

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI SALERNO

Dipartimento di chimica e biologia

Dottorato in Chimica

XXXI Ciclo

Abstract della Tesi

**Charge transfer in organic materials
with potential applications in
electronics**



Tutor:

Prof. Andrea Peluso

Coordinatore:

Prof. Gaetano Guerra

Candidato:

Alessandro Landi

Matr. 8800100016

ANNO ACCADEMICO 2017-2018

Abstract

La ricerca di materiali elettronici a basso costo ha portato alla sintesi e all'impiego di semiconduttori organici (OSC), una classe di materiali che combinano i vantaggi elettronici dei materiali semiconduttori con i benefici chimici e meccanici dei composti organici. Nonostante l'intensa ricerca, nuovi OSC di solito sono stati scoperti attraverso tentativi ed errori e, anche retrospettivamente, non è stato sempre possibile spiegare perché alcuni materiali mostrino prestazioni migliori di altri. È tuttavia necessario un approccio più efficiente e, a tale riguardo, la computer aided material discovery può essere estremamente vantaggioso. Un numero crescente di nuovi OSC è già stato progettato e migliorato attraverso la modellazione computazionale, la quale richiede la simulazione efficiente di processi di trasporto di carica (CT) che si svolgono in dispositivi basati su OSC.

In questa tesi studiamo e confrontiamo le prestazioni relative di diversi modelli nella simulazione del trasporto di carica negli OSC.

Nella prima parte ci concentriamo sulle diverse proprietà dei semiconduttori organici rispetto ai loro corrispettivi inorganici, i loro benefici e i loro inconvenienti, limitando la nostra analisi ai semiconduttori organici cristallini, che mostrano le più alte mobilità tra tutti gli OSC. In seguito descriviamo alcune delle classi più studiate di materiali OSC, mostrando alcuni casi in cui la progettazione di materiali guidata dalla teoria è già stata applicata ottenendo nuovi materiali con prestazioni elettroniche superiori.

Nella seconda parte di questa tesi ci soffermiamo sulle peculiari proprietà fisiche dei semiconduttori organici e sui motivi che animano il dibattito sul modello teorico più appropriato per la descrizione CT in questi materiali. Analizziamo quindi brevemente punti di forza e aspetti negativi di cinque modelli teorici: la teoria di Marcus, la regola d'oro di Fermi (FGR), l'espansione al secondo ordine dei cumulanti della matrice di densità (SOC), la dinamica quantistica e un approccio recentemente sviluppato, la transient localization theory (TLT). In particolare ci soffermiamo sulla descrizione di alcune strategie approssimate che accelerano significativamente i calcoli garantendo comunque risultati accurati.

Nella terza parte applichiamo i modelli sopra menzionati alla descrizione del trasporto di carica in alcuni degli OSC più studiati, confrontando le loro previsioni con dati sperimentali e discutendo le prestazioni relative di ciascun metodo. I nostri risultati mostrano che le previsioni SOC e TLT sono in buon accordo con i dati sperimentali, e quest'ultimo risulta il metodo migliore a causa del basso costo computazionale e delle assunzioni in ottimo accordo con la fisica dei semiconduttori organici.

Nell'ultima parte di questa tesi ci focalizziamo sulla simulazione del CT negli oligomeri del DNA, un problema attuale in quanto la migrazione della carica a lungo raggio rende il DNA un materiale potenzialmente adatto per la nanoelettronica. La nostra analisi riproduce in modo quantitativo i dati sperimentali pubblicati e ci consente di riconciliare risultati sperimentali in disaccordo sul ruolo dei ponti di timina nel CT in oligomeri del DNA.