

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	2

### Professor de contacte

Nom: Jordi Pascual Gainza

Correu electrònic: Jordi.Pascual@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: No

### Prerequisits

És recomanable haver aprovat l'assignatura "Fenòmens Quàntics I".

### Objectius

Adquisició de coneixements bàsics de Mecànica Quàntica complementaris dels impartits en l'assignatura de Fenòmens Quàntics I, i de la seva aplicació a fenòmens específics i propietats de la matèria a la nanoescala. El curs està organitzat en cinc unitats: La primera tracta del moment magnètic dels electrons. En la segona unitat s'estudia l'efecte Zeeman, el moment magnètic nuclear i la ressonància magnètica. En la tercera unitat es fa una breu introducció a les estadístiques i estudi de la densitat d'estats i ocupació. La quarta unitat aborda l'estudi de pous i barreres de potencial quadrats, i aplicacions a la nanociència. Es clou l'assignatura amb l'estudi dels pous de potencial triangulars i parabòlics, amb aplicacions a la nanociència. L'assignatura ajuda a l'alumne a tenir uns coneixements sòlids de fonaments de mecànica quàntica i es donen exemples de l'interès dels coneixements adquirits en l'àmbit de la nanoescala.

### Competències

- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de natura quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.

- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

## Resultats d'aprenentatge

1. Analitzar situacions i problemes en l'àmbit de la física i plantejar respostes o treballs de tipus experimental utilitzant fonts bibliogràfiques.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aplicar l'equació de Schroedinger a sistemes quàntics unidimensionals com pous de potencial i/o oscil·ladors i a tridimensionals com molècules.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
6. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
7. Definir adequadament les estadístiques quàntiques de Bose-Einstein i Fermi-Dirac.
8. Descriure el moment magnètic, orbital i d'espín.
9. Emprar la tecnologia de la informació i la comunicació per a la documentació de casos i problemes.
10. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
11. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
12. Indicar les bases físiques de la mecànica quàntica i relacionar-les amb fets experimentals.
13. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
14. Proposar idees i solucions creatives.
15. Raonar de forma crítica.
16. Reconèixer la dualitat ona-partícula.
17. Reconèixer la naturalesa quàntica de la física atòmica i molecular.
18. Resoldre l'equació de Schrödinger per a problemes unidimensionals i ser capaç de calcular l'efecte túnel en diversos sistemes físics.
19. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
20. Resoldre problemes i prendre decisions.
21. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
22. Utilitzar l'equació de Schrödinger per resoldre problemes de forces centrals.
23. Utilitzar l'equació de Schrödinger per resoldre problemes tridimensionals amb simetria esfèrica (àtom d'hidrogen, oscil·lador harmònic).
24. Utilitzar programes de tractament de dades per elaborar informes.

## Continguts

### I. Moment magnètic. Spin. Àtoms multieletrònics

Moment magnètic en física clàssica. Relació entre el moment orbital magnètic i el moment orbital angular: diamagnetisme. Moment magnètic permanent: paramagnetisme. Teorema general de precessió.

Estats multieletrònics: Moment angular. Resum dels resultats de la solució de l'equació de Schrödinger aplicada a l'àtom d'H. Acoblament Russell-Saunders. Regles de Hund. Interacció de bescanvi. Acoblament spin-òrbita. Efecte del camp cristal·lí a les molècules i els sòlids.

Moment magnètic permanent. Moment magnètic associat al moviment orbital electrònic. Spin electrònic; moment magnètic associat. Acoblament spin-òrbita: moment magnètic associat. Paramagnetisme atòmic.

### II. Àtoms/ions en presència de camps magnètics externs

Efecte Zeeman. Regles de selecció de les transicions electròniques.

Spin nuclear; moment magnètic associat. Interacció hiperfina. Interacció quadrupolar elèctrica. Estructura hiperfina en un camp magnètic aplicat.

Ressonància magnètica. Ressonància paramagnètica electrònica. Ressonància magnètica nuclear.

### III. Densitat d'estats i ocupació

Longituds característiques en sistemes mesoscòpics. Pous, fils i punts quàntics.

Dimensionalitat i nivells d'energia. Model de Sommerfeld dels electrons lliures. Ones viatgeres: condicions de contorn de Born-von Kármán.

