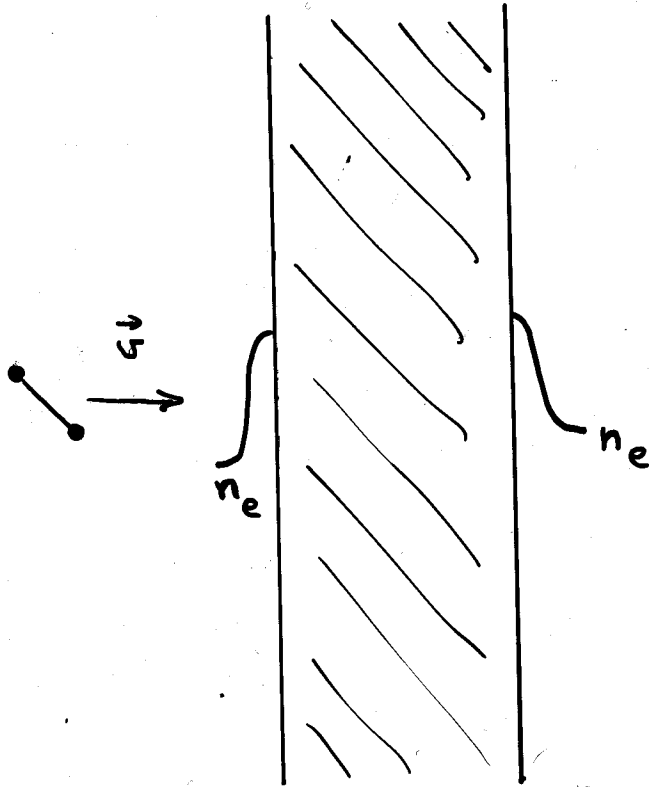


# INTRODUCCIÓN



$$U < 0,5 \text{ u.a.}$$

$$E_i < 6,25 \text{ keV}$$

# INTRODUCCION

Cuando un ión molecular incide sobre una lámina delgada, este se disocia, descomponiéndose en fragmentos. Los fragmentos resultantes comienzan a distanciarse bajo la influencia de la interacción Coulombiana, separándose luego de unos pocos femtosegundos. Este fenómeno es llamado “Explosión Coulombiana” de la molécula. Los fragmentos moleculares así producidos, viajan como tales en el sólido bajo la acción de su interacción mutua y de los átomos de la red, perdiendo energía a través de excitaciones del medio. A la salida de la lámina metálica, éstos fragmentos emergen con una distribución de distancias internucleares, tal que existe una cierta probabilidad de recombinación de dichos fragmentos, los que darán lugar a la formación de un ión molecular.

El conocimiento de la energía del estado base y de la distribución internuclear del ión molecular, en presencia de una superficie, nos permite en una primera aproximación determinar las condiciones para que se produzca la disociación del dímero y la dinámica de la recombinación de los fragmentos que emergen del interior del metal. La densidad electrónica en la superficie del metal es inhomogénea y es modelada usando un gas de electrones libres en la aproximación de densidad local.

En el presente trabajo nos centraremos en determinar la energía del estado base y la distancia internuclear (obtenida en la aproximación de ión fijo) de un ión molecular de hidrógeno, como función de la distancia de éste a la superficie de una lámina monocristalina de Au; donde la distancia es medida de manera perpendicular al plano (100), es decir, en la misma dirección de incidencia de los iones y ubicando el origen sobre la última capa atómica.

- Cuando el ión incide sobre la lámina se disocia, pero como el ión está entrando en el sólido, los fragmentos están fuertemente apantallados y disponen de muy poco tiempo para distanciarse, por lo cual no ocurre lo que definimos como “Explosión Coulombiana”. Por este motivo los fragmentos ingresan al sólido con una distancia muy cercana a la distancia que tenían cuando formaban un ión molecular.

- Cuando los fragmentos emergen del sólido, deben recorrer una pequeña distancia antes de encontrarse en el vacío. Por tal motivo, si los fragmentos no se recombinan en el corto camino donde disponen de electrones para hacerlo (superficie), estarán sometidos a su interacción Coulombiana no apantallada produciéndose la llamada “Explosión Coulombiana”.

