

## Tópicos de Físicoquímica de Superficies

### Programa analítico del curso con Bibliografía

#### Objetivos

El objetivo 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 120 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 12 módulos temáticos que pueden dividirse en tres grupos:

1. Fundamentos (módulos 1-5).
2. Modelado computacional (módulos 6, 7)
3. Técnicas de caracterización experimental (módulos 8-12)

Los módulos son los siguientes:

1. Estructura atómica de superficies. Empaquetamiento y estructuras ideales. Índices de Miller y nomenclatura. Energía superficial, relajación y reconstrucción. Defectos.
2. 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.
3. 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.
4. 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.
5. Modificación Molecular de Superficies Tecnologías de deposición de películas moleculares delgadas. Monocapas autoensambladas, películas de Langmuir -Blodgett,

cepillos poliméricos, autoensamblados capa por capa. Deposición Física de Fase vapor, Deposición química de fase vapor, deposición pulsada por láser.

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. Tecnología de Ultra Alto Vacío. Tecnologías de sensores de medición de presión, bombas mecánicas, turbo moleculares, iónicas, difusoras, sublimación de Titanio.

9. Microscopías y técnicas de difracción de superficies. Fundamentos y aspectos prácticos de las microscopías de efecto túnel (STM) y de fuerza atómica (AFM). Difracción de electrones de baja energía.

10. Técnicas calorimétricas Desorción térmica programada (TPD) y microcalorimetría.

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

12. 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, Oxford Science Publications, 1998.

Hans- Jürgen Butt, K. Graf, Michael Kappl, Physics and Chemistry of Interfaces, Wiley, 2003. Harald Ibach, Physics of Surfaces and Interfaces, Springer-Verlag, 2006.

K. Christmann, Introduction to Surface Physical Chemistry, Springer -Verlag 2001.

E. M. Mc Cash, Surface Chemistry. Oxford University Press, 2001.

K. W. Kolasinski, Surface Science. Wiley, 2002.

Surface Analysis—The Principal Techniques, John C. Vickerman, Wiley, 2nd Edition, 2009. Modern Techniques of Surface Science, D. P. Woodruff, T. A. Delchar, Second edition, Cambridge University Press 1994.

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, 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