Densitat d'estats (DOS); nivell de Fermi. DOS en 3D en el model de Sommerfeld. Nivell de Fermi. DOS en 3D per a ones viatgeres. DOS en 2D i 1D. Distribucions estadístiques. Distribució de Maxwell-Boltzmann. Distribució de Bose-Einstein. Distribució de Fermi-Dirac; algunes consideracions.

Ocupació dels nivells d'energia. Funció de Fermi-Dirac i propietats físiques.

### IV. Pous i barreres de potencial quadrats: aplicacions a la nanociència

Pou de potencial quadrat, finit i simètric en 1D. Barrera de potencial quadrada en 1D; efecte túnel. Esglaó de potencial quadrat en 1D.

Nanoestructures físiques de baixa dimensionalitat.

Estructures fonamentals per construir els dispositius electrònics. Bandes d'energia en els semiconductors 3D. Dispersió de bandes d'energia en els semiconductors 3D.

Pous de potencial en semiconductors; el MODFET. Pous amb doble barrera de potencial; el díode túnel ressonant.

Pous quàntics múltiples; fotodetectors d'IR. Superxarxes.

### V. Pous triangulars i parabòlics: aplicacions a la nanociència

Pou quàntic triangular en 1D. Sistemes 2G; el MOSFET. Pou quadrat en un camp elèctric aplicat; moduladors.

Pou quàntic parabòlic en 1D; l'oscil·lador harmònic. Vibració de molècules diatòmiques.

Efecte d'un camp magnètic sobre un gas d'electrons. Camp magnètic en un sistema 2D: nivells de Landau i densitat d'estats. Extensió a sistemes 3D.

Efecte d'un camp magnètic; aplicacions. Efecte Hall. Efecte Hall quàntic.

## **Metodologia**

### **Classes de teoria**

El professor/a explicarà el contingut del programa amb suport audiovisual. Es disposarà de material de suport per lliurar als alumnes.

### **Classes de problemes**

Les classes de problemes serviran per consolidar i veure'n com es porten a la pràctica els coneixements adquirits en les classes de teoria. S'aniran intercalant amb les classes de teoria per reforçar-ne aspectes determinats o en acabar les unitats temàtiques. Part dels problemes els resoldrà el professor, i per a l'altra part els alumnes disposaran dels enunciats dels exercicis que hauran d'anar resolent al llarg del curs. El plantejament/resolució dels exercicis es farà a les classes de problemes sota la direcció del professor. Depenent del número total d'alumnes, aquests exposaran els problemes no resolts pel professor.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
classes de problemes	20	0,8	2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 12, 14, 15, 16, 18, 19, 20
classes de teoria	36	1,44	2, 3, 4, 7, 8, 9, 12, 14, 15, 17, 18, 23
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Presentació de treballs	8	0,32	1, 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 18, 20, 24
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Estudi	68	2,72	1, 2, 4, 5, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 19, 21, 24

## Avaluació

**Exàmens escrits:** Suposaran el 90% de la nota. Es programaran dos exàmens parcials al llarg del curs i un examen final. Els dos exàmens parcials tenen el mateix pes (45%). Si s'han aprovat els dos exàmens parcials no caldrà presentar-se a l'examen final. En cas de no haver aprovat un o els dos parcials caldrà fer l'examen final. És obligatori aprovar aquesta part per aprovar l'assignatura.

Cas que els alumnes no resolguin problemes en grup, els dos exàmens escrits suposaran el 100% de la nota.

**Problemes resolts:** Suposaran el 10% de la nota. Els alumnes hauran de lliurar al professor un document amb els problemes resolts, i exposar-los a classe (si el calendari ho permet). La resolució dels problemes, lliurament dels documents corresponents i exposició a classe (si el calendari ho permet) són obligatoris per aprovar l'assignatura.

Cas que no es demani als alumnes resoldre problemes, no influirà en la nota.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
exàmens escrits (parcials i final)	90%	8	0,32	2, 3, 5, 6, 7, 8, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 23
Problemes resolts	10%	10	0,4	1, 2, 4, 5, 6, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 20, 21, 24

## **Bibliografia**

No hi ha un text basic de referència. S'utilitzarà el pdf amb el desenvolupament dels continguts (tant de teoria com de problemes) que el professor lliura als alumnes, i les referències que puntualment consten al seu interior.