

**MISSION
INNOVATION**

accelerating the clean energy revolution

POA MATERIALI AVANZATI PER L'ENERGIA**PROGETTO IEMAP - Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per
l'Energia**

D1.20 - Implementazione di un workflow computazionale per il calcolo automatizzato delle velocità di conversione dei precursori

Juliette Zito, Gabriele Saleh, Liberato Manna

**ISTITUTO
ITALIANO DI
TECNOLOGIA**

D1.20 - Implementazione di un workflow computazionale per il calcolo automatizzato delle velocità di conversione dei precursori

Juliette Zito (IIT), Gabriele Saleh (IIT), Liberato Manna (IIT).

Dicembre 2024

Report MISSION INNOVATION

Ministero dell'Ambiente e della Sicurezza Energetica - ENEA
Mission Innovation 2021-2024 - III annualità

Progetto: Piattaforma accelerata per i Materiali per l'Energia

Work package: 1

Linea di attività 1.17: Predisposizione codici e workflow per automatizzazione dei calcoli sui precursori

Responsabile del Progetto: Massimo Celino (ENEA)

Responsabile della LA: Liberato Manna (IIT)

Indice

1	Risultati attesi	5
2	Risultati ottenuti	5
2.1	Avanzamento della ricerca rispetto allo stato dell'arte internazionale con riferimento ai risultati ottenuti	5
3	Prodotti attesi	5
4	Prodotti ottenuti	5
5	Analisi degli scostamenti su attività e risultati	5
6	Sintesi delle attività svolte	6
7	Dettaglio delle attività svolte	6
8	Contributo delle eventuali consulenze alle attività sopra descritte	7
9	Pubblicazioni scientifiche	7
10	Eventi di disseminazione	8
11	Descrizione dei risultati ottenuti	8

Indice delle figure

Figura 1. Piattaforma computazionale per lo screening dei leganti. a) illustrazione delle principali interazioni che governano l'azione dei leganti nei nanocristalli; b) schema dei vari step di screening che permettono di selezionare i (pochi) leganti più adatti a partire dal database di molecole PubChem (10^8 molecole); due step rappresentativi sono schematizzati a destra: il calcolo della proprietà di solvatazione tramite metodi di tipo machine learning (Fast Sigma) e il calcolo della binding energy attraverso semplici simulazioni quantistiche high-throughput.	9
Figura 2. Distribuzione delle classi di leganti di interesse per i quantum dot.....	9
Figura 3. Confronto dei modelli COSMO e FastSigma nel calcolo dei profili sigma utili per stimare la solvatazione per vari leganti.....	10
Figura 4 (a) Sistemi modello di un nanocristallo di InAs visti dalle faccette (111) (i, in arancione) e (-1-1-1) (ii, in azzurro) come utilizzati nelle simulazioni di dinamica molecolare. (b, c) Radial distribution function (RDF) e numero cumulativo (CN) di ligandi per le molecole di OA (b) e TOA (c) tracciate a diversi rapporti volumetrici TOA:OA. (d, e) Rappresentazione delle prime (d, ad un raggio $r = 3,0 \text{ \AA}$) e seconde (e, ad un raggio $r = 6,8 \text{ \AA}$) sfere di leganti nel modello: le molecole di OA sono rappresentate in rosso e quelle di TOA in blu. (f) Concentrazioni di ligandi di OA sulle faccette (111) e (-1-1-1) e di TOA per tutte le faccette a diversi rapporti TOA:OA.	11

1 Risultati attesi

- Calcolo delle velocità di conversione da precursori, con utilizzo di simulazioni ab-initio MD o ricerche di stato di transizione DFT.
- Individuazione del numero di precursori da analizzare atomisticamente, inclusi i sostituenti organici.
- Automatizzazione della ricerca degli stati di transizione attraverso la piattaforma QMFlows, dove i modelli machine learning verranno integrati con i dati sperimentali provenienti dalle sintesi.

