Il Dipartimento di Scienza dei Materiali nasce nel 1997 con la missione di promuovere lo sviluppo di tematiche di ricerca su materiali funzionali. Primo e per lungo tempo unico esempio di Dipartimento interdisciplinare interamente rivolto ad una tematica di ricerca ai tempi ben poco nota in Italia, punta su una forte integrazione tra ricerca, didattica e rapporto con il territorio. I risultati di questo approccio possono essere letti facilmente attraverso i numeri della produzione scientifica del Dipartimento, tra le migliori a livello nazionale sia nell'area fisica che in quella chimica, come pure negli esiti delle azioni di *fundraising* e nella capacità di intercettare la richiesta di innovazione tecnologia di soggetti industriali operanti nell'ambito dei nuovi materiali. La VQR 2006-2010 ha, infatti, sancito la posizione di assoluto rilievo del Dipartimento, non solo nell'ambito proprio della Scienza dei materiali ma anche delle discipline chimiche e fisiche essendo risultato nel top-10% dei migliori Dipartimenti di chimica e di fisica in Italia (vedi quadro B3). La quasi totalità dei prodotti di ricerca presentati è stata valutata eccellente e non si segnalano casi di ricercatori inattivi o parzialmente attivi.

Il Dipartimento comprende laboratori di ricerca per la sintesi e la caratterizzazione di materiali organici, inorganici, polimerici e ibridi. Ospita alcune grandi attrezzature in laboratori considerati *facilities* di riferimento nel campo della deposizione da fasci molecolari di molecole organiche, preparazione e caratterizzazione di nanopolveri, preparazione e caratterizzazione di dispositivi fotovoltaici di terza generazione, attività coordinate nel Centro MIB-Solar, caratterizzazione ottica avanzata di semiconduttori, datazione di beni culturali, nel quadro delle attività del Centro Interdipartimentale per le Datazioni e l'Archeometria, CUDAM, simulazione e modellizzazione di materiali. Il personale di ricerca intesse fitte reti di collaborazione interdisciplinare sia all'interno del Dipartimento stesso sia a livello nazionale e internazionale.

Qui di seguito vengono presentate le linee di ricerca che, pur intersecandosi nelle competenze, si possono raggruppare in quattro aree. Per questo motivo non si ritiene di compilare il Quadro B1b.

#### Linee di ricerca

# 1-Materiali organici e polimerici

Questa linea di ricerca comprende varie attività relative all'applicazione di sistemi organici nei seguenti ambiti: energia, optoelettronica, fotonica, ottica non lineare, semiconduttori e matrici per materiali nanostrutturati. In particolare, le ricerche sono indirizzate principalmente verso le seguenti tematiche:

- materiali e dispositivi organici per fotovoltaico organico e ibrido a film sottile di terza generazione e per la fotosintesi artificiale;
- materiali polimerici altamente coniugati per applicazione in dispositivi fotoconduttori, elettrocromici e concentratori solari luminescenti;
- materiali organici per fotonica e optoelettronica con progettazione e preparazione di semiconduttori;
- studio della degradazione termica e fotochimica di polimeri per celle fotovoltaiche;
- materiali nanostrutturati a base polimerica;
- cristalli organici da soluzione e caratterizzazione delle superfici cristalline in crescita;
- crescita di cristalli di semiconduttori organici e simulazione con campi di forza empirici di sistemi eteroepitassiali organico-organico;
- preparazione e caratterizzazione di materiali nanostrutturati con porosità permanente o inclusione di polimeri in architetture supramolecolari;
- confinamento di molecole e di macromolecole in gallerie e nanocanali;
- studio di materiali gerarchici a base di copolimeri a blocchi, nanoparticelle polimeriche multifase, nanocristalli inorganici in matrici polimeriche;
- studio di materiali molecolari e polimerici quali sensori ottici in strutture a cristallo fotonico.

