Universitat Autònoma de Barcelona

**2019/2020**

# Física de Nanomaterials

Codi: 100184
Crèdits: 6

| Titulació | Tipus | Curs | Semestre |
|---|---|---|---|
| 2500097 Física | OT | 4 | 2 |

## Professor/a de contacte

Nom: Marta González Silveira

Correu electrònic: Marta.Gonzalez@uab.cat

## Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: Sí

## Equip docent

Javier Rodríguez Viejo

Ana Vila Costa

Marta González Silveira

## Prerequisits

És recomanable, tot i que no és imprescindible, haver cursat *Estat Sòlid*.

## Objectius

L'objectiu d'aquesta assignatura és donar els fonaments per que l'estudiant pugui entendre la variació de les propietats físiques (electròniques, òptiques, tèrmiques, magnètiques i de transport) dels materials a l'escala nanomètrica.

## Competències

- Aplicar els principis fonamentals a l'estudi qualitatiu i quantitatiu de les diferents àrees particulars de la física
- Comunicar eficaçment informació complexa de manera clara i concisa, ja sigui oralment, per escrit o mitjançant TIC, i en presència de públic, tant a públics especialitzats com generals
- Conèixer les bases d'alguns temes avançats incloent desenvolupaments actuals en la frontera de la física sobre els quals poder-se formar posteriorment amb més profunditat
- Desenvolupar estratègies d'aprenentatge autònom
- Desenvolupar un pensament i un raonament crítics i saber comunicar-los de manera efectiva tant en les llengües pròpies com en una tercera llengua
- Fer treballs acadèmics de manera independent usant bibliografia (especialment en anglès), bases de dades i col·laborant amb altres professionals
- Formular i abordar problemes físics identificant els principis més rellevants i utilitzant aproximacions, si fos necessari, per arribar a una solució que ha de ser presentada explicitant hipòtesis i aproximacions
- Generar propostes innovadores i competitives en la recerca i en l'activitat professional.

- Planejar i realitzar, utilitzant els mètodes apropiats, un estudi o recerca teòrica i interpretar i presentar-ne els resultats
- Planejar i realitzar, utilitzant els mètodes apropiats, un estudi, mesura o recerca experimental i interpretar i presentar-ne els resultats
- Raonar críticament, tenir capacitat analítica, fer servir correctament el llenguatge tècnic i elaborar arguments lògics
- Respectar la diversitat i pluralitat d'idees, persones i situacions
- Treballar autònomament, tenir iniciativa pròpia, ser capaç d'organitzar-se per assolir uns resultats i planejar i executar un projecte
- Treballar en grup, assumint responsabilitats compartides e interaccionant professional i constructivament amb altres amb absolut respecte als seus drets.
- Utilitzar les matemàtiques per descriure el món físic, seleccionant les eines apropiades, construint models adequats, interpretant resultats i comparant críticament amb l'experimentació i l'observació

## Resultats d'aprenentatge

1. Aprofundir en la descripció de la interacció radiació-matèria en sistemes manomètrics.
2. Calcular diagrames de bandes en sistemes de dimensionalitat baixa.
3. Calcular i analitzar les característiques del gas d'electrons bidimensional.
4. Calcular l'absorció i emissió de llum en nanopartícules semiconductores.
5. Comunicar eficaçment informació complexa de manera clara i concisa, ja sigui oralment, per escrit o mitjançant TIC, i en presència de públic, tant a públics especialitzats com generals.
6. Correlacionar les modificacions de les propietats físiques en la nanoescala amb el desenvolupament de nous dispositius.
7. Desenvolupar estratègies d'aprenentatge autònom.
8. Desenvolupar un pensament i un raonament crítics i saber comunicar-los de manera efectiva, tant en les llengües pròpies com en una tercera llengua.
9. Fer treballs acadèmics de manera independent usant bibliografia (especialment en anglès), bases de dades i col·laborant amb altres professionals.
10. Generar propostes innovadores i competitives en la recerca i en l'activitat professional.
11. Identificar els principis bàsics del transport electrònic i fonònic per a la seva posterior aplicació en sistemes avançats de baixa dimensionalitat.
12. Identificar la importància de la dimensionalitat en les propietats electròniques, tèrmiques, òptiques, magnètiques i de transport en els materials.
13. Identificar les modificacions de les propietats físiques en disminuir la mida a l'escala nanomètrica.
14. Interpretar la simplificació de les equacions de transport en el límit balístic.
15. Mesurar la luminescència de punts quàntics semiconductors.
16. Obtenir models simplificats de bandes d'energia per descriure el comportament electrònic de sòlids de baixa dimensionalitat.
17. Racionalitzar els resultats obtinguts al laboratori en relació amb els fenòmens físics observats considerant la influència de la dimensionalitat en les mesures experimentals.
18. Raonar críticament, tenir capacitat analítica, usar correctament el llenguatge tècnic i elaborar arguments lògics.
19. Relacionar la dimensionalitat amb les dimensions característiques de les partícules en la nanoescala.
20. Respectar la diversitat i la pluralitat d'idees, persones i situacions.
21. Simular les propietats de transport mitjançant analogies amb circuits electrònics.
22. Treballar autònomament, tenir iniciativa pròpia, ser capaç d'organitzar-se per assolir uns resultats i planejar i executar un projecte.
23. Treballar en grup, assumir responsabilitats compartides i interaccionar professionalment i de manera constructiva amb altres persones amb un respecte absolut als seus drets.
24. Utilitzar el càlcul en una i diverses variables, les equacions diferencials i el càlcul matricial en l'estudi de les propietats físiques dels nanomaterials.
25. Utilitzar el formulisme de Landauer per descriure el transport balístic.