2 Risultati ottenuti

- Software automatizzato per la selezione automatizzata ("high-throughput") dei leganti più adatti per stabilizzare i quantum dot, basato su big data (database molecolari), analisi strutturali, relazione struttura-proprietà (il quale è una sorta di archetipo di machine learning applicato alla chimica), e simulazioni quantistiche semplificate
- Comprensione del comportamento dinamico dei leganti sui quantum dot attraverso simulazioni di dinamica molecolare
- Dimostrazione dell'impatto dei leganti e dalla miscela di solventi sulla forma finale di quantum dot InAs

2.1 *Avanzamento della ricerca rispetto allo stato dell'arte internazionale con riferimento ai risultati ottenuti*

- Il software per la selezione dei leganti per quantum dot non ha, al meglio delle nostre conoscenze, precedenti nella letteratura scientifica: è un'idea assolutamente originale
- Il comportamento dinamico dei tipici leganti per quantum dots è stato qui studiato nella sua interezza grazie allo sviluppo di potenziali interatomici che hanno permesso di simulare la dinamica dei leganti per periodi di tempo estesi (centinaia di nanosecondi, corrispondenti a 10^8 calcoli di forze)
- L'impatto dei leganti organici sull'evoluzione dei quantum dot durante la loro sintesi è stato studiato in dettaglio, dimostrando come la composizione del solvente determini la forma dei quantum dot (tetraedrica oppure tetrapodica)

3 Prodotti attesi

Nessun prodotto atteso, solo questo rapporto tecnico.

4 Prodotti ottenuti

Pubblicazioni scientifiche e software per la selezione automatica dei leganti per i quantum dots.

5 Analisi degli scostamenti su attività e risultati

Sebbene non un vero e proprio scostamento dai risultati, si menziona qui la scelta di utilizzare le simulazioni atomistiche (principalmente dinamica molecolare ma anche chimica quantistica) in misura maggiore rispetto a quanto inizialmente previsto. La scelta deriva dalla constatazione, durante le attività svolte (si veda la sezione 9, pubblicazioni) di un grande complessità nel meccanismo di conversione dei precursori e dell'azione dei leganti. Da ciò ne consegue che una descrizione realistica dei nanocristalli richiede simulazioni ad alta accuratezza quali quelle atomistiche (classical molecular dynamics e density functional theory).

6 Sintesi delle attività svolte

- Sviluppo di un software per la determinazione dei leganti più adatti alla stabilizzazione dei vari tipi di quantum dot
- Simulazioni di dinamica molecolare per comprendere a fondo il comportamento dei leganti organici nei quantum dot in soluzione
- Simulazioni di chimica quantistica e dinamica molecolare per prevedere l'effetto dei leganti sulla forma finale dei quantum dot

7 Dettaglio delle attività svolte

È stata creata una piattaforma computazionale per lo screening dei leganti più adatti per un determinato tipo di quantum dot. La piattaforma consiste in diversi step, schematizzati in Figura 1 nella sezione 11, per l'analisi delle proprietà delle molecole in modo da escludere le meno adatte:

- Vaglio della struttura in formato SMILES¹ per conservare solo quelle molecole che contengono un solo gruppo di ancoraggio
- Esame della temperatura di ebollizione e di fusione per eliminare le molecole che a temperatura ambiente non sono liquide
- Esame delle proprietà di solvatazione attraverso algoritmi specifici (si veda sezione 11 di questo documento)
- Esame dell'ingombro sterico attraverso procedura di linearizzazione e calcolo dell'angolo di cono della catena laterale
- Calcolo della 'binding energy' sul quantum dot di interesse
- Vaglio della facilità con cui la molecola può essere sintetizzata

