

**Física i Química de Superfícies**

Codi: 103299

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2501922 Nanociència i Nanotecnologia	OB	3	1

### Professor/a de contacte

Nom: Gemma Garcia Alonso

Correu electrònic: gemma.garcia@uab.cat

### Idiomes dels grups

Podeu accedir-hi des d'aquest [enllaç](#). Per consultar l'idioma us caldrà introduir el CODI de l'assignatura. Tingueu en compte que la informació és provisional fins a 30 de novembre de 2023.

### Equip docent

Xavier Solans Monfort

### 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 de segons curs.

Es recomana estar cursant al mateix temps, sinó s'ha fet amb anterioritat, l'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. Es tractaran els aspectes més bàsics dels fenòmens químicofísics que tenen lloc en les interfases líquid-gas, sòlid-líquid, sòlid-gas i sòlid-sòlid. S'aprofundirà en diversos temes introduïts en l'assignatura "Introducció a la Nanociència i la Nanotecnologia" de primer curs i "Laboratori de microscòpies i caracterització de materials" de segon curs. Es descriurà amb detall l'estructura superficial dels sòlids i la seva modificació així com les principals tècniques de caracterització superficial des d'un punt de vista estructural, morfològic, microestructural i composicional. S'utilitzaran els coneixements en química i en Termodinàmica per abordar els fenòmens de superfície, interfície i catàlisi heterogènia.

## 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 catàlisi 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 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

Tema 1. Introducció a les superfícies

Tema 2. Estructura de les superfícies sòlides

2.1. Cristal·lografia bàsica en dues dimensions (xarxes bidimensionals, Índex de Miller dels plans cristal·lins)

2.2. Notació de les estructures superficials

2.3. Ultra alt buit i Superfícies Netes

2.4. Estructura atòmica de les superfícies netes (relaxació i reconstrucció)

2.5. Estructura atòmica de les superfícies amb adsorbat

Tema 3. Tècniques analítiques de superfície

3.1. Introducció: Sensibilitat superficial i especificitat superficial.

3.2. Mètodes de difracció (LEED, RHEED)

3.3 Mètodes d'espectroscòpia d'electrons AES i XPS

3.4. Microscòpies (AFM, STM, SPM)

Tema 4. Fenòmens de superfície

4.1. Tensió superficial i energia lliure superficial

4.2. Superfícies corbes (equació de Laplace, equació de Kelvin)

4.3. Mètodes de mesura de la tensió superficial

Tema 5. Tensió superficial i tensió interfacial

5.1. Tensió superficial en solucions aquoses

5.2. Isoterma de Gibbs

5.3. Treball d'adhesió, treball de cohesió

5.4. Angle de contacte - equació de Young

5.5. Mullabilitat

5.6. Detersió per agents tensioactius

Tema 6. Fenòmens d'adsorció

6.1. Definicions. Interacció gas o buit amb sòlids

6.2. Isotermes d'adsorció (isoterma de Langmuir, Isoterma de Temkin, Isoterma de Freundlich, Teoria BET, avaluació de la superfície específica, determinació de la mida de porus )

Tema 7. Interacció líquids amb sòlids

7.1. Interfases carregades.

7.2. Model de Helmholtz-Perrin

7.3. Model de Gouy-Chapman

7.4. Model de Stern

7.5. Fenòmens Electrocinètics (electroquímica i corrosió)

Tema 8. Catàlisis heterogènia

8.1. Introducció. Catalitzadors. Etapes d'un procés catalític.

8.2. Cinètica química en catàlisis heterogènia ( influència de la temperatura, Model de Langmuir-Hinshelwood, Model de Eley-Rideal)

8.3. Exemples de processos de catàlisi heterogènia (Cracking. Reformat. Oxidació catalítica)

## **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. Algunes sessions de problemes es realitzaran en grup. 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.

### Pràctiques de laboratori.

Les pràctiques son d'assistència (o realització) obligatòria, no s'acceptarà cap absència no justificada.

El treball previ de lectura de guions, enunciats i revisió dels continguts teòrics serà fonamental per la bona resolució dels problemes i de les pràctiques.

- El mòdul A realitzarà dues sessions de pràctiques de laboratori de 3 hores.

- El mòdul B realitzarà dues sessions de pràctiques de 4 hores (una presencial en continuïtat amb els problemes en grup i una de revisió de conceptes teòrics que es realitzarà individualment i en format virtual autònom).

