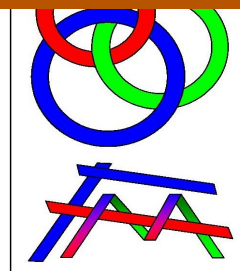




Seminarios del Departamento de Física Atómica, Molecular y de Agregados (FAMA,IFF)



## La hipérbola como parábola del papel de la simetría en el entendimiento y la mejora de materiales altamente energéticos

**Pedro Noheda**

Instituto de Química Orgánica General, IQOC-CSIC, Madrid

El entendimiento y la mejora de los Materiales Altamente Energéticos se ha convertido en una importante necesidad social y en un reto científico-técnico a las escalas planetaria y extraplanetaria. El modelo científico actualmente aceptado para la detonación de los materiales energéticos es el llamado Modelo fuera del equilibrio de Zeldóvich-von Neumann-Döring (modelo de detonación de ZND) propuesto hace unos setenta años.

A partir de 1990, se han identificado cuatro regiones temporales en el modelo de detonación ZND; la primera, implica fonones que se excitan y equilibran en menos de un picosegundo; la segunda, llamada “multiphonon up-pumping”, de unos 100 picosegundos; la tercera, del orden de los nanosegundos y en la que se produce la ruptura en cadena de enlaces químicos; la cuarta, cientos de nanosegundos y llegada a la zona del equilibrio de Chapman-Jouget. Esta última de suma importancia para entender la preparación de nanodiamantes y nanotubos en la tierra y... en el universo!

Densidad, simetría molecular, entropía de simetría, energía, red cristalina, generación y clasificación de “hot spots”, coordenadas de reacción, cálculos basados en la teoría del funcional densidad serán junto, cómo no!, a las hipérbolas y los hiperboloides, algunos de los conceptos y datos que entrelazaré para explicar mi aproximación.

[1] A. Tokmakoff et al., *J. Phys. Chem.* 97 (1993) 1901.

[2] S. Boyd et al., *J. Chem. Phys.* 131 (2009) 204903.

[3] N.A. Marks et al., *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012) 075503.

**Sala de Conferencias Serrano 121**

**Miércoles 12 de Febrero de 2014 a las 12:30 pm**