Per il lavoro sui quantum dots InAs tetrapodici, sono stati utilizzati una combinazione di metodi computazionali avanzati per esplorare i meccanismi che regolano la crescita e le proprietà strutturali ed elettroniche dei tetrapodi colloidali di InAs. Un aspetto cruciale dello studio è stato l'impiego di simulazioni di dinamica molecolare classica (MD) per indagare il comportamento dei leganti sulla superficie dei nanocristalli. Sono stati costruiti modelli dettagliati di nanocristalli di InAs partendo dalla struttura bulk con reticolo zinc-blend, tagliata lungo le faccette (111) ricche di indio per ottenere un tetraedro regolare. Per garantire la neutralità di carica del sistema, sono stati introdotti ioni Cl^- , il cui posizionamento sulla superficie è stato ottimizzato attraverso simulazioni MD. Il sistema è stato simulato in condizioni realistiche, considerando il solvente (toluene) e variando il rapporto tra oleilammina (OA) e triottilammina (TOA) per replicare le condizioni sperimentali. Le simulazioni sono state condotte utilizzando il pacchetto GROMACS², applicando force field appositamente parametrizzati per modellare con precisione le interazioni tra leganti e superficie del nanocristallo. Attraverso il calcolo delle funzioni di distribuzione radiale (RDF), è stato possibile analizzare la disposizione dei leganti rispetto alla superficie dei nanocristalli e determinare le densità di leganti legati alle diverse faccette cristallografiche. I risultati hanno mostrato che l'OA tende a legarsi fortemente alle faccette (111), stabilizzandole, mentre il TOA, a causa del suo ingombro sterico, presenta un legame più debole, localizzandosi principalmente su spigoli e vertici. Questa diversa affinità di legame è risultata cruciale per comprendere come la variazione del rapporto TOA:OA influenzi la crescita dei nanocristalli, favorendo la formazione di strutture tetrapodali a rapporti elevati di TOA. Per approfondire le

¹ https://en.wikipedia.org/wiki/Simplified_Molecular_Input_Line_Entry_System

² H.J.C. Berendsen, D. van der Spoel, and R. van Drunen, "GROMACS: A message-passing parallel molecular dynamics implementation," *Comp. Phys. Comm.*, **91** 43–56 (1995)

proprietà elettroniche dei tetrapodi di InAs e spiegare le loro caratteristiche ottiche peculiari, sono stati eseguiti calcoli teorici basati sul modello k-p. Utilizzando il software COMSOL³, i ricercatori hanno applicato un approccio single-band per descrivere gli stati di bordo della banda di conduzione e di valenza nei nanocristalli, considerando sia modelli sferici che tetraedrici (compresi i tetrapodi con bracci di diversa lunghezza). Il modello ha incluso anche l'accoppiamento spin-orbita e il parametro di Kane per un'accurata descrizione delle interazioni tra le bande.

Nel lavoro per comprendere la dinamica dei leganti nei quantum dot, è stata condotta un'approfondita indagine computazionale per analizzare la distribuzione, il legame e la mobilità dei leganti organici sulla superficie dei nanocristalli (NC) di CdSe. Lo studio si è focalizzato principalmente sull'utilizzo di simulazioni MD per esplorare i meccanismi atomistici che regolano l'interfaccia inorganica-organica di questi materiali. Il primo passo è stato la costruzione di un modello di nanocristallo di CdSe che riflettesse fedelmente le caratteristiche osservate sperimentalmente. Il modello è stato ricavato da una struttura bulk di CdSe con reticolo zinc-blenda, intagliata in una forma cubottaedrica di circa 4 nm di diametro. Questo modello ha presentato una leggera sovrabbondanza di atomi di cadmio rispetto al selenio, in linea con i dati sperimentali. Il nanocristallo risultante ha mostrato superfici con diverse faccette: faccette Cd-ricche (100) e (111), faccette Se-ricche (-1-1-1) e superfici di tipo (110), ognuna caratterizzata da differenti configurazioni atomiche e livelli di coordinazione degli atomi di superficie. Le simulazioni di dinamica molecolare sono state eseguite utilizzando il pacchetto GROMACS², con l'impiego di un force field specificamente parametrizzato per i sistemi CdSe. Sono state condotte più di 300 simulazioni indipendenti per ottenere una distribuzione statisticamente significativa dei leganti oleato sulla superficie dei nanocristalli, raggiungendo un tempo totale simulato totale di circa 10 μ s. Inizialmente, i leganti sono stati posizionati casualmente su una sfera virtuale a circa 1 nm dalla superficie del NC, con i gruppi carbossilati orientati verso il centro. Le simulazioni sono state avviate in condizioni di vuoto utilizzando un ensemble microcanonico (NVE) a 500 K per circa 20 ns, permettendo ai leganti di muoversi verso la superficie e legarsi alle faccette del NC. Successivamente, i sistemi sono stati solvati in diclorometano e sottoposti a una fase di rilassamento in condizioni isoterme-isobariche (NpT) a 1 atm e 500 K, seguita da un raffreddamento graduale fino a temperatura ambiente (298 K). Questo protocollo ha consentito di studiare la distribuzione dei leganti in un ambiente realistico e la loro evoluzione dinamica fino al raggiungimento di uno stato di equilibrio. Un aspetto cruciale delle simulazioni è stato lo studio delle modalità di legame dei leganti oleato con la superficie del NC. Sono stati identificati diversi tipi di legame, tra cui configurazioni che includono legami chelanti e a ponte tra i gruppi carbossilati dei leganti e gli atomi di Cd sulla superficie. Un altro aspetto investigato è stato il ruolo dei difetti di superficie, in particolare la presenza di atomi di Se sotto-coordinati (Se-2c), che possono agire come stati trappola per lacune di carica. Le simulazioni hanno mostrato che questi stati si formano e si dissolvono spontaneamente su scale temporali dell'ordine di nanosecondi, principalmente in prossimità di difetti strutturali o a causa di riorganizzazioni locali della superficie. La presenza di leganti ben distribuiti e stabili contribuisce a ridurre la densità di questi difetti, migliorando potenzialmente le proprietà ottiche dei nanocristalli.

