

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xv
Resumen	xvii
Motivación	xix
1. Procesos atomísticos	1
1.1. Mecanismos atomísticos de difusión superficial [6]	1
1.1.1. Difusión superficial por <i>hopping</i>	1
1.1.2. Mecanismo de intercambio	3
1.1.3. Mecanismo de vacancias	3
1.2. Difusión superficial de <i>clusters</i> [6]	4
1.2.1. Nucleación y crecimiento de islas	4
1.3. Fases del sistema Sn/Cu(001)	6
2. Técnicas Experimentales.	9
2.1. Microscopio de efecto túnel	9
2.2. LEED	11
2.3. Equipo experimental	14
2.4. Preparación del sistema	17
2.4.1. Calibración del evaporador	18
3. Teoría Funcional Densidad (DFT)	21
3.1. Teoremas de Hohenberg-Kohn	22
3.2. Modelo de Kohn y Sham (KS)	23
3.3. Soluciones de las ecs. de Kohn y Sham en sólidos.	24
3.4. Simulación de imágenes de STM	26

3.5. Cálculos de barreras de activación.	28
4. Resultados experimentales y discusión.	31
4.1. Preparación a de la fase split p(2x2) a temperatura ambiente.	31
4.2. Propiedades a muy bajos cubrimientos.	34
4.2.1. Depósito de Sn a temperatura ambiente.	34
4.2.2. Depósito de Sn a bajas temperaturas.	42
4.2.3. Primeras etapas de formación de la aleación.	44
4.3. Formación de la split p(2x2).	48
4.4. Fases ordenadas a baja temperatura.	50
5. Simulaciones.	55
5.1. Cu <i>Bulk</i>	56
5.2. Superficie de Cu (0 0 1)	58
5.3. Superficie de Cu (0 0 1)(4x4)	60
5.3.1. Simulación de imágenes de STM.	60
5.3.2. Reactividad de la superficie - Densidad de estados.	62
5.4. Movimiento difusivo de átomos <i>embebidos</i>	64
6. Conclusiones	75
Agradecimientos	81