## Continguts

1. Mètodes d'obtenció de NANOCRISTALLS i MATERIALS nanocristal·lins

1.1. Nucleació i Creixement

Introducció a la nucleació i creixement cristal·lí.

1.2 A partir de fase vapor

MBE, MOCVD, Sputtering,...(punts i pous quàntics)

Consideracions d'epitàxia. Modes de creixement. Heteroestructures.

Sistemes tensionats: autoorganització. Cas del Si-Ge i altres.

1.3. A partir de fase líquida

Síntesis química (Punts quàntics semiconductors)

1.4. A partir de fase sòlida

Mitjans mecànics, etc...(nanoestructures)

1.5. Lectura

2. Efectes de GRANDÀRIA en les propietats físiques.

2.1 Propietats electròniques: Confinament en 1,2,3 dimensions

2.1.1. Xarxa lineal o circular d'àtoms de carboni.

2.1.2. Partícules en pous de potencial quadrats.

2.1.3. Estructura de bandes i densitat d'estats en funció de la dimensionalitat.

2.1.4. Confinament en presència d'un camp elèctric: pou de potencial triangular.

2.1.5. Confinament en presència d'un camp magnètic: pou de potencial parabòlic.

2.1.5.1. Nivells de Landau. Efecte Hall quàntic.

2.1.6 Lectura.

2.2. Propietats de transport electrònic

2.2.1 Transport bal·lístic: Formulisme de Landauer

2.2.2. Transport túnel: Funció esglaó. Barrera quadrada. Corrent en 1D. Efecte túnel ressonant. Tunnelling en heteroestructures.

2.2.3 Aplicacions: Dispositius electrònics i magnètics basats en heterostructures.

2.2.4 Lectura

2.3.Propietats òptiques

2.3.1 Excitons: interaccions coulombianes.

2.3.2 Emissió i absorció de llum (interbanda, intrabanda).

2.3.3 Aplicacions tecnològiques

2.3.4 Lectura

2.4. Propietats tèrmiques

2.4.1 Capacitat calorífica

Introducció: Deducció Cv,Cp en sistemes massius.

Variació de Cp amb la dimensionalitat: efectes electrònics i fonònics. Cas del C: diamant (3D), grafit (quasi-2D), grafè (2D), nanotubs de carboni (1D).

2.4.2 Temperatura i entalpia de fusió en nanoparticules metàl·liques i semi conductores.

2.4.3 Exemple i Aplicacions tecnològiques.

2.4.4 Transport tèrmic: Teoria Cinètica. Equació de Boltzmann. Conductivitat tèrmica. influència de la dimensionalitat. Exemples: modificació de la conductivitat en superxarxes i nanofils.

2.5 Termoelectricitat

2.5.1 Efectes Seebeck i Peltier

2.5.2 Figura de mèrit: definició i implicacions.

2.5.3 Efectes de dimensionalitat. Influència sobre la figura de mèrit.

2.5.4 Exemples i aplicacions.

Pràctiques de laboratori

1. Microscòpia de superfícies mitjançant STM (Demostrativa).
2. Influència de la grandària sobre l'emissió de llum en punts quàntics semiconductors de CdSe.
3. Mesura de la capacitat calorífica i determinació de la variació de la temperatura de fusió amb la mida de nanopartícules.
4. Transport tèrmic en sistemes bidimensionals

## Metodologia

En aquest curs s'ofereix un ensenyament específic on hi hauran les diferents activitats formatives que es descriuen a continuació. Les hores de treball que s'especifiquen per a cada activitat formativa corresponen a un alumne promig. Naturalment, no tots els alumnes necessiten el mateix temps per a aprendre conceptes i dur a terme determinades activitats, de manera que la distribució de temps s'ha d'entendre com a orientativa. En aquesta assignatura s'intenta potenciar la participació activa de l'estudiant com una eina rellevant d'aprenentatge.