8 Contributo delle eventuali consulenze alle attività sopra descritte

Nessuna consulenza.

9 Pubblicazioni scientifiche

³ COMSOL Multiphysics®. www.comsol.com. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.

- Liu, Z., Pascazio, R.,..., Zhu, D.,..., Infante, I., De Trizio, L. & Manna, L. (2023). Colloidal InAs Tetrapods: Impact of Surfactants on the Shape Control. **Journal of the American Chemical Society**, 145(33), 18329-18339.
- Cosseddu, S., Pascazio, R., Giansante, C., Manna, L., & Infante, I. (2023). Ligand dynamics on the surface of CdSe nanocrystals. **Nanoscale**, 15(16), 7410-7419.
- L. De Trizio, I. Infante, & L. Manna (2023). Surface chemistry of lead halide perovskite colloidal nanocrystals. **Accounts of Chemical Research**, 56(13), 1815-1825.

10 Eventi di disseminazione

- J. Zito “Computational Chemistry for Quantum Dots”, Workshop. Materials for Energy, Storage and Renewable Energy designed by Supercomputing, Artificial Intelligence Tools and Big Data, September 21, 2024, online
- J. Zito “A Universal Database of Surface Ligands in Colloidal Semiconductor Nanocrystals” Nanoinnovation 2024, September 09- September 13, 2024, Rome, Italy
- J. Zito: “An Automated Tool for the Construction of Semiconductor Nanocrystals” Nanoinnovation 2023, September 18- September 22, 2023, Rome, Italy

11 Descrizione dei risultati ottenuti

È stato ultimato il software per il design e selezione dei migliori leganti per un nanocristallo, le cui fasi di sviluppo iniziali sono state descritte nel deliverable D1.19. In particolare, i vari pacchetti software riguardanti i leganti per quantum dot sono stati inseriti in una piattaforma computazionale che, dato un database di molecole come PubChem, seleziona la/e molecola/e più adatta/e in base a vari criteri di screening (Figura 1), principalmente legati a interazione legante-nanocristallo, interazione tra i leganti (ingombro sterico) e interazione legante-solvente (solubilità del nanocristallo coi leganti). Questi criteri sono basati su considerazioni di chimica generale, simulazioni di chimica quantistica, e predizioni di machine learning (sezione 7 di questo documento).

