



Asignatura: Física de Superficies e Interfases  
Código: 30596  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología  
Nivel: Máster  
Tipo: Asignatura obligatoria  
Nº de créditos: 4

## ASIGNATURA / COURSE TITLE

Física de Superficies e Interfases / Physics of Surfaces and Interfaces

### 1.1. Código / Course number

30596

### 1.2. Materia / Content area

Fundamentos de Física de la Materia Condensada / Fundamentals of Condensed Matter Physics

### 1.3. Tipo / Course type

Formación obligatoria / Compulsory subject

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / Master (second cycle)

### 1.5. Curso / Year

1º / 1<sup>st</sup>

### 1.6. Semestre / Semester

1º trimestre / 1<sup>st</sup> trimester

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

4 créditos ECTS / 4 ECTS credits

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Para cursar esta asignatura es necesario poseer un dominio profundo de la Física del Estado Sólido, así como buenos conocimientos de Mecánica Cuántica y Estadística / In order to be able to follow this subject, a strong background



Asignatura: Física de Superficies e Interfases  
Código: 30596  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Física de la Materia Condensada y Nanotecnología  
Nivel: Máster  
Tipo: Asignatura obligatoria  
Nº de créditos: 4

in Solid State Physics is required. A fairly good knowledge of Quantum and Statistical Mechanics is also highly desirable.

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / Minimum attendance requirement

La asistencia es obligatoria al menos en un 85% / Attendance at a minimum of 85% of in-class sessions is mandatory

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / Lecturer(s): Juan José de Miguel Llorente (Coordinador)  
Departamento de Física de la Materia Condensada / Department of Condensed Matter Physics  
Facultad de Ciencias / Faculty of Sciences  
Despacho - Módulo / Office - Module: 01-03-DE-514  
Teléfono / Phone: +34 91 497 4746  
Correo electrónico/Email: juanjose.demiguel@uam.es  
Página web/Website: <http://>  
Horario de atención al alumnado/Office hours: 12:00 - 14:00

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

Se introducen los conceptos y fenómenos básicos asociados con la ruptura de la periodicidad cristalina tridimensional en superficies e interfaces de contacto entre diferentes materiales, así como efectos de confinamiento y otros derivados del tamaño reducido. Finalmente, se presentan las técnicas experimentales y teóricas más relevantes dentro del campo. / The basic concepts and phenomena associated to the rupture of the three-dimensional crystalline periodicity at surfaces and interfaces between different solid materials, as well as the effects of confinement and others derived from reduced size. Finally, the students will become familiar with the most relevant theoretical and experimental techniques in the field.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

- I. Introducción a la Física de Superficies e Interfases. Técnicas de Ultra Alto Vacío (UAV).
  1. Importancia de los fenómenos superficiales. Desarrollo histórico. Necesidad del UAV. Producción y medida de UAV.
- II. Termodinámica de superficies
  2. Formulación de Gibbs. Método de los excesos superficiales. Tensión superficial. Anisotropía de la tensión superficial. Construcción de Wulff.
- III. Análisis químico de superficies

3. Termodinámica de la composición superficial. Segregación. Superficies de aleaciones. Caracterización experimental: Espectroscopías de fotoelectrones y de electrones Auger.

#### **IV. Estructura cristalina de superficies limpias**

4. Redes de Bravais bidimensionales. Notaciones de Miller y van Hove. Superestructuras. Red recíproca bidimensional.
5. Teoría cinemática de la difracción. LEED. Construcción de Ewald.
6. Relajación. Reconstrucción. Defectos: vacantes, superficies escalonadas, dislocaciones.

