

Transporte Clásico de Átomos sobre Superficies Metálicas: Caos, Transporte Dirigido y Difusión Activada

Raúl Guantes*, José Luis Vega y Salvador Miret-Artés
 Instituto de Matemáticas y Física Fundamental
 Consejo Superior de Investigaciones Científicas
 c/Serrano, 123 28006-Madrid

En esta contribución estudiamos diferentes fenómenos de transporte clásico que tienen lugar sobre superficies metálicas, en especial procesos de difusión y transporte dirigido. Recientemente se ha demostrado que las técnicas de dispersión de átomos de He a baja energía por superficies metálicas con adsorbatos proporcionan una información detallada sobre la dinámica de las partículas adsorbidas¹. El observable medido en experimentos es el factor de estructura dinámico, que es la transformada de Fourier espacio-temporal de la distribución de probabilidad de los adsorbatos a un cierto tiempo t . El factor de estructura proporciona información tanto de procesos de difusión, mediante la anchura del pico cuasielástico, como de frecuencias vibracionales y fricción experimentada por los adsorbatos a través de la posición y la anchura de picos inelásticos adicionales. En condiciones muy generales la dinámica vibracional y de difusión de los átomos adsorbidos se puede simular por el movimiento de partículas clásicas en un potencial bidimensional periódico, sometidas a fricción y a una fuerza térmica estocástica.

Usando un potencial semiempírico para difusión de átomos de Na por una superficie de Cu(001) como sistema prototipo², analizamos el papel que juega la dinámica clásica a diferentes niveles: primero investigamos la dinámica puramente Hamiltoniana (límite de baja fricción y temperatura), y mostramos que el transporte caótico es dominante para ciertos intervalos de energía y puede inducir procesos de *difusión anómala*. Dichos procesos son analizados en términos de distribuciones de saltos de Lévy y modelos de caminante aleatorio. También demostramos la influencia de las órbitas periódicas principales y sus bifurcaciones tanto en la difusión como en los movimientos vibracionales³.

En segundo lugar, introducimos el efecto simultáneo de la disipación y un campo externo periódico en el tiempo. Elijiendo un campo biarmónico adecuado con la simetría temporal rota, podemos lograr un flujo neto de adsorbatos en una dirección determinada (efecto *ratchet*⁴), como se demuestra en la Fig. 1. Este efecto se produce en condiciones experimentalmente medibles y por tanto abre la posibilidad de controlar selectivamente la difusión de átomos sobre superficies metálicas mediante campos eléctricos alternantes (electromigración en superficies⁵). Además en condiciones de campo fuerte la dirección de corriente neta viene determinada esencialmente por la dinámica clásica⁶.

Finalmente, en condiciones en que son dominantes los procesos de difusión activada, extendemos la teoría de Kramers en potenciales periódicos⁷ para estudiar difusión mediante técnicas de dispersión de He en superficies bidimensionales⁸.

Se pueden obtener coeficientes de difusión, velocidades de escape y distribuciones de saltos analíticamente, con sólo dos parámetros físicamente relevantes: la fricción y la altura de la barrera. Asimismo, demostramos que los resultados experimentales se pueden reproducir con bastante exactitud usando esta teoría.

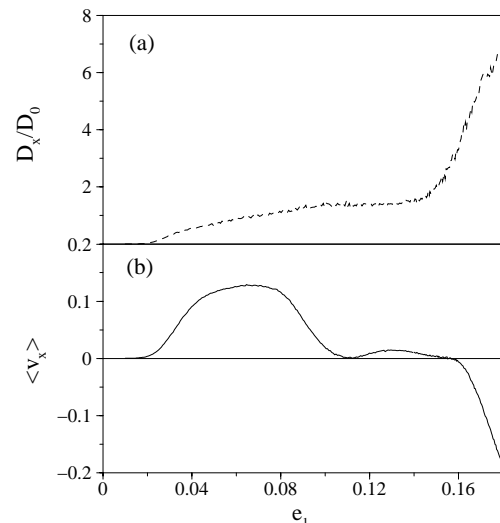


Figura 1. (a) Coeficiente de difusión normalizado al coeficiente de Einstein y (b) Flujo neto de partículas sobre una superficie bidimensional a $T=50$ K y con un campo biarmónico alternante, en función de la amplitud del primer armónico.

* rgn@imaff.cfmac.csic.es

¹ A. P. Jardine, J. Ellis and W. Allison, J. Phys.:Condens. Matter **14**, 6173 (2002).

² A. P. Graham, F. Hofmann, J. P. Toennies, L. Y. Chen and S. C. Ying, Phys. Rev. Lett. **78**, 3900 (1997).

³ J. L. Vega, R. Guantes and S. Miret-Artés, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 6193 (2002).

⁴ P. Reimann, Phys. Rep. **361**, 57 (2002).

⁵ P. J. de Pablo, J. Colchero, J. Gómez-Herrero, A. Asenjo, M. Luna, P. A. Serena and A. M. Baró, Surf. Sci. **464**, 123 (2000).

⁶ R. Guantes and S. Miret-Artés, Phys. Rev. E **67**, 046212 (2003).

⁷ Y. Georgievskii and E. Pollak, Phys. Rev. E **49**, 5098 (1994).

⁸ R. Guantes, J. L. Vega, S. Miret-Artés and E. Pollak, J. Chem. Phys. (in press).