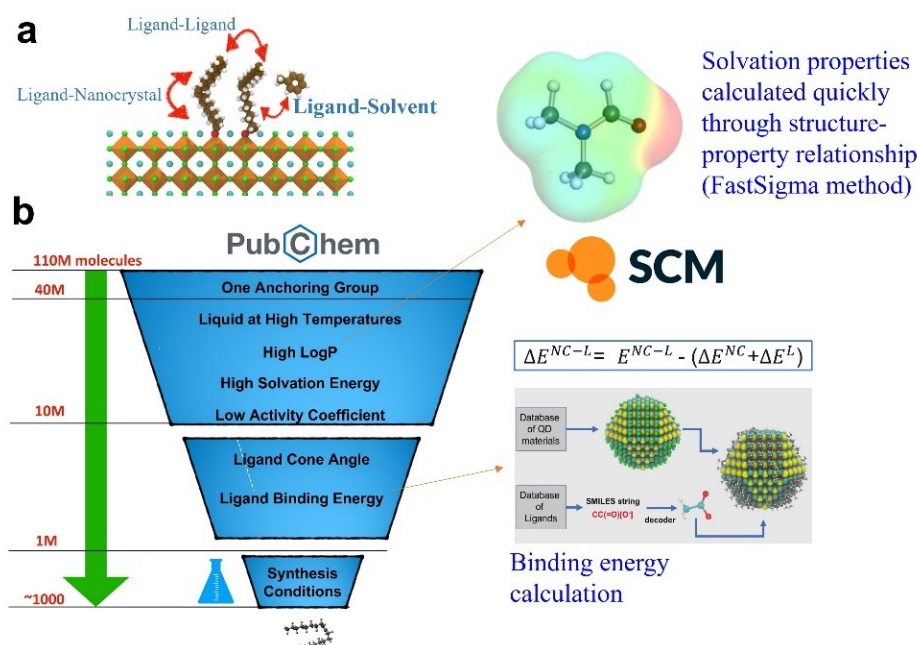


Figura 1. Piattaforma computazionale per lo screening dei leganti. a) illustrazione delle principali interazioni che governano l'azione dei leganti nei nanocristalli; b) schema dei vari step di screening che permettono di selezionare i (pochi) leganti più adatti a partire dal database di molecole PubChem (10⁸ molecole); due step rappresentativi sono schematizzati a destra: il calcolo della proprietà di solvatazione tramite metodi di tipo machine learning (Fast Sigma⁴) e il calcolo della binding energy attraverso semplici simulazioni quantistiche high-throughput.

Un'attenzione particolare è stata data alle tre classi di leganti che i nostri colleghi sperimentali hanno individuato come altamente efficienti per le perovskiti: ammine terziarie, alchil fosfonio e alchil sulfonio. Seguendo la procedura riportata per gli altri tipi di leganti, siamo partiti del database di PubChem,[11] che elenca circa 110 milioni di molecole disponibili, e abbiamo utilizzato la libreria Python Flamingo per filtrare le molecole contenenti i suddetti gruppi di ancoraggio, selezionando così 12.681.029 ammine terziarie, 67.018 alchil fosfoni e 92.379 alchil sulfoni. La distribuzione finale dei leganti del nostro database è riportata in Figura 2.

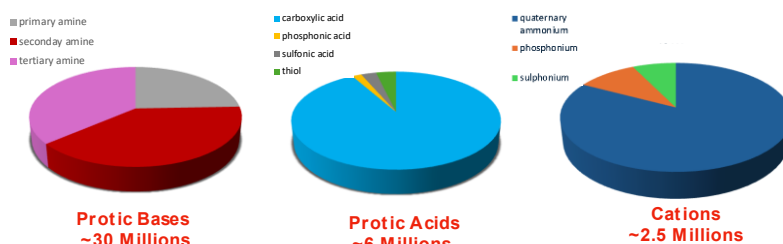


Figura 2. Distribuzione delle classi di leganti di interesse per i quantum dot

⁴ <https://www.scm.com/doc/COSMO-RS/downloads/1e686151eaf079b1c78c7a6daec301d0/COSMO-RS.pdf>

Infine, abbiamo effettuato un'analisi di sensitività riguardante la stima delle proprietà chimico-fisiche intrinseche e di solvatazione dei ligandi ottenuta dal programma Fast-Sigma di SCM^{5,6}. Per ogni gruppo funzionale incluso nel nostro database di ligandi, abbiamo scelto una molecola rappresentativa e confrontato i profili sigma calcolati esplicitamente con il modello COSMO-RS⁵ e quelli stimati con Fast-Sigma⁶, rappresentati rispettivamente con una linea rossa e blu in Figura 3. Abbiamo rivelato notevoli discrepanze dei valori stimati con FastSigma per i composti contenenti acidi fosfonici o solfonici (gruppi funzionali che non erano stati inclusi nel training set del programma). Abbiamo quindi deciso di calcolare esplicitamente le proprietà COSMO-RS per i ligandi caratterizzati da gruppo di ancoraggio acido fosfonico e acido solfonico, che rappresentano un sottoinsieme ridotto del database, come evidenziato in Figura 2.

