

## COURSE SYLLABUS

### Chemistry of Molecular Materials

2526-1-FSM02Q006

---

#### Obiettivi

##### obiettivi generali

I materiali molecolari stanno rapidamente guadagnando terreno, sia in termini di ricerca scientifica, sia di applicazioni tecnologiche.

Obiettivo del corso è quello di fornire una conoscenza dettagliata delle relazioni delle proprietà della struttura che governano il comportamento di tali materiali, con particolare attenzione alle proprietà elettroniche, ottiche e optoelettroniche.

##### Conoscenza e comprensione

Alla fine del corso lo studente:

1. Comprende il concetto di coniugazione in materiali organici e correla l'estensione della coniugazione con proprietà ottiche, elettriche e optoelettroniche
2. Comprende il concetto di legame non covalente ed è in grado di comprendere la sua influenza nello stato di aggregazione di molecole e polimeri allo stato solido e in soluzione
3. È in grado di distinguere tra residui donatori ed accettori di elettroni in molecole organiche. Può ragionare sulla loro influenza sulle proprietà elettriche, ottiche e optoelettroniche.
4. È in grado di progettare materiali coniugati organici per uno scopo specifico, in base a una serie di condizioni che definiscono il comportamento richiesto

##### Conoscenze e capacità di comprensione:

Lo studente:

1. Conosce i principi di funzionamento di base dei modulatori elettro / ottici organici, transistor a film sottile, dispositivi elettrocromici, celle solari, OLEDs, fotoreattori, batterie organiche. Sulla base di tale conoscenza, lo studente è in grado di proporre strategie per migliorarne le prestazioni.

2. È in grado di raccogliere in modo indipendente informazioni aggiuntive su uno qualsiasi degli argomenti descritti durante le lezioni.
3. È in grado di progettare e modificare una struttura molecolare proposta in modo da poter essere applicata in differenti dispositivi.

### **Autonomia di giudizio**

Data la struttura di una molecola o di un polimero coniugati, lo studente è in grado di stimare qualitativamente le corrispondenti proprietà ottiche, elettriche e optoelettroniche. All'opposto, data una certa funzione che una data molecola organica deve svolgere, lo studente può proporre derivati organici noti in letteratura e originali in grado di eseguirla. Lo studente è anche in grado di stimare l'influenza dell'ambiente sulle proprietà di molecole isolate ed aggregate.

### **Abilità comunicative.**

Lo studente possiede capacità di fornire informazioni concise e complete. Lo studente possiede la terminologia specifica del campo, quindi è nella posizione di discutere con le controparti che possiedono un background sia chimico sia fisico / ingegneristico. Possiede un atteggiamento di "problem solving".

### **Capacità di apprendimento.**

Lo studente è in grado di estendere quanto appreso nelle lezioni a casi di studio non trattati durante il corso. In particolare è in grado di gestire autonomamente la vasta letteratura dedicata ai materiali coniugati. Conosce gli strumenti di ricerca della letteratura dedicata, inclusi i brevetti.

## **Contenuti sintetici**

Elementi di design molecolare e individuazione delle componenti in un materiale coniugato. Interazioni non covalenti, aggregati e solidi molecolari: dipolo-dipolo, ion-dipolo, legame idrogeno, legame coordinativo e interazioni tra pareti. Esempi di interazioni ospite ospitante in soluzione: eteri corona, coronandi, criptandi, calixareni e resorcinareneni, rotaxani e catenani. Richiami di interazioni luce-materia in sistemi organici. Materiali per ottica non lineare: background teorico. Materiali molecolari per optoelettronica. Derivati push-pull e modello BLA. Film sottili (polimeri polati e sol-gel, film di Langmuir-Blodgett, superreticoli autoassemblati). Materiali assorbenti a due fotoni e relative applicazioni (laser e imaging, limitazione ottica, microfabbricazione 3D) Sintesi e caratterizzazione di semiconduttori organici. Proprietà di trasporto nei complessi a trasferimento di carica. Polimeri conduttori (poliacetilene, PPV, polietereocicli). Polimerizzazioni elettrochimiche e ossidative. Polimerizzazioni per cross-coupling.

