

P074. ETAPAS EN LA ADSORCIÓN DE SELENIO SOBRE Au(111): ESTUDIO POR XPS, LEED, TOF-DRS y DFT

G. Ruano¹, E. Tosi², E. Sanchez³, P. Abufager⁴, M.L. Martiarena⁵ y O. Grizzi⁶, G. Zampieri⁷

¹ Centro Atómico Bariloche (CNEA-CONICET) e Instituto Balseiro (UNCU) Av. Bustillo 9500 S.C. de Bariloche.
Actualmente Instituto de Física del Litoral (UNL-CONICET) Güemes 3450 Santa Fe.

² Centro Atómico Bariloche (CNEA-CONICET) e Instituto Balseiro (UNCU) Av. Bustillo 9500 S.C. de Bariloche.
Actualmente Nanoproject Laboratorio de Física del Sólido (FACET-CONICET-UNT) Av. Independencia 1800 S. M. De Tucumán

³ Centro Atómico Bariloche (CNEA-CONICET) e Instituto Balseiro (UNCU) Av. Bustillo 9500 S.C. de Bariloche.

⁴ Instituto de Física de Rosario (UNR-CONICET) Rosario.

⁵ Centro Atómico Bariloche (CNEA-CONICET) Av. Bustillo 9500 S.C. de Bariloche.

⁶ Centro Atómico Bariloche (CNEA-CONICET) e Instituto Balseiro (UNCU) Av. Bustillo 9500 S.C. de Bariloche.

⁷ Centro Atómico Bariloche (CNEA-CONICET) e Instituto Balseiro (UNCU) Av. Bustillo 9500 S.C. de Bariloche.

E-mail (autor que presentará el trabajo): esanchez@cab.cnea.gov.ar grizzi@cab.cnea.gov.ar

Las monocapas autoensambladas (SAMs) de moléculas de calcógenos más pesados que el azufre (como Se o Te) sobre metales nobles son interesantes porque podrían proveer mejor conductividad eléctrica y además un enlace más fuerte a la superficie que las formadas con S. Sin embargo, los estudios de Se/Te-SAMs son más escasos que su contraparte S-SAMs.

Realizamos un estudio de la adsorción de Se sobre Au(111) utilizando XPS, TOF-DRS, LEED y cálculos DFT. La deposición se realizó en ultra alto vacío (UHV) utilizando una celda electroquímica de estado sólido lo que permitió estudiar la evolución desde un régimen submonocapa hasta la formación de multicapas. En el régimen de la monocapa encontramos dos fases ordenadas con patrones de LEED distintivos. El patrón de LEED de la primera fase presenta tres *spots* fraccionales simétricamente dispuestos alrededor de los *spots* que corresponden a un patrón $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$. El análisis de este patrón sugiere la formación de una superestructura $n\times n$ de dominios $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ donde $n=19$ ó $n=22$, o bien, que la adsorción procede sin remover la reconstrucción herringbone ($22\times\sqrt{3}$) de la superficie de Au(111). Esta última posibilidad concuerda con cálculos DFT que muestran que la transferencia de carga al Se adsorbido no sería suficiente para desestabilizar la reconstrucción superficial. Al incrementar el recubrimiento más allá de 0.3 ML aparece un nuevo patrón de LEED con *spots* anchos que luego de un recocido a 420 K se definen bien indicando una periodicidad 8×1 . Si se incrementa más aún el recubrimiento se forman multicapas sin un patrón de LEED discernible. Discutimos similitudes y diferencias destacables con los resultados reportados para la adsorción de S-SAMs/Au(111) y también importantes discrepancias entre adsorciones realizadas en UHV y por *dipping* en solución líquida.