





Licenciado (2008) en química en la Universidad de Kiev, Ucrania y Doctorado (2013) en Ciencia de Materiales de la Universidad de Tolosa Francia. Realizó una estancia post-doctoral en la Escuela de Mineros de Nancy (Francia, 2013).

En la actualidad, es Profesor Asociado en la Universidad de Marsella, Francia. Su actividad investigadora se centra en los cálculos teóricos ab initio de los materiales metálicos para comprender mejor sus propiedades fundamentales (energéticos, electrónicos, vibracionales, elásticos) y diferentes mecanismos en el nivel microscópico (catálisis heterogéneo, decomposiciones). Fue premiado con el mejor presentaciones en "15 th International DFT conference" (Durham, UK, 2013) y "International conference of Complex Alloys" (Ljubljana, Eslovenia, 2013).

El Dr. D. Kandaskalov es coautor de 8 artículos científicos, publicados en su mayoría en el primer autor.



**Ass, Pr., Dr. Dmytro Kandaskalov**

Grupo RDI del laboratorio IM2NP  
Universidad de Marsella, Francia

## The DFT calculations to understand better the material on the microscopic level

En los últimos tiempos los cálculos basados en transformada de Fourier discreta (DFT) ha devenido una herramienta importante para comprender mejor los fenómenos que no es fácil estudiar experimentalmente en la física, química, ciencia de los materiales etc. Especialmente en la ciencia de los materiales no es evidente investigar unos fenómenos como difusión, formación de defectos, interfaces u otros en el volumen de material a causa de que es un cuerpo sólido.

Esta conferencia está dedicada a describir las utilidades de los cálculos DFT en la investigación de los materiales. Además de presentar los resultados obtenidos, se pretende, por una parte mostrar la amplitud de la información que se podría obtener con el uso de herramientas informáticas, y por otra discutir las limitaciones de estos métodos.

Algunas aplicaciones de interés están relacionadas con:

- Estudio de la formación de vacancias y su difusión en el hierro [1]
- Estudio de los propiedades fundamentales de una fase Fe<sub>16</sub>C<sub>2</sub> en el acero [2]
- Uso de la materia o-Al<sub>13</sub>Co<sub>4</sub> con la estructura próxima a los cuasicristales para formación selectiva de etileno durante la hidrogenación del acetileno [3] (para estudio superficial de la catálisis heterogénea)
- [1] D. Kandaskalov, C. Mijoule, D. Connétable, J. Nucl. Mat. 441, 168 (2013)
- [2] D. Kandaskalov, P. Maugis, Comp. Mat. Sc. 128, 278 (2017) and 129, xxx (2018).
- [3] D. Kandaskalov, J. Ledieu, V. Fournée, É. Gaudry J. Phys. Chem. C 118, 23032 (2014) and 121, 18738 (2017)

