

Aplicaciones de la conjetura de Maldacena.

Nicolás Grandi.

contacto: grandi@fisica.unlp.edu.ar

Derivada originalmente dentro de la Teoría de Cuerdas, la "Conjetura de Maldacena", también conocida como "dualidad AdS/CFT", "dualidad gauge/gravedad" o "dualidad holográfica", se ha transformado en un paradigma que modela el régimen cuántico de la gravedad mediante la descripción perturbativa de la teoría de campos y recíprocamente, describe el comportamiento cuántico de teorías de campos fuertemente acopladas en términos de modelos clásicos de gravedad. En esta charla daremos una introducción a los conceptos fundamentales en los que se basa la dualidad.

Investigación teórica de la interacción de moléculas pequeñas con estructuras.

Víctor Ranea.

Investigador Adjunto CONICET, INIFTA, UNLP

contacto: vranea@inifta.unlp.edu.ar

Este proyecto está motivado por problemas ambientales, nuevas tecnologías, conversión de energía, procesos industriales e interés científico.

La interacción entre moléculas pequeñas y estructuras es tópico de interés e investigación en una gran variedad de disciplinas científicas como nanotecnología, ciencias ambientales, conversión de energía, catálisis heterogénea, estructuras magnéticas, físico-química de superficie y corrosión, por nombrar algunas. Las moléculas pequeñas en consideración son H₂O, CO, NO, SO₂, O₂ y NH₃, principalmente. Las estructuras pueden ser una superficie, que podría ser metálica o de un óxido metálico, grafeno o un cluster metálico pequeño, etc.

Los objetivos del proyecto de investigación son predecir, entender y describir a nivel molecular, la interacción entre moléculas y la estructura con la que interaccionan.

Se calculan energías de interacción y geometrías óptimas, básicamente. Las frecuencias de vibración calculadas se comparan con resultados experimentales para individualizar o predecir las especies que interaccionan con un cluster o con una superficie, o bien para respaldar estados de transición. Espectros de desorción térmica programada (TDS) son calculados para predecir la temperatura de desorción de especies de una superficie o son comparados con resultados experimentales para individualizar configuraciones de adsorción. Cálculos de los caminos de difusión y de barreras de energías son útiles en la predicción y descripción de la cinética de una reacción. El cálculo de la densidad de estados es útil en la individualización de los orbitales involucrados en los enlaces y en la predicción de resultados de microscopía electrónica.

Las herramientas que utilizo para alcanzar los objetivos son cálculos de energía total basados en la teoría del funcional densidad (DFT), principalmente. DFT es una poderosa herramienta de la mecánica cuántica que se utiliza en la predicción de geometrías óptimas y energías de interacción. Otras herramientas de la mecánica cuántica, mecánica estadística, termodinámica, etc. también pueden ser usadas.