

Escuela José Antonio Balseiro 2023

“Física de Superficies y Materiales 2D”

Profesor Responsable: Dr. Julio Esteban Gayone

Comité organizador: Esteban Gayone, Hugo Ascolani, Silvina Bengiό, Gisela Bocán, Esteban Cantero, Javier Fuhr, Oscar Grizzi, Christian Helman, María Luz Martiarena, Pablo Roura, Esteban Sánchez, Laura Serkovic, Guillermo Zampieri

Estructura de los cursos:

La duración de la Escuela será de 4 semanas, de lunes a viernes. La escuela tendrá una estructura de 6 módulos de clases de aula durante las 3 primeras semanas, y una pasantía en un laboratorio del Centro Atómico Bariloche durante la cuarta semana. Las clases de aula tendrán duración de 4 horas, comprendiendo una parte teórica y una parte de resolución de ejercicios. El programa detallado de la Escuela puede verse en el siguiente vínculo Programa EJOB 2023.

La evaluación se basará en: i) un examen escrito tomado al finalizar los 6 módulos de clases en aula y ii) la presentación de un póster exponiendo los resultados y análisis del trabajo realizado durante la pasantía en el laboratorio asignado. El Instituto Balseiro extenderá certificados de aprobación y/o asistencia según corresponda.

Las temáticas propuestas para los módulos de las clases son las siguientes:

Módulo 1: Fundamentos de física del estado sólido. (5 clases)

Módulo 2: Fundamentos de física de superficies. (5 clases)

Módulo 3: Teoría de Funcional Densidad y aplicaciones a superficies y materiales 2D. (5 clases)

Módulo 4: Técnicas experimentales de física de superficies. (5 clases)

Módulo 5: Materiales bidimensionales sobre superficies. (5 clases)

Módulo 6: Estructuras organometálicas bidimensionales sobre superficies. (5 clases)

Se propone el siguiente cronograma:

	Semana 1	Semana 2	Semana 3	Semana 4		
	Intro			lunes	martes- jueves	viernes
Mañana (8:30-12:30)	Módulo 1	Módulo 3	Módulo 5	Examen	Prácticas de laboratorio	Presentación de posters
Tarde (14:30-18:30)	Módulo 2	Módulo 4	Módulo 6			Comida

Breve descripción del contenido de los módulos

Módulo 1: Fundamentos de física del estado sólido. (5 clases)

Docente: Pablo Roura

- Electrones en un potencial periódico. Teorema de Bloch, zonas de Brillouin. Modelo de enlaces fuertes.
- Bandas de energía. Grafeno, estructura de bandas, puntos de Dirac. Metales y aislantes: siliceno, germaneno, antimoneno y estaneno.
- Simetrías de inversión temporal y espacial en sistemas de Bloch. Fase de Berry. Sistema de dos niveles. Obstrucción genérica para elegir un dado gauge.
- Simetría de inversión temporal en sistemas con espín.

Módulo 2: Fundamentos de física de superficies. (5 clases)

Docente: Esteban Gayone y Hugo Ascolani

- Cambios en la cristalografía y estructura electrónica al pasar de 3D a 2D.
- Relajación en metales simples.
- Reconstrucción en semiconductores.
- Reconstrucción en metales pesados.
- Potencial electrónico en la superficie y estados electrónicos localizados; estados Shockley, Tamm y de carga imagen.
- Difracción de electrones de baja energía (LEED) y espectroscopía de fotoelectrones (XPS)

Módulo 3: Teoría de Funcional Densidad y aplicaciones a superficies y materiales 2D. (5 clases)

Docentes: Javier Fuhr y Gisela Bocán

- Electrones interactuantes: aproximaciones.
- Teoría de la Funcional Densidad (DFT): teoremas de Hohenberg-Kohn.
- Método Kohn-Sham: problema efectivo de una partícula. Funcionales de intercambio y correlación.
- Implementaciones del método Kohn-Sham: bases, pseudopotenciales.
- Aplicaciones a superficies: relajación y reconstrucción, adsorción, estados de superficie.
- Aplicaciones a materiales 2D: configuración atómica, estructura de bandas, acoplamiento espín-órbita.

