

Física i Química de Superfícies

Codi: 103299
Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

Professor de contacte

Nom: Gemma Garcia Alonso
Correu electrònic: Gemma.Garcia@uab.cat

Utilització d'idiomes a l'assignatura

Llengua vehicular majoritària: espanyol (spa)
Grup íntegre en anglès: No
Grup íntegre en català: No
Grup íntegre en espanyol: No

Equip docent

José Antonio Ayllón Esteve

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.

Es recomana estar cursant al mateix temps, sinó s'ha fet amb anterioritat, la assignatura de tercer: Síntesi i Estructura de Materials Cristal·lins i Amorfs.

Objectius

L'objectiu d'aquesta assignatura es donar a conèixer una ciència tant important i interdisciplinar com la ciència de les superfícies, frontera entre la física, la química, la biologia i la enginyeria. L'estudi de les superfícies des d'un punt de vista teòric esdevé en tots aquest camps extremadament útil des del punt de vista de les aplicacions tecnològiques .

Es tractaran els aspectes més bàsics dels fenòmens químicofísics que tenen lloc en les interfases líquid-gas, sòlid-líquid i sòlid-gas. S'aprofundirà en diversos temes introduïts en la assignatura "Introducció a la Nanociència i la Nanotecnologia" de primer curs i "Laboratori de microscòpies i caracterització de materials" de segon curs, aprofitant el coneixements adquirits durant els dos primers cursos.

S'utilitzaran els coneixements en química i en Termodinàmica per abordar els fenòmens de superfície, interfície i catàlisi heterogènia, discutint-ne els diferents tipus de catalitzadors.

Es descriurà amb detall l'estructura superficial dels sòlids i la seva modificació així com les principal tècniques emprades per la caracterització de superfícies sòlides des d'un punt de vista estructural, morfològic, microestructural i composicional. S'introduiran les tècniques de creixement de capes primes, destacant-ne la importància del creixement epitaxial en les aplicacions en nanotecnologia.

Amb l'objectiu d'enfortir les competències transversals de l'alumnat en aprenentatge autònom, comunicació científica, raonament crític i perspectiva de gènere, s'inclourà un treball, individual o en grup, de recerca bibliogràfica sobre una temàtica que relacioni la ciència de superfícies, la evolució de la carrera científica i la perspectiva de gènere.

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 natura 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 càlculs amb reaccions químiques o catàlisi en superfícies.
11. Fer càlculs correctes relatius a la termodinàmica i cinètica de superfícies i interfícies.
12. Fer cerques bibliogràfiques de documentació científica.
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 riscos per a la salut i el medi ambient associats a la manipulació de compostos químics i materials en general.
27. Reconèixer els termes propis de la física i química de les superfícies, de la química supramolecular i del reconeixement molecular.
28. Redactar i exposar informes sobre la matèria en anglès.
29. Resoldre problemes amb l'ajuda de bibliografia complementària proporcionada.
30. Resoldre problemes i prendre decisions.
31. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
32. Utilitzar correctament els protocols de manipulació de la instrumentació, de reactius i residus químics i el laboratori propi de la matèria.

Continguts

Mòdul 1 (José A. Ayllón)

- **1. Introducció a las superfícies.**

ü Superfícies líquides. Tensió superficial. Tècniques mesura tensió superficial. Condensació capil·lar.

ü Termodinàmica de les interfases. Isoterma de Gibbs.

- **2. Adsorció. Superfície electrificada**

ü Fisorció i quimisorció. Isotermes de adsorció. Adsorció de gases. Cinètica d'adsorció

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

- **3. Catàlisis heterogonia.**

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

ü Oxidació catalítica.

Mòdul 2 (Gemma Garcia)

- **4. Estructura de superfícies sòlides i modificació**

ü 4.1. Notació de les estructures de superfície

ü 4.2. Reconstrucció superficial

ü 4.3. Estructura de monocapes adsorbides

- **5. Tècniques de caracterització de les superfícies**

ü 5.1. Espectroscòpies AES, XPS

ü 5.2. Microscòpies de proximitat: AFM, STM, SPM

- **6. Creixement cristal·lí de capes primes.**

ü 6.1. Nucleació i creixement a partir de fase vapor - Epitàxia

ü 6.2. Tècniques de creixement PVD i CVD

Metodologia

L'assignatura consta de: 28 hores de teoria + 14 hores de problemes + 10 hores de laboratori, per alumne.

