

Identificazione, progettazione e ottimizzazione  
computazionale di molecole organiche per  
applicazioni in dispositivi optoelettronici



UNIVERSITÀ  
DI SIENA  
1240

**Prof. Daniele  
Padula**

**Dipartimento di  
Biotecnologie,  
Chimica e  
Farmacia  
Università di  
Siena**

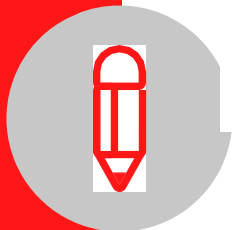
## L'attività di ricerca



Le attività di ricerca si focalizzano sull'identificazione computazionale di nuovi materiali organici per applicazioni in dispositivi optoelettronici finalizzati alla produzione di energia pulita e ridotto consumo energetico (celle solari, OLEDs, OFETs), con studi finalizzati alla comprensione e caratterizzazione di processi fotofisici fondamentali che avvengono in tali dispositivi. In questo ambito, sfruttiamo un'ampia gamma di metodi computazionali che spaziano dalla meccanica quantistica, alla fisica classica, con l'ausilio di metodi di Machine Learning.

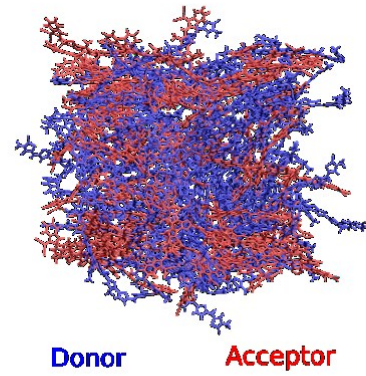
Inoltre, vengono realizzati studi meccanicistici di reazioni organiche finalizzate alla sintesi industriale di importanti precursori sintetici o al rilascio di piccole molecole organiche (farmaci) in condizioni blande.

Disegni e Immagini

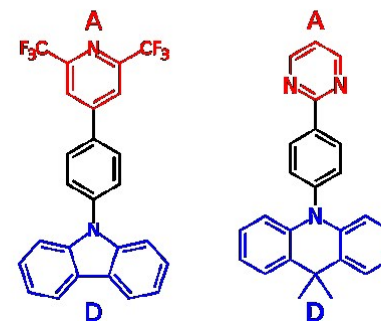


Organic Photovoltaics

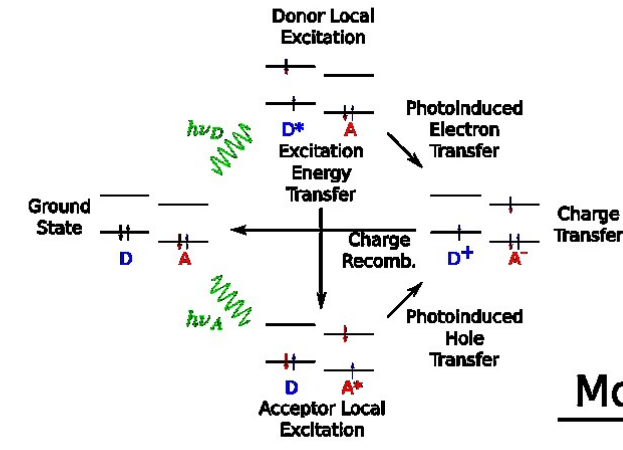
Classical MD  
FF parameterisation



OLEDs

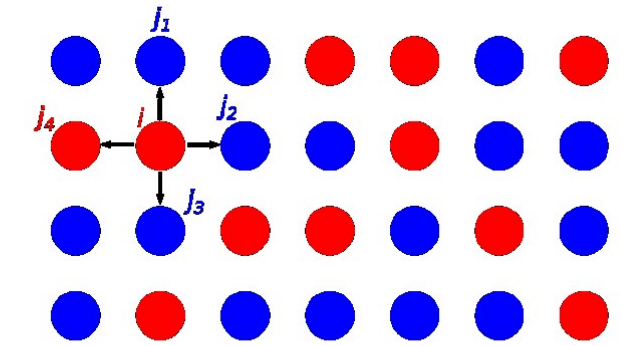
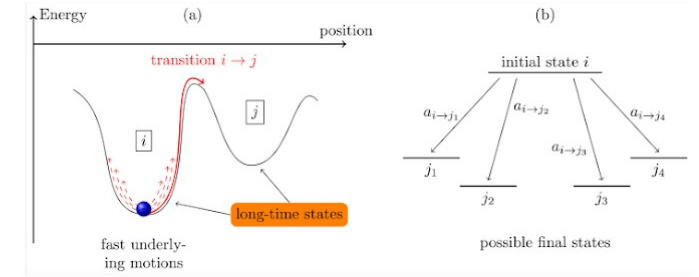


