

## ESTRUCTURA CRISTALINA

- Una completa caracterización de la superficie no implica conocer que átomos están presente en la superficie, sino también en donde están los átomos. Además, cual es la posición de estos átomos relativa a las capas subyacente, en otras palabras cual es la cristalografía de la región de la superficie.
- La estructura del bulbo puede ser encontrada por medio de difracción de rayos-x, desafortunadamente la gran profundidad de penetración y el camino libre medio de los rayos-x limitan a esta técnica para ser usada en cristalografía de superficie.
- De las diferentes técnicas que se tienen para el análisis de la cristalografía de superficie, ninguna es tan sencilla como lo es la difracción de rayos-x para determinar la cristalografía del bulbo.

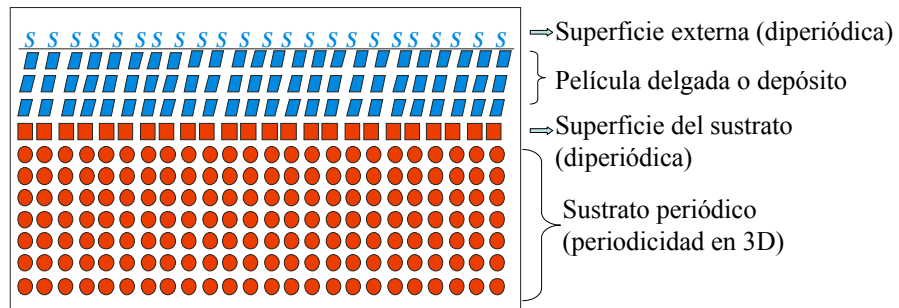


Diagrama de la nomenclatura utilizada para referirse a la región de la superficie

Las estructuras asociadas con la superficie se pueden definir en relación con una sección plana paralela al sustrato, de modo que podrá consistir de pequeños desplazamientos de los átomos (puede haber casos en donde el desplazamientos reconstructivos no guardan relación alguna con el sustrato). Ésta constituye la superficie más externa del sistema y es la superficie propiamente dicha, por otro lado, la superficie del sustrato también sufre una pérdida gradual de la periodicidad del mismo.

La adsorción de átomos de una especie distinta al material considerado, ocasionará un cambio en la estructura de la superficie más externa. Si esta adsorción constituye una película (varias monocapas), podrá desarrollar su propia periodicidad en la dirección  $z$  y, por lo tanto, tendrá su propia superficie.

En muchos casos es importante establecer la relación entre la estructura de la superficie del sustrato y la estructura del sustrato. Si la superficie tiene una estructura cristalina, con periodicidad en dos dimensiones, es decir, diperiódica, los puntos de la red forman una malla y la estructura unitaria de dicha malla, es decir, la equivalente a la celda unitaria tridimensional, se denomina malla unitaria.

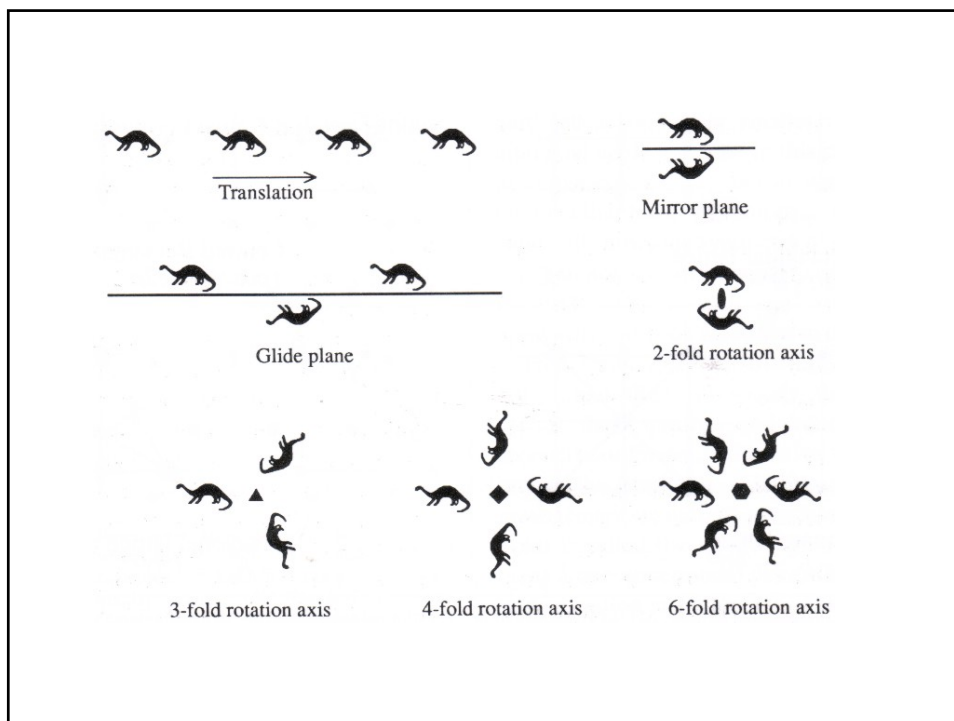
### **Redes superficiales**

Aunque una superficie real siempre tiene defectos, el modelo de una superficie periódicamente perfecta en dos direcciones es conveniente para la descripción de una muestra bien preparada con grandes áreas bien ordenadas y baja densidad de defectos.

A pesar de que en los experimentos de superficies, la profundidad de penetración es usualmente no despreciable, las capas atómicas más externas son las que predominan durante dichos experimentos.

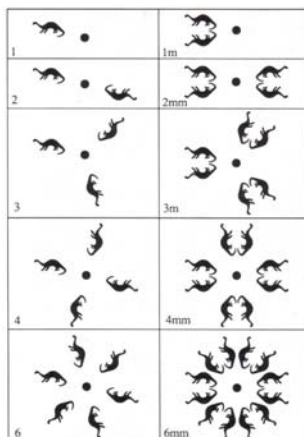
A pesar de que la región de la superficie es 3D, todas las propiedades de simetría son de 2D. Por tanto la cristalografía de la superficie es 2D y uno debe considerar los grupos puntuales en 2D y las redes de Bravais en 2D.

