

Attualità

GLOBAL CHALLENGES IN MATERIALS SCIENCE

Daide Bonifazi^a, Tatiana Da Ros^b, Paolo Tecilla^b, Luigi Vaccaro^c

^aInstitut für Organische Chemie, Universität Wien, Austria

^bDipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi di Trieste

^cDipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie, Università degli Studi di Perugia

Breve resoconto del primo congresso scientifico del progetto ITN "Tailored materials for Sustainable Technologies: programming functional molecular components through Boron-Nitrogen doping" (STiBNite, Grant Agreement No. 956923) coordinato dal Prof. Daide Bonifazi, Università di Vienna, Austria.



Nel contesto dei materiali per l'energia, il progetto STiBNite intende sviluppare, grazie alla progettazione, sintesi e caratterizzazione di nuove strutture, una generazione di semiconduttori organici innovativi, le cui proprietà ed efficienza siano modulate da molecole contenenti boro e azoto (BN). STiBNite è il risultato di un'ambiziosa collaborazione fra sette gruppi accademici [Vienna (A), Trieste (I), Perugia (I), Leida (NL), Louvain (B), Monaco, TUM (D), Groningen (NL)] e tre aziende high-tech [Applied Nanolayers BV (NL), Graphene-XT Srl (I), AIMPLAS (ES)] che interagiranno in modo sinergico, con competenze uniche in sintesi organica, scienza dei materiali, scienza delle superfici, caratterizzazione dei materiali, modellazione e ingegneria dei dispositivi.

STiBNite è anche un progetto di formazione innovativa e pionieristica che ha l'obiettivo di forgiare 15 giovani ricercatori grazie a un programma multidisciplinare e multisettoriale che li porterà ad affrontare importanti sfide globali nella scienza dei materiali, con una particolare attenzione allo sviluppo di strategie di "doping" BN che contemplano aspetti di progettazione, sintesi, caratterizzazione fisica, modellazione e applicazioni del dispositivo.

Tra i tanti materiali che hanno cambiato il nostro stile di vita nel corso dell'ultimo secolo, i semiconduttori inorganici di silicio drogato occupano sicuramente una posizione preminente e hanno costituito le fondamenta dell'elettronica moderna. Il drogaggio consente di allineare le bande di assorbimento del silicio a quelle del semiconduttore, sintonizzando la sua conduttività. Tuttavia, i dispositivi avanzati basati su questo elemento sono costosi, meccanicamente fragili e le loro proprietà sono limitatamente modulabili. I costi di produzione elevati e la loro rigidità limitano l'immediata implementazione della tecnologia del silicio in dispositivi flessibili e miniaturizzati. Pertanto, non sorprende che siano stati investiti notevoli sforzi nella ricerca di materiali sostitutivi più performanti.

STiBNite si colloca in questo ambito, offrendo una prospettiva in tema di semiconduttori organici drogati con boro e azoto.

L'attenzione di questo progetto è stata incentrata verso il grafene, identificato come fra i più promettenti candidati per sostituire il silicio nei dispositivi. L'interesse per questo materiale deriva da proprietà quali spessore dello strato atomico, ampia area superficiale, ottime resistenza meccanica e flessibilità, elevata mobilità del vettore, conduttività termica, nonché elevata stabilità termica e chimica (*Nanoscale*, 2015, **7**, 4598). Il grafene esfoliato però non ha *bandgap* (*Science*, 2004, **306**, 666) e richiede ulteriori modifiche strutturali (spesso introdotte in modo incontrollato e difficilmente riproducibile) per essere impiegato in dispositivi optoelettronici o applicazioni ad attivazione luminosa (ad es. materiali per fotocatalisi e produzione di combustibile solare). Ottenere il controllo delle proprietà di *bandgap* dei nuovi materiali a base grafenica in modo da poterne controllare in modo

riproducibile le proprietà è, quindi, una sfida fondamentale nella fabbricazione di semiconduttori organici a strato singolo.

Tra i diversi semiconduttori organici disponibili, grafeni molecolari come gli idrocarburi policiclici aromatici (IPA) hanno attratto grande attenzione. Sfruttando la ricchezza della sintesi organica e della chimica supramolecolare, è possibile modulare le proprietà di *bandgap* dei materiali in diversi modi, ad esempio con l'inclusione di "difetti" che possano promuovere le interazioni tra le singole molecole che ne governano l'organizzazione in una fase condensata, ma anche la sostituzione di sistemi di carbonio-carbonio con analoghi isostrutturali e isoelettronici.

