

Università degli Studi di Salerno
Dipartimento di Chimica e Biologia “A. Zambelli”



PhD Course in Chemistry
XIV CICLO NUOVA SERIE

Abstract

PhD thesis in:

Small organic molecules for next generation electronics

Tutor:

Prof. Andrea Peluso

PhDStudent:

Amalia Velardo
Matr: 8880700179

Coordinator:

Prof. Gaetano Guerra

Academic year 2014 – 2015

Abstract

In this PhD thesis attention has been focused on the theoretical design of organic small molecules for next generation electronics. The task of this thesis has concerned with the theoretical analysis of the operational performances of small dyes in photovoltaic solar cells, both in bulkheterojunction and dye sensitized solar cells; with particular emphasis on the theoretical analysis of the rates of the elementary electron transfer processes.

A full quantum mechanics procedure for computing the rates of elementary electron transfer processes has been developed. The procedure starts from the Fermi Golden Rule (FGR) expression of the rate of electronic transitions and makes use of a rigorous evaluation of the Franck-Condon weighted density of states, performed by Kubo's generating function approach. The analysis of electron transfer rates has revealed to be a very powerful tool for investigating structure-property relationships for the employment of small organic molecules in photovoltaic solar cells. The methodology has been applied to a class of small organic molecules, which show different power energy conversion efficiencies. The different efficiencies of the dyes have been attributed to very different rates of photoinduced electron transfer, the first step of energy conversion process in any type of photovoltaic solar cell.

The last part of this thesis has been devoted to a very important task for next generation electronics: the rational design of new N-rich fused-ring heteroaromatics small organic molecules for n-type charge transport in thin layers. The substitution of CH units with nitrogen atoms is particularly appealing because, it offers the possibility of tuning the electron donor/acceptor character of the molecule.

Abstract **(versione italiana)**

La tesi di dottorato si colloca nel settore dell'elettronica di nuova generazione, in particolare nella progettazione teorica di molecole organica di piccole dimensioni. Nel lavoro è presentata l'analisi teorica di molecole organiche impiegate in celle solari sia di tipo BHJ che DSSC, dando particolare enfasi ai processi elementari che si verificano nei dispositivi. La procedura, impiegata nello studio delle cinetiche dei processi di trasferimento elettronico, è stata sviluppata impiegando la regola d'oro di Fermi relativa alle velocità delle transizioni elettroniche e avvalendosi della valutazione della densità di stati pesata Franck-Condon mediante l'approccio della funzione generatrice di Kubo. L'analisi delle velocità di trasferimento degli elettroni si è rivelata uno strumento molto potente per studiare le relazioni struttura-proprietà per molecole da impiegare nelle celle solari. La procedura messa a punto è stata applicata ad una classe di piccole molecole organiche, le quali mostrano differenti percentuali di efficienza. Le diverse energie di conversione sono attribuite alle diverse cinetiche dei processi di trasferimento elettronico fotoindotto.

L'ultima parte della tesi è stata rivolta alla progettazione razionale di nuove molecole organiche aromatiche azosostituite da impiegare nell'elettronica per conduzione di tipo n. La presenza di atomi di azoto è particolarmente appetibile poiché offre la possibilità di modulare il carattere donatore/accettore delle molecole.