Los grupos puntuales que operan en la periodicidad de 2D son: la rotación de 1<sup>ro</sup>, 2<sup>do</sup>, 3<sup>er</sup>, 4<sup>to</sup> y 6<sup>to</sup> orden con ejes perpendiculares a la superficie, planos espejos también normal a la superficie. Los ejes paralelos a la superficie no son permitidos ya que los puntos transformados quedan por fuera de la superficie.

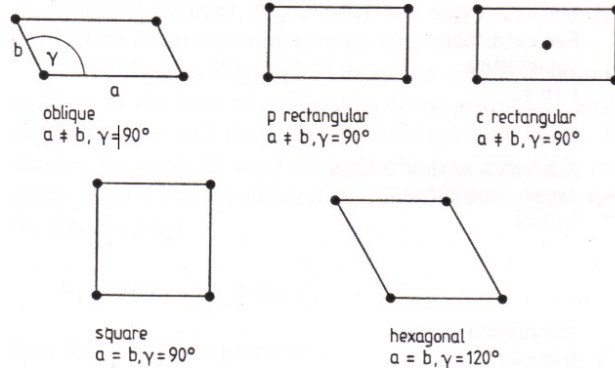


Con la combinación de números limitados de operaciones de simetría, podemos obtener 10 diferentes grupos puntuales de simetría denotados por: 1, 2, 1m, 2mm, 3, 3m, 4, 4mm, 6, 6mm.

El numeral ( $v=1\dots 6$ ) denota las rotaciones dada por  $2\pi/v$ , la primera m se refiere a un plano espejo, la segunda m indica una combinación del resultado de las dos primeras operaciones con un plano espejo.



La operación de los grupos puntuales de 2D en una red traslacional bidimensional dan como resultado las redes de Bravais en 2D. En contraste con las redes 3D, sólo son 5 redes simétricamente posibles en 2D.



Los experimentos de superficie, tales como difracción de electrones de baja energía, usualmente no sondan la capa atómica más externa; la información obtenida (el patrón de difracción) está relacionado con varias capas atómicas. Una descripción formal de la estructura periódica de las capas atómicas más externas de un sólido cristalino debe contener información acerca del sustrato en si, así como de una o de dos capas atómicas más externa, la cual posiblemente exhibe una periodicidad diferente debido a una posible reconstrucción. Cuando se tiene una periodicidad diferente en las capas atómicas más externas (una red superficial, llamada superred), dicha periodicidad es superimpuesta en la red del sustrato, la cual exhibe la periodicidad básica.

La red básica del sustrato puede ser descrita por los siguientes vectores traslacionales:

$$\mathbf{r}_m = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$$

En donde  $\mathbf{m}=(m,n)$  denota un par de número enteros y  $\mathbf{a}_i$ 's son los dos vectores unitarios de la red.

La red superficial de las capas atómicas más externas pueden ser determinadas en términos de la red del sustrato, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= m_{11}\mathbf{a}_1 + m_{12}\mathbf{a}_2 \\ \mathbf{b}_2 &= m_{21}\mathbf{a}_1 + m_{22}\mathbf{a}_2 \end{aligned} \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

donde M es la siguiente matriz

$$M = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}$$

Para las áreas B y A de las mallas unitarias de superficie y del sustrato respectivamente, tenemos:

$$B = |\vec{b}_1 \times \vec{b}_2| = A \det M$$

La determinante de M es

$$\det M = \frac{|\vec{b}_1 \times \vec{b}_2|}{|\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|}$$

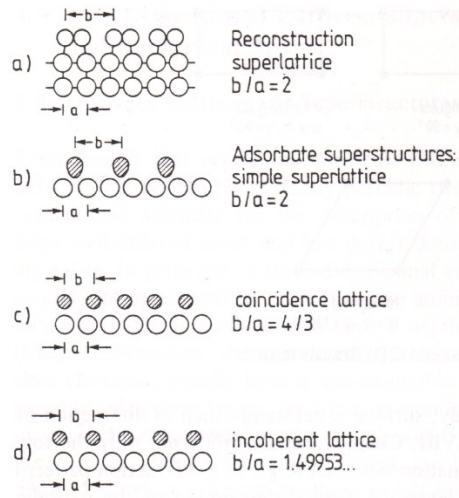
La determinante de M puede ser usada para caracterizar la relación entre la superficie y el sustrato

$$\begin{aligned} B &= \mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2 = (m_{11}\mathbf{a}_1 + m_{12}\mathbf{a}_2) \times (m_{21}\mathbf{a}_1 + m_{22}\mathbf{a}_2) \\ &= (m_{11}m_{21}\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_1 + m_{11}m_{22}\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) + (m_{12}m_{21}\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_1 + m_{12}m_{22}\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_2) \\ &= m_{11}m_{22}\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 + m_{12}m_{21}\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_1 \\ &= m_{11}m_{22}\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 - m_{12}m_{21}\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 \\ &= (m_{11}m_{22} - m_{12}m_{21})\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 \\ |\mathbf{b}_1 \times \mathbf{b}_2| &= \det M |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2| \end{aligned}$$

Cuando  $\det \mathbf{M}$  es un entero, la red de la superficie es llamada una superred simple.

Cuando  $\det \mathbf{M}$  es un número racional, la red de la superficie es llamada red coincidente.

Cuando  $\det \mathbf{M}$  es irracional, la red de la superficie es llamada red incoherente.



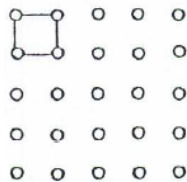
Por lo tanto, para los dos primeros casos anteriores, la superposición de mallas puede representarse por una sola malla  $\mathbf{C}$ , tal que,

$$\mathbf{C} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{b}$$

Resulta conveniente escoger la malla  $\mathbf{C}$  con la celda unitaria mínima. Por lo tanto,  $\mathbf{M}$  y  $\mathbf{P}$  deberán ser enteros sin factor común.

