento dell'idrogeno all'interno della fase intermetallica CeNi₂

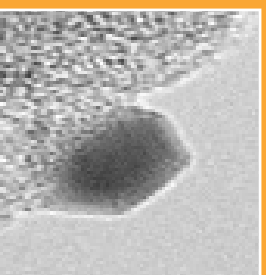
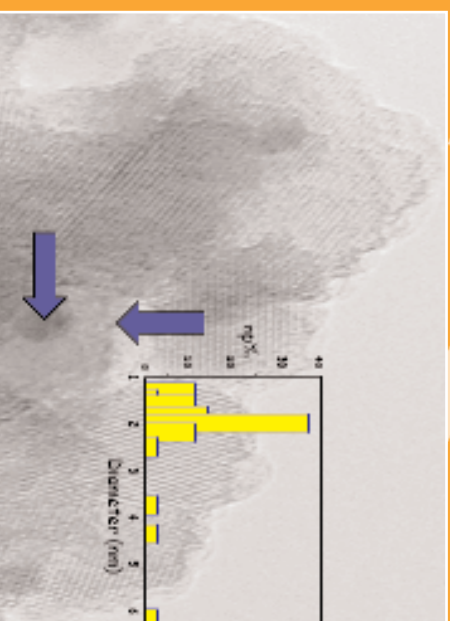


Immagine HRTEM di particelle d'oro supportate su ZrCeO₂-8TiO₂

1. E. Gribov, S. Bertarione, D. Scarano, C. Lamberti, G. Spoto, A. Zecchina, **Vibrational and Thermodynamic Properties of H₂ Adsorbed on MgO in the 300-20 K Interval**, Journal of Physical Chemistry B, 108, (2004), 16174
2. S. Bordiga, C. Lamberti, G. Ricchiardi, L. Regli, F. Bonino, A. Damin, K.P. Lillerud, M. Bjorgen, A. Zecchina, **Electronic and vibrational properties of a MOF-5 metal-organic framework: ZnO quantum dot behaviour**, Chemical Communications (2004) 2300.
3. G. Spoto, E. Gribov, S. Bordiga, C. Lamberti, G. Ricchiardi, D. Scarano, A. Zecchina, **Cu+(H₂) and Na+(H₂) adducts in exchanged ZSM-5 zeolites**, Chemical Communications (2004) 2768.
4. X. Solans-Monfort, V. Branchadell, M. Sodupe, C.M. Zicovich-Wilson, E. Gribov, G. Spoto, C. Busco, P. Ugliengo, **Can Cu+-exchanged zeolites store molecular hydrogen? An ab-initio periodic study compared with low-temperature FTIR**, Journal of Physical Chemistry B 108 (2004) 8278.
5. S. Bordiga, J.G. Vitillo, G. Ricchiardi, L. Regli, D. Cocina, A. Zecchina, B. Arstad, M. Bjorgen, J. Hafizovic, K.P. Lillerud, **Interaction of hydrogen with MOF-5**, Journal of Physical Chemistry B 109 (2005) 18237.
6. Zecchina, S. Bordiga, J.G. Vitillo, G. Ricchiardi, C. Lamberti, G. Spoto, M. Bjorgen, K.P. Lillerud, **Liquid hydrogen in protonic chabazite**, Journal of the American Chemical Society 127 (2005) 6361.
7. L. Regli, S. Bordiga, A. Zecchina, M. Bjorgen and K. P. Lillerud, **Acidity properties of CHA-zeolites (SAP0-34 and SSZ-13): an FTIR spectroscopic study**, in: **Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications** ELSEVIER SCIENCE BV: Amsterdam, 2005; Vol. 155, p. 471.
8. G. Spoto, S. Bordiga, J. G. Vitillo, G. Ricchiardi and A. Zecchina, **The role of surfaces in hydrogen storage, in: Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications**, ELSEVIER SCIENCE BV: Amsterdam, 2005; Vol. 155, p. 481.
9. L. Regli, A. Zecchina, J.G. Vitillo, D. Cocina, G. Spoto, C. Lamberti, K.P. Lillerud, U. Olsbye, S. Bordiga, **Hydrogen storage in chabazite zeolite frameworks**, Physical Chemistry Chemical Physics 7 (2005) 3197.
10. J.G. Vitillo, G. Ricchiardi, G. Spoto, A. Zecchina, **Theoretical maximal storage of hydrogen in zeolitic frameworks**, Physical Chemistry Chemical Physics 7 (2005) 3948.
11. M. Di Chio, S. Livraghi, M. Baricco, J. Alloys and Comp., in press.
12. M. Di Chio, A. Ziggioiti, L. Schiffrini, S. Enzo, G. Cocco, M. Baricco, **Hydrogen absorption-desorption on LaMg₂Ni**, Proc. of "1st World Congress of Young Scientists on Hydrogen", Turin, Italy 18-20 May 2005, Begell House Inc, New York (2005)

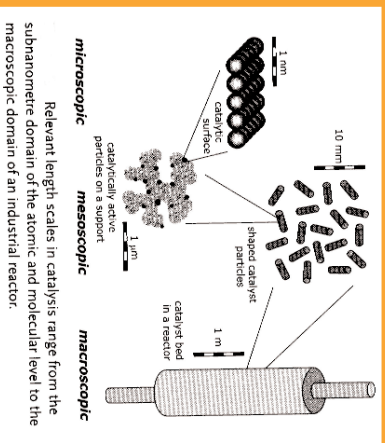


CATALIZZATORI NANO-STRUTTURATI

La richiesta sempre crescente di nuovi prodotti e processi produttivi a più basso impatto ambientale motiva il grande sforzo verso la ricerca di innovazione di tutti i passaggi produttivi, a partire dallo sviluppo di nuovi catalizzatori. I catalizzatori selettivi possono essere considerati come nanomacchine disegnate per realizzare la sintesi di molecole, con elevata attività e selettività. Il sito attivo di un catalizzatore consiste in una macchina nanometrica che "mima" la struttura degli enzimi, i più efficienti catalizzatori esistenti, ottimizzati dalla natura nel corso di milioni di anni.

Le proprietà a livello nanometrico dei catalizzatori, derivano da un preciso controllo, della struttura dei siti attivi, dell' intorno tridimensionale che li circonda e della loro interazione. Solo così è possibile guidare in modo specifico la maniera in cui le molecole si avvicinano, interagiscono e si combinano per dare i prodotti desiderati.

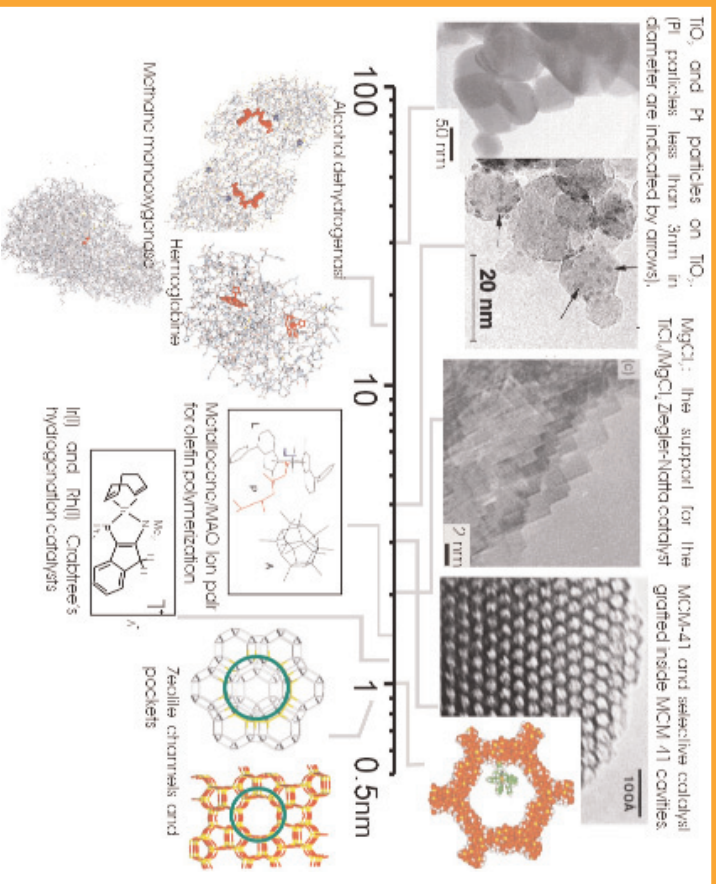
Materiali studiati in questo ambito sono per esempio le zeoliti (silico alluminati cristallini porosi), ossidi, ioni di transizione graffiati e/o incapsulati su ossidi ad elevato sviluppo superficiale, metalli supportati su ossidi e carboni.



Relevant length scales in catalysis range from the subnanometre domain of the atomic and molecular level to the macroscopic domain of an industrial reactor.

Lo sviluppo di nuovi catalizzatori di questo tipo richiede la comprensione di fenomeni che avvengono su scala nanometrica: l'adsorbimento, la rottura e la formazione di legami. Ciò è possibile facendo ricorso ad avanzate tecniche di caratterizzazione (spettroscopie, microcalorimetria, misure volumetriche) e di simulazione. Non meno importanti sono anche le caratteristiche dei sistemi studiati a livello mesoscopico: morfologia e dimensione delle particelle, distribuzione sul supporto, interazione con questo. Questo è l'ambito della preparazione dei catalizzatori e degli studi meccanicistici che considerano i fenomeni di trasporto e la diffusione delle molecole nei pori. In questo caso molto informative sono le misure di attività catalitica.

fenomeni di trasporto e la diffusione delle molecole nei pori. In questo caso molto informative sono le misure di attività catalitica.



1. C. Prestipino, F. Bonino, S. Usseglio, A. Damini, A. Tasso, M.G. Clerici, S. Bordiga, F. D'Acapito, A. Zecchina, C. Lamberti

Equilibria between peroxo and hydroperoxo species in the titanosilicates: An in situ high-resolution XANES investigation, *ChemPhysChem* 5 (2004) 1799.

2. V. Bolis, A. Barbaglia, S. Bordiga, C. Lamberti, A. Zecchina
Heterogeneous nonclassical carbonyls stabilized in Cu(II)- and Ag(I)-ZSM-5 zeolites: Thermodynamic and spectroscopic features, *Journal of Physical Chemistry B* 108 (2004) 9970.

3. F. Bonino, A. Damini, S. Bordiga, M. Selva, P. Tundo, A. Zecchina
Dimethyl carbonate in the supercages of NaY zeolite: The role of local fields in promoting methylation and carboxymethylation activity, *Angewandte Chemie-International Edition* 44 (2005) 4774.
4. M.T. Nechita, G. Bertler, G. Ricchiardi, S. Bordiga, A. Zecchina
New precursor for the post-synthesis preparation of Fe-ZSM-5 zeolites with low iron content, *Catalysis Letters* 103 (2005) 33.

5. F. Arena, G. Gatti, G. Martra, S. Coluccia, L. Stevano, L. Spadaro, P. Famulari, A. Parmaliana,
Structure and reactivity in the selective oxidation of methane to formaldehyde on low-loaded Fe_x/SiO₂ catalysts, *Journal of Catalysis* 231 (2005) 365.

6. G. Bertler, M. Pourny, S. Bordiga, G. Spoto, A. Zecchina, C. Lamberti,
Coordination and oxidation changes undergone by iron species in Fe-MCM-22 upon template removal, activation and red-ox treatments: an in situ IR, and XANES study
Journal of Catalysis 229 (2005) 45.

7. G. Bertler, G. Ricchiardi, S. Bordiga, A. Zecchina
Catalytic activity of Fe ions in iron-based crystalline and amorphous systems: role of dispersion, coordinative unsaturation and Al content, *Journal of Catalysis* 229 (2005) 127.

8. E. Groppo, C. Lamberti, G. Spoto, S. Bordiga, G. Magnacca, A. Zecchina,
Tuning the structure, distribution and reactivity of polymerization centres of Cr(III)/SiO₂ Phillips catalyst by controlled annealing, *Journal of Catalysis* 236 (2005) 233.

9. E. Groppo, C. Prestipino, F. Cesano, F. Bonino, S. Bordiga, C. Lamberti, P.C. Thune, J.W. Niemantsverdriet, A. Zecchina
In situ, CrK-edge XAS study on the Phillips catalyst: activation and ethylene polymerization, *Journal of Catalysis* 230 (2005) 98.

10. G. Bertler, C. Prestipino, M. Rivallan, S. Bordiga, C. Lamberti, A. Zecchina,
Behavior of extraframework Fe sites in MFI and MCM-22 zeolites upon interaction with N₂O and NO, *Journal of Physical Chemistry B* 109 (2005) 22377.

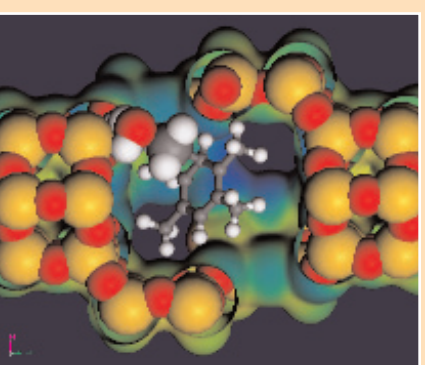
11. S. Bordiga, L. Regli, C. Lamberti, A. Zecchina, M. Jorgen, K.P. Lillerud
FTIR adsorption studies of H₂O and CH₃OH in the isostructural H-SSZ-13 and H-SAPO-34: Formation of H-bonded adducts and protonated clusters, *Journal of Physical Chemistry B* 109 (2005) 7724.

12. S. Bordiga, L. Regli, D. Cocina, C. Lamberti, M. Biorgen, K.P. Lillerud
Assessing the acidity of high silica chabazite H-SSZ-13 by FTIR using CO as molecular probe: Comparison with H-SAPO-34, *Journal of Physical Chemistry B* 109 (2005) 2779.

13. E. Groppo, C. Lamberti, S. Bordiga, G. Spoto, A. Damini, A. Zecchina,
Phillips catalyst: A preliminary step in the understanding of a complex system, *Journal of Physical Chemistry B* 109 (2005) 15024.

14. C. Busco, A. Barbaglia, M. Broyer, V. Bolis, G.M. Foddanu, P. Ugliengo,
Characterisation of Lewis and Brønsted acidic sites in H-MFI and H-BEA zeolites: a thermodynamic and ab initio study, *Thermochimica Acta* 418 (2004) 3.

15. C. Prestipino, L. Capello, F. D'Acapito, C. Lamberti,
Local structure of Cu-(CO)₂ (+) adducts hosted inside ZSM-5 zeolite probed by EXAFS, XANES and IR spectroscopies, *Physical Chemistry Chemical Physics* 7 (2005) 1743.



Tetrametilbenzene nella cavità di un catalizzatore CHA: un intermedio nella trasformazione del metanolo in benzine

16. Zecchina, G. Spoto, S. Bordiga
Probing the acid sites in confined spaces of microporous materials by vibrational spectroscopy, Physical Chemistry Chemical Physics 7 (2005) 1627.
17. E. Groppo, C. Lamberti, S. Bordiga, G. Spoto and A. Zecchina
The structure of active centers and ethylene polymerisation mechanism on the Cr/SiO₂ catalyst: a frontier of characterization methods Chemical Reviews, 2005, 105, 115.
18. E. Groppo, A. Damin, F. Bonino, A. Zecchina, S. Bordiga, C. Lambert
New strategies in the Raman study of the Cr/SiO₂ Phillips catalyst: Observation of molecular adducts on Cr(III) sites, Chemistry of Materials 17 (2005) 2019.
19. M. Bjorgen, F. Bonino, B. Arstad, S. Kolboe, K.P. Lillerud, A. Zecchina, S. Bordiga,
Persistent methylbenzenium ions in protonated zeolites: The required proton affinity of the guest hydrocarbon, Chemphyschem 6 (2005) 232.
20. C. Prestipino, L. Regli, J.G. Vitillo, F. Bonino, A. Damin, C. Lamberti, A. Zecchina, P.L. Solarì, K.O. Kongsnaug, S. Bordiga,
Local structure of framework Cu(II) in HKUST-1 metallorganic framework: Spectroscopic characterization upon activation and interaction with adsorbates, Chemistry of Materials 18 (2006) 1337.
21. A. Damin, F. Bonino, S. Bordiga, E. Groppo, C. Lamberti, A. Zecchina
Vibrational properties of Cr-III Centers on reduced Phillips catalysts highlighted by resonant Raman spectroscopy, Chemphyschem 7 (2006) 342.
22. G. Bertler, E. Gribov, D. Cocina, G. Spoto, A. Zecchina,
Probing the Bronsted and Lewis acidity of Fe-silicalite by FTIR spectroscopy of H₂ adsorbed at 20 K: Evidences for the formation of Fe₃+/H₂ and Fe₂+/H₂ molecular adducts, Journal of Catalysis 238 (2006) 243.
23. A. Gervasini, M. Manzoli, G. Martra, A. Ponti, N. Ravasio, L. Sordelli, F. Zeccheria
Dependence of copper species on the nature of the support for dispersed CuO catalysts Journal of Physical Chemistry B 110 (2006) 7851.
24. C. Bisio, P. Massiani, K. Fajerwerg, L. Sordelli, L. Stievano, E.R. Silva, S. Coluccia, G. Martra,
Identification of cationic and oxidic caesium species in basic Cs-overloaded BEA zeolites, Microporous and Mesoporous Materials 90 (2006) 175.
25. E.N. Gribov, D. Cocina, G. Spoto, S. Bordiga, G. Ricchiardi, A. Zecchina
Vibrational and thermodynamic properties of Ar, N₂, O₂, H₂ and CO adsorbed and condensed into [H-Na]-Y zeolite cages as studied by variable temperature IR spectroscopy, Physical Chemistry Chemical Physics 8 (2006) 1186.



MATERIALI E MOLECOLE FOTOATTIVE

I fotocatalizzatori sono materiali in grado di utilizzare l'energia della luce per condurre reazioni chimiche. Il fenomeno è complesso e richiede materiali e molecole specificamente progettate a questo scopo. Le applicazioni spaziano dai sistemi fotocatalitici per l'abbattimento degli inquinanti ai materiali autopulenti, ai materiali foto elettrocatalitici per la reazione di decomposizione dell'acqua.

Per quanto concerne i materiali fotoattivi per l'abbattimento degli inquinanti, benché il materiale di riferimento sia il biossido di titanio (TiO₂), grande potenzialità hanno assunto nuove tecniche preparative che permettono di ottenere composti ad elevata area superficiale e/o materiali nanostrutturati per i quali la forma e la dimensione delle particelle può essere modificata a piacere.

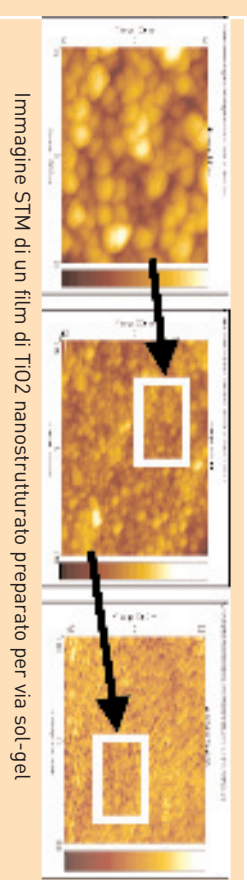
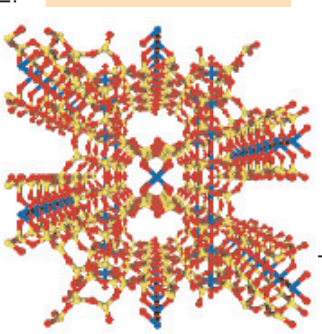


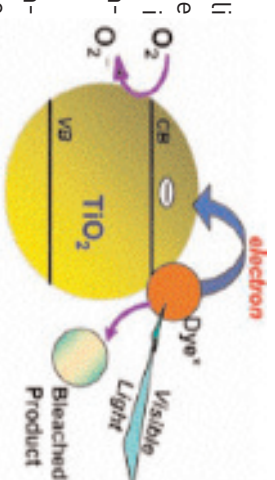
Immagine STM di un film di TiO₂ nanostrutturato preparato per via sol-gel



ETS-10: un catalizzatore con selettività di forma

La caratteristica intrinseca di microporosità di alcuni silico-titanati è un ulteriore elemento che può dare origine a materiali che abbinano le proprietà fotocatalitiche di specie TiO₂, con quelle di selettività di forma tipiche dei materiali microporosi.

Ulteriori elementi di innovazione sono ottenibili funzionalizzando questi materiali con specie che assorbono luce visibile in modo da rendere attivi i materiali non solo se stimolati da radiazione ultravioletta, ma anche visibile.



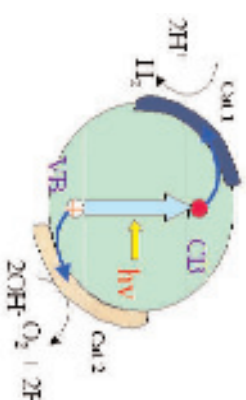
La luce o l'ambiente chimico, possono comportare un cambiamento strutturale di specifiche molecole che, cambiando colore, possono essere utilizzate come sensorie/indicatori



Materiali cementizi contenenti piccole quantità di biossido di Titanio altamente disperso stanno riscuotendo grande interesse come nuovi materiali per l'edilizia in quanto manifestano significative proprietà autopulenti.

Specie molecolari a base di complessi di Rutenio sono alla base di nuovi materiali che trovano applicazioni nel settore delle celle solari "dye-sensitized".

Una importante sfida tecnologica consiste nel realizzare un materiale capace di decomporre l'acqua in idrogeno ed ossigeno. Si tratta di un argomento di estremo interesse che confluisce con le attività inerenti al settore idrogeno.

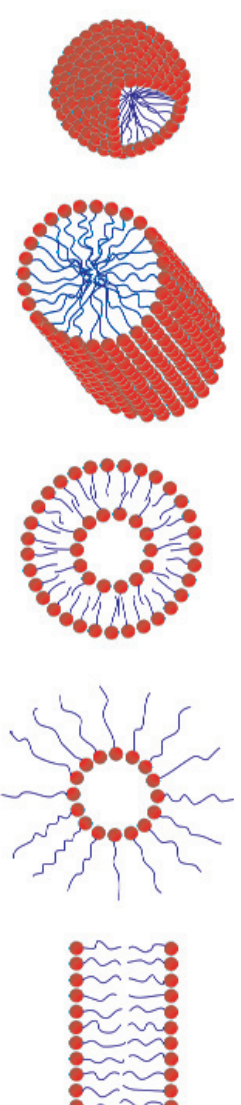


CHIMICA MACRO E SUPRA-MOLECOLARE

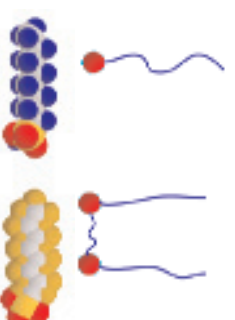
I tensioattivi sono molecole contenenti due porzioni con natura diversa: idrofila e idrofobica. Tale caratteristica consente loro di adattarsi ai diversi ambienti liquidi, acquoso e non acquoso, consentendo di rendere compatibile, ad esempio l'olio con l'acqua. La loro capacità di concentrarsi alle interfacce è fonte di numerosissime applicazioni pratiche che ci vedono coinvolti ogni giorno, come ad esempio la detergenza personale, dei tessuti, delle stoviglie. Altre applicazioni coinvolgono settori più avanzati della tecnologia. I tensioattivi possono ad esempio:

- legarsi ai metalli proteggendoli dalla corrosione,
- funzionare come stampo molecolare per la formazione di strutture a base inorganica con struttura porosa (zeoliti, ma soprattutto i materiali mesoporosi)
- formare complessi con il DNA che possono trasportare il DNA stesso nelle cellule per scopi terapeutici (terapia genica con *carrier* non virali).