Activitats formatives dirigides:

Classes magistrals: classes en les que el professor de teoria explica els conceptes més rellevants de cada tema. Habitualment són classes de pissarra, malgrat que en algunes ocasions és fan classes amb programes d'ordinador. Els alumnes disposen d'apunts al campus virtual o de còpia de les transparències en format pdf amb antelació i dins el campus virtual de la UAB.

Classes de problemes: classes en les que el professor de problemes explica als alumnes com es resolen els problemes tipus de l'assignatura. El professor resoldrà en detall una llista de problemes seleccionats, i proposarà als alumnes una llista de problemes que s'han de lliurar de forma obligatòria, doncs formen part de l'avaluació de l'assignatura.

Classes de discussió: Es recomana la lectura d'articles científics en relació directa a la temàtica de l'assignatura i es discuteix els seu contingut en classe.

Pràctiques de laboratori: Els alumnes realitzaran pràctiques de laboratori com una eina més d'aprenentatge.

Activitats formatives supervisades:

Tutories: en les hores d'atenció als alumnes, els professors estaran disponibles per a les consultes dels alumnes que tinguin dubtes en qualsevol dels temes del temari.

Activitats formatives autònomes:

Resolució de problemes i lliurament de problemes addicionals: l'alumne ha de resoldre els problemes de la llista que lliuren els professors i els addicionals que li demani el professor de problemes o els que l'alumne vulgui fer pel seu compte per a preparar-se millor l'assignatura.

Estudi i preparació d'exàmens: Treball personal de l'alumne per tal d'adquirir els conceptes teòrics de l'assignatura i les habilitats per a la resolució de problemes.

Treballs: de manera opcional els estudiants poden fer treballs que demanen un nivell de programació adient per resoldre problemes en relació als temes de l'assignatura.

## Activitats formatives

| Títol | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|---|---|---|---|
| Tipus: Dirigides | | | |
| Classes de discussió d'articles científics | 3 | 0,12 | 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25 |
| Classes de problemes | 12 | 0,48 | 1, 2, 3, 12, 13, 14, 16, 19, 21, 24 |
| Classes de teoria | 27 | 1,08 | 1, 2, 3, 6, 8, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 19, 21, 24, 25 |
| Laboratori | 7 | 0,28 | 12, 15, 17, 19 |
| Tipus: Autònomes | | | |
| Estudi i preparació d'examens | 51 | 2,04 | 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 16, 19, 21, 24, 25 |
| Realització de treballs | 20 | 0,8 | 5, 7, 8, 9, 10, 18, 20, 22, 23 |
| Resolució de problemes i lliurament de problemes adicionals | 17 | 0,68 | 2, 3, 5, 9, 13, 14, 16, 21, 24 |
| Tutories | 5 | 0,2 | 5, 8, 10, 18, 20, 22, 23 |

## Avaluació

Resolució de problemes i participació en lectures: 25 % de la nota final.

Treballs pràctiques (realització, informe, entrevista): 15 % de la nota final.

Examen1 : 30% de la nota final.

Examen 2: 30% de la nota final

Examen repesca: 60% nota final (per tal de poder-se presentar a l'examen de repesca, heu d'haver estat prèviament avaluats d'almenys 2/3 de la nota final)

Nota mínima de cada examen per aprovar per parcials: 4

## Activitats d'avaluació

| Títol | Pes | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|---|---|---|---|---|
| Examen parcial I | 30% | 2 | 0,08 | 2, 3, 12, 13, 14, 16, 19, 21, 24, 25 |
| Examen parcial II | 30% | 2 | 0,08 | 1, 4, 6, 11, 12, 19, 24 |
| Lliurament de problemes i lectura d'articles | 25% | 0 | 0 | 5, 7, 8, 9, 10, 12, 19, 20, 22, 23, 24 |
| Pràctiques de laboratori | 15% | 1 | 0,04 | 5, 8, 9, 12, 15, 17, 18, 19, 20, 22, 23 |
| Repesca parcials | 60% | 3 | 0,12 | 1, 4, 6, 11, 12, 13, 14, 16, 19, 21, 24, 25 |

## Bibliografia


Solid State Physics, N.W.Ashcroft, N.D. Mermin, Saunders College Publishing.

The Physics of Low dimensional semiconductors: An introduction, J.H.Davies, Cambridge University Press, 1997.

Quantum semiconductor structures: Fundamentals and applications , C.Weisbuch, B.Vinter, Academic Press, 1991.

Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications, Ed. A. S. Edelstein, R. C. Cammarata, Institute of Physics, 1998.

The atomistic nature of crystal growth, B.Mutaftschiev,... Springer-verlag, 2003.