

Física y Química de Superficies

Código: 103299
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2501922 Nanociencia y Nanotecnología	OB	3	1

Contacto

Nombre: Gemma Garcia Alonso

Correo electrónico: gemma.garcia@uab.cat

Idiomas de los grupos

Puede consultarlo a través de este [enlace](#). Para consultar el idioma necesitará introducir el CÓDIGO de la asignatura. Tenga en cuenta que la información es provisional hasta el 30 de noviembre del 2023.

Equipo docente

Xavier Solans Monfort

Prerrequisitos

Se recomienda haber aprobado el primer curso entero (especialmente Introducción a la nanociencia y la nanotecnología, Enlace Químico y Estructura de la Materia, y Reactividad Química) y las asignaturas Termodinámica, Cinética y Transformaciones de Fase, Química Orgánica, Química del Elementos y laboratorio de microscopias y caracterización de materiales del segundo curso.

Se recomienda estar cursando al mismo tiempo, sino se ha hecho con anterioridad, la asignatura de tercero: Síntesis y Estructura de Materiales Cristalinos y Amorfos.

Objetivos y contextualización

El objetivo de esta asignatura es dar a conocer una ciencia tan importante e interdisciplinar como la ciencia de las superficies, frontera entre la física, la química, la biología y la ingeniería. Se tratarán los aspectos más básicos de los fenómenos químico-físicos que tienen lugar en las interfases líquido-gas, sólido-líquido, sólido-gas y sólido-sólido. Se profundizará en diversos temas introducidos en las asignaturas "Introducción a la nanociencia y la nanotecnología" de primer curso y "Laboratorio de microscopias y caracterización de materiales" de segundo curso. Se describirá con detalle la estructura superficial de los sólidos y su modificación así como las principales técnicas de caracterización superficial desde un punto de vista estructural, morfológico, microestructural y composicional. Se utilizarán los conocimientos en química y en Termodinámica para abordar los fenómenos de superficie, interfaz y catálisis heterogénea, discutiendo los diferentes tipos de catalizadores.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aplicar las normas generales de seguridad y funcionamiento de un laboratorio y las normativas específicas para la manipulación de la instrumentación y de los productos y materiales químicos y biológicos teniendo en cuenta sus propiedades y riesgos.
- Aplicar los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología a la resolución de problemas de naturaleza cuantitativa o cualitativa en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales relacionados con la Nanociencia y Nanotecnología.
- Desarrollar trabajos de síntesis, caracterización y estudio de las propiedades de materiales en la nanoescala en base a procedimientos previamente establecidos.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiada.
- Manipular los instrumentos y materiales estándares propios de laboratorios de ensayos físicos, químicos y biológicos para el estudio y análisis de fenómenos en la nanoescala.
- Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo la utilización de medios telemáticos e informáticos.
- Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer los términos relativos al ámbito de la Física, Química y Biología, así como a la Nanociencia y la Nanotecnología en lengua inglesa y utilizar eficazmente el inglés en forma escrita y oral en su ámbito laboral.
- Reconocer y analizar problemas físicos, químicos y biológicos en el ámbito de la Nanociencia y Nanotecnología, plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Aplicar los contenidos teóricos adquiridos a la explicación de fenómenos experimentales.
3. Aprender de forma autónoma.
4. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
5. Describir las superficies sólidas y líquidas y el fenómeno de la doble capa en interfaces cargadas.
6. Describir los mecanismos de reactividad superficial y catálisis y distinguir los procesos de catálisis heterogéneas más importantes.
7. Evaluar resultados experimentales de forma crítica y deducir su significado.
8. Explicar la termodinámica y cinética de la adsorción.
9. Gestionar la organización y planificación de tareas.
10. Identificar las bases termodinámicas y cinéticas de las superficies e interfaces.
11. Identificar los diferentes tipos de defectos en las superficies sólidas y reconocer los procesos de adsorción y modificación de superficies.
12. Interpretar textos en inglés sobre aspectos relacionados con la Física y Química en Nanociencia y Nanotecnología.
13. Interpretar y racionalizar los resultados obtenidos en el laboratorio en procesos relacionados con la Física y Química en Nanociencia y Nanotecnología.
14. Llevar a cabo procesos de modificación de superficies y su caracterización.
15. Manejar adecuadamente los instrumentos y materiales estándares propios de laboratorios de la materia Física y Química en Nanociencia y Nanotecnología.

