

Universidad de La Habana
Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales

Curso de Postgrado Química-Física de Superficies e interfaces	Total de Horas: 190 Créditos: 4	Tipo de curso: Fundamental <input checked="" type="checkbox"/> Específico <input type="checkbox"/> Carácter: Obligatorio <input type="checkbox"/> Opcional <input checked="" type="checkbox"/>
Profesor Mayra Paulina Hernández Sánchez		
Objetivo general <ul style="list-style-type: none"> Formar al profesional en aspectos básicos relacionados con la física-química de la superficie e interfaces. 		
Contenidos (temas) <ul style="list-style-type: none"> La cristalografía de 2D. Redes cristalinas. Operaciones de Simetría. Relajación y reconstrucción de la superficie. Numero de Coordinación. Representación de Wood y matricial. Espacio recíproco 2D. Representaciones de redes 2D en el espacio inverso. Esfera de Ewald. Similitud entre el espacio inverso y el espacio de Fourier. Tecnología de Ultra Alto Vacío (UHV) como requisito básico para el estudio de superficie. Conceptos básicos de vacío. Tecnología de UHV. Materiales. Bombas. Medidores de presión. Breve descripción de una instalación de UHV. Adsorción de moléculas en superficies. Enlace de las moléculas a la superficie. Cinética de adsorción. Física y química adsorción. Curvas de energía versus distancia entre la molécula y la superficie. Proceso de desorción. Estructura atómica de superficies con adsorbatos. Fases superficiales en sistemas de sustrato/monocapas. Composición de fases en superficies. Cubrimientos de adsorbatos. Nuevas superficies por el efecto del adsorbato. Diagramas de formación de fases. Métodos para evaluar la adsorción de moléculas en una superficie. Variación del cubrimiento con la temperatura y la presión. Isotermas de Langmuir y de BET. Técnicas de Difracción para el análisis de superficies. Difracción de electrones. Microscopia de transmisión de electrones. Difracción de baja energía de electrones (LEED). Difracción por reflexión de electrones (RHEED). Difracción de Rayos X por incidencia rasante (GIXRD). Microscopia de punta para análisis de superficie. Microscopio de barrido por efecto túnel (STM). Microscopia de Fuerza Atómica (AFM). Principio de Funcionamiento. Procedimiento para la obtención de imágenes. Manipulación de átomos y moléculas. Procesamiento de imágenes. Un estudio comparativo entre las microscopias electrónicas de transmisión y barrido con respecto al STM y AFM. Análisis de propiedades mecánicas de superficie. Espectroscopia de Fuerza. Adherencia. Dureza. Coeficiente de fricción. Modulo elástico. Torsión. Manipulación atómica y formación de nanoestructuras. Manipulación atómica con STM. Desplazamiento atómico lateral. Extracción de átomos. Depósito de átomos. Autoensambles moleculares (SAM). Análisis de propiedades eléctricas de uniones molécula/metal. Espectroscopia de barrido por efecto túnel (STS). Mediciones de corriente y voltaje usando un STM, AFM y puntas de mercurio. Análisis de superficie usando Espectroscopia de Electrones. Sensibilidad y especificidad de la superficie. Espectros de electrones secundarios. Analizadores de energía de electrones. Espectroscopia de electrones Auger (AES). Espectroscopia de fotoelectrones de Rayos X (XPS). Espectroscopia de fotoelectrones de ultravioleta (UPS). Espectroscopia de electrones por pérdida de energía (EELS). Principio de funcionamiento. Procedimiento para obtención de espectros. Análisis cuantitativo y cualitativo. Alcance de cada técnica. Análisis de superficie por espectroscopia vibracional. Espectroscopia reforzada de la dispersión de Raman (SERS). Principio de funcionamiento. Comparación entre espectroscopia infrarrojo, espectroscopia Raman y EELS. Aspectos de cálculos teóricos de superficie. Teoría de la función densidad (DFT). El programa VASP. 		

Objetivos específicos (habilidades a adquirir por parte de los estudiantes)

- Crear habilidades en la representación cristalográfica de las superficies atendiendo a los aspectos de notación, operaciones de simetría, número de coordinación.
- Crear habilidades para el manejo de la transformación del espacio directo al espacio recíproco con vistas a las aplicaciones de la difracción de electrones y rayos X, así como la transformada de Fourier para las imágenes de alta resolución atómica.
- Conocer los requerimientos básicos de la tecnología de UHV dada su importancia en el estudio de superficie.
- Explicar satisfactoriamente la adsorción de moléculas en superficies basado en la cinética de adsorción y desorción.
- Saber sobre la estructura atómica de superficies con adsorbatos, estableciendo un conocimiento profundo sobre el efecto de los adsorbatos en los sustratos.
- Saber extraer información sobre el proceso de adsorción basadas en las isothermas de Langmuir y BET.
- Crear habilidades basadas en el concepto de espacio recíproco para reconocer la cristalografía de la superficie por medio de patrones de difracción de electrones y rayos X.
- Saber distinguir el tipo de microscopia requerida para el estudio de materiales teniendo en cuenta el principio de funcionamiento de los microscopios STM, AFM, SEM y TEM.
- Saber diseñar experimentos que permitan evaluar propiedades mecánicas de la superficie usando la espectroscopia de fuerza.
- Saber cómo el STM es capaz de manipular átomos y moléculas para obtener la formación de nanoestructuras.
- Conocer los métodos de medición de propiedades eléctricas de uniones molécula/metal usando el STM y la punta de Hg.
- Saber utilizar las espectroscopias de electrones para el reconocimiento de propiedades físicas y químicas de la superficie.
- Saber diseñar los experimentos para la cuantificación de especies químicas basados en la espectroscopia de electrones teniendo en cuenta la composición química de la muestra.
- Saber utilizar la UPS para la medición de Banda de Valencia y estados de hibridización de especies químicas.
- Saber utilizar las espectroscopias RAMAN para el reconocimiento de propiedades físicas y químicas de la superficie.
- Distinguir las diferencias la espectroscopia infrarrojo, espectroscopia Raman y EELS.
- Conocer la importancia de los cálculos teóricos en el estudio de superficie.
- Conocer la teoría de la función densidad (DFT) y el programa VASP.

Bibliografía fundamental

- Notas de clases. Química y Física de Superficie. Folleto elaborado por el docente. (Digital)
- Surface Science. An Introduction. K. Oura. V.G. Lifshits, A.A. Saranin. A.V. Zotov. M. Katayama. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York. 2003. (Digital)
- Handbook XPS. John F. Moulder, W. Uliam, F. Stickle, Peter E. Sobol, Kennetlf D. Bomben. Edited by Jill Chastain. Published by Perkin Elmer Corporation Physical Electronics Division 65. Minnesota 55344. USA (1992). (Digital)

Bibliografía complementaria

- Introduction to infrared and Raman spectroscopy. Norman B. Colthup. Lawrence H. Daly. Stephen Wiberly. Academic Press. 1990. (digital)

Sistema de evaluación (el profesor debe conformar lo que mejor conviene, según particularidades de la asignatura)

- Evaluación de preguntas en las clases prácticas.
- Trabajo de control extraclase que consiste en la presentación de un seminario (duración de 15 minutos) sobre un tema actual asignado a cada estudiante.
- Examen final (en correspondencia con los objetivos específicos)

Formas de enseñanza

- Conferencias (predomina la exposición del profesor),
- Clases Prácticas (prevalece la elaboración conjunta profesor-estudiantes de las soluciones a los problemas)
- Seminarios (predomina la participación de los estudiantes; es recomendable como preparación con vistas al examen)

