

PERSPECTIVA ACTUAL EN NANOCIÈNCIA I NANOTECNOLOGIA

**Jordi Pascual
Director
Institut Català de Nanotecnologia**

ÍNDEX

El Nanomón

Fonaments físics

Definició de nanociència i nanotecnologia

1959 R.P. Feynman

1983 Microscopi de rastreig túnel (STM)

1983-2006 Evolució científica

Copiar la naturalesa

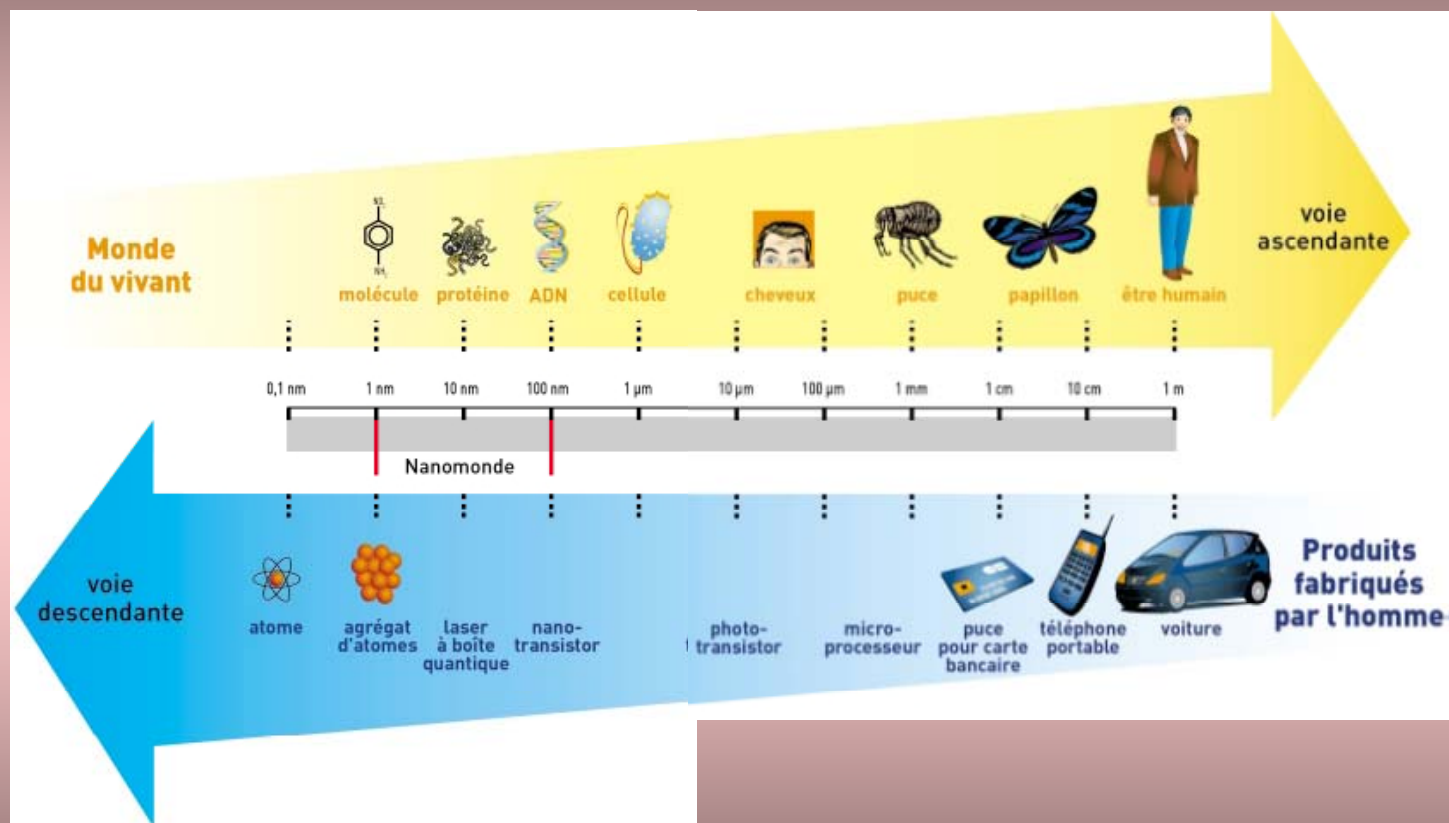
Principals àrees d'aplicació; exemples

NANO-?

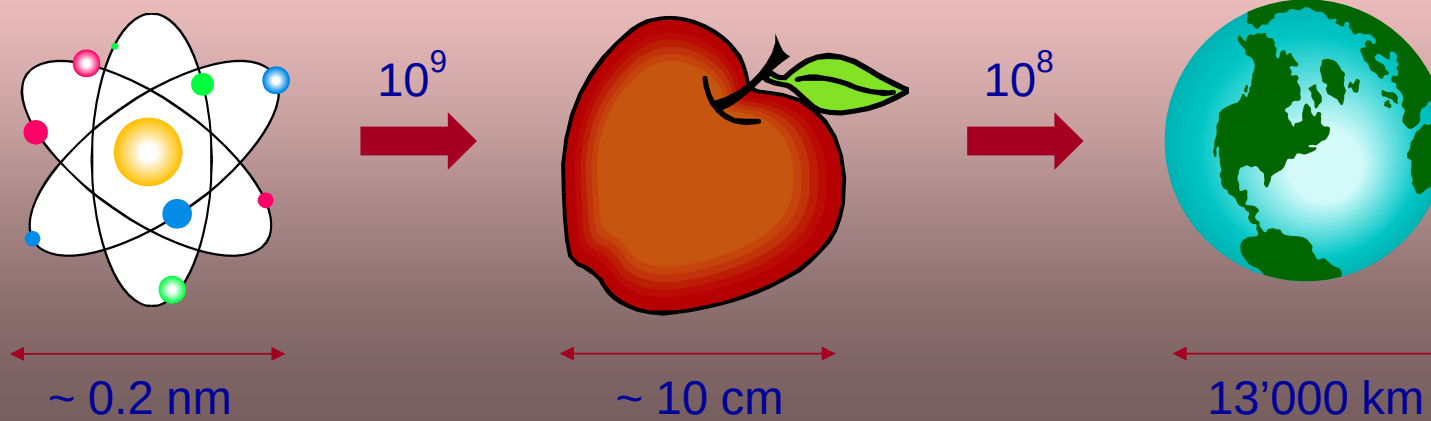
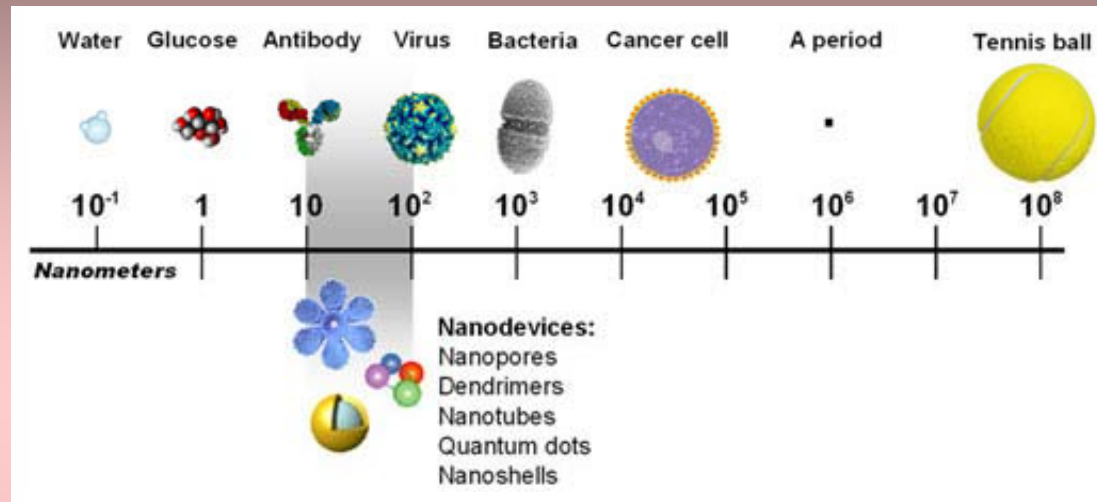
Escala (en unitats de 10^3):

Teràmetre (Tm)	10^{12} (1000000000000)
Gigàmetre (Gm)	10^9 (1000000000)
Megàmetre (Mm)	10^6 (1000000)
Kilòmetre (Km)	10^3 (1000)
metre (m)	1
mil·límetre (mm)	10^{-3} (0.001)
micròmetre (μm)	10^{-6} (0.000001)
nanòmetre (nm)	10^{-9} (0.000000001)
picòmetre (pm)	10^{-12} (0.000000000001)
femtòmetre (fm)	10^{-15} (0.000000000000001)
attòmetre (am)	10^{-18} (0.0010000000000000001)

Nanomón

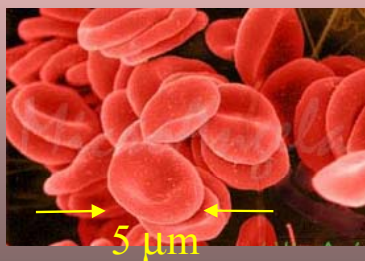
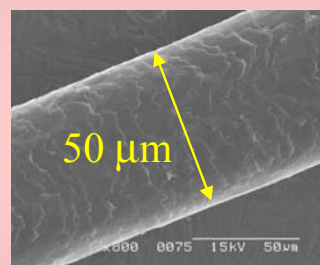


Nanomón





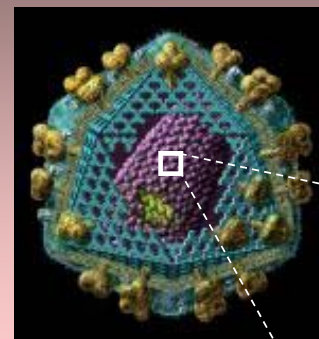
Cabell
humà



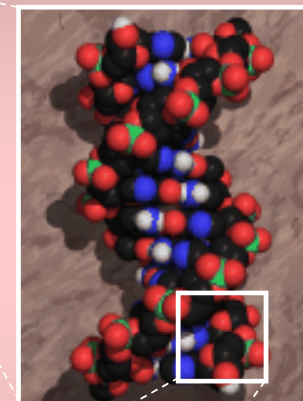
Glòbuls
rojos

Nanomón

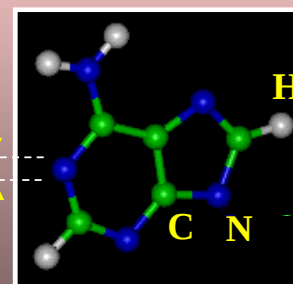
Virus de la SIDA



ADN
2 nm



Adenina



Nanomón

És un món de **NOUS CONCEPTES?**,
(com la teoria de la relativitat o la mecànica quàntica)

NO

És un món de **NOUS FENÒMENS?**,

SI

s'expliquen a partir de teories establertes (MQ, ...)

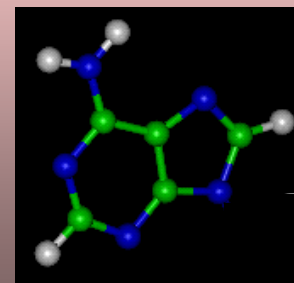
Macromón: mil·límetre, micra



Física Clásica

Nanomón: àtoms, molècules, ...

Física Quàntica



EFFECTES DE SUPERFÍCIE

Estudi de sòlid a partir dels efectes de volum:

Quan les tres dimensions són de l'ordre o superior al μm ($N \sim N_A$)

En aquest cas, quina influència tenen les condicions de contorn?

Diferència en la quantificació dels estats (electrònics, fonons, etc.),
però mateixa densitat d'estats.

Importància de les condicions de contorn:

$$V \sim r^3 \quad S \sim r^2$$

$$S/V \sim 1/r$$

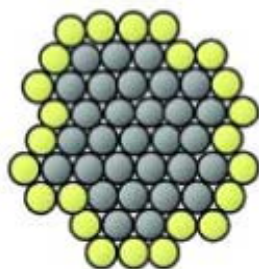
Tot canvi en la superfície afecta directament les propietats.

Importància de la dimensió, la forma, etc. que **determina** les propietats.

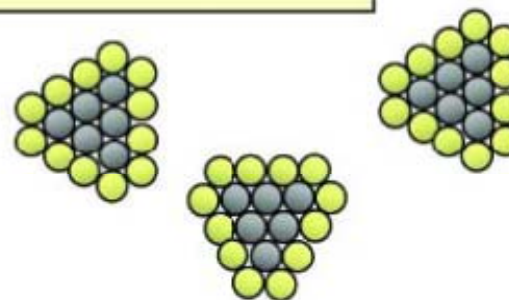
Importància de la funcionalització o "tractament" de la superfície .

Catàlisi

Why nanoparticles make better catalysts



54 atoms total
24 reactive surface atoms
30 non-reactive internal atoms

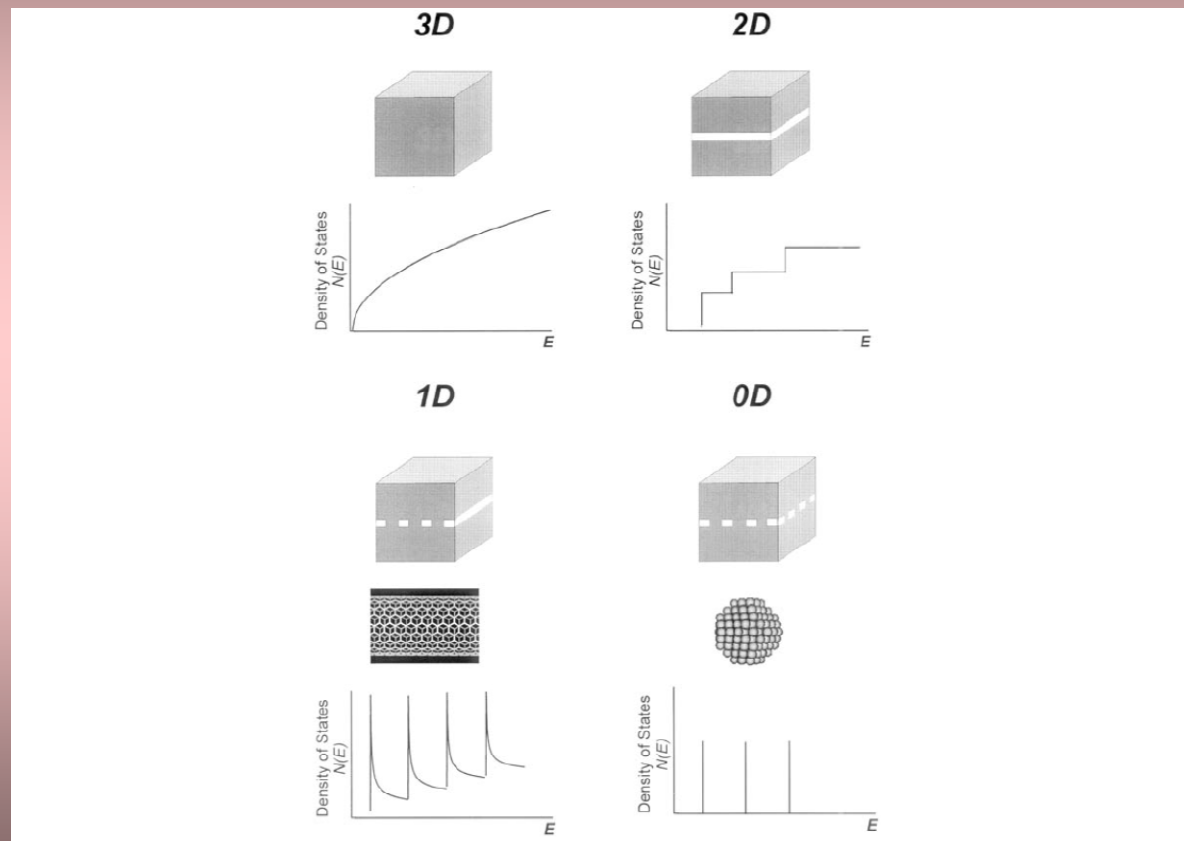


54 atoms total
36 reactive surface atoms
18 non-reactive internal atoms

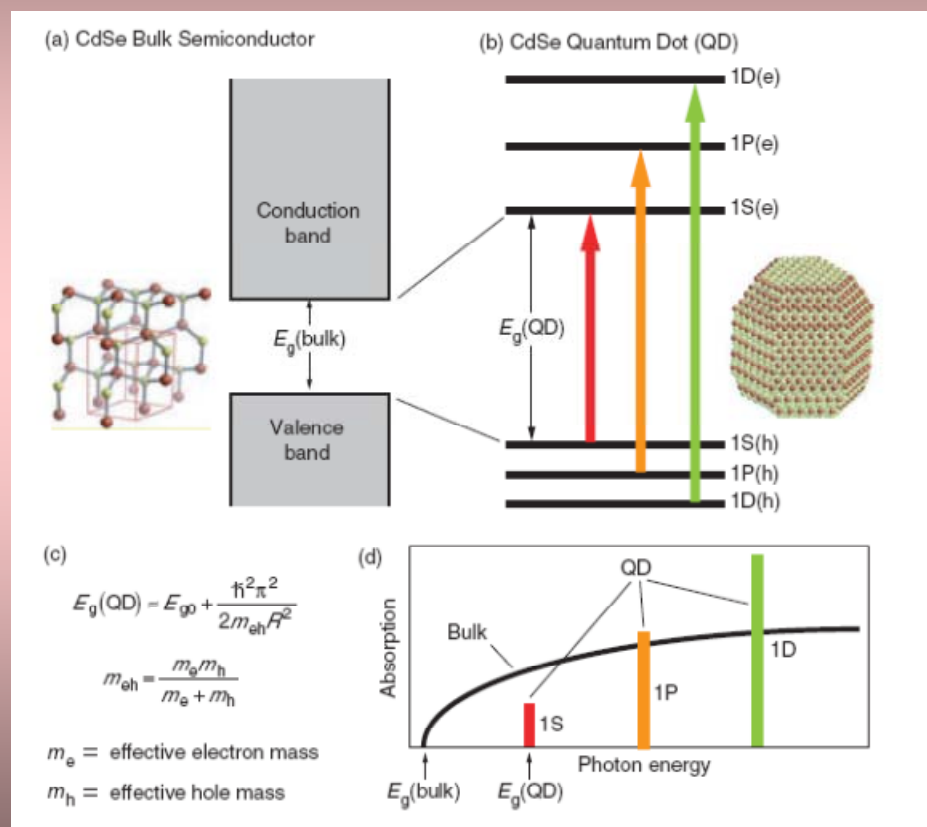
NOUS CONCEPTES FÍSICS? EN PRINCIPI NO; NOUS FENÒMENS

CAMP	PROPIETAT	ESCALA DE LONGITUD (nm)
Electrònica	Longitud d'ona electrònica Lliure recorregut mig Túnel	10-100 1-100 1-10
Magnetisme	Parets de dominis Longitud scattering spin-flip	10-100 1-100
Òptica	Pous quàntics Camps evanescents Longitud de penetració en metalls	1-100 10-100 10-100
Superconductivitat	Longitud de coherència parells de Cooper Profunditat penetració Meissner	0.1-100 1-100
Mecànica	Interacció de dislocacions Fronteres de gra Defecte per nucleació/creixement	1-1000 1-10 0.1-10
Catàlisi	Topologia de superfície	1-10
Supramolècules	Longitud de Kuhn Estructura secundària Estructura terciària	1-100 1-10 10-1000
Immunologia	Reconeixement molecular	1-10