Presso il NIS le ricerche sui tensioattivi sono prevalentemente indirizzate verso la sintesi organica dei tensioattivi, la loro caratterizzazione mediante tecniche chimico-fisiche e spettroscopiche, il loro utilizzo come stampo molecolare per la preparazione di materiali mesoporosi e come trasportatori di DNA al nucleo cellulare.



I tensioattivi si assemblano spontaneamente a formare strutture complesse



consentire di regolare la stereoselettività delle reazioni condotte in presenza di questi tensioattivi.

Un ulteriore settore in espansione si rivolge alla conservazione e recupero dei beni culturali. In questo ambito si menzionano gli studi rivolti alla preparazione e caratterizzazione di nuovi materiali per coating protettivi.

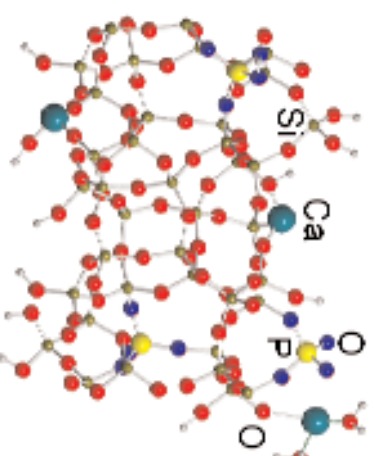
1. M. K. Nazeeruddin, S. M. Zakeeruddin, J.-J. Lagref, P. Liska, P. Comte, C. Barolo, G. Viscardi, K. Schenk, M. Graetzel
Stepwise Assembly of Amphiphilic Ruthenium Sensitizers and their Applications in Dye Sensitized Solar Cell, Coordination Chemistry Review, 248 (2004), 1317
2. L. Borrello, B. Onida, C. Barolo, K.J. Edler, C. O. Areean, E. Garrone
Accessibility of dyes molecules embedded in surfactant-silica hybrid materials in both powder and film forms, Sensors and Actuators B-Chemical 100, (2004), 107
3. B. Onida, L. Borrello, S. Fiorilli, C. Barolo, K.J. Edler, C. Otero-Areean, E. Garrone
Accessibility to gases of dye molecules in hybrid surfactant-silica mesophases Studies in Surface Science and Catalysis 154 3010-3016, 2004
4. R. Piron, S. Brasselet, D. Josse, J. Zyss, G. Viscardi, C. Barolo
Matching molecular and optical multipoles in photozomerizable nonlinear systems, JOSA B, 22, 1276-1282 (2005)
5. S. Livraghi, A. Votta, M.C. Paganini, E. Giamello,
The nature of paramagnetic species in nitrogen doped TiO₂ active in visible light photocatalysis, Chemical Communications (2005) 498.
6. V. Maurino, C. Minero, G. Mariella, E. Pelizzetti
Sustained production of H₂O₂ on irradiated TiO₂ - Fluoride Systems Chemical Communications (2005) 2627.
7. M. Addamo, V. Augugliaro, S. Coluccia, M.G. Faga, E. Garcia-Lopez, V. Loddò, G. Marci, G. Martra, L. Palmisano,
Photocatalytic oxidation of acetonitrile in gas-solid and liquid-solid regimes, Journal of Catalysis 235 (2005) 209.
8. C. Prestipino, P.L. Solari, C. Lamberti
EXAFS and XANES investigation of the ETS-10 microporous titanosilicate Journal of Physical Chemistry B 109 (2005) 13132
9. M. K. Nazeeruddin, F. De Angelis, S. Fantacci, A. Selloni, G. Viscardi, P. Liska, S. Ito, B. Takeru, M. Grätzel,
Combined Experimental and DFT-TDDFT Computational Study of Photoelectrochemical Cell Ruthenium Sensitizers Journal of the American Chemical Society 127 (48), (2005), 16835
10. B. Onida, L. Borrello, S. Fiorilli, C. Barolo, G. Viscardi, D. Macquarrie, E. Garrone
One-pot synthesis and characterization of HMS silica carrying Disperse Red 1 (DR1) covalently bonded to the inner surface C. R. Chimie 8, 655-661 (2005)
11. Y. Hu, G. Martra, J.L. Zhang, S. Higashimoto, S. Coluccia, M. Anpo
Characterization of the local structures of Ti-MCM-41 and their photocatalytic reactivity for the decomposition of NO into N₂ and O₂ Journal of Physical Chemistry B 110 (2006) 1680.



1. M. Lazzari, O. Chiantore, R. Mendichi and M. A. Lopez-Quintela
Synthesis of Polyacrylonitrile-block-polystyrene copolymers by Atom Transfer Radical Polymerization,
Macromolecular Chemistry and Physics, 206, (2005), 1382
2. O. Chiantore, Massimo Lazzari, D. Scalarone, Valter Castelvetro, Francesca Signori
Novel partially fluorinated copolymers: evidence of the effect of fluorine on the reactivity of the unfluorinated co-monomer units
Macromolecular Rapid Communications, 26(2) (2005) 75.
3. P. Quagliotto, G. Viscardi, C. Barolo, E. Barni, S. Bellinva, E. Fiscaro, C. Compari
Gemini Pyridinium Surfactants: Synthesis and properties of a novel class of amphiphiles
Journal of Organic Chemistry, 68, (2003), 7651.
4. E. Fiscaro, C. Compari, E. Duce, C. Contestabili, G. Viscardi, P. Quagliotto
First evaluation of the thermodynamic properties for spheres to elongated micelles transition of some propanediyl-alpha,omega-bis(dimethylalkylammonium bromide) surfactants in aqueous solution,
Journal of Physical Chemistry B 109 (2005) 1744.
5. P. Quagliotto, G. Viscardi, C. Barolo, D. D'Angelo, E. Barni, C. Compari, E. Duce, E. Fiscaro,
Synthesis, and properties of new glucocorticoid surfactants: model structures for marking cationic surfactants with carbohydrates,
Journal of Organic Chemistry 70 (2005), 9857-9866.
6. D. Scalarone, O. Chiantore
FTIR monitoring of surfactant phase-separation and stability in waterborne organic coatings and artists acrylic paints
Proceedings of the Sixth Infrared and Raman Users Group Conference, Il Prato Publisher, Italy, 2004, pp.52-57.
7. Piccirillo, D. Scalarone, O. Chiantore
Comparison between off-line and on-line derivatisation methods in the characterisation of siccative oils in paint media
Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 1-2 (2005) 33.
8. D. Scalarone, M.C. Duursma, J.J. Boon, O. Chiantore
MALDI-TOF mass spectrometry on cellulosic surfaces of fresh and photo-aged di- and triterpenoid varnish resins
Journal of Mass Spectrometry, 40 (2005) 1527.
9. R. Ploeger, A. Murray, S. Hesp, D. Scalarone
An investigation of the chemical changes of artists' acrylic paint films when exposed to water,
Materials Issues in Art and Archaeology VII, edited by Pamela B. Vandiver, Jennifer L. Mass, and Alison Murray [Water. Res. Soc. Symp. Proc. 852, Warrendale, PA, 2005], 003.4.
10. P. Savarino, S. Parlati, R. Buscaino, P. Piccinini, C. Barolo, E. Montoneri,
Effects of additives on the dyeing of polyamide fibres.
Part II: Methyl-beta-cyclodextrin, Dyes and Pigments 69 (2006) 7.

BIOCOMPATIBILITÀ E TOSSICITÀ DEI MATERIALI

La specificità dei materiali bioattivi è quella di essere capaci di interagire con la materia vivente e di trasformarsi in modo da adattarsi a questa, eventualmente assumendo caratteristiche di composizione e struttura simili ai componenti naturali. Si tratta di un settore in grande crescita che si affianca a quello dei materiali bio-compatibili, già ampiamente sviluppato e studiato nel campo delle protesi.

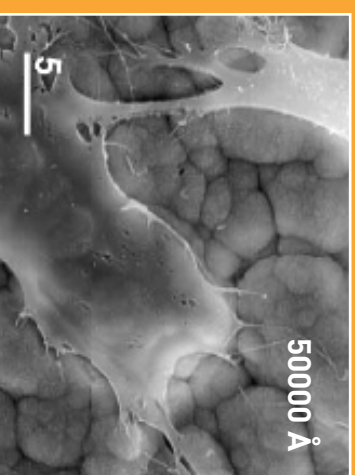
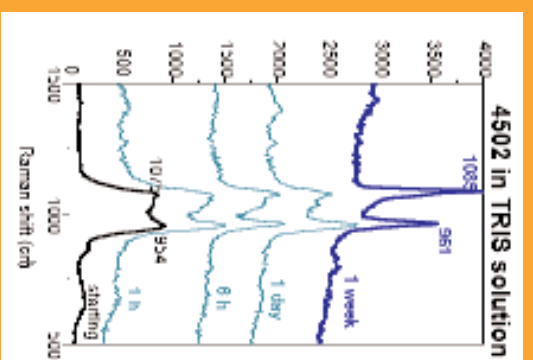


L'elemento di innovazione, che comporta da una parte grandi aspettative ma anche incertezze, consiste nel fatto che alcuni materiali si dimostrano bio-attivi quando messi in contatto con un mezzo biologico. La bioattività rappresenta una grande potenzialità: in seguito all'interazione, il materiale si trasforma in qualche cosa di molto simile, al limite identico, al materiale biologico. In questo modo sembrano comportarsi alcuni vetri che, immersi in soluzioni fisiologiche si sciolgono parzialmente per poi ricristallizzare depositando uno strato di materiale osseo.

Il rovescio della medaglia consiste invece in quei materiali che si dimostrano bio-attivi esplicitando un'azione aggressiva verso le cellule, diventando tossici cancerogeni.

La ricerca in questo settore è molto vivace e molti studi sono in atto sia per quanto concerne la preparazione di nuovi materiali che per la loro caratterizzazione. Vista la complessità della tematica la caratterizzazione viene condotta percorrendo strategie diverse che cercano di combinare l'uso di svariate tecniche spettroscopiche, le microscopie elettroniche, misure di adsorbimento sia volumetrico che micro-calorimetrico. Nell'ambito delle spettroscopie, particolare rilievo ha la spettroscopia Raman capace di seguire le modificazioni strutturali di biovetri nel corso di diversi trattamenti, sempre rimanendo in contatto con soluzioni acquose e quindi in ambienti che simulano gli ambienti fisiologici.

Molto utili si stanno dimostrando anche i metodi di simulazione sia con metodi *ab-initio* sia con metodi di meccanica molecolare.



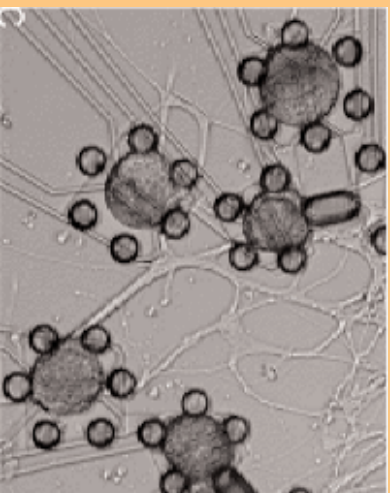
1. M. Cerruti, C. Morterra, P. Ugliengo
Surface features of P-doped silica: a comparison between IR spectroscopy and theoretical modelling,
Journal of Materials Chemistry 14 (2004) 3364.
2. F. Pascale, P. Ugliengo, B. Civalleri, R. Orlando, P. D'Arco, R. Dovesi
The katolite hydrogarnet Si-free $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_4)_2(\text{OH})_4$: A periodic Hartree-Fock and B3-LYP study,
Journal of Chemical Physics 121 (2004) 1005.
3. S.E. Favero-Longo, F. Turci, M. Tomatis, D. Castellì, P. Bonfante, M.F. Hochella, R. Peverittori, B. Fubini,
Chrysotile asbestos is progressively converted into a non-fibrous amorphous material by the chelating action of lichen metabolites,
Journal of Environmental Monitoring 7 (2005) 764.
4. M. Cerruti, C.L. Bianchi, F. Bonino, A. Damin, A. Perardi, C. Morterra
Surface modifications of bioglass® Immersed In TRIS-buffered solution. A multitechnical spectroscopic study,
Journal of Physical Chemistry B 109 (2005) 14496.
5. M. Cerruti, A. Perardi, G. Cerrato, C. Morterra
Formation of a nanostructured layer on bioglass particles of different sizes immersed in tris-buffered solution.
 N_2 adsorption and HR-TEM/EDS analysis, Langmuir 21 (2005) 9327.
6. Perardi, M. Cerruti and C. Morterra
Carbonate formation on sol-gel bioactive glass 58S and on Bioglass (R) 455S,
in: Oxide Based Materials: New Sources, Novel Phases, New Applications;
ELSEVIER SCIENCE BV: Amsterdam, 2005; Vol. 155, p. 461.
7. S. Daghino, E. Martino, I. Fenoglio, M. Tomatis, S. Perotto, B. Fubini
**Inorganic materials and living organisms:
Surface modifications and fungal responses to various asbestos forms**
Chemistry-A European Journal 11 (2005) 5611.

BIO-FISICA E NEUROCHIPS

L'eccitabilità neuronale e la trasmissione sinaptica sono funzioni cellulari fondamentali per la sopravvivenza e sono controllate da meccanismi molecolari che si generano a livello della membrana plasmatica. L'evento più importante associato allo stato di eccitabilità di un neurone è il potenziale d'azione, indotto da una variazione del potenziale di membrana di circa 100 mV (del



Immagine di parte di una cellula



Neuroni di lumaca

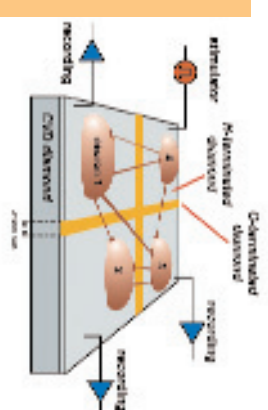
tipo tutto-oriente) che persiste per pochi millisecondi. La registrazione di un potenziale d'azione equivale a valutare la funzionalità di un neurone ed è tipicamente effettuata mediante microelettrodi conduttivi che permettono il contatto elettrochimico tra neurone e strumentazione esterna. Registrosioni di potenziali d'azione ripetibili e protratte nel tempo attraverso sistemi miniaturizzati, come nel caso di protesi e dispositivi a microelettrodi, richiedono una continua ricerca di nuovi materiali ad alta conduttività, stabilità e biocompatibilità.

Al momento esiste un forte interesse scientifico per nuove tecnologie, materiali e dispositivi che

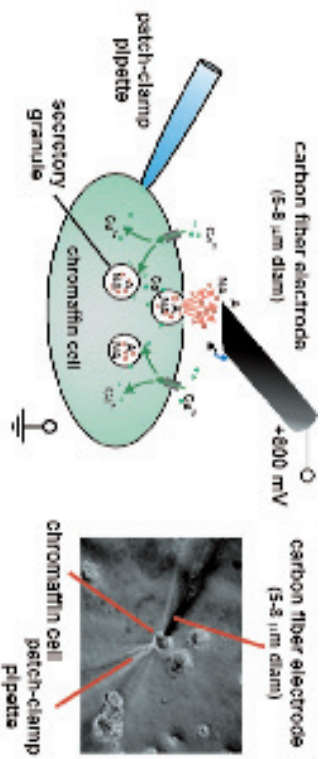
semplifichino il lavoro sperimentale e permettano di sviluppare micro e nano-dispositivi finalizzati alla ricerca di base e allo sviluppo di biosensori per analisi di laboratorio, studi clinici e trattamenti terapeutici. D'altra parte, l'interfacciamento con superfici a stato solido di neuroni (di dimensioni micrometriche) o di porzioni cellulari funzionalmente attive, quali la sinapsi, i neuriti e le vescicole secretorie (di dimensioni nanometriche), ha evidenziato l'esistenza di nuove problematiche scientifiche sui tipi di

materiali da utilizzare, sulla loro struttura superficiale, biocompatibilità e bioreattività con la materia vivente a livello nano- e micrometrico. Si tratta di un settore in larga espansione che vede la partecipazione attiva di ricercatori di varia estrazione (biologi, medici, farmacisti, chimici, fisici, ingegneri). Data la sua bio-compatibilità, attualmente argomento di studio è la possibilità di utilizzare superfici di diamante depositato per condensazione o cristallino, rese conduttive (idrogenate) o isolanti (ossidate) in micro o nanoaree attraverso tecniche litografiche, come materiale di base per fabbricare MEAs di forme e dimensioni diverse, oppure sviluppare "lab on a chip" funzionalizzati per la misura simultanea di correnti ioniche, rilevazione di molecole e cambi di pH.

Utilizzando la tecnica della dip-pen nanolitografia, è ora possibile bio-funZIONALIZZARE la superficie di diamante disegnando con precisione nanometrica piste di biomolecole che favoriscano l'adesione e la crescita neuronale. Sono allo studio molecole di diversa struttura e con particolari proprietà chimico-fisiche associate a sonde fluorescenti appartenenti alla famiglia delle cianine che permettano la visualizzazione delle piste e la possibilità di effettuare misure ottiche sulle diverse interazioni tra substrato, biomolecole e neurone.



Prototipo di "lab-on-chip" con il quale è possibile stimolare o registrare segnali neuronali grazie all'alta conduttività delle zone di diamante idrogenato (grigie) preparato secondo trattamenti di idrogenazione classici.



I granuli secretori, contenenti adrenalina (A) e noradrenalina (NA), si fondono alla membrana citoplasmatica e rilasciano il loro contenuto a seguito di brevi depolarizzazioni indotte dalla pipetta da patch-clamp, che induce l'apertura dei canali del Ca^{2+} e l'ingresso di Ca^{2+} nella cellula. La microfibra di carbonio è polarizzata a +800 mV ed è quasi in contatto con la cellula. La fibra rileva transienti di corrente di ossido-riduzione (20-500 pA) associati alle molecole di A e NA rilasciate durante l'esocitosi di un singolo granulo. Sulla destra è riportata un'immagine al microscopio dei vari elementi.

1. S. Visentin, B. Rolando, A. Di Stilo, R. Fruttero, M. Novara, E. Carbone, C. Russel, N. Vanthuyne e A. Gasco
New 1,4-dihydropyridines endowed with NO donor and calcium channel agonist properties
Journal of Medicinal Chemistry 47, (2004), 2688.
2. Novara M., Baldelli P., Cavallari D., Carabelli V., Giacippoli A. e Carbone E
Exposure to cAMP and b-adrenergic stimulation recruit Cav3 T-type channels in cultured rat chromaffin cells through Epac cAMP-receptor proteins
Journal of Physiology 558, (2004), 433
3. Carbone E., Carabelli V., Baldelli P., Novara M., Giacippoli A., Cavallari D. e Hernández-Guijo J.M.
cAMP and b-adrenergic stimulation regulate L-type channel gating and exocytosis in rat chromaffin cells. In: Cell Biology of the Chromaffin Cells. R. Borges & L. Gandia Eds, Istituto Teófilo Hernando, Spain p. 35-42. Novara M., Giacippoli A., Carabelli V., Baldelli P., Cavallari D. e Carbone E.
4. Novara M., Giacippoli A., Carabelli V., Baldelli P., Cavallari D. e Carbone E.
Exposure to cAMP and b-adrenergic stimulation recruit T-type channels in cultured rat chromaffin cells through an Epac-mediated pathway: effects on exocytosis. Annual Press Book, Society for Neuroscience, 2004, Part II: 463- 465.
5. Baldelli P., Hernández-Guijo J.M., Carabelli V. e Carbone E.
BDNF enhances GABA release probability and non-uniform distribution of N- and P/Q-type channels on release sites of hippocampal inhibitory synapses
Journal of Neuroscience 25(14), (2005), 3358.
6. Mareschi, M. Novara, D. Rustichelli, D. Guido, D. Garbossa, M. Mereuta, E. Carbone , E. Madon, A. Vercelli, F. Fagioli
Plasticità delle cellule staminali mesenchimali. Haematologica
The Hematology Journal, 90 (4), (2005), 11.
7. Mottola, S. Antonioti, D. Lovisolo, L. Munaron
Regulation of noncapacitative calcium entry by arachidonic acid and nitric oxide
in J. Erriquéz, A. Gilardino, P. Ariano, L. Munaron, D. Lovisolo, C. Distasi. Calcium signals activated by arachidonic acid in embryonic chick ciliary ganglion neurons, Neurosignals 14 (2005) 244.
8. E. Carbone,
Ion trafficking through T-type Ca^{2+} channels: a way to look at channel gating position
Journal of General Physiology 124, (2004), 619-622
9. P. Ariano, P. Baldelli, E. Carbone, A. Gilardino, A. Lo Giudice, D. Lovisolo, C. Manfredotti, M. Novara, H. Sternschulte, E. Vittone,
Cellular adhesion and neuronal excitability on functionalised diamond surfaces.
Diamond and Related Materials 14 (2005) 669.
10. Giacippoli, M. Novara, A. de Luca, P. Baldelli, A. Marcantoni, E. Carbone, V. Carabelli
Low-threshold exocytosis induced by cAMP-recruited $CaV1.3$ (alpha1H) channels in rat chromaffin cells
Biophysical Journal 90 (2006) 1830.

ACCESSO ALLE GRANDI INFRASTRUTTURE

L'uso di sorgenti avanzate di raggi X (Sincrotroni: ESRF, Elettra, Daresbury) e di neutroni (ISIS, ILL), è diventata una prerogativa irrinunciabile nella caratterizzazione di punta di materiali. Tale uso è ovviamente trasversale a tutte le tematiche discusse precedentemente. Conseguentemente, l'elenco dei lavori riportati è costituito da pubblicazioni già citate nelle sezioni tematiche.

Membri del NIS hanno effettuato più di 20 esperimenti presso le diverse sorgenti europee, che sono stati approvati dai corrispondenti comitati scientifici. In questi due anni membri del NIS sono stati responsabili di un "Long Term Project" presso il sincrotrone di ESRF. Tre esperimenti sono stati selezionati fra gli "Highlights" di ESRF negli anni 2004-2005.

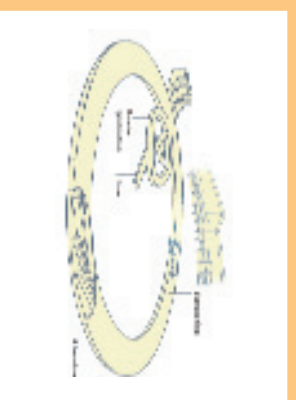
La mole di lavoro svolto e l'impatto delle pubblicazioni ottenute ha permesso a due membri del NIS di entrare a far parte dei comitati che valutano i progetti ed assegnano il tempo di misura presso i sincrotroni di ESRF e di SLS.

Per poter riprodurre presso le grandi sorgenti di radiazioni, le condizioni sperimentali di pressione e temperatura controllate utilizzate per gli esperimenti di laboratorio, membri del NIS hanno sviluppato una vasta gamma di strumentazione dedicata in grado di essere trasportata-

montata e smontata agevolmente ed adattabile alle diverse linee di misura.



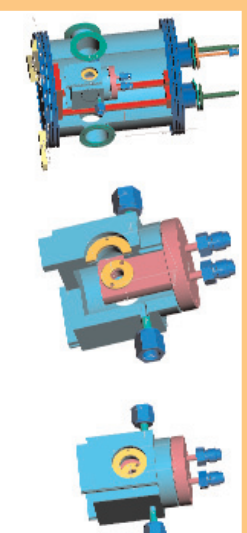
Immagini aeree di Sincrotroni europei: ESRF (Grenoble-Francia) - Daresbury (Inghilterra)



Parti essenziali di un Sincrotrone: Linac; Booster, l'Anello; le lenze di misura



Apparato sperimentale per misure di diffrazione in condizioni di reazione.