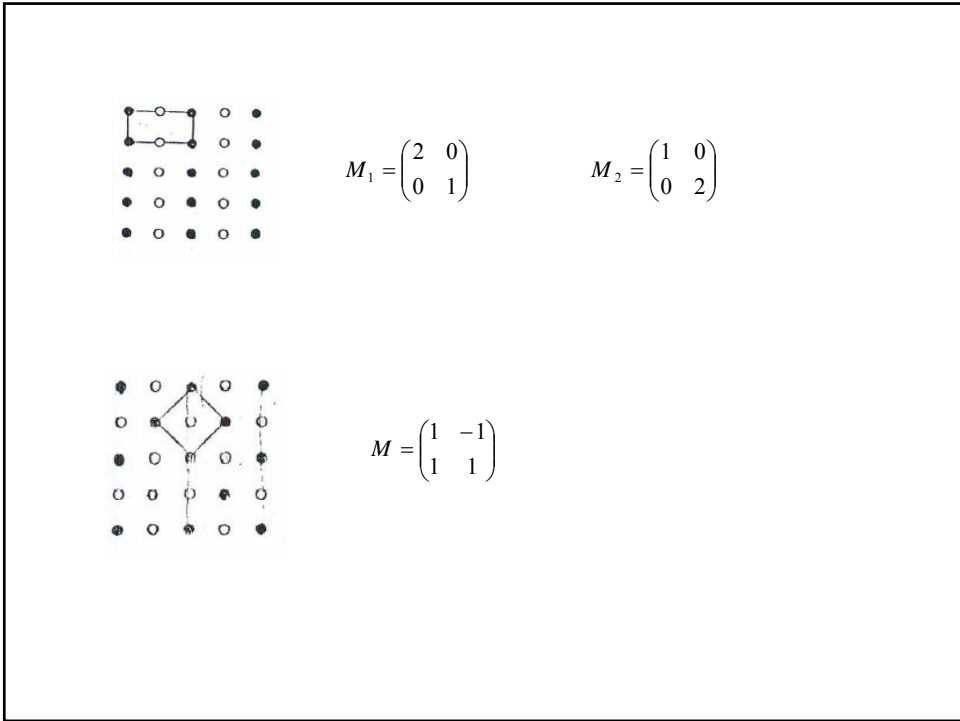
### Notación para las estructuras superficiales

La representación matricial de la superposición de mallas se utiliza frecuentemente para denotar la estructura cristalográfica superficial. En la siguiente figura, se presenta un ejemplo.



En este caso la periodicidad de la superficie permanece invariante respecto al volumen. Por lo tanto,

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

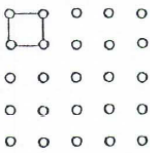


Existe otra notación de uso más frecuente debida a Wood. En esta notación la superposición se representa por el cociente de las longitudes de los vectores de traslación de ambas mallas y la rotación  $R$  de una malla respecto a la otra (si existe). Para una reconstrucción de una superficie del sustrato  $X\{h,k,l\}$  dada por:

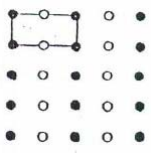
$\mathbf{b}_1 = p\mathbf{a}_1$  ,  $\mathbf{b}_2 = q\mathbf{a}_2$

La notación estará dada por  $X\{h,k,l\}(p \times q)R$  o  $X\{h,k,l\}c(p \times q)R$

Esta notación sólo puede usarse si los ángulos internos en las celdas unitarias de cada malla, son iguales. Utilizando esta notación, los ejemplos anteriores quedarían denotados de la siguiente forma



(1x1)



(2x1)



$c(2 \times 2)$  o  $(\sqrt{2} \times \sqrt{2}) R45^\circ$

### Celdas unitarias de la superficie de materiales comunes y su respectiva notación

Substrate	Surface Unit Cell	
	Wood Notation	Matrix Notation
fcc(100),bcc(100),	p(1x1)=(1x1)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
	p(2x1)=(2x1)	$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
diamond(100),	p(1x2)=(1x2)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$
	c(2x2)=( $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ )R45°	$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$
zincblende(100)	p(2x2)=(2x2)	$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$
	( $2\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ )R45°	$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$
	c(4x2)	$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
fcc(111),hcp(0001),	p(1x1)=(1x1)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
	p(2x1)=c(2x2)=(2x1)	$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
diamond(111),zincblende(111),	p(2x2)=(2x2)	$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$
	graphite(0001)	$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$
graphite(0001)	c(4x2)	$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$
	( $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ )Rarctan( $\sqrt{3}/5$ )	$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$
fcc(110),diamond(110),	p(1x1)=(1x1)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
	p(2x1)=(2x1)	$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
zincblende(110)	p(1x2)=(1x2)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$
	c(2x2)	$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$
bcc(110)	p(1x1)=(1x1)	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
	p(2x1)=(2x1)	$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
	p(2x2)=(2x2)	$\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$

### Red reciproca en 2 dimensiones

Al igual que en el espacio tridimensional, los vectores de la red reciproca,  $\mathbf{a}_i^*$  son definidos en términos de los vectores de la red del espacio real,  $\mathbf{a}_i$ , por la siguiente expresión:

$$a_1^* = 2\pi \frac{a_2 \times \hat{n}}{|a_1 \times a_2|} \quad a_2^* = 2\pi \frac{\hat{n} \times a_1}{|a_1 \times a_2|}$$

donde  $\hat{n}$  es un vector normal a la superficie, además

$$a_i^* \cdot a_j = 2\pi\delta_{ij} \quad \text{y} \quad |a_i^*| = \frac{2\pi}{a_i \text{Sen} \angle(a_i a_j)}$$

Estas últimas ecuaciones pueden ser usadas para construir geoméricamente la red reciproca de una red en 2 dimensiones.