Electronic Modelling  
of Fundamental Processes

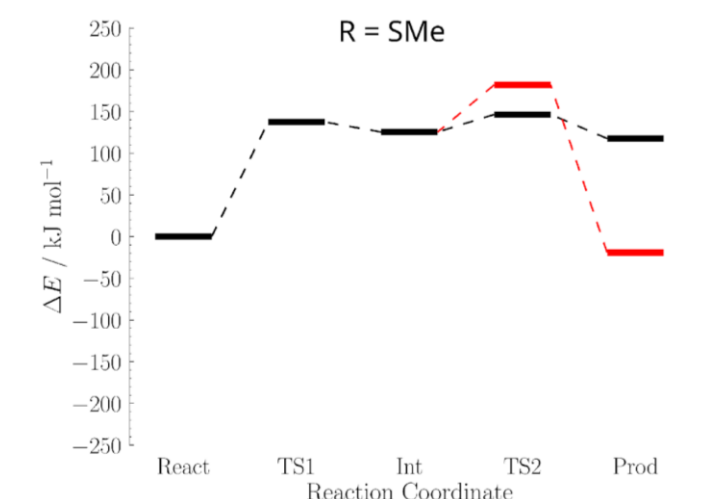
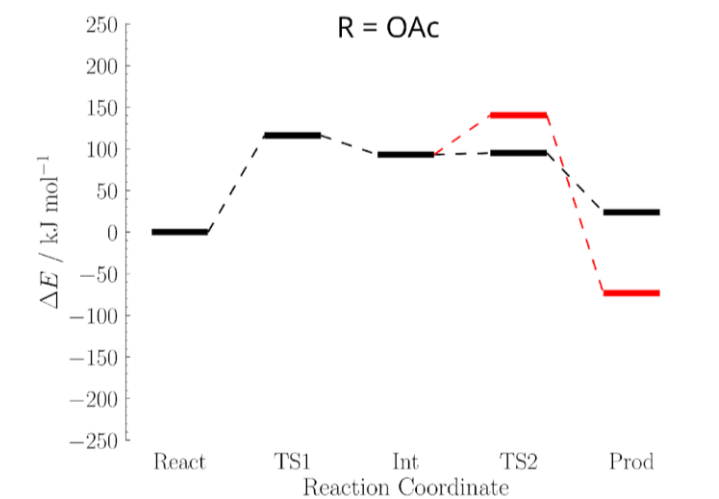


Morphology  
Rates

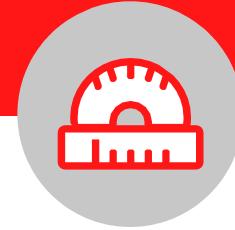
Model Reduction



Reaction mechanisms for the release of small molecules (drugs).



## Strumenti, Tecnologie e Servizi



La strumentazione utilizzata è una infrastruttura di High-Performance Computing presente presso il nostro Ateneo, e risorse nazionali accessibili su richiesta (CINECA). I servizi erogabili ad imprese sono studi teorici finalizzati alla comprensione di un determinato processo (reazione chimica o funzionamento di un dispositivo optoelettronico), con l'obiettivo di migliorarne l'efficienza.

## Possibili applicazioni e collaborazioni



Abbiamo già effettuato studi meccanicistici per processi industriali per una azienda farmaceutica italiana (Recipharm). Abbiamo collaborato con aziende straniere interessate alla messa a punto di nuovi materiali organici per display di dispositivi elettronici.

Inoltre, abbiamo in corso una collaborazione con la Lavazza e l'ICCOM-CNR di Pisa per la messa a punto di materiali polimerici per la realizzazione di capsule compostabili per il caffè.

Per maggiori informazioni



## Ufficio di Trasferimento Tecnologico dell'Università di Siena

Sede: Banchi di sotto, 55 - Siena

Sito web: <http://research.unisi.it>

E-mail: [ricerca@unisi.it](mailto:ricerca@unisi.it) - [liaison@unisi.it](mailto:liaison@unisi.it)

Per maggiori informazioni



## Ufficio Regionale di Trasferimento Tecnologico

Sede: Via Luigi Carlo Farini, 8 - 50121 Firenze, FI

E-mail: [urtt@regione.toscana.it](mailto:urtt@regione.toscana.it)