Rappresentazioni in scala di celle di misura EXAFS per studi in situ



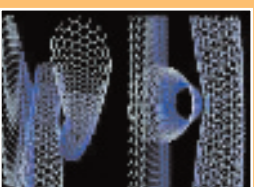
Linea di trattamento ed invio di gas direttamente montate in camera di misura

NUOVE LINEE DI LAVORO AL NIS

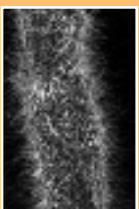
A partire da consolidate conoscenze nei campi della preparazione e caratterizzazione dei materiali nanostrutturati, nel corso di questi ultimi anni, alcune linee di lavoro si sono sviluppate verso argomenti nuovi per i ricercatori afferenti al NIS.

Qui di seguito sono riportati alcuni esempi

Materiali a base di carbonio e/o composti a base di carbonio.



H₂/C₂H₄ 4:1
Fe/carbon fibres
catalyst T = 600°C
1h



F. Cesano, S. Bertarione, D. Scarrano, A. Zecchina,
Connecting carbon fibers by means of catalytically grown nanofilaments:
Formation of carbon-carbon composites,
Chemistry of Materials 17 (2005) 5119

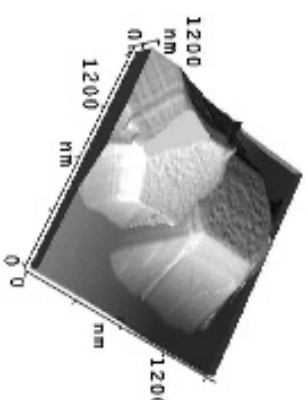
Le fibre di carbonio, usate come tali o come additivi per materiali composti nella fabbricazione di stumenti che richiedono elevate prestazioni meccaniche associate a caratteristiche di leggerezza e facilità di lavorazione, migliorano di molto le prestazioni se, una volte filate e tessute, costituiscono un insieme compatto e difficilmente "sifrabile".

Le tecniche comunemente usate ricorrono all'impregnazione delle fibre con resine, poi sottoposte a trattamenti termici molto drastici che comportano la carbonizzazione della resina e la formazione di una nuova fase carboniosa che salda le fibre.

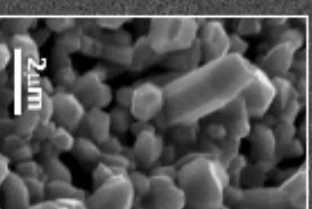
La ricerca di nuove tecniche preparative che richiedano trattamenti meno costosi e assicurino una migliore saldatura fra le fibre, è estremamente attiva e vede la concorrenza di molti gruppi di ricerca già consolidati. Ciononostante, grazie all'esperienza di alcuni ricercatori nel campo della catalisi, è stato possibile raggiungere risultati significativi tali da permettere, non solo la preparazione di pubblicazioni scientifiche, ma anche la presentazione di un brevetto.

Le possibili varianti preparative sono molteplici e portano di

volta in volta a prodotti che vedono l'interfaccia non solo di fasi carboniose caratterizzate da nanostrutture peculiari, ma anche matrici a base di carbonio e sistemi ossidici con caratteristiche isolanti e/o semiconduttori. In questo ambito sono stati preparati materiali a base di carbonio ricoperti da strati di ossidi quali TiO₂ o ZnO. Un esempio è illustrato in figura, nel caso di un materiale composito C/ZnO.



20µm



2µm

Ampi sono gli scenari di applicabilità ed interesse spaziando dai rivestimenti, ai sensori.

Nuovi materiali composti

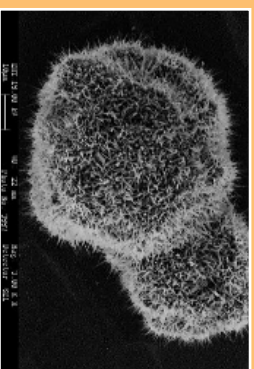
Materiali fibrosi a base di carbonio ma non solo, sono stati ricoperti con film di natura ossidica e/o polimerica in modo da modificarne

sostanzialmente le caratteristiche, come nel caso di fibre di quarzo ricoperte da film polimerici. Il rivestimento di polietilene forma una guaina omogenea ed il film è saldamente aderente alla fibra di quarzo. Nel caso lo si desidera, è anche possibile eliminare la fibra di quarzo ed ottenere un micro tubo di polietilene come è mostrato in figura.

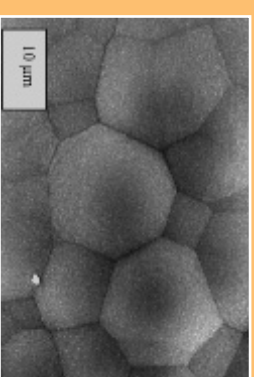
L'utilizzo di tecniche sol-gel hanno permesso di ottenere materiali con proprietà del tutto peculiari con ampie potenzialità di impiego. La possibilità di partire da miscele molecolari di precursori rende possibile, controllando tempi e temperature di reazione, la preparazione di matrici ossidiche contenenti fasi micro e nanodisperse.

In fase di studio sono soprattutto materiali contenenti nanoparticelle di biossido di titanio, viste le loro proprietà fotocatalitiche. Aree di interesse in questo caso sono i nuovi materiali per l'edilizia ed il cosiddetti tessuti intelligenti o "smart textiles".

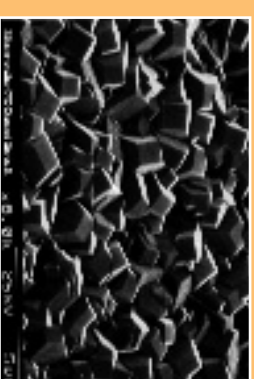
Nanoparticelle di metalli preziosi (oro ed argento) altamente disperse in matrici ossidiche si stanno dimostrando interessanti non solo nel settore della catalisi ma anche come materiali per lo sviluppo di dispositivi utili per la tecnica SERS (Surface enhancement RAMAN spectroscopy).



Nanotubi di ZnO

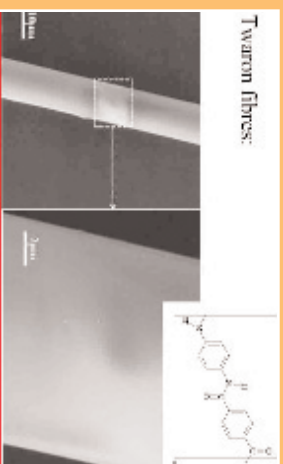
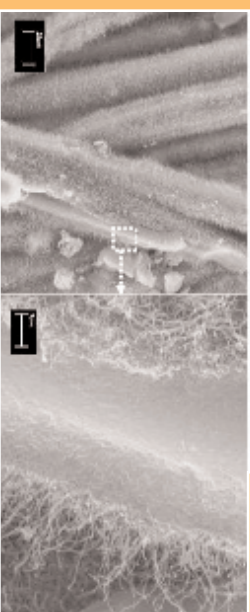


Strato di apatite cresciuto su una protesi di titanio



Diamante nanocristallino cresciuto su silicio

Fibre di cotone rivestite da un film di biossido di titanio hanno mostrato che, benchè le proprietà originarie delle fibre non sono state compromesse, lo strato di rivestimento è autopulente. Se infatti si sottopone la fibra sporca con un colorante ad un semplice irraggiamento solare, la macchia viene eliminata in maniera efficiente e rapida.



Carbon fibres

European patent No05425714.2.
Applicant/Proprietor
Stabilimenti Ozella S.p.A.
Date of Filing 11.10.05
Title
Synthesis of Carbon Nanotubes and/or nanofibres on a polymer substrate
Inventors L. Mezzo, A. Gaiò, F. Cesano, D. Scarrano and A. Zecchina

Inventors L. Mezzo, A. Gaiò, F. Cesano, D. Scarrano and A. Zecchina



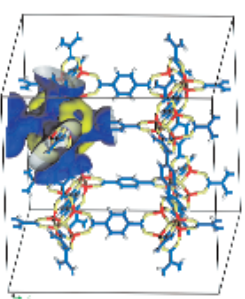
PROGETTI INTERNAZIONALI

IDECAT: a consortium dedicated to catalysis science to promote sustainability

IDECAT gathers the main European research Institutions (37 laboratories from 17 Institutions) in the broad field of catalysis (from homogeneous to heterogeneous and bio-catalysis) to create the critical mass and the multi-disciplinary competences necessary to design the next-generation catalysts and catalytic processes/technologies to promote sustainability. The broad range of expertise ranges from the synthesis and mastering of nano-objects, the bridging between homo- hetero- and bio-catalysis and theory and modelling, surface science, and kinetic/ applied catalysis as well, to the Integrated design of catalytic nanomaterials. Final objective of IDECAT is the creation of an European Research Institute of Catalysis to be the reference Institute for frontier research in catalysis in Europe.

**NEWMOFs New Metal Organic Frameworks for Industrial Applications
SPECIFIC TARGETED RESEARCH OR INNOVATION PROJECT**

Metal Organic Frameworks (MOFs) are novel organic-inorganic crystalline materials, with promise to become a powerful and flexible family for different industrial uses within catalysis, adsorption and sensor technology, overcoming many of the limitations of Zeolites. MOFs may display extreme porosity, and their functionalities can be tailored by using functional precursors in their preparation or by post-functionalization using standard techniques of organic- and organometallic chemistry. These features will be studied in the present project for the development of new heterogeneous catalysts and gas adsorbents.



PHOTOCATALYTIC DECONTAMINATION OF NEUROTOXIC AND VESICANT COMPOUNDS

Nato programme for security through science.

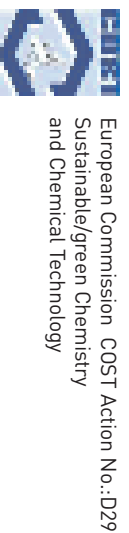
L-type Ca2+ channels in health and disease (CavNET)

Human resources and mobility (HRM) activity

Marie Curie Research Training Networks (RTN)

Call: FP6-2005-Mobility-1

Organic Syntheses with Zeolites: Activation of CO₂ and of Organic Carbonates for Fine Chemicals



**CMA: COMPLEX METALLIC ALLOYS
European Network of Excellence**

Due to the unparalleled diversity of metallic materials, metal-based industries will remain of outstanding importance for the competitiveness of Europe's economy in the 21st century. However, in order to remain successful, metals have to stand up against their competitors, like polymers and ceramics, and they must fulfil the conditions of sustainable development. Of the two possible strategies to respond to these challenges, i.e. improvement of known materials or tapping entirely new systems, the applying institutions suggest the second one. At a time where the great majority of possible metallic systems have not even been looked at, hopes are justified to find among these systems new alloys with properties offering superior solutions with respect to the market demand for outstanding properties at competitive cost combined with environmental harmlessness and low energy consumption during production, service and recycling.

<http://www.cma-ecnoe.org/>

**DUCTILISATION OF BULK METALLIC GLASSES (BMGS) BY
LENGTH-SCALE CONTROL IN BMG COMPOSITES AND APPLICATIONS**

European Research and Training Network (2004-2008):

Recent breakthroughs in Materials Engineering have generated complex Zr, Ti, Cu, Fe, Ni, La, Pd and Mg-based alloys that retain a glassy state in bulk form (Bulk Metallic Glasses or BMGs) via conventional ingot casting.

Due to their 2% elastic strain range (as compared to 0.2% for crystalline materials) BMGs currently have the best known values for the performance index and good values of the yield strength, mass density and Young's modulus.

While they exhibit a very high elastic limit of 2% strain which is of major interest for many structural applications, they show insignificant macroscopic room-temperature plasticity and fail by fracture when solicited beyond their elastic limit.

The major objective of the proposed research programme is to develop ductile high-strength bulk metallic glass (BMG) based composites showing of the order of 10% plastic deformation at room temperatures. This will be achieved by the introduction of selected dispersions of a second phase of crystalline particles in the BMG matrix.

<http://bmg-rtn.inpg.fr/DBMG-Programme.htm>

**COMPLEX SOLID STATE REACTIONS FOR ENERGY EFFICIENT HYDROGEN STORAGE
MARIE CURIE Research Training Networks (RTN)**

Call: FP6-2005-Mobility-1

PROGETTI DI RICERCA APPLICATA

Il Bando regionale sulla Ricerca scientifica applicata 2004

La Regione Piemonte ha avviato con il bando "Ricerca Scientifica Applicata" del 2004 un significativo sforzo di supporto del sistema piemontese della ricerca.

I progetti di ricerca presentati sono stati 684, di cui l'80% da parte degli Atenei piemontesi.

La valutazione dei progetti è stata affidata ad una Commissione (Nucleo tecnico scientifico di Valutazione), istituita con DR n. 19 del 17/05/2005 e formata da 4 esperti indicati dal M.I.U.R. da 5 esperti particolarmente accreditati, uno per ciascuno dei cinque settori d'intervento, e dai responsabili delle Direzioni Regionali coinvolte dal Bando.

Ai fini della selezione, il Nucleo di Valutazione si è avvalso - per ogni singolo progetto - del giudizio espresso da almeno un Referee esterno all'Ente di appartenenza del proponente il progetto. In totale i referee coinvolti sono stati 246.

Il Nucleo di valutazione ha operato a composizione variabile e le singole sottocommissioni, competenti per ciascun settore di ricerca, hanno proceduto alla stesura delle rispettive graduatorie, successivamente approvate dalla Regione.

Il Centro NIS ha partecipato al bando investendo sul coordinamento delle proposte progettuali e dotandosi di un codice di autoregolamentazione basato sui seguenti principi:

- **PRE-SELEZIONE** delle proposte progettuali, al fine di far convergere i propri ricercatori su un numero limitato di progetti ad alto impatto scientifico e tecnologico.
- **PARTENARIATO** con gli altri centri di ricerca del territorio, in particolare con il Politecnico di Torino, al fine di sfruttare al meglio le competenze disponibili.

Complessivamente sono stati finanziati 312 progetti di cui 146 con fondi da delibera CIPE n. 17/03 e 166 con risorse aggiuntive da delibera CIPE n.20/04, con cofinanziamento regionale, per un impegno finanziario complessivo di oltre 31 milioni di Euro.

Nel settore **Nanotecnologie** sono stati presentati 65 progetti di cui 21 sono stati selezionati e finanziati secondo la seguente graduatoria.

Dei 21 progetti finanziati, 9 vedono o come proponente o come co-proponente un ricercatore afferente al Centro NIS. [\[Evidenziati in azzurro\]](#)

PROPONENTE TITOLO DEL PROGETTO

1. Adriano ZECCHINA	Sistemia base di Carbonio nanostrutturato per applicazioni industriali
2. Emilio CARBONE	Biosensori e interazioni neuroni-superfici nanostrutturate
3. Aldo PRIOLA	
4. Fabrizio GIORGIS	
5. Silvio AIME	
6. Giovanni MANA	
7. Emma ANGELINI	
8. Oscar CHIANTORE	Materiali polimerici nanostrutturati per la fabbricazione di membrane e coatings funzionali
9. Giovanni GHIONE	
10. Paolo VOLPE	Studio per la realizzazione di un dispositivo SQUID basato su nanogiuinzioni Josephson intrinseche in materiali superconduttori ad alta Tc
11. Livio BATTEZZATI	Processi di sintesi, proprietà meccaniche, applicazioni di leghe amorfie e nanostrutturate
12. Claudio MORTERRA	Materiali nanostrutturati biocompatibili per applicazioni biomediche Si
13. Candido PIRRI	
14. Mauro ZUCCA	Arrays cellulari e molecolari basati su materiali nanostrutturati fotoattivi
15. Salvatore COLUCCIA	
16. Paolo ALLIA	
17. Monica FERRARIS	
18. Edoardo GARRONE	Sintesi e caratterizzazione di materiali ossidici nanostrutturati
19. Giampiero AMATO	
20. Enrico BOCCALERI	
21. Giuseppe DELLA GATTA	Studio chimico-fisico e strutturale dei processi nanoscopici e mesoscopici nel deterioramento ambientale di pergamene storiche

Altri progetti che vedono come proponente o come co-proponente un membro del NIS e che sono stati presetati in altri ambiti disciplinari:

Nel settore **Sviluppo sostenibile** sono stati presentati 132 progetti di cui 44 sono stati selezionati e finanziati secondo la seguente graduatoria (primi 10). Tra i primi 10 progetti finanziati, 2 vedono come co-proponente e come proponente un membro del NIS.

1. Paolo SPINELLI	Studio per il miglioramento di sistemi elettrodici (MEA) per cella bassa temperatura
2. Mauro CAUSÀ	Modellizzazione su scala regionale della dinamica e della chimica del particolato atmosferico
3. Elisabetta BARBERIS	Prevenzione dell'inquinamento da fosforo di fonte agricola acque superficiali per l'applicazione del Piano di Tutela delle Acque.
4. Aurelio FACCHINELLI	Contributi al problema dell'eutrofizzazione: Il caso del Lago (TO).
5. Aldo VIARENGO	Valutazione del rischio ecologico in suoli inquinati da diossine
6. Paola BENZI	Carburi e nitruri di germanio per applicazioni fotovoltaiche
7. Marcello BARRICO	Materiali innovativi per l'immagazzinamento idrogeno
8. Marco BAGLIANI	Sostenibilità del sistema socio-economico piemontese: flussi materia-energia
9. Enrico FERRERO	Studio modellistico e sperimentale della turbolenza atmosferica e della dispersione inquinanti in ambiente urbano

Nel settore **Scienza della Vita** sono stati presentati 346 progetti di cui 178 sono stati selezionati e finanziati.

Al 49 posto si è classificato il progetto Federico BUSSOLINO su "Modellizzazione in silico di circuiti di segnale intracellulari che regolano la formazione del sistema vascolare".

PIEMONTE MICRO E NANOTECH



Sul territorio piemontese sono attive una molteplicità di iniziative di ricerca, innovazione e produzione industriale, che pur procedendo con approcci differenti ed in settori apparentemente non contigui, si confrontano quotidianamente con le nanotecnologie. Si tratta per esempio delle grandi e piccole realtà manifatturiere, alle prese con l'innovazione nel campo dei materiali, ma anche di alcune nuove piccole imprese nel campo delle biotecnologie, o dei settori tradizionali del tessile e dei casalinghi sottoposti alle sfide dell'innovazione tecnologica.

La rete dei laboratori di ricerca coinvolti nelle nanotecnologie include molti laboratori universitari, centri di ricerca industriali quali il Centro Ricerche Fiat o l'Istituto Donegani di Novara, istituzioni nazionali quali "L'Istituto Elettrotecnico Nazionale Galileo Ferraris", Centri del CNR, e molti altri. A questi attori, si aggiungono i laboratori di ricerca industriale nati dagli atenei per servire le esigenze del territorio, quali ad esempio Tecnogranda (Politecnico di Torino per la provincia di CN) o NISLabVCO (Università di Torino per la provincia del VCO), ed i Centri di Eccellenza.

Da alcuni mesi, molti degli attori di questo ricco scenario, hanno intrapreso un'iniziativa di coordinamento mirata alla costituzione di un vero e proprio Network Piemontese delle Micro e Nanotecnologie, con la funzione di catalizzare e rafforzare le iniziative dei singoli attori, e di accelerare la comunicazione scientifica ed il trasferimento tecnologico. Questo coordinamento trova l'appoggio degli enti pubblici territoriali e vede un'attenzione particolare delle Camere di Commercio e delle organizzazioni dell'Industria e dell'artigianato, impegnate sul fronte della competitività delle aziende.

I laboratori pubblici coinvolti nell'iniziativa sono:

- **Università di Torino:** vari Dipartimenti, Centro di Eccellenza NIS, Centro di Eccellenza CEBIOVEM,
- **Politecnico di Torino:** vari Dipartimenti, CHILab - Latemar, Centro di Cultura Materie Plastiche, LAQ INTESE, LAQ IBIS)
- **Università del Piemonte Orientale:** vari Dipartimenti
- **Istituto Elettrotecnico Nazionale Galileo Ferraris** -INRIM, Laboratorio di Nanotechnology, Materiali Magnetici e Quantum computation
- **CNR:** Istituto di Metrologia G. Colonnetti - INRiM, Dip. Nanometrology
- **CNR:** Istituto di Scienza e Tecnologia dei Materiali Ceramici (ISTEC)
- **Parchi Tecnologici:** BioIndustry Park Ivrea, Environment Park Torino, Tecnoparco del Lago Maggiore, Tecnogranda

A questi si aggiungono numerosi laboratori e stabilimenti industriali, attivi nei seguenti settori:

- Automotive,
- Information technologies,
- Chimica
- Domotica
- Tessile
- Agroalimentare
- Protezione Ambientale
- Sensori e misure
- Diagnostica medica

Il Centro NIS supporta il Network Piemontese Micro e Nanotecnologie nella sua fase di definizione e costituzione formale. Maggiori informazioni saranno disponibili nei prossimi mesi agli indirizzi:

www.nis.unito.it

www.polito.it

www.iem.it



PIEMONTE IDROGENO

La sfida dell'uso dell'idrogeno come vettore energetico del futuro si gioca nel campo dei materiali. Il Centro di Eccellenza NIS è impegnato in numerosi progetti di ricerca in questo settore, riguardanti:

- materiali per l'immagazzinamento dell'idrogeno
- catalizzatori e fotocatalizzatori per la produzione di idrogeno
- catalizzatori ed adsorbenti per la purificazione dell'idrogeno
- materiali per celle a combustibile (elettrodi, catalizzatori, membrane)
- studi fondamentali sulla comprensione dell'interazione dell'idrogeno con i materiali

Queste ricerche vengono svolte attraverso progetti con partner pubblici e privati, e trovano stimolo e coordinamento negli sforzi compiuti dalla Regione Piemonte per creare un vero e proprio Sistema Idrogeno in Piemonte.

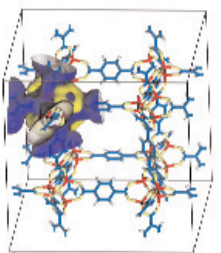
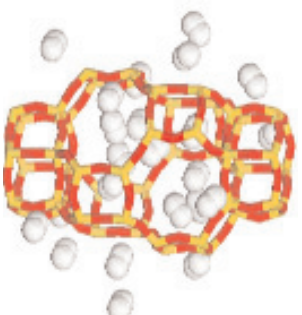
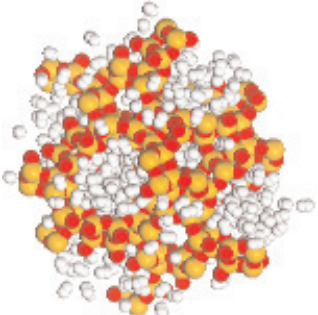
La collaborazione con la Regione Piemonte è resa possibile dalle Borse di Dottorato di Ricerca finanziate dalla Regione Piemonte nel quadro del Bando Regionale Ricerca Applicata 2004 per ricerche sull'idrogeno negli atenei piemontesi per il triennio 2004-2006. Presso il centro NIS sono attivi cinque progetti di questo tipo, strettamente coordinati a quelli analoghi condotti presso il Politecnico di Torino, l'Università del Piemonte Orientale e l'HYSLab:

- Microporous materials for Hydrogen Storage (Laura Regli)
- Quantum mechanical studies of materials for hydrogen storage (Javier Torres)
- Alloys and intermetallic compounds for Hydrogen Storage (Jacopo Urgnani)
- Interaction of hydrogen with oxides in hydrogen storage materials (Francesco Dolci)
- Gold Catalysts for hydrogen production and purification (Floriana Vindigni)



Per valorizzare questo portafoglio di progetti e competenze, il NIS ha scelto, in risposta al Bando Regionale Ricerca Applicata del 2005, di presentare un complesso progetto sull'idrogeno in collaborazione col Politecnico di Torino ed HYSYLab, mirato a supportare lo sviluppo di nuovi materiali ed i progetti di dottorato già avviati. Il progetto: **"Materiali Innovativi per l'immagazzinamento di Idrogeno"**, coordinato dai Prof. Marcello Baricco e Giuseppe Spoto ha ottenuto un finanziamento di 240.000 (vedi sezione Bilancio), che consente significative acquisizioni di nuova strumentazione ed un efficace coordinamento con gli altri attori piemontesi nel campo dell'idrogeno.

