

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44614
Nom	Materials avançats
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2218 - M.U. en Química	Facultat de Química	1	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2218 - M.U. en Química	9 - Materials avançats	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
ORTI GUILLEN, ENRIQUE	315 - Química Física

RESUM

El títol de “Materials avançats” fa referència als materials moleculars i polimèrics utilitzats en el camp de l’electrònica molecular per al desenvolupament de dispositius electrònics i optoelectrònics de base orgànica. L’electrònica molecular emergeix en la dècada dels anys 1970-1980 com a conseqüència del descobriment de materials orgànics moleculars i polimèrics conductors de l’electricitat, i actualment representa una alternativa real a l’electrònica convencional basada en materials metàl·lics i semiconductors de naturalesa inorgànica. Els materials orgànics combinen els avantatges dels sistemes moleculars (mida nanoscòpica, baix pes específic, gran versatilitat sintètica, transparència, plasticitat, processabilitat, biocompatibilitat...) amb les propietats elèctriques i òptiques dels metalls i semiconductors inorgànics.

L’objectiu de l’assignatura és proporcionar una visió general sobre:

1) Els diferents tipus de materials orgànics conjugats, moleculars i polimèrics, conductors de l’electricitat. Aquests materials inclouen: a) els complexos i les sals de transferència de càrrega; b) els oligòmers i els polímers pi-conjugats, entre els quals es destaquen els polímers conductors com ara el poliacetilè o el politiofè; c) els macrocicles pi-conjugats com ara les ftalocianines; i d) les nanoestructures de carboni que inclouen materials com ara els ful·lerens, els nanotubs i el grafè.



2) Les propietats estructurals, electròniques, òptiques i de transport de càrrega que presenten aquests materials. Per facilitar la comprensió d'aquestes propietats, es revisaran els conceptes relacionats amb: a) l'estructura electrònica i l'enllaç químic en sistemes carbonats pi-conjugats, que inclou des dels orbitals en sistemes moleculars fins a la teoria de bandes en sistemes polimèrics; b) la interacció amb la llum i especialment els conceptes relacionats amb l'espectroscòpia electrònica; i c) l'organització supramolecular i les interaccions intermoleculars.

3) Les aplicacions principals en dispositius electrònics/optoelectrònics que deriven d'aquests materials. S'explicaran principalment els principis que governen els dispositius electroluminescents que transformen el corrent elèctric en llum (OLED) i els diferents tipus de cèl·lules solars utilitzades per transformar la llum en energia elèctrica. Els OLED són una realitat comercial en l'actualitat, ja que estan presents en les pantalles de tot tipus de dispositius electrònics com ara telèfons mòbils i televisors. Les cèl·lules solars orgàniques o híbrides, les quals combinen materials orgànics i inorgànics, estan sent intensament investigades com a alternativa realista a les cèl·lules de silici.

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Es requereixen els coneixements previs de química que s'imparteixen en les titulacions que indiquen en el perfil d'ingrés que es recomana per a l'estudiant de màster.

COMPETÈNCIES

2218 - M.U. en Química

- Que els estudiants siguin capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Ser capaç de resoldre problemes complexos de química, siga en l'àmbit acadèmic, de la investigació o de l'aplicació industrial a nivell d'especialització o màster
- Posseir les habilitats necessàries per a desenrotllar activitats multidisciplinàries dins de l'àmbit de la química a nivell d'especialització de màster.
- Ser capaços de dissenyar, realitzar, analitzar i interpretar experiències i dades complexes en l'entorn de la química a nivell d'especialització.
- Adquirir coneixements avançats que permeten valorar la importància de la química en la salut, el medi ambient, nous materials i energia.