#### **V. Estructura electrónica de superficies**

7. Modelos continuos. Aproximación de densidad local (LDA). Modelo de “jellium”. Modelos de gas de electrones libres.
8. Estados en una cadena unidimensional semi-infinita. Estados de superficie intrínsecos (Shockley, Tamm) y extrínsecos.
9. Potencial imagen. Estados imagen de superficie. Métodos experimentales: fotoemisión inversa, espectroscopía túnel.
10. Función de trabajo y potencial electrostático de superficie. Dependencia de la función de trabajo con: orientación cristalina, densidad de escalones atómicos.
11. Espectroscopía de fotoelectrones. Modelo de tres pasos. Simetría de estados inicial y final. Reglas de selección.
12. Magnetismo de superficie. Orden ferromagnético en 2D. Modelos de Heisenberg y de Stoner. Momentos magnéticos en 2D. Anisotropía magnética. Temperatura de Curie en 2D.

#### **VI. Excitaciones elementales**

13. Fonones. Vibraciones de una cadena lineal. Modelo 3D con superficie.
14. Relación de dispersión de fonones. Zonas de Brillouin en 2D. Ondas de Rayleigh. Relajación y reconstrucción.
15. Temperatura de Debye de la superficie. Factor Debye-Waller.
16. Plasmones y excitones. Relación de dispersión de plasmones.
17. Magnones. Ondas de espín. Relación de dispersión.

#### **VII. Transiciones de fase en superficies**

18. Parámetro de orden y clases de universalidad. Fusión superficial. Teoría de Kosterlitz-Thouless.
19. La transición rugosa. Modelo sólido-en-sólido. Fluctuaciones de un escalón en un potencial periódico. Modelos en 2 dimensiones.
20. Reconstrucción superficial. Fases estructurales de superficie. Ejemplos.
21. Transiciones orden-desorden magnéticas. Teorías de campo medio. Fenómenos críticos. Fluctuaciones.

#### **VIII. Fisisorción y Quimisorción**

22. Fisisorción. Interacción de van der Waals. Estados fisisorbidos.
23. Quimisorción. Formulación de Gibbs. Isotermas de absorción de Gibbs y de Langmuir. Enlaces de quimisorción. Estados precursores. Quimisorción disociativa.

24. Variación de la función de trabajo inducida por adsorbatos. Capa dipolar superficial. Quimisorción en semiconductores. Zona de carga espacial. Curvatura de bandas.

#### **IX. Transiciones de fase en sistemas quimisorbidos**

25. Equilibrio de fases. Isotermas de adsorción. Modelo de gas de red 2D. Interacciones adsorbato-adsorbato. Condensación.
26. Fases ordenadas bidimensionales. Interacciones entre adsorbatos. Transiciones orden-desorden. Dominios.
27. Estructuras commensuradas e incommensuradas. Modelo de Frenkel-Kontorova. Dominios de antifase.

#### **X. Procesos dinámicos**

28. Difusión superficial. Teoría del Estado de Transición. Camino aleatorio en 2D. Coeficientes de difusión. Difusión anómala: saltos largos, desplazamientos no-aleatorios.

#### **XI. Reacciones superficiales**

29. Catálisis. Actividad y selectividad catalítica. Promotores y venenos.
30. Nucleación y crecimiento. Modos de crecimiento. Sobresaturación. Núcleo crítico. Modelo de Frank-van der Merwe. Modelos cinéticos. Métodos experimentales basados en difracción.

#### **XII. Ingeniería de materiales a nivel atómico**

31. Interfases sólido-sólido. Potencial de contacto. Curvatura de bandas y barrera Schottky. Fijación del nivel de Fermi. Estados electrónicos en el gap (MIGS, VIGS).
32. Ingeniería de “band-gap”. Curvatura de bandas. Zona de carga espacial. Heterouniones semiconductoras. Gas bidimensional de electrones de alta movilidad.
33. Multicapas y super-redes magnéticas. Anisotropía magnética. Acoplamiento magnético oscilatorio en multicapas. Magneto-resistencia gigante. Válvulas de espín.