- La pregunta que nos planteamos es:

**¿ Puede producirse recombinación a la salida de la lamina?**

HAMILTONIANO QUE DESCRIBE AL  
 IÓN MOLECULAR INTERACTUANDO CON  
 LA SUPERFICIE DEL SÓLIDO.

$$\check{H} = \check{H}_{\text{MOLECULAR}} + \check{H}_{\text{SÓLIDO}} + \check{V}_{\text{INTERACCIÓN}}$$

[1]  $\check{H}_{\text{SÓLIDO}}$

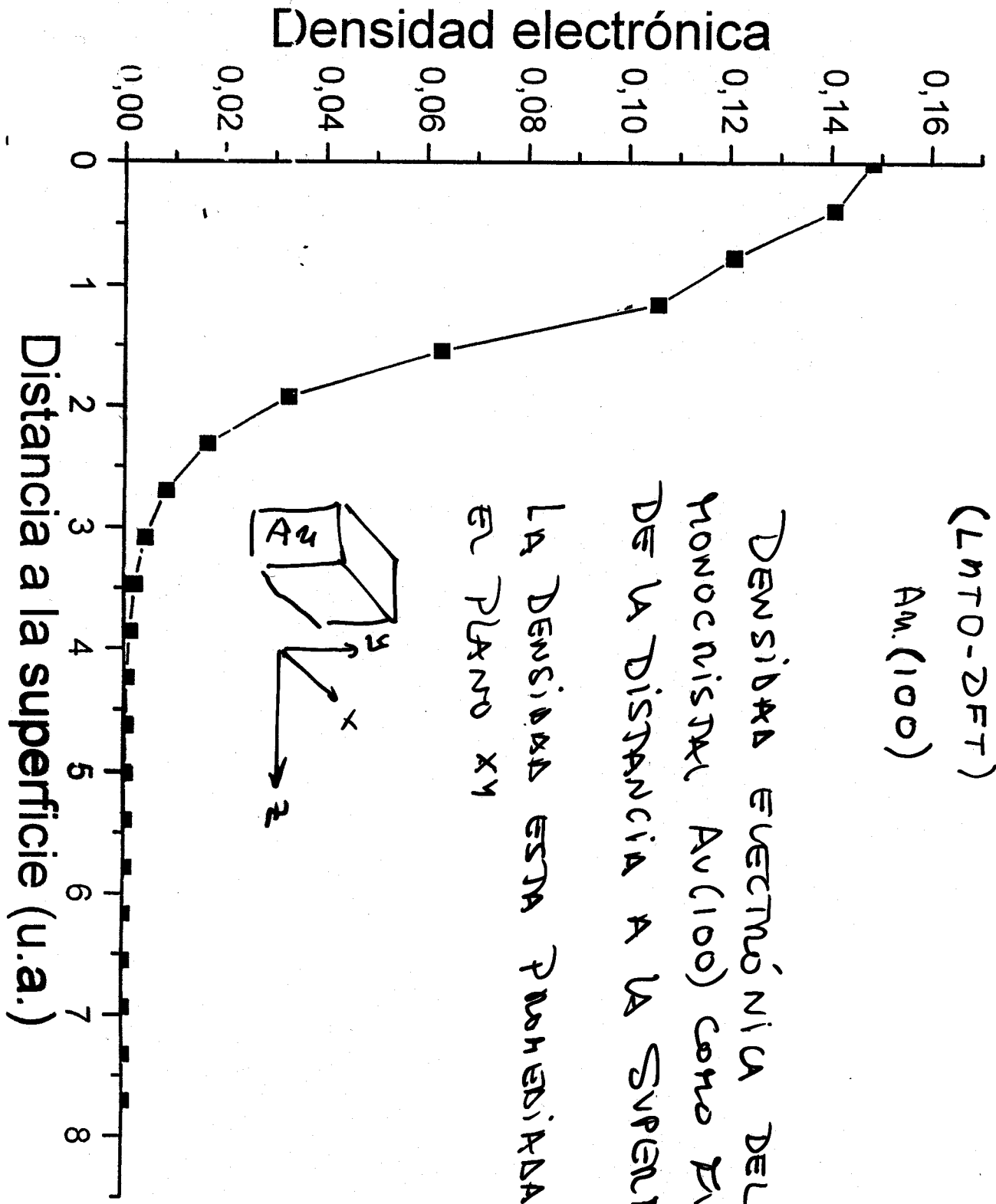
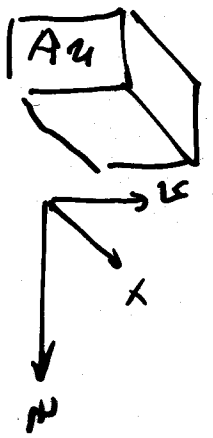
[2]  $\check{H}_{\text{MOLECULAR}} \left( \frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{r} (1 + \beta r) e^{-2\beta r} \right)$