Materiali e dispositivi elettrocromici: criteri di base e di progettazione per materiali molecolari e polimerici. Problemi specifici con l'assemblaggio dei dispositivi. Materiali per display e illuminazione: principio di funzionamento e architettura degli OLED. Materiali polimerici e materiali molecolari. Dispositivi di conversione a stato solido. Materiali per dispositivi solari organici e ibridi. Batterie ricaricabili organiche. Elementi di materiali organici per bioimaging e terapia fotodinamica.

## **Programma esteso**

Il corso è organizzato in attività in classe, attività interattive in aula basate sull'analisi del design molecolare e attività di laboratorio.

- Elementi di design dei materiali coniugati (elementi costitutivi)

- Elementi di chimica supramolecolare (interazioni non covalenti)
- Elementi di interazione luce-materia
- Molecole e materiali coniugati con comportamento ottico non lineare
- Fotoresist
- Semiconduttori e conduttori polimerici organici
- Materiali elettrocromici
- Transistor a effetto di campo organico
- Terapia fotodinamica
- Materiali organici per celle solari (DSSC, perovskite e ad eterogiunzione)
- Complessi a trasferimento di carica
- Dispositivi organici ad emissione luminosa

Gli studenti sono invitati a prendere parte alle attività interattive così organizzate:

### **Disegno e analisi critica di strutture molecolari**

- Il lavoro verrà svolto a gruppi in aula e verranno proposte e analizzate strutture specifiche di molecole. Le strutture verranno poi modificate in maniera cooperativa per modificarne le proprietà previste.

### **Attività pratica di laboratorio**

- Il lavoro verrà svolto a gruppi in laboratorio e verranno proposte alcune attività legate alla preparazione e caratterizzazione di dispositivi sperimentando alcune tecniche viste durante le lezioni in aula.

## **Prerequisiti**

I materiali a base molecolare richiedono un approccio interdisciplinare. Elementi di

- Scienza dei materiali
- Chimica organica
- Chimica inorganica
- Chimica fisica
- Chimica farmaceutica, chimica ambientale, fisica .... (a seconda dell'applicazione) possono essere richiesti

## **Modalità didattica**

Insegnamento con differenti modalità didattiche:

13 lezioni da 2 ore in presenza, Didattica Erogativa

4 esercitazioni da 2 ore in presenza in modalità erogativa nella parte iniziale che è volta a coinvolgere gli studenti in modo interattivo nella parte successiva. Didattica mista.

3 attività di laboratorio per un totale di 8 ore in presenza, Didattica interattiva

## **Materiale didattico**

- Jonathan W. Steed, David R. Turner, Karl J. Wallace, Core Concepts in Supramolecular Chemistry and

Nanochemistry, John Wiley&Son

- Nanoscale Science and Technology, R.Kelsal, I.Hamley, M.Geoghegan. John Wiley and Sons, Chichester, 2005
- Nanochemistry, G.A Ozin and A.C. Arsenault. Royal Society of Chemistry Publishing, Cambridge 2006.
- Kirk-Othmer encyclopedia of chemical technology (<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/0471238961>)
- H. Tian, G. Boschloo, A. Hagfeldt, Molecular Devices for Solar Energy Conversion and Storage, Springer, 2018 (<https://doi.org/10.1007/978-981-10-5924-7>)
- Annotated slides (on moodle)
- Registration of standard classes (on moodle)
- Video lessons (on moodle)

## Periodo di erogazione dell'insegnamento

secondo semestre

## Modalità di verifica del profitto e valutazione

- COLLOQUIO SUGLI ARGOMENTI SVOLTI A LEZIONE, SUI TESTI DI ESAME E DISCUSSIONE SULLE ATTIVITA' DI LABORATORIO;

durante l'esame lo studente dovrà rispondere a 3 domande generali sugli argomenti discussi nelle lezioni. Le domande si concentreranno sulla capacità di riorganizzare i concetti discussi nelle lezioni. Gli studenti saranno incoraggiati a ragionare sul possibile uso delle loro nozioni in esempi pratici / applicazioni. L'esame prevede una prima domanda su un argomento a scelta dello studente e le altre due domande deriveranno dalla estensione dei concetti esposti e riportati su altri argomenti trattati nel corso.

Viene applicato il seguente grado di giudizio in relazione ai seguenti parametri:

1. Conoscenza concettuale e capacità di comprensione
2. Capacità di applicare conoscenza e comprensione
3. Capacità comunicative e argomentative
4. Capacità di apprendimento, di autovalutazione e di autoregolazione

*Votazione < 18*

### **Conoscenza e Comprensione**

Lo studente identifica solo parzialmente le caratteristiche dei concetti. Le connessioni tra i concetti risultano frammentarie e scarsamente supportate da conoscenze teoriche.