### Tutories

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

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

## 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, 11, 12, 14, 15, 21
treballs dirigits i problemes	14	0,56	2, 6, 9, 11, 12, 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	36	1,44	1, 2, 3, 4, 6, 7, 9, 10, 13, 14, 15, 20, 22, 24, 28
informe de pràctiques	12	0,48	2, 4, 5, 10, 11, 12, 13, 16, 17, 19, 21, 22, 23, 24, 27, 28, 31
lectura de guions	6	0,24	2, 3, 13
resolucio de problemes	26	1,04	2, 5, 9, 11, 12, 20, 21, 24, 29

## Avaluació

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

- 2 parcials obligatoris, amb un pes del 40% de la nota final, cadascun.
- 1 entrega d'Informes de pràctiques - al laboratori de Química - la nota del qual serà del 10% de la nota final.
- 1 entrega de problemes de pràctiques a l'aula en grup, la nota de la qual serà del 10% de la nota final.
- 1 entrega individual d'una pràctica virtual, que no computa per la nota final però que és d'entrega obligatòria i per tant restarà 2 punts a la nota global de l'assignatura si no es fa l'entrega.

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de:

- realitzar obligatòriament les pràctiques en laboratori de química, però podrà optar a una realització individual del problema pràctic, i haurà igualment de realitzar la Practica Virtual. La entrega dels corresponents informes es podrà realitzar fins a 48h abans del dia programat pel segon parcial de l'avaluació continuada.
- realitzar una prova final de tot el temari teòric i de problemes de l'assignatura. Aquesta prova es realitzarà el dia en què l'alumnat de l'avaluació contínua fan el segon parcial.

IMPORTANT: Per tal de superar l'assignatura caldrà complir els dos requisits següents:

- tenir una nota global igual o superior a 5.0 i
- haver obtingut com a mínim 5.0 punts sobre 10 a la mitjana de les dues proves parcials (o de la prova final en el cas de l'alumnat que opti per l'avaluació única).

Quan no es superi l'avaluació, incomplint algun d'aquests dos criteris, però s'obtingui un mínim de 3.5 en el global de l'assignatura, es tindrà dret a una prova escrita de recuperació sobre tot el temari que permetrà aprovar l'assignatura amb una nota de 5 sobre 10.

## Activitats d'avaluació continuada

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Entrega Treball en grup	10	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32
Entrega d' Informes de Pràctiques	10	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 10, 13, 14, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32
Primer Parcial	40	3	0,12	5, 6, 7, 9, 11, 12, 15, 17, 21, 23, 27
Segon Parcial	40	3	0,12	2, 5, 7, 14, 15, 17, 21, 24, 27, 30

## Bibliografia

Surface Analysis -The Principal Techniques 2nd Edition Editors JOHN C. VICKERMAN Manchester Interdisciplinary Biocentre, University of Manchester, U. S. GILMORE National Physical Laboratory, Teddington, UK

<https://onlinelibrary-wiley-com.are.uab.cat/doi/book/10.1002/9780470721582>

Crystallography and Surface Structure - 2e An Introduction for Surface Scientists and Nanoscientists; By: K. Hermann. Wiley-VCH Verlag GmbH. ISBN: 978-3-527-33970-9, 978-3-527-69712-0, 978-3-527-69713-7, 978-3-527-69714-4.

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

H.-J. Butt, K. Graf, M.Kappl, *Physics and Chemistry of Interfaces*, 2003 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. ISBN 3-527-40413-9. [https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C\\_\\_Rb2013137](https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C__Rb2013137)

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

A. J. Bard, L. R. Faulkner, *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications* (2<sup>on</sup> ed.) 2001 John Wiley and Sons, ISBN: 978-0471043720

Atkins, Peter.; De Paula, Julio. *Química Física*. 8ª ed. 2008. Ed. Médica Panamericana.  
[https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C\\_\\_Rb2043130](https://cataleg.uab.cat/iii/encore/record/C__Rb2043130)

Davis, Mark E. and Davis, Robert J. *Fundamentals of chemical reaction engineering. Chapter 5 - Heterogeneous Catalysis*. McGraw-Hill Higher Education, New York. (2003).  
<http://authors.library.caltech.edu/25070/>

Otero, Enrique- *Corrosión y degradación de materiales*. Editorial Síntesis

## **Programari**

CAP