DIMENSIONALITAT I DENSITAT D'ESTATS

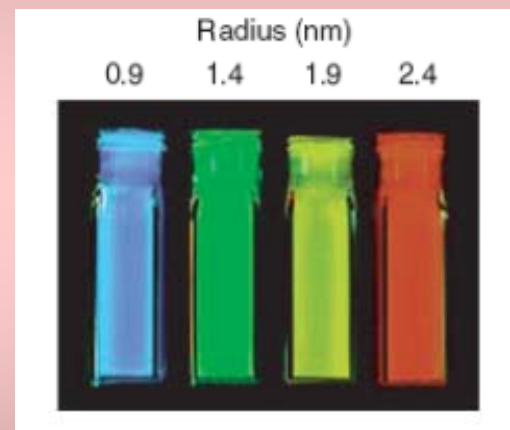
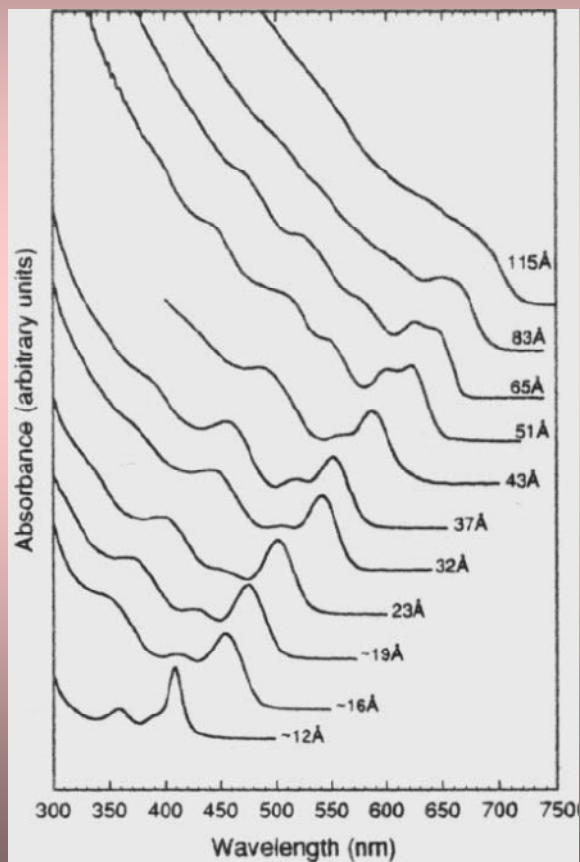


Variació del gap d'absorció als semiconductors



$$E(e,h) \sim 1/r^2$$

Teòricament les propietats òptiques depenen del quocient
 $r/r_B(3D)$



Nanocrystals CdSe de diferents mides

DEFINICIÓ DE NANOCIÈNCIA I NANOTECNOLOGIA

És la ciència, enginyeria i tecnologia relacionada amb el coneixement i control de la matèria a escala d'aproximadament 1 a 100 nm.

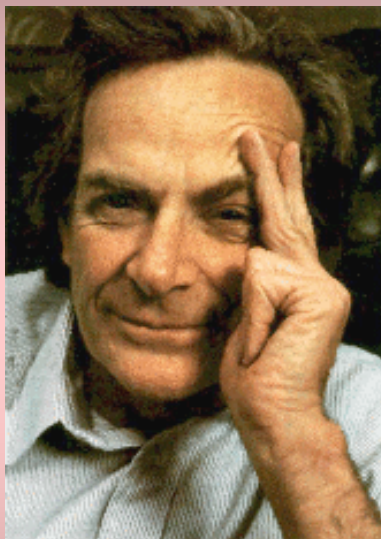
N+N és també la recerca i el desenvolupament de materials, dispositius i sistemes amb noves propietats i funcions degut a les seves dimensions nanomètriques o components.

Moltes estructures biològiques i processos es fan a escala nanomètrica: [?]

Només inclourem dins de N+N

- Estudis que utilitzen eines i conceptes de N+N
- Enginyeria de molècules biològiques amb realització de funcions diferents de les que fan a la natura
- Manipulació de sistemes biològics per mètodes més precisos dels que es fan utilitzant biologia molecular, química sintètica o aproximacions bioquímiques que s'han utilitzat durant anys en recerca biològica

PER QUÈ PARLEM AVUI DE NANOTECNOLOGIA ?



“There’s Plenty of Room at the Bottom...”

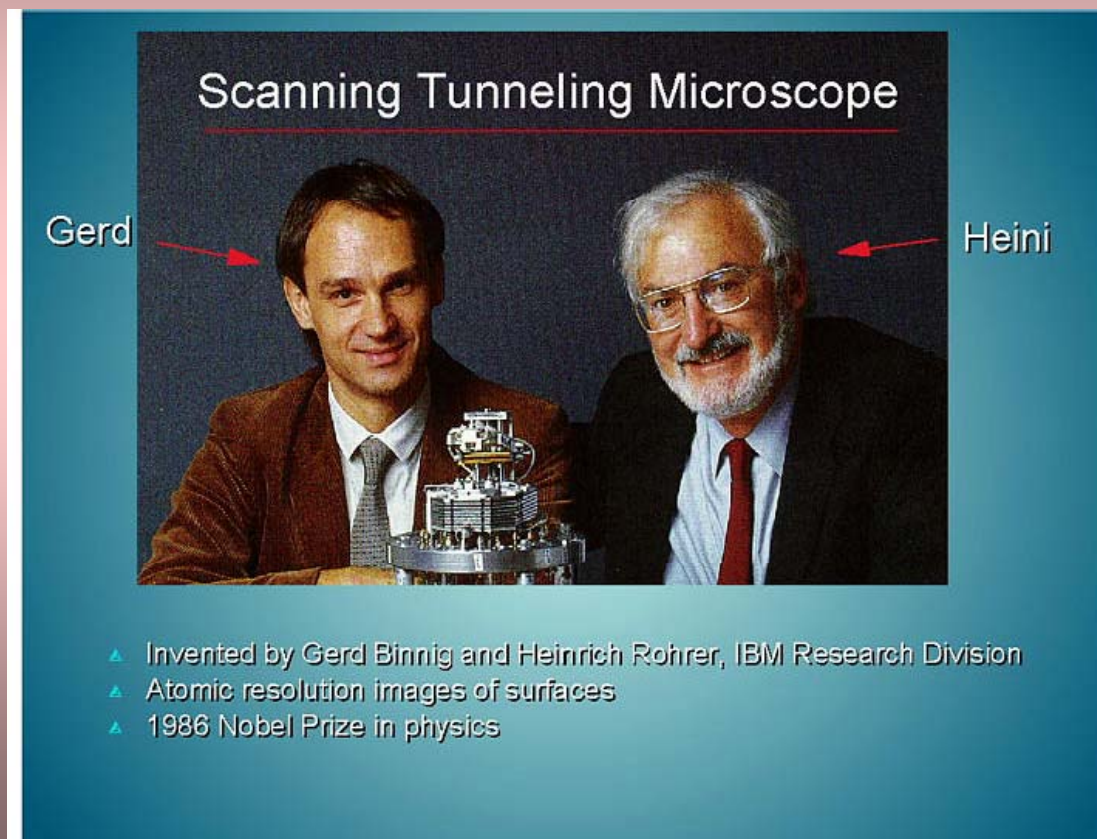
Richard P. Feynman, **1959**

Conferència impartida el 29 de desembre de 1959,
en la reunió anual de l’American Physical Society,
al California Institute of Technology (Caltech).

“No hi ha cap llei física que impedeixi manipular àtoms i molècules
individualment, o fabricar estructures a partir d’aquests”

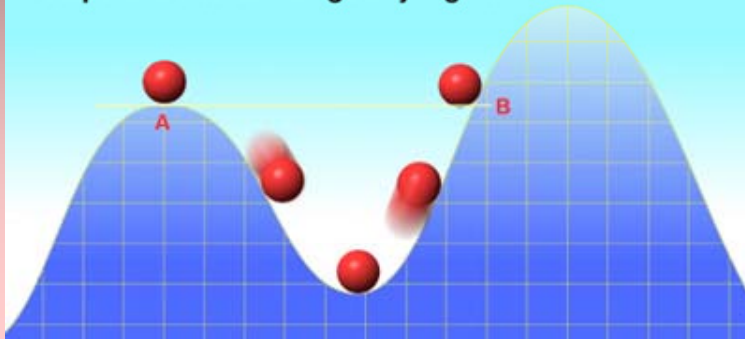
1959-2006 [?]

1983 Veure objectes a escala atòmica (Microscopi de rastreig túnel)

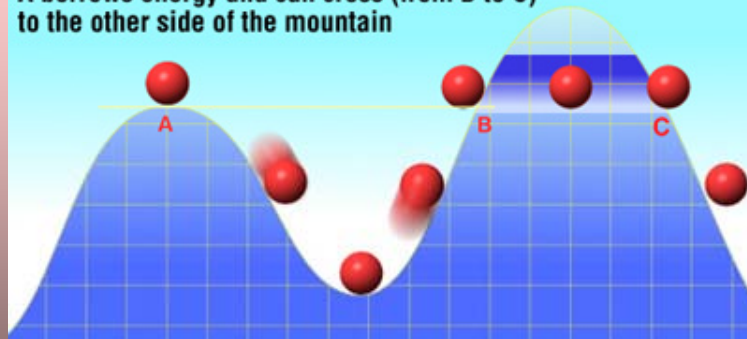


EFFECTE TÚNEL

In classical dynamics,
A stops at B and cannot go any higher

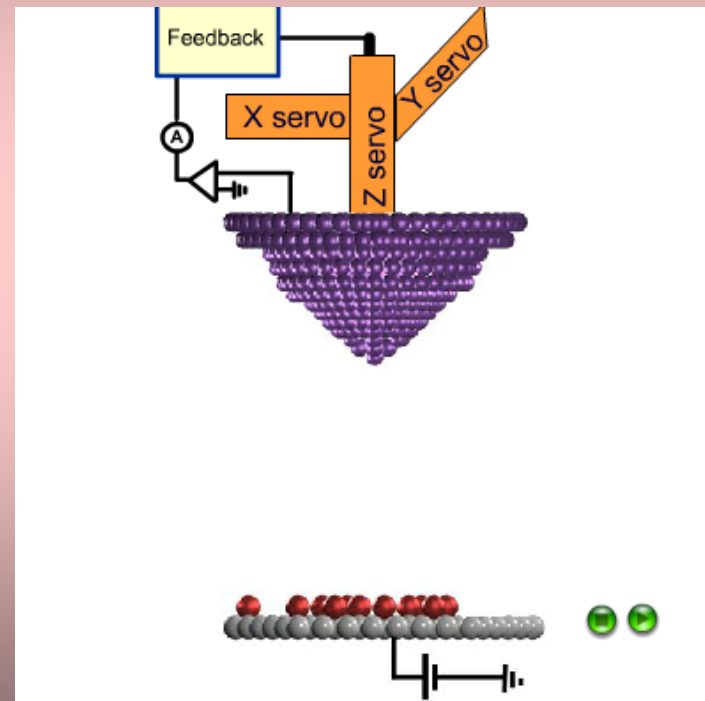


In quantum mechanics,
A borrows energy and can cross (from B to C)
to the other side of the mountain

