

Modelización a partir de cálculos de primeros principios de procesos fisicoquímicos sobre superficies: desde la adsorción hasta la funcionalización

HERIBERTO FABIO BUSNENGO¹

¹*Instituto de Física Rosario, CONICET - Universidad Nacional de Rosario, Rosario, Argentina*

ABSTRACT

En esta presentación se ilustrará a través de varios ejemplos, el estado del arte de la modelización teórica de varios procesos fisicoquímicos sobre superficies. Se discutirán en detalle posibles mecanismos de adsorción de moléculas pequeñas sobre superficies metálicas limpias y la relevancia de los diferentes mecanismos de transferencia de energía entre la molécula y la superficie, el efecto de la presencia de especies preadsorbidas, la posibilidad de modificar la reactividad de una superficie a través de la preparación controlada de aleaciones superficiales bimetálicas y el papel relativo de las interacciones molécula-superficie y molécula-molécula en las posibles estructuras que moléculas orgánicas más complejas forman a escala nanométrica (auto-organización). Se mostrará además, cómo a través de la comparación directa de este tipo de simulaciones con resultados experimentales de caracterización estructural de superficies en ultra alto vacío, desorción térmica programada, con haces moleculares supersónicos, es posible contribuir al desarrollo de nuevas funcionales de intercambio y correlación electrónica en la que reside la aproximación central dentro de la Teoría de la Funcional Densidad, la herramienta teórica estándar hoy en día para la descripción de sistemas molécula-superficie.