- Adquirir els coneixements avançats necessaris per a valorar la importància de la química en el desenvolupament econòmic i social en un context d'especialització.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

- Ser capaç de valorar el paper de la química en el disseny i la preparació de nous materials moleculars i polimèrics amb aplicacions tecnològiques en sectors de gran impacte econòmic i social com ara l'estalvi i la generació d'energia.
- Identificar els diferents tipus de materials moleculars i polimèrics amb propietats conductores de l'electricitat, així com els seus mètodes de síntesis i les seues aplicacions.
- Conèixer els requisits que han de complir els semiconductors orgànics i les propietats estructurals i electròniques que els caracteritzen.
- Conèixer l'estructura i propietats de les diferents nanoformes de carboni: fullerenes, nanotubs, grafé, etc.
- Comprendre les relacions estructura/proietat que determinen la potencialitat dels semiconductors orgànics com a materials elèctrica i òpticament actius.
- Identificar les interaccions intermoleculars que determinen l'organització supramolecular dels materials moleculars i polimèrics i conèixer les implicacions d'aquesta organització en les propietats de transport de càrrega.
- Conèixer els diferents tipus de mecanismes que regulen el transport de càrrega en els semiconductors orgànics.
- Conèixer l'arquitectura, els components, el funcionament i els principis bàsics dels dispositius electroluminescents de tipus OLED i de les cèl·lules solars com a aplicacions principals dels semiconductors orgànics.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

0. Introducció: Aplicacions principals

Objectius de l'assignatura. Electrònica molecular: desenvolupament històric. Semiconductors orgànics Presentació de les aplicacions principals. Dispositius per a estalviar energia i per a generar energia.

1. Materials polimèrics

Introducció. Definició de polímer. Història dels polímers. Tipus de polímers segons l'estructura i segons les propietats. Mecanismes de polimerització: per etapes o en cadena. Aplicacions.

2. Estructura electrònica dels semiconductors orgànics

Conceptes bàsics: Orbitals atòmics. Àtoms polieletrònics: El model orbital. L'àtom de carboni. Estructura electrònica molecular. Orbitals moleculars: sistemes pi-conjugats. Estats electrònics: estats singlet i triplet. Teoria de bandes.



3. Interacció amb la llum

Conceptes generals. Corbes d'energia potencial. Espectroscòpia electrònica. Processos fotofísics. Paràmetres fotofísics. Tipus de luminiscència.

4. Conductors moleculars

Desenvolupament històric. Donadors d'electrons: TTF i sistemes anàlegs. Acceptors d'electrons: TCNQ i sistemes anàlegs. Complexos de transferència de càrrega. Metalls moleculars. Superconductors moleculars.

5. Materials moleculars electroactius

Tipus de conductors orgànics. Oligòmers i polímers pi-conjugats. Sistemes donadors/acceptors d'electrons (HTM/ETM). Metal·lomacrocicles: Ftalocianines i altres macrocicles. Orbitals moleculars: Una ferramenta útil. Propietats estructurals i vibracionals. Propietats redox: Injecció de càrregues. Propietats òptiques: Absorció i emissió de llum. Aplicacions.

6. Organització supramolecular i propietats de transport

Interaccions no covalents: forces intermoleculars. Agregats supramoleculars: propietats òptiques. Polímers supramoleculars. Cristalls líquids. Propietats de transport.

7. Nanoestructures de carboni

Introducció: estructures i nanoestructures de carboni. Full·lerens: estructura i propietats. Nanotubs de carboni: estructura i propietats. Altres tipus de nanoestructures de carboni. Grafè. Funcionalització. Aplicacions.

8. Polímers conductors

Síntesi i disseny molecular. Estructura electrònica dels polímers conjugats. Defectes i portadors de càrrega. Interacció amb la llum: propietats òptiques. Transicions i estats excitats en polímers pi-conjugats. Excitacions en agregats. Electroluminescència i emissió estimulada. Estructura d'estat sòlid: conformació, flexibilitat, cristallinitat, morfologia. Estructura de perovskites orgàniques-inorgàniques.