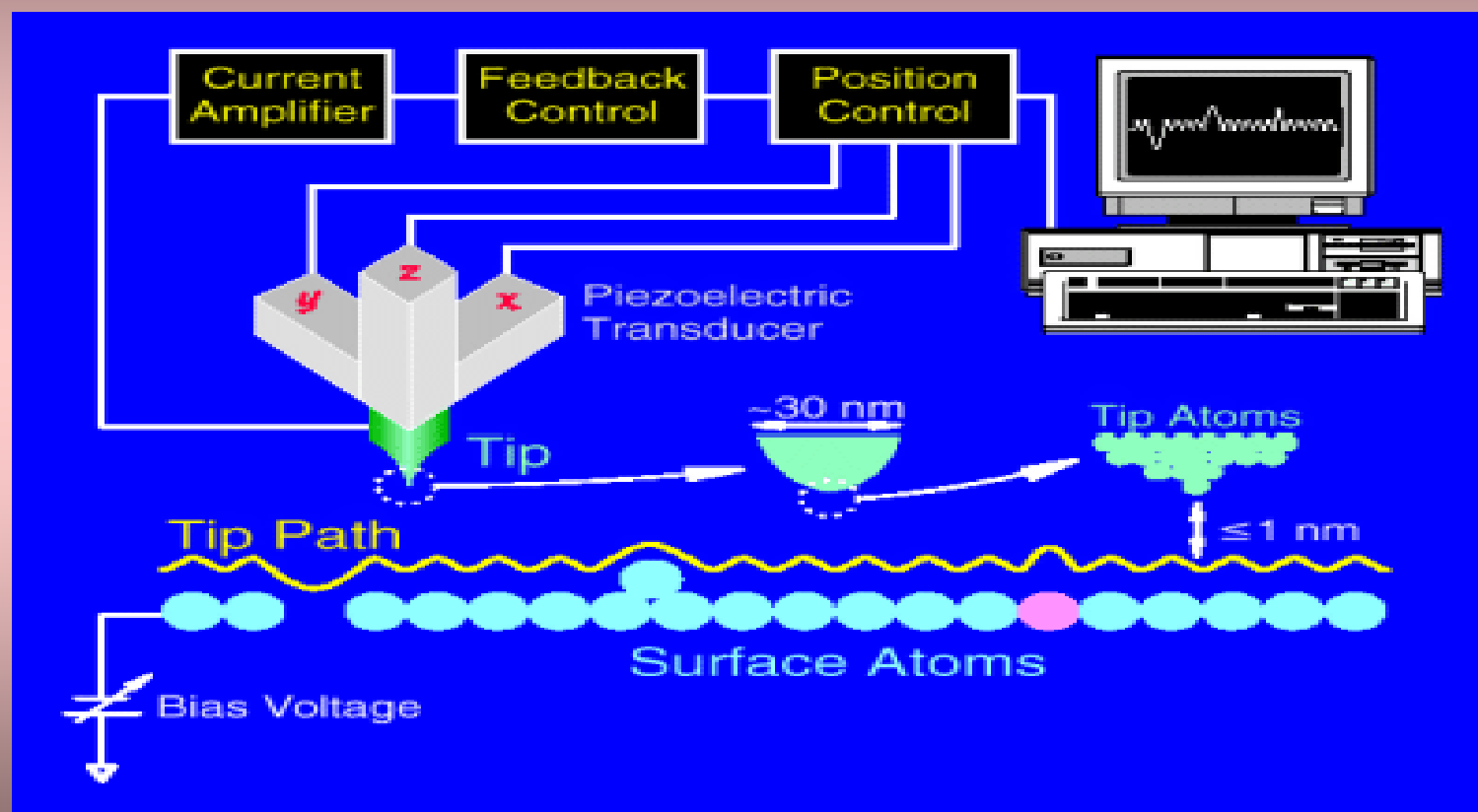


STM

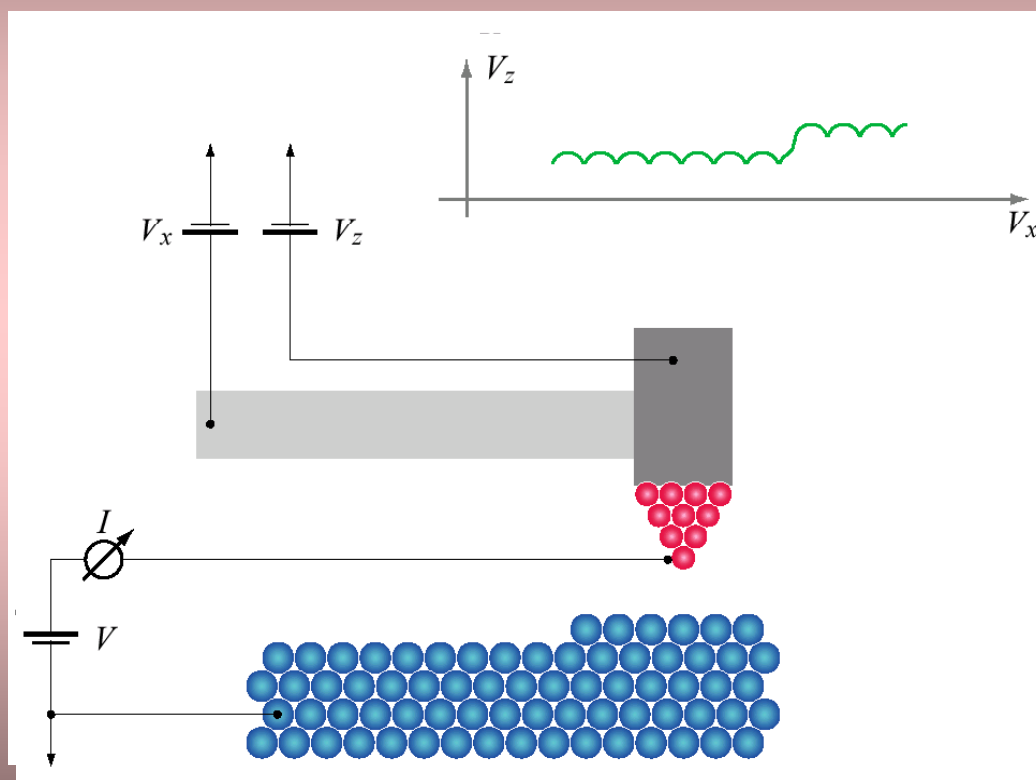
$$I_t \propto \exp(-d/d_0)$$



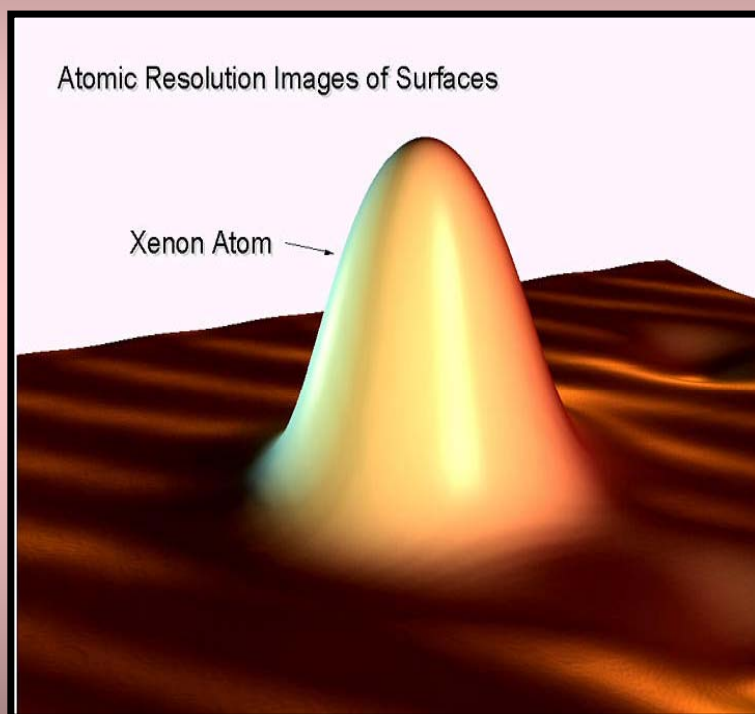
STM: Principi bàsic



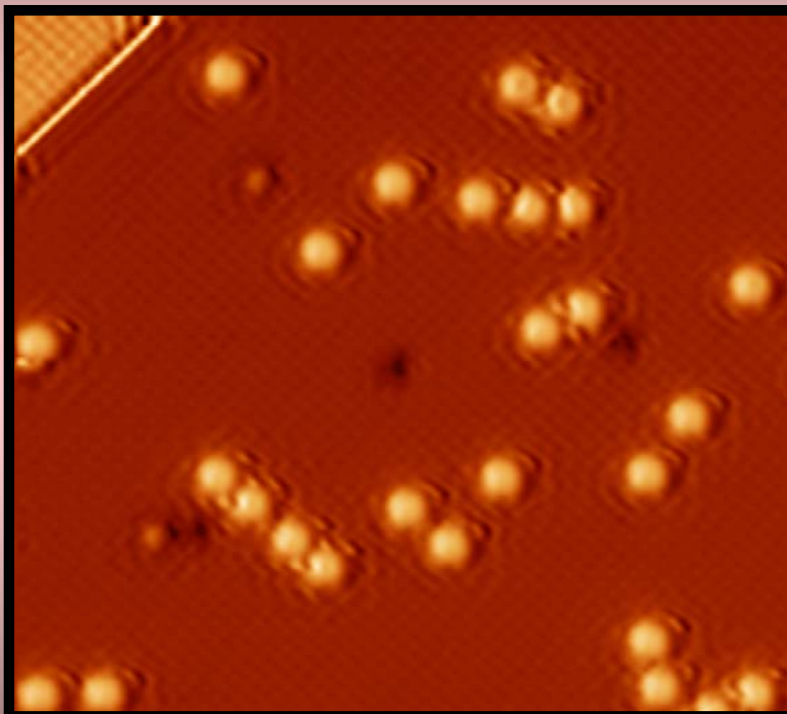
STM: Funcionament



STM: Veure àtoms, molècules, agregats, ...

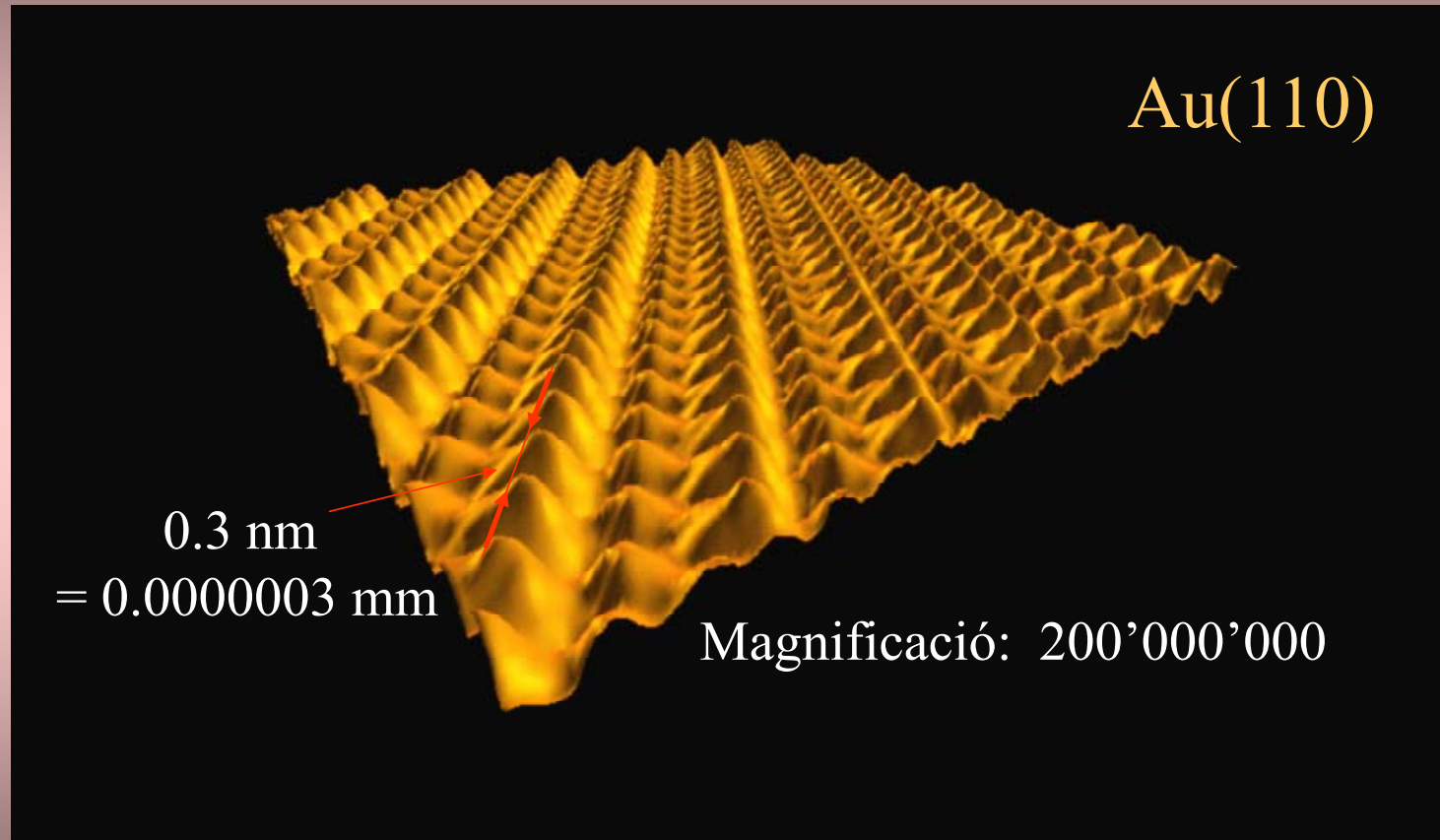


Àtom de Xenó

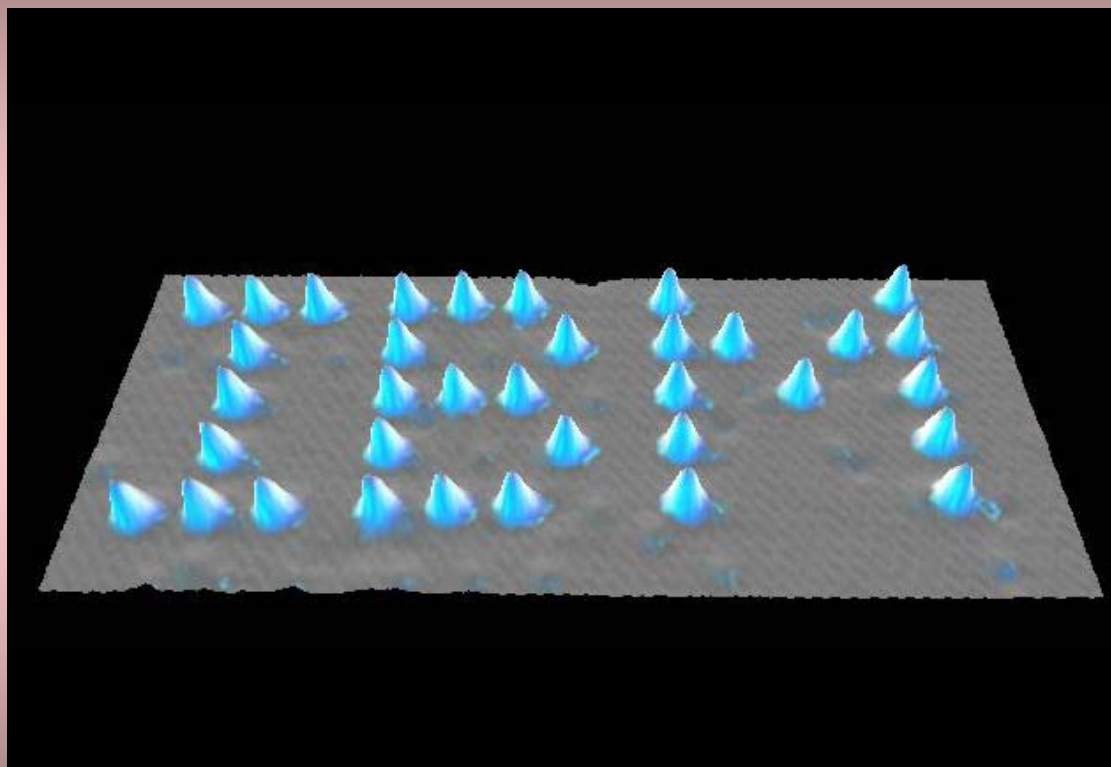


Benzè sobre Cu(100)

Estudi de superfícies



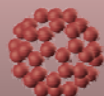
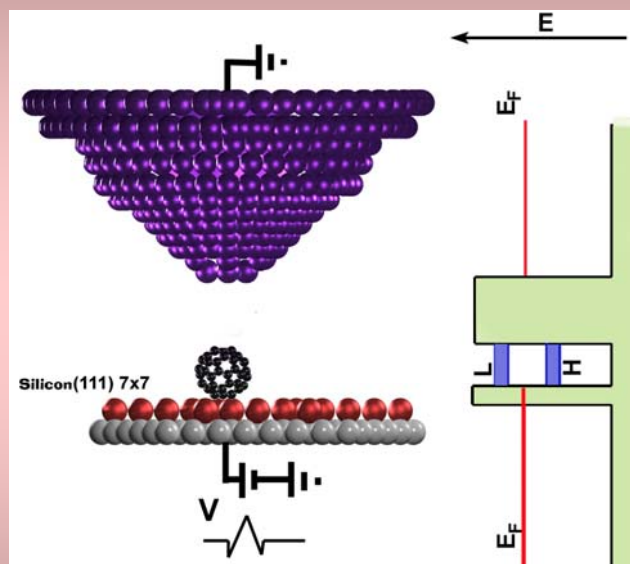
STM: Manipulació atòmica



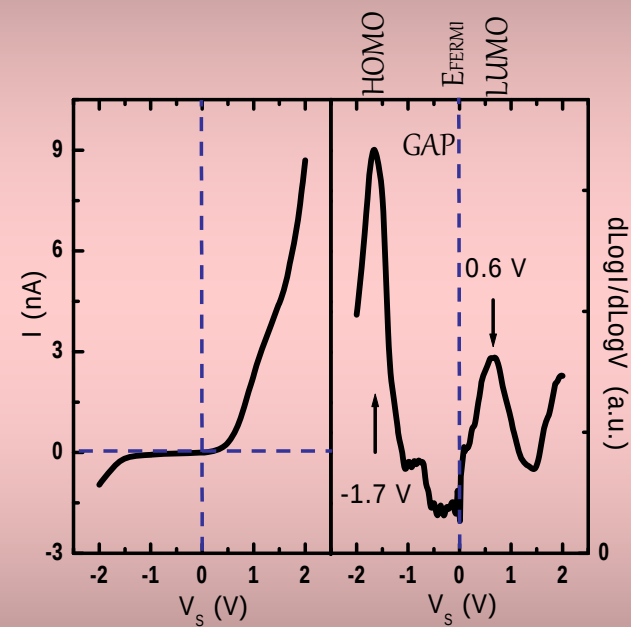
Xenó sobre Ni(110)

D.M. Eigler, E.K. Schweizer. Positioning single atoms with a scanning tunneling microscope. Nature 344, 524-526 (1990)

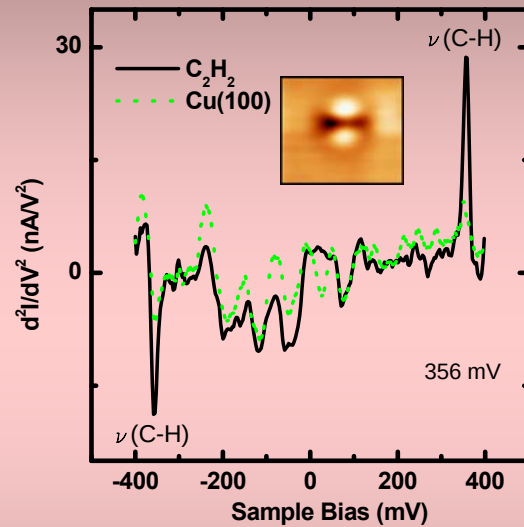
STM: Estructura electrònica



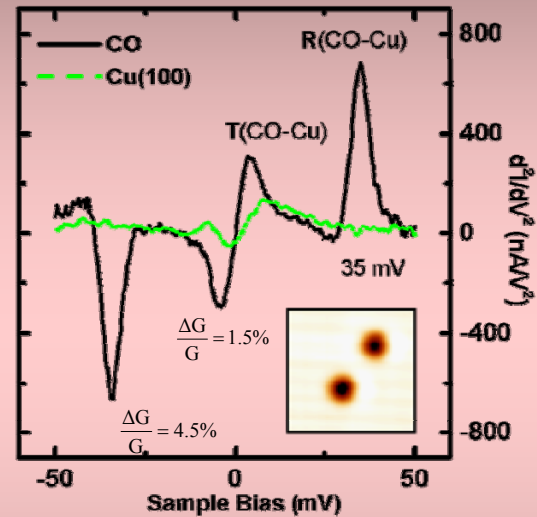
C_{60} sobre Au(111)



STM: Espectroscòpia de vibració



C_2H_2 sobre Cu(100)



Vibració lligam adsorbat-substrat: Co-Cu(100)

Identificació química d'adsorbats

Caracterització d'entorns químics

Caracterització de propietats específiques d'enllaços

Caracterització d'interaccions adsorbat-adsorbat,

...

