



Al Prof. Gaetano Senatore
Coordinatore del Dottorato di Ricerca in Fisica
Università degli Studi di Trieste

Trieste, 18 gennaio 2005

Progetto di Tesi di Dottorato in Fisica di LAURA BIANCHETTIN

E' noto che la superficie dei metalli di transizione $4d$ e $5d$ possa agire come catalizzatore di reazioni chimiche riducendo le barriere di attivazione di tali processi.

In particolare gli atomi di superficie a bassa coordinazione (adatom isolati, dimeri, atomi sugli step) oppure quelli immersi in una lega bimetallica sono caratterizzati da straordinarie proprietà catalitiche.

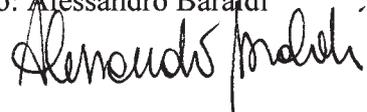
Studi teorici realizzati nell'ultimo decennio hanno mostrato come la variazione delle proprietà catalitiche degli atomi che risiedono in queste particolari configurazioni dipenda dallo spostamento della posizione del baricentro della banda d [1,2].

La tesi di dottorato sarà incentrata nello studio della correlazione esistente tra questa quantità fisica e la reattività chimica attraverso l'uso della spettroscopia di fotoemissione ad alta risoluzione energetica dei livelli di core [3].

L'attività di ricerca sperimentale si svolgerà presso il Laboratorio di Fisica delle Superfici del TASC-INFN e presso la beamline SuperESCA di ELETTRA. Il progetto di tesi include inoltre la realizzazione di calcoli teorici sui sistemi studiati in collaborazione con il gruppo del Prof. Stefano de Gironcoli della SISSA.

- [1] T. Zambelli, J. Winterlin, J. Trost, G. Ertl, *Identification of the "active sites" of a surface-catalyzed reaction*, Science 273, 1688 (1996).
- [2] B. Hammer, M. Scheffler, *Local chemical reactivity of a metal alloy surface*, Phys. Rev. Lett. 74, 3487 (1995).
- [3] A. Baraldi, S. Lizzit, G. Comelli, M. Kiskinova, R. Rosei, K. Honkala, J.K. Nørskov, *Spectroscopic link between adsorption site occupation and local surface chemical reactivity*, Phys. Rev. Lett. 93, 46101 (2004).

Visto: Alessandro Baraldi


Laura Bianchettin