



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

---

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**CARRERA:** Posgrado / Doctorado en Ciencias Químicas

**CUATRIMESTRE:** Segundo

**AÑO:** 2013

**CODIGO DE CARRERA:** 51

**MATERIA:** Físicoquímica de Superficies

**CODIGO:** 5074

**PUNTAJE:** 5 (cinco)

**DURACIÓN:** cuatrimestral

**HORAS DE CLASE SEMANAL:**

- **Teóricas:** 5hs.
- **Seminarios y Problemas:** 3hs.

**TOTAL:** 8 hs.

**CARGA HORARIA TOTAL:** 128

**ASIGNATURAS CORRELATIVAS:** Título de grado o afín.

**FORMA DE EVALUACIÓN:** Presentación oral y examen final integrador.

**PROGRAMA ANALÍTICO:**

**Objetivos:**

La meta de este curso es presentar una descripción fundamental de la estructura y las propiedades de las superficies, complementada por una introducción a las técnicas modernas de caracterización y modelado a la luz de estudios experimentales y teóricos recientes. Proponemos un tratamiento con un énfasis en la escala atómica y en los mecanismos moleculares de los procesos fisicoquímicos superficiales, sin descuidar por otra parte los aspectos macroscópicos y el punto de vista termodinámico. Se discutirán en detalle las herramientas de caracterización más importantes, en particular técnicas de microscopía, espectroscopía, y de modelado computacional. Estas temáticas serán ilustradas mediante la realización de trabajos prácticos especiales. En este marco nuestra intención es la de proporcionar una introducción actualizada y rigurosa a la ciencia de superficies, y un sentido predictivo que resulte de utilidad tanto en la investigación básica como en el campo de la innovación tecnológica.



### **Contenidos:**

El curso comprende 128 horas de clases teórico-prácticas, que incluyen la resolución de problemas y la realización de trabajos prácticos experimentales y de modelado computacional. El programa consta de 11 módulos temáticos que pueden dividirse en tres grupos:

- 1) Fundamentos (módulos 1, 2, 3, 4).
- 2) Modelado computacional (módulos 6, 7)
- 3) Técnicas de caracterización experimental (módulos 8, 9, 10, 11)

Los módulos son los siguientes:

#### **1. Introducción**

Motivación. Breve recorrido por los principales hallazgos científicos y tecnológicos que propiciaron la ciencia de superficies en su forma actual.

#### **2. Estructura atómica de superficies**

Empaquetamiento y estructuras ideales. Índices de Miller y nomenclatura. Energía superficial, relajación y reconstrucción. Defectos.

#### **3. Estructura electrónica de sistemas extendidos**

De los orbitales moleculares a las funciones de Bloch. El espacio recíproco. Estructura de bandas en dos y tres dimensiones. Nivel de Fermi. Función trabajo. Densidad de estados.

#### **4. Interacciones entre moléculas y superficies**

Equilibrio de adsorción e isothermas. Clasificación de adsorbatos y modos de adsorción. Organización, interacciones laterales, monocapas autoensambladas, difusión superficial. Reactividad: mecanismos de disociación y recombinación en superficies metálicas y semiconductoras. Rol de los defectos. Fotocatálisis heterogénea.

#### **5. La interfase sólido-líquido**

Efecto dieléctrico del solvente. La doble capa interfacial y la capa difusa. El potencial de carga cero. Incidencia del solvente en la relajación superficial y en la reactividad. Modelos empíricos para la estimación de la acidez en solución.

#### **6. Simulación molecular de sistemas extendidos: conceptos**

Posibles metodologías. Técnicas de mecánica molecular y de estructura electrónica. Teoría del funcional de la densidad (DFT) y su implementación en sistemas extendidos.

#### **7. Simulación molecular de sistemas extendidos: aplicaciones**

Obtención de propiedades electrónicas, estructurales, y termodinámicas: geometría, estructura de bandas, energía superficial, reconstrucción, función trabajo, energía de adsorción y de activación, simulación de espectros.



### **8. Microscopías**

Fundamentos y aspectos prácticos de las microscopías de efecto túnel (STM) y de fuerza atómica (AFM).

### **9. Técnicas calorimétricas**

Desorción térmica programada (TPD) y microcalorimetría.

### **10. Microscopías y espectroscopías fotoelectrónicas**

Introducción a diversas metodologías fotoelectrónicas de uso convencional: XPS, UPS, EXAFS, XANES, EELS, HREELS.

### **11. Espectroscopías vibracionales**

Fundamentos. Espectroscopías vibracionales intensificadas por efecto de superficies. Técnicas vibracionales con resolución espacial y temporal. Interpretación de espectros vibracionales de superficies.

#### **Bibliografía:**

- G. Attard and C. Barnes, *Surfaces*. Oxford Chemistry Primer N° 59, Oxford Science Publications, 1998.
- E. M. Mc Cash, *Surface Chemistry*. Oxford University Press, 2001.
- K. W. Kolasinski, *Surface Science*. Wiley, 2002.
- J. B. Hudson, *Surface Science: An Introduction*. Wiley, 1998.
- A. W. Adamson and A. P. Gast, *Physical Chemistry of Surfaces*. Wiley, 1997.
- R. Hoffmann, *Solid and surface: a chemist's view of bonding in extended structures*. Wiley, 1988.
- V. E. Heinrich and P. A. Cox, *The surface science of metal oxides*. Cambridge University Press, 1994.
- E. Kaxiras, *Atomic and electronic structure of solids*. Cambridge University Press, 2003.
- R. M. Martin, *Electronic Structure*. Cambridge University Press, 2004.
- J. Kohanoff, *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules*. Cambridge University Press, 2006.

**Dr. Federico Williams**

**Dr. Damián Scherlis Perel**