1983 ... 2006 (Evolució científica)

Nous mètodes de caracterització: SPM (Scanning Probe Microscopies)

AFM: Microscopi de forces atòmiques

Síntesi de nanoobjectes (nanopartícules, nanotubs, QDs, ...)

Funcions

Nano-estructures multi-funcions, motors moleculars, ...

Funcionalització de nanoobjectes (aplicacions mèdiques, biosensors, ...)

Fer més petit (**Top-down**): Augment de la densitat (nanofabricació en electrònica, nanomagnetisme, ...).

Desenvolupament de *nova instrumentació*

Fer més gran (**Bottom-up**): Auto-organització, nano-compostos, biomimètics, ...

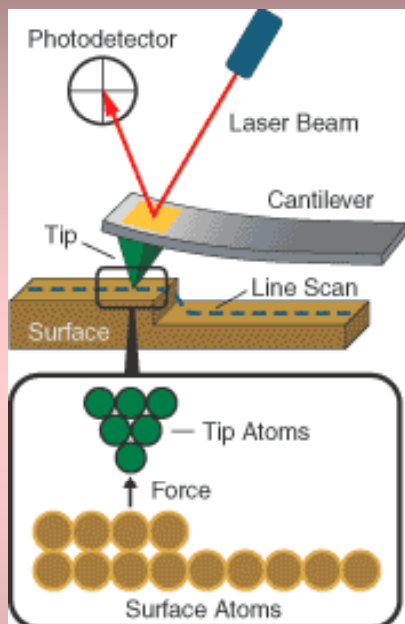
Teoria

Eines de *simulació*

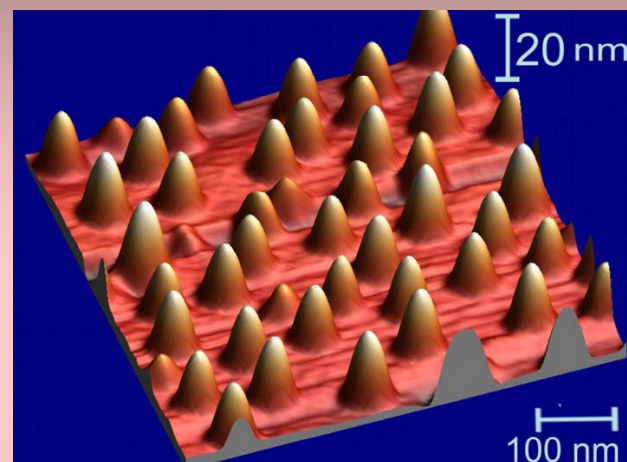
Capacitat de plantejar-se l'estudi d'*estructures complexes*

NOUS MÈTODES DE CARACTERITZACIÓ

AFM (Microscopi de forces atòmiques)



Mitjançant un feix làser es transmet la desviació de l'agulla del sensor a la cèl·lula fotoelèctrica

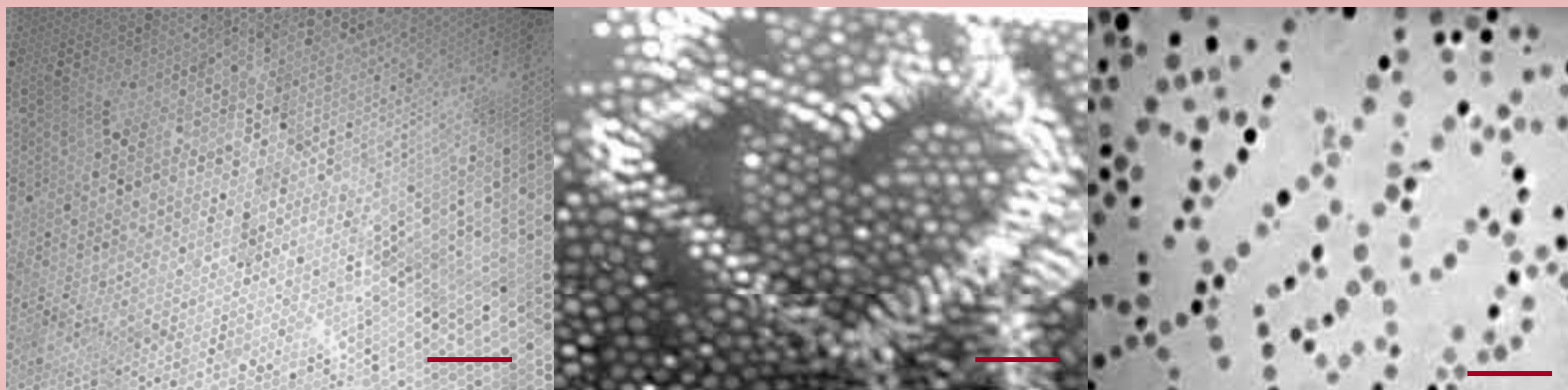


Nano-illes de Ge sobre Si(100)

Als materials inorgànics les forces per trencar enllaços químics són ~ 1 nN
Amb l'AFM es poden aconseguir forces de ~ 1 nN i penetracions fins a 20 nm
(amb una resolució inferior a 1 nm)

SÍNTESI

Nanopartícules de Co



9 nm

12 nm

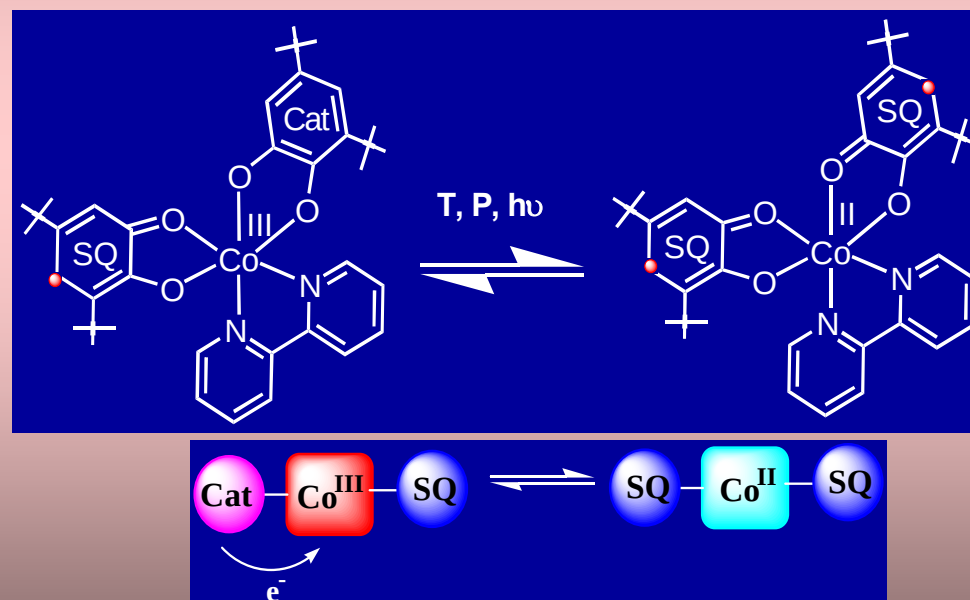
16 nm

— 100 nm

FUNCIONS

Nano-estructures multifuncionals

Sistemes moleculars biestables: Comportament sota estímuls externs

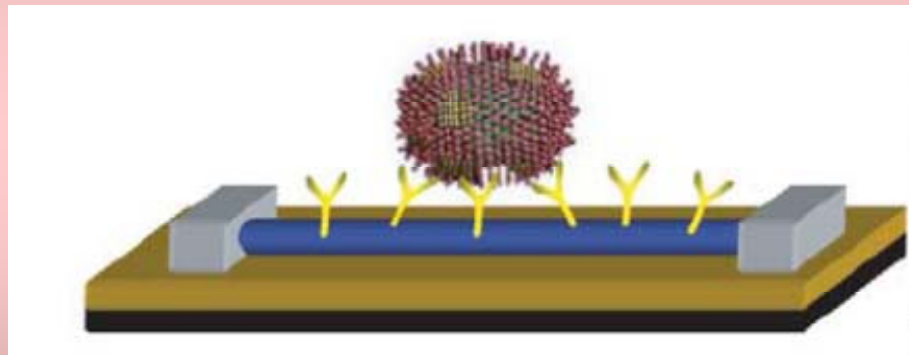


FUNCIONS

Funcionalització de nanoobjectes

Biosensors de CNTs

Els organismes utilitzen enzims, anticossos,..., per interactuar amb el seu entorn

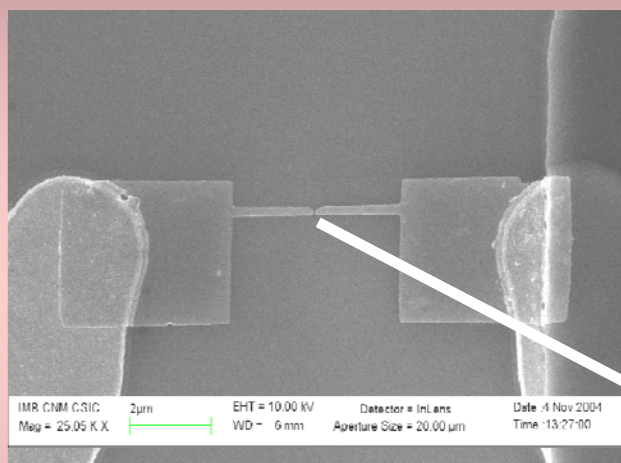


Funcionalització de la superfície d'un nanotub de carboni amb biomolècules
Mida dels nanotubs similar a la de les biomolècules

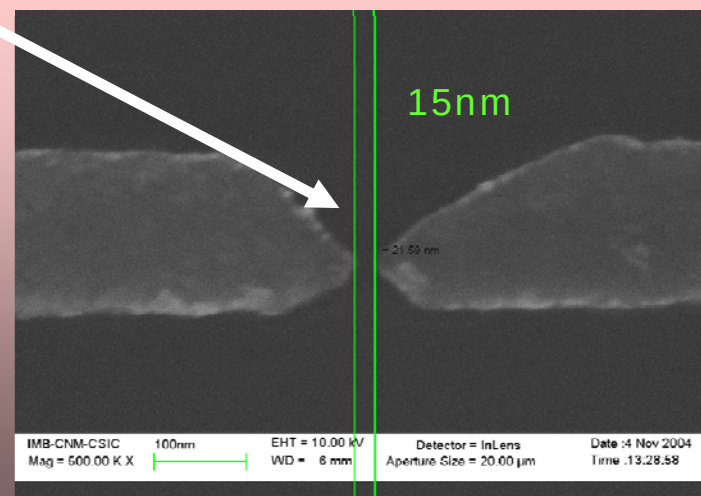
FUNCIONS **top-down** **Nanofabricació**



Sistema de nanolitografia e-beam



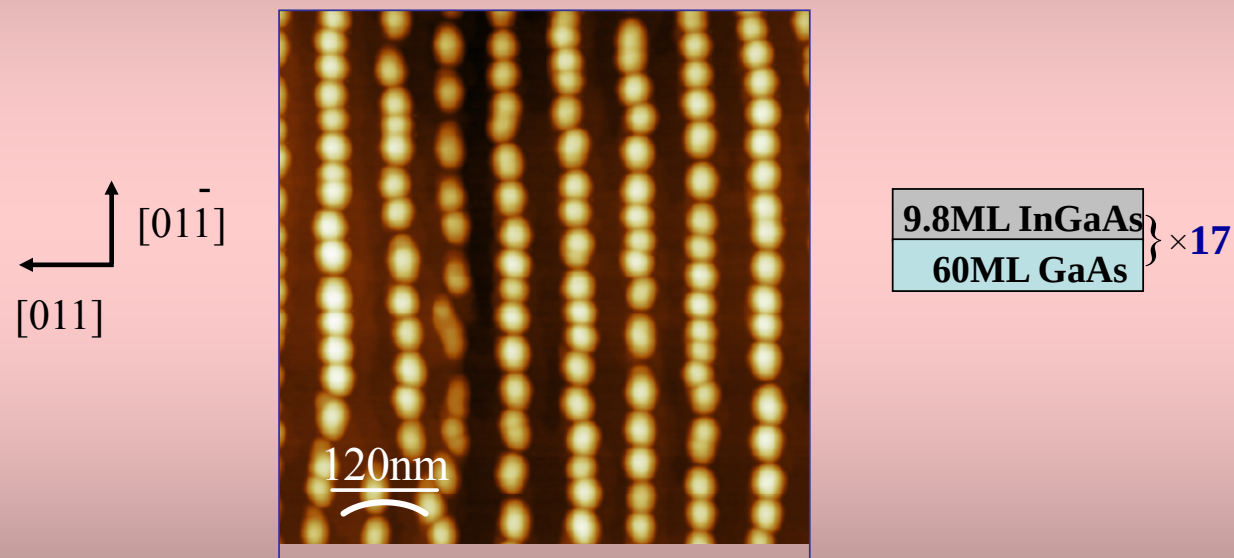
Nanoelèctrodes



FUNCIONS

Bottom-up

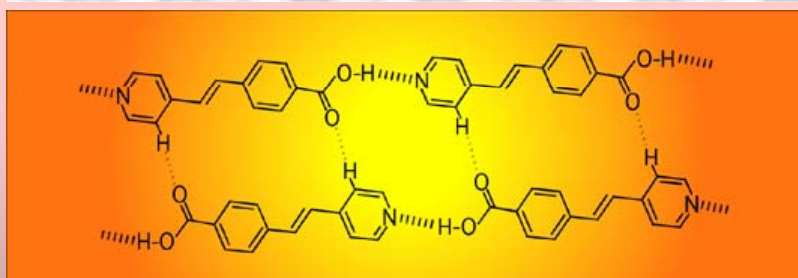
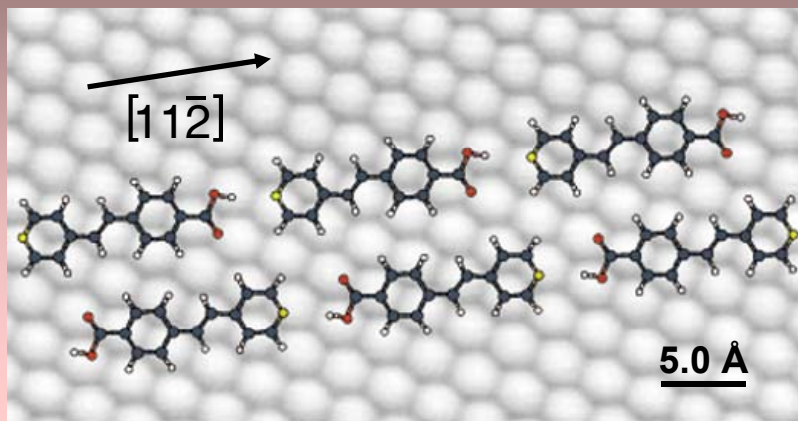
Ordre en estructures GaInAs/GaAs



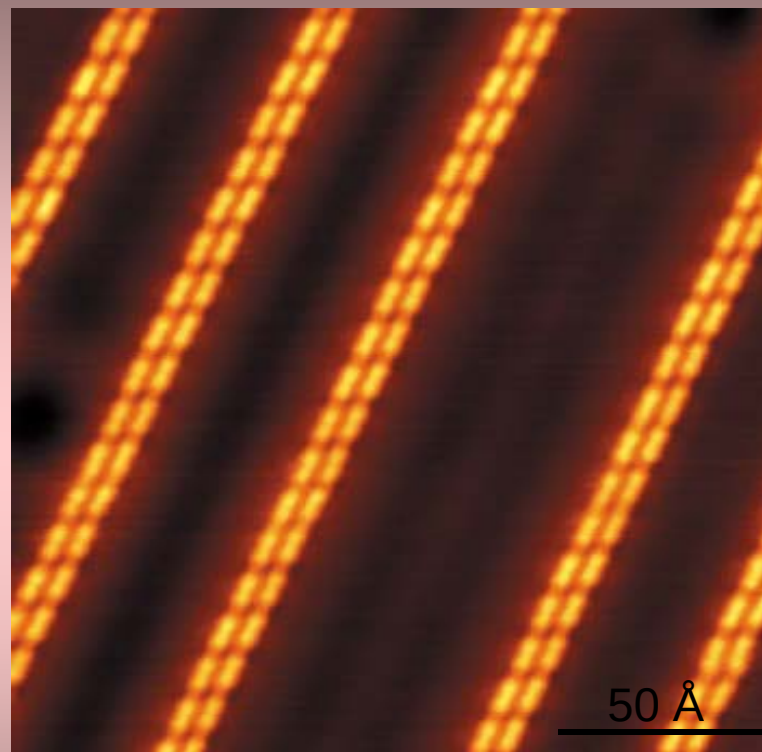
Ordre lateral induït per efectes de tensions

Dipòsit de molècules PVBA sobre Ag(111)

model



Mesura STM

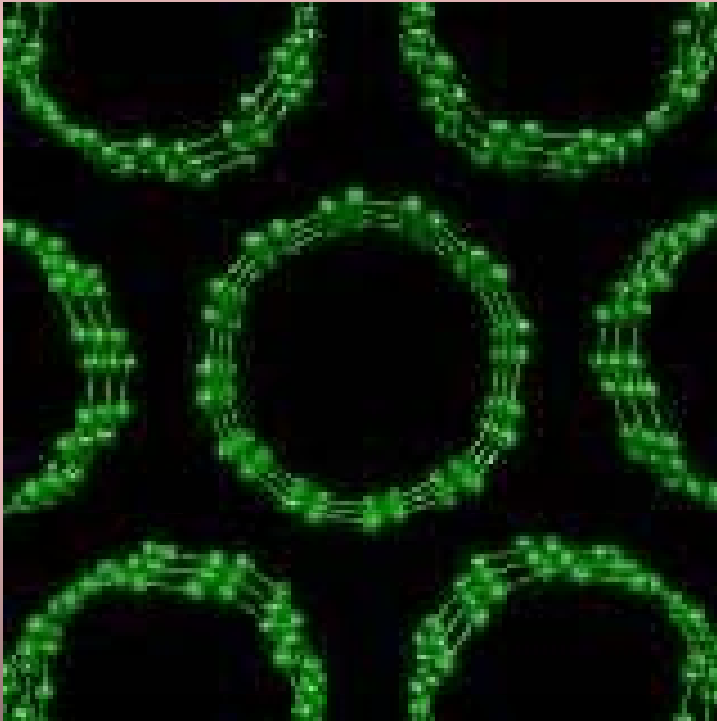


Interessant per:

- Organització en fils moleculars
- Propietats electròniques (electrònica molecular)

TEORIA

Nanotubs de carboni



Nanotubs sota pressió:

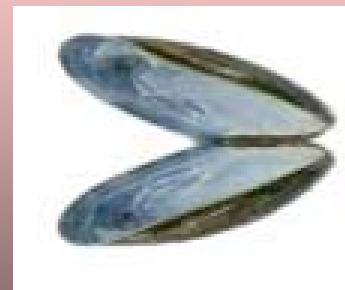
Transformació estructural en diamant
hexagonal $P = 0$ $\longrightarrow$ $P = 25 \text{ GPa}$

Observat experimentalment després de la
predicció teòrica

LA NANOTECNOLOGIA I LA NATURALES

En els seus 4.000 milions d'anys la naturalesa ha trobat solucions a molts dels seus problemes

La matèria viva s'estructura al nivell del detall més fi, fins a nivell atòmic. Aquest és un dels camins camí que vol refer el nanotecnòleg, però amb nous sistemes, també "a mida".