El vector traslacional de la red reciproca está dado por:

$$g_{hk} = ha_1^* + ka_2^*$$

donde los números enteros  $h$  y  $k$  son los índices de Miller



REAL SPACE

RECIPROCAL SPACE

a)  $M |100| (2 \times 2)$       b)  $M |100| c (2 \times 2)$       c)  $M |111| (\sqrt{3} \times \sqrt{3}) 30^\circ$

Si  $|\mathbf{a}_1|=|\mathbf{a}_2|=1$  unidad, entonces  $|\mathbf{a}_1^*|=|\mathbf{a}_2^*|=1$  unidad  
 Si  $|\mathbf{a}_1|=|\mathbf{a}_2|=2$  unidades, entonces  $|\mathbf{a}_1^*|=|\mathbf{a}_2^*|=1/2$  unidad  
 Si  $\mathbf{a}_1$  es perpendicular a  $\mathbf{a}_2$  entonces  
 $\mathbf{a}_1^*$  debe ser perpendicular a  $\mathbf{a}_2$        $\mathbf{a}_2^*$  debe ser perpendicular a  $\mathbf{a}_1$   
 $\mathbf{a}_1^*$  debe ser paralelo a  $\mathbf{a}_1$        $\mathbf{a}_2^*$  debe ser paralelo a  $\mathbf{a}_2$

En analogía con el espacio real, la red recíproca de la superestructura  $(b_1^*, b_2^*)$  puede ser expresada en términos de la red recíproca del sustrato  $(a_1^*, a_2^*)$

$$\begin{aligned}
 b_1^* &= m_{11}^* a_1^* + m_{12}^* a_2^* \\
 b_2^* &= m_{21}^* a_1^* + m_{22}^* a_2^*
 \end{aligned}
 \quad \text{o} \quad
 \begin{pmatrix} b_1^* \\ b_2^* \end{pmatrix} = M^* \begin{pmatrix} a_1^* \\ a_2^* \end{pmatrix}$$

La matriz  $M$  y  $M^*$  están relacionadas por la siguiente expresión:

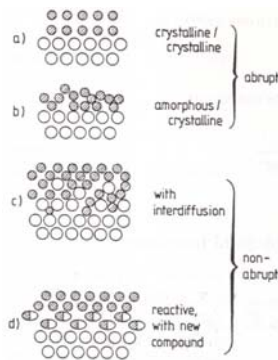
$$M^* = (M^{-1})^T$$

Donde  $(M^{-1})^T$  es la transpuesta de la inversa con

$$m_{ii}^* = \frac{m_{ii}^*}{\det M^*} \quad \text{y} \quad m_{ij}^* = \frac{-m_{ji}^*}{\det M^*}$$

## Modelos estructurales de la interfaz sólido/sólido

En términos de la estructura atómica, la interfaz sólido/sólido se puede presentar en 2 casos: interfaz abrupta y la no abrupta. En el primer caso podemos tener interfaz cristalino/cristalino y amorfo/cristalino. Para el caso no abrupto, el recubrimiento puede difundir sobre el sustrato o puede reaccionar con la superficie del sustrato para formar un nuevo compuesto.



## Difracción de electrones en estructura de 2D

El método físico más común para estudiar las posiciones relativas de átomos en estructuras periódicas es la difracción de electrones.

Para el caso de la estructura en la superficie, la difracción de electrones constituye una poderosa técnica. De hecho, se utilizan dos formas distintas: la difracción de electrones de baja energía o por sus siglas en inglés LEED (Low Energy Electron Diffraction), o bien, difracción por reflexión de electrones de alta energía, o RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction). Evidentemente, la energía cinética de los electrones,  $E$ , es distinta en cada caso. En LEED,  $E < 500\text{eV}$ . En el caso de RHEED,  $E$  se encuentra en el intervalo de 10 a 100 KeV.

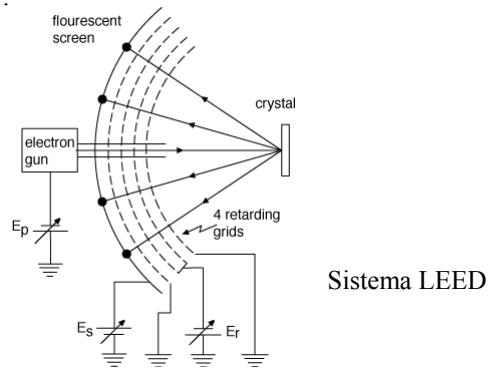
La geometría del experimento también resulta significativamente diferente, ya que en LEED el haz incidente es normal a la superficie, en tanto que en RHEED, el haz incidente es rasante a la superficie. En ambas técnicas, se observan los electrones elásticamente retrodispersados en la superficie del material.

La sensibilidad a la superficie se deriva, en el caso de LEED, al muy pequeño valor de IMFP de los electrones retrodispersados, de 3 a 10 Å. En el caso de RHEED, el ángulo de incidencia rasante  $< 5^\circ$  con respecto a la superficie, limita la penetración del haz electrónico.

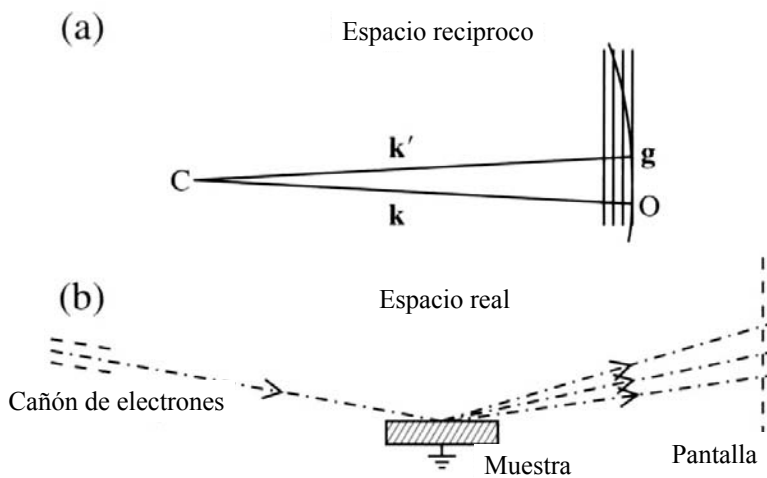
Hay que tener presente que para diseñar un experimento de difracción, para el análisis estructural de un cristal, se requiere “sondas” con una longitud de onda de de Broglie menor que el espaciado interatómico, es decir,  $\sim 1\text{\AA}$ .