9. Transport de càrrega

Conceptes bàsics. Injecció de càrregues. Portadors de càrrega: mobilitats. Teories de la conducció: models de transport. Fotoconductivitat. Conductivitat en polímers dopats. Aplicació de polímers conductors en bioelectrònica.



10. Aplicacions i dispositius

Cèl·lules solars: tipus de cèl·lules i principis de funcionament. Dispositius electroluminescents: díodes emissors de llum (LED). Làsers: principis bàsics i funcionament. Làsers de polímers.

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	40,00	100
Tutories reglades	5,00	100
Seminaris	5,00	100
Elaboració de treballs individuals	10,00	0
Estudi i treball autònom	35,00	0
Lectures de material complementari	10,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	20,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

La assignatura s'imparteix usant la metodologia docent que segueix:

- Classes magistrals participatives. En aquestes classes s'introdueixen els conceptes bàsics de l'assignatura. S'hi fomenta la participació activa de l'alumne/a mitjançant el plantejament de qüestions relacionades amb l'aplicació de conceptes i coneixements adquirits prèviament per l'alumne/a.
- Tutories. Es plantegen com a fòrums de discussió dels conceptes explicats o de la resolució dels exercicis proposats. S'utilitzen per avaluar la comprensió de l'assignatura per part de l'alumne/a.
- Seminaries. Aborden l'explicació de temes específics per part dels professors de l'assignatura o de professors convidats. A més s'utilitzen per exposar i discutir els treballs individuals o grupals proposats pels professors.

AVALUACIÓ

Primera convocatòria

La qualificació de l'assignatura és la mitjana ponderada de les notes obtingudes en un examen final (75%), el qual versa sobre els conceptes i coneixements impartits durant el curs, i en les activitats d'avaluació contínua realitzades al llarg del curs (25%). La qualificació mínima en cadascuna de les dues parts de l'avaluació ha de ser de ser igual o superior a 4.0 per fer-ne la mitjana.



La qualificació de l'avaluació contínua es fa sobre la base de la participació i l'esperit crític demostrats en les discussions plantejades i dels resultats obtinguts en els treballs i les activitats plantejats.

La qualificació global mínima per aprovar l'assignatura és de 5.0.

Segona convocatòria

La qualificació de l'assignatura en segona convocatòria s'obté aplicant els mateixos criteris que en la primera convocatòria.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- A. Köhler, H. Bässler, *Electronic Processes in Organic Semiconductors. An Introduction*, Wiley-VCH 2015
- M. C. Petty, M. R. Bryce, D. Bloor, (eds), *Introduction to Molecular Electronics*, Blackwell, 1995
- K. Müllen, G. Wegner, (eds), *Electronic Materials: The Oligomer Approach*, Wiley-VCH, 1998
- H.S. Nalwa, (ed), *Handbook of Organic Conductive Molecules and Polymers Vol. 1-4*, John Wiley & Sons, 1977
- T. A. Skotheim, J. R. Reynolds, (eds), *Handbook of Conducting Polymers (3rd ed.) Vol. 1 & 2*, CRC Press, 2007
- M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund, (eds), *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, 1996.
- J.H. Warner, F. Schäffel, A. Bachmatiuk, M.J. Rümeli, *Graphene: Fundamentals and Applications*, Elsevier, 2012

Complementàries

- I. F. Perepichka, D. F. Perepichka, (eds), *Handbook of Thiophene-Based Materials. Applications in Organic Electronics*, Vol. 1 & 2, Wiley, 2009.
- P. A. Cox, *The Electronic Structure and Chemistry of Solids*, Oxford University Press, 1987
- M. C. Petty, *Molecular Electronics. From Principles to Practice*, Wiley, 2007
- Durante el curso se dará bibliografía especializada basada en artículos de revisión publicados en revistas científicas. Durant el curs es facilitarà bibliografia especialitzada basada en articles de revisió publicats en revistes científiques. During the course, specialized bibliography based on review articles published in scientific journals will be given.