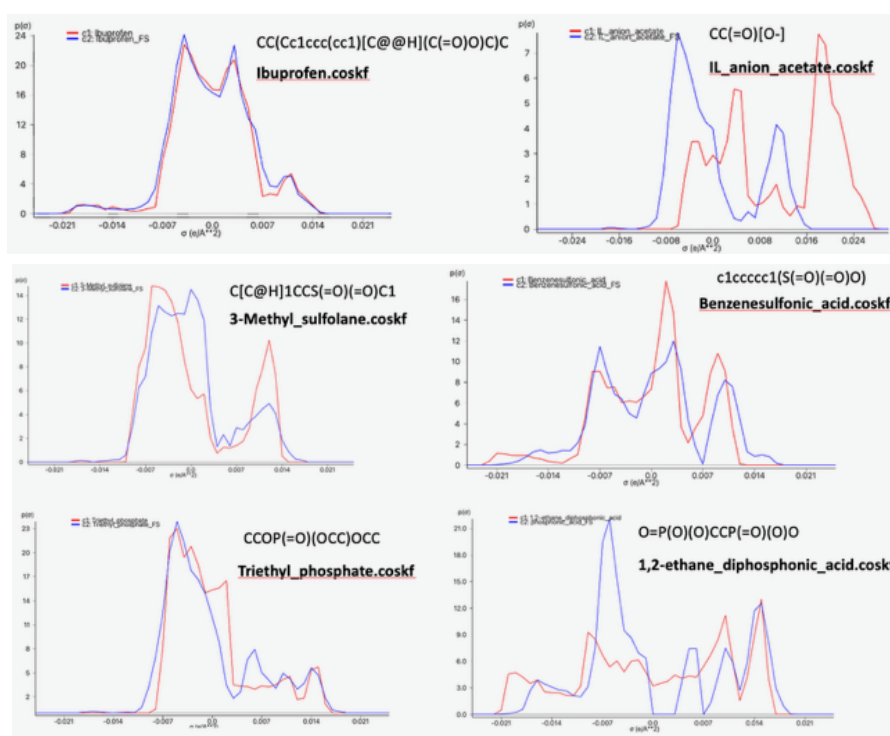


Figura 3. Confronto dei modelli COSMO e FastSigma nel calcolo dei profili sigma utili per stimare la solvatazione per vari liganti

Inoltre, FastSigma non è adatto per i composti ionici: le proprietà COSMO-RS dei ligandi contenenti gruppi funzionali cationici del nostro database sono quindi stati calcolate esplicitamente per coppie ioniche neutrali ligando cationico - contro-anione Br⁻.

Dal punto di vista delle simulazioni atomistiche, sono inoltre stati studiati gli effetti dei precursori sulla crescita dei quantum dot core-shell di indio arseniuro (InAs). Sono state effettuate simulazioni di dinamica molecolare (MD) sulla crescita dei core di InAs in diversi solventi, ovvero misture di molecole di OA (acido oleico) e TOA (octilammina) con l'obiettivo di spiegare la formazione di strutture forma tetrapodica. I

⁵ Klamt, A. (1995). Conductor-like screening model for real solvents: a new approach to the quantitative calculation of solvation phenomena. *The Journal of Physical Chemistry*, 99(7), 2224-2235.