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{m\sqrt{2eV_0}} = \frac{hc}{\sqrt{2(mc^2)eV_0}} = \frac{1240eVnm}{\sqrt{2(0.511MeV)eV_0}} = \frac{1.227}{\sqrt{V_0}} nm$$

para  $E=150 eV$  ( $V_0=150 V$ ) entonces  $\lambda=1\text{\AA}$ . Por tanto en LEED se trabaja en el intervalo de 20-500 eV.



### Esquema de RHEED



El patrón de LEED es una imagen de la red recíproca del sustrato cuando es vista a lo largo de la normal de la superficie de la muestra a una gran distancia del cristal.

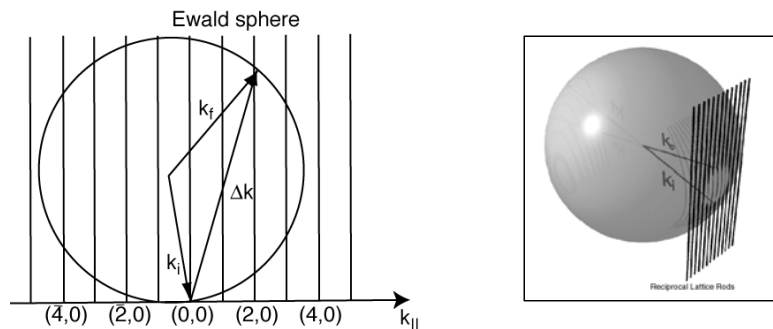
Recordemos que la distancia entre los puntos adyacentes en una red recíproca es inversamente proporcional a la distancia entre los puntos en la correspondiente dirección de la red real. Para una red puramente planar la distancia periódica de repetición está en el infinito (normal a la superficie), por tanto los puntos de la red recíproca a lo largo de la normal de la superficie son infinitamente densos y uno puede hablar de rodillos en la red recíproca para las superficies planares. Sin embargo, la no variación traslacional en 2D garantiza que la difracción ocurre si se cumple la condiciones de Laue en 2D, que son:

$$(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{b}_1 = 2\pi m \quad (\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{b}_2 = 2\pi n$$

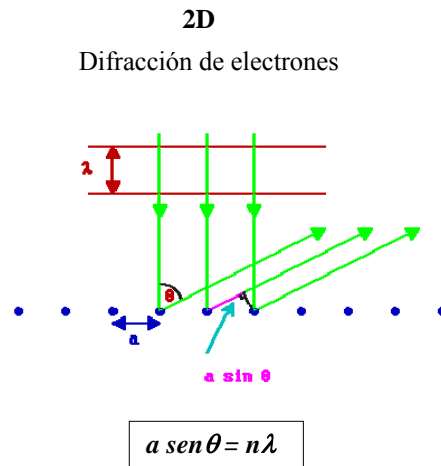
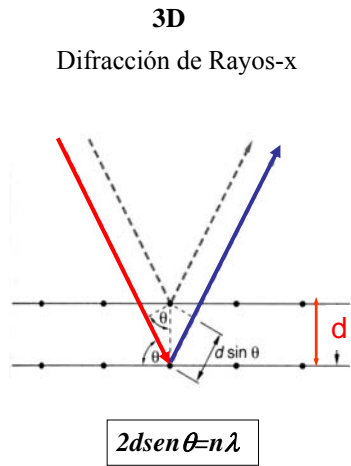
donde  $\mathbf{k}_i$  y  $\mathbf{k}_f$  son los vectores de onda de los electrones incidentes y dispersados respectivamente y,  $m$  y  $n$  son números enteros.

Las condiciones de Laue son ilustrada mejor, utilizando la construcción de la esfera de Ewald.

Los rodillos de la red recíproca pasan a través de los puntos de la malla de la red recíproca ( $\mathbf{g} = h\mathbf{b}_1^* + k\mathbf{b}_2^*$ ,  $h$  y  $k$  son los índices de Miller). La magnitud del vector de onda del electrón define el radio de la esfera y las condiciones de difracción se cumplen para cada haz que emerge a lo largo de la dirección de la intersección de la esfera con los rodillos de la red recíproca. Al igual que en 3D los haces son indexados por los vectores de la red recíproca que producen la difracción.



## Ley de Bragg



El tamaño de la diferencia de caminos ( $2d \sin \theta$ ,  $a \sin \theta$ ) debe ser igual a un número entero de la longitud de onda para que ocurra interferencia constructiva.

La existencia de un patrón de puntos implica la existencia de una superficie bien ordenada y provee información directa acerca de la simetría del sustrato.

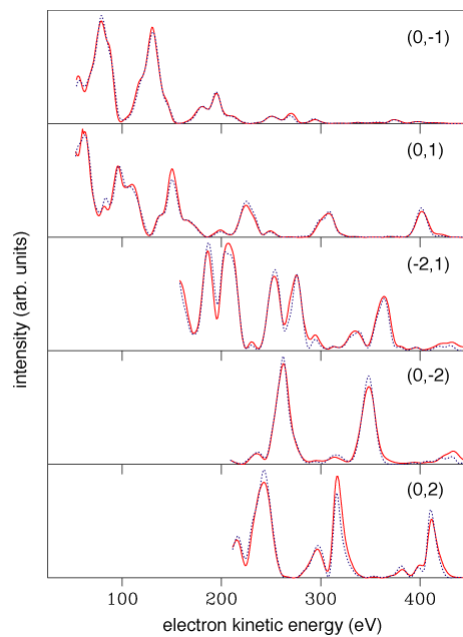
Para muchos propósitos, el arreglo superficial de los átomos presentan la simetría indicada por un patrón de LEED. Puede ocurrir que dos regiones de la superficies estén orientadas una con respecto a la otra, precisamente bajo una operación de simetría. Por ejemplo, dos patrones que tengan simetría de rotación de 3<sup>er</sup> orden puede ser encontrado en una superficie de una región que esté rotada 60° con respecto a otra región.

