

# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

# SYLLABUS DEL CORSO

# **Molecular Electronics and Photonics**

2526-1-FSM02Q013

## Obiettivi

- Conoscenza e capacità di comprensione (DnD 1).
   Il corso si propone di insegnare i principi fisici alla base delle proprietà elettroniche, ottiche e di luminescenza dei semiconduttori molecolari.
- 2. Conoscenza e capacità di comprensione applicate. (DnD 2). Le conoscenze apprese verranno applicate alle molecole singole, cristalli molecolari, sistemi solidi disordinati, polimeri coniugati e sistemi ibridi, e il loro ruolo nella tecnologie dei dispostivi basati su materiali coniugati.
- 3. Autonomia di giudizio (DnD 3).
- 4. Abilità comunicative (DnD 4).
  Ogni lezione comprende una parte di discussione aperta con il docente in modo da verificare e approfondire le conoscenze acquisite, la capacità critica di individuare le informazioni più cruciali. e la capacità di esporle e trasmetterle.
- Capacità di apprendere (DnD 5).
   Gli articoli scientifici a complemento delle lezioni saranno discussi anche come esempio di ricerca in letteratura per proseguire/approfondire gli argomenti trattati.

## Contenuti sintetici

Principali argomenti trattati nelle lezioni:

1. Stati elettronici di molecole e polimeri policoniugati.

- 2. Stati eccitati nei cristalli molecolari.
- 3. Elettroluminescenza e dispositivi a LED.
- 4. Celle fotovoltaiche organiche e laser.
- 5. Applicazioni all'avanguardia dei materiali coniugati e ibridi in elettronica e fotonica.

## Programma esteso

#### STATI ELETTRONICI DI MOLECOLE E POLIMERI POLICONIUGATI:

Modello dell'elettrone libero, modello di Hückel. Struttura a bande dei polimeri coniugati. Approssimazione monoelettronica: hamiltoniano di Su-Shrieffer-Heeger. Interazione elettrone-fonone e gap di Peierls. Solitoni, polaroni, bipolari. Correlazione elettronica: hamiltoniano di Hubbard.

#### PROPRIETÀ OTTICHE LINEARI:

Assorbimento ed emissione di molecole coniugate. Coefficienti di Einstein e formula di Strickler-Berg. Singoletti e tripletti. Calcolo degli spettri ottici con il metodo "tight binding". Calcolo degli elementi di matrice di transizione. Regola di Kasha. Processi non radiativi. Tempi di vita. Efficienza quantica della fotoluminescenza e sua misura.

## STATI ECCITATI NEI CRISTALLI MOLECOLARI:

Stati eccitati negli aggregati molecolari: classificazione degli eccitoni (Frenkel, a 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.

#### ELETTROLUMINESCENZA E DISPOSITIVI LED:

Architettura di un dispositivo prototipo e diagramma dei livelli energetici. Iniezione e trasporto di carica. Generazione e ricombinazione degli eccitoni. Microcavità.

## **ELETTRONICA E FOTONICA MOLECOLARE:**

Fisica e architettura dei diodi organici a emissione di luce (OLED). Raccolta della luce, separazione e trasporto di carica. Celle solari organiche e polimeriche e loro architettura, separazione di carica: donatori e accettori. Eterogiunzioni planari e "bulk". Efficienza. Celle fotoelettrochimiche sensibilizzate con coloranti (Graetzel). Ottimizzazione della raccolta della luce solare: processi di "upconversion" e "downconversion". Laser basati su semiconduttori organici. Principi e uso delle molecole organiche nelle tecniche di imaging a fluorescenza e di superrisoluzione. Macromolecole, biomolecole e supermolecole e il loro significato in fisica, chimica e biologia. Impiego delle molecole per fotoreazioni in biologia.

## **Prerequisiti**

Questo corso richiede una buona conoscenza della fisica quantistica (equazioni di Schrödinger indipendente e dipendente dal tempo, teoria delle perturbazioni, regola d'oro di Fermi), della struttura della materia (atomi, molecole e solidi) e alcune conoscenze di base di chimica organica.

## Modalità didattica

Lezione frontale in aula (30 lezioni) in modalità erogativa e interattiva.

Il docente fornirà in anticipo le slides che saranno al centro di ogni lezione e gli ariticoli scientifici a complemento

ritenuti necessari.

In caso di richeiste di approfondimente, materiale addizionale sarà preparato e discusso dal docente.

## Materiale didattico

- 1. J. M. André et. al.," Quantum chemistry aided design of organic polymers"
- 2. M. Pope C. E. Swenberg, "Electronic processes in organic crystals"
- 3. Diversi articoli scientifici forniti dal docente come complemento alle lezioni.

## Periodo di erogazione dell'insegnamento

Secondo semestre.

## Modalità di verifica del profitto e valutazione

L'esame orale è finalizzato a verificare la capacità degli studenti:

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

L'esame consisterà in una serie di domande riguardanti:

- a) strettamente il programma del corso, per valutare le conoscenze acquisite sui concetti generali e sui tipi di materiali presentati (DnD 1, 2, 5);
- b) domande più orientate all'interpretazione personale e alla proposta di possibili soluzioni relative ai dispositivi a base organica discussi durante le lezioni (DnD 3, 4).

## Orario di ricevimento

Su appuntamento, inviare un email all'indirizzo del docente (angelo.monguzzi@unimib.it).

## **Sustainable Development Goals**

IMPRESE. INNOVAZIONE E INFRASTRUTTURE