PARA RESOLVER  $\check{H}$ , SE RESUELVE  
 EL SÓLIDO Y EL IÓN MOLECULAR COMO  
 SISTEMAS NO INTERACTUANTES. DONDE  
 EL IÓN MOLECULAR ES RESUELTO MEDIANTE  
 EL USO DE UN POTENCIAL APANTALLADO  
 QUE REPRESENTA LA DENSIDAD ELECTRÓNICA  
 DEL SÓLIDO.

(LNT0-DFT)  
 Au(100)

DENSIDAD ELECTRÓNICA DEL  
 MONOCRISTAL Au(100) COMO FUNCIÓN  
 DE LA DISTANCIA A LA SUPERFICIE.

LA DENSIDAD ESTA PORBEDIADA EN  
 EL PLANO XY



Una vez obtenida la densidad del sólido, nos centramos en resolver el ión molecular.

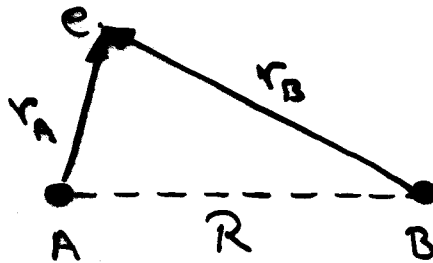
La Ec. [1] Representa el Hamiltoniano completo para un ión molecular de hidrógeno.

### Aproximaciones:

- 1.- Como el caso en estudio es a bajas velocidades, podemos usar la aproximación de ión fijo ( $V=0$ )
- 2.- Consideramos a los núcleos detenidos al comparar su velocidad con la del electrón ligado. (Born-Oppenheimer)
- 3.- La densidad electrónica en la cual esta sumergido el ión, estará descrita por la aproximación de plasma local (LPA).

El Hamiltoniano que incluye todas estas aproximaciones esta dado por la Ec [3].

# HAMILTONIANO PARA EL ION MOLECULAR DE HIDROGENO



$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_A^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_B^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad [1]$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} + \frac{1}{R} \quad [2]$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - V(r_A) - V(r_B) + V(R) \quad [3]$$

$$\text{CON } V(r) = \frac{1}{r} (1 + \rho r) e^{-2\rho r} *$$

EXPANDIMOS LA SOLUCIÓN DEL IÓN MOLECULAR  $\Psi$   
EN (LCAO) UNA COMBINACIÓN DE ORBITALES  
ATÓMICOS

$$\hat{H} = \left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 - V(r_A) \right] - V(r_B) + V(R) \quad [4]$$

$$H\Psi = E\Psi$$

$$\Psi = \sum_r c_r \phi_r \quad \text{CON } H_{\text{HIDROGENO}} \phi_r = E_r \phi_r$$