Módulo 4: Técnicas experimentales de física de superficies. (5 clases)

Docentes: Esteban Sánchez, Silvina Bengió y Oscar Grizzi

- Condiciones experimentales para realizar un experimento de física de superficies.

- Métodos de sensado de propiedades de superficie: microscopías, espectroscopías, espectrometrías.
- Técnicas experimentales: Microscopías de barrido (SEM, STM, AFM), espectroscopías de electrones (AES, UPS, XPS, EELS), espectroscopía de fotones (RAMAN), espectroscopías y espectrometrías de iones (SIMS, SARS, RBS), técnicas de difracción (LEED, GIFAD).
- Prácticas guiadas en laboratorios.

Módulo 5: Materiales bidimensionales sobre superficies. (5 clases)

Docentes: Laura Serkovic y Pablo Roura

- Introducción a los materiales 2D. Grupos de materiales 2D.
- Grafeno: propiedades y aplicaciones (espintrónica, transistores, sensores).
- X-enos (siliceno, germaneno, antimoneno y estaneno): propiedades y posibles aplicaciones (espintrónica, sensores).
- Técnicas de fabricación: top-down (exfoliación mecánica y exfoliación en fase líquida) y bottom-up (CVD, crecimiento epitaxial, adsorción atómica y molecular).
- La importancia de la superficie en la estructura y las propiedades de los materiales 2D.
- Nociones de topología y su vínculo con la Física. Desarrollo histórico: Conductancia Hall, aislantes de Chern. Simetría de inversión temporal en sistemas sin espín. Modelo de Haldane y Kane-Mele de aislante topológico. Siliceno, germaneno, antimoneno y estaneno como realizaciones en dos dimensiones de aislantes topológicos.

Módulo 6: Estructuras organometálicas bidimensionales sobre superficies. (5 clases)

Docentes: Hugo Ascolani y Esteban Gayone

- Arquitectura con moléculas orgánicas (MO) en superficies. Introducción a la química del carbono. Interacciones intermoleculares no-covalentes. Adsorción de MO en superficies: interacción de Van der Waals, intercambio de carga y deprotonación.
- Autoensamblado de MO en superficies. El problema de la separación quiral. Helicenos.
- Estructuras metal-orgánico basadas en enlaces de coordinación sobre superficies. Enlaces de coordinación. Estrategias de síntesis, propiedades.
- Momento magnético local. Efectos de la superficie. Su control mediante adsorción de ligandos axiales. Determinación del momento magnético local mediante NEXAFS.

- Orden magnético. Interacción magnética entre centros de coordinación. Efecto de la superficie. Determinación del orden magnético mediante dicroísmo circular.

Destinatarios/as:

Estudiantes de carreras de grado en Ciencias (Física, Química o afines) e Ingenierías, con al menos el 75 % de la carrera aprobada al momento de realizar la inscripción, o estudiantes graduados/as que estén realizando un posgrado en las mismas áreas.

Dado el carácter intensivo de los cursos el número de participantes estará limitado a un máximo de 20-25 alumnos/as que serán seleccionados/as en base a sus méritos académicos y afinidad del área de investigación con la temática de la escuela.

Objetivo de la Escuela JAB 2023 “Física de Superficies y Materiales 2D”:

El objetivo de la Escuela José Antonio Balseiro 2023 (EJAB2023) es brindar a los estudiantes una formación básica actualizada en el área de física de superficies y su aplicación al crecimiento y caracterización de nuevos materiales 2D. La escuela se compondrá de 6 módulos de clases en aula más un módulo de experimentos en laboratorios del CAB. La sección de clases en aula iniciará con sendos módulos sobre conceptos fundamentales de física del estado sólido y de física de superficies, continuando luego con los módulos más avanzados sobre: i) teoría de la funcional densidad y sus aplicaciones a sistemas bidimensionales, ii) técnicas experimentales de física de superficies, iii) síntesis, caracterización y física de materiales 2D sobre superficies (X-enos), y iv) síntesis, caracterización y física de redes metal-orgánicas. El módulo de prácticas en laboratorios comprenderá la realización de experimentos sobre la temática de la escuela guiados por investigadores locales.