

# Ciclo de Conferencias del Departamento de FÍSICA

El

## Dr. Alfredo Juan

Prof. Titular del Dpto Física de la UNS

Inv. Principal del CONICET

Vicepresidente Comisión Inv. Científicas Pcia. Bs. As.

Senior Research Associate ICTP, Trieste Italia.

Editor Asociado, Applied Surface Science

disertará acerca de

## "Catalizadores Intermetálicos PdGa "

El compuesto intermetálico PdGa es un catalizador selectivo para la eliminación de trazas de acetileno en la producción de polietileno. La naturaleza del plano expuesto y su estructura electrónica son factores claves para entender su comportamiento y sus propiedades de adsorción. La experimentación en este sistema es altamente costosa y muy sofisticada y aún no ha logrado datos concluyentes. En esta charla se propondrá una explicación mediante cálculos de ab-initio a nivel del Funcional de la Densidad cómo es posible predecir los posible enlaces de los metales con moléculas de hidrogeno, acetileno y monóxido de carbono y su efecto en las propiedades de la superficie.

**VIERNES 29 de Mayo, 15hs**

**Sala de Conferencias del Dpto. de Física  
(Complejo Alem - Cuerpo B- Subsuelo)**