Il NIS, in qualità di principale centro dell'Università di Torino nel campo dell'idrogeno, partecipa alle attività del Sistema Piemonte Idrogeno (SPH₂) www.hy-park.org



IL LABORATORIO NISLabVCO

Il Centro NIS è impegnato da tempo in attività di formazione e di collaborazione scientifica con aziende ed istituzioni dell'area del Verbano-Cusio-Ossola. Quest'area vanta una radicata tradizione industriale nei settori della chimica e del manifatturiero, ed ospita uno dei Parchi Tecnologici del sistema piemontese. Su questi presupposti, il NIS ha avviato la costituzione di un laboratorio distaccato a Verbania, presso il Tecnoparco del Lago Maggiore (NISLabVCO). Il laboratorio NISLabVCO nasce dalla collaborazione tra il Centro NIS dell'Università di Torino e l'Associazione per lo Sviluppo della Cultura, della Ricerca e degli Studi Universitari nel VCO (ARSUnVCO), e vede inoltre la partecipazione di:

- Società Aree Industriali e Artigianali S.p.a
- Tecnoparco del Lago Maggiore S.p.a.
- Unione Industriale del VCO
- Camera di Commercio Industria, Agricoltura e Artigianato del VCO
- Banca Popolare di Intra S.c.a.r.l.
- Centro Servizi Lapideo del VCO, SCpA

Il laboratorio ha lo scopo di incrementare le collaborazioni di ricerca tra Università ed Industria, di condurre ricerca applicata nei campi delle nanotecnologie.

Il NISLabVCO sarà in grado di intervenire in risposta a bisogni tecnologici delle aziende, utilizzando risorse tecnologiche accademiche esistenti e personale ad hoc. Da una estesa indagine condotta nella fase preliminare del progetto, è emersa la necessità di un'offerta tecnico-scientifica differenziata. NISLabVCO metterà a disposizione le seguenti tipologie di servizi:

Interviste / attivazione di contatti. Il partner accademico agirà come broker scientifico-tecnologico, individuando le competenze necessarie all'avvio di un progetto o alla soluzione di un problema, ricercandole sia al proprio interno che all'esterno.

Analisi bibliografica e brevettale. I centri di ricerca accademici godono di un enorme patrimonio documentale e dell'accesso alle principali banche dati internazionali di pubblicazioni tecnico scientifiche, la cui consultazione efficace richiede competenze specifiche, ed è perciò spesso preclusa ai ricercatori industriali, soprattutto nelle PMI. Questa situazione produce un sotto-utilizzo del patrimonio documentale, che può essere superato attraverso collaborazioni tra l'accademia ed i privati.

Analisi chimico-fisiche. Talune problematiche industriali richiedono l'effettuazione di misure chimico-fisiche secondo norme o procedure non standard. I laboratori di ricerca accademici possono svolgere efficacemente ed a costi contenuti misure per conto terzi, soprattutto quando si tratti di analisi non di routine o che richiedano strumentazioni complesse. Tipiche attività di questo tipo sono le campagne di prove su materiali o processi, i piccoli impianti pilota, la preparazione e l'analisi sistematica di lotti di sostanze e materiali.

Progetti di ricerca. La tipologia di collaborazione di più ampio respiro è costituita da un vero e proprio progetto di ricerca, che vede la partecipazione congiunta dei tecnici dell'industria e dei ricercatori ad un progetto innovativo. La ricerca opera su tecnologie non ancora mature per il mercato, ma che potrebbero diventarlo a fronte di significativi miglioramenti tecnici o economici. I progetti di ricerca più ambiziosi e dal ritorno commerciale più incerto richiedono investimenti ingenti, ma possono spesso godere di finanziamenti pubblici. In questo caso, il ruolo del NISLabVCO sarà quello di coordinare l'accesso di un gruppo di ricerca misto industriale ed accademico alle risorse messe a disposizione da bandi di finanziamento pubblici.



giorni di energia
all'idrogeno
HY PARK
hydrogen
energy days



Università degli Studi di Torino

IL CONTRIBUTO DEL NIS ALLA VALUTAZIONE NAZIONALE DELLA RICERCA

EFFETTUATA DAL CIVR di Ugo Finardi

Il Comitato di Indirizzo per la Valutazione della Ricerca (CIVR) è un organismo ministeriale fondato nel 1998 a cui è affidato il compito fondamentale di promuovere l'attività di valutazione della ricerca attraverso il sostegno alla qualità ed alla migliore utilizzazione scientifica della ricerca nazionale. La prima campagna nazionale di valutazione dei prodotti della ricerca italiana ha riguardato il biennio 2001-2003. Pertanto il Centro di Eccellenza NIS non rientra tra le istituzioni esaminate. Tuttavia, i contributi inviati alla valutazione CIVR dagli afferenti NIS negli anni 2001-2003 possono fornire una misura della qualità della ricerca prodotta dai nostri laboratori in quel lasso di tempo. Il metodo di valutazione, prevede che ciascun Ateneo selezioni ed invii per la valutazione un numero di prodotti eccellenti, proporzionale alla consistenza numerica del corpo dei ricercatori. Per quanto riguarda l'Università di Torino due quinti dei lavori presentati nel campo delle Scienze Chimiche ed addirittura i tre quarti di quelli nell'Area Speciale Nanoscienze e Nanomateriali hanno visto afferenti al Centro di Eccellenza tra i loro autori. Anche i biologi afferenti al centro, che peraltro fanno parte di un'area (Area5) molto ampia, in cui si ritrovano non solo biologi ma anche medici, hanno visto un loro lavoro inserito tra quelli presentati al CIVR. Anche gli afferenti in forza all'Università del Piemonte Orientale hanno dato – nonostante il loro numero esiguo – un contributo significativo alla valutazione di Ateneo, con un quarto dei prodotti presentati nell'Area 3.

Un altro dato importante da portare a testimone del buon livello della ricerca all'interno del NIS è anche quello relativo ai lavori presentati dai Consorzi Nazionali di cui fanno parte afferenti al Centro di Eccellenza. Infatti un certo numero di prodotti ha trovato posto nella valutazione di INCA (Istituto Nazionale per la Chimica dell'Ambiente) e INSTM (Istituto Nazionale per la Scienza e la Tecnologia dei Materiali). Una piccola presenza di lavori si è anche verificata nella valutazione di INFEM (Istituto Nazionale per la Fisica dei Materiali).

Particolarmente significativo è stato il risultato riportato dagli afferenti al NIS nella valutazione della produzione scientifica di INSTM nell'area delle Scienze Chimiche (costituito da 44 "unità di ricerca" facenti capo ad altrettanti atenei diffusi sul territorio nazionale). Infatti il NIS ha visto nella valutazione dell'Istituto la presenza di 13 lavori su 88 presentati, ovvero il 15 per cento, nonostante i suoi afferenti facciano parte di una sola delle 44 unità (2,3%).

Nei lavori inviati al CIVR per la valutazione di INCA (80 unità di ricerca) erano inseriti 2 lavori NIS su 51 considerati per le Scienze Chimiche ed addirittura 2 su 4 per l'area speciale relativa ai nanomateriali.

SCUOLE E CONFERENZE ORGANIZZATE DAL NIS

• **"Scienza dei Materiali: la frontiera dello sviluppo"**. Il Centro si è fatto carico dell'organizzazione dell'edizione 2004 di questa fortunata serie di conferenze, mirate alla divulgazione dell'interesse per la scienza presso i giovani. Gli oratori di quest'anno sono stati il Premio Nobel per la Chimica Sir Harold Kroto (scopritore dei fullereni), ed il Direttore del Consorzio Interuniversitario Nazionale per la Scienza e Tecnologia dei Materiali, Prof. Dante Gatteschi.

• Il giorno 20 Aprile 2004 è stato organizzato un incontro di presentazione dei laboratori del Centro alle aziende piemontesi, organizzato in collaborazione con l'Unione Industriale di Torino.

• Organizzazione del ciclo di Conferenze **"La Scienza e le scommesse del futuro"**. Il Centro è stato coorganizzatore – assieme all'Unione industriale, all'Università di Torino e alla Facoltà di Scienze M.F.N. dello stesso Ateneo – di questo ciclo di otto incontri, svoltisi in parte nell'autunno 2005 ed in parte previsti per la primavera 2006, pensato per avvicinare i giovani alla scienza, alle sue nuove scoperte ed applicazioni.

• Il centro, ancora prima della costituzione, aveva presentato il progetto della Scuola Internazionale di Dottorato: **"NANOCAT 2003, Highlights in nanoscale catalysts design and engineering"**, organizzata in collaborazione con l'Università di Lione nel settembre 2003 (<http://www.cpe.fr/nanocat-school2003/>).

• Alcuni membri del Consiglio Scientifico figurano anche tra gli organizzatori della **scuola NANOCAT 2005** (<http://www.cpe.fr/nanocat2005/>), tenutasi a Lione nel luglio 2005.

• Anche **"The Fourth International Workshop on Oxide Surfaces (IWOX-4)"** svoltosi a Torino ed Aussois nel gennaio 2005 ha avuto membri del Consiglio Scientifico del Centro tra gli organizzatori.

• Il convegno: **"UHMWPE for arthroplasty: degradation, stabilisation and crosslinking"** si è tenuto a Torino il 18 marzo 2005 presso il Museo dell'Automobile con il patrocinio del NIS

• La scuola **"MSSC2006 - Ab initio Modeling in Solid State Chemistry"** è in corso di organizzazione da parte di afferenti NIS con il contributo del Centro.

• La scuola **"Bulk Metallic Glasses"**, svolta nell'ambito del MC-RTN "Ductilisation of Bulk Metallic Glasses (BMGS) by Length-scale Control in BMG Composites and Applications" è in corso di organizzazione da parte di afferenti NIS con il contributo del Centro.

IL CONTRIBUTO DEL NIS SCUOLE, CONFERENZE E SEMINARI

UN ANNO DI NIS COLLOQUIA

Con il secondo anno di attività del Centro di Eccellenza NIS è terminata anche la prima serie dei "NIS Colloquia", una serie di tredici incontri, ciascuno dedicato ad una tematica scientifica direttamente connessa ad una o più attività del centro.

I Colloquia sono nati con l'intento di:

- divulgare il patrimonio di conoscenze scientifiche sviluppate all'interno del NIS
- offrire un servizio di formazione multidisciplinare a livello internazionale
- stimolare la reciproca condivisione di risultati e prospettive fra i gruppi di ricerca afferenti alle due Università Piemontesi ed al Politecnico di Torino
- permettere a giovani ricercatori di presentare in maniera informale i loro risultati ad un auditorio nazionale ed internazionale (educazione alla comunicazione pubblica)
- avvicinare rappresentanti dei settori produttivi locali, con l'intento di avviare collaborazioni su specifiche tematiche con evidenti sbocchi applicativi e tecnologici
- offrire un'occasione d'incontro capace di stimolare la proposizione di progetti di ricerca comuni finanziabili da enti esterni.

La segnalazione degli eventi è stata effettuata in maniera capillare usufruendo degli indirizzari di posta elettronica degli afferenti il centro, dei rispettivi dipartimenti, consorzi associazioni varie e gruppi di lavoro relative alle diverse discipline coinvolte.

È importante notare quale sia stata la composizione della platea che ha partecipato ai tredici eventi. Infatti, oltre ad un nutrito gruppo di affiliati NIS (in particolare giovani ricercatori, studenti di dottorato e post dottorato) sono stati spesso presenti colleghi provenienti da altri atenei italiani e stranieri e esponenti dell'industria. Ai diversi colloqui infatti hanno partecipato rappresentati tanto di piccole e medie imprese del Piemonte quanto di grossi gruppi industriali sia nazionali che internazionali, attivi nei diversi campi in cui le nanoscienze e le nanotecnologie hanno importanza significativa. Queste presenze sono state sicuramente un importante segnale di consapevolezza della necessità di una sempre maggiore integrazione tra ricerca di base ed innovazione.

L'organizzazione dei Colloquia ha usufruito di un budget da parte del NIS volutamente limitato, evitando ogni spesa di iscrizione per i partecipanti e rinunciando ad ogni tipo di lussuoso materiale stampato: Il contenimento del budget è stato anche reso possibile dal fatto che alcuni oratori, tra i quali alcuni molto prestigiosi, hanno coperto parte delle loro spese di viaggio e soggiorno con fondi propri. Il fatto che molti relatori abbiano voluto partecipare a proprie spese ai Colloquia, mostra indirettamente come questi convegni abbiano raggiunto una capacità di attrazione inaspettata, (circa 100 presenze per ogni evento).

Il contenimento dei costi è stato anche reso possibile dal fatto che l'organizzazione degli eventi è stata interamente curata dagli afferenti il centro: Il centro NIS ha infatti messo a disposizione un giovane che ha curato gli aspetti logistici ed informativi;

Al termine di ciascun colloquium gli oratori hanno in genere aderito all'iniziativa di raccogliere in formato pdf tutte le presentazioni che sono poi state inviate sotto forma di CD a tutte le istituzioni che hanno preso parte al singolo evento. Per ogni colloquium è stata infine redatta una sintetica relazione che ha dato origine alla pubblicazione originale: "Il Quaderno dei NIS Colloquia".

In definitiva l'esperienza dei NIS Colloquia è stata estremamente positiva sotto tutti i punti di vista. Partita come una serie di scambi scientifici per valorizzare i giovani ricercatori locali ed al tempo stesso creare comunicazione scientifica a livello internazionale, l'iniziativa NIS Colloquia si è in breve tempo trasformata in un evento di notevole portata scientifica senza per questo perdere la sua sobrietà organizzativa.

NIS COLLOQUIA 2004 - 2005

Innovative materials for hydrogen storage and generation	5 luglio 2004
Cr sites grafted on amorphous silica: experimental and theoretical efforts joint to solve the mystery of the Phillips catalyst	22-23 ottobre 2004
Amorphous and Nanocrystalline Alloys: State of the Art and Perspectives	1 dicembre 2004
Scanning Probe Microscopy and Nanotechnology	13-14 dicembre 2004
Nanostructured polymeric systems	3 febbraio 2005
Nanostructured Oxide Surfaces	17-18 febbraio 2005
Nucleation: an interfacial phenomenon	28 febbraio 2005
Chemistry and Spectroscopy of Carbon and Carbon Surfaces	16 marzo 2005
Ab Initio Simulation of the Properties of Crystalline Surfaces and Interfaces: Progress and Prospect	19 maggio 2005
Role of surfaces and interphases in photocatalysis: a multidisciplinary approach	30-31 maggio 2005
Cells and biomolecules on nanostructured surfaces	29 giugno 2005
State of the art in zeolite catalysis	28-29 ottobre 2005
Nanostructured materials for hydrogen storage: role of surfaces and interfaces	17 novembre 2005

NIS COLLOQUIA 2006/2007

IL PROGRAMMA AGGIORNATO È DISPONIBILE ALL'INDIRIZZO www.nis.unito.it/colloquia.html

	ORGANIZZAZIONE	DATA INDICATIVA
Nanostructured Oxide Surfaces Non stoichiometric oxides: growth, properties and applications	Elio Giamello	23-24 Marzo 2006
Raman spectroscopy: a powerful technique to characterize nano-materials	Angelo Agostino, Carlo Lamberti, Marco Truccato	12 Maggio 2006
Olefin polymerization heterogeneous and homogeneous catalysts: structure-activity- selectivity relationship	Adriano Zecchina, Alessandro Damini Elena Groppo	9 Giugno 2006
Nanotechnologies and biophotonics: new opportunities for cellular and molecular imaging.	Guido Viscardi, Giuseppe Caputo	5-6 Ottobre 2006
Carbon based nanocomposites materials	Adriano Zecchina, Domenica Scarano	Novembre 2006
Solid/living-matter interaction at the nano-level: nano-particles toxicity, biocompatibility, bioactivity	Bice Fubini, Gianmarco Martra, Claudio Morterra	Dicembre 2006
Metallorganic frameworks as new materials for adsorption and catalysis	Silvia Bordiga, Gabriele Ricchiardi	Gennaio 2007
		Febbraio 2007

Cr SITES GRAFTED ON AMORPHOUS SILICA: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL EFFORTS JOINT TO SOLVE THE MYSTERY OF THE PHILLIPS CATALYST

a cura di Adriano Zecchina ed Elena Groppo

October 22nd and 23rd 2004

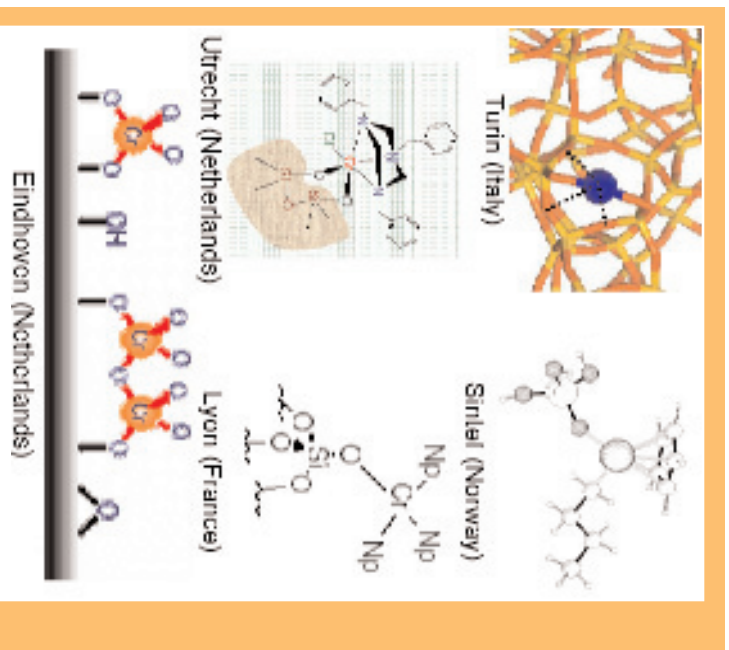
A. Zecchina	Open problems and perspectives in facing the Cr/SiO ₂ catalyst: a challenge for the future NIS Torino
D. Donadio	Simulation of rare events: the surface relaxation of amorphous silica ETH Zurich
E. Groppo	The complex forest of the Phillips catalyst: finding the path to go from the structure of the active sites to the catalytic activity NIS Torino
R. Blom	Peculiarities with the chromocene catalyst SINTEF Oslo
A. Quadrelli	Surface Organometallic chemistry of CrR ₄ (R = CH ₂ Me ₃ , CH ₂ SiMe ₃) on silica: comparison and contrast with Phillips catalysts CPE Lyon
<i>Visit to "Salone del Gusto": Italian and International foods and wines ...how to merge toxic Chromium with best food and wine</i>	
Cristina Nenu	Novel Heterogeneous Cr-based catalysts for the trimerization of ethylene Utrecht Univ.
P. C. Thüne	The Phillips catalyst on a square centimeter Eindhoven Univ.
A. Damini	Theoric studies on grafted Chromium NIS Torino
H. Freund	Single Metal Atoms on Silica and Alumina Fritz Haber Inst. Berlin

Target

Aim of the colloquium was the discussion of the more recent results on the Phillips catalyst and its related systems among all the European research groups involved in this field. The target was the identification of a common work direction and the joining of the efforts in order to solve the still open questions in the field.

Integration among the groups has been pursued also through social events: Visit to "Salone del Gusto" and trip in Alba to "truffle market"

Different Phillips type catalysts have been discussed, obtained by varying both the silica support and the Cr precursors. Starting with the industrial Cr(III)/SiO₂ sample, the Cr(III)/SiO₂/Si(001), the Cr(III)/SiO₂, CrR₄/SiO₂ (R = N_p or N_s), CrCp₂/SiO₂ and Cr(TAC)/SiO₂ systems have been considered, some of which are active only in the presence of a cocatalyst. Different data in the field of characterization (dealing with different techniques, such as IR, Raman, DRS UV-Vis, XANES-EXAFS, XPS, SIMS, EPR, etc.) and of polymerization activity, very often not so easy to be compared among each other, have been reviewed.



From all the presentations the following three open questions have been identified.

The heterogeneity of the amorphous silica leads to a high heterogeneity in the structure of the Cr sites: **is it possible to simplify the system?** The dream should be the presence of only one type of Cr site on the silica surface, so that it should be possible to relate a precise structure with the catalytic performances. Since it is impossible to correctly reproduce the structure of the amorphous silica and the strain properties of its surface by means of ab-initio calculations, in order to compare theoretical and experimental results a model support is required. In the absence of a high surface area crystalline silica, the following "model supports" have been identified: silicalite, sintered silica and SiO₂/Si(001). In all these cases, characterization techniques present a problem of sensitivity due to the low Cr content.

Is it possible to compare the characterization results and the polymerization conditions obtained in different experimental conditions on different catalysts? From the discussion it emerged that a possible solution could be the study of a battery of different samples in exactly the same conditions. This requires a complex

exchange of catalyst samples and of technical competences among different laboratories. Only when these conditions will be satisfied the results about polymerization activity of different catalysts can be compared. Among all the still open questions, this joint effort could be useful to understand the effect of the activation procedure on the catalytic performances and the effect of the adopted polymerization conditions (ethylene pressure, temperature etc.) on the TOF and on the number of the active sites. The use of different and more complex Cr ligands, if from one side may complicate the system, from the other side may help in identifying a relationship between structure and catalytic performances.

Is it possible to identify the initiation mechanism? The reduction of the complexity of the system (few types of sites, low reaction speed, etc.) should be the starting point for any mechanistic investigations. Provided this condition is satisfied as better as possible, also energetic and kinetic considerations must be taken into account.

Participants

The Colloquium was followed by about 50 persons, coming from several different groups of the University of Torino, from foreign University or Research Centers (Utrecht University, Eindhoven University, ETH Zurich, CPE Lyon) and from industries related with the polyethylene production (Polimeri Europa, Sintef, etc.). With the exception of the group of Bergen University (Norway) and of Fritz Haber Institute of Berlin (Germany), all the european research groups involved in the Phillips catalyst field have been represented by at least one participant. The participation of people coming from industry was relevant to stimulate the discussion. The contribution given by an expert in the silica simulation highlighted the complexity arising from the amorphous nature of the support

Actions

- Sharing of techniques and experimental apparatus
- Exchange of samples
- Training of young researchers (PhD and PostDoc) coming from the different laboratories

Costs: 800 Euro covered by NIS

AMORPHOUS AND NANOCRYSTALLINE ALLOYS: STATE OF THE ART AND PERSPECTIVES

a cura di Livio Battezzati

December 1st 2004

- L. Battezzati **Melt fragility and the glass transition in alloys** NIS Torino
- T. Kulik **Magnetically Soft Nanomaterials for High-Temperature Applications** NanoCentre Warsaw
- P. L. Cavallotti **Materials for perpendicular recording** Politecnico Milano
- P. Tiberto **Nanocrystalline hard magnetic alloys** IENGF Torino
- S. Enzo **Kinetics of amorphous-to-crystal transformations by quantitative powder diffraction** Università di Sassari
- M. Baricco **Bulk metallic glasses** NIS Torino
- P. Riello **Applications of low angle scattering** Università di Venezia
- G. Maizza **Ultrafast sintering of nanostructured powders** Politecnico Torino

Target

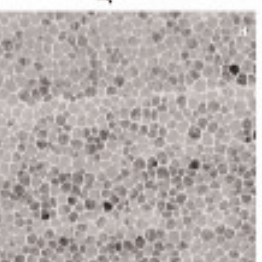
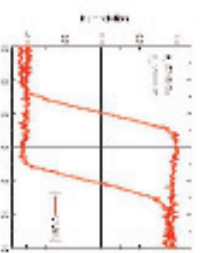
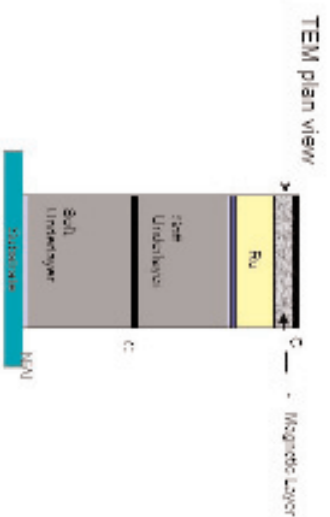
Aim of the colloquium was to discuss the state of the art and future perspectives in the production and properties of amorphous and nanocrystalline alloys. The target was to review the most recent issues on quenchability of alloys and the composition ranges for easy glass formation. Properties of interest were magnetic, mostly for nanocrystalline alloys obtained from amorphous precursors and electrodeposition, and mechanical for bulk metallic glasses.

