

Fisicoquímica de Superficies

Curso de Posgrado propuesto con una carga horaria de 36 horas totales

Docentes: Federico Williams – Damian Scherlis

Introducción

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, siendo 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 la comprensión termodinámica, estructural y microscópica de las superficies e interfaces si se pretende optimizar y controlar estos importantes procesos.

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 atomística 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 las herramientas de caracterización más importantes, en particular técnicas de microscopía, espectroscopía, y de simulación. Estas temáticas serán ilustradas mediante la realización de problemas, y de un trabajo práctico vinculado al modelado computacional.

Contenidos

El curso comprende 36 horas de clases teórico-prácticas, que incluyen la resolución de problemas y la realización de un trabajo práctico computacional. El programa consta de los siguientes módulos temáticos:

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, nivel de Fermi. Función trabajo. Densidad de estados.

4. Interacciones entre moléculas y superficies, y la interfase sólido-líquido

Equilibrio de adsorción e isothermas. Clasificación de adsorbatos y modos de adsorción. Monocapas autoensambladas. Reactividad, rol de los defectos. Efecto dieléctrico del solvente. La doble capa interfacial y la capa difusa. El potencial de carga cero.

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. Simulación molecular de sistemas extendidos

Posibles metodologías. Teoría del funcional de la densidad (DFT) y su implementación en sistemas extendidos. Obtención de propiedades electrónicas, estructurales, y termodinámicas: geometría, estructura de bandas, energía superficial, reconstrucción, función trabajo, energía de adsorción.

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.