

PROGRAMMA DI CHIMICA ORGANICA dei Materiali Funzionali (6 CFU)

Laurea Magistrale in CHIMICA DEI MATERIALI AA 2012/2013

Prof. TOMASELLI GAETANO

1. **Forze di Binding non covalenti.** Ion pairing. Ponti salini. Interazioni ione-dipolo. Interazioni dipolo-dipolo. Legame a idrogeno. Geometrie. Forza di legami a idrogeno. Effetti della solvatazione. Effetto dell'elettronegatività. Legami a idrogeno assistiti dalla risonanza. Polarizzazione. Interazioni secondarie. Cooperatività. Effetti π . Interazioni catione- π . Il recettore nicotina. Interazioni π -polari. Interazioni di stacking. Interazioni arene-perfluorene. Interazioni π donatore-accettore. Folding controllato da donatore-accettore. Interazioni ione-dipolo indotto. Interazioni dipolo-dipolo indotto. Effetto idrofobico. Aggregazione di composti organici. Origine dell'effetto idrofobico.

2. **Riconoscimento molecolare.** Cooperatività. Compensazione entalpia-entropia. Complementarietà e preorganizzazione. Tweezers e Clefts. Riconoscimento molecolare con un largo contributo dell'ion pairing. Riconoscimento molecolare con un largo contributo del legame idrogeno. Strutture rappresentative. Riconoscimento molecolare con un largo contributo dell'effetto idrofobico. Cicloestrine. Ciclofani. Controllo termodinamico nella chimica supramolecolare. Assemblaggio di architetture complesse.

3. **Self-assembly.** Self-assembly attraverso i composti di coordinazione. The directional-bonding approach. The weak-link approach. Self-assembly attraverso il legame idrogeno. Architetture supramolecolari. Catenani, rotaxani, knots. Composti contenitori. Carcerandi, semicarcerandi, criptofani. Capsule molecolari. Macchine molecolari.

4. **Materiali organici semiconduttori.** Bande molecolari. Polimeri coniugati. Proprietà. Polaroni. Bipolaroni. Solitoni. Fotoluminescenza. Elettroluminescenza. OLED. OLED single layer. OLED a doppio strato. Considerazioni energetiche. OLED multilayer. Strato emettitore. Efficienza OLED. Polimeri coniugati negli OLED. Materiali a basso peso molecolare negli OLED. Emettitori trasportatori di elettroni. Materiali bloccanti di lacune. Materiali trasportatori di lacune. Emettitori dopanti. OLED fosforescenti. Complessi dei metalli di transizione negli OLED.

5. **Celle solari organiche.** Celle solari. Principi di funzionamento. Giunzione p-n. Celle fotovoltaiche organiche e polimeriche. Principi di funzionamento. Tipologie di celle. La cella di Graetzel. Celle polimero/colorante. Celle polimero/polimero. Celle polimero/fullerene. Celle polimero/quantum-dot.

6. **Polimeri coniugati.** Sintesi: metodi classici. Polimerizzazione mediante omoaccoppiamento ossidativo. Sintesi di polimeri coniugati: metodologie organometalliche. Reazione di cross-coupling. Reazione di Suzuki-Miyaura. Reazione di Heck.

Testi Consigliati

1. Appunti dalle lezioni