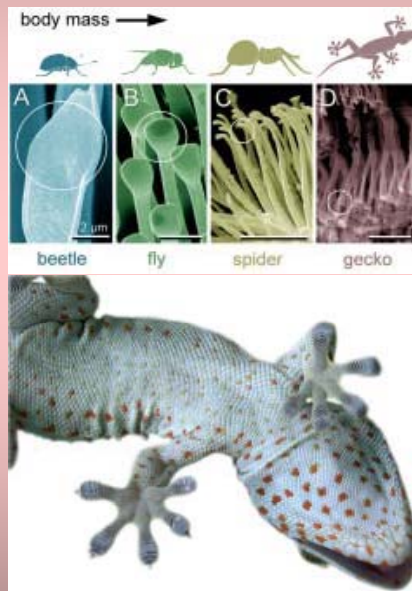
EFFECTE LOTUS



El creixen manté les seves fulles netes per "l'efecte lotus". La superfície és peluda i les gotes d'aigua s'escolen enduent-se la brutícia.

La nanotecnologia utilitza capes primes de material hidròfob per mantenir netes les parets, o nanopartícules funcionalitzades amb radicals hidròfobs, per fer teixits que no es taquen.

ANIMALS “CAP PER AVALL” I FORCES DE VAN DER WAALS



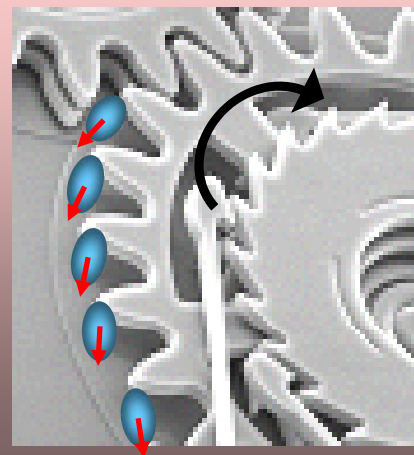
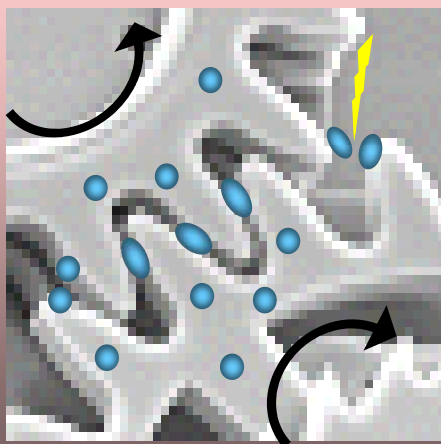
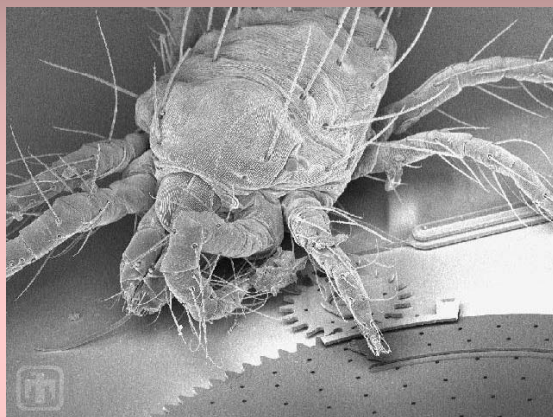
Mosques, aranyes, dragons,... s'aguanten a les parets i el sostre.

Potes recobertes de pèls fins. S'adhereixen per forces de van der Waals. El número de pèls per pota depèn del pes i mida de l'animal (el dragó en té milions).

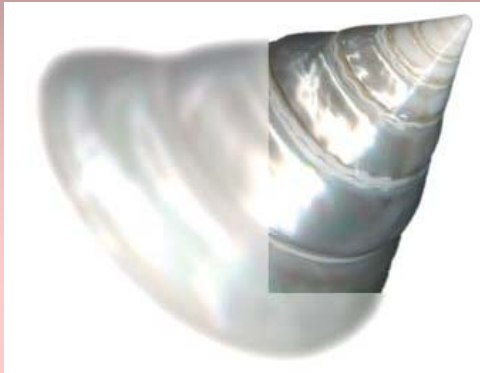
Els enllaços es trenquen fàcilment per efecte de “pelat”.

L'AIGUA I ELS MEMS i NEMS

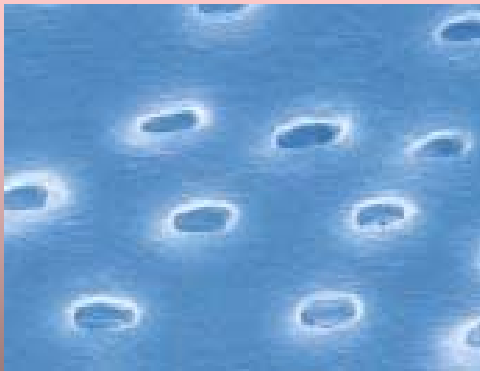
(MicroElectroMechanical Systems i NanoElectroMechanical Systems)



LA BIOMINERALITZACIÓ



El nacre de les petxines està format per cristalls d'aragonit, fràgils, però units per proteïnes molt elàstiques. N'hi ha prou amb un 3% del pes en proteïnes per que que la closca sigui unes tres mil vegades més forta que la d'un cristall pur de calcita.



Les nanopartícules reparen les dents:
La sensibilitat als aliments freds o calents, o el dolor en contacte amb aliments amargs es deu a petits canals que es formen a l'esmalt de les dents. Aquests canals es poden tancar molt bé amb un compost de nanopartícules d'apatita (fosfat càlcic) i proteïnes. La capa mineralitzada es comporta a la boca com l'esmalt.

PRINCIPALS ÀREES D'APLICACIÓ

Ciència de materials

Actualment el camp més desenvolupat i de major impacte

- Estructures moleculars organitzades

 - Nous imants moleculars

 - Estructures multifuncionals

 - Dispositius biestables, en funció dels estímuls externs

 - Robots moleculars

- Nanopartícules

 - Reforçar materials

 - Noves cèl·lules solars

 - Vidres cromòfors

 - Biosensors

 - Funcionalitzar cosmètics

 - Nanoestructures superficials (resistents al ratllat, hidròfobes,...)

- Nanotubs i nanofil·ls

 - Nous dispositius nanoelectrònics

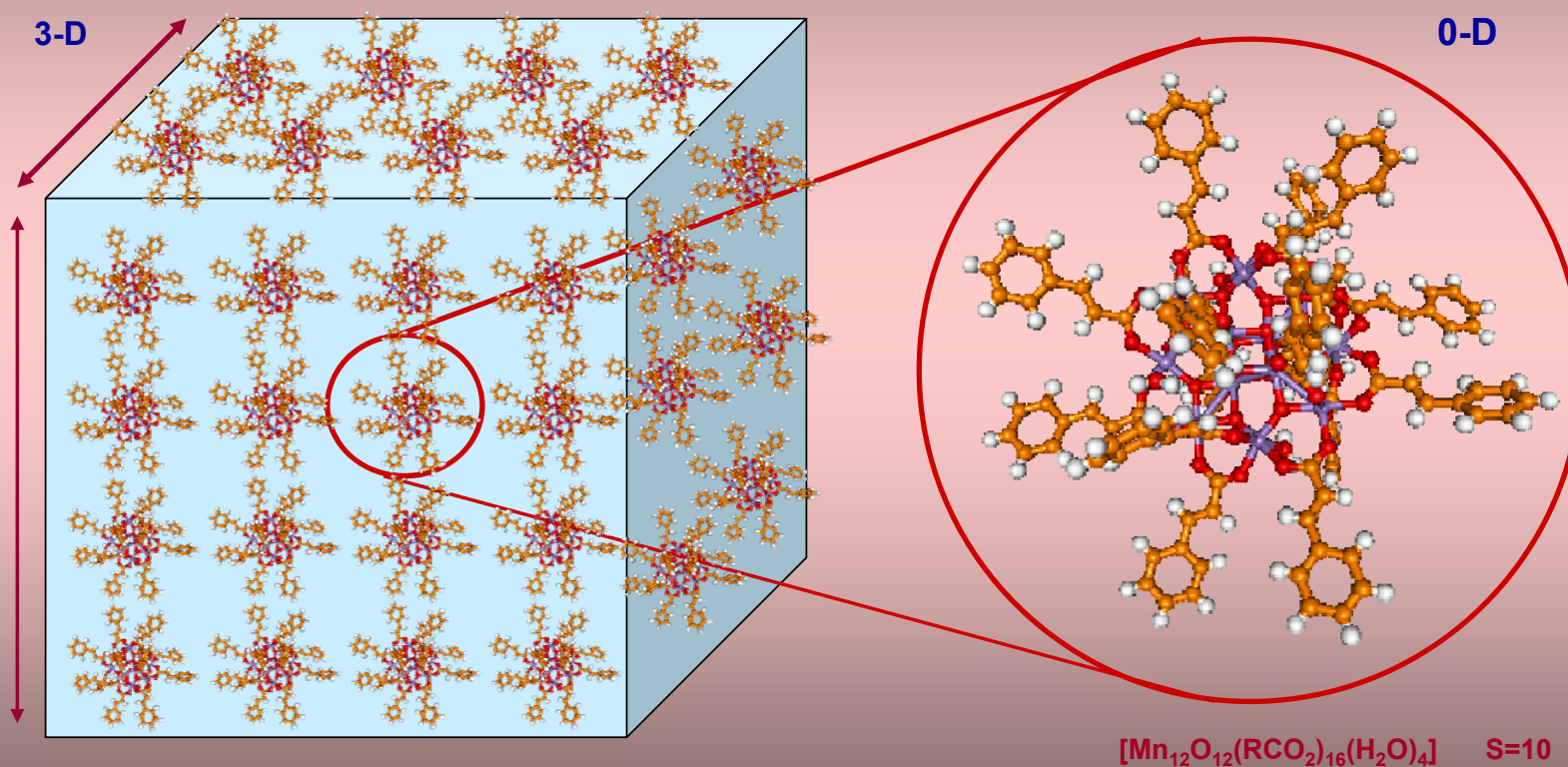
 - Nanoòptica

 - Biosensors, ...

...

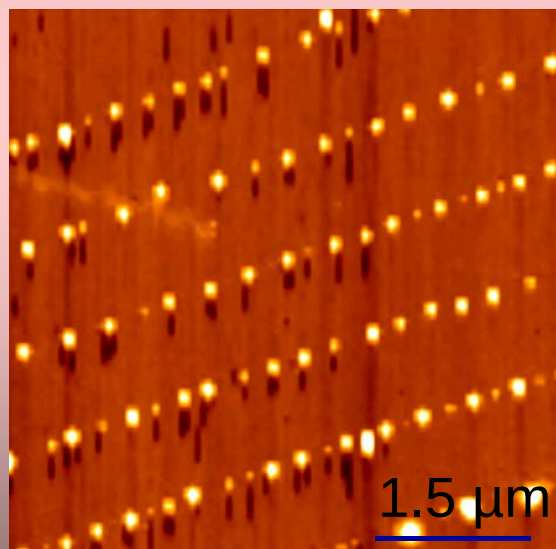
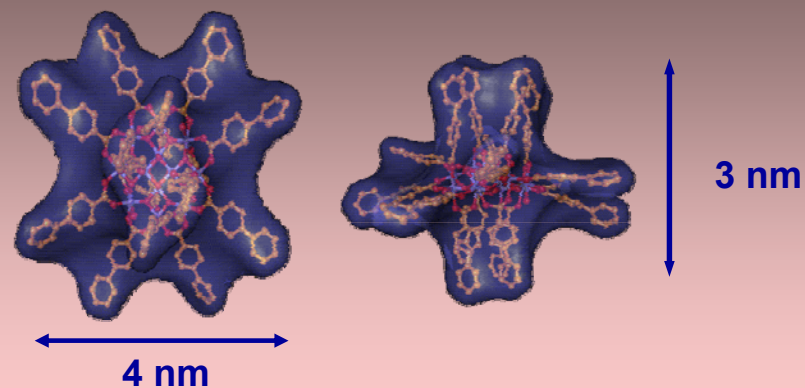
IMANTS MOLECULARS

Propietats funcionals: origen no intermolecular sinó...