Classes de teoria

Es duran a terme combinant la utilització de material en format digital i la pissarra. El professorat plantejarà casos pràctics per tal d'exemplificar l'aplicació de les diverses teories i models.

Classes de problemes

Es tractarà d'impulsar la participació de l'alumnat durant les classes de problemes. Quan el professorat ho determini, serà obligatòria l'entrega de problemes resolts. Quan el professorat ho determini s'utilitzaran les hores de problemes per la realització de proves d'avaluació continuada.

En el mòdul 2 s'utilitzaran també aquestes sessions per a la resolució de problemes pràctics en grup.

Pràctiques de laboratori

Les pràctiques son d'assistència obligatòria, no s'acceptarà cap absència no justificada. Les sessions pràctiques es centraran en l'aprenentatge de tècniques bàsiques per la caracterització de superfícies.

Es realitzaran en grups petits. El treball previ de lectura de guions i revisió dels continguts teòrics serà fonamental per la bona resolució dels problemes i de les practiques.

ü El mòdul 1 realitzarà dues sessions de pràctiques de laboratori de 3 hores.

ü El mòdul 2 realitzarà una sessió pràctica de 4 hores amb ús de simulador (caldrà portar un PC per grup o per estudiant) i d'equipament .

Tutories

El professorat estarà disponible perales consultes de l'alumnat. Es recomana fortament l'ús d'aquest recurs didàctic.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
practiques laboratorori	10	0,4	1, 2, 3, 4, 5, 8, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 27, 28, 31, 32

teoria	28	1,12	6, 7, 9, 10, 11, 14, 15, 21
treballs dirigits i problemes	14	0,56	2, 6, 9, 10, 11, 13, 17, 19, 21, 24, 29, 30, 31
tutories	12	0,48	2, 4, 5, 9, 13, 16, 19, 20, 27
Tipus: Autònomes			
estudi individual	32	1,28	1, 2, 3, 4, 6, 7, 9, 12, 13, 14, 15, 20, 22, 24, 28
informe de practiques	10	0,4	2, 4, 5, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 19, 21, 22, 23, 24, 27, 28, 31
lectura de guions	5	0,2	2, 3, 13
resolucio de problemes	25	1	2, 5, 9, 10, 11, 20, 21, 24, 29
treball bilbiografic	8	0,32	1, 3, 12, 15, 17, 20, 24

Avaluació

Avaluació

L'avaluació global es realitzarà de forma continuada i consta de:

ü Dos proves escrites o parcials, obligatòries, la nota dels quals serà de 70 % de la nota final.

ü Realització d'exercicis, entrega de qüestionaris i/o treballs individuals o en grup amb data d'entrega, la nota dels quals serà del 15% de la nota final.

ü Realització de treballs pràctics que tindran un pes del 15%, i es realitzarà mitjançant entrega de informes o qüestionaris.

Per tal de superar l'assignatura caldrà tenir una nota global igual o superior a 5,0 i caldrà haver obtingut com a mínim 5.0 punts sobre 10 a la mitjana de les dues proves escrites (dos parcials). Quan no es superi l'avaluació continuada, incomplint algun d'aquests dos criteris, es tindrà dret a una prova escrita de recuperació sobre els continguts d'un o els dos mòduls. En aquest cas, la nota final de la prova escrita serà la mitja de la nota del parcial i de la repesca.

La no assistència als parcials, la no entrega de treballs, informes, qüestionaris, o qualsevol prova d'avaluació serà notada amb un zero en cada un d'aquests apartats.

Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Entrega de problemes i treballs	15	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 10, 11, 12, 17, 19, 20, 22, 24, 27, 28, 29, 30, 31
parcials	70	6	0,24	2, 4, 6, 7, 9, 10, 11, 14, 15, 21, 24, 29, 30
Pràctiques	15	0	0	1, 5, 8, 10, 11, 12, 13, 16, 18, 23, 25, 26, 27, 28, 31, 32

Bibliografia

G. A. Somorjai, Fundamentos de química de superficies, versión española de J.A. Rodríguez Renuncio, 1975 Ed. Alhambra

H.-J. Butt, K. Graf, M.Kappl, Physics and Chemistry of Interfaces, 2003 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. ISBN 3-527-40413-9

G.T. Barnes, I.R. Gentle, Interfacial Science: an introduction (2^{on} ed.), 2010 Oxford University Press, ISBN 978-0-19-657118-5

A. J. Bard, L. R. Faulkner, Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications (2^{on} ed.) 2001 John Wiley and Sons, ISBN: 978-0471043720

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