

| Titulació                            | Tipus | Curs |
|--------------------------------------|-------|------|
| 2501922 Nanociència i Nanotecnologia | OB    | 3    |

### Professor/a de contacte

Nom: Javier Rodríguez Viejo

Correu electrònic: javier.rodriguez@uab.cat

### Equip docent

Marta Gonzalez Silveira

### Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

### 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 la primera unitat es posa èmfasi i s'amplien alguns temes abordats en l'assignatura de Fenòmens Quàntics I. La segona tracta dels estats electrònics atòmics i el moment magnètic dels electrons. Es fa una introducció a l'efecte Zeeman,. 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, i una breu introducció a les barreres parabòliques i hiperbòliques, 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 Schrodinger a sistemes quàntics unidimensionals com pous de potencial i/o oscil·ladors i a tridimensionals com molècules.
4. Aprendre de manera autònoma.
5. Avaluat 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. Èmfasi i aplicacions d'alguns temes abordats a FQI

Equació d'Schrödinger en 1D i en 3D.

El moment angular més enllà dels harmònics esfèrics: l'spin.

Revisió de l'àtom d'hidrogen. Estructures fina i hiperfina.

Resolució de l'hamiltonià; notació matricial.

Teoria de pertorbacions independents del temps (síntesi).

## II. Moment magnètic. 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.

Efecte Zeeman.

## 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. Esclaó 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.

Barrera quàntica hiperbòlica: la desintegració alfa.

Barrera quàntica parabòlica. Aplicacions en processos químics i bioquímics.

## Activitats formatives i Metodologia

| Títol                         | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge                        |
|-------------------------------|-------|------|---|
| Tipus: Dirigides              |       |      |   |
| activitats dirigides a classe | 8     | 0,32 | 1, 2, 3, 4, 5, 15, 18, 19, 20, 22, 23           |
| classes de problemes          | 16    | 0,64 | 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 12, 14, 15, 16, 18, 19, 20 |
| classes de teoria             | 30    | 1,2  | 2, 3, 4, 7, 8, 9, 12, 14, 15, 17, 18, 23        |
| Tipus: Supervisades           |       |      |   |
| Presentació de treballs       | 6     | 0,24 | 1, 2, 3, 5, 6, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 18, 20, 24 |
| Resolució de problemes        | 6     | 0,24 | 3, 7, 8, 14, 15, 18, 19, 20, 21, 22, 23         |
| Tipus: Autònomes              |       |      |   |
| Estudi                        | 68    | 2,72 | 1, 2, 4, 5, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 19, 21, 24   |

### 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. Els alumnes resoldran u exposaran a classe els problemes no resolts pel professor.

### Activitats Dirigides.

Resolució de problemes en grup a l'aula amb ajuda del professor.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

## Avaluació

### Activitats d'avaluació continuada

| Títol                                  | Pes | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge                             |
|--|-----|-------|------|--|
| Problemes resolts                      | 15% | 2     | 0,08 | 1, 2, 4, 5, 6, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 20, 21, 24     |
| Treballs, lectures, activitats varies. | 15% | 6     | 0,24 | 1, 2, 4, 5, 6, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 21, 24     |
| exàmens escrits (parcials i final)     | 70% | 8     | 0,32 | 2, 3, 5, 6, 7, 8, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 22, 23 |

Exàmens escrits: Suposaran el 70% de la nota. Es programaran dos exàmens parcials al llarg del curs i un examen final. Els dos exàmens parcials tenen el mateix pes (35%). 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, ni facin activitats els dos exàmens escrits suposaran el 100% de la nota.

Problemes resolts: Suposaran el 15% de la nota. Els alumnes hauran de lliurar al professor un document amb els problemes resolts, i exposar-los a classe. La resolució dels problemes, lliurament dels documents corresponents i exposició a classe són obligatoris per aprovar l'assignatura.

Treballs, lectures, altres activitats: Es proposaran algunes activitats complementàries que valdran el 15% de la nota.

Examen de recuperació: Per tal de fer la recuperació l'alumne ha de presentar-se a la part que no hagi superat el 4. També es pot presentar qualsevol alumne a pujar nota. La nota que obtingui en l'examen de recuperació serà la nota que servirà per fer promig amb les altres activitats avaluable.

#### Avaluació única

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar una prova final que consistirà en un examen de teoria on haurà de respondre a una sèrie de qüestions curtes. Seguidament, haurà de fer unaprova de problemes on haurà deresoldre una sèrie d'exercicis semblants als que s'han treballat a les sessions de problemes. Quan hagi finalitzat, lliurarà els informes corresponents a solucions de problemes i la entrega d'un treball.

La qualificació de l'estudiant serà la mitjana ponderada de les tres activitats anteriors, on l'examen de teoria suposarà el 35% de la nota, l'examen de problemes el 35% i la entrega dels problemes i dels treballs serà del 30%.

Si la nota final no arriba a 5, l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà en la data que fixi la coordinació de la Titulació. En aquesta prova es podrà

recuperar el 70% de la nota corresponent a la teoria i els problemes. La part d'entrega de problemes i treballs no és recuperable.

## Bibliografia

No hi ha un text basic de referència, però si dos llibres rellevants per l'assignatura. També s'utilitzarà el pdf que el professor lliura als alumnes al Campus Virtual i que juntament amb el desenvolupament dels continguts (tant de teoria com de problemes que es fan a classe) pot servir com a eina d'estudi.

Introduction to quantum mechanics, David J. Griffiths, Cambridge University Press

The physics of low dimensional semiconductors. An introduction. John H. Davies, Cambridge University Press

## Programari

Es fan servir eines infromàtiques basades en windows per presentar documents ppt o pdf o word.

## Llista d'idiomes

| Nom                      | Grup | Idioma | Semestre           | Torn  |
|--------------------------|------|--------|--------------------|-------|
| (PAUL) Pràctiques d'aula | 1    | Català | segon quadrimestre | tarda |
| (SEM) Seminaris          | 1    | Català | segon quadrimestre | tarda |
| (TE) Teoria              | 1    | Català | segon quadrimestre | tarda |