Se puede tener información adicional explorando la intensidad difractada a lo largo del ancho de un sólo punto, lo anterior es llamado perfil del punto (spot profile). Si es interrumpida la periodicidad 2D de la superficie entonces se destruye la función delta de los rodillos de la red recíproca y aparecerán ensanchamientos y/o divisiones de la componente paralela del vector  $\mathbf{k}$  del electrón dispersado.

La determinación de la posición de los átomos en la superficie (estructura) no es tan directo en un experimento de LEED, es complicado por el hecho de que los electrones van a estar bajo múltiples dispersiones elásticas en las primeras capas atómicas y podrían cambiar su dirección de su difracción original.

La dependencia en energía de la intensidad de los haces de LEED, es llamada curva  $I(V)$ . Estas curvas son usadas en un procedimiento iterativo para determinar el arreglo geométrico de los átomos de la superficie.

- 1) Se postula un arreglo de átomos en la superficie que sea consistente con la simetría de los patrones de LEED
- 2) La intensidad de un número de haces difractados son calculados como una función de la energía incidente a partir de la solución de la ecuación de Schrödinger para la función de onda del electrón en las primeras capas atómicas incluyendo los efectos de amortiguamiento inelásticos.
- 3) Las curvas  $I(V)$  de la simulación es comparada con las curvas experimentales, el proceso es seguido hasta que exista un buen acuerdo entre las curvas  $I(V)$ .

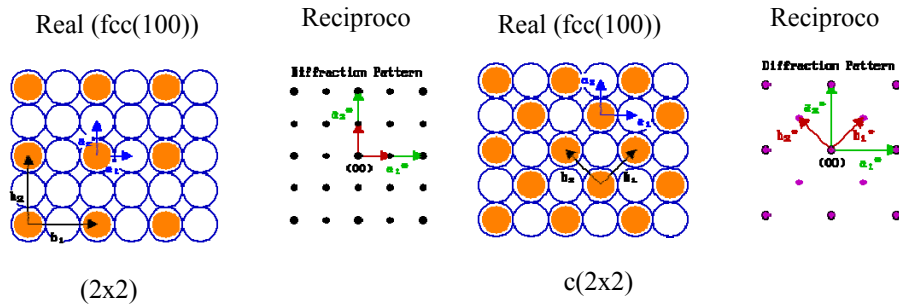


Concordancia entre las curvas  $I(V)$  de LEED para los diferentes puntos del patrón de la superficie (111) del Aluminio. Líneas sólidas son los datos experimentales y las líneas punteadas son los cálculos.

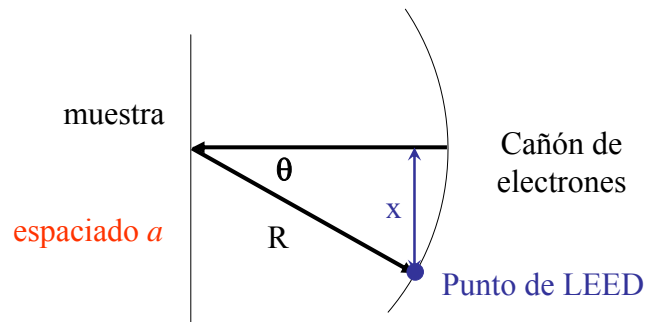
## Interpretación de un patrón de LEED

Muchas cosas pueden ser observadas de un patrón de LEED sin tener presente el comportamiento  $I(V)$  de los puntos del patrón. Básicamente en un patrón de LEED se ve la red recíproca de la superficie y, se pueden proponer modelos para la red real.

Se puede observar si en superficie limpia hay reconstrucción o no, con la simple comparación con un patrón de la superficie limpia no reconstruida.



## Análisis de datos en LEED



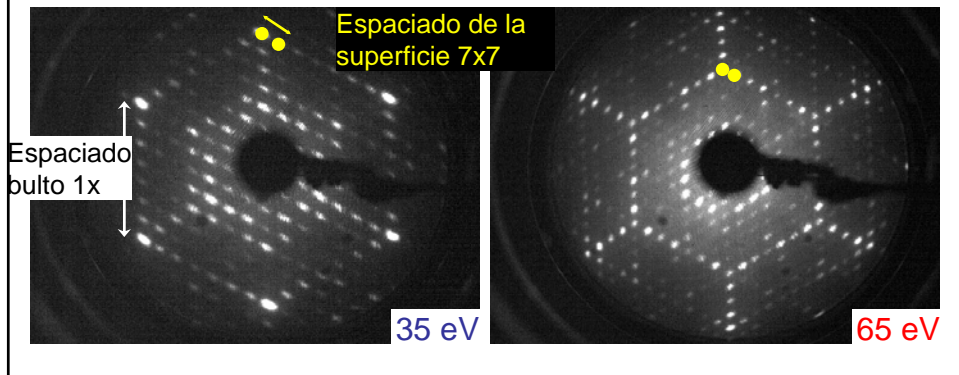
$$n\lambda = a \text{Sen} \theta, \quad \text{donde } \lambda = \frac{1.227}{\sqrt{V_0}} \text{ nm}, \quad \text{Sen} \theta = \frac{x}{R}$$