Various types of bulk metallic glasses (BMG) were discussed. Examples of composition are given below:

- Zr-based : $Zr_{52.5}Ti_5Cu_{17.9}Ni_{14.6}Al_{10}$
- Fe-based: $Fe_{61}Co_7Zr_{10}Mo_5W_2B_{15}$
- Mg-based: $Mg_{60}Cu_{30}Y_{10}$
- Nd-based: $Nd_{70}Fe_{20}Al_{10}$

with emphasis on their superior mechanical properties such as high elastic limit and high strength. Their structural and mechanical characterization was described (techniques of interest are: nanoindentation, hardness and compression tests, XRD including the use of large scale facilities, HRTEM etc.).

Perpendicular Media - Challenges



- Need thinner break layer from SUL to Mag layer
- Better SNR
- Smoother for better tribology

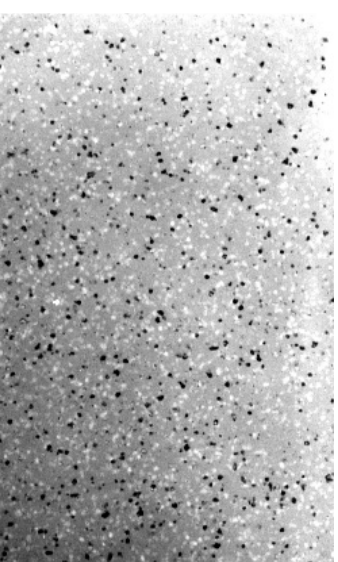


The main open issue appears to be the need for ductilisation of the glass which may be achieved by producing composites.

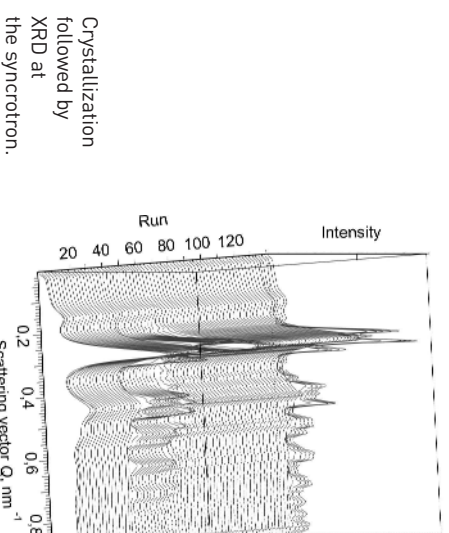
The magnetic properties of nanocrystalline alloys were dealt with at length. One of the major future breakthrough could come from the development of wet chemistry techniques for deposition of active layers for perpendicular recording devices.

Applications of fine grained materials in the field of both soft and hard magnets were covered. For hard Nd-Fe-Al alloys, there is challenge in producing a uniform glassy phase which can then be devitrified to fine crystals-single domain. Controlled devitrification is already achieved in some soft magnetic alloys. Here the advancement appears the optimization of the multicomponent materials in term of composition and thermal treatment.

The formation of BMG's needs fine control of the purity of the material to avoid the nucleation of crystals and the development of suitable casting technologies.



Magnetic nanocrystals in a glassy matrix



Crystallization followed by XRD at the synchrotron.

Fundamental issues are still open in order to define the glass forming ability of melts. These appear to behave as strong liquids as opposed to fragile non-glass formers. The kinetic and thermodynamic parameters used to define such property have been reviewed.

Participants

The Colloquium was followed by about 40 people coming from the Universities of Torino, Venezia and Sassari, the Istituto Nazionale Galileo Ferraris di Torino, and from the Politecnico of Torino and Milano. As a foreign guest, the Director of the Nano Centre of Excellence in the Technical University of Warsaw was invited. A few participants came from industries interested in the exploitation of bulk metallic glasses in electromagnetic devices and in nanostructured

Actions

- Discussion on future EU proposal.
- Training of young researchers (PhD and PostDoc) coming from the different laboratories.

Costs: about 1000 Euro covered by NIS

SCANNING PROBE MICROSCOPY AND NANOTECHNOLOGY

a cura di Claudio Manfredotti e Domenica Scarano

December 13rd - 14th 2004

<p>Claudio Manfredotti, NIS Torino Introduction</p> <p>A. Schlüger Measuring the force of individual surface ions University College London</p> <p>F. Marchi Atomic Force Microscopy and related techniques: new ways and tools to explore the nanoworld University of Grenoble, UJF-LEPES/CNRS</p> <p>P. Samori Scanning probe microscopies beyond imaging ISOE - CNR Bologna</p> <p>S. Bertarione Imaging the surface morphology on nanostructured materials by atomic force microscopy NIS Torino</p> <p>U. Valbusa The nanostructure zoo Università di Genova</p> <p>G. Mori Chemical and transport properties of nanostructures fabricated by local anodic oxidation INFN - TASC Trieste</p> <p>C. Manfredotti Nanofunctionalization of diamond surfaces by local anodic oxidation NIS Torino</p> <p>P. Pingue The Nanoworker: a user-friendly approach to SPM-based nanolithography and nanomanipulation NEST - INFN Pisa</p> <p>T. Muehl STM-based nanolithography of diamond-like carbon films IFW Dresden</p>	<p>University College London</p> <p>University of Grenoble, UJF-LEPES/CNRS</p> <p>CNR Bologna</p> <p>Università di Genova</p> <p>INFN - TASC Trieste</p> <p>NIS Torino</p> <p>NEST - INFN Pisa</p> <p>IFW Dresden</p>
--	---

Target

Aim of the colloquium was to share recent results and developments in the field of SPM microscopies, mainly atomic force microscopy and related techniques, among some European groups involved in this field. In the first part of the colloquium the use of SPM techniques as tools for the characterisation of materials was highlighted, whereas in the second part the most recent applications in the field of nanotechnology were reviewed.

The colloquium was opened with a lecture, devoted to the discussion of the mechanism of the image formation, in terms of tip-surface interactions, their measurement by dynamic force microscopy in comparison with theoretical models. This approach allowed to provide information about the surface-probe tip system and the physical changes occurring during the scanning process.

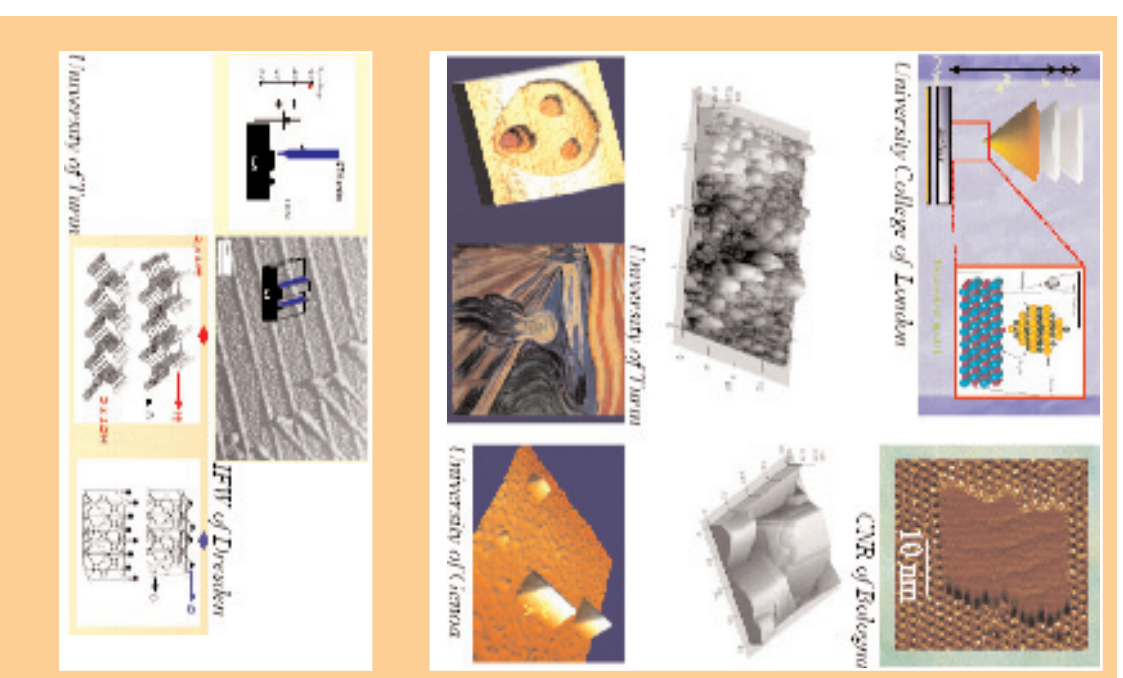
As far as the morphology of a wide class of materials is concerned, AFM has been shown to have a relevant role in identifying on the surfaces the presence of aggregates, defects, such as steps, kinks or even to define the lattice periodicity of well ordered crystals systems. Within this field, the surface morphology of many polycrystalline materials has been imaged and compared with spectroscopic data, in order to correlate phenomena occurring at atomic level with the real structure of the surfaces. Then electrical modes-based AFM techniques were widely discussed with particular attention to Electric Force

Microscopy (EFM), Spreading Resistance Microscopy (SSRM), Scanning Capacitance Microscopy (SCM) and Kelvin mode. Their application to the study of electrical properties of semiconductor nanostructures, together with the manipulation-detection of single charges have been presented. Moving then to the use of SPMs on soft materials, particular emphasis was given to the study of the mechanical properties of isolated polymer chains as well as to the monitoring of dynamic processes occurring in polydisperse molecular systems physisorbed at solid-liquid or solid-gas interfaces. Effects such as the perturbation of the electronic states of adlayers and the occurrence of chemical reaction were also reviewed.

In the second part of the colloquium the production of nanostructures by ion erosion and molecular beam epitaxy for many materials, ranging from semiconductors to metals, from glasses to ionic crystals, was at first discussed, by highlighting the elementary processes on which their formation is based and their potential applications in nanotechnology. The discussion has then moved to the description of the local anodic oxidation (LAO) technique, as an effective tool for patterning the surface of a conductive sample and then to the study of the chemical properties of the LAO obtained structures.

Particular attention was focussed on the description of quantum point contacts on GaAs/AlGaAs and then on the recent results concerning the nanofunctionalization of diamond hydrogenated surfaces by LAO, together with the analysis of the effect of the different parameters involved in the process. Within this technique, a further contribution dealt with the investigation of nanoscale processes occurring during local graphitisation of diamond-like carbon thin films. A new SPM

system, called Nanoworker, allowing to perform nanolithography and monitoring the whole process in real time, as well as its use as tool for lithography, manipulation and mapping on nanometer scale has been presented. In addition its ability to perform dynamic ploughing and spatially-resolved LAO on semiconductor and metallic substrates, together with dip-pen nanolithography (DPN) and carbon nanotubes manipulation has been described.



UN ANNO DI NIS COLLOQUIA

Participants

The Colloquium was followed by about 40 people, coming from foreign and Italian Universities or Research Centers: University College of London, UJF-LEPES/CNRS of Grenoble, IFW of Dresden, Universities of Torino, Bologna, Genova, Trieste, Istituto Nazionale Galileo Ferraris, Italian National Research Council (CNR) and Politecnico di Torino.

Actions

- Sharing of fundamental knowledge and practical problems as a starting point for future collaborations.
- Training of young researchers (PhD and Post Doc) coming from the different laboratories.

Costs: about 700 Euro covered by NIS

SISTEMI POLIMERICI NANOSTRUTTURATI

a cura di Oscar Chiantore

3 Febbraio 2005

Oscar Chiantore, NIS Torino **Introduzione**
V. Castelvetro **Sintesi colloidali e interfacciali per la generazione di materiali ibridi e funzionali a morfologia nanostrutturata**
Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa
Dinamica e stabilità di superfici in film polimerici organici e ibridi
NIS, Università di Torino
D. Scalalone **Funzionalizzazione di nanotubi di carbonio per nanocompositi a matrice polimerica** Università di Perugia
J. M. Kenny **Copolimeri a blocchi per la fabbricazione di materiali nanostrutturati**
NIS, Università di Torino
M. Lazzari **Preparazioni e proprietà ottiche di sistemi nanostrutturati cromoforici dispersi in matrici polimeriche**
A. Pucci Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa

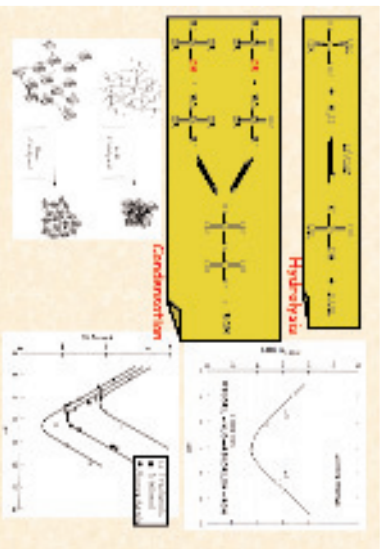
Target

Aim of the colloquium was to discuss recent developments and future perspectives in the production and properties of nanostructured polymer materials for functional applications.

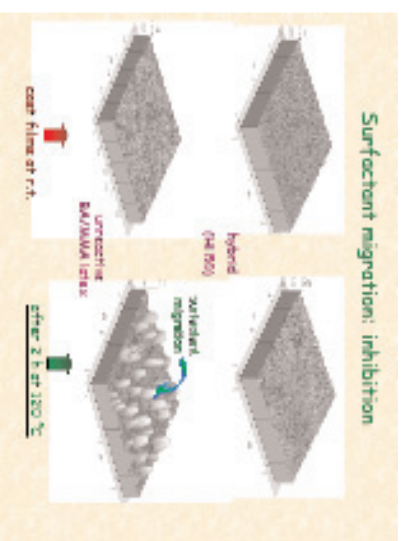
The target was to highlight joint cooperative efforts for synthesis, control and characterization of macromolecular structures capable of displaying tunable surface, optical and chemical properties.

Polymer systems typically show nano-structuration at the molecular and supra-molecular level, with different possibilities of molecular architecture, morphological organization and distribution of chemical functionalities. This feature brings to a variety of situations from **self-assembling** and **self-organizing** materials, to self-adaptive, **tunable hydrophobic** – **hydrophilic surfaces**, to optical and electro-optical responsive films and nanocomposites.

Colloidal and interfacial methods for synthesis of **organic-inorganic hybrid nanoparticles** with controlled morphology and stability were described. The interest is not only for the characteristics of the materials, but also for the environmental advantages and biocompatibility of the water-based polymer systems.



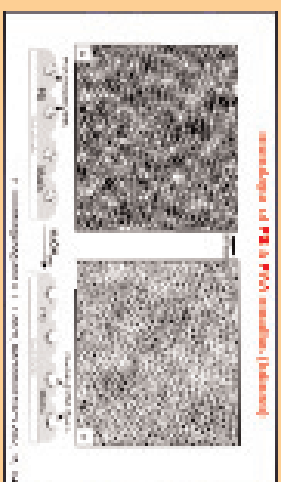
The hybrid polymer films can form distinct morphologies which remain even under severe ageing conditions. In addition to maintaining the **nanoparticle shapes** and **surface morphology**, it has been shown that complete inhibition of surfactant migration may be achieved.



Block copolymers (BC) are a particular useful tool for fabrication of nanomaterials because of their intrinsic dimensions, ease of processing and peculiar mesophase separation which give self-assembling both in solution and in bulk. Recently developed techniques of controlled radical (living) polymerization allow for the obtainment of well-defined architectures where a wide range of chemical functionalities may be incorporated.

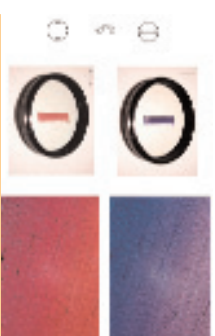
The nanostructured materials are obtained by direct application of self-assembled BCs or after selective chemical isolation (degradation, dissolution, pyrolysis, etc.) of one or more blocks. Alternatively, films obtained from BCs

are used as **templates** for **fabrication** of **nanoreactors** and **nanomaterials** (nanowires, nanotubes, nanoposts, nanopores).



Nanostructured carbons and Carbon nanotubes are also produced from BC templates, and the issues related with functionalisation of carbon structures have been covered.

Photoresponsive nanoparticles dispersed in oriented polymer films have been discussed, with their potential practical applications as displays, optical coatings, special inks, smart packaging.



Other **applications** of the nanostructured polymer systems are: functional coatings (self-cleaning, ultra-hydrophobic), catalysis, photoelectronics, solar cells, biosensors, bioencapsulation.

Participants

The Colloquium was followed by more than 40 people from different groups of the Universities and the Politechnics of Torino and Milano. Participants came also from industries interested in production and applications of polymer films, special coatings and packaging.

Actions

- Discussion on collaborative research projects and planning of future interactions.
- Training of young researchers (PhD and PostDoc) coming from the different laboratories.

Costs: 50 Euro covered by NIS

NANOSTRUCTURED OXIDE SURFACES

a cura di Elio Giamello

February 17th-18th 2005

Elio Giamello, Università di Torino e NIS Introduzione ai lavori

G. Pacchioni **Charging of metal atoms deposited on MgO, SiO₂, and TiO₂ surfaces and thin films: mechanisms and consequences**

Dipartimento di Scienza dei Materiali, Milano Bicocca

P. Ugliengo **Role of calcium hydroxyapatite in bioglasses: ab-initio characterization of its surface properties**

Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Synthesis and surface characterization of ZnO-based materials: from single crystals to microporous nanostructures

Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Hydration of oxide surfaces. A case study: modulation of MgO surface reactivity

Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Interactions of ns1 atoms with the surface of ionic oxides

Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Ossidi supportati su ossido: uso delle vibrazioni fondamentali e di sovratono per la determinazione della molecolarità

Dipartimento di Ingegneria Chimica, Università di Genova

Study of new gas sensor materials obtained from Pt/Zn/Al layered double hydroxides

Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Adsorbimento di idrogeno alla superficie di ossidi nanostrutturati

Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Preparation and structure of oxide nanostructures on metal single crystals

Dipartimento di Chimica, Università di Padova

HREELS, XPS and molecular beam studies of the oxidation of stepped metal surfaces.

INEM-CNR Sez. di Genova and INFN, Dip. di Fisica, Univ. di Genova

Caratterizzazione morfologico-strutturale di sistemi a base di ZrO₂ di potenziale impiego in ambito catalitico

Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Micro-nano strutturazione di sistemi metallo-ossido

INFN - National Research Center on nanoStructures and bioSystems at

Struttura e reattività di sub-monolayer di ossidi supportati su metalli

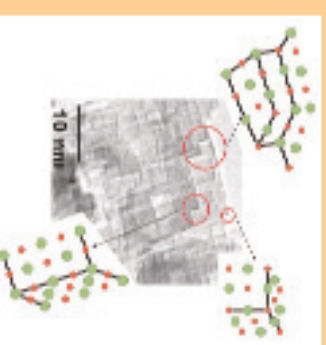
Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Nichel e ossido di nichel su Ag (1100)

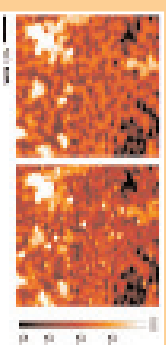
Dip. di Scienze e Tecnologie Chimiche e dei Biosistemi, Univ. di Siena

Target

Aim of the colloquium was to bring together Italian scientists working in the field of the surface properties of metal oxides. This area is characterized by the strong interaction between experimentalists and theoreticians as, owing to the recent tremendous increases of the computational capabilities, the results of surface modeling are nowadays fruitfully comparable with the experiments. Simultaneously the Colloquium aimed to compare the approaches and the results of experimentalists working on single crystal faces or on ultrathin oxide layers epitaxially grown on a support (Surface Science) with those of the classic surface chemistry performed on polycrystalline systems. Also in this case an efficient dialog between the two communities is now possible as the surface chemistry and spectroscopy of nanostructured oxide can often reach a detail of description comparable to that of surface science



Polycrystalline MgO. TEM image by G. Spoto (Torino)



H2O on MgO(1100) on Ag(1100). Altieri, Valeri et al. Modena

world of Italian surface science were presented by Gaetano Granozzi, (Padova, new oxidic phases grown on metal single crystal), Mario Rocca (Genova, oxidation of stepped silver surfaces), Sergio Valeri (Modena, nanotechnological applications at the metal-oxide interface) and Andrea Atrei (Siena, thin nickel oxide films).

The world of polycrystalline oxides was represented essentially by the groups acting in Torino in the context of NIS except for the lecture given by Guido Busca (Genova) on the vibrational analysis of oxides supported on oxides. Among the Torino's contributions the talk of Mario Chiesa described the interaction between alkali metal atom and the surface of ionic oxides as seen by EPR spectroscopy,

introducing a possible way to rationalize the metal support interaction. The theoretical chemistry groups in Torino were represented by Piero Ugliengo (modelling of hydroxyapatite in bioglasses) and Annamaria Ferrari. Her contribution on oxide submonolayers on metals was strictly connected to the surface science experimental activity in Padova and Modena.

Finally a number of experimental contributions came from NIS people on various subjects including nanostructured zinc oxide (Domenica Scaranò), surface hydration of ionic oxides (Gianmarco Martrai), surface properties of zirconium dioxide (Giuseppina Cerrato), new oxide based sensor materials (Federica Prinetto) and potentiality of oxide systems in the storage of molecular hydrogen (Donato Cocina).

Participants

The Colloquium was followed by nearly 100 persons, coming from various groups of the University of Torino, from other Italian Universities (Milano, Milano Politecnico, Piemonte Orientale, Ferrara, Siena, Padova, Genova) and from various public research institution (CNR) and private companies

Actions

- Discussions on possible joint project including EC projects.

Costs: 400 Euro covered by NIS

Outstanding contributions coming from the

NUCLEATION: AN INTERFACIAL PHENOMENON

a cura di Livio Battezzati

February 28th, 2005

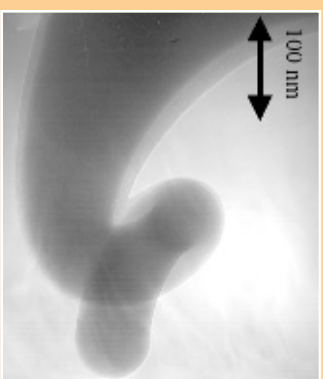
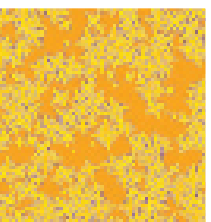
Livio Battezzati	NIS Torino, Introduction: nucleation fundamentals and open points
E. Johnson	Properties of nanoscale solid and liquid lead inclusions in aluminium as seen by TEM Nano Science Center, University of Copenhagen
A. Dupasquier	Positron annihilation spectroscopy of clustering in Al alloys Politecnico Milano
G. C. Alfonso	Theory and practice of crystal nucleation in polymeric materials Università Genova
L. Costa	Fracture of climbing ropes: a case study on polymer crystallisation NIS Torino
A. Passerone	Interfacial energies and wettability CNR Genova
P. Rizzi	Nucleation in amorphous alloys NIS Torino
M. Manzoli	Nanosized gold particles: morphology and properties NIS Torino
M. Ferraris	Nucleation and growth of metal nanoclusters in silica glass for photonic applications Politecnico Torino

Target

Nucleation is a central issue in materials science. It has implications in the production of fine particles as well as bulk materials, one of the key examples being solidification. Aim of the colloquium was to present up-to-date reviews on aspects of nucleation in various materials. It was also aimed at providing examples of advanced characterization techniques for the study of early stages of crystal formation from various matrices.