#### **I. An Introduction to the Physics of Surfaces and Interfaces. Ultra-High Vacuum Techniques (UHV)**

1. Importance of surface phenomena. Historical development. Need for UHV. Production and measurement of UHV.

#### **II. Surface Thermodynamics**

2. Gibbs formulation. Method of surface excesses. Surface tension. Anisotropy of surface tension. Wulff construction.

#### **III. Chemical analysis of surfaces**

3. Thermodynamics of surface composition. Segregation. Alloy surfaces. Experimental characterization: Photoelectron and Auger electron spectroscopies.

**IV. Crystal structure of clean surfaces**

4. 2-dimensional Bravais lattices. Notations of Miller and van Hove. Superstructures. 2-dimensional reciprocal lattice.
5. Kinematic theory of diffraction. Low Energy Electron Diffraction (LEED). Ewald construction.
6. Relaxation. Reconstruction. Defects: vacancies, stepped surfaces, dislocations.

**V. Surface electronic structure**

7. Continuum models. Local density approximation (LDA). Jellium model. Free electron gas models.
8. Electronic states in a semi-infinite one-dimensional chain. Intrinsic (Shockley, Tamm) and extrinsic surface states.
9. Image potential. Surface image states. Experimental methods: inverse photoemission, tunnel spectroscopy.
10. Work function and surface electrostatic potential. Work function dependence with: crystal orientation, atomic step density.
11. Photoelectron spectroscopy. Three-step model. Symmetry of initial and final states. Selection rules.
12. Surface magnetism. Ferromagnetic order in 2D. Heisenberg and Stoner models. Magnetic moments in 2D. Magnetic anisotropy. Curie temperature in 2D.

**VI. Elementary excitations**

13. Phonons. Vibrations in a linear chain. 3D model with surface.
14. Phonon dispersion relation. 2D Brillouin zones. Rayleigh waves. Relaxation and reconstruction.
15. Surface Curie temperature. Debye-Waller factor.
16. Plasmons and excitons. Plasmon dispersion relation.
17. Magnons. Spin waves. Dispersion relation.

**VII. Phase transitions at surfaces**

18. Order parameter and universality classes. Surface melting. Kosterlitz-Thouless theory.
19. The roughening transition. Solid-on-solid model. Fluctuations of a step in a periodic potential. 2D models.
20. Surface reconstruction. Surface structural phases. Examples.
21. Magnetic order-disorder transitions. Mean-field theories. Critical phenomena. Fluctuations.

**VIII. Physisorption and Chemisorption**

22. Physisorption. Van der Waals interaction. Physisorbed states.
23. Chemisorption. Gibbs formulation. Gibbs and Langmuir adsorption isotherms. Chemisorption bonds. Precursor states. Dissociative chemisorption.
24. Adsorbate-induced work function change. Surface dipolar layer. Chemisorption on semiconductors. Space charge layer. Band bending.

**IX. Phase transitions in chemisorbed systems**

25. Phase equilibrium. Adsorption isotherms. 2D lattice gas model. Adsorbate-adsorbate interactions. Condensation.
26. 2D ordered phases. Interactions between adsorbates. Order-disorder transitions. Domains.
27. Commensurate and incommensurate structures. Model of Frenkel-Kontorova. Antiphase domains.

#### X. Kinetic processes

28. Surface diffusion. Transition State Theory. 2D random walk. Diffusion coefficients. Anomalous diffusion: long jumps, non-random displacements.

#### XI. Surface reactions

29. Catalysis. Catalytic activity and selectivity. Promoters and poisons.
30. Nucleation and growth. Growth modes. Supersaturation. Critical nucleus. Model of Frank-van der Merwe. Kinetic models. Diffraction-based experimental methods.

#### XII. Atomic-level materials engineering

31. Solid-solid interfaces. Contact potential. Band bending and Schottky barrier. Fermi level pinning. Band-gap electronic states (MIGS, VIGS).
32. Band-gap engineering. Band bending. Space charge layer. Semiconductor heterojunctions. High-mobility 2D electron gas.
33. Magnetic multilayers and superlattices. Magnetic anisotropy. Oscillatory magnetic coupling in multilayers. Giant magneto-resistance. Spin valves.

