

Índice general

Resumen	I
Abstract	III
Introducción	1
1. Conceptos Teóricos	7
1.1. Introducción.	7
1.2. Conceptos Básicos	8
1.3. La aproximación de Hartree-Fock	11
1.3.1. Energía de Correlación	13
1.4. Teoría de la Funcional Densidad	14
1.4.1. Primer Teorema de Hohenberg y Kohn	14
1.4.2. Segundo Teorema de Hohenberg y Kohn	15
1.4.3. Método de Kohn-Sham	16
1.4.3.1. Ecuaciones de Kohn-Sham Relativistas	18
1.5. Similitudes y Diferencias entre HF y la DFT	19
1.6. Funcionales de Intercambio y Correlación.	20
1.6.1. Aproximación local de la densidad	21
1.6.2. Aproximación del gradiente generalizado	22
1.6.3. Intercambio exacto	24
1.6.4. Funcionales híbridas	24
1.7. Estructuras periódicas	25
1.7.1. Ondas planas	26
1.7.2. Espacio recíproco	27
1.7.3. Métodos de <i>smearing</i>	28
1.7.4. Índices de Miller	29
1.7.5. Superficies	30

1.8. Pseudopotenciales	31
1.8.1. Conservantes de la norma	32
1.8.2. Ultrasuaves	33
1.8.3. Proyector de ondas planas aumentadas	34
1.g. El código VASP	34
1.10. Análisis de las propiedades de los estados estacionarios	35
1.10.1. Densidad de estados	35
1.10.2. Simulación de imágenes de microscopía túnel.	37
1.10.3. Métodos de búsqueda de estados de transición	38
1.10.3.1. Método de la banda elástica	38
1.10.3.2. Método de la banda elástica de imagen Resolvente	42
1.10.3.3. Aproximación de la banda elástica adaptada	43
1.10.3.4. Recomendaciones prácticas y procedimiento empleado	44
2. Adsorción de S sobre Au(111)	47
2.1. Introducción	47
2.2. La superficie de Au(111)	48
2.3. Adsorción de S sobre Au(111)	51
2.3.1. Detalles computacionales	51
2.3.2. Adsorción de S a recubrimiento 1/3	53
2.3.3. Adsorción de S a recubrimiento 1/3	56
2.3.4. Estructura de la fase compleja a alto recubrimiento	59
2.3.4.1. Adsorción de la especie S ₂ a recubrimiento 2/3	60
2.3.4.2. Estructura de la aleación de SAu	63
2.3.4.3. Adsorción de 8 S a recubrimiento 2/3	65
2.3.5. Energía de Adsorción en función del Recubrimiento	68
2.4. Conclusiones.	68
3. Proceso de disociación unimolecular de tioles de cadena corta sobre Au(111)	71
3.1. Introducción.	71
3.2. Adsorción de IVletanotiol (HSCH ₂ J) sobre Au(111)	72
3.2.1. Caracterización del HSCH ₂ J	72
3.2.2. Detalles Computacionales	74
3.2.3. Estados Moleculares	75

3.2.4.	Estados Disociados	78
3.2.5.	Caminos de Reacción	81
3.2.6.	Relajación de la Superficie	84
3.2.7.	Referencia de Resultados Convergidos	86
3.3.	Adsorción de Etéilthiol, 1-Propanotiol y Butanotiol sobre Au(111)	87
3.3.1.	Detalles Computacionales	87
3.3.2.	Estados Moleculares y Disociados	89
3.3.3.	Caminos de Reacción	92
34.	Conclusiones.	94
4.	Proceso de disociación unimolecular y bimolecular del H ₂ S sobre Au(111)	97
4.1.	Introducción	97
4.2.	Mecanismo Unimolecular	98
4.2.1.	Estados Moleculares y Disociados	99
4.2.2.	Caminos de Reacción	101
4.3.	Mecanismo Bimolecular	103
4.3.1.	Detalles Computacionales	104
4.3.2.	Estados de dos Moléculas Absorbidas	106
4.3.3.	Estados de dos Moléculas Disociadas	109
4.3.4.	Caminos de Reacción	111
4.3.4.1.	Efecto del Recubrimiento	117
4.3.4.2.	Un Nuevo Camino vía el Intercambio de Protones	121
4.4.	Conclusiones.	122
5.	Proceso de disociación bimolecular de HSCH ₃	125
5.1.	Introducción	125
5.2.	Mecanismo Bimolecular	126
5.2.1.	Estados Moleculares y Disociados	126
5.2.2.	Caminos de Reacción	128
5.2.3.	Efecto del recubrimiento	133
5.3.	Estudio de Adsorción Molecular de HSCH ₃	136
5.3.1.	Estados Moleculares	137
5.3.2.	Simulaciones de STM	138
5.4.	Conclusiones	140

6. Conclusiones Generales	143
Apéndices	147
A. Estados de dos H ₂ S Adsorbidas Molecularmente y Disociativamente	149
B. Detalles de los Caminos de Reacción Bimoleculares del H ₂ S/ Au(111)	153
Bibliografía	157
Agradecimientos	169
Publicaciones	171