$$a = \frac{1.227}{\sqrt{V_0}} \left( \frac{R}{x} \right) \text{ nm}$$

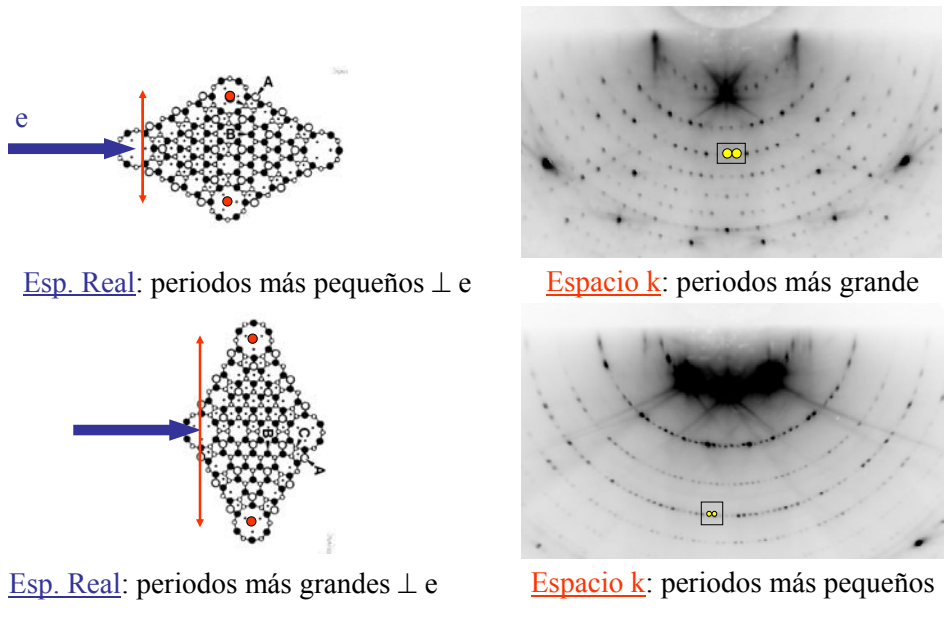
donde  $R = 66 \text{ mm}$  en Lab.

LEED no puede ser utilizado en cualquier situación. Al igual que la espectroscopia Auger, la superficie de materiales aislantes son difíciles de estudiar debido a que el haz de electrones incidentes carga rápidamente la muestra.

Ejemplo de un LEED para Si(111) 7x7

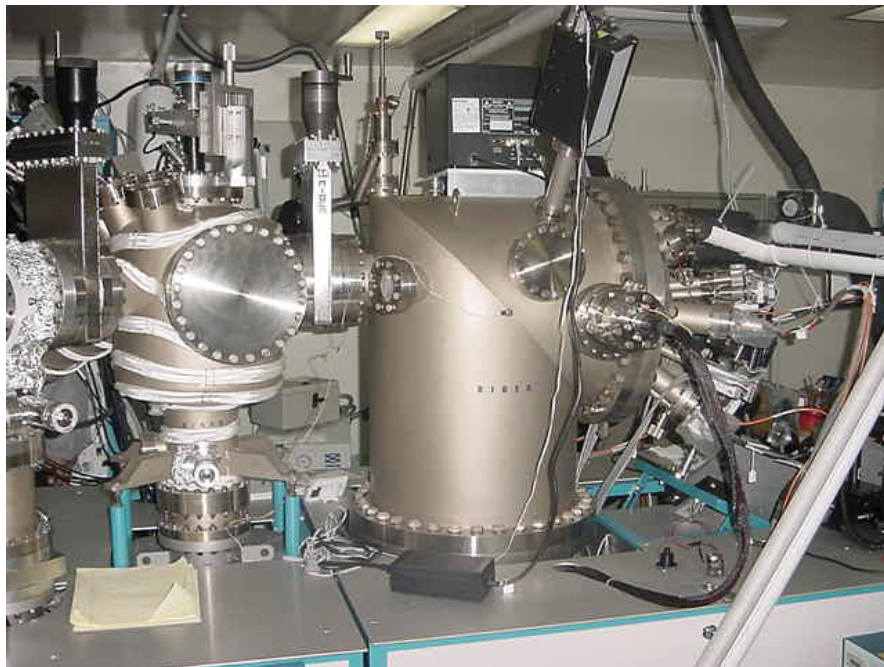
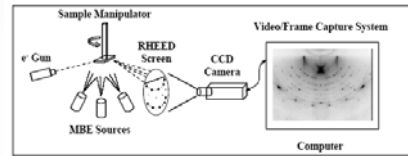
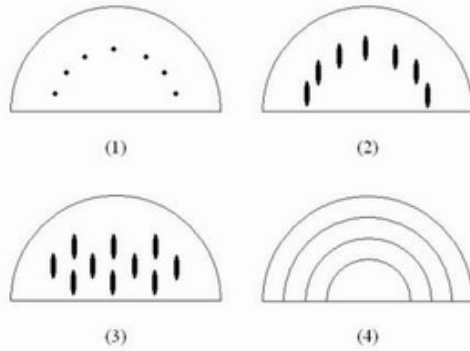


### RHEED: Si(111)7x7





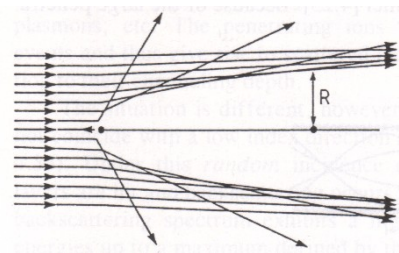
## RHEED es sensible a la morfología de la superficie





## Dispersión de iones

Un enfoque completamente diferente para el análisis estructural de la superficie esta basado en la dispersión clásica de Rutherford. Imagine un haz de iones ( $H^+$ ,  $He^+$ , etc) de luz dirigido hacia una superficie. El cristal presenta un blanco a los iones en la forma de columnas de átomos que yacen paralelos a la direcciones de bajo indice. La distribución de los iones dispersados formaran un cono de sombreado característico, de tras del átomo de la superficie. Los átomos dentro del cono de sombra no contribuirán a la señal retrodispersada.



El radio del cono de sombra es:  $R = 2\sqrt{Z_1 Z_2 e^2 d / E_0}$

donde  $Z_1$  y  $Z_2$  son los números atómicos de los átomos del blanco y del proyectil,  $E_0$  es la energía del haz primario y  $d$  es la distancia entre las columnas atómicas.

