

Resúmenes de Tesis: Doctorado en Física

Efectos de la repulsión coulombiana entre electrones localizados en la interacción entre átomos y superficies

Adalberto de Jesús Iglesias García

adalberto.iglesias@ifis.santafe-conicet.gov.ar

Edith Catalina Goldberg /

Evelina Andrea García

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas; Facultad de Ingeniería Química; Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Universidad Nacional del Litoral

Fecha de la defensa: 22/03/2013

Resumen

En este trabajo se estudian los procesos dinámicos de transferencia de carga en la colisión de iones con superficies. El marco conceptual para la descripción del sistema interactuante átomo-superficie lo provee el modelo de Anderson. En una visión localizada del proceso de intercambio de carga se analiza el efecto de la estructura electrónica del sólido (estructura de bandas, presencia de gaps superficiales), y se discuten distintas aproximaciones de la repulsión coulombiana en el sitio del átomo. Mediante el lenguaje de proyectores se incluyen las configuraciones atómicas que se consideran con mayor probabilidad de ocurrencia en el proceso de intercambio de carga con la superficie. La evolución dinámica del sistema se describe usando el Método de Ecuaciones de Movimiento aplicado a las funciones de Green-Keldysh adecuadas

para cada caso, y los parámetros del Hamiltoniano de Anderson se obtienen de un cálculo *ab-initio* que incorpora las propiedades químicas de los átomos involucrados en la interacción.

El efecto de la correlación electrónica entre el estado fundamental y los estados excitados en el intercambio de carga ión-superficie nos permite explicar la alta (prácticamente un 100%) neutralización observada en la dispersión de He^+ por HOPG.

En el caso de He^+ dispersado por Al(100), donde el mecanismo Auger es el dominante para la neutralización al estado fundamental, analizamos el efecto de la estadística de espín y de la base atómica usada para describir el átomo de He. Encontramos que se mejora el acuerdo con el experimento cuando usamos una base extendida para describir al He.

Encontramos que los efectos de la estructura bandas del sólido son importantes en el cálculo de magnitudes físicas tales como anchos y corrientes de nivel en el caso adiabático y estado de carga del proyectil en el caso dependiente del tiempo. Los efectos de interferencia entre los distintos átomos de la superficie que interactúan con el átomo adsorbato (proyectil) pueden explicar los tiempos de vida media grandes medidos para los estados de átomos alcalinos adsorbidos en superficies de Cu, y también los comportamientos a bajas energías de las fracciones de átomos neutros de Li y

de iones negativos de H en la colisión con una superficie de HOPG.

The effect of coulombian repulsion between localized electrons in the atom-surface interaction

Summary

We studied, in this work, the charge exchange between atoms and surfaces involved in the dynamical collision process by using the theoretical frame provided by the Anderson model. The effect of the fine details of the electronic band structure (surface energy gaps, surface states) on the

charge exchange process is analyzed within a localized description, and different approximations to the Coulomb repulsion in the atom site are discussed. The projector language is used for introducing the atomic configurations which have an appreciable probability of occurrence in the atom-surface interaction. The dynamical evolution of the interacting system is described by appropriate Green-Keldysh functions, and these ones are solved by means of the Equation of Motion method. The Anderson Hamiltonian parameters are obtained from an *ab-initio* model calculation that takes into account the chemical properties of the involved atoms.

Resúmenes de Tesis: Maestría en Didáctica de las Ciencias Experimentales

La analogía como estrategia didáctica en la enseñanza del concepto de reactivo limitante y la recuperación de análogos útiles en contenidos de mayor complejidad

Nancy Silvana Piovano

nancypiovano@arnet.com.ar

Ester Mercedes Ocampo

Facultad de Ingeniería Química

Química General

Departamento de Química

Universidad Nacional del Litoral

Fecha de defensa: 04/11/2013

Resumen

La problemática que dio origen a esta investigación está fundamentada en la dificultad que presentan los estudiantes universitarios para el aprendizaje de la este-

quiometría de reacciones químicas y, en particular, del concepto reactivo limitante. La estequiometría se ocupa de los aspectos cuantitativos de la reacción química por ello es uno de los conceptos centrales de la química. En su aprendizaje los estudiantes presentan dificultades que van más allá de cuestiones matemáticas, como el dominio de la proporcionalidad. El estudio se realizó con alumnos de la asignatura Química de las carreras de Licenciatura en Química, Profesorado en Química y Químico Analista. Una de las primeras unidades del programa de esta asignatura, común a las tres