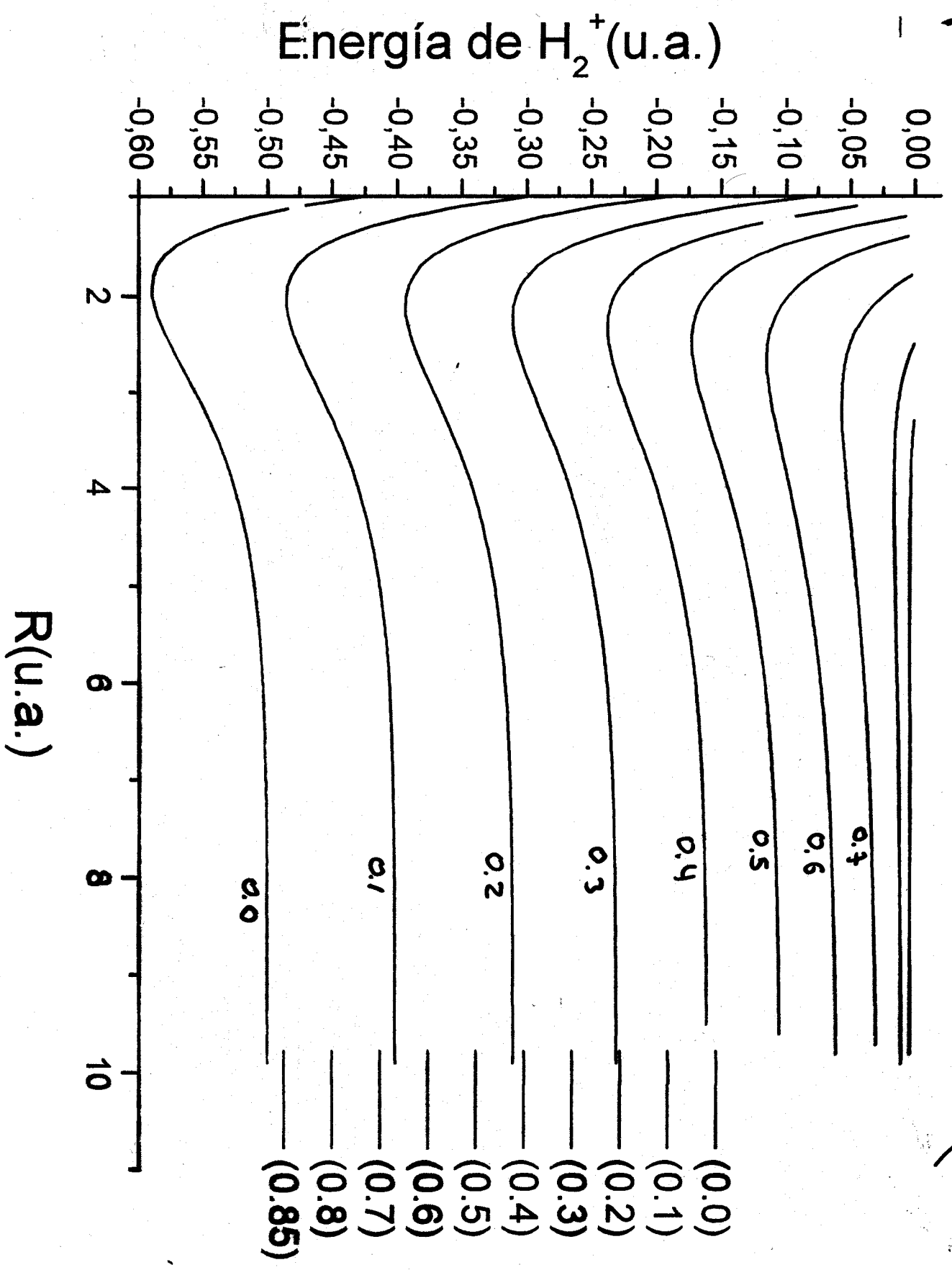
$$\sum_r c_r (H_{rs} - E S_{rs}) = 0$$

$$\text{DET} | H_{rs} - E S_{rs} | = 0$$

$$H_{rs} \equiv \langle \phi_s | \hat{H} | \phi_r \rangle$$

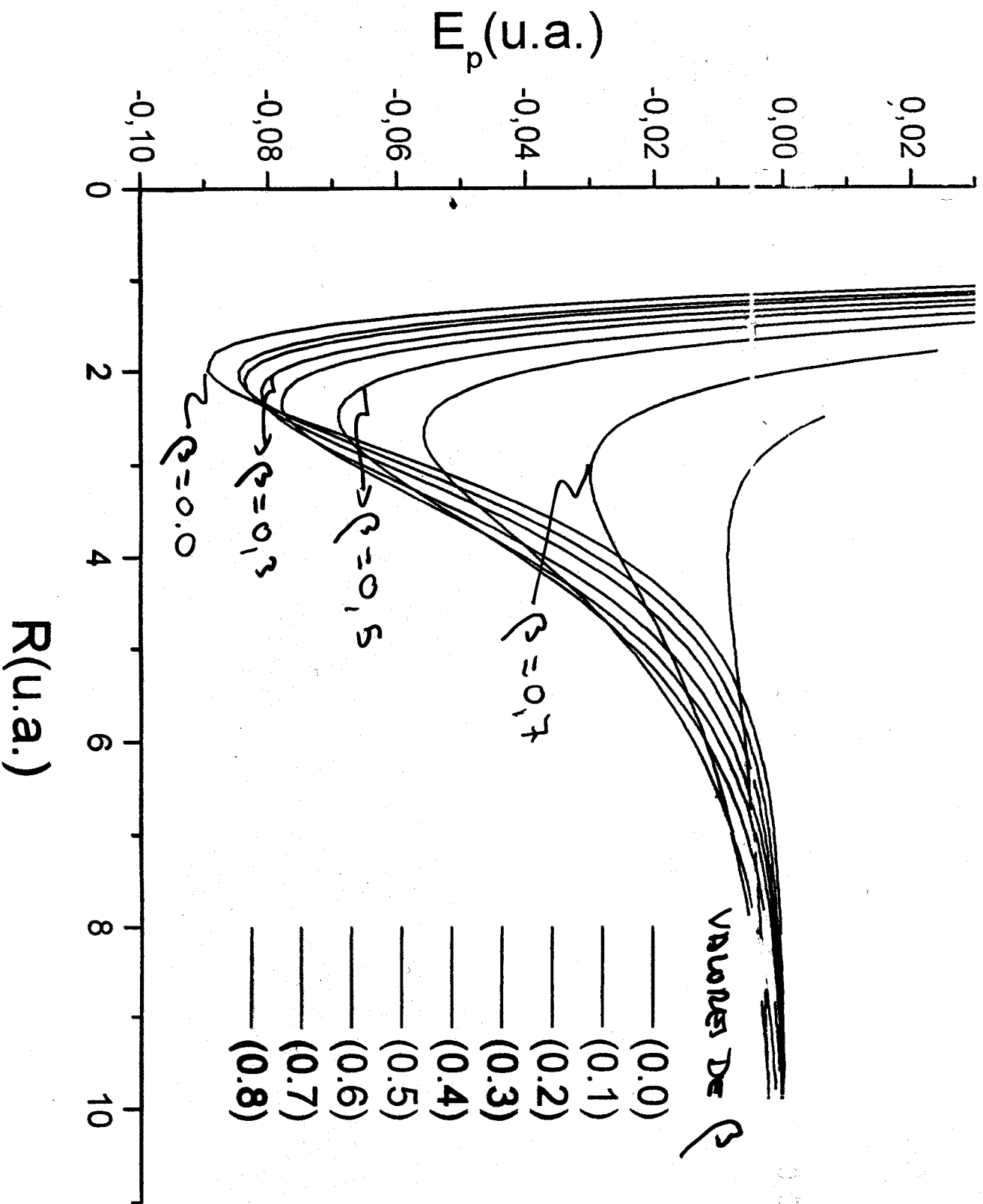
PARAMETROS HA AJUSTAR  $c_r$

ENERGÍA DE IÓN MOLECULAR EN FUNCIÓN DE LA DISTANCIA INTRANUCLEAR (R) PARA DIFERENTES Q

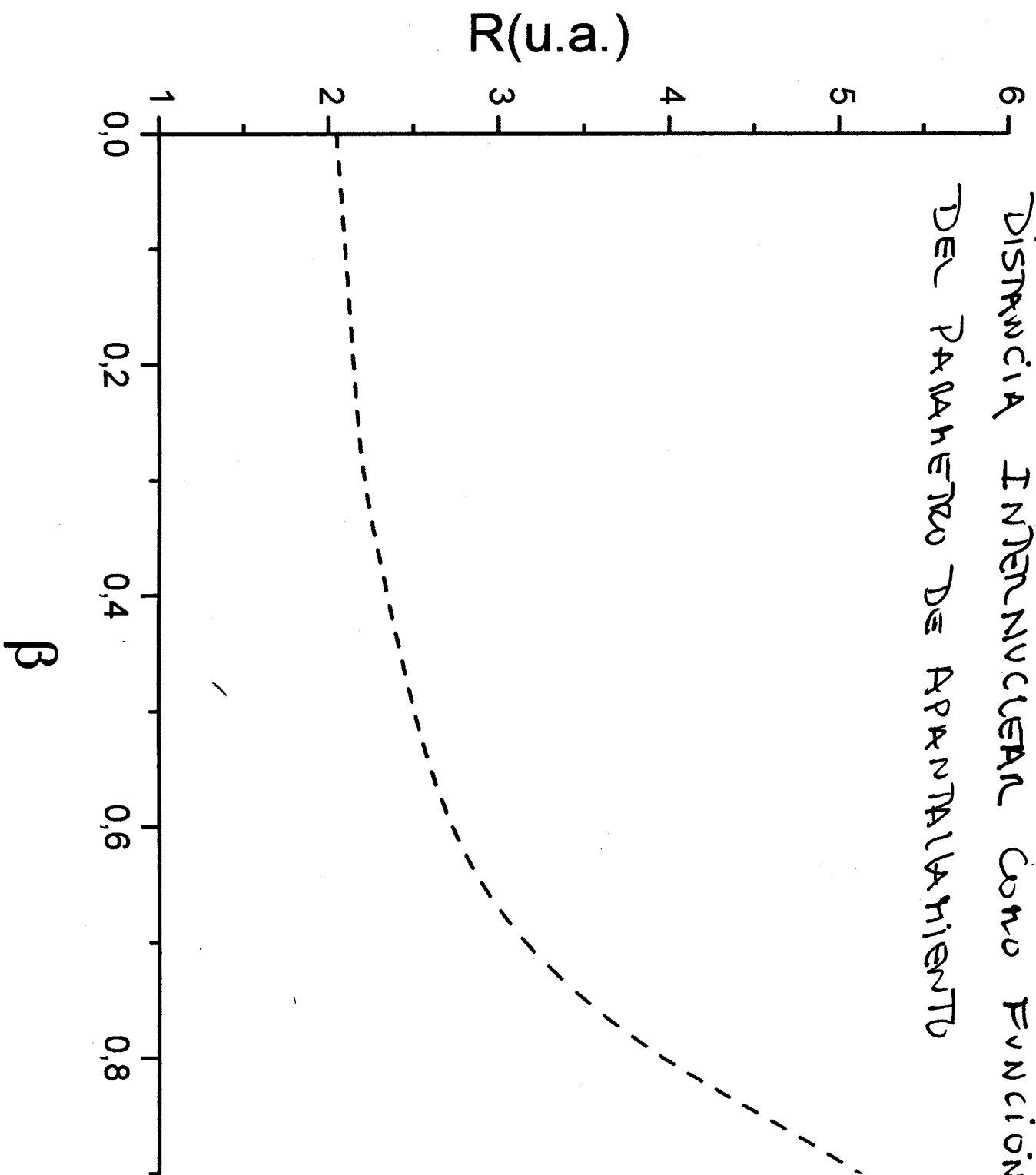


DIFERENCIA DE ENERGIA DEL ESTADO BASE

$$E(H_2^+) - E(H) = E_p$$



DISTANCIA INTERNUCLEAR COMO FUNCION  
DEL PARAMETRO DE APUNTAMIENTO



## **ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS**

**De nuestros resultados vemos que para un valor del parámetro de apantallamiento  $\beta < 0.87$  pueden existir estados ligados, para ciertos valores de la distancia internuclear  $R$ .**

**Por otra parte si resolvemos la ecuación de Schrödinger de manera autocosistente, imponiendo la regla de suma de Friedel, podemos relacionar el valor del parámetro  $\beta$  con la densidad electrónica y ésta con la distancia a la superficie del sólido.**

**El valor de  $\beta = 0.87$  corresponde a una distancia a la superficie de 1.9 u.a.. Si miramos el gráfico de la densidad del sólido como función de la distancia, se ve que el ión puede recorrer una distancia poco mayor a 2 u.a. donde es posible la recombinación, al menos desde el punto de vista energético.**