Argomenti trattati

Introduzione al corso. Introduzione all' organica elettronica.
Descrizione delle strutture di superfici e di bulk in termini dei reticoli di Bravais. Celle unitarie e celle primitive.
Cella di Wigner Seitz. Coordinazione atomi di superfici. Superfici vicinali.
Scattering da un elettrone, da un atomo, da un cristallo.
Fattore di forma atomico, fattore di struttura. Momento scambiato e condizioni di Laue. Reticolo reciproco.
Esempi di applicazione delle tecniche di diffrazione GIXRD e LEED.
Ricostruzione della superficie di oro 110.
Ricostruzione herringbone dell'oro 111 e crescita di Self-Assembled Monolayer di alcanotoli.
L'interfaccia Au-S studiata con diffrazione di raggi X e STM.

Struttura a bande di un solido 1-D con l'approccio Hoffmann.
Enunciazione del Teorema di Bloch.
Descrizione e dipendenza da r delle interazioni carica-dipolo, dipolo dipolo e dipolo indotto-dipolo indotto.
Carica immagine e forze di van der Waals su superfici.
Modello Blyholder per legame di CO su metalli.
Modelli di Norskov per l'interazione tra molecole e metalli di transizione.
Esempi di chemisorbimento (NMA su Ni, O₂ e CO su Pd, etilene su Pt(111))
Misura del calore isosterico di adsorbimento: Clausius Clapeyron e metodo SCAC.
Introduzione alla funzione lavoro e tecnica Kelvin Probe. Legge di Hertz Knudsen.
Adsorbimento alla Langmuir, dissociativo e con precursor state. Equazione di Frenkel.
Tempo di adsorbimento calcolato dall'equazione di Frenkel. Equazione di Polanyi-Wigner.
Ordine di desorbimento 0,1 e 2. Misura della pressione.
Relazione tra rate di desorbimento, pressione e ricoprimento.
Desorbimento TPD e determinazione dell'energia e della costante pre-esponenziale.

Principi della fotoemissione: regola di Fermi, shift chimici, shake-up, surface core level shift, split spin-orbita.
Caratterizzazione della chimica dei SAM: legame SAM-metallo e chimica del gruppo funzionale del sam.
Principi della tecnica NEXAFS.
Regola di Fermi e sudden approximation.
Dipendenza angolare del segnale e orientazione delle molecole.
Esempi di applicazione a film organici auto-assemblati su superfici.
Principi alla base della fotoemissione risonante.
Decadimenti spectator e participator.
Introduzione al metodo core-hole clock per la misura del trasferimento di carica.
Microscopio a scansione ad effetto tunnel (STM).
Principio di funzionamento, topografia e spettroscopia, curve dI/dV . Strumentazione.
Esempi di applicazione. Microscopio a forza atomica (AFM).
Principi di funzionamento. Modalità contact, no contact e tapping. Misure combinate STM/AFM.
Funzionalizzazione della punta e misure tapping mode con risoluzione atomica.
Reazione Ullmann su superfici. Covalent Organic Frameworks (COF).
Reazione di condensazione boronica e COF 2D. Il grafene: cenni alla struttura a bande.
Sintesi di grafene su superfici: grafene su nickel.
Esempio di sintesi di nanoribbons di grafene per ciclo-deidrogenazione.
Hot electrons e studio del transition state di reazioni su superfici.
Cenni alla fotoemissione a due fotoni: studio del processo di singlet fission.

Modalità di esame.

Discussione di un articolo concordato con il docente, riguardante un argomento della seconda parte del corso (tecnica sperimentale o caso scientifico a cui si è interessati) più una domanda sugli argomenti della prima parte. Si consiglia di preparare una breve presentazione dell'articolo concordato, in cui si riportano i grafici significativi che si vuole commentare in base