

Índice General

Introducción	1
Teoría de la funcional densidad y su implementación	5
1.1 El formalismo de la funcional densidad (DFT)	5
1.2 El método de Kohn-Sham	8
1.2.1 Las ecuaciones de Kohn y Sham	9
1.3 Sistemas polarizados en espín	12
1.4 El método LAPW	13
1.4.1 El método de ondas planas aumentadas	13
1.4.2 La base LAPW y sus propiedades	15
1.4.3 Orbitales locales (LO)	17
1.4.4 Expansión del potencial y la densidad de carga	17
1.4.5 Código WIEN97	18
2 Adsorción de Pd en la superficie (0001) de MoS₂	19
2.1 Introducción	19
2.2 Estructura del MoS ₂	21
2.3 Detalles de los cálculos	22
2.4 Cálculos de estructura electrónica y energía total	24
2.4.1 Superficie limpia de MoS ₂ (0001)	25
2.4.2 Pd adsorbido sobre la superficie (0001) de MoS ₂	27
2.5 Conclusiones	34

3	Análisis de la ligadura Pd-S mediante la teoría de Bader	35
3.1	Introducción.	35
3.2	Teoría de Bader	35
3.2.1	Puntos críticos de la densidad de carga	36
3.2.2	Definición de superficie atómica	37
3.3	Pd adsorbido en la superficie (0001) de MoS ₂	38
3.3.1	Puntos críticos de ligadura	38
3.3.2	Cargas atómicas	42
3.4	Discusión de la teoría de Bader	43
3.5	Conclusiones	45
4	Defectos en la superficie (0001) de MoS₂	47
4.1	Introducción.	47
4.2	Aproximación de Tersoff-Hamann para la corriente túnel	50
4.3	Detalles de los cálculos	52
4.4	Resultados.	54
4.4.1	Superficie limpia de MoS ₂	54
4.4.2	Vacancia de S de la superficie	54
4.4.3	Impurezas sustitucionales de S superficial	56
4.5	Conclusiones	63
5	Estados ligados de un ion moviéndose en un sólido	65
5.1	Introducción.	65
5.2	Autoenergía y potencial inducido	66
5.2.1	Estados degenerados	74
5.3	Aproximación de plasma local	75
5.4	Corrimiento de energía de iones con un electrón	77
5.5	Conclusiones	81
	Conclusiones Generales	83

ÍNDICE GENERAL	v
Agradecimientos	87
Apéndices	87
A Implementación de la teoría de Bader en el código WIEN97	89
A.1 Representación de la Densidad de Carga en el Código WIEN97	89
A.1.1 El calculo de la densidad de carga en la zona intersticial	90
A.1.2 Cálculo de la densidad de carga dentro de las esferas atómicas	91
A.2 Calculo del gradiente y el Hessiano de la densidad de carga	92
A.2.1 Gradiente y Hessiano de la densidad de carga en la zona intersticial	92
A.2.2 Gradiente y Hessiano de la densidad de carga dentro de las esferas	93
A.2.3 Derivadas de los armónicos esféricos	95
A.3 Búsqueda de puntos críticos	96
A.4 Calculo de la superficie atómica	96
B Acoplamiento entre estados hidrogenoides por el potencial inducido	99
Bibliografía	103