16. Obtener, gestionar, analizar, sintetizar y presentar información, incluyendo el uso de medios telemáticos e informáticos.
17. Operar con un cierto grado de autonomía e integrarse en poco tiempo en el ambiente de trabajo
18. Predecir la modificación de las superficies en base a su composición y los reactivos utilizados.
19. Proponer ideas y soluciones creativas.
20. Racionalizar los resultados obtenidos en el laboratorio en términos de las magnitudes físicas y de su relación con los fenómenos físicos observados.
21. Razonar de forma crítica.
22. Realizar búsquedas bibliográficas de documentación científica.
23. Realizar correctamente cálculos relativos a la termodinámica y cinética de superficies e interficies.
24. Realizar cálculos con reacciones químicas o catálisis en superficies.
25. Realizar ensayos de reactividad y catálisis en superficies.
26. Reconocer los riesgos para la salud y el medio ambiente asociados a la manipulación de compuestos químicos y materiales en general.
27. Reconocer los términos propios de la física y química de las superficies, de la química supramolecular y del reconocimiento molecular.
28. Redactar y exponer informes sobre la materia en inglés.
29. Resolver problemas con la ayuda de bibliografía complementaria proporcionada.
30. Resolver problemas y tomar decisiones.
31. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
32. Utilizar correctamente los protocolos de manipulación de la instrumentación, de reactivos y residuos químicos en los laboratorios propios de la materia.

Contenido

Tema 1. Introducción a las superficies

Tema 2. Estructura de las superficies sólidas

2.1. Cristalografía básica en dos dimensiones (redes bidimensionales, Índice de Miller de los planos cristalinos)

2.2. Notación de las estructuras superficiales

2.3. Ultra alto vacío y Superficies Limpias

2.4. Estructura atómica de las superficies limpias (relajación y reconstrucción)

2.5. Estructura atómica de las superficies con adsorbado

Tema 3. Técnicas analíticas de superficie

3.1. Introducción: Sensibilidad superficial y especificidad superficial.

3.2. Métodos de difracción (LEED, RHEED)

3.3 Métodos de espectroscopia de electrones AES y XPS

3.4. Microscopias (AFM, STM, SPM)

Tema 4. Fenómenos de superficie

4.1. Tensión superficial y energía libre superficial

4.2. Superficies curvas (ecuación de Laplace, ecuación de Kelvin)

4.3. Métodos de medida de la tensión superficial

Tema 5. Tensión superficial y tensión interfacial

5.1. Tensión superficial en soluciones acuosas

5.2. Isoterma de Gibbs

5.3. Trabajo de adhesión, trabajo de cohesión

5.4. Ángulo de contacto - ecuación de Young

5.5. Mojabilidad

5.6. Detersión por agentes tensioactivos

Tema 6. Fenómenos de adsorción

6.1. Definiciones. Interacción gas o vacío con sólidos

6.2. Isotermas de adsorción (isoterma de Langmuir, Isoterma de Temkin, Isoterma de Freundlich, Teoría BET, evaluación de la superficie específica, determinación del tamaño de poro)

Tema 7. Interacción líquidos con sólidos

7.1. Interfases cargadas.

7.2. Modelo de Helmholtz-Perrin

7.3. Modelo de Gouy-Chapman

7.4. Modelo de Stern

7.5. Fenómenos Electrocinéticos (electroquímica y corrosión)

Tema 8. Catálisis heterogénea

8.1. Introducción. Catalizadores. Etapas de un proceso catalítico.

8.2. Cinética química en catálisis heterogénea (influencia de la temperatura, Modelo de Langmuir-Hinshelwood, Modelo de Eley-Rideal)

8.3. Ejemplos de procesos de catálisis heterogénea (Cracking. Reformado. Oxidación catalítica)

Metodología

La asignatura consta de: 28 horas de teoría + 14 horas de problemas + 10 horas de laboratorio, por alumno.

Clases de teoría

Se llevarán a cabo combinando la utilización de material en formato digital y la pizarra. El profesorado planteará casos prácticos para ejemplificar la aplicación de las diversas teorías y modelos.

