



# AULA UPV/EHU-BCAM: DE LOS ÁTOMOS A LAS APLICACIONES: DISEÑO Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES PIONEROS MEDIANTE SIMULACIONES ATOMÍSTICAS

**Ponentes:** [Henry Andrés Cortés](#) y [Mauricio Rincón Bonilla](#)

**Fecha y hora:** 10 de abril, 2024 | 12:00 - 13:00

**Lugar:** Aula 1.10 Facultad de Ciencia y tecnología.

**Campus Leioa (UPV/EHU).**

**Inscripción:** <https://forms.gle/JLAgmHzykmU7YSEt6>



## Abstract:

Las simulaciones atomísticas representan un enfoque transformador en la ciencia de los materiales, ya que ofrecen una visión sin precedentes de los comportamientos fundamentales de los materiales a nivel atómico. Aprovechando modelos computacionales para simular las interacciones y la dinámica de átomos y moléculas dentro de un material, los científicos pueden predecir y analizar una amplia gama de propiedades, como la resistencia mecánica, la conductividad iónica y la estructura electrónica. Además, las simulaciones atomísticas facilitan la exploración del comportamiento de los materiales en condiciones extremas que son difíciles de reproducir experimentalmente. Como resultado, pueden acelerar el descubrimiento de nuevos materiales y reducir significativamente el coste y el tiempo asociados a los enfoques experimentales de ensayo y error. En el Centro Vasco de Matemática Aplicada (BCAM), el grupo Modelling and Simulation in Life and Materials Science (MSLMS) de la profesora Elena Akhmatskaya está a la vanguardia del desarrollo de técnicas mejoradas para aumentar la precisión y velocidad de las simulaciones atomísticas. El grupo también está desarrollando técnicas para salvar las múltiples escalas de tiempo y longitud que intervienen en el comportamiento de los materiales más avanzados tecnológicamente, así como explorando el uso de métodos de aprendizaje automático para modelizar, caracterizar y mejorar mejor los materiales objeto de estudio. Las aplicaciones prácticas de estas metodologías son amplias y de gran impacto.

Actualmente, estamos centrados en el desarrollo de baterías más seguras y eficientes, un componente crítico en la transición hacia fuentes de energía sostenibles. Además, colaboramos con empresas locales en la creación de aceros avanzados para el almacenamiento y transporte de combustible de hidrógeno, un prometedor vector energético alternativo. En esta charla hablaremos de nuestros métodos, de cómo los utilizamos en estos proyectos y de las interesantes posibilidades que nos esperan en el campo del diseño computacional de materiales y la innovación.

## Sobre los ponentes

**Henry Andrés Cortés** obtuvo una licenciatura en Física de la Universidad del Quindío, Colombia, y un doctorado en Ciencia y Tecnología en Física de la Universidad Nacional de San Martín, Argentina (2020). Su investigación se centra en la simulación multiescala de materiales energéticos para acelerar su descubrimiento y optimización. Después de doctorarse, se unió al grupo de Simulaciones Moleculares en Materia Condensada de la Universidad de Buenos Aires, Argentina, donde investigó la partición de solutos alcohol-agua dentro de nanoporos utilizando dinámica molecular y modelos coarse-grained. En 2021 se unió al grupo MSLMS de la Prof. Elena Akhmatskaya en BCAM, donde lidera el desarrollo de campos de fuerza y simulaciones atomísticas de electrolitos sólidos, así como en el modelado de interfaces en baterías comerciales de ion litio.

**Mauricio Rincón Bonilla** es Ingeniero Químico con más de diez años de experiencia en métodos multiescala en fisicoquímica computacional. Obtuvo un doctorado en Ingeniería Química (2014) de la Universidad de Queensland (Australia) y se desempeñó como post-doctor en la misma universidad (2014-2016). En 2017 se incorporó al grupo MSLMS de la Profesora Elena Akhmatskaya en BCAM. Aquí, co-lidera un equipo que aplica técnicas avanzadas de simulación en el estudio de materiales para almacenamiento energético. Mauricio obtuvo las becas Ramón y Cajal (2023) y Juan de la Cierva (2019) de la AEI, así como HPC-Europa3 (2018) de la comisión europea. Ha sido co-PI y miembro de equipo de numerosas ayudas nacionales e internacionales relacionadas con el modelamiento de procesos difusivos en sólidos, líquidos interfaces.

