

All. 1 – Piano delle attività

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca:

Le perovskiti a bassa dimensionalità sono semiconduttori avanzati che stanno attirando crescente interesse per applicazioni in fotovoltaico e fotonica. L'obiettivo del progetto è lo sviluppo di *perovskite quantum wells* in cui i cationi organici non siano limitati al tipico ruolo strutturale, ma partecipino attivamente alle caratteristiche energetiche del materiale migliorandone il trasporto di carica e la luminescenza, anche consentendo la modulazione del tipo di allineamento delle bande di energia delle quantum wells. A questo scopo, il progetto svilupperà una strategia razionale per la creazione di cationi funzionali coniugati π con proprietà di semiconduttori, e dotati delle caratteristiche strutturali e interazioni intermolecolari necessarie a guidare l'auto-assemblaggio a livello supramolecolare delle perovskiti ibride. Il lavoro sarà sviluppato nel contesto del progetto europeo ERC-STG "SUPramolecularly engineered functional PERovskite quantum wells" (SUPER) in sinergia con caratterizzazione spettroscopica e strutturale avanzate e ingegnerizzazione di dispositivi elettroluminescenti, puntando alla creazione di una piattaforma ibrida in grado di sfruttare in modo sinergico le interazioni dei sottoreticoli organici e inorganici con un livello di sofisticazione senza precedenti.

- Progetto di ricerca correlato all'incarico di ricerca in inglese:

Low-dimensional perovskite semiconductors are attracting increasing interest for application in photovoltaic and photonics. The target of the project is to develop advanced perovskite quantum wells where the organic cations are not only limited to the typical templating and structural role, but actively participate in the energetic landscape of the material enhancing the electronic and luminescent properties, also allowing the modulation of the type of band alignment of the quantum well. To reach this goal, this project will develop a logic-driven strategy for the design of π -conjugated functional cations with semiconducting properties also encoding the structural characteristics and atomistic interactions necessary to drive the controlled supramolecular assembly of the hybrid perovskite semiconductor. The work will be performed in the framework of the ERC-STG project "SUPramolecularly engineered functional PERovskite quantum wells" (SUPER) in synergy with advanced spectroscopic and structural characterization and device engineering, aiming at the development of a hybrid material platform fully exploiting synergistic interactions between the organic and inorganic sublattices with an unprecedented level of sophistication.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico:

Supervisione nello sviluppo di cationi funzionali e perovskiti ibride, analisi e interpretazione dati, stesura di articoli scientifici.

- Descrizione delle attività di assistenza alla ricerca che saranno affidate al titolare dell'incarico in inglese:

Supervision in the development of functional cations and hybrid perovskites, data analysis and interpretation, writing of scientific articles.

- Piano delle attività:

Il piano delle attività sperimentali sarà il seguente: a) sviluppo di cationi organici coniugati con livelli modulabili di HOMO-LUMO, tenendo conto dei requisiti geometrici imposti dal reticolo inorganico della perovskite alla larghezza massima della molecola templante; b) sintesi di semiconduttori molecolari lineari (molecular rods) con unità centrali coniugate basate su strutture assiali (e.g. p-oligofenileni, fenilacetileni), strutture molecolari a zig-zag (oligofluoreni, oligotiofeni) e co-oligomeri di moduli assiali e a zig-zag (e.g. oligo(p-fenilvinilene) (PPVs), co-oligomeri tiofene/fenilene (TPCOs)); ottimizzazione del tipo e posizione dei sostituenti laterali per regolare le proprietà optoelettroniche e di autoassemblaggio; d) ottimizzazione delle unità di ancoraggio alla perovskite (posizione, lunghezza, flessibilità, densità di carica) per regolare

l'interazione del catione alla parte inorganica; e) sintesi di perovskiti 2D utilizzando i nuovi cationi funzionali sviluppati, in forma di polveri, cristalli, film sottili; f) caratterizzazione dei composti mediante NMR (liquido e stato solido), XRD, TGA, DSC; g) caratterizzazione fotofisica mediante spettroscopia di assorbimento e fotoluminescenza in temperatura. h) integrazione dei dispositivi elettroluminescenti (light emitting diodes).

- Piano delle attività in inglese:

The experimental work will follow this workflow: a) design of conjugated templating cations with the desired HOMO-LUMO levels, taking into account the strict geometrical requirements on the molecular cross section imposed by the inorganic framework of the perovskite; b) synthesis of molecular rod semiconductors with conjugated cores based on axial rods (e.g. p-oligophenylenes, phenyleneacetylenes), zig-zag molecular rods (e.g. oligofluorenes, oligothiophenes) and co-oligomers of axial and zig-zag modules (e.g. oligo(p-phenylene vinylene) (PPVs) and thiophene/phenylene co-oligomers (TPCOs)); c) engineering of the substituents type and position to adjust the optoelectronic and self-assembling properties; d) engineering of the linker unit (position, length and flexibility, type of tethering unit, charge density) to adjust the binding character of the cation to the inorganic framework of the perovskite; e) layered perovskite synthesis employing the newly developed functional cations; f) characterization via NMR (liquid and solid state), XRD, TGA, DSC; g) photophysical characterization with optical absorption and temperature dependent photoluminescence; h) integration in electroluminescent devices (light emitting diodes)

- Quantificazione figurativa delle attività annue, ai fini della rendicontazione dei costi sui progetti di ricerca:

x 1720 ore annue

- ☐ 1500 ore annue (nel solo caso in cui sia previsto da specifiche iniziative di finanziamento, es. FIS, PNRR, ...)