⁶ Te Velde, G. T., Bickelhaupt, F. M., Baerends, E. J., Fonseca Guerra, C., van Gisbergen, S. J., Snijders, J. G., & Ziegler, T. (2001). Chemistry with ADF. *Journal of Computational Chemistry*, 22(9), 931-967.

risultati ottenuti dalle simulazioni hanno permesso di comprendere meglio come la presenza di queste molecole influenzi la morfologia finale dei nanocristalli. In particolare, le simulazioni hanno rivelato informazioni dettagliate sul comportamento di legame delle molecole di OA e TOA sulla superficie dei NC. Le molecole di OA si legano in modo stabile alla superficie del nanocristallo, con un picco di distribuzione radiale (RDF) a circa 3,0 Å dalla superficie, mentre le molecole di TOA si legano più debolmente, con un picco a circa 5,0 Å. Questo suggerisce che OA forma legami più forti con il NC rispetto a TOA, e che quest'ultima ha una capacità di legarsi meno pronunciata, dovuta probabilmente all'ingombro sterico delle catene delle molecole di TOA. Questo ostacola l'accesso alla superficie del nanocristallo, portando a legami più deboli anche a concentrazioni elevate di TOA. In termini di densità dei ligandi, le simulazioni hanno mostrato che, in presenza esclusiva di OA (rapporto TOA:OA 0:5), circa il 28% delle molecole di OA presenti nel sistema si legano alla superficie del NC, concentrandosi principalmente sulle faccette (111), con una densità di 4,15 ligandi per nm². Quando la concentrazione di OA viene ridotta, la frazione di molecole legate aumenta fino al 77%, ma la densità totale di ligandi diminuisce a 2,83 ligandi per nm². Questo cambiamento suggerisce che, pur aumentando il numero relativo di molecole legate, la riduzione della concentrazione di OA porta a una minore copertura della superficie del nanocristallo. Invece, quando il rapporto TOA:OA è alto (come nel caso 4:1), la densità di OA sulle faccette (111) si riduce notevolmente, suggerendo una minore stabilità di questi faccetti. Questa instabilità favorisce la crescita di bracci, portando i nanocristalli a trasformarsi in strutture a forma tetrapodica. Le simulazioni indicano quindi che una maggiore densità di OA stabilizza le faccette (111), mantenendo la struttura tetraedrica, mentre un aumento della concentrazione di TOA riduce questa stabilità, favorendo la formazione di tetrapodi. In sintesi, i risultati delle simulazioni di dinamica molecolare sono coerenti con le analisi effettuate tramite NMR e offrono importanti indicazioni su come la distribuzione dei ligandi influenzi la forma finale dei nanocristalli di InAs. La densità di OA gioca un ruolo cruciale nel determinare la stabilità delle faccette (111) e, di conseguenza, la forma finale del nanocristallo. Una densità elevata di OA porta alla formazione di una struttura tetraedrica, mentre un'alta concentrazione di TOA favorisce la crescita di bracci e la formazione di tetrapodi (Figura 4).