### **Capacità di applicare conoscenza e comprensione**

Lo studente individua solo alcuni elementi rilevanti in un fenomeno, senza riuscire a integrarli in un'analisi organica.

### **Capacità comunicative e argomentative**

Nella prova orale lo studente elabora un'argomentazione essenziale, priva di articolazione logica e caratterizzata da numerose imprecisioni espositive.

### **Capacità di apprendimento, di autovalutazione e di autoregolazione**

Lo studente riesce a ricostruire solo alcuni aspetti del proprio percorso di apprendimento e sviluppo professionale.

*Votazione 18-22*

### **Conoscenza e Comprensione**

Lo studente riconosce e restituisce la maggior parte delle caratteristiche concettuali e riesce a fornirne una spiegazione relativamente coerente, sebbene con qualche imprecisione. I riferimenti teorici sono presenti ma non

sempre in modo rigoroso.

#### **Capacità di applicare conoscenza e comprensione**

Lo studente è in grado di riconoscere un numero significativo di elementi e di fornire una spiegazione parziale, pur evidenziando alcune lacune nell'analisi.

#### **Capacità comunicative e argomentative**

Nella prova orale lo studente costruisce un'argomentazione di base, dotata di una struttura minima ma con alcune imprecisioni.

#### **Capacità di apprendimento, di autovalutazione e di autoregolazione**

Lo studente dimostra una consapevolezza di base del proprio percorso di apprendimento, riuscendo a tracciare collegamenti essenziali tra le esperienze formative, sebbene con alcune imprecisioni.

#### *Votazione 23-27*

#### **Conoscenza e Comprensione**

Lo studente dimostra una comprensione approfondita delle caratteristiche concettuali. Nella prova orale le spiegazioni risultano ben articolate e supportate da un uso adeguato dei riferimenti teorici.

#### **Capacità di applicare conoscenza e comprensione**

Lo studente individua con precisione gli elementi essenziali di un fenomeno. L'applicazione delle conoscenze avviene con un rigore metodologico non sempre solido.

#### **Capacità comunicative e argomentative**

Nella prova orale lo studente sviluppa un'argomentazione coerente e ben organizzata, dimostrando una buona padronanza del linguaggio e una struttura logico-argomentativa solida. La comunicazione risulta chiara ed efficace.

#### **Capacità di apprendimento, di autovalutazione e di autoregolazione**

Lo studente analizza il proprio percorso di apprendimento in modo chiaro e strutturato, mettendo in evidenza relazioni significative tra le diverse tappe evolutive e dimostrando una buona capacità di riflessione critica.

#### *Votazione 28-30*

#### **Conoscenza e Comprensione**

Lo studente evidenzia una padronanza completa dei concetti, articolando connessioni complesse e fornendo spiegazioni esaustive. I riferimenti teorici sono utilizzati con pertinenza e rigore.

#### **Capacità di applicare conoscenza e comprensione**

Lo studente evidenzia una capacità avanzata di analisi di un fenomeno, individuando e interpretando in modo esaustivo tutti gli elementi salienti. L'applicazione delle conoscenze avviene con rigore metodologico, supportato da un'argomentazione solida e articolata.

#### **Capacità comunicative e argomentative**

Nella prova orale lo studente elabora un'argomentazione solida e articolata, con un impianto logico rigoroso e un elevato livello di coerenza testuale. Il discorso è fluido e ben strutturato.

#### **Capacità di apprendimento, di autovalutazione e di autoregolazione**

Lo studente evidenzia una capacità avanzata di autoriflessione, elaborando un'analisi articolata e approfondita del proprio percorso di apprendimento e sviluppo professionale. Le connessioni tra esperienze formative e concetti teorici risultano chiare, coerenti e rigorose.

## **Orario di ricevimento**

in genere nel pomeriggio tra le 14:30 e le 17:30 ma si suggerisce di prendere appuntamento

## **Sustainable Development Goals**

ISTRUZIONE DI QUALITÀ | ENERGIA PULITA E ACCESSIBILE | IMPRESE, INNOVAZIONE E INFRASTRUTTURE

---