COMPUTATIONAL THERMODYNAMICS of MATERIALS

TO UNDERSTAND MATERIALS PROPERTIES
TO SIMULATE MATERIALS BEHAVIOUR
TO DESIGN NEW MATERIALS

Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale - Università di Genova - DCCI

Gruppo COMAT

presso UNIGE-DCCI

Gabriele Cacciamani

gabriele.cacciamani@unige.it

Lorenzo Fenocchio

lorenzo.fenocchio@edu.unige.it

presso CNR-ICMATE

Sofia Gambaro

Collaborazioni

e possibili stage presso:

PennState Univ. – USA

KTH – Stockholm – S

Univ. Laval – CAN