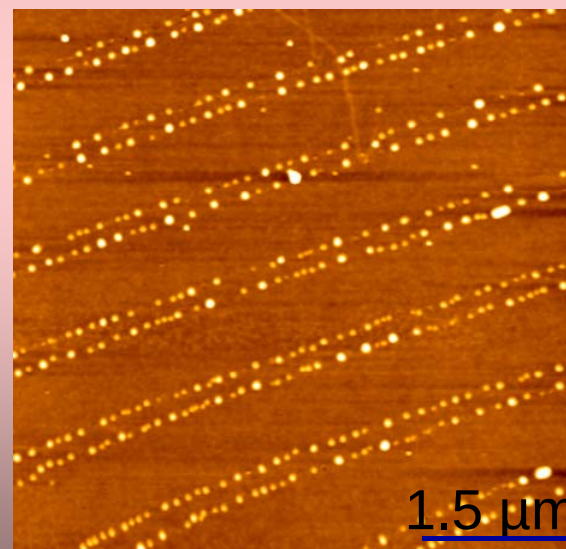


... intramolecular

IMANTS MOLECULARS en superfícies



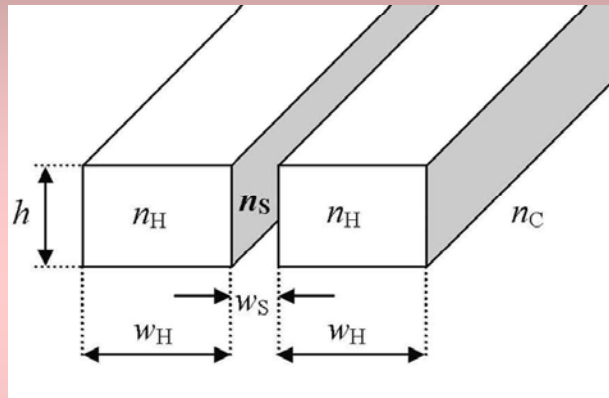
$\phi = 170 \pm 15 \text{ nm}$
 $\text{dist.} = 640 \pm 25 \text{ nm}$
 $h = 40 \pm 9 \text{ nm}$



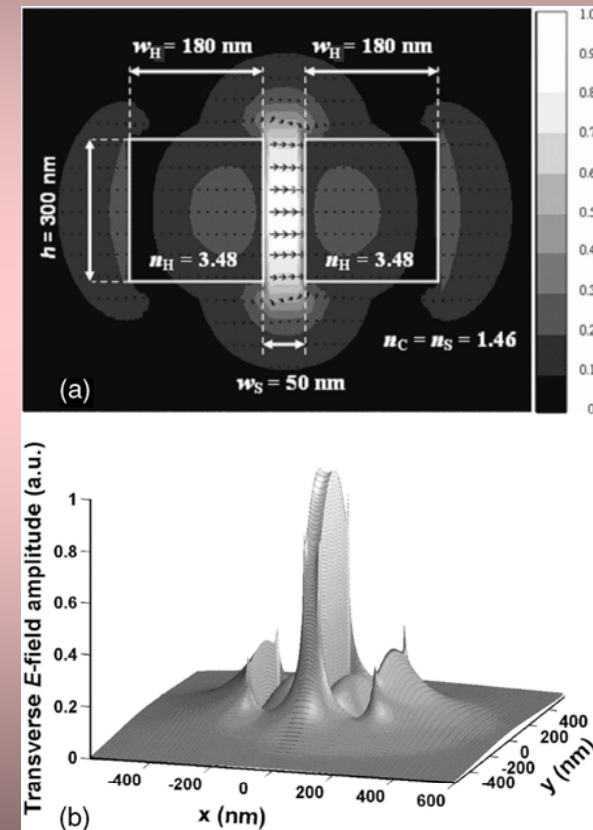
$\phi = 70 \pm 10 \text{ nm}$
 $\text{dist.} = 200 \pm 25 \text{ nm}$
 $h = 8 \pm 2 \text{ nm}$

NANOÒPTICA

Transmissió / Pèrdues en estructures sub- λ

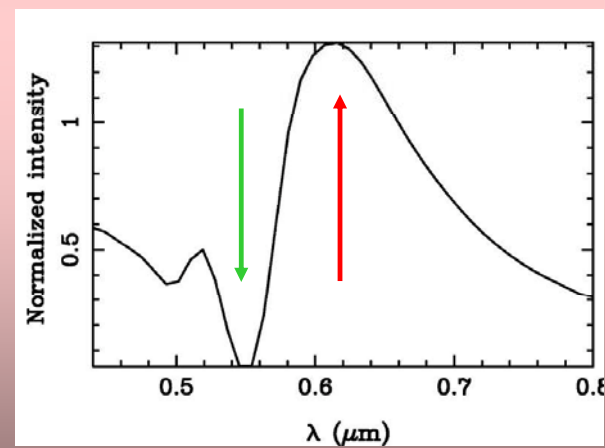
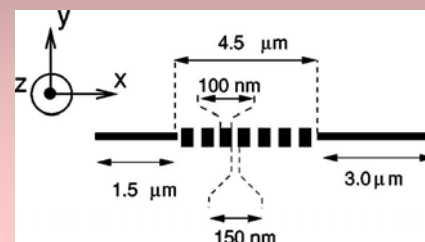
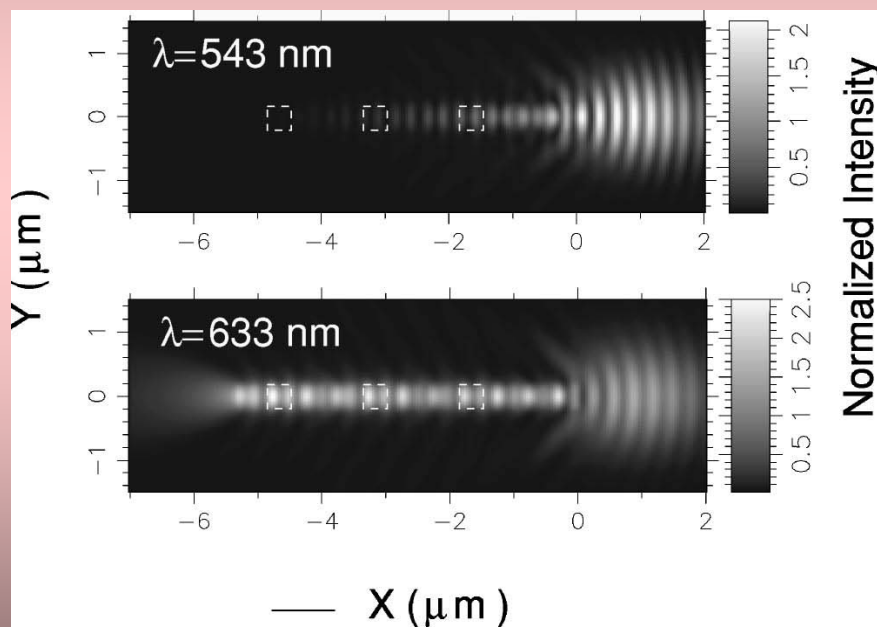


Discontinuitat del camp E a la interfície
 d'alt contrast $\Rightarrow$ Intensificació del camp i
 confinament en el material de baix índex



TÚNEL ÒPTIC RESSONANT

Funció clorofil·lica (?)



PRINCIPALS ÀREES D'APLICACIÓ

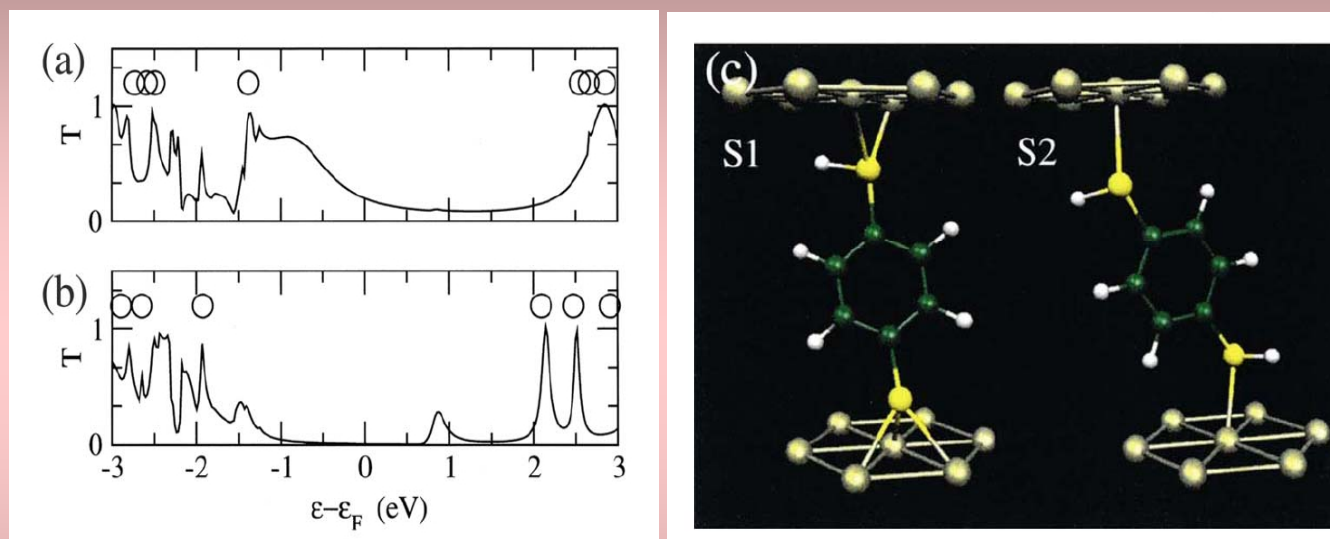
Nanoelectrònica i tecnologies de la informació

Reducció de mida dels xips i ampliació de memòria
Nanoelectrònica (actualment < 90 nm)
Ordinadors orgànics?. “Somni”: emmagatzemar i processar informació sense intervenció d'altres elements electrònics (com el cervell)
Nanoelectrònica molecular i biomolecular
Emmagatzematge de dades d'alta densitat (Terabit/polzada)
Spintrònica i informàtica quàntica
Dispositius a un electró

Fabricació d'instruments per estudi i desenvolupament a escala nano

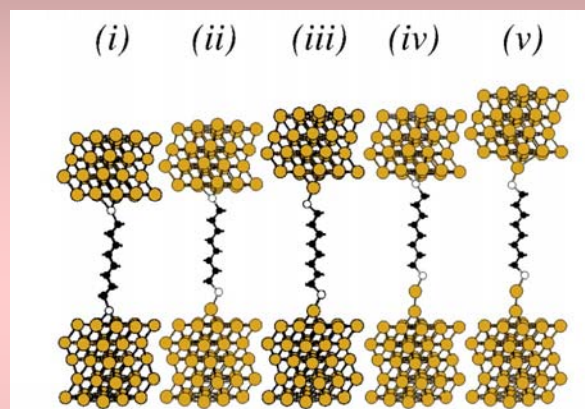
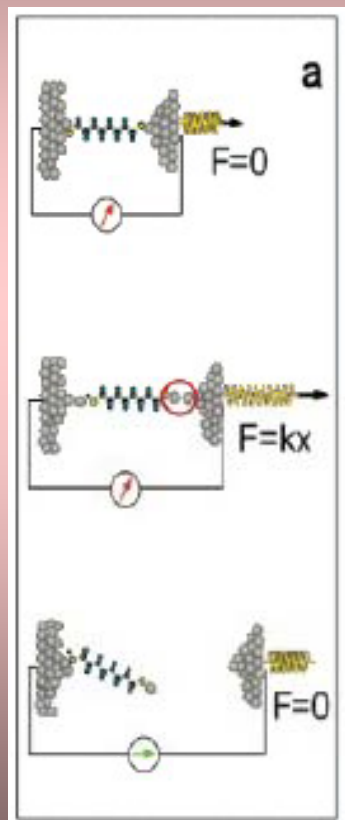
Metrologia
Caracterització
Nous mètodes de fabricació
...

TRANSPORT ELECTRÒNIC electrònica molecular-1



Coeficients de transmissió (relacionats directament amb la conductància elèctrica) (a) y (b), d'una molècula de ditiol benzè en contacte amb dos elèctrodes d'Au, per dues configuracions atòmiques S1 y S2, respectivament, mostrades a (c). La conductància canvia radicalment pel sol fet d'eliminar un àtom d'hidrogen al contacte amb l'elèctrode

TRANSPORT ELECTRÒNIC electrònica molecular-2



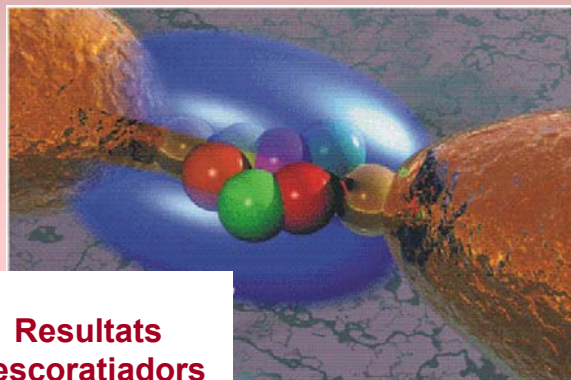
Efectes de l'estirament

Estructura del contacte molècula-elèctrode

Límit de ruptura

Propietats de transport

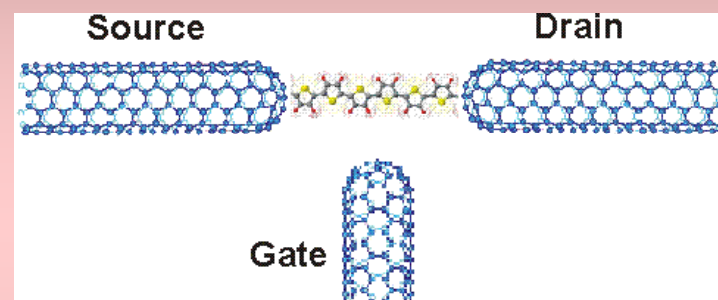
TRANSPORT ELECTRÒNIC electrònica molecular-3



**Resultats
descoratjadors**

Reproductibilitat de resultats (?)

Contacte metall-molècula



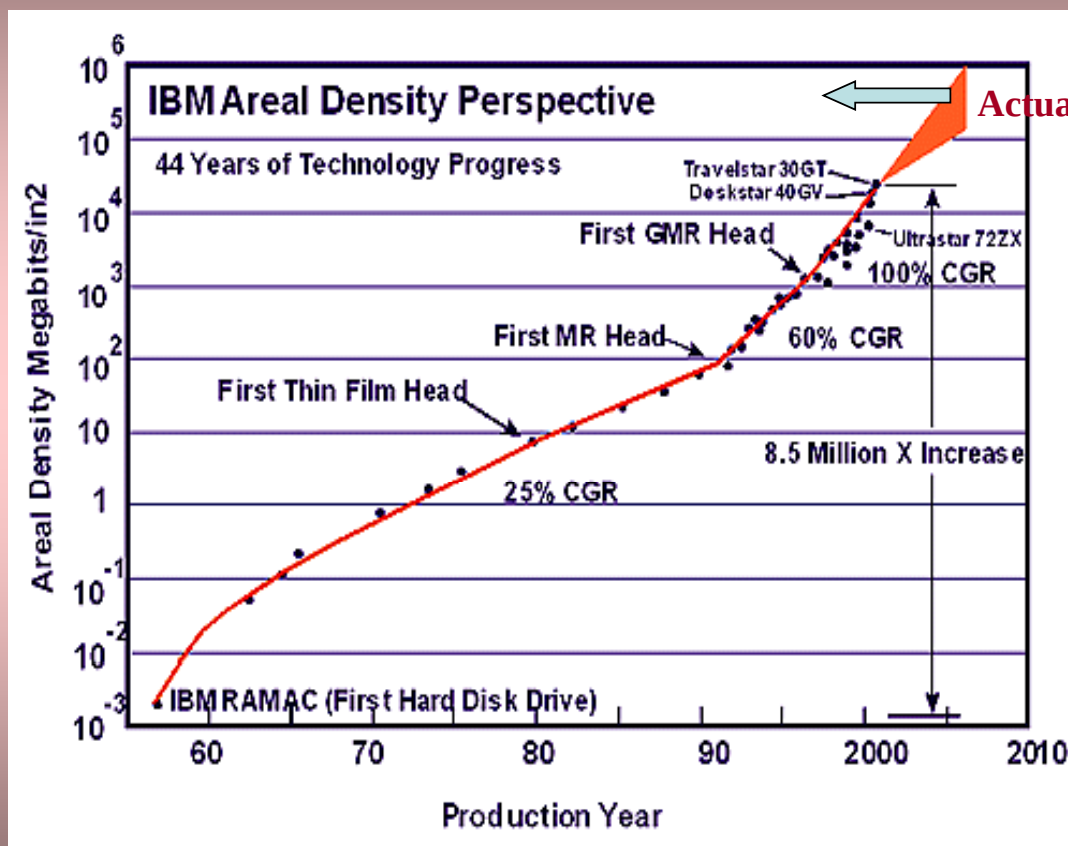
Alternativa:

Connexions amb CNTs
(químicament inerts, geometria ben
definida)

Reproductibilitat de resultats (OK)

EMMAGATZEMATGE DE DADES D'ALTA DENSITAT-1

Disc dur

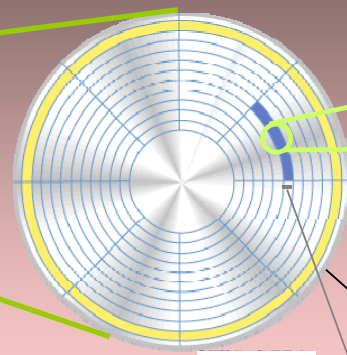


Actualment: 100 Gbits/in²

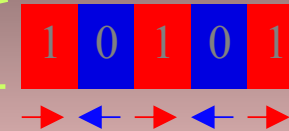
EMMAGATZEMATGE DE DADES D'ALTA DENSITAT-2

Disc dur

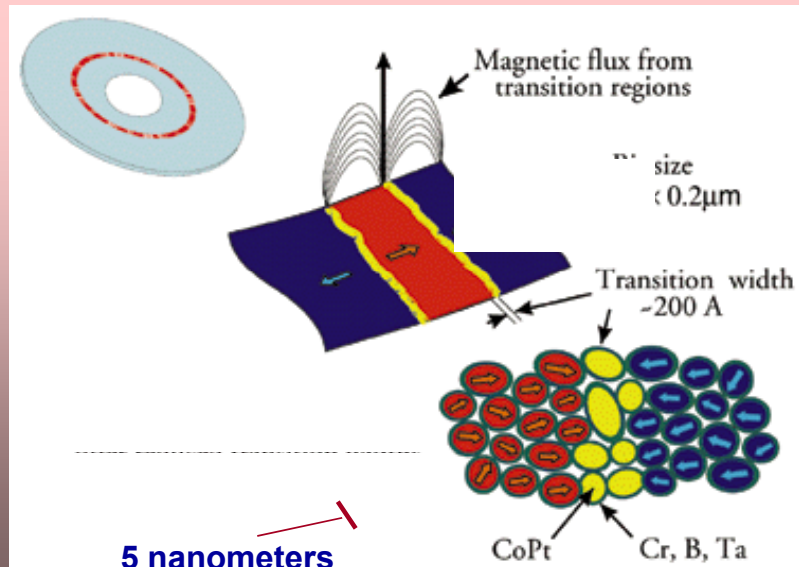
10 cm



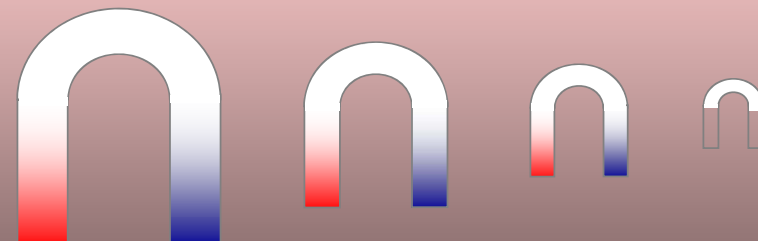
50 nanometers = 50×10^{-9} m



0.5 microns = 0.5×10^{-6} m



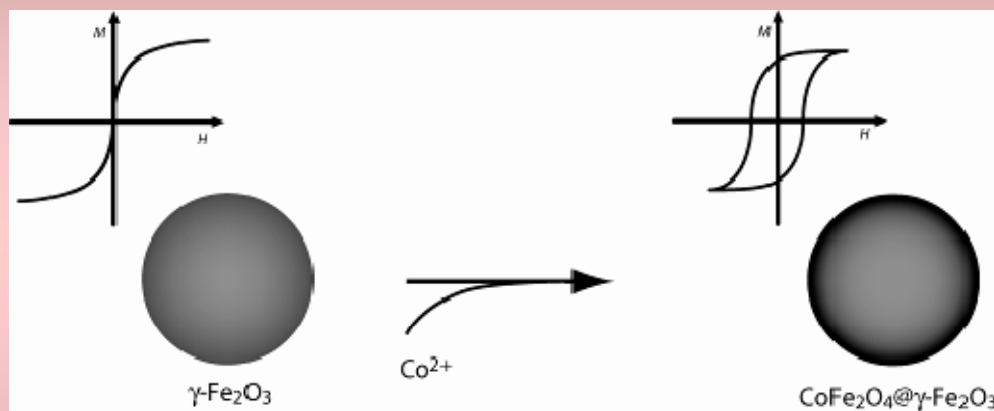
Un imant petit (nano) deixa de ser imant