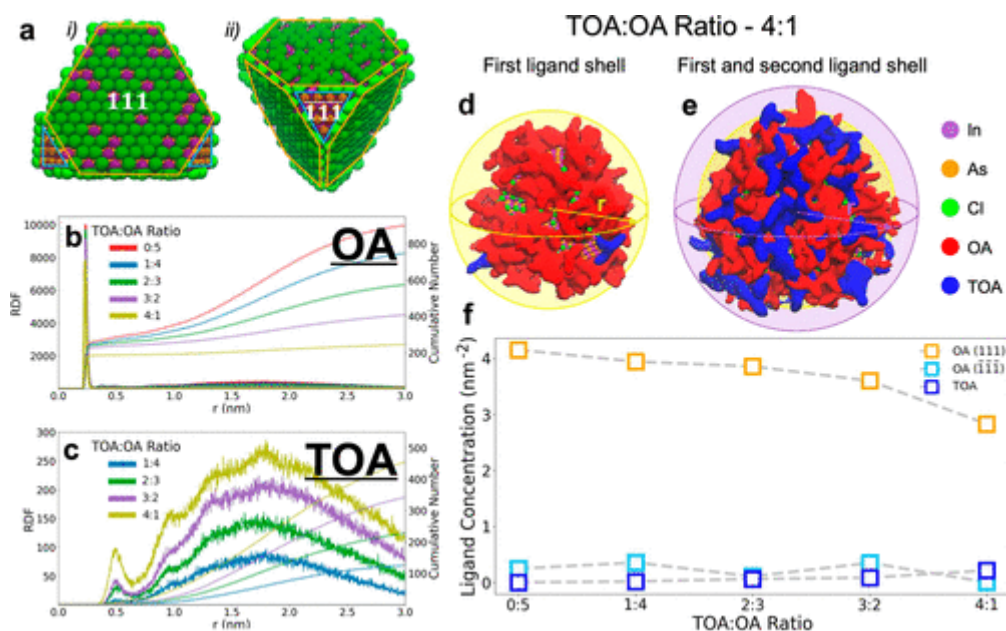


Figura 4 (a) Sistemi modello di un nanocristallo di InAs visti dalle faccette (111) (i, in arancione) e (-1-1-1) (ii, in azzurro) come utilizzati nelle simulazioni di dinamica molecolare. (b, c) Radial distribution function (RDF) e numero cumulativo (CN) di ligandi per le molecole di OA (b) e TOA (c) tracciate a diversi rapporti volumetrici TOA:OA. (d, e) Rappresentazione delle prime (d, ad un raggio $r = 3,0$ Å) e seconde (e, ad un raggio $r = 6,8$ Å) sfere di leganti nel modello: le molecole di OA sono rappresentate in rosso e quelle di TOA in blu. (f)

Concentrazioni di ligandi di OA sulle faccette (111) e (111) e di TOA per tutte le faccette a diversi rapporti TOA:OA.

Sempre sull'argomento dei leganti, sono state utilizzate simulazioni di dinamica molecolare (MD) per studiare il comportamento di vari leganti sui quantum dot, utilizzando nanocristalli di CdSe, un tipico semiconduttore i cui nanocristalli presentano le caratteristiche tipiche dei quantum dot. In particolare, è stato investigato il comportamento di leganti carbossilati, come l'acido oleico, per comprendere il loro movimento, le modalità di interazione con la superficie e le loro configurazioni preferenziali in funzione della temperatura e della struttura superficiale del nanocristallo. I risultati delle simulazioni mostrano che la mobilità dei leganti dipende fortemente dal numero di coordinazione degli atomi di Cd e Se sulla superficie. Gli atomi di cadmio con bassa coordinazione presentano un'elevata tendenza a interagire con i gruppi carbossilati, favorendo una maggiore mobilità e un riarrangiamento dei leganti sulla superficie. Al contrario, gli atomi di selenio sottocoordinati tendono a formarsi spontaneamente su scale temporali dell'ordine dei nanosecondi. Questa osservazione suggerisce che la presenza di tali siti potrebbe influenzare negativamente la fotoluminescenza del nanocristallo, facilitando meccanismi di quenching. Inoltre, le simulazioni evidenziano come la temperatura influenzi significativamente il comportamento dei leganti: all'aumentare della temperatura, la mobilità dei ligandi cresce, portando a una maggiore fluttuazione delle configurazioni e a una distribuzione più dinamica dei siti di legame sulla superficie del nanocristallo. Questi risultati offrono nuove prospettive sulla progettazione di nanocristalli CdSe con proprietà ottiche migliorate, suggerendo strategie per ottimizzare la stabilità dei leganti e ridurre gli effetti indesiderati sulla fotoluminescenza.

L'esperienza guadagnata dalle simulazioni per lo studio dei leganti nei quantum dot ha permesso di delineare uno studio sul loro comportamento generale. Nella review risultante, è stata esaminata l'importanza della chimica di superficie dei nanocristalli di perovskite ad alogenuri di piombo nella determinazione della loro stabilità colloidale e strutturale, oltre che delle loro proprietà ottiche. Una comprensione approfondita della natura del guscio di leganti, delle interazioni tra legante e quantum dot, e delle interazioni tra legante e solvente è fondamentale. Sono state discusse le sfide tecniche nella commercializzazione dei nanocristalli di perovskite, inclusa l'insufficiente riproducibilità del colore e la produzione su larga scala. Inoltre, viene sottolineata l'importanza di progettare leganti di fosfolipidi specifici per stabilizzare i nanocristalli metallici morbidi, migliorando così le loro proprietà e la loro applicabilità. In sintesi, lo studio ha evidenziato come la chimica di superficie influenzi in modo significativo le proprietà e le potenziali applicazioni dei nanocristalli di perovskite alogenuri di piombo.