

Ciclo de charlas

Mecánica Cuántica Aplicada: Diseño computacional de materiales



Sala de conferencias.
Dpto. Física-UNS.



Viernes 02/09. 15hs.



Dr. Alfredo Juan

Universidad Nacional del Sur
IFISUR-CONICET

La búsqueda permanente de mejoras en la calidad de vida y las necesidades de nuestras sociedades han llevado a desarrollar diferentes formas de resolver estos dilemas. Desde la mera observación de algo útil a ser aprovechado pasando por la prueba y error, la experimentación y la formulación de teorías predictivas hoy nos encontramos con una forma de solución diferente de las anteriores: el modelado computacional. En la búsqueda de nuevos materiales con nuevas propiedades, antes inesperadas producto de la nano-dimensión, hoy son posibles de tratar problemas muy complejos imposibles de resolver de manera analítica. La famosa **ecuación de Schrödinger (1925)**, fue llamada en su época "la clave del universo", sin embargo algunas aplicaciones prácticas debieron esperar. Los cálculos teóricos de estructura electrónica y las predicciones de las propiedades de los materiales a partir de los fundamentos de la mecánica cuántica, sin recurrir a parámetros empíricos, se han desarrollado ampliamente en años recientes. La significación de la teoría moderna de estructura electrónica ha sido reconocida con el otorgamiento del Premio Nobel en 1998 a *Walter Kohn por el desarrollo de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)* y a *John Pople por el desarrollo de los métodos computacionales*. Sin embargo es aun más reciente que problemas de envergadura como los procesos catalíticos en superficies sólidas o la adsorción de medicamentos son posibles de ser analizados mediante el cálculo computacional. En esta presentación hablaremos de la utilidad de la DFT en la búsqueda de soluciones para energías alternativas basadas en hidrógeno. Merecen atención tanto en el almacenamiento y producción de hidrógeno como en los procesos de deterioro que puede provocar en los materiales. En otro aspecto se mostrará la utilidad del modelado en el estudio de intermetálicos PdGa y la descripción a nivel atómico de su rol en la eliminación de trazas de acetileno en la producción de polietileno.



www.fisica.uns.edu.ar



Departamento de Física-UNS

Departamento de Física-UNS

2016

02/09