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

#### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA / BASIC BIBLIOGRAPHY:

- A. Zangwill, Physics at Surfaces, 2nd. edition, Cambridge Univ. Press (Cambridge, 1990).
- H. Lüth, Surfaces and Interfaces of Solids, Springer (Berlin, 1993).

#### BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA / RECOMMENDED BIBLIOGRAPHY:

- M.C. Desjonquères & D. Spanjaard. Concepts in Surface Physics. 2nd. edition, Springer (Berlin, 1998).
- G. Ertl & J. Küppers, Low Energy Electrons and Surface Chemistry, Monographs in Modern Chemistry Vol. 4, Verlag Chemie (Weinheim, 1985).

#### OTROS RECURSOS / ADDITIONAL RESOURCES:

Simulaciones, enlaces web y ejercicios de software incluidos en la página web de la asignatura / [Simulations, web links and software exercises included in the subject's web page](#).

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

- Clase magistral en grupo. Los alumnos pueden descargar las presentaciones previamente desde la web de la asignatura / Standard group lectures. The students can download the presentations prior to the classes from the subject's web site.
- Seminarios de investigadores invitados sobre temas relevantes del curso / Seminars given by invited researchers on relevant matters from the course programme.
- Página web de la asignatura / Course web page
- Resolución individual de ejercicios y problemas por los alumnos, comentados en clase / Individual solving of problems and exercises by the students; discussion during the lectures.
- Tutorías individuales a petición del alumno / Personal tutorials upon student request

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		Nº de horas	Porcentaje
Presencial	Clases teóricas	33 h (33%)	44 horas = 44%
	Clases prácticas		
	Tutorías programadas a lo largo del semestre	5 h (5%)	
	Seminarios	4 h (4%)	
	Presentación de trabajos finales	2 h (2%)	
No presencial	Realización de actividades prácticas	15 h (%)	56 horas = 56%
	Estudio semanal (3 horas/semana x 10 semanas)	30 h (%)	
	Realización de cuestionarios web para cada tema	11 h (%)	
Carga total de horas de trabajo: 25 horas x 4 ECTS		100 h	

## 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

- Calificación media de los cuestionarios web realizados al final de cada tema / Average grade of the web questionnaires completed at the end of each chapter: ..... 50%
- Trabajo final de asignatura / Final course assignment: ..... 50%

Se usarán los mismos métodos y criterios de evaluación en la convocatoria extraordinaria / **The same criteria and procedures will be used for the extraordinary evaluation.**

## 5. Cronograma / Course calendar

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1	Temas I, II, III, IV-4 / <b>Units I, II, III, IV-4</b>	4	4
2	Temas IV-5, IV-6, V-7, V-8 / <b>Units, IV-5, IV-6, V-7, V-8</b>	4	4
3	Temas V-9, V-10, V-11, tutorías / <b>Units V-9, V-10, V-11, tutorial</b>	5	4
4	Temas V-12, VI-13, VI-14 / <b>Units V-12, VI-13, VI-14</b>	4	4
5	Temas VI-15, VI-16, VI-17, seminario / <b>Units VI-15, VI-16, VI-17, seminar</b>	5	4
6	Temas VII-18, VII-19, VII-20, VII-21 / <b>Units VII-18, VII-19, VII-20, VII-21</b>	4	4
7	Temas VIII-22, VIII-23, VIII-24, tutorías / <b>Units VIII-22, VIII-23, VIII-24, tutorial</b>	5	4
8	Temas IX-25, IX-26, IX-27 / <b>Units IX-25, IX-26, IX-27</b>	4	4
9	Temas X-28, XI-29, XI-30 / <b>Units X-28, XI-29, XI-30</b>	4	4
10	Temas XII-31, XII-32, XII-33, seminario / <b>Units XII-31, XII-32, XII-33, seminar</b>	5	4
11, 12	Trabajo final de curso / <b>Final course assignment</b>	0	16
	<b>TOTAL</b>	<b>44</b>	<b>56</b>