Un ión retrodispersado sufre una colisión elástica con los átomos de la superficie. La conservación de la energía y de momentum determinan la energía final del ión, la cual estará dado por:

$$E = E_0 \left( \frac{M_1 - M_2}{M_1 + M_2} \right)^2$$

Esta última ecuación dice que los iones retrodispersado ( $M_1$ ) sufre un corrimiento en energía que depende de la masa de los átomos de la superficie.

Análisis de los espectros de energía de el ión dispersado puede ser tenido en cuenta como otro método para el análisis elemental de la superficie (la corriente del haz es mantenido por debajo del umbral que produce erosión de la muestra de interés).

Para el estudio estructural, hay que tener presente que el radio del cono de sombra y la sección eficaz de Rutherford dependen fuertemente de la energía del haz primario.

La dispersión de iones se divide en tres regímenes: dispersión de iones de baja energía (LEIS, low energy ion scattering, de 1-20 KeV); dispersión de iones de mediana energía (MEIS, de 20-200 KeV); Dispersión de iones de alta energía (HEIS, de 200- 2000 KeV).

En LEIS los iones nunca pueden pasar de las capas superficiales, en caso de que si, son rápidamente neutralizados por la captura de algún electrón de tal forma que no contribuirá a la señal de mi experimento (el detector sólo colecta las partículas cargadas)

En HEIS, la mayoría de los iones penetran al bulto bajo una serie de colisiones entre las cadenas de átomos vecinos. Estos iones, eventualmente son retrodispersados con una energía más baja que los iones retrodispersados elásticamente de la superficie. Cuando estos iones son analizados en función de la energía, presentan un pico, llamado pico de superficie.

La determinación estructural usando HEIS requiere un procedimiento iterativo. Primero se propone una estructura, se realiza un cálculo que permita comparar el pico de superficie tanto teóricos como experimentales, el procedimiento se repite hasta que exista una buena concordancia entre los datos experimentales y los calculados.

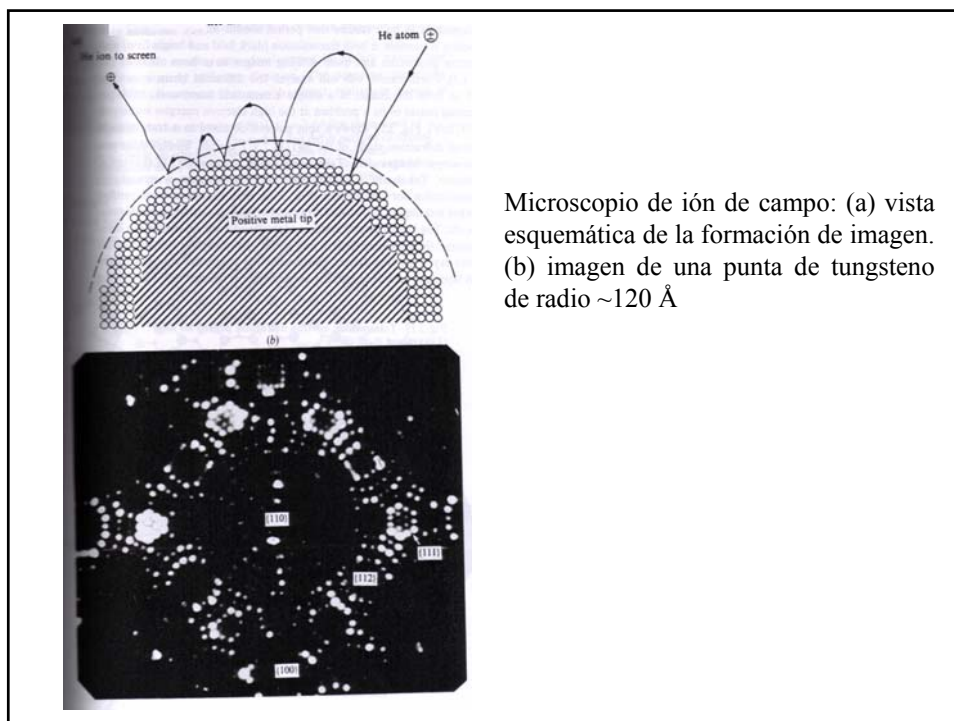
Hay que tener presente que la determinación de la estructura de la superficie es no-trivial. Generalmente hablando, un modelo estructural superficial solamente puede ser aceptado definitivamente si es consistente con todos los datos disponibles (de alta calidad) de diferentes métodos experimentales. Debido a esto, el número total de estructuras superficiales resueltas completamente es muy pequeño.

### **Microscopía**

El propósito de toda microscopía es producir una imagen fiel de una muestra experimental. Que puede ser más satisfactorio que ver el arreglo actual de los átomos de un sólido? En este contexto una representación de la topografía de los átomos de una superficie pueden dar soporte a las estructuras propuestas por otros métodos indirectos como el LEED, o dispersiones de iones, etc.

Una imagen proyectada de los arreglos de los átomos de una superficie metálica puede ser obtenido con un microscopio de ión de campo (FIM, Field Ion Microscope) inventado por Erwin Muller (1951). En este microscopio, una punta aguda del material de la muestra es mantenido a un gran potencial positivo, tal que la intensidad del campo en la superficie sea aproximadamente  $10^9\text{V/cm}$ . Se introduce un gas de átomos neutrales (típicamente de He o una mezcla de He/H) en la cámara de la muestra. Estos átomos son atraídos hacia el sólido y pierden energía cinética a través de múltiples colisiones con la superficie, hasta que el campo eléctrico del ambiente es suficiente para ionizar el gas. Una imagen es formada cuando los iones positivos son acelerados del metal hacia una pantalla fluorescente.

El FIM está limitado al estudio de metales de transición debido a que la punta debe ser estable para los campos aplicados.



Microscopio de ión de campo: (a) vista esquemática de la formación de imagen. (b) imagen de una punta de tungsteno de radio  $\sim 120 \text{ \AA}$