

# Actividades del Plan Estratégico de Asuntos Académicos INTEQUI

## Referencia dentro del PEAA

## Cobertura de la vacancia en modelado por DFT

Propuesta de trabajo con la sublínea “Diseño de materiales catalíticos” para el modelado por DFT de: a) la exsolución del Rh y el Ni desde perovskitas para el diseño de la arquitectura superficial y estudio de la adsorción de reactivos (Plan doctoral del Lic. Asiel Hernandez) y b) Interacción Cu-Zn, modificación de la densidad electrónica y estudios de mecanismos de hidrogenólisis de glicerol (Plan para postulación a una beca postdoctoral)

# Conferencia

## Dr. Alfredo Juan (IFISUR, Bahía Blanca)

### El rol del Galio en la hidrogenación catalítica de acetileno en el sistema intermetálico PdGa (*un estudio por DFT*)

El Ga se considera un mero espaciador en las superficies del intermetálico PdGa. En dichos intermetálicos el Pd está rodeado de Ga y separado a una distancia del próximo Pd de forma que aparece como un sitio aislado real. En este trabajo se trata de establecer el rol del Ga, al tiempo que se analiza la adsorción de acetileno y su hidrogenación a etileno mediante cálculos cuánticos a nivel del Funcional de la Densidad y análisis de la densidad electrónica y del enlace químico del adsorbato y de las superficies expuestas