EMMAGATZEMATGE DE DADES D'ALTA DENSITAT-2

Disc dur

Un avenç: Nanopartícules superparamagnètiques de $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ modificades per l'adsorció d'ions de Co(II)



Modificació superficial de nanopartícules per adsorció de Co(II)

L'adsorció de Co(II) no canvia la mida de les partícules però sí que augmenta H_c i, per tant, la temperatura de bloqueig

PRINCIPALS ÀREES D'APLICACIÓ

Producció i emmagatzemament d'energia

Noves fonts menys contaminants i més eficients

Noves formes d'emmagatzemament d'energia

Nous desenvolupaments en piles de combustible

Sòlids lleugers nanoestructurats amb possibilitat d'emmagatzemar hidrogen

Cèl·lules solars fotovoltaïques de baix cost (pintures solars)

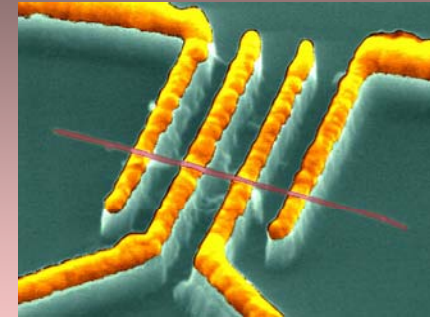
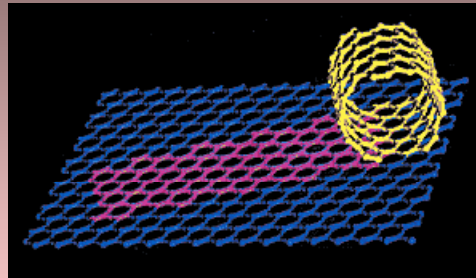
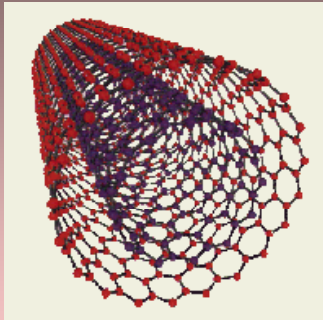
Millora en l'aïllament

Millora en el transport

Millora en l'eficàcia de la il·luminació

...

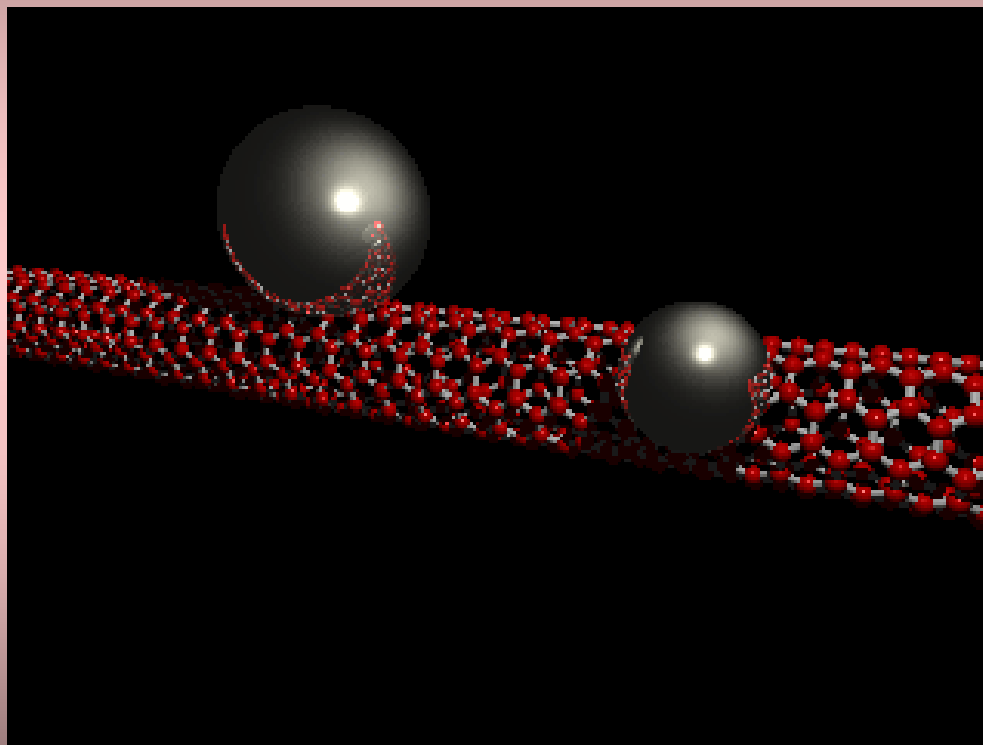
CNTs



Els més llargs són de l'ordre d'1 mm i uns pocs nm de diàmetre

Propietat	Nanotub de Carboni	Comparativa
Mida	Diàmetre entre 0.6-1.8 nm in diàmetre	Fils de Si com a mínim 50 nm de gruix
Força	45 Bilions de Pascals	Acer 2 Bilions de Pascals
Flexibilitat	Es torça sense que es trenqui	Els Metalls es trenquen quan es torcen
Conductivitat	Estimada 10^9 A/cm ²	Fils de Cu es cremen a 10^6 A/cm ²
Lliure recorregut mig	10 μ m	Cu: 0.04 μ m

CNTs: TRANSPORT DE MASSA



MILLORA EN L'EFICÀCIA DE LA IL·LUMINACIÓ

De les làmpades als LEDs i els OLEDs

L'electricitat suposa 1/3 del total d'energia consumida als USA
1/5 del total de l'energia s'utilitza per il·luminar

La llum és molt poc eficient

Les bombetes converteixen només un 5% en llum visible
(la resta es perd en forma de calor)

Els fluorescents, millors, converteixen un 25%

Comparativa: els forns tenen una eficiència de 80%
els motors elèctrics arriben fins al 95%

Cal millorar l'eficiència de l'energia lumínica

Ho fan els LEDs (semiconductors). Però, un sol color

Llum blanca eficient?

LED a 410 nm i nanopartícules de mida diferent. Llum de color desitjat



**Si substituïssim bombetes per LEDs
de manera que s'utilitzés ½ de l'energia
actual, equivaldria a estalviar l'energia
produïda per 50 centrals nuclears**

PRINCIPALS ÀREES D'APLICACIÓ

Medicina

Diagnosi (augment de la sensibilitat).

Detecció precoç de malalties

Teràpia (vectorització de fàrmacs)

Teràpia cel·lular

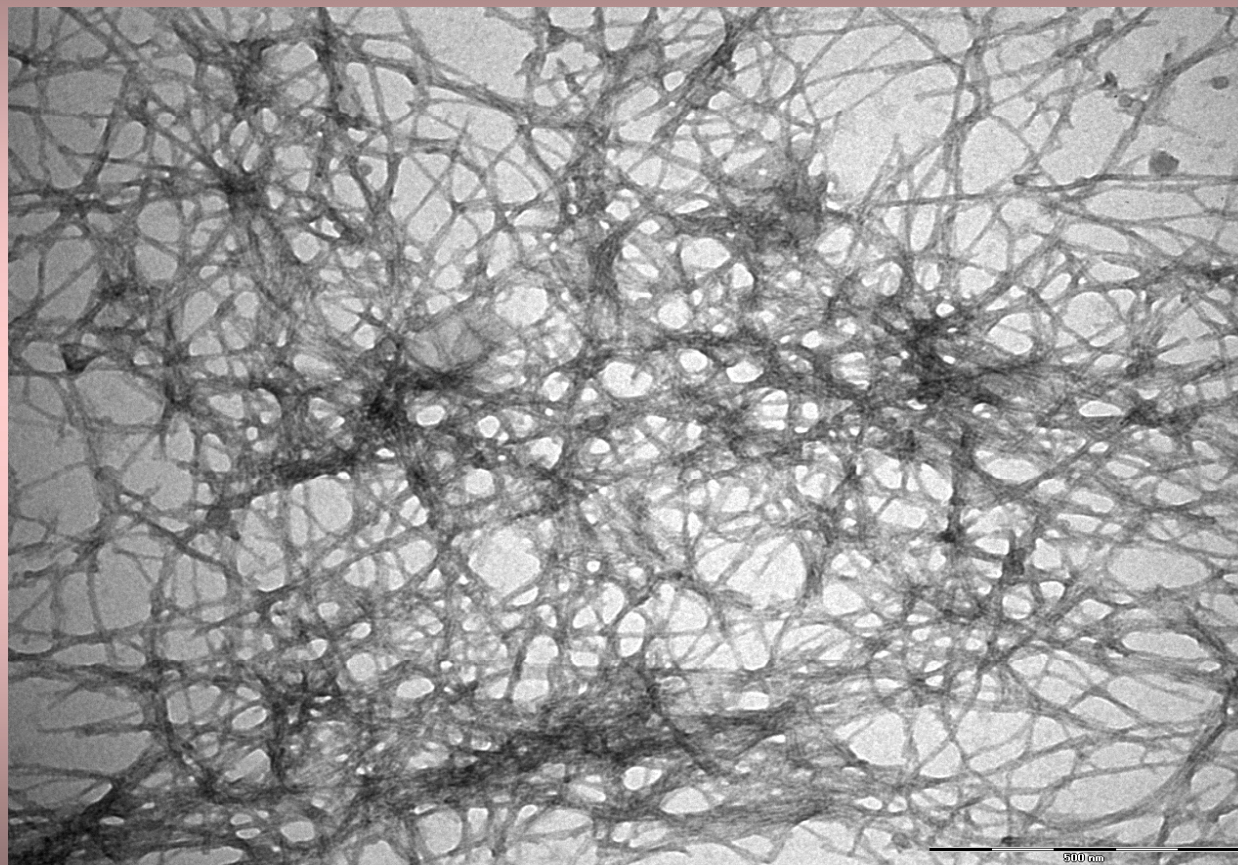
Recobriments.

Millora de la biocompatibilitat i la bioactivitat dels implants

Bioenginyeria: teixits artificials. Autoorganització.

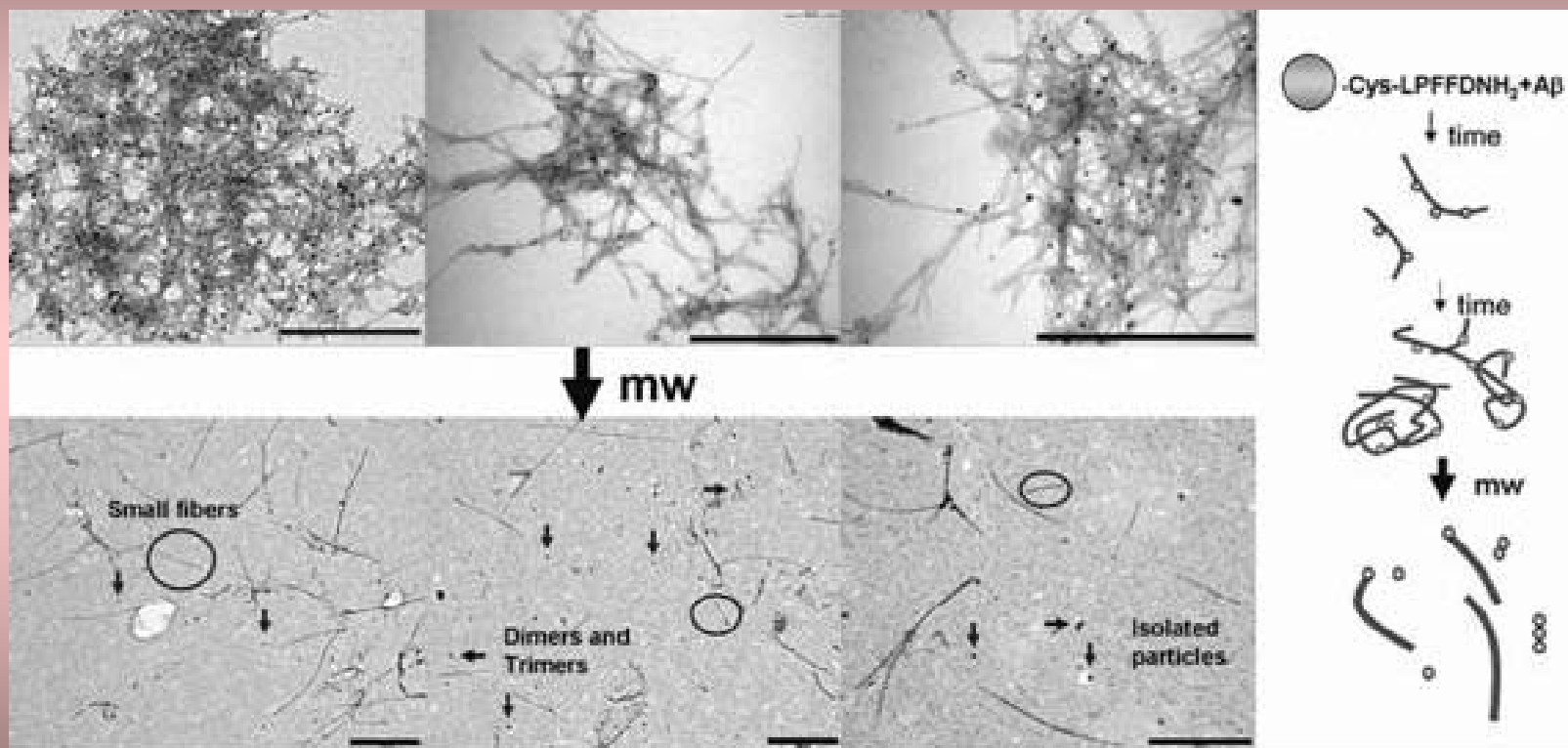
Nova generació de materials (enginyeria de teixits). Síntesi d'òrgans de substitució. Nous teixits

MALALTIES NEURODEGENERATIVES



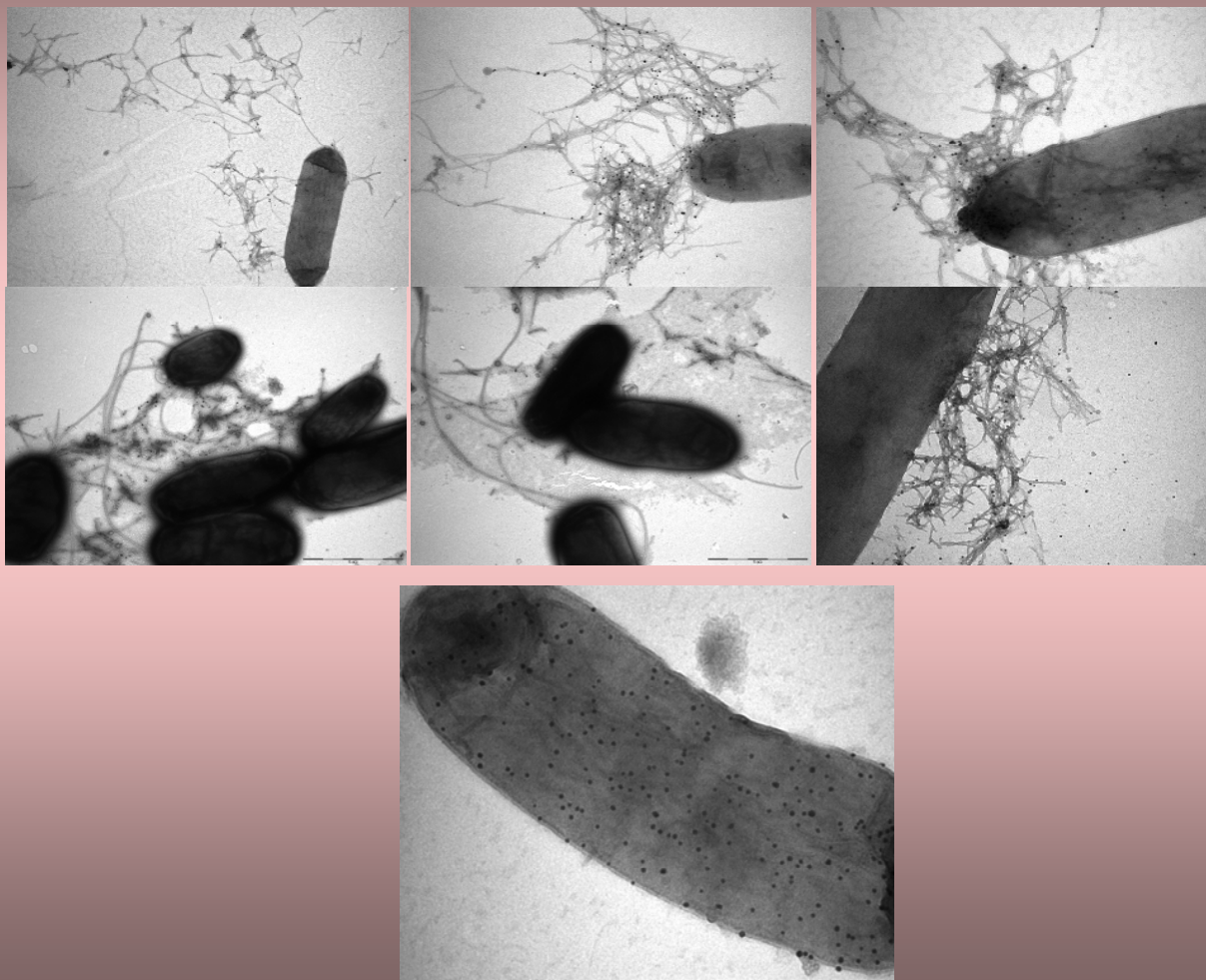
Aglomerats de β -amiloïde

CONJUGATS NP d'Au + PROTEÏNES



Acció d'un camp e.m. altern

FAGOCITOSI PER MACRÒFAGS



BIOSENSORS



Biosensor de glucosa

La mesura té lloc en 10-15 s.



