

**Física i Química de Superfícies****2012/2013**

Codi: 103299

Crèdits ECTS: 6

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Graduat en Nanociència i Nanotecnologia	983 Graduat en Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

**Professor de contacte**

Nom: Gemma Garcia Alonso

Correu electrònic: Gemma.Garcia@uab.cat

**Utilització d'idiomes**

Llengua vehicular majoritària: espanyol (spa)

Algun grup íntegre en anglès: No

Algun grup íntegre en català: No

Algun grup íntegre en espanyol: No

**Prerequisits**

Es recomana haver aprovat el primer curs sencer (especialment Introducció a la Nanociència i la Nanotecnologia, Enllaç Químic i Estructura de la Matèria, i Reactivitat Química) i les assignatures Termodinàmica, Cinètica i Transformacions de Fase, Química Orgànica, Química del Elements i laboratori de microscòpies i caracterització de materials del segons curs.

**Objectius**

L'objectiu d'aquesta assignatura és tractar els aspectes més bàsics dels fenòmens químicofísics que tenen lloc en les interfases líquid-gas, sòlid-líquid i sòlid-gas. S'aprofundeix en diversos temes introduïts en la assignatura "Introducció a la Nanociència i la Nanotecnologia" del primer curs, aprofitant el coneixements adquirits durant els dos primers cursos.

S'aborden amb més profunditat els fenòmens d'adsorció i es discutiran des de un punt de vista més formal amb les eines que ens dona la Termodinàmica. S'utilitzaran el coneixements en química per abordar la catàlisi heterogènia, i es discutiran amb detall exemples concrets del diferents tipus de catalitzadors.

Es descriuen amb detall la estructura dels sòlids i la seva modificació així com les principals tècniques emprades per la caracterització de superfícies dels sòlids des d'un punt de vista estructural, morfològic, microestructural i composicional.

**Competències**

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aplicar els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia a la resolució de problemes de naturalesa quantitativa o qualitativa en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia.
- Aplicar les normes generals de seguretat i funcionament d'un laboratori i les normatives específiques per a la manipulació de la instrumentació i dels productes i materials químics i biològics tenint en compte les seves propietats i els riscos.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, principis, teories i fets fonamentals relacionats amb la nanociència i la nanotecnologia.

- Desenvolupar treballs de síntesi, caracterització i estudi de les propietats dels materials en la nanoescala a partir de procediments establerts prèviament.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques, identificar-ne el significat i relacionar-les amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Manipular els instruments i materials estàndards propis dels laboratoris d'assaigs físics, químics i biològics per a l'estudi i l'anàlisi de fenòmens en la nanoescala.
- Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
- Operar amb un cert grau d'autonomia.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer els termes relatius als àmbits de la física, la química, la biologia, la nanociència i la nanotecnologia en llengua anglesa i fer servir l'anglès de manera eficaç per escrit i oralment en l'àmbit laboral.
- Reconèixer i analitzar problemes físics, químics i biològics en l'àmbit de la nanociència i la nanotecnologia i plantejar respostes o treballs adequats per a la seva resolució, incloent-hi en els casos necessaris l'ús de fonts bibliogràfiques.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.

## Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Aplicar els continguts teòrics adquirits a l'explicació de fenòmens experimentals.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Avaluar els resultats experimentals de manera crítica i deduir-ne el significat.
5. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
6. Descriure els mecanismes de reactivitat superficial i catàlisi i distingir els processos de catàlisis heterogènies més importants.
7. Descriure les superfícies sòlides i líquides i el fenomen de la doble capa en interfícies carregades.
8. Dur a terme processos de modificació de superfícies i la seva caracterització
9. Explicar la termodinàmica i cinètica de l'adsorció.
10. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
11. Fer càlculs amb reaccions químiques o catàlisi en superfícies.
12. Fer càlculs correctes relatius a la termodinàmica i cinètica de superfícies i interfícies.
13. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
14. Identificar els diferents tipus de defectes a les superfícies sòlides i reconèixer els processos d'adsorció i modificació de superfícies.
15. Identificar les bases termodinàmiques i cinètiques de les superfícies i interfícies.
16. Interpretar i racionalitzar els resultats obtinguts en el laboratori en processos relacionats amb la física i química en nanociència i nanotecnologia.
17. Interpretar textos en anglès sobre aspectes relacionats amb la física i química en nanociència i nanotecnologia.
18. Manejar adequadament els instruments i materials estàndards propis de laboratoris de la matèria física i química en nanociència i nanotecnologia.
19. Obtenir, gestionar, analitzar, sintetitzar i presentar informació, incluent-hi la utilització de mitjans telemàtics i informàtics.
20. Operar amb un cert grau d'autonomia.
21. Predir la modificació de les superfícies partint de la seva composició i els reactius utilitzats.
22. Proposar idees i solucions creatives.
23. Racionalitzar els resultats obtinguts al laboratori en termes de les magnituds físiques i de la seva relació amb els fenòmens físics observats.
24. Raonar de forma crítica.
25. Realitzar assaigs de reactivitat i catàlisi en superfícies
26. Reconèixer els termes propis de la física i química de les superfícies, de la química supramolecular i del reconeixement molecular.

27. Redactar i exposar informes sobre la matèria en anglès.
28. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
29. Resoldre problemes i prendre decisions.
30. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
31. Utilitzar correctament els protocols de manipulació de la instrumentació, de reactius i residus químics als laboratoris propis de la matèria.

## Continguts

Els temes tractats seran:

### Mòdul 1

#### 1. Introducció a las superfícies.

Superfícies líquides. Tensió superficial. Tècniques mesura tensió superficial. Condensació capil·lar. Termodinàmica de les interfases. Isoterma de Gibbs.