The topic is a long-standing one: Farhenheit observed undercooling of pure water and Roberts-Austen of various metals and alloys. Nowadays, with phase field models phenomena such as dendrite growth are convincingly described. However, **the activation barriers to crystal formation** is still an open point to be tackled in every single new material.

The subject was treated from the fundamentals: the **thermodynamics of cluster formation** as well as of **wetting** and the **kinetics of atomic attachment**. The latest advancements concern the derivation of driving forces from computer optimisation of phase diagrams and atomistic simulation of clustering. **Interfacial energies**, however, remain a difficult task

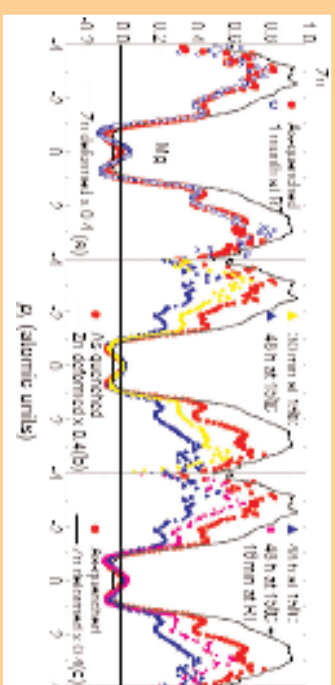
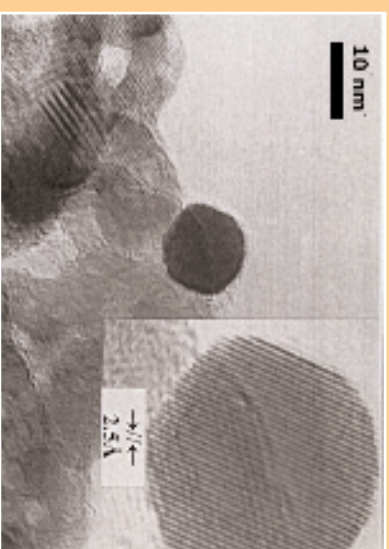


Crystal free glass filament after tensile test

Particles of nanometer size embedded in a crystal matrix can take up peculiar shapes and perform motion along crystal defects: phenomena which are not explained yet.

The **formation of crystals in polymers** must account not only for chemical aspects but also for mechanical energy input including the rate of application of stress. This has relevance for various applications of plastics. Quite surprisingly, mechanical stresses can also influence nucleation in metallic glasses of some compositions where the **propagation of shear bands locally enhances atomic mobility**.

Nucleation is paramount for the production of fine grained catalysts. The **number and size of metal particles** supported by an oxide will depend markedly on the chemical nature of the substrate itself affecting the **catalytic activity** of the metal. Analogously, **metal nanoparticles** can be grown to the desired extent **in a glass** and the material be used as a non-linear electro-optical device, to generate second



Ageing of AlZnMg

harmonic wavelengths externally controlled by an electric field.

Atomic clustering may be difficult to spot in the bulk of metals. Advancements in techniques such as positron annihilation help in analyzing the **local chemistry around defective sites** and its evolution in time.

Participants

The Colloquium was followed by about 40 people, coming from the Universities of Torino and Genova, the IENI-CNR of Genova, and from the Politecnics of Torino and Milano. As a foreign guest, a member of the Nano Science Centre in the University of Copenhagen was invited. Participants came also from industries interested in the production of fine particles, automotive materials and nanostructured steel.

Actions

- Discussion on collaborative research projects.
- Training of young researchers (PhD and PostDoc) coming from the different laboratories.

Costs: about 600 Euro covered by NIS

CHEMISTRY AND SPECTROSCOPY OF CARBON AND CARBON SURFACES

a cura di Adriano Zecchina e Domenica Scarano

March 16th 2005

G.Zerbi	Lo spettro vibrazionale come 'probe' della chimica e fisica dei materiali carboniosi amorfi	Politecnico Milano
L.Costa	Formazione di carboni da polimeri polivinilici	NIS Torino
F.Zaglia	Applicazioni della fibra di Carbonio per particolari destinati a carrozzerie di autovetture	Sparco S.p.A. Leini(To)
A.Tagliaferro	Ruolo dell'azoto nel determinare le proprietà dei film nanostrutturati di carbonio amorfo	Politecnico Torino
B.Bonelli	Sintesi e caratterizzazione di carboni nanostrutturati:breve riepilogo delle attività in corso al Politecnico di Torino	Politecnico Torino
L.Mezzo	Dalla grafite ai nanotubi: evoluzione dei tessuti a base di filati ad alto modulo per la produzione di materiali compositi strutturali	Ozella-FTS S.Maurizio (To)
F.Cesano	Compositi a base carbonio: sintesi, caratterizzazione spettroscopica e morfologico-strutturale	NIS Torino

Target

Aim of the colloquium was to highlight the recent results concerning the study of carbon and carbon surfaces and its related systems, among local research and industry groups involved in this field. The target was to define the peculiar level of knowledge and experience of each group in order to start a joint work in the field.

Starting from a general introduction concerning the spectroscopic characterizations of amorphous carbon-based materials, several kinds of nanostructured carbons: nanotubes and replicas of mesoporous silicas or zeolites, until to composite systems have been discussed and compared to "classical" amorphous carbons, with the aim of finding materials for feasible applications in the fields of catalysis, gas storage (H₂, CH₄), optics, etc. An exhaustive discussion on the application of Raman spectroscopy to the study of condensed phase systems was also given, together with a variety of other characterization techniques, such as FTIR, FTIR-DR, UV-vis, EPR, photoluminescence, XRD, SEM, TEM, AFM and of chemisorption activity. In more detail an accurate investigation on pure and hydrogen-doped amorphous carbons has been presented, with particular emphasis to the role of nitrogen on the properties of the local structure (porous or compact) of the obtained materials. As far as the production of crystalline and nanostructured carbons, new synthesis procedures have been discussed by

the different groups, whose relevant results will be briefly summarized in the following.

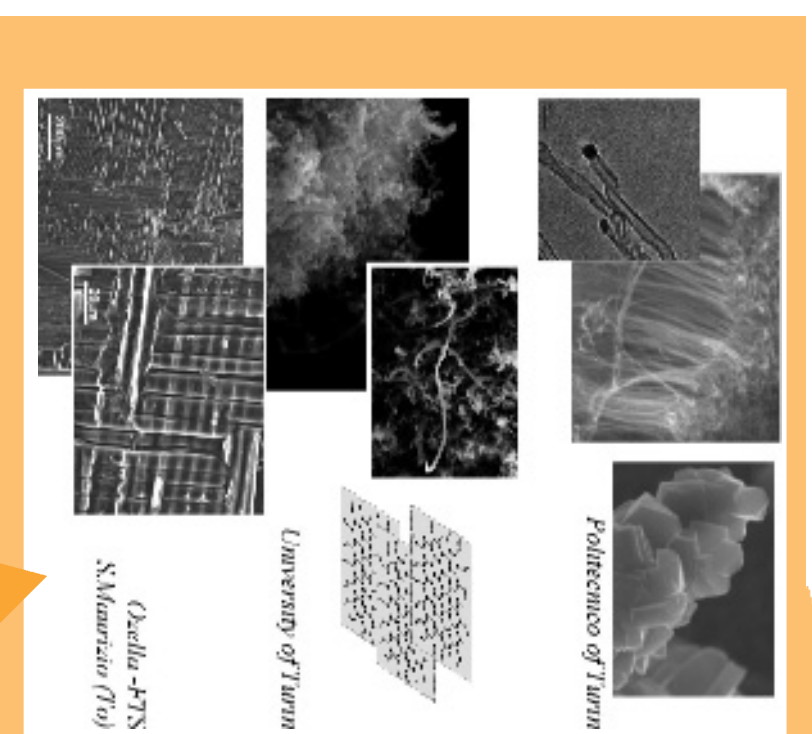
Carbons coming from the more traditional thermal-oxidative degradation processes of polyvinyl precursors are studied for the first time by means of transmission-reflection micro FTIR technique, which allows the study of the structure of dark insoluble materials. It is known that the char formation, stable at high temperatures, is one of the possible strategies of fire retardancy.

On an other side, carbons characterized by a tailored porous structure have been obtained by a casting procedure, starting from template systems such as SBA-15 silica and commercial Na-Y zeolite, following literature recipes. As far as the carbon replicas are concerned, XRD spectra showed that the hexagonal structure of the parent silica is maintained with SBA-15 replicas and that ordered carbon replicas have been obtained also from Na-Y zeolite. On account of their high porosity and low specific weight, they could be promising media for hydrogen storage, a challenge of materials science.

Furthermore the discovery of fullerene and carbon nanotubes has shown the possibility to obtain ordered and non-conventional carbon structures. On these bases catalytically grown nanofilaments on conventional carbon fibres have been described. A "porous nanotissue" which interconnects the original fibres is

initially generated, then at later stages a more compact C/C composite material is formed, which shows a high graphitization degree. The obtained results demonstrate that the catalytic method affords an effective and low temperature way to synthesize carbon-carbon composites ranging from microporous to more compact materials, where the role of metal particles in promoting the formation of a dense carbon matrix is highlighted.

The acquired knowledge on these materials allowed to become more active interlocutors of the industry involved in the production of the light weight composites for high-performance materials, such as advanced tissues. However it is noteworthy that the synthesis of new ordered structures represents a challenge of material science.



Participants

The Colloquium was followed by about 50 persons, coming from several different groups of the University of Torino, from the Politecnico di Torino and Milano and from industries related with the production of carbon-based materials (Ozella-FTS Saiag group). With the exception of the Sparco industry, most of the relevant research groups (from university and industry) involved in the carbon field attended the meeting, giving a significant contribution to the discussion on this frontier topic.

Actions

- Sharing of fundamental knowledge and practical problems. Placing techniques and experimental apparatus at industry's disposal. Training of young researchers within PhD and PostDoc courses.

Costs: 300 Euro covered by NIS

AB INITIO SIMULATION OF THE PROPERTIES OF CRYSTALLINE SURFACES AND INTERFACES: PROGRESS AND PROSPECTS

a cura di Cesare Pisani

May 19th-20th, 2005

Adriano Zecchina Direttore NIS, Università di Torino	Introduction
M. Parrinello	Progress and challenges in ab-initio molecular dynamics
C. Pisani	Department of Chemistry and Applied Biosciences, ETH Zürich (CH) Post Hartree-Fock local-correlation methods for crystals
L. Maschio	Dipartimento di Chimica IFM, Università di Torino Implementing a local-correlation method for crystals: critical aspects
R. Resta	Dipartimento di Chimica IFM, Università di Torino Electric properties of solids and surfaces
M. Rérat	Dipartimento di Fisica Teorica, Università di Trieste Physorption of atoms and molecules on crystal surfaces
R. Dovezi M. Catti	Laboratoire de Chimie Structurale, Université de Pau (FR) Vibrations in Solids and at surfaces Dip. di Chimica IFM, Università di Torino
B. Civalieri	Ab initio approaches to thermodynamics and kinetics in solid phases Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università di Milano Bicocca
S. Tosoni	Vibrations in crystalline urea: the role of the Hamiltonian Dipartimento di Chimica IFM, Università di Torino
N. Harrison	The calculated vibrational spectrum of a layered compound: kaolinite Dipartimento di Chimica IFM, Università di Torino
J. Scaranto	Complex surfaces: Predicting stoichiometry, structure and properties Imperial College, London (UK)
A. Damini	An ab initio study on the adsorption of Vinyl Fluoride on Rutile(110) Dipartimento di Chimica Fisica, Università di Venezia
M. Cossi	Chromium(III) catalytic centres on silica surface: cluster or periodic approach? Dipartimento di Chimica IFM, Università di Torino Modelling wet surfaces: a polarizable continuum model for periodic systems Dipartimento di Chimica, Università di Napoli "Federico II"

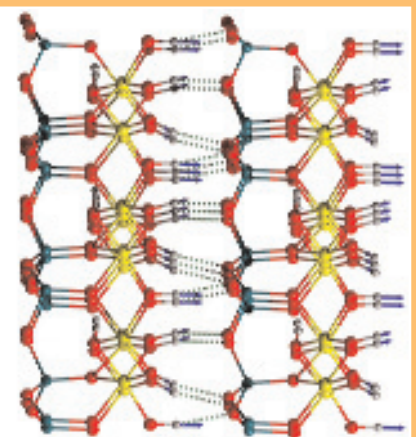
Target

The ab initio simulation of crystalline surfaces and interfaces is particularly difficult because of the low symmetry, intrinsic heterogeneity, and highly defective nature of these systems. In its two sessions, the present meeting aimed at highlighting recent progress and prospective work in the development of new software and new interpretative tools for this task. Activity taking place in this area of research in the frame of NIS was illustrated, but other lines of progress were also presented, through contributions from outstanding scientists. Most of the Abstracts are on the NIS site.

This meeting is one of the "NIS Colloquia" which are informal discussion meetings promoted periodically by our Centre of Excellence, and aimed at networking and spreading its research initiatives.

The ab initio simulation of complex chemical objects is becoming standard practice in many branches of Material Science. The case of crystalline surfaces and interfaces is a particularly difficult one because of the low symmetry and highly defective nature of

these systems. More powerful and accurate software is needed, and sometimes new interpretative tools are required in this area of research. In its two sessions, the present meeting intends to highlight recent progress and prospective work in these directions. Activity taking place in the frame of NIS was illustrated, but other lines of progress were also represented at the meeting through contributions from outstanding scientists.



The Colloquium started with an invited contribution by **Michele Parrinello**. He brightly outlined the status and perspectives of ab-initio Molecular Dynamics, and presented in particular recent ideas by himself and his research group, on how to get a rough, but well balanced description of the Born-Oppenheimer surface in comparatively few "time steps". The discussion that followed showed that, among present-day computational tools, those based on Parrinello ideas are now generally believed to be among the most promising ones in order to get thermo-chemical information on such complex processes as may occur at solid surfaces.

Cesare Pisani and **Lorenzo Maschio** provided information on the progress of a computational project, CRYSCOR. It is aimed at implementing a new code, capable of accounting for correlation effects in periodic structures, by adopting a post-HF local-correlation approach. This is important also for providing a firm reference for assessing the reliability of DFT formulations to be applied in surface-science applications. **Raffaele Resta** related about the electric properties of solids and surfaces from a fundamental and new viewpoint. His ideas may provide useful interpretative tools, especially as concerns the equilibrium structure of ionic surfaces. **Michel Rérat** showed how to calculate the dispersion coefficient of the van der Waals interaction between a molecule and a crystalline surface, from the ab-initio determination of their frequency-dependent dynamic polarizabilities. The simulation of the vibrational spectra of crystalline solids with the CRYSTAL program was the object of **Roberto Dovezi's** communication, which concluded the first session. The power and accuracy of the newly implemented facility of CRYSTAL was clearly demonstrated. On the next day, the communications by **Michele Catti, Bartolomeo Civalieri** and **Sergio Tosoni** gave further evidence of the power of the new "vibrational facility" of CRYSTAL, with reference to different applications. Catti showed how the quasi-harmonic approximation, coupled with Bose-Einstein statistics can be used for thermodynamic simulations, and the Arrhenius-like formulation of Transition State

Theory for tackling kinetic processes in crystals. Civalieri analysed critically the influence of the formulation adopted for the exchange-correlation potential in the frame of DFT on the calculated vibrational spectrum for the case of crystalline urea. Tosoni discussed the vibrational modes of the three species of OH groups existing in kaolinite: inner, inner-surface and outer surface hydroxyls; this kind of calculation is very useful for the interpretation of experimental spectroscopic data. **Nic Harrison, Jessica Scaranto** and **Alessandro Damini** discussed the determination of structural and chemical properties of complex crystalline surfaces from various viewpoints. Harrison showed how to extrapolate ground state data to obtain finite temperature thermodynamic information on surface properties. Scaranto provided an example of accurate determination of geometric, energetic and vibrational characterization of an adsorbed phase. Damini tackled the topical subject of the combined use of a cluster and a periodic approach for the solution of surface problems. Finally, **Maurizio Cossi** showed how to simulate the effect of a solvent on the properties of surfaces, by a simple extension of the Polarizable Continuum model (PCM) which has proved very useful in molecular studies. This facility is presently being implemented in CRYSTAL.

Participants

The Colloquium was followed by about 50 persons, coming from different groups of the University of Torino and from other University or Research Centers, both in Italy (Milano, Napoli, Trieste, Venezia, Modena, Bologna, PISA) and abroad (Zürich, London, Pau, Regensburg). Stimulating discussions took place during the Workshop, involving many of the participants.

Actions

- Sharing and critical comparison of different ab initio techniques
- Training of young researchers (PhD and PostDoc) coming from the different laboratories.

Costs: 800 Euro paid by NIS, 200 Euro from Gruppo di Chimica Teorica.

ROLE OF SURFACES AND INTERPHASES IN PHOTOCATALYSIS: A MULTIDISCIPLINARY APPROACH

a cura di Paola Calza, Valter Maurino e Giuseppe Spoto

30th - 31st May 2005

Ezio Pelizzetti, Rettore dell'Università di Torino	NIS Introduction
A. Zecchina, Direttore del Centro di Eccellenza NIS	New materials for photocatalytic applications
G. Centi	Dip. di Chimica Industriale ed Ingegneria dei Materiali, Università di Messina
S. Usseglio	Photoinduced transformation of organic compounds on titanosilicate materials. A) ETS4 and ETS10 structural properties
P. Calza	Dip. di Chimica IFM e NIS, Università di Torino
R.F. Howe	Photoinduced transformation of organic compounds on titanosilicate materials. B) toward a selective photocatalysis
G. Martra	Dip. di Chimica Analitica e NIS, Università di Torino
M. C. Paganini	Microporous materials as a route to nanostructured photocatalysts
N. Serpone	Engineering & Physical Sciences School, Chemistry, University of Aberdeen (Scotland)
H. Garcia	Molecular events at the surface of microcrystalline TiO₂: photo-dependent and photo-independent transformations
Y. Paz	Dip. di Chimica IFM e NIS, Università di Torino
V. Maurino	On the nature of the nitrogen paramagnetic impurities in doped titanium dioxide Dip. di Chimica IFM e NIS, Università di Torino
M. Sangermano	STARUST – Microreactors and photostimulated heterogeneous reactions occurring in galactic space – Abiogenesis of molecules
	Dip. di Chimica Organica, Università di Pavia
	Zeolite-based photocatalysts: The case of 2,4,6-triphenylpyrylium encapsulated inside large pore zeolites
	Instituto de Tecnologia Química, Universidad Politécnica de Valencia
	Towards preferential photodegradation: from “Adsorb & Shuttle” to nano-imprinting Department of Chemical Engineering and the Institute of Catalysis, Technion-Israel Institute of Technology, Haifa, Israel
	Influence of TiO₂ surface speciation on the photoproduction of active oxygen species Dip. di Chimica Analitica, Università di Torino
	Use of UV light for the preparation of nanostructured polymeric films
	Dip. di Scienza dei Materiali e Ingegneria Chimica, Politecnico di Torino

Target

The Colloquium aimed to highlight state of the art and future trends of heterogeneous photocatalysis, focusing mainly on those aspects related to surface properties and interfacial phenomena. The approach was multidisciplinary, as it was intended to bring together experts operating, often with little exchange of information, in different research fields, i.e. physicochemical characterization of solids and evaluation of the photo-activity by analytical tools. By involving local and foreign researchers, the colloquium also offered the chance to discuss the possibility to prepare a common EU research program on photocatalysis.

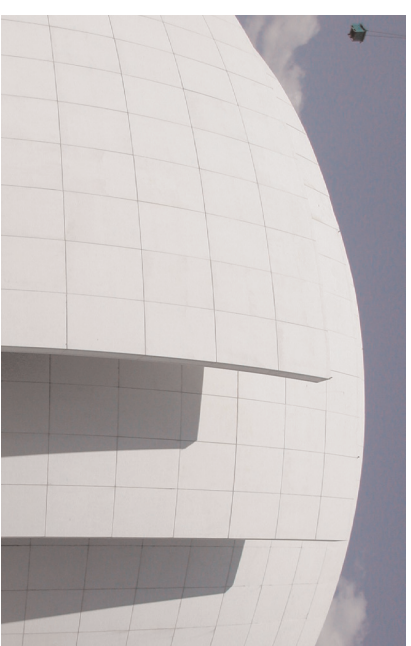
The Colloquium consisted of eleven oral presentations (distributed over two half days) which covered topics ranging from the market applications of photocatalysis, to its role in the

synthesis of life relevant molecules in the galactic space and on the primitive earth (N. Serpone).

The opening lecture (G. Centi) offered a review on principles, applications, market and S&T opportunities, and possible future developments of photocatalysis.

The “Japanese approach” was illustrated as an example of fruitful interaction between academic and market oriented research.

Materials structuring as a tool for improving the performances of already available photoactive systems and for the preparation of new photocatalysts represented the central topic of most of the other contributions.



Examples were discussed of structuring operated at the nano (R. Howe, Y. Paz, S. Usseglio and P. Calza, H. Garcia) and atomic levels (C. Paganini, V. Maurino, G. Martra).

In both cases TiO₂ still represents a reference system.

Efforts in view of atomic modifications of this material are mainly concentrated on the doping of the bulk (introduction of N impurities) and of the surface (with F, Zn, OH groups).

Examples of nano-modifications are the obtainment of exotic TiO₂ structures like nanotubes, nanowires, porous forms, etc., or the embedding of -TiOTiO- chains into nanostructured porous solids (e.g. ETS-10). Similar materials based on -VOVO- chains have been also prepared and characterized.

Participants

The Colloquium was opened by Prof. E. Pelizzetti in the capacity of Rector of the Turin University as well as of world-wide renown expert in photocatalysis. The Colloquium was attended by about 50 persons. Contributions were given by invited speakers coming from foreign (UK: R. Howe; Israel: Y. Paz; Spain: H.Garcia; Canada: N. Serpone) and national (Catania University: G. Centi; Turin University: P. Calza, G. Martra, V. Maurino, C. Paganini, S. Usseglio; Turin Politecnico: Sangermano) academic institutions. The audience was composed of academic researchers (from Turin and Milan) and by some industrial representatives (Buzzi Unicementi SpA).

Actions

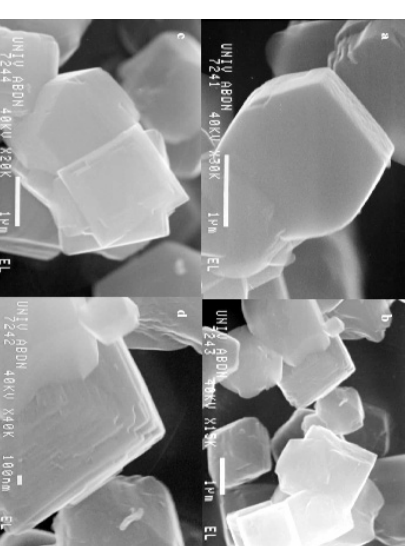
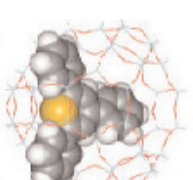
- Exchange of information and samples.
- Evaluation of the possibility to prepare and submit a common European project (STREP Actions)

Costs: 1100 Euro covered by NIS

Chiesa
“Dives in Misericordia”

Another interesting approach for the preparation of photocatalysts, still based on nano-modifications techniques, discussed during the Colloquium is the encapsulation of photoactive molecules (pyryliumderivates) or oxidic nanoclusters (TiO₂) into three-dimensional porous frameworks (zeolites and zeotypes).

Finally, the use of photocatalysis for the preparation of nano-structured polymeric or hybrid (polymeric inorganic) materials has been also reported.