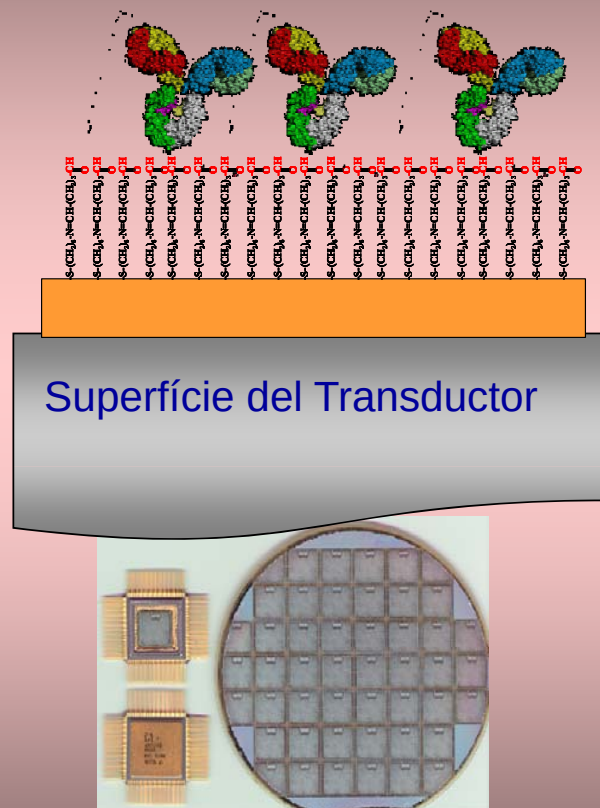
La detecció es realitza mitjançant un enzim que reacciona amb la sang.



Els models més moderns tenen microagulles per fer l'extracció de la sang automàticament

Suposa una millora en la QUALITAT DE VIDA dels malalts

QUÈ ÉS UN BIOSENSORS ?



Receptors biològics

Enzims, Anticossos, ADN, ...

Transductors

ISFET, Transductors Amperomètrics
Potenciomètrics, Piezoelèctrics, Ones
acústiques superficials(SAW), Adsorció,
reflectivitat, ressonància plasmó, índex
refracció,...

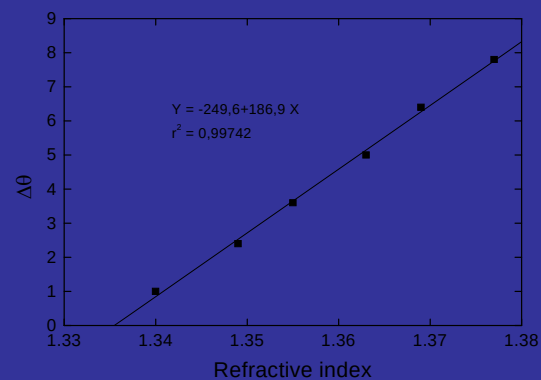
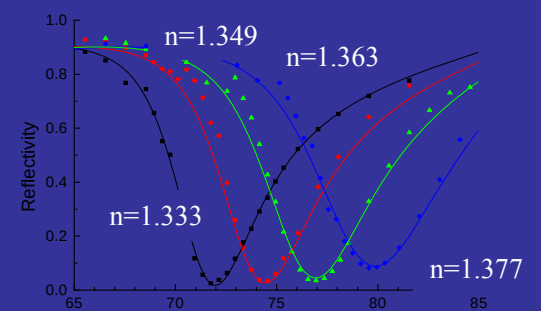
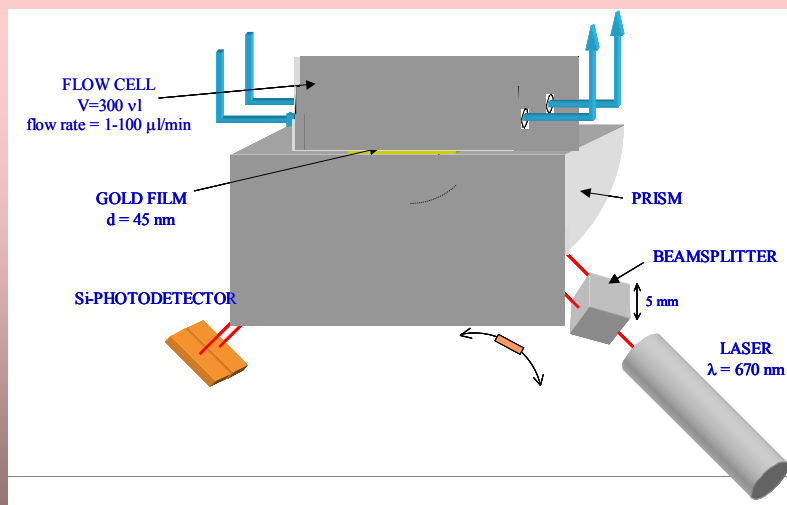
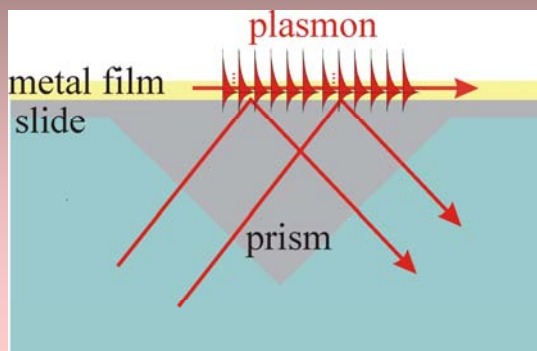
Senyal de reconeixement

Conductivitat, Potencial, Freqüència,
Luminiscència, Efectes tèrmics,...

SPR : Ressonància del plasmó superficial

Llum làser polaritzada

Límit de detecció: $\Delta n_{\min} \sim 10^{-5}$



PRINCIPALS ÀREES D'APLICACIÓ

Aliments, aigua i medi ambient

Desenvolupament de sensors per detectar, avisar i/o neutralitzar la presència de microorganismes o plagicides.

Ús de tècniques fotocatalítiques per pal·liar o neutralitzar els efectes de la contaminació i altres danys mediambientals aigua contaminada, ...)

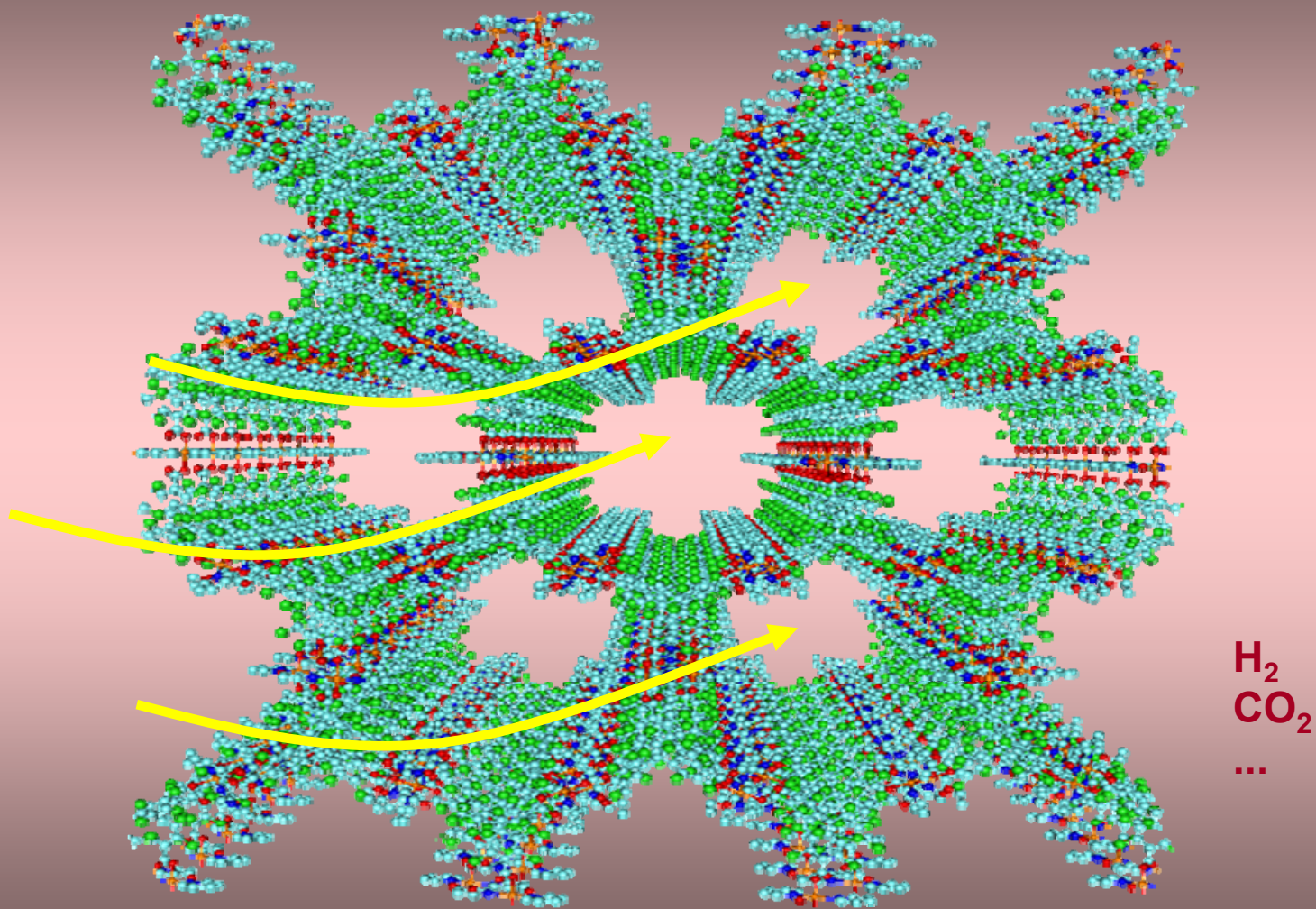
Seguretat

Detectors específics d'alerta precoç d'agents químics, biològics,...

Protecció de la propietat (nanoetiquetat)

Noves tècniques criptogràfiques per la comunicació de dades

MATERIALS POROSOS

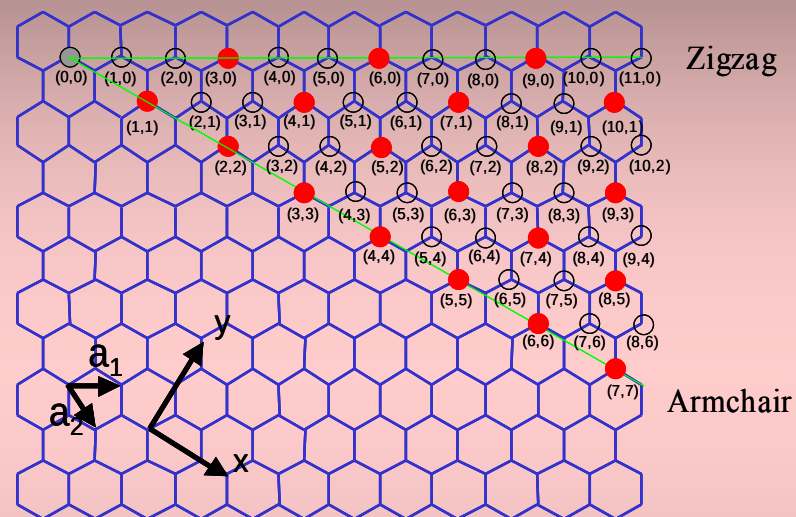
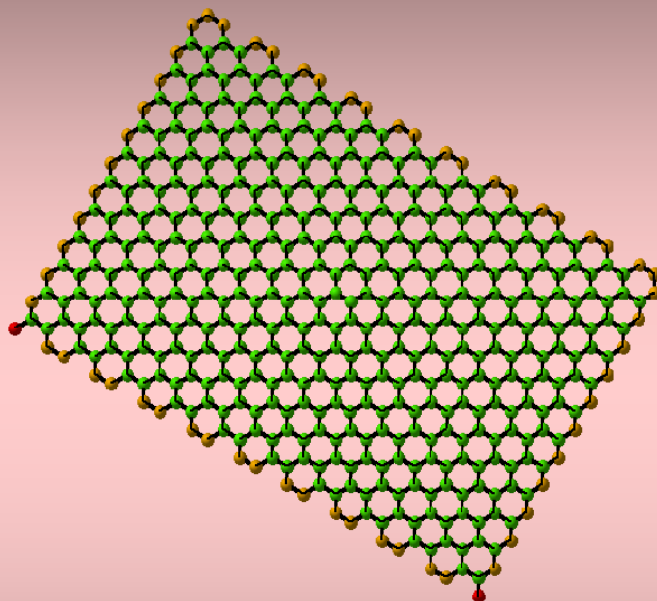


CODA (predicció)

“La riquesa del nanomón canviarà el macromón”

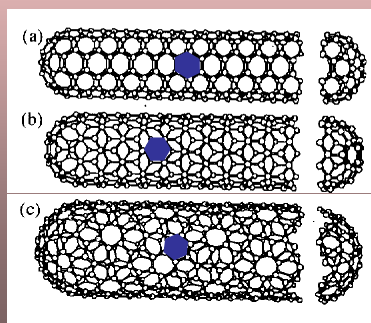
Charles M. Lieber, professor de química de la Universitat de Harvard

Família de CNTs



 **Metà·lic**

 **Semiconductor**



PRINCIPALS ÀREES D'APLICACIÓ

Nous Materials

Actualment el camp més desenvolupat i de major impacte (materials més resistents, més flexibles, control del comportament d'electrons individuals, ...)

Electrònica

Reducció de mida dels xips i ampliació de memòria
Ordinadors orgànics?. "Somni": emmagatzemar i processar informació sense intervenció d'altres elements electrònics (com el cervell)

Medicina

Diagnosi (augment de la sensibilitat)
Teràpia (vectorització de fàrmacs)
Bioenginyeria: teixits artificials

Energia

Noves fonts menys contaminants i més eficients
Noves formes d'emmagatzemament d'energia

NOUS MATERIALS

Productes al mercat

Ulleres que no es ratllen: Amb teixits polimèrics ultrafins amb propietats protectores i antireflectants

Parabrises que es netegen sols: Vidres recoberts amb NPs de TiO_2 . La radiació UV Reacciona amb les NPs, generant radicals que oxiden la matèria orgànica i elimina les incrustacions de brutícia. Al passar-hi aigua aquesta s'estén uniformement i se'n duu la brutícia

Roba que no s'embruta: amb NPs i materials hidròfobs

Cosmètics més eficaços i protectors: Cremes transparents amb NPs de TiO_2 però que protegeixen dels raigs UVA

Equipament esportiu més competitiu: Raquetes de tennis i bicicletes més lleugeres i resistents, amb CNTs

NOUS MATERIALS

Aplicacions de futur

CNTs

Substitució d'ossos: Osteoporosi

Aparells basats en camps d'emissió: Pantalles de TV, ordinadors

Naosensors: Canvi de la resistència elèctrica amb l'adsorció d'agents en superfície

Molins de vent: Barreja amb reïnes. Pales més llargues i menys pesants

Materials superdurs: Fabricació de bigues més flexibles, materials als automòbils, ...

NPs

Pintures solars: NPs-polímers conductors

Vidres fotocromics