

CONFERENCIAS CIENTÍFICAS

Camino hacia los materiales superduros: importancia de los cálculos de red cristalina dinámicas.

Los últimos intentos de diseñar nuevos materiales superduros ($H > 40$ GPa) se concentraban en la introducción de elementos ligeros (B, C, N, and O) que forman enlaces fuertes en metales de transición con módulos de alta elasticidad.

El Dr. Legut presentará en su conferencia los límites de resistencia al cizallamiento y a la tracción en metales de transición (4d y 5d) con boro, platino con nitrógeno, y carburo de tungsteno con diferentes secuencias de apilado usando cálculos cuánticos y de dinámica molecular. Nos mostrará las relaciones entre la estructura electrónica, el módulo de cizallamiento, constantes de elasticidad, entalpía de formación y las vibraciones atómicas.

Recientemente, se han iniciado investigaciones con la ayuda de cálculos de dinámica molecular para demostrar un camino posible para el diseño de supermateriales. El origen de los límites de la resistencia a la cizalladura y su relación con la estructura electrónica y sus propiedades mecánicas se mostrarán en detalle.

Dr. DOMINIK LEGUT

Centro IT4Innovations, VSB

Universidad Técnica de Ostrava, República Checa

Búsqueda de imanes permanentes sin tierras raras por medio de métodos de predicción de estructuras: posibilidades y limitaciones.

La predicción de estructuras basada en métodos de algoritmo evolutivos/genéticos combinada con los cálculos teóricos de densidad funcional ofrece la posibilidad de obtener desde cero la estructura estable de un componente simplemente con el conocimiento de su composición. En la práctica, sin embargo, hay muchos factores que hacen que el proceso de predicción de una nueva estructura mediante simulación, sea tan complicado como en el laboratorio.

El Dr. Arapan nos presentara algunos de los resultados obtenidos en la búsqueda de nuevas estructuras magnéticas sin tierras raras mediante el uso del código USPEX y el código ab-initio VASP los cuales han sido obtenidos a través de las investigaciones desarrolladas en el proyecto NOVAMAG por él mismo y su colega Pablo Nieves, ambos pertenecientes a ICCRAM, Centro de Investigación de la Universidad de Burgos.

Basándose en esta experiencia, el Dr. Arapan propondrá un debate sobre sus límites así como las posibilidades de sacar el mejor partido al uso de estos métodos predictivos de estructuras.

Dr. SERGIU ARAPAN

Centro IT4Innovations, VSB

Universidad Técnica de Ostrava, República Checa

Las conferencias se realizarán en **inglés**

Universidad de Burgos · Salón de Actos - Facultad de ciencias

10 de julio a las 12:00

|

17 de julio a las 12:00

ORGANIZA:



UNIVERSIDAD DE BURGOS



NOVAMAG
PERMANENT MAGNETS



This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Grant Agreement No 686056 (NOVAMAG)