#### 2. Adsorció. Superfície electrificada

Fisisorció i quimisorció. Isotermes de adsorció. Adsorció de gases. Cinètica d'adsorció

Interfase solució-electrode. Velocitat de transferència de carga. Corrosió. Electròlisi.

#### 3. Catàlisis heterogonia.

Mecanisme. Catalitzadors bifuncionals. Exemples de processos de catàlisi heterogènia: Cracking. Reformat. Oxidació catalítica.

### Mòdul 2

#### 4. Estructura de superfícies sòlides i modificació

4.1. Notació de les estructures de superfície

4.2. Reconstrucció superficial

4.3. Estructura de monocapes adsorbides

#### 5. Tècniques de caracterització de les superfícies

5.1. Espectroscòpies auger, xps

5.2. Microscòpies de proximitat : AFM i STM

5.3. Difracció d'electrons RHEED

#### 6. Creixement cristal·lí de capes primes.

6.1. Nucleació i creixement a partir de fase vapor

6.2. Tècniques de creixement PVD i CVD

6.3. Epitaxia

Els alumnes podran realitzar pràctiques en els temes següents:

- Determinació de la tensió superficial en líquids. (diferents líquids, en funció temperatura)
- Tractaments i/o modificació superficial d'un sòlid - Determinació de la tensió superficial
- Microscòpia AFM
- Microscòpia STM

- Anàlisi de espectres de XPS i/o SRIM (implantació iònica)
- Isotermes d'adsorció.

## Metodologia

La assignatura consta de :

**30 hores de teoria + 14 hores de problemes + 8 hores de laboratori per alumne.**

### Classes de teoria

Es duran a terme combinant la utilització de material informàtic i la pissarra. El professor plantejarà casos pràctics per tal de exemplificar l'aplicació dels diverses teories i models.

### Classes de problemes

Es tractarà d'impulsar la participació dels alumnes durant les classes de problemes.

Quan el professor ho determini, serà obligatòria l'entrega de problemes resolts.

### Pràctiques de laboratori

Les pràctiques son d'assistència obligatòria. Es centren en l'aprenentatge de tècniques bàsiques per la caracterització de superfícies.

Es realitzaran en grups petits. Es fonamental que els alumnes hagin dedicat amb antelació el temps suficient a la lectura del guió.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
practiques labororatori	8	0,32	1, 2, 3, 4, 5, 8, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 30, 31
teoria	30	1,2	6, 7, 9, 11, 12, 14, 15, 21
treballs dirigits i porblems	14	0,56	2, 6, 9, 11, 12, 13, 17, 19, 21, 24, 28, 29, 30
tutories	15	0,6	2, 4, 5, 9, 13, 16, 19, 20, 26
<b>Tipus: Autònomes</b>			
estudi individual	30	1,2	1, 2, 3, 4, 6, 7, 9, 10, 13, 14, 15, 20, 22, 24, 27
informe de practiques	12	0,48	2, 4, 5, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 19, 21, 22, 23, 24, 26, 27, 30
lectura de guions	5	0,2	2, 3, 13
resolucio de problemes	25	1	2, 5, 9, 11, 12, 20, 21, 24, 28
treball bilbiografic	8	0,32	1, 3, 10, 15, 17, 20, 24

## Avaluació

La avaluació es farà de forma continuada. Es proposaran dos parcials, la nota dels quals serà com a màxim el 70 % de la nota final.

Es proposaran exercicis o treballs bibliogràfics individuals amb data d'entrega, la nota dels quals serà com a màxim un 20% de la nota final.

Es demanaran informes de pràctiques o presentacions dels resultats de les pràctiques en grup, la nota dels quals correspondrà a un màxim del 20% de la nota final.

Per tal de superar l'assignatura cal tenir una nota mitjana ponderada igual o superior a 5,0. Endemés, cal treure com a mínim 4 punts sobre 10 a cada una de les dos proves escrites, i la mitjana de les dues proves escrites ha de ser 5 o superior.

Els alumnes que tinguin entre 4 i 4.99 de nota final en la avaluació continuada tindran dret de presentarse al examen final.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
entrega informes practiques	20	0	0	5, 10, 11, 12, 13, 16, 23, 27
entrega de problemes i treballs	20	0	0	2, 3, 5, 10, 11, 12, 17, 27, 28, 29
parcials	60	3	0,12	2, 6, 7, 9, 11, 12, 14, 15, 21, 29

## Bibliografia

### Somorjai, G. A.

*Fundamentos de química de superficies*

versión española de J.A. Rodríguez Renuncio

Publicació Madrid : Alhambra, 1975

### Hans-Jürgen Butt, Karlheinz Graf, Michael Kappl

*Physics and Chemistry of Interfaces*

2003 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co.

KGaA, Weinheim

ISBN 3-527-40413-9

### G.T. Barnes, I.R. Gentle

*Interfacial Science: an introduction* (2<sup>on</sup> ed.)

2010 Oxford University Press

ISBN 978-0-19-657118-5

### Oura, K., Lifshits, V.G., Saranin, A.A., Zotov, A.V., Katayama, M.

*Surface Science: An Introduction*

2003, Springer

ISBN 978-3-540-00545-2

**J.M. Albella (ed.)**

*Láminas Delgadas y Recubrimientos : Preparación, propiedades y aplicaciones*

J.M. Albella (ed.)

ISBN: 978-84-00-08166-9

**Atomic force microscopy/scanning tunneling microscopy 3**

edited by Samuel H. Cohen and Marcia L. Lightbody

Kluwer Academic Publishers, 2002