

DEPARTAMENTO DE QUIMICA INORGANICA ANALITICA Y QUIMICA FÍSICA
MATERIA DE DOCTORADO
2º CUATRIMESTRE 2006

Estructura atómica y electrónica de Superficies (bimestral)

PUNTAJE: 3 puntos (60 hs)

Profesor a cargo: Dr. Federico Williams

El comportamiento de átomos y moléculas en superficies tiene un rol central en áreas de gran interés académico e importancia industrial. La fisicoquímica de superficies es altamente relevante para el estudio de los problemas de cada día como la corrosión y lubricación hasta tecnologías con alto valor agregado como la bio- y la nanotecnología. El estudio de fenómenos superficiales es importante para comprender desde el comportamiento de dispositivos electrónicos hasta la reducción de la capa de ozono en la estratosfera. El estudio de superficies también es crucial en los campos de la electroquímica, los coloides, la óptica y cada vez más en el uso de membranas y biosensores. Además, muchos sistemas biológicos tienen comportamientos que en última instancia se encuentran dominados por interacciones en o a través de interfaces. Por lo tanto es claramente esencial que comprendamos las superficies e interfaces si vamos a optimizar y controlar estos importantes procesos.

Objetivos

El objetivo de este curso es presentar una descripción coherente y fundamental de la estructura y propiedades de interfaces “secas” (interfase sólido-gas). Consideraremos el comportamiento en un rango de escalas, desde los mecanismos atomísticos involucrados en reacciones químicas mediadas por superficies hasta la descripción macroscópica y termodinámica del proceso de adsorción. El foco del curso será la identificación de ideas conceptuales claves y la unificación de conceptos provistos en cursos anteriores (Fisicoquímica I y II; Complementos de Química Inorgánica y Analítica) para comprender y predecir el comportamiento de las superficies. También se discutirán en detalle las herramientas más importantes para el estudio de superficies. La filosofía del curso es discutir la química de superficies a través del entendimiento actual basado en las conclusiones de estudios experimentales y teóricos.

La evaluación de los alumnos será a través de la discusión de casos y la presentación de seminarios en los cuales los alumnos resolverán un problema “integrador”. Estos problemas contendrán un conjunto de resultados experimentales de un sistema específico (basado en la literatura moderna) que el alumno deberá interpretar utilizando todos los conceptos brindados durante el curso.

Contenidos

El curso consiste de los siguientes temas que serán dictados en un total de 60 horas. Para cada tema se presentarán las motivaciones para su estudio con ejemplos tomados de la literatura reciente. Por ejemplo, cuando se discuta la microscopía de efecto túnel, se mostrará cómo esta técnica experimental fue fundamental para manipular átomos sobre superficies para la construcción de nano-estructuras “desde abajo” tal cual Richard Feynman propusiera en 1959.

1. Introducción a la ciencia de superficies: Se brindará la motivación del curso mostrando un conjunto de fascinantes descubrimientos científicos y tecnológicos basados en el conocimiento generado en este campo.

2. Superficies limpias: Estructuras ideales. Metales, semiconductores, función trabajo. Estructura superficial y reconstrucciones. Estados superficiales, "dangling bonds". Superficies de óxidos: acidez superficial

3. Adsorción y desorción: Procesos de adsorción. Cambios de función trabajo asociados con la adsorción. Sitios y geometrías de adsorción. Interacciones laterales entre adsorbatos: Monocapas autoensambladas. Cinética de adsorción, "sticking", difusión superficial, Modelado de la adsorción: complejos superficiales.

4. Reacciones superficiales: Teoría del estado de transición. Selectividad. Reactividad. Mecanismos de reacción. Reacciones oscilatorias. Reacciones heterogéneas en la atmósfera. Fotoquímica superficial.

5. Técnicas experimentales: Mediciones de los calores de adsorción y velocidades de desorción (TPD, microcalorimetría). Espectroscopias y microscopías fotoelectrónicas (XPS, UPS, AES, SPEM). Espectroscopias vibracionales (HREELS, RAIRS) Microscopías de efecto túnel y fuerza atómica (STM, AFM).

6. Modelado computacional de superficies: Posibles metodologías. Teoría de los funcionales de la densidad (DFT). Cálculo de variables estructurales y termodinámicas: energía superficial, reconstrucciones, función trabajo, energías de adsorción. Dinámica molecular. Simulación de espectros STM.

Bibliografía

- G. Attard and C. Barnes, *Surfaces*, Oxford Chemistry Primer No 59, Oxford Science Publications, 1998.
E. M. McCash, *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, 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.



Federico Williams (1973) es Licenciado en Química de la Universidad de Mar del Plata y doctor en Química de la Universidad de Cambridge. Actualmente es investigador Independiente del Conicet con lugar de trabajo en Tenaris-Siderca.

federico.williams@gmail.com