

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 44424
Nom: Electrònica molecular
Cicle: Màster Universitari Oficial / Postgrau doctorat
Crèdits ECTS: 4,5
Curs acadèmic: 2025-26

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
2208 - Máster Universitari en Nanociència i Nanotecnologia Molecular	Facultat de Química	1	Segon quadrimestre

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
2208 - Máster Universitari en Nanociència i Nanotecnologia Molecular	Electrònica molecular	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

CORONADO MIRALLES EUGENIO

RESUM

Es pretén familiaritzar els alumnes amb els conceptes bàsics de l'electrònica orgànica o molecular i les aplicacions més importants que els materials moleculars tenen en aquesta àrea.

Es pretén familiaritzar els alumnes amb els conceptes bàsics, tant experimentals com teòrics, de les diferents tècniques de mesurament de les propietats electròniques d'una única molècula depositada en substrats o contactada a elèctrodes metàl·lics i les seues possibles aplicacions en nanoelectrònica.

CONEIXEMENTS PREVIS**RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

ALTRES TIPUS DE REQUISITS

Es requereixen els coneixements previs sobre química, física o ciències de materials que s'imparteixen en les titulacions indicades en el perfil d'ingrés recomanat al màster. Es requereixen els coneixements previs



sobre nanociència i nanotecnologia molecular que s'imparteixen en els Mòduls Introducció i Bàsic.

COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENTATGE

-

Adquirir els coneixements bàsics en els fonaments, l'ús i les aplicacions de les tècniques microscòpiques i espectroscòpiques utilitzades en nanotecnologia.

Avaluar la rellevància de les molècules i dels materials híbrids en electrònica, espintrònica i Nanomagnetismo molecular.

Avaluar les relacions i diferències entre les propietats macroscòpiques dels materials i les propietats dels sistemes unimoleculares i els nanomaterials.

Conèixer els problemes tècnics i conceptuals que planteja la mesura de propietats físiques en sistemes formats per una única molècula (transport de càrregues, propietats òptiques, propietats magnètiques).

Conèixer les aproximacions metodològiques utilitzades en Nanociència.

Conèixer les principals aplicacions biològiques i metgesses d'aquesta àrea

Conèixer les principals aplicacions de les nanopartícules i dels materials nanoestructurats -obtinguts o funcionalitzats per mitjà d'una aproximació molecular- en magnetisme, electrònica molecular i biomedicina.

Conèixer les principals aplicacions tecnològiques dels nanomaterials moleculars i ser capaç de situar-les en el context general de la Ciència de Materials.

Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.

Que els estudiants d'una àrea de coneixement (p.e. física) siguin capaços de comunicar-se i interaccionar científicament amb col·legues d'altres àrees de coneixement (p.e. química en la resolució de problemes plantejats per la Nanociència i la Nanotecnologia Molecular.

Que els estudiants hagen adquirit els coneixements i habilitats necessàries per a seguir futurs estudis de doctorat en Nanociència i Nanotecnologia.

Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autòdirigida o autònoma.

Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.

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.



DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Introducció i conceptes bàsics de l'electrònica basada en materials moleculars i de l'electrònica unimolecular.
2. Dispositius electrònics moleculars: OFETs, OLEDs i cèl·lules fotovoltaïques; estructura i tipus de dispositius; fonaments físics del seu funcionament; materials constituents; comparació amb els dispositius inorgànics. Cèl·lules fotovoltaïques de tercera generació com DSSC, OPV i Perovskitas.
3. Electrònica unimolecular: conceptes bàsics del transport electrònic coherent a través de molècules; tècniques experimentals per a la mesura del transport quàntic i fabricació de nanodispositius moleculars.
4. Modelització teòrica del transport quàntic.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Tutories	6,00
Teoria	22,50
Seminari	7,50
Altres activitats	2,00
Total hores	38,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	0,00
Estudi i treball autònom	0,00
Preparació de classes	18,00
Preparació d'activitats d'avaluació	56,50
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	74,50

METODOLOGIA DOCENT

Les classes d'esta assignatura s'impartiran, juntament amb les de la resta del mòdul avançat, de manera intensiva durant 3 setmanes de maig i cada any en una universitat diferent.

Durant les **classes teòriques** el professorat donarà una visió general del tema objecte d'estudi posant l'accent en els aspectes nous o d'especial complexitat. S'indicaran les fonts bibliogràfiques necessàries per a l'aprofundiment per part de l'alumnat.

Les **classes pràctiques** d'esta assignatura es dedicaran a l'organització de seminaris en els quals es



plantejaran i resoldran problemes relacionats amb el contingut teòric. D'igual manera, es discutiran amb l'alumnat casos pràctics i altres temes relacionats amb la matèria.

Durant estes hores d'activitats pràctiques s'organitzaran, en la mesura que siga possible, vistes als laboratoris i instal·lacions relacionades amb els continguts de les classes teòriques. Això inclou visites als laboratoris de fabricació de dispositius en atmosfera controlada i en sala blanca i als equips de mesures elèctriques i òptiques de dispositius. A més, es duran a terme exercicis pràctics senzills amb els principals programes de computació utilitzats per a la modelització teòrica del transport quàntic en dispositius electrònics moleculars.

Després de les classes presencials intensives, el professorat plantejarà als estudiants una sèrie de **qüestions** sobre els continguts impartits que l'alumne haurà de resoldre.

El professorat realitzarà **tutories** amb l'alumnat per a resoldre els dubtes i qüestions que puga resoldre. Estes tutories seran de manera presencial o a distància (email, videoconferència, telèfon, etc.) segons si alumne i professor són de la mateixa o diferent universitat.

AVALUACIÓ

L'adquisició de les competències de l'assignatura s'avaluarà mitjançant la realització d'un examen escrit basat en les qüestions que s'han plantejat a l'alumnat. La nota d'este examen representarà el 90% de la nota final de l'assignatura.

La participació de l'alumnat durant les activitats formatives representarà el 10% de la nota final.

Per a aprovar l'assignatura serà necessari haver assistit a un 80% de les activitats formatives presencials.

BIBLIOGRAFIA



- Organic Electronics: Foundations to Applications. Stephen R. Forrest. © Stephen R. Forrest 2020. Published in 2020 by Oxford University Press. DOI: 10.1093/oso/9780198529729.001.0001
- World Scientific Series in Nanoscience and Nanotechnology: Volume 1. Molecular Electronics. An Introduction to Theory and Experiment. Juan Carlos Cuevas (Universidad Autónoma de Madrid, Spain), Elke Scheer (Universität Konstanz, Germany)
- Lessons from Nanoelectronics. A New Perspective on Transport. Supriyo Datta (Purdue University, USA) World Scientific, 2012 - "Dye-Sensitized Solar Cells: Advances and Challenges", Peng Wang, CRC Press, edición: 2018
- "Organic Photovoltaics: Concepts and Realization" Christoph Brabec, Ullrich Scherf, Springer, 2018 - "Perovskite Solar Cells: Technology and Practices" Showkat Ahmad Bhawani, Iek-Heng Chuah, Ahmad Shahrizan bin Sulaiman, Wiley, 2020
- "Electrons in Molecules. From Basic Principles to Molecular Electronics", Jean-Pierre Launay, Michel Verdaguer. Oxford University Press, 2014