UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI DI MILANO-BICOCCA

COURSE SYLLABUS

Molecular Electronics and Photonics

2627-1-FSM02Q013

Obiettivi

Il corso verte sui fondamenti fisici dei semiconduttori molecolari organici, come molecole coniugate, polimeri e materiali ibridi avanzati, impiegati in fotonica ed elettronica. Nella prima parte del corso, analizzeremo la descrizione quantomeccanica delle proprietà elettroniche di questi materiali, dal livello della singola molecola fino agli aggregati e ai solidi, nonché i principali meccanismi che regolano il trasporto di energia e carica in questi sistemi. Nella seconda parte, ci concentreremo sugli aspetti più applicativi, con una panoramica sulla tecnologia OLED, il fotovoltaico, il laser, le tecniche di imaging a fluorescenza ad altissima risoluzione e la scintillazione per il rilevamento di radiazioni ionizzanti, nonché sulle applicazioni biomediche.

In dettaglio, gli obbiettivi didattici sono:

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 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.

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 basati su meterili coniugati.
5. Tecniche di imagiang a flurorescenza
6. Scintillatori coniugati per la rivelazione ed uso della radiazione ionizzante.
7. Applicazioni all'avanguardia dei materiali coniugati e ibridi in elettronica e fotonica.

CORSI COMPLEMENTARI:
Chemistry of Molecular Materials
Physics of Soft Matter Nanostructures

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. Teire di Marcus per il trasporto di carica. Antenne fotoniche.

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. Fisica ed uso dei processi di scintillationi in materili coniugati luminescenti

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 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).

La graduazione dei voti sarà la seguente:

< 18: votazione insufficiente; non raggiunto il livello minimo di preparazione;
18-21: preparazione su un numero ridotto di argomenti presenti nel programma del corso, con capacità di trattazione e analisi limitate che emergono solo a seguito dell'aiuto e delle domande del docente; competenza espositiva e lessico non sempre corretti, capacità di elaborazione critica limitata;
22-24: preparazione su una parte degli argomenti presenti nel programma del corso, capacità di analisi autonoma limitata, uso di un lessico corretto anche se non del tutto accurato e chiaro e di una capacità espositiva a tratti incerta;
25-27: preparazione su un numero ampio di argomenti trattati nel programma del corso, capacità di svolgere in modo autonomo l'argomentazione e l'analisi critica, capacità di applicazione delle conoscenze ai casi concreti, uso di un lessico corretto e competenza nell'uso del linguaggio disciplinare;
28-30/30L: preparazione completa ed esaustiva sugli argomenti in programma d'esame, capacità personale di trattazione autonoma e di analisi critica dei temi, ottima capacità di pensiero critico e autonomo, piena padronanza del lessico disciplinare e di una capacità espositiva rigorosa e articolata.

Orario di ricevimento

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

Sustainable Development Goals

IMPRESE, INNOVAZIONE E INFRASTRUTTURE