SEM images of porous ETS-10 photocatalysts

CELLS AND BIOMOLECULES ON NANOSTRUCTURED SURFACES

a cura di Emilio Carbone

June 29th, 2005

Introduction: A. Zecchina NIS Torino, G. Gilardi DBA, Torino

1st part - Micro-nano devices for electrical recordings and molecules detection

E. D'Angelo Recordings of synaptic activity in brain slices using multi-electrode arrays (MEA) recordings INFN, Pavia

S. Vassanelli Cell-semiconductor interfaces for ion channel recording and single-cell genetic engineering Dept of Physiology, Padova

S. Martinoia In-vitro neurons bi-directionally connected to a robotic body: investigation of the adaptive properties and learning mechanisms of the network for robot control DIBE, Genova

E. Wanke Action potential recordings with MEAs: potentiality for investigating ion channels roles in neural networks information processing Dept of Biotechnology, Milano Bicocca

P. Ariano Cell adhesion and recordings from hydrogenated diamond surfaces NIS, Torino

F. Lehmann-Horn Voltage-sensor movement disorders Dept. of Applied Physiology, Ulm, Germany

V. Carabelli

Carbon fiber microelectrodes for detecting released biomolecules NIS, Torino

2nd part - Nanotechnologies applied to biology

L. Businaro Nanodevices for biological applications TASC, Trieste

F. Pirri Nanotechnologies for designing novel biosensors MML, Politecnico, Torino

A. Rossi Porous silicon as substrates for biomolecules IEN, Torino

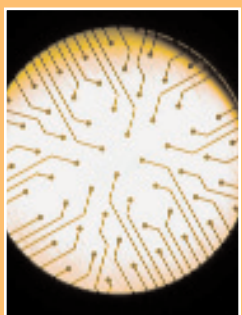
A. Pasquarelli A diamond-on-silicon device for patch-clamp measurements EDC, Ulm, Germany

E. Vittone Functionalised conductive diamond surfaces as substrates for bioelectrical recordings NIS, Torino

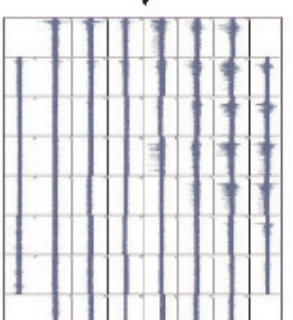
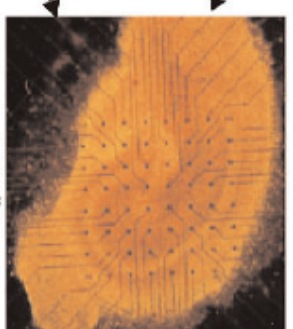
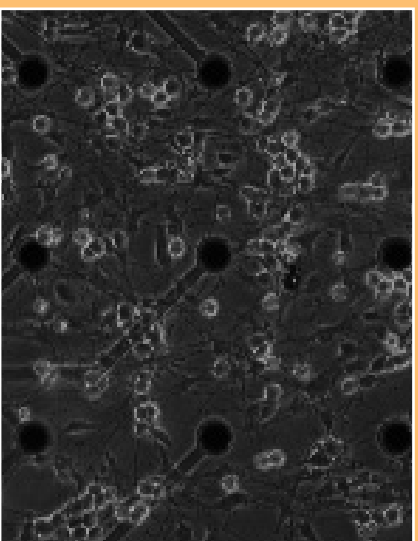
C. Barolo Fluorescent probes for cells-biomolecules and solid-state surfaces interactions NIS, Torino

Target

Aim of the Colloquium was to discuss the state of the art and future perspectives of functionalized solid-state nanodevices that can be used for inducing and recording electrical events in neurons, neuronal networks and brain slices, as well as the design and construction of multifunctional "lab-on-chips" for drug delivery, cell manipulations with optical tweezers, recording of electro-optical events and detection of released biomolecules



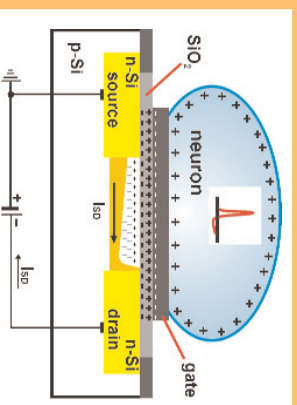
Commercially available MEAs
Peripheral neurons grown on MEAs (bottom) commercially available 60-electrode MEA (left)



Extracellular recordings from brain slices on MEAs



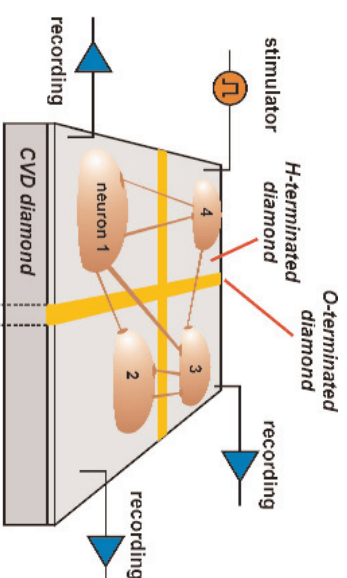
Nanostructured Si-FET chips are used to improve the signal-to-noise ratio of recorded APs. The principle is based on the capacitive voltage changes that the gate (in contact with the neuron) induces to the n-Si layer through the isolating SiO₂ film.



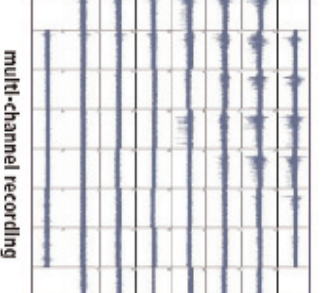
Neurons on silicon field-effect transistors (FET)

The voltage of the gate modulates the LSD current flowing through the source and drain regions producing signals proportional to the AP.

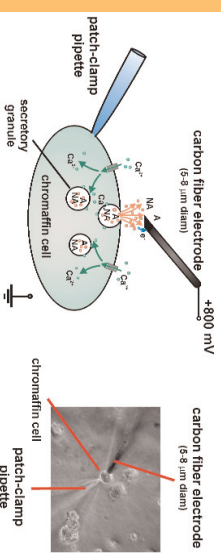
A promising approach to the detection and stimulation of neuronal signals is expected from the fast developing technology of functionalized diamond-based "lab-on-chips" (see below), which offers high biocompatibility and excellent optical transparency



Biomolecules detection with carbon-fibers

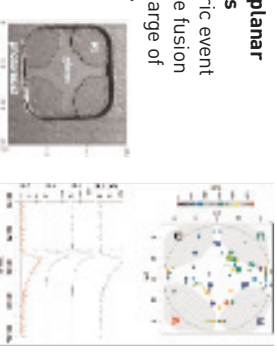


Detection of catecholamines released from chromaffin cells or peripheral neurons can be detected as amperometric spikes of 20-200 pA using carbon-fiber electrodes of micrometric dimensions (see below). Recent attempts from the group of M. Lindau to detect catecholamines rely on planar arrays of metallic micro-electrodes in contact with the secretory cell



Arrays of four Pt planar detectors on glass

Each amperometric event corresponds to the fusion and content discharge of a single secretory granule (200 nm diam.) containing



Participants

The Colloquium was followed by about 150 people, coming from the Universities of Torino, Milano, Genova, Pavia, Padova, TASC of Trieste, I.E.N. and Politecnico of Torino and two guest speakers from the University of Ulm (Germany). A few participants came from the FIAT Research Center of Torino and a number of colleagues from the NIS Center of Torino.

Actions

- Discussion on future EU proposals and joint research projects in the field on nanobiotechnology. Training of young researchers (PhD and PostDoc) of different backgrounds (biology, chemistry, physics, engineering) to discuss up-to-date topics on the application of nanotechnologies to biological problems.

Costs: about 1000 Euro covered by NIS

STATE OF THE ART IN ZEOLITE CATALYSIS

a cura di Silvia Bordiga

October 28th – 29th, 2005

Introduction
Chairperson
G. Saracco

A Zecchina, NIS-Centre of excellence
Salvatore Coluccia, NIS-Centre of Excellence and ASP
Catalytic abatement of nitrogen oxides: current trends and key challenges
Politecnico di Torino

B. Wichterlova
G. Berlier
G. Ricchiardi

SCR-NOx and NO decomposition activity of Transition metal exchanged zeolites
J. Heyrovsky Institute – Praga

Chairperson
V.B. Kazansky

The elusive structure of active sites in Fe-zeolites catalysts: recent studies and perspectives
NIS-Centre of excellence
C. Otero Areán Universitat de les Illes Balears
Intensities of IR bands of adsorbed molecules as a new spectral criterion of their chemical activation
Russian Academy of Science
A rational design for tuning the acidity of molecular sieves
Università del Piemonte Orientale – NIS-Centre of Excellence

L. Marchese
M. Selva

Highly Selective Reactions of Dimethylcarbonate in the Presence of Alkali Metal Exchanged Faujasites
Università Ca' Foscari, Venezia e INCA

Chairperson
A. Carati
R. Buzzoni

Industrial application of zeolites: role of shape selectivity
Entechnologie
Zeolites in petrochemistry: process improvements and new challenges
PolimeriEuropa

E. Garrone
C. Lamberti

Bronsted sites of moderate acidity in zeolitic and amorphous aluminosilicates
Politecnico di Torino
XAFS spectroscopy applied on zeolitic catalysts: limits and perspectives
NIS-Centre of excellence

Chairperson
G. Tabacchi

Spectroscopic properties of Ti-sites in zeolites from first principles approaches
Università dell'Insubria
Lewis/Bronsted acidity in (high silical) zeolites: a microcalorimetric and computational ab-initio study
NIS-Centre of excellence
Understanding the reaction mechanism in Zeolite catalysis - Impact on catalyst design
Universit Oslo

K. P. Lillerud
S. Bordiga

Characterization of acidity properties of zeolites Y in relation with framework stability and catalytic activities
NIS-Centre of Excellence
Photocatalytic decontamination of neurotoxic and vesicant compounds
NIS-Centre of Excellence

A. Zecchina

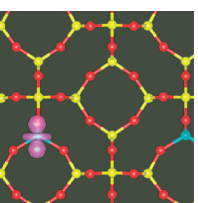
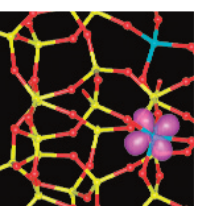
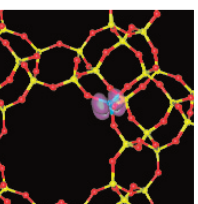
PARALLEL SESSIONS
Kick-off meeting of NATO Science for Peace programme project
1) Photocatalytic decontamination of neurotoxic and vesicant compounds
Open discussions on two hot subjects:
2) Zeolites as alternative catalysts to conventional SCR DeNOx
discussion leader G. Saracco, Politecnico di Torino
3) Acidic Zeolites in hydrocarbon transformation
discussion leader C. Otero Areán, Universitat de les Illes Balears

Target

Aim of the Colloquium was to stimulate an open discussion among people coming from public and private research centers involved in the development and use of zeolites in catalysis. Two main fields have been considered: redox catalysis devoted to NO decomposition and acidic catalysis related to petrochemistry and valorization of natural gas.

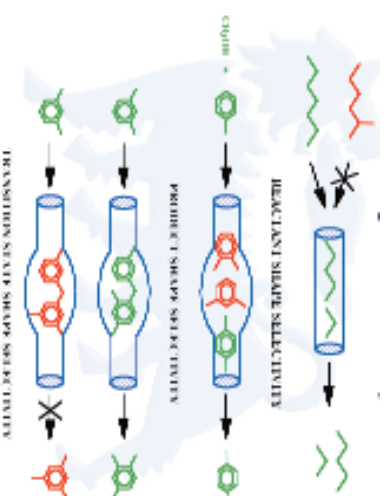
The opening lecture, given by **Guido Saracco**, gave an overview on the current trends and key challenges about the catalytic abatement of nitrogen oxides. Together with oxides, Zeolite catalysts seem to have chances of success in

the SCR of NOx with hydrocarbons, especially as far as N₂O is concerned. Regarding NO decomposition by hydrocarbons, the talk given by **Bianca Wichterlova** evidenced the relevance of Al location and consequently of cations (Cu and Co) distribution in pentasil frameworks (MFI and BEA).



In this field more and more interest is devoted to Fe-zeolites, and the elusive structure of active sites was the topic of **Gloria Berlier** talk and one of the subjects described by **Carlo Lamberiti** who gave an overview about XAFS spectroscopy applied on zeolitic catalysts. Finally, the spectroscopic properties of Ti-sites in zeolites (electronic transitions) from first principles approaches have been described by **Gloria Tabacchi**.

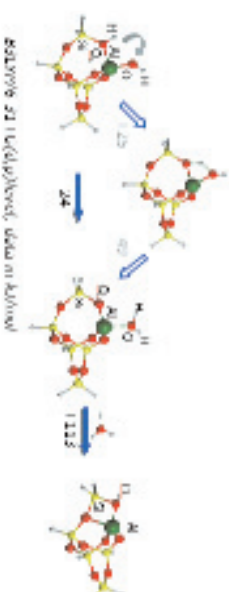
The second section, opened by **Vladimir B. Kazansky** was mainly focused on zeolitic properties related to acid catalyzed reactions. The talks covered a broad area involving both fundamental and applicative aspects with the contributions of speakers coming from industries and academy. **Angela Carati** and **Roberto Buzzoni** gave two significant overview pointing out the central role of shape selectivity in the development of novel catalytic processes for petroleum refinery and petrochemistry and underlying the need of fundamental knowledge about reactions mechanisms in order to allow the improvement of the actual process and the achievement of new challenges. It has been evidenced that laboratory results are only the first step towards the identification of a new catalyst suitable for commercialization.



The Colloquium was followed by about 80 persons, coming from several different groups of the University of Torino and Piemonte Orientale, from foreign Universities or Research Centers (Oslo University, Palma de Majorca University, ETH Zürich, Valencia University, Ottawa University, Bucarest University) and from industries related with zeolites (Polimeri Europa, Entechnologie, TOPSOE, Süd Chemie). The participation of people coming from industry was relevant to stimulate the discussion.

Participants

The need of development of new processes able to work in mild conditions and characterized by low environmental impact and reduced waste has been strongly evidenced. Conversion of natural gas to liquid hydrocarbons and the development of new catalysts for environmentally friendly fuels has been the topic of the talk given by **Karl Petter Lillerud**, while **Maurizio Selva** reported about the high performances of Na-Y zeolite for mono methylation reactions with DMC in liquid phase at T₉₀ °C. It has been shown that bifunctional primary amines react only at the amino nitrogen. Further advantages are: no need of additional solvents, no by-products, recycle of the catalyst, mild reaction conditions. Finally, some contributions have been devoted to describe the acidic properties of some very common zeolites and related materials. In this area the talks given by **Leonardo Marchese**, **Edoardo Garrone**, **Silvia Bordiga** and **Claudia Busco**, gave a broad overview about available approaches, in terms of experimental and computational techniques, to characterize the active sites in terms of number, distribution and location. It has been shown that Brønsted acidity due to the presence of framework Al³⁺ species is only one component of the large family of acid sites. Hydroxyls nests present in defects, sites present on the external surfaces of the micro crystals, Lewis sites (alkaline cations and extraframework Al³⁺ species) also contribute to the final behavior of the catalyst. Moreover it has been shown that activation and regeneration procedures strongly affect the final material. The complexity of real systems encourages the use of model compounds and to combine experimental data and computational ab-initio approaches.



Actions

- Sharing of fundamental knowledge and practical problems as a starting point for future collaborations also with industries. Placing techniques and experimental apparatus at industry's disposal
- Training of young researchers (PhD and Post Doc) coming from the different laboratories.

Costs: 1000 Euro paid by NIS • 1500 Euro contributed by ASP

NANOSTRUCTURED MATERIALS FOR HYDROGEN STORAGE: ROLE OF SURFACES AND INTERFACES

a cura di Marcello Baricco

July 5th 2004

A. Zecchina	Presentazione del Progetto MISGI
M. Baricco	Assorbimento/desorbimento di idrogeno in leghe e composti intermetallici
G. Spoto	Stoccaggio di idrogeno in forma molecolare
E. Giannelo	Interazioni idrogeno-ossidi
F. Trotta	Membrane conduttrici protoniche per celle a combustibile
S. Bertarione	Palladio altamente disperso in matrici zeolitiche, ruolo nell'adsorbimento dell'idrogeno
M. Di Chio	Assorbimento di idrogeno in composti intermetallici a base Mg
J. Vitillo	Modelli quantomeccanici per la descrizione dell'interazione dell'idrogeno molecolare
L. Regli	Proprietà di materiali ibridi organici-inorganici: i MOFs
D. Cocina	Studio spettroscopico dell'interazione di H ₂ in zeoliti

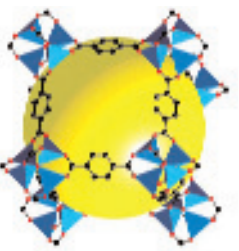
a cura di Marcello Baricco e Gabriele Ricchiardi

November 17th, 2005

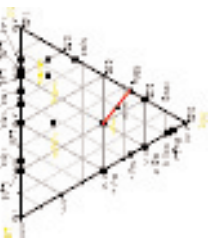
Introduction	M. Baricco – NIS-Centre of excellence, Torino
A. Züttel	Fundamentals of solid state hydrogen storage
P. De Jongh	Hydrogen storage materials: from nanoporous to nanoparticulate
R. Cantelli	Decomposition mechanisms and reversible hydrogen release in alاناتes
N. Patel	Structural characterization and hydrogen desorption from Nb-doped magnesium hydride films
Introduction	G. Ricchiardi – NIS-Centre of excellence, Torino
A. Zecchina	The role of surfaces in hydrogen storage
M. Conte	Hydrogen storage in metal hydrides for Fuel Cell Vehicles: main results of an Italian project ENEA, Centro ricerche Casaccia
G. Spoto	Probing molecular hydrogen storage with Infrared Spectroscopy
S. Bordiga	NIS Centre of excellence, Torino
P. Delzanno	State of the art about molecular hydrogen in MOFs
	NIS Centre of excellence, Torino
	Current fuel cells research programs at CRF and near term technology needs
	Centro Ricerche FIAT, Torino

Target

Aim of the colloquium was the presentation of current state-of-the-art on the hydrogen storage. Different materials have been considered, ranging from metal hydrides, mesoporous materials and complex hydrides. Either experimental and theoretical aspects of hydrogen storage have been discussed.



MOF-5



Mg-La-Ni

The first seminar of the "NIS Colloquia" Series was dedicated to Hydrogen research at NIS. The seminar, initially intended as an internal meeting for the coordination of the research activities in the different labs, obtained such a success and broad participation from other institutions, that it was indeed the stimulus to transforming the NIS Colloquia into open national and international seminars, as they now are.

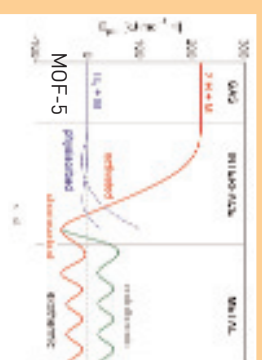
About one year later, a second seminar on hydrogen was organized, now with international breadth. Here, we report the program of both seminars, and the minutes of the recent one only.

After a short introduction given by Marcello Baricco (NIS), the first talk of the morning session was given by Andreas Züttel (University of Fribourg, CH) on "Fundamentals of solid state hydrogen storage". It was a general overview on various aspects of hydrogen storage in different classes of materials. Petra

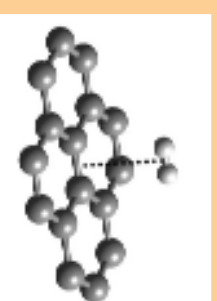
De

Jongh (University of Utrecht, NL) with a talk on "Hydrogen storage materials: from nanoporous to nanoparticulate" has discussed the critical role of nonometric particle size and microstructure on hydrogen absorption/desorption. Rosario Cantelli (Università di Roma "La Sapienza") presented recent results based on anelastic spectroscopy. The hydrogen absorption in thin films has been presented by Nainesh Patel (Università di Trento), who presented a talk on the role of Nb MgH₂ storage properties.

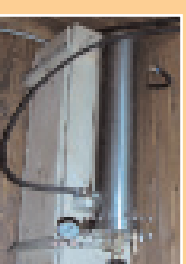
Adriano Zecchina (NIS), has given an overview on the effect of catalysts on hydrogen absorption/desorption phenomena. The main results of an Italian project on hydrogen storage has been reported by Mario Conte (ENEA, Centro ricerche Casaccia) who presented a talk on "Hydrogen Storage in metal hydrides for Fuel Cell Vehicles: main results of an Italian project". Giuseppe Spoto (NIS) presented recent results on "Probing molecular hydrogen storage with Infrared Spectroscopy" and Silvia Bordiga (NIS) discussed on "State of the art about molecular hydrogen in MOFs". Recent applications on hydrogen for car industry have been reported by Alessandro Garriglio (Centro Ricerche Fiat, Torino), who presented a talk on "Current fuel cells research programs at CRF and near technology needs".



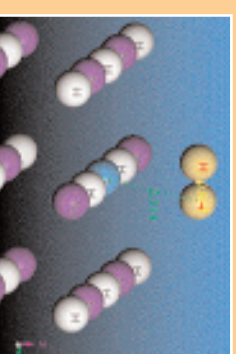
Lennard-Jones potential



H₂ storage in nanoporous materials



SGS Tank



Role of Ti in NaH in hydrogen activation



Fiat Panda Hydrogen

Participants

The Colloquium was followed by about 55 persons, coming from several different groups of the University of Torino and from other Italian University or Research Centers (Politecnico di Torino, Università del Piemonte orientale, Università di Milano, Università di Milano-Bicocca, Università di Genova) and from industries interested to hydrogen (Hysy Lab, Centro Ricerche Fiat, Pirelli Labs, Edison).

Actions

- Sharing of techniques and experimental apparatus
- Exchange of results
- Training of young researchers (PhD and PostDoc) coming from the different laboratories

Financial support

The meeting was free of charge. ASP has provided financial support

NANOSTRUCTURED OXIDE SURFACES II

a cura di Elio Giamello

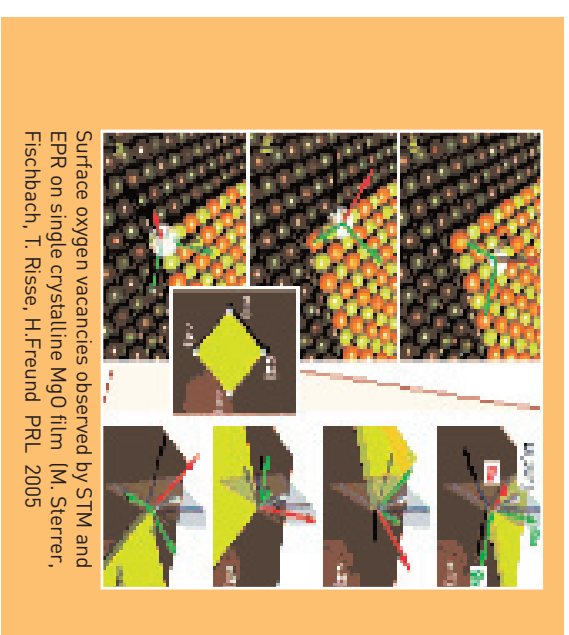
March 23rd and 24th 2006

E. Giamello, Università di Torino e NIS <i>Chair: H. J. Freund (Fritz-Haber Institut, Berlin)</i> P. Milani	Introduzione Transition metal oxide films generated via cluster beam deposition. Applications in the fields of sensors and molecular biology. Dipartimento di Fisica, Università di Milano
C. Di Valentin	Metal atoms as local probes of the morphology and basicity of alkaline-earth oxide surfaces. Dipartimento di Scienza dei Materiali, Università di Milano-Bicocca.
C. Paganini	Photosensitivity of paramagnetic centres in N doped TiO₂ Dip. di Chimica IFM e NIS, Università di Torino
G. Ghiotti	Semiconductor metal oxides: electronic properties and surface chemistry of powders and films studied by IR and UV-Vis spectroscopy. Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino
B. Bonelli	Spectroscopic characterization of vanadyl phosphate catalysts, supported on alumina or titania oxides, for oxydative dehydrogenation reactions. Dip. di Scienza dei Materiali e Ingegneria Chimica, Politecnico di Torino
P. Luches	Structural investigation of Fe on NiO(001) and MgO(001) surfaces. CNR-INFM S3, Modena
<i>Chair: Gianfranco Pacchioni Università di Milano Bicocca</i> T. Risse	A combined EPR and STM/STS approach to investigate color centres and their interaction with metal atoms on thin films MgO(001) Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft Berlin
C. Pisani	Theoretical characterisation of stoichiometric and non stoichiometric phases of NiO on Pd. Dip. di Chimica IFM e NIS, Università di Torino
E. Gianotti	Ti(IV) centres grafted on siliceous materials: spectroscopic and catalytic properties. Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino.
P. Fornasiero	Nanostructured CeO₂ based catalysts. How "Innocent" is the support? Dipartimento Scienze Chimiche Università di Trieste
O. Diwald,	Optical Surface Properties of MgO, Ca_xMg_{1-x}O and CaO Nanocrystals Institute of Materials Chemistry Vienna University of Technology, Wien
S. Usseglio Nanot	Titanium dioxide containing color centres having molecular character Dipartimento di Chimica IFM e NIS, Università di Torino

Target

The second edition of the Colloquium aimed to group together Italian and selected European scientists working in the field of the surface properties of metal oxides, an area characterized by the deep and fruitful interaction between experimentalist and theoreticians. Following the line defined one year before in the first NIS-NOS Colloquium the focus was put on the approaches and the results of experimentalists working on single crystal faces or on ultrathin oxide layers epitaxially grown on a support (Surface Science) with those of the classic surface chemistry performed on polycrystalline systems. The role of point defects at the surface or in the bulk of oxides in determining the electronic properties, the reactivity and the photoactivity of the whole system was particularly discussed in this second edition.

Three leading scientists in the field accepted to chair the Sections of the Colloquium which started in the afternoon of March the 23th and ended on 24th at noon. They are **Hans-Joachim**



The subject of nanostructured titanium dioxide prepared by cluster beam deposition was illustrated by **Paolo Milani** (Univ. Milano) who stressed the exciting applications of the layers obtained by this method in the field of biosensors.

The world of Surface Science on well defined single crystal faces was represented by **Thomas Risse** (Berlin) who presented recent and very innovative results on the widely discussed surface color centres on MgO consisting in the simultaneous investigation of the centres by STM and EPR. **Paola Luches**, (CNR-INFM Modena) presented a thorough structural investigation on the interaction of iron at the surface of MgO and NiO (001). Complementary results on NiO layers deposited on Pd single crystal faces, elaborated

by state of the art DFT calculations were presented by **Cesare Pisani** and **Anna Maria Ferrari** (Torino).

Model systems of ionic oxides but in polycrystalline form were discussed by **Oliver Diwald** (TU Wien) who reviewed the optical properties of nanostructured alkali earth oxides with particular emphasis on mixed MgO-CaO solids. A non secondary aspect in this NIS-NOS II was covered by the reports on semiconducting oxides interesting for their properties as catalysts, sensors or for their photoactivity. **Stefano Fabris** (Trieste) presented a thoughtful contribution on a

extremely important oxide (CeO₂) aiming to individuate the basic reason of its peculiar activity as oxygen reservoir in catalytic pots for automobile exhaust. **Giovanna Ghiotti** (Torino) gave a lecture on her activity of investigation via IR and UV-vis spectroscopies while **Maria Cristina Paganini** and **Sandro Usseglio Nanot** described the attempts to prepare variously doped systems based on titanium dioxide. In this latter case recent results leading to the individuation of the photoactive species in N doped Titanium dioxide were presented (Paganini) while Usseglio described an original method for doping the solid with iodine.

Other contribution (**Barbara Bonelli**, Politecnico di Torino and **Enrica Gianotti**, NIS) were devoted to catalytic activity of oxide systems in various industrial reactions.

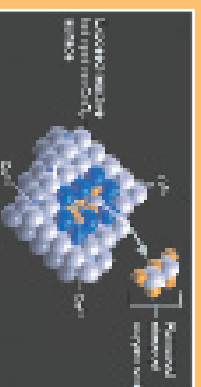
Participants

The Colloquium was followed by nearly 100 persons, coming from various groups of the University of Torino, from other Italian Universities (Milano, Milano Politecnico, Milano Bicocca, Piemonte Orientale, Modena, Padova, Genova) and from various public research institution (CNR) and private companies.

Actions

- Discussions on possible joint project including EC projects.

Costs: 800 Euro covered by NIS



Local structure of surface and subsurface oxygen vacancies on Ceria. (Esch, Fabris, Fornasiero et. al SCIENCE 2005)

NON STOICHIOMETRIC OXIDES: GROWTH, PROPERTIES, CHARACTERIZATION AND APPLICATIONS

A cura di Angelo Agostino, Carlo Lamberti e Marco Truccato

May 12th 2006

C. Lamberti, Università di Torino e NIS M. Takano W. Paulus M. Johnson & H. Schöber T. Berthier A. Agostino Y. I. Latyshev E. Silva A. Rigamonti L. Pellegrino M. Truccato	<p>C. Lamberti, Università di Torino e NIS Introduction</p> <p>M. Takano <i>Effects of Oxygen Deficiency in SrTiO₃ (shallow d) and SrFeO₃ (deep d)</i> Lab. of Advanced Solid State Chemistry, Inst. for Chemical Research, Kyoto University, Japan</p> <p>W. Paulus <i>Structural exigencies and reactivity of solids: low temperature oxygen ion conduction in low dimensional perovskite-type oxides</i> Magistère Matériaux, Université de Rennes 1, France</p> <p>M. Johnson & H. Schöber <i>Ab initio modeling of structural, vibrational and electronic properties of defective oxides</i> Institut Laue-Langevin (ILL), Grenoble, France</p> <p>T. Berthier <i>(Sr,Ca)FeO_{3-x}: Crystal growth structure analysis and chemical reactivity</i> Université de Rennes 1, France & Università di Torino e NIS.</p> <p>A. Agostino <i>Discussion on superconducting properties of non-stoichiometric cuprates whiskers</i> Università di Torino e NIS</p> <p>Y. I. Latyshev <i>Interlayer tunneling spectroscopy and dynamics of Josephson vortex lattice in Bi₂Sr₂CaCu₂O_{8+x}</i> Russian Academy of Science, Institute of Radioengineering and Electronics, Moscow, Russia.</p> <p>E. Silva <i>Microwave properties of superconducting copper oxides</i> Università di Roma 3, Italy</p> <p>A. Rigamonti <i>Superconducting fluctuating diamagnetism versus precursor diamagnetism in heterogeneous superconductors</i> Università di Pavia, Italy</p> <p>L. Pellegrino <i>Electric Field Effect and Magnetic Nanodevices made of Functional Oxides fabricated by AFM Lithography</i> CNR-INFM-Lamia, Genova, Italy</p> <p>M. Truccato <i>Electric conductivity properties of superconducting perovskitic microcrystals</i> Università di Torino e NIS</p>
--	---

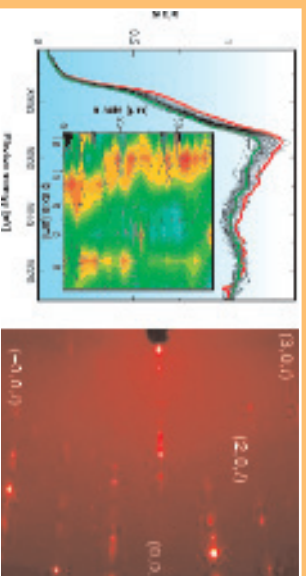
Target

Aim of the Colloquium was to stimulate an open discussion among scientists coming from different European and Japanese universities involved in the study of a complex class of materials such as the non-stoichiometric oxides. The aspects of (i) crystal growth; (ii) materials characterization, both experimental and ab initio; (iii) applications have been addressed. The investigated materials may be classified in oxides for O storage (relevant for batteries and fuel cells) and in high temperature superconducting (HTSC) oxides.

The colloquium was opened by **C. Lamberti** with a brief overview on the invited speakers and their talks, followed by the NIS presentation by **A. Zecchina**.

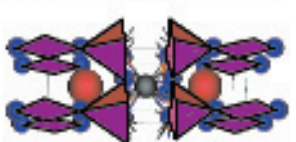
The opening lecture was given by **M. Takano**. He presented the advanced synthesis techniques used in his group in Kyoto: single crystal growth at high pressure (5GPa, 1000°C); film growth using laser ablation; micro-fabrication using photolithography. **M. Takano** reviewed the electric and Magnetic properties of Sr(Ti,Fe)O_{3-d}, Ca(Ti,Fe)O_{3-d}, (La,Sr)CuO_{2.5},

BiCoO₃, PbVO₃ and PbTiO₃ systems, discussing the relevant problem of the possible presence of ordered vacancies in defective oxides reporting XRD and Mössbauer data (topic also faced by **W. Paulus**). Photoluminescence of Ar-irradiated SrTiO₃ has been discussed.

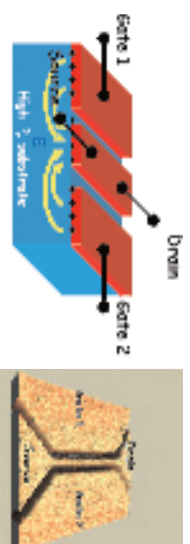


W. Paulus discussed the room temperature oxygen ion conduction in low dimensional perovskite-type oxides. He reported the electrochemical oxidation of SrCoO_{2.5} to SrCoO₃ investigated in situ by neutron diffraction (ILL, LLB) and by XAFS (ESRF). **M. Johnson** compared the structural, vibrational and electronic properties of defective oxides obtained by ab initio methods with experimental results from neutron diffraction, inelastic neutron scattering and Raman data. **T. Berthier** described the growth of single crystal of (Sr,Ca)FeO_{3-d} by image furnace and their structural characterization by neutron diffraction (FRM-2, D).

A. Agostino opened the talks devoted to HTSC oxides. He gave an extensive introduction to the phenomenology of superconductivity and a deep insight in the growth technique of YBCO and BSCCO whisker-shaped crystals. The ionic and O mobility evidenced by experiments at the ESRF synchrotron has been discussed. **Y. I. Latyshev**, summarized the results on the dynamics of the inter-layer vortex motion. Results were also obtained on FIB nano-lithographed whiskers. **E. Silva** and **A. Rigamonti** exposed several important results on a wide variety of HTSC systems and on MgB₂. **E. Silva** reported about the electromagnetic properties of thin films in the microwave regime. **A. Rigamonti** explained the different behaviors between fluctuating diamagnetism in heterogeneous and homogeneous systems. **L. Pellegrino** introduced the PLD growth technique for the SrTiO_{3-d} thin films and the local nano oxidation technique via AFM.



Several examples of field effect transistors with different geometries both in SrTiO_{3-d} and in La_{1-x}Sr_xMnO₃ systems have been illustrated.



M. Truccato, closed the colloquium by discussing the role of purely quantum effects in the paraconductivity in BSCCO whiskers using an advanced Ginzburg-Landau model for the interpretation of the experimental resistance vs. temperature data.

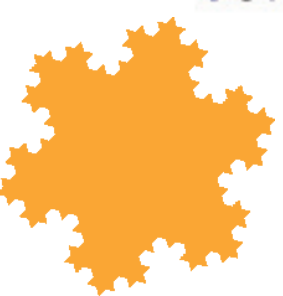
Participants

Professors, researchers and PhD students from Rennes-1 (F), Grenoble (F), Moscow (Ru), Kyoto (Jpn) had the opportunities to meet Italian colleagues coming from Pavia, Milano, Roma, Genova and Torino. More than 35 PhD students in Materials Science, Physics, Chemistry and Engineering have attended the event.

Actions

- Starting meeting of the PRIN project on fluctuations in heterogeneous superconductors submitted in May 2006 by the Pavia, Torino, Milano units.
- Meeting between Torino, ILL (Grenoble) and Rennes-1 on the vibrational properties of defective oxides investigated by INS, Raman and ab initio calculations.
- One joint PhD between Torino and Rennes-1 (T. Berthier).
- Planning of exchange of PhD and Post-Doc.
- Planning of new experiments with neutrons and synchrotron sources. (vi) Starting of a European Master in Materials Science (Torino & Rennes-1) 2006/07.

Costs: 1200 Euro (by NIS)
1500 Euro (by IDECAT)



IL QUADRO ECONOMICO di Silvia Bordiga

Il Progetto "Nanostructured interfaces and surfaces" presentato al termine del 2001 prevedeva investimenti per 5.000.000 di Euro così ripartiti:

Risorse disponibili come cofinanziamento:	Università di Torino	250.000
Dipartimenti		786.000
Finanziamento richiesto al MIUR:		3.964.000

La somma complessiva risultava così ripartita nelle seguenti voci:

Adeguamento strutture:	50.000
Materiale inventariabile:	2.700.000
Consumo:	800.000
Personale:	1.040.000
Missioni	230.000
Altro:	180.000

Il progetto è stato selezionato a fine 2003 e, malgrado avesse ricevuto giudizi estremamente positivi anche dal punto della programmazione delle spese ed investimenti, ha subito una decurtazione di più dei 2/3 del finanziamento richiesto. Il finanziamento accordato è stato di soli 1.540.000 Euro per il triennio 2004-2006.

A fronte di questa riduzione di fondi, il Consiglio scientifico del NIS ha dovuto fin da subito modificare il piano delle attività. Due sono state le azioni intraprese:

- rivedere consistentemente la previsione di spesa e di investimenti, privilegiando le spese di media e piccola entità e le spese che si riferivano ad un completamento di strumentazioni già in via di acquisizione;
- intraprendere con determinazione una azione rivolta al recupero di nuove risorse attraverso i canali di finanziamento ordinario e straordinario degli enti locali, nazionali europei, tramite le fondazioni bancarie e, non ultimo, attraverso l'offerta alle imprese.

A partire dal termine del primo e nel corso del secondo anno di attività del Centro NIS, gli afferenti al Centro, sia presentando progetti autonomi (con affiliazione NIS) sia organizzando veri e propri progetti comuni su specifiche tematiche, hanno ottenuto nuovi finanziamenti provenienti da: i) Fondazione S. Paolo, ii) Regione Piemonte, iii) MIUR e iv) Comunità Europea.

La documentazione che segue si propone di illustrare in maniera sintetica ma puntuale le spese e gli investimenti effettuati nel corso dei primi due anni di attività del Centro e le risorse che sono state acquisite nel corso di questi primi anni di attività.

Particolarmente rilevante, sia dal punto quantitativo che strategico è il contributo accordato dalla Compagnia di San Paolo, che ammonta a 1.200.000 Euro per il triennio 2005-2007. Il contributo permette il completamento del piano originale di acquisizioni strumentali, ed un sostanziale incremento della dotazione di funzionamento del centro. Esso costituisce anche la principale fonte di finanziamento (allo stato attuale) del quarto anno di esercizio del centro, cruciale allo scadere del finanziamento ministeriale.

IL BILANCIO 2004 - 2005

Allo stato attuale il Centro NIS non redige un bilancio proprio, ma partecipa al bilancio del Dipartimento di Chimica IFM, che ne svolge tutte le funzioni amministrative. La rendicontazione economica è tuttavia necessaria per ragioni di programmazione e per la rendicontazione ai diversi enti finanziatori. Riportiamo nelle tabelle seguenti la rendicontazione relativa ai due principali finanziamenti accordati: quello ministeriale ed il Contributo della Compagnia di S. Paolo.

Per quanto riguarda le entrate, esse si compongono, oltre che dei due contributi sopra citati, di un notevole numero di altri contributi ottenuti attraverso la partecipazione a bandi di finanziamento di progetti di ricerca. I principali contributi di questo tipo sono illustrati nell'apposita tabella. Infine, un'ulteriore fonte di finanziamento deriva dai contratti con aziende private, per lo svolgimento di ricerche e servizi di misura. I dati economici relativi a queste collaborazioni sono disponibili a richiesta.

RENDICONTO A VALERE SUL FINANZIAMENTO MINISTERIALE

le relative quote di cofinanziamento dell'Ateneo)

		ENTRATE		
Fonte	I anno descrizione	II anno descrizione	III anno descrizione	
Ministero	480.000	480.000	480.000	
Università	93.700			
Dipartimento	281.200			
Totale	854.900	480.000	480.000	
Adeguamento strutture		USCITE		
	0	20.132	45.000	Glove box
				Strum. per i Lab. Comuni: pressa; deionizzatore H ₂ O macchina per il ghiaccio stufa per sintesi; muffola forno tubolare
		47.668		Lavori edili, impianti ed arredi per i nuovi laboratori di Via Michelangelo 32
Materiale inventariabile	656.200	110.175	200.000	Cofinanziamento EPR
				Up-grade sistema XPS-ESCA, Completamento Micro Raman
				Micro Raman
				cofin. Microbilancia; Tensiometro
				Spettrofotometro; Microscopio AFM
				Cluster-Multiprocessore CATLAB
Materiale di consumo	62.660	59.618	56.000	
				Spese di manutenzione per le 5 linee
				Reagenti e materiali
Personale	96.145	206.963	140.000	
				Contratto tecnico EP
				Avvio ass. ricerca biennali
				Borse di studio
				Numero Contratti: 18
Missioni	24.332	27.989	24.000	
Altri costi	16.933	7.455	15.000	
				Spese per materiale illustrativo NIS colloquia
				Sponsor IWDX 4;
				Spese gen. e di segreteria
				Spese di viaggi e missioni per attività di promozione del centro
				Spese di promozione del centro
Totale Uscite	856.270	480.000	480.000	
Avanzo	-1.370	0	0	

RENDICONTO A VALERE SUL CONTRIBUTO DELLA COMPAGNIA DI SAN PAOLO

La tabella riporta la destinazione del contributo accordato dalla Compagnia di San Paolo, come deliberato dal Consiglio scientifico del Centro secondo le direttive dell'ente finanziatore. Si noti come il contributo sia stato utilizzato in modo sinergico rispetto ai fondi acquisiti attraverso il Bando Regionale Ricerca Applicata (vedi tabella seguente), che richiede una quota di co-finanziamento di ciascun progetto da parte dell'ente proponente. Vedi anche la sezione "Sistema Regionale della Ricerca" al capitolo "Ricerca".

		ENTRATE	
Voci di spesa			
Attrezzamento dei laboratori e strumentazione	700.000		
Spese di funzionamento	150.000		
Borse di studio e contratti	350.000		
Attrezzamento dei laboratori e strumentazione		USCITE approvate nel 2005-2006	
		200.000	Cofinanziamento Microscopio Elettronico TEM
		50.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Battezzati
		40.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Baricco-Spoto
		48.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Morretta e Carbone
		35.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Bussolino-Bordiga
		31.000	Upgrade di un apparato per Chemical Vapor Deposition
		9.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Ghiotti
		10.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Zecchina
		3.000	Cella per irraggiamento materiali Prof. Benzi
		6.000	Accessori per microscopio AFM Prof. Manfredotti
		60.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Carbone
		12.000	Attrezzatura per alto vuoto per misure XAFS
		10.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Volpe-Operti
			in fase di definizione
		30.000	Cofinanziamento progetto regionale Prof. Baricco-Spoto (Il tranche)
		20.000	Strumentazioni per nuovo laboratorio di Sintesi Idrottermali
		20.000	Strumentazione per il nuovo laboratorio chimico e strumentale
		116.000	Banco ottico Raman e FTIR per il nuovo laboratorio
Totale	700.000	700.000	
Spese di funzionamento			
	10.000		Spese per attività di trasferimento tecnologico e disseminazione Prof. Coluccia
	140.000		Altre spese di funzionamento: mat. di consumo, servizi esterni, viaggi e missioni.
Totale	150.000		
Borse di studio e contratti			
	90.000		Assegni di ricerca, borse di studio interamente o parzialmente a carico del NIS in corso di svolgimento
	215.000		Borse di studio e contratti da assegnare
	45.000		Contratti ex art. 19 Iricercatori a contratti in corso di svolgimento
Totale	350.000		

FINANZIAMENTI OTTENUTI

Tipo di prog.	Responsabile/i	Titolo del progetto	Periodo	Costo prog.	Quota amm.da NIS
PROGETTI INTERNAZIONALI					
NATO	Adriano Zecchina	Photocatalytic decontamination of neurotoxic and vesicant compounds	2005-2007	307,000	32,000
COST	Adriano Zecchina	Organic Synthesis with zeolites: Activation of CO ₂ and of organic carbonates for fine chemicals.	2004-2008	600,000	0
COST	Guido Viscardi	Molecular Engineering of Interfaces of Photonic Devices based on Mesoscopic Oxide Layers	2006-2010	155,000	0
STRREP	Silvia Bordiga	New Metal Organic Frameworks for Industrial Applications	2006-2008	2,200,000	350,000
STRREP	Salvatore Coluccia	Immunoprobes for food contamination analysis	2003-2006		153,000
NOE	Livio Batezzati	Complex Metallic Alloys	2005-2010		0
MAP-EESA	Livio Batezzati	Demixing in Cu-Co alloys	2000-2006		0
PROGETTI NAZIONALI					
FISR	Salvatore Coluccia	Matrici di microcombustori ad idrogeno	2005-2008		611,000
	Salvatore Coluccia	Sviluppo di Micro fuel cells a metanolo ed etanolo diretto per applicazioni portatili	2005-2007	2,698,000	488,000
PROGETTI REGIONALI Ricerca Applicata, Banda 2005					
Settore Nanotecnologie	Adriano Zecchina	Sistemi a base di Carbonio nanostrutturato per applicazioni industriali	2005-2008	302,700	208,774
	Emilio Carbone	Biosensori e interazioni neuronali-superfici nanostrutturate	2005-2008	302,700	
	Paolo Volpe	Studio per la realizzazione di un dispositivo SQUID basato su nanoginzioni Josephson intrinseche in materiali superconduttori ad alta Tc	2005-2008	96,700	0
	Livio Batezzati	Processi di sintesi, proprietà meccaniche, applicazioni di leghe amorphe e nanostrutturate	2005-2008	247,700	155,677
	Claudio Morterra	Materiali nanostrutturati biocompatibili per applicazioni biomediche	2005-2008	276,700	276,700
	Salvatore Coluccia	Arrays cellulari e molecolari basati su materiali nanostrutturati fotoattivi	2005-2008		43,765
	Oscar Chiantore	Materiali polimerici nanostrutturati per la fabbricazione di membrane e coating funzionali	2005-2008	158,700	158,700
Settore Sviluppo Sostenibile	Marcello Baricco	Materiali innovativi per l'innalzamento di idrogeno	2005-2008	240,000	182,400
	Palo Spinelli (Politecnico)	Studio per il miglioramento di sistemi elettrodi (MEA) per fuel cell a bassa temperatura	2005-2008	260,000	90,000
	Giovanna Ghiotti (Dip. IFM-NIS)				
Settore Salute	Federico Bussolino	Modelizzazione in silico di circuiti di segnale intracellulari che regolano la formazione del sistema vascolare.	2005-2008	210,000	80,000
	Silvia Bordiga	Sviluppo di composti idrossipatite/zirconia nanostrutturati e funzionalmente gradati per impianti ortopedici	2005-2008		21,200
	Emma Angelini (Politecnico), Salvatore Coluccia (NIS)	Biosensori MEMS e NEMS integrati per analisi genomica, proteomica e molecolare	2005-2008		10,680
	Fabrizio Pirri (Politecnico), Salvatore Coluccia (NIS)				
ALTRI PROGETTI					
	Contratto COREP - Diadi		2006	16,000	16,000
TOTALE					2.877.896

Redazione a cura di:

Silvia Bordiga

Ugo Finardi

Gabriele Ricchiardi

info.nis@unibo.it

Grafica:

Orange zero21

www.orange021.com