

## COURSE SYLLABUS

### Molecular Electronics and Photonics

2425-1-FSM01Q013

---

#### Obiettivi

Il corso tratta i principi fisici delle proprietà dei semiconduttori molecolari. Cristalli molecolari e origini quantomeccaniche delle forze intermolecolari. Sistemi policoniugati a base di carbonio: anisotropia, proprietà a bassa dimensione. Semiconduttori polimerici.

#### Contenuti sintetici

ELECTRONIC STATES OF POLICONJUGATED MOLECULES AND POLYMERS.

EXCITED STATES IN MOLECULAR CRYSTALS.

ELECTROLUMINESCENCE AND LED DEVICES.

ORGANIC PHOTOVOLTAIC CELLS.

MOLECULAR ELECTRONICS AND PHOTONICS.

#### Programma esteso

STATI ELETTRONICI DI MOLECOLE E POLIMERI CONIUGATI: Modello a elettroni liberi, modello di Hueckel. Struttura a bande dei polimeri coniugati. Approssimazione monoelettronica: Hamiltoniana di Su-Shrieffer-Heeger. Interazione elettrone-fonone e lacuna di Peierls. Solitoni, polaroni, bipolaroni. Correlazione elettronica: Hamiltoniana di Hubbard.

**PROPRIETÀ OTTICHE LINEARI:** Assorbimento ed emissione di molecole coniugate. Coefficienti di Einstein e formula di Strickler-Berg. Singoli e triplette. Calcolo degli spettri ottici con il metodo del "tight binding". Calcolo degli elementi della matrice di transizione. Regola di Kasha. Processi non radiativi. Tempi di vita. Efficienza quantica della fotoluminescenza e sua misurazione.

**STATI ECCITATI NEI CRISTALLI MOLECOLARI:** Stati eccitati negli aggregati molecolari: classificazione degli eccitoni (Frenkel, trasferimento di carica, Wannier). Delocalizzazione ed energia di legame: confronto tra materiali organici e inorganici. Calcolo dell'energia degli eccitoni. Scissione di Davydov. Meccanismi di generazione degli eccitoni. Mobilità degli eccitoni. Trasferimento di energia coerente e incoerente. Trasferimento di energia di Foerster e Dexter. Antenna fotonica.

**DISPOSITIVI DI ELETTROLUMINESCENZA E LED:** Architettura di un dispositivo prototipo e diagramma dei livelli energetici. Iniezione e trasporto di carica. Generazione e ricombinazione di eccitoni. Microcavità.

**ELETTRONICA E FOTONICA MOLECOLARE:** Fisica e architettura dei diodi organici a emissione di luce (OLED). Raccolta della luce, separazione della carica e trasporto. Celle a semiconduttore organico e polimerico e loro architettura, separazione di carica: donatori e accettori. Etero-giunzione planare e "bulk". Efficienza. Celle solari sensibilizzate ai coloranti basate su celle fotoeletrochimiche (Graetzel). Ottimizzazione della raccolta della luce solare: Processi di "upconversion" e "downconversion". Laser basati su semiconduttori organici. Principi e uso di molecole organiche nelle tecniche di imaging a fluorescenza e di super-risoluzione. Macromolecole, biomolecole e supramolecole e loro significato in fisica, chimica e biologia. Impiego di molecole per le fotoreazioni in biologia.

## Prerequisiti

Questo corso richiede una buona conoscenza della fisica quantistica (equazioni di Schroedinger tempo-indipendenti e tempo-dipendenti, teoria delle perturbazioni, regola aurea di Fermi), della struttura della materia (atomi, molecole e solidi) e alcune conoscenze di base di chimica organica.

## Modalità didattica

Lezioni frontali, in presenza.

40 ore di didattica in presenza.

20 ore di didattica interattiva.

## Materiale didattico

T. A. Skotheim, "Handbook of Conducting Polymers"

J. M. André et. al., " Quantum chemistry aided design of organic polymers"

M. Pope C. E. Swenberg, "Electronic processes in organic crystals"

Several review articles supplied by the lecturer

## **Periodo di erogazione dell'insegnamento**

2° SEMESTRE

## **Modalità di verifica del profitto e valutazione**

Prova orale mira a verificare la capacità degli studenti di:

- i) modellare e discutere le proprietà delle molecole e dei materiali organici
- ii) analizzare i processi ottici ed elettronici che avvengono in questa classe di materiali; iii) descrivere il funzionamento, le peculiarità e i limiti dei dispositivi elettronici e fotonici organici.

Non sono previste prove parziali.

## **Orario di ricevimento**

su appuntamento

## **Sustainable Development Goals**

IMPRESE, INNOVAZIONE E INFRASTRUTTURE

---