

Índice general

Agradecimientos	I
1. Introducción	1
1.1. Colisiones rasantes ion-superficie. Emisión electrónica	2
1.1.1. Metales y semiconductores	3
1.1.2. Aisladores. Caso particular: <i>LiF</i>	4
1.2. Objetivos	5
1.3. Desarrollo del trabajo	6
2. Estudio de la colisión $H^+ \rightarrow LiF$	7
2.1. <i>LiF</i> : características del material	7
2.2. Características del proceso de colisión	8
3. Caracterización del campo eléctrico	12
3.1. Potenciales involucrados	12
3.2. Track de iones de la superficie	12
3.2.1. Probabilidad de ionización por unidad de camino recorrido: densidad lineal de carga del track	13
3.2.2. Trayectoria del proyectil frente a una superficie de <i>LiF</i>	15
3.2.3. Aproximación de campo eléctrico homogéneo	19
3.2.4. Variación del potencial de ionización de un átomo de F^-	23
3.3. Carga de polarización sobre la superficie: carga imagen del proyectil	26
4. Evolución post-colisional	28

4.1. Evolución temporal	28
4.1.1. La ecuación de Schrödinger	28
4.1.2. Desarrollo de la función de onda electrónica: elección de la base	30
4.2. Box-based states: estados del átomo de H en una caja esférica	33
4.2.1. Ecuación de Schrödinger estacionaria para el átomo de H en una caja esférica de radio A	33
4.3. Cálculo de los elementos de acoplamiento	37
4.4. Condiciones iniciales	38
4.4.1. Distribución electrónica inicial	39
5. Resultados	42
5.1. Ángulo de incidencia $\theta = 1.0^\circ$	42
5.2. Comparación con otros ángulos de incidencia	49
5.3. Densidad electrónica de orbitales de energía positiva	50
6. Conclusiones y perspectivas	53
A. Método (Algoritmo) de Numerov	55
B. Armónicos esféricos	57
C. Coeficientes $3j$ de Wigner	60
D. Trayectoria	63
D.1. Potencial producido por un plano de átomos sobre un proyectil	63
D.2. Aproximación de Molière	65
D.3. Aproximación de potencial planar	67
E. Colisión $H^+ \rightarrow H_{(1s)}$	70
E.1. Transición $1s \rightarrow 2p_0$. Resolución numérica exacta.	71
E.2. Transiciones $1s \rightarrow 2p_0$ y $1s \rightarrow 2p \pm 1$. Campo eléctrico homogéneo.	75