



## Relazione finale della visita nell'ambito del programma STM

Fruitore: Prof. Luisa De Cola,

Istituto di afferenza: Université de Strasbourg, Institut de Science et d'Ingénierie Supramoléculaires (ISIS)

con qualifica full Professor (Class Exceptionnelle)

Istituzione ospitante: Istituto di Chimica dei Composti Organometallici del CNR

Responsabile Scientifico: Dr. Alessandro Mordini

Dipartimento di afferenza: Scienze Chimiche e Tecnologie dei Materiali

Titolo del programma: Water soluble and processable photo/electroactive materials

La visita della Prof.ssa De Cola ha avuto come obiettivo quello di pianificare collaborazioni fattive tra l'ISIS e ICCOM-CNR sullo sviluppo di nuove molecole per la costruzione di celle fotovoltaiche di terza generazione (DSSC). In particolare lo scopo principale è stato quello di verificare la possibilità di ottenere materiali interamente processabili ed utilizzabili in acqua e senza utilizzare metalli pesanti che sono normalmente i costituenti principali dei coloranti per celle DSSC. Ovviamente tutto questo mantenendo comunque le caratteristiche fondamentali per un uso adeguato come fotosensibilizzatori per celle fotovoltaiche quindi con ampia capacità di assorbimento luminoso (alti coefficienti di estinzione molare e lunghezze d'onda d'assorbimento possibilmente fino a 900 nm), alta efficienza, capacità di funzionare con coppie redox solubili in acqua (ad esempio a base di cobalto).

I primi esperimenti sono stati pianificati e condotti durante la visita della Prof.ssa De Cola e hanno riguardato la sintesi di coloranti puramente organici (quindi senza metalli di transizione) a struttura D- $\pi$ -A. I coloranti di questo tipo sono costituiti da molecole coniugate in cui sono presenti un gruppo donatore (D, generalmente un'ammina aromatica), un gruppo spaziatore ( $\pi$ , generalmente un sistema coniugato contenente anelli benzenici e tiofenici) e un gruppo accettore (A, generalmente un acido cianoacrilico).

I nostri primi studi hanno riguardato molecole in cui il classico componente accettore del fotosensibilizzatore (acido carbossilico), è stato rimpiazzato da un gruppo trialcossisilanico. Mentre infatti il gruppo carbossilico è suscettibile di distacco dal biossido di titanio in ambiente acquoso, il legame tra il biossido di titanio ed il gruppo silossanico è più stabile e quindi resistente anche a condizioni idrolitiche.

All'uso di gruppi accettori silossanici, stabili in acqua una volta ancorati sul biossido di titanio, è stata anche accoppiata un'accurata analisi di possibili modificazioni strutturali del fotosensibilizzatore per renderlo solubile in acqua. A questo scopo si sono esaminate procedure sintetiche semplici ed efficienti per accedere a librerie di molecole in cui la parte donatore o la parte spaziatore del colorante siano decorate con gruppi capaci di forti interazioni con l'acqua come ad esempio gruppi solfonato e catene poliossidrilate (PEG). La scelta delle procedure compatibili col solvente acquoso è ricaduta per ora su metodi di coupling tipo Suzuki che consentono una buona versatilità anche in fase acquosa.



Ovviamente nel breve periodo della visita della Prof.ssa De Cola si sono gettate le basi scientifiche per questo progetto ambizioso sfruttando le eccellenti competenze della De Cola sul campo dei nuovi materiali e della comprensione dei fenomeni di interazione tra i coloranti ed i materiali su cui sono assorbiti. La maggior parte dell'attività sperimentale verrà poi condotta nei rispettivi laboratori di ICCOM ed ISIS sfruttando questi iniziali approcci al tema di ricerca e le competenze di entrambe i partners.

L'avvio di questi studi focalizzati inizialmente su nuovi coloranti per celle DSSC, potrà aprire anche nuove prospettive in settori quali il water splitting in cui le caratteristiche delle molecole ottenute attraverso le procedure sintetiche sopra descritte, sono fondamentali per il funzionamento dei dispositivi.

Firma del Proponente