

**UNIVERSIDAD DE BURGOS
ESCUELA DE DOCTORADO**

TESIS DOCTORALES

- TÍTULO:** MULTISCALE DESIGN OF SUPERMATERIALS: FRONTIER FOR HIGH-PERFORMANCE ENGINEERING
- AUTOR:** ORTÚN PALACIOS, JAIME.
- PROGRAMA DE DOCTORADO:** QUÍMICA AVANZADA.
- FECHA LECTURA:** 25/06/2019
- HORA:** 12:00 H
- CENTRO LECTURA:** SALÓN DE ACTOS. FACULTAD DE CIENCIAS. UNIVERSIDAD DE BURGOS.
- DIRECTORES:** SANTIAGO CUESTA LÓPEZ
NICOLÁS ALEJANDRO CORDERO TEJEDOR
- TRIBUNAL:** ROBERTO LUIS IGLESIAS PASTRANA
ROBERTO SERRANO LÓPEZ
SERGIU ARAPAN
LUIS MIGUEL MOLINA MARTÍN
ALFREDO BOL ARREBA
- RESUMEN:** Actualmente, hay una falta de herramientas computacionales para predecir el daño sufrido por los materiales nanoestructurados y su comportamiento en condiciones de trabajo severas como las que se esperan en las paredes de las cámaras de reacción en fusión nuclear o el blindaje de los satélites espaciales. Esta tesis intenta llenar este vacío mediante el desarrollo de un marco de modelado predictivo para optimizar el diseño de materiales que muestren una resistencia mejorada al daño y propiedades mecánicas excepcionales con aplicación en sistemas de ingeniería avanzada. Como enfoque innovador, se propone una metodología multiescala para testar materiales nanoestructurados trabajando en ambientes realistas que combina técnicas como la teoría del funcional de la densidad, dinámica molecular y el método de los elementos finitos (DFT, MD y FEM, respectivamente, por sus siglas en inglés).
- Palabras clave:** modelización multiescala; grafeno; nanocompuestos metálicos multicapa, helio; defectos puntuales.
- Keywords:** multiscale modeling; graphene; nanoscale metallic multilayer composites, helium; point defects.