

## INTERPRETACIÓN DE IMÁGENES DE STM EN TiO<sub>2</sub> (110)-(1x1)

C. Sánchez-Sánchez<sup>1</sup>, C. González<sup>2</sup>, P. Jelinek, P. L. de Andrés<sup>1</sup>, J. Méndez<sup>1</sup>, M. F. López<sup>1</sup> y J. A. Martín-Gago<sup>1</sup>.

*1 Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Sor Juana Inés de la Cruz 3, Cantoblanco, España*

*2 Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Cukrovarnicka 10, Prague, Czech Republic*

[cssanchez@icmm.csic.es](mailto:cssanchez@icmm.csic.es)

El estudio de los óxidos de metales es de gran relevancia científica debido a su amplio abanico de aplicaciones tecnológicas. De entre todos ellos, el TiO<sub>2</sub> se ha convertido en prototipo para la ciencia de superficies debido a su alto grado de ordenamiento y a la posibilidad de comportarse como un semiconductor al ser reducido en ultra-alto vacío (UHV). Estos dos factores hacen que sea posible su estudio mediante técnicas de superficies y han propiciado que haya sido investigado ampliamente en las últimas décadas. De todas las posibles caras que presenta este material, la (110) es la más estable presentando, básicamente, dos reconstrucciones en función del grado de reducción del sustrato, de la temperatura y del tiempo de calentamiento, a saber, la (1x1) y la (1x2) [1, 2]. La 1x1 ha sido la más estudiada y conocida por ser la primera de la que se tuvo constancia al surgir como consecuencia de truncar el volumen en UHV. Aún así, siguen quedando algunos frentes abiertos por la enorme complejidad de estos óxidos, sobre todo a la hora de interpretar las imágenes que se obtienen con el STM. Si bien se sabe que los oxígenos pueden jugar un papel importante, no se conoce con exactitud cuál puede ser y qué tipo de imágenes pueden producir. Por ser ésta una superficie rica en oxígeno, son muy frecuentes los cambios de punta durante el barrido, pudiéndose identificar hasta tres tipos frecuentes de imágenes diferentes.

En este trabajo se han estudiado los distintos tipos de imágenes de resolución atómica y se ha tratado de dar una explicación para cada uno de ellos, basándose en diferentes estructuras de la punta. Para ello se han combinado medidas experimentales de STM a temperatura ambiente con cálculos DFT-LDA de primeros principios mediante el método Fireball [3].

### Referencias:

- [1] M. Blanco-Rey et al. Physical Review Letters, 96 (2006) 055502.
- [2] U. Diebold, Surface Science Reports, **48** (2003) 53.
- [3] P. Jelinek et al. Phys. Rev. B **71** (2005) 235101.

**Figuras:**

