

SYLLABUS DEL CORSO

Molecular Electronics and Photonics

2526-1-FSM02Q013

Obiettivi

1. 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 tecnologia dei dispositivi 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.
5. 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 super-risoluzione. 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 articoli scientifici a complemento

ritenuti necessari.

In caso di richieste di approfondimento, 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