Clases de problemas

Se tratará de impulsar la participación del alumnado durante las clases de problemas. Algunas sesiones de problemas se realizarán en grupo. Cuando el profesorado lo determine, será obligatoria la entrega de problemas resueltos. Cuando el profesorado lo determine utilizarán las horas de problemas para la realización de pruebas de evaluación continua.

Prácticas de laboratorio i en el aula.

Las prácticas son de asistencia obligatoria, no se aceptará ninguna ausencia no justificada. El trabajo previo de lectura de guiones, enunciados y la revisión de los contenidos teóricos, será fundamental para la buena resolución de los problemas y de las prácticas.

- El módulo A realizará dos sesiones de prácticas de laboratorio de 3 horas.

- El módulo B realizará una sesión de prácticas presencial de 4 horas, complemento del trabajo en grupo, y una práctica virtual que se realizará en formato autónomo e individual.

Tutorías

El profesorado estará disponible para las consultas del alumnado. Se recomienda fuertemente el uso de este recurso didáctico.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases de teoría	28	1,12	6, 5, 8, 24, 23, 11, 10, 18
Prácticas en laboratorio o aula	10	0,4	1, 2, 3, 7, 4, 14, 22, 24, 23, 9, 13, 12, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 25, 27, 28, 31, 32
Resolución de problemas	14	0,56	2, 6, 8, 24, 23, 9, 12, 16, 18, 21, 29, 30, 31
tutorías	12	0,48	2, 7, 4, 8, 9, 13, 16, 17, 27
Tipo: Autónomas			
Estudio individual	36	1,44	1, 2, 3, 7, 6, 5, 8, 22, 9, 11, 10, 17, 19, 21, 28
Informes de prácticas	12	0,48	2, 7, 4, 22, 24, 23, 9, 13, 12, 16, 18, 19, 20, 21, 27, 28, 31
Resolución de problemas	26	1,04	2, 4, 8, 24, 23, 17, 18, 21, 29
lectura de guiones	6	0,24	2, 3, 9

Evaluación

La evaluación global se realizará de forma continuada y consta de:

- 2 parciales obligatorios, con un peso del 40% de la nota final cada uno.
- 1 entrega de Informes de prácticas - en el laboratorio de Química - cuya nota será del 10% de la nota final.
- 1 entrega de problemas de prácticas en el aula en grupo, cuya nota será del 10% de la nota final.
- 1 entrega individual de una práctica virtual, que no computa por la nota final pero que es de entrega obligatoria y por tanto restará 2 puntos a la nota global de la asignatura si no se hace la entrega.

El alumnado que se haya acogido a la modalidad de evaluación única deberá:

- realizar obligatoriamente las prácticas en laboratorio de química, pero podrá optar a una realización individual del problema práctico, debiendo igualmente realizar la Practica Virtual. La entrega de los correspondientes informes podrá realizarse hasta 48h antes del día programado por el segundo parcial de la evaluación continua.
- realizar una prueba final de todo el temario teórico y de problemas de la asignatura. Esta prueba se realizará el día en que el alumnado de la evaluación continua realiza el segundo parcial.

IMPORTANTE: Para superar la asignatura será necesario cumplir los dos requisitos siguientes:

- tener una nota global igual o superior a 5.0 y
- haber obtenido al menos 5.0 puntos sobre 10 en la media de las dos pruebas parciales (o de la prueba final en el caso del alumnado que opte por la evaluación única).

Cuando no se supere la evaluación, incumpliendo alguno de estos dos criterios, pero se obtenga un mínimo de 3.5 en el global de la asignatura, se tendrá derecho a una prueba escrita de recuperación sobre todo el temario que permitirá aprobar el asignatura con una nota de 5 sobre 10.

Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Entrega trabajo en grupo	10	0	0	1, 2, 3, 7, 4, 6, 5, 14, 8, 22, 24, 23, 9, 10, 13, 12, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32
Primer Parcial	40	3	0,12	4, 6, 5, 8, 24, 23, 10, 12, 18, 20, 27
Segundo Parcial	40	3	0,12	2, 4, 5, 11, 10, 12, 18, 21, 27, 30
entrega de informes de prácticas	10	0	0	1, 2, 3, 7, 4, 5, 14, 22, 9, 11, 13, 12, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32

Bibliografía

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^{on} 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

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^{on} 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

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

Software

NINGUNO