Quest'ultima strategia è l'unica che può adattare efficacemente le proprietà di *bandgap* degli IPA mantenendo la continuità elettronica e strutturale. Tra i diversi approcci certamente la sostituzione di porzioni C=C con coppie covalenti BN isostrutturali e isoelettroniche sta emergendo come uno dei metodi più versatili per modulare il *bandgap* degli IPA.

In questo contesto culturale si delineano anche le sfide future di una parte della scienza dei materiali e da qui nasce STiBNite, che punta alla costruzione di moduli molecolari BNC per la realizzazione di dispositivi elettroluminescenti. Il progetto deriva da una iniziale collaborazione tra il Prof. Davide Bonifazi (Vienna) e IMDEA (Spagna), grazie alla quale è stato possibile dimostrare che il benzocoronene drogato con B₃N₃ porta a risultati di foto- ed elettroluminescenza bianca multiemissiva eccellenti, ottenendo una delle più luminose, più stabili ed efficienti celle elettrochimiche monocomponente a emissione di luce bianca preparate finora (*Adv. Funct. Mater.*, 2020, **30**, 1906830. DOI: [10.1002/adfm.201906830](https://doi.org/10.1002/adfm.201906830)).

Il consorzio ITN STiBNite ha come obiettivo formare con nuove competenze professionali 15 giovani ricercatori impegnati nello sviluppo di materiali semiconduttori organici drogati con BN per lo sviluppo di tecnologie sostenibili. Inoltre STiBNite mira a introdurre un preciso approccio per la preparazione di composti policiclici aromatici drogati con moduli BN con proprietà optoelettroniche programmabili, che possano essere sviluppati ulteriormente su superfici 2D e in sistemi nanoparticellari 3D.

Unitamente a questi due obiettivi, STiBNite mira inoltre a condividere le proprie attività scientifiche e di formazione con un ampio coinvolgimento di aziende e partner accademici, grazie all'organizzazione di eventi aperti al pubblico.

Con questa filosofia, i Proff. Tatiana Da Ros e Paolo Tecilla dell'Università degli Studi di Trieste hanno organizzato l'evento dal titolo "Global Challenges in Materials Science", quale primo incontro scientifico del progetto ITN STiBNite. Questo simposio ha avuto luogo lo scorso 30 marzo 2021 e ha ospitato sei relatori coinvolti in diversi aspetti della chimica dei materiali.

La Prof. Danila Moscone (Università degli Studi di Roma Tor Vergata, Italia) ha parlato di biosensori stampati su carta come soluzione per un approccio più sostenibile ai dispositivi elettrochimici. Il Prof. Stefan Wuttke (Ikerbasque, Spagna) ha illustrato la preparazione e l'utilizzo di "Metal-Organic Frameworks" (MOF) per applicazioni biomediche, mentre il Dr. Wolfgang Mildner (MSWTEch, Germania) ha fatto un quadro completo sui dispositivi elettronici flessibili sia dal punto di vista della ricerca pura che delle applicazioni di mercato.

Il Prof. Mauricio Terrones (Penn State University, USA) è entrato nel cuore delle tematiche vicine a STiBNite, parlando nel dettaglio dei difetti dei materiali metallici dicalcogenidi (MX₂, dove X = S, Se o Te) e del loro processo di doping e come queste modificazioni influenzino le proprietà magnetiche, elettroniche e catalitiche dei materiali. Il Prof. Klaus Müllen (Max Planck Institute, Germania) ha presentato la sintesi di strutture aromatiche policicliche ingegnerizzate a dare nanostrutture grafeniche, mentre il Prof. Brent S. Sumerlin (University of Florida, USA) ha descritto le tecniche di preparazione di nuovi materiali attraverso la polimerizzazione radicalica.

Il simposio, organizzato in via telematica e aperto anche al pubblico esterno al progetto, è stato seguito da una novantina di persone che hanno partecipato attivamente ponendo molte domande ai relatori. Nonostante le restrizioni dovute alla modalità telematica dell'incontro, l'interazione tra gli oratori, gli studenti di STiBNite, i ricercatori coinvolti nel progetto e il pubblico è stata molto buona, con una fruttuosa discussione scientifica che ha arricchito la base culturale del consorzio di STiBNite, fornendo ulteriori stimoli per la prosecuzione del progetto.