### 2 Materiali per microelettronica e fotonica

Questa linea raggruppa le attività di ricerca relative ai nanomateriali funzionali, ai materiali per nanoelettronica e spintronica, ai materiali ossidici vetrosi per ottica e optoelettronica, ai semiconduttori molecolari organici e alla simulazione da principi primi di materiali per la microelettronica. In dettaglio, le tematiche di ricerca vertono su:

• spettroscopia avanzata di nanocristalli colloidali semiconduttori, up-conversion non-coerente, concentratori solari luminescenti;

- ossidi, interfacce tra silicio o germanio ed ossidi;
- nanostrutture per dispositivi con applicazioni in nanoelettronica, spintroniche, neuroelettroniche;
- vetri e vetroceramici per applicazioni ottiche, in fotonica, optoelettronica e rivelazione di radiazioni ionizzanti;
- spettroscopia ottica e crescita di semiconduttori e strutture quantistiche a semiconduttore;
- crescita di film sottili di semiconduttori molecolari organici attraverso epitassia da fasci molecolari (OMBE);
- crescita di semiconduttori dei gruppi IV e III-V: eterostrutture SiGe e strutture quantistiche di semiconduttori III-V e studio sperimentale delle loro proprietà ottiche;
- simulazioni e modellizzazione della deposizione epitassiale di semiconduttori e di nanostrutture;
- simulazioni atomistiche con tecniche basate sulle rete neuronali (*Neural Network*) di materiali a cambiamento di fase per memorie non volatili, e di fononi di superficie in isolanti topologici per applicazioni in spintronica;
- studio di nanostrutture di Ge attraverso simulazioni atomistiche di *Kinetic Monte Carlo* e/o modelli nel continuo.

## 3 Materiali per ambiente ed energia

Gli argomenti di ricerca di questa linea comprendono lo studio di materiali inorganici per la produzione e l'immagazzinamento dell'energia, di semiconduttori inorganici per applicazioni fotovoltaiche e di ossidi semiconduttori per processi catalitici e fotocatalitici. Le principali tematiche sviluppate sono:

- preparazione e chimica dei materiali inorganici e ibridi per applicazioni fotocatalitiche;
- chimica fisica dei materiali inorganici per applicazioni nel fotovoltaico, nel termoelettrico e nel rilevamento ambientale;
- studio di materiali elettrodici ed elettrolitici per celle a combustibile a stato solido e per batterie ricaricabili a ioni alcalini;
- sintesi, caratterizzazione spettroscopica e studio funzionale di ossidi metallici con struttura e morfologia controllata per la sensoristica;
- sintesi, caratterizzazione spettroscopica e studio funzionale di materiali ibridi organici-inorganici e della loro interfaccia;
- filler inorganici di forma controllata per la produzione di nanocompositi di gomma per autotrazione;
- dispositivi termoelettrici e sensori basati su silicio nanostrutturato:
- biosensori basati su nanofili e nanostrati di silicio mono e policristallino:
- struttura, termodinamica e modellistica di materiali a idrogeno e litio per l'energia e lo stoccaggio di gas;
- preparazione di nuovi materiali con architetture porose per lo stoccaggio di gas metano e idrogeno, per la separazione dell'anidride carbonica dall'azoto e per la cattura di vapori inquinanti;
- deposizione via *sputtering* di film sottili di un calcogenuro (CIGS) su vetro e su substrati flessibili;
- modellizzazione e studio computazionale di struttura e proprietà di materiali a bassa dimensionalità (film ultrasottili di ossidi cresciuti su supporti metallici);
- determinazione con metodi quantistici delle proprietà elettroniche e della reattività superficiale di ossidi semiconduttori per le energie rinnovabili:
- studio computazionale dell'interazione con il supporto e della reattività in processi catalitici di *cluster* metallici:
- screening computazionale di nuovi materiali elettrodici a base di carbonio per celle a combustibile;
- spettroscopia di core: calcolo da principi primi degli spettri *near edge x-ray absorption fine structure* (NEXAFS) di molecole aromatiche adsorbite.

#### 4 Materiali per i beni culturali

Le attività di ricerca relative a questa tematica vengono svolte principalmente nell'ambito della datazione e caratterizzazione di materiali antichi. In particolare, i gruppi di ricerca coinvolti utilizzano e sviluppano le seguenti tecniche:

- datazione con termoluminescenza (TL) di materiale archeologico;
- datazione con luminescenza stimolata otticamente (OSL) di sedimenti geologici, Surface dating;
- radiocarbonio, dendrocronologia, analisi XRF, *imaging* e acquisizione 3D di reperti di scavo.

Le attività del Dipartimento sono svolte spesso nell'ambito di progetti nazionali e internazionali, in collaborazione con altre Università e Enti di ricerca o con piccole, medie e grandi Imprese. Si opererà per incrementare il livello di queste collaborazioni. Un ulteriore obiettivo riguarda il rafforzamento della comunicazione delle competenze presenti in Dipartimento e dei risultati della ricerca.

La quantità e qualità della produzione scientifica del Dipartimento è discussa nel Quadro B3 e si colloca a livelli di eccellenza. Un importante obiettivo è perciò il mantenimento dei livelli raggiunti.

Si opererà anche ai fini del miglioramento dell'utilizzo delle strumentazioni, con un accresciuto livello di interscambio di ricercatori delle diverse aree. A questo fine, il Dipartimento si caratterizza già per una elevata interdisciplinarietà sin dalla nascita, come ricordato all'inizio di questo Quadro.

#### AZIONE 1 Attività in collaborazione con Enti di ricerca e Imprese nazionali e internazionali

Azione 1.1 Convenzioni con altri Dipartimenti/Enti/Istituzioni

**Obiettivo specifico:** Mantenimento delle attuali convenzioni attive con altri Dipartimenti/Enti/Istituzioni e attivazione di nuove convenzioni

**Descrizione:** I gruppi di ricerca del Dipartimento hanno numerose collaborazioni scientifiche con gruppi di ricerca di altri Dipartimenti, Enti ed Istituzioni, anche internazionali, come testimoniato dall'elevato numero di pubblicazioni scientifiche in collaborazione e di finanziamenti con partner nazionali e internazionali. Il Dipartimento ha attivato da anni convenzioni ufficiali con alcuni di questi Dipartimenti, Enti o Istituzioni regionali quali il Politecnico di Milano, l'Università di Milano, l'Università di Pavia, il Laboratorio MDM IMM-CNR di Agrate (e.g. Centro Interuniversitario L-NESS e accordo quadro per i Beni culturali), o interregionali quali lo IOM-CNR di Trieste, o internazionali nei termini della *European Energy Research Alliance* (EERA) o di azioni COST e vari accordi bilaterali internazionali.

Monitoraggio e verifica: numero di convenzioni attive - Riesame 2015

Azione 1.2 Ricadute tecniche, applicative, sociali, e altri aspetti di integrazione territoriale

**Obiettivo specifico:** Consolidare ed intensificare le ricadute e l'integrazione territoriale delle ricerche svolte in Dipartimento

**Descrizione:** Il Dipartimento già si impegna molto nell'azione di trasferimento tecnologico e nell'attività conto terzi e intende quindi proseguire in questa direzione consolidando ed intensificando le azioni e l'attività come descritto meglio nella Sezione III.

**Monitoraggio e verifica:** numero di brevetti, *spin off*, contratti di consulenza, servizi tecnici e formativi erogati - Riesame 2015

Azione 1.3 Compartecipazione a Centri di ricerca e Consorzi

Obiettivo specifico: Consolidamento delle compartecipazioni esistenti

**Descrizione:** il Dipartimento partecipa attualmente a due consorzi interuniversitari, INSTM e CNISM, e al consorzio CORIMAV comprendente Università di Milano-Bicocca e Pirelli. Alcuni afferenti al Dipartimento svolgono parte della propria ricerca presso i laboratori L-NESS, struttura condivisa fra Università di Milano-Bicocca e Politecnico di Milano. Per il triennio 2015-2017 il Dipartimento punta al consolidamento delle reti esistenti.

Monitoraggio e verifica: Riesame 2015

#### AZIONE 2. Mantenimento del livello di produzione scientifica

**Obiettivo specifico:** Mantenimento dell'attuale, elevato, numero di pubblicazioni, in particolare in fascia A nella prossima VQR

**Descrizione:** la VQR 2004-10 ha fotografato una situazione molto positiva per i prodotti presentati dal Dipartimento (vedi Quadro B3). Più del 95 % di questi sono stati infatti valutati in fascia A (eccellenti). Il consolidamento ed eventuale miglioramento di questo risultato verrà perseguito favorendo l'inclusione e l'aggregazione dei ricercatori più deboli all'interno dei macroobiettivi comuni indicati nell'Allegato.

**Cronologia:** aumento del coefficiente di premialità per l'aggregazione attorno a tematiche comuni a partire dal 14-15. Supporto della rete di collaborazione tra afferenti dal 13-14

Monitoraggio e verifica: Riesame 2015

### AZIONE 3. Interdisciplinarietà

Azione 3.1 Programmi di interscambio tra ricercatori di diverse aree

Obiettivo specifico: Consolidamento delle attività di interscambio nazionali e internazionali

**Descrizione:** consolidamento delle numerose iniziative di mobilità/collaborazione internazionale già attive nel Dipartimento. In particolare, due iniziative Marie Curie-ITN interesseranno il Dipartimento nel triennio 2014-2016, affiancandosi a programmi già esistenti sia nazionali (FIRB) sia internazionali (COST, FP7). Ulteriori iniziative di sostegno alla mobilità/internazionalizzazione sono delineate nella sezione relativa ai Corsi di Dottorato (dottorato PCAM)

**Cronologia:** sostegno alla strutturata e capillare rete di collaborazioni internazionali esistenti e loro incremento a partire dal 2013-2015.

Monitoraggio e verifica: incremento delle pubblicazioni comprendenti coautori stranieri - Riesame 2015

Azione 3.2 Identificazione e mappatura di aggregazioni multidisciplinari su tematiche strategiche

**Obiettivo specifico:** Messa a sistema delle competenze interdisciplinari dei Dipartimento per il raggiungimento di obiettivi strategici comuni

**Descrizione:** i vari gruppi del Dipartimento si riuniranno attorno a quattro tematiche trasversali e strategiche rispetto agli obiettivi delineati nel programma Horizon 2020. Dette tematiche – sviluppo sostenibile, ICT, nanotecnologie, beni culturali – sono descritte in dettaglio nell'Allegato agli Obiettivi.

**Monitoraggio e verifica:** Riesame 2015, incremento del numero di richieste di finanziamento relative al programma Horizon 2015

**Azione 3.3** Utilizzo di grandi attrezzature disponibili presso l'Ateneo o presso sedi e centri convenzionati, consorziati, o comunque soci.

Obiettivo specifico: Consolidamento dell'utilizzo di grandi attrezzature

**Descrizione:** Il Dipartimento partecipa all'utilizzo di diverse grandi attrezzature, sia presso l'Ateneo che presso centri nazionali e internazionali. In particolare, per le grandi attrezzature di Ateneo si rimanda al Quadro C1. Attività interdisciplinare si svolge in particolare presso i Centri MIB-Solar e CUDAM, Centro Inter Dipartimentale per le Datazioni e l'Archeometria.

**Cronologia:** l'azione di utilizzo di grandi attrezzature sarà attiva per tutto il triennio