

Índice de contenidos

Dedicatoria	1
Índice de abreviaturas	3
Índice de contenidos	5
Lista de Figuras	7
Lista de Tablas	12
Resumen	13
Abstract	17
Introducción general	21
Capítulo 1: Técnicas experimentales	25
1.1. Microscopías	27
1.1.1. Microscopio de efecto túnel (STM)	27
1.1.2. Microscopio de fuerza atómica (AFM)	39
1.2. Espectroscopías de iones con análisis de energía por tiempo de vuelo	41
1.2.1. Espectroscopía de iones dispersados y de átomos emitidos (TOF-ISS y TOF-DRS)	45
1.2.2. Transmisión de iones – Pérdida de energía	48
1.2.3. Transmisión de iones – Fracciones de carga	53
1.3. Espectroscopías de fotoelectrones	57
1.3.1. Espectroscopía de fotoelectrones emitidos por luz ultravioleta (UPS)	59
1.3.2. Espectroscopía de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS)	61
1.4. Espectroscopía de electrones Auger (AES)	62
1.5. Estructura fina de la absorción de rayos X cercana al borde (NEXAFS)	65
1.6. Moléculas EP-PTCDI, AlF ₃ y LiF	71
1.6.1. Métodos de determinación de espesores y densidades de masa	72
1.6.2. Resultados	74
1.7. Preparación de los sustratos de Si (111) y Ag (111)	76
Capítulo 2: Métodos teóricos	79
2.1. Teoría de funcional densidad	79
2.2. Programa VASP para modelar moléculas sobre superficies	80
2.3. Modelos teóricos para calcular el poder de frenado	82
2.3.1. Modelo de poder de frenado para compuestos	82
2.3.2. Modelo de poder de frenado para proyectiles lentos	84
Capítulo 3: Adsorción de moléculas orgánicas de EP-PTCDI en superficies de Si (111) y Ag (111)	91
3.1. Adsorción de EP-PTCDI sobre la superficie de Si (111)-(7×7)	93
3.1.1. Resultados de STM	95
3.1.2. Resultados de AFM	102
3.2. Adsorción y desorción de EP-PTCDI sobre la superficie de Ag (111)	103
3.2.1. Adsorción	104
3.2.1.1. Resultados de STM y AFM y el modelo teórico de DFT	104
3.2.1.2. Resultados de TOF-DRS	111

3.2.1.3. Resultados de la banda de valencia y cálculos DFT de la densidad parcial de estados	113
3.2.1.4. Resultados de XPS	116
3.2.1.5. Resultados de NEXAFS	120
3.2.2. Desorción.....	125
3.2.2.1. Resultados de TOF-DRS	125
3.2.2.2. Resultados de UPS	128
3.2.2.3. Resultados de AES y XPS	129
3.2.2.4. Resultados de STM.....	130
3.3. Conclusiones.....	133
Capítulo 4: Poder de frenado de fluoruros y películas orgánicas	137
4.1. Poder de frenado electrónico	139
4.2. Resultados y discusión	140
4.2.1. Materiales conductores	140
4.2.2. Fluoruros.....	142
4.2.3. Molécula orgánica EP-PTCDI.....	151
4.3. Conclusiones.....	158
Capítulo 5: Intercambio de carga entre un ión y películas conductoras, semi-conductoras y aislantes	161
5.1. Transferencia de carga en la colisión de iones con superficies	162
5.2. Resultados y discusión	166
5.2.1. Carbono	166
5.2.2. Fluoruros.....	170
5.2.3. EP-PTCDI.....	175
5.3. Conclusiones.....	176
Conclusiones generales	179
Referencias	185
Agradecimientos.....	195
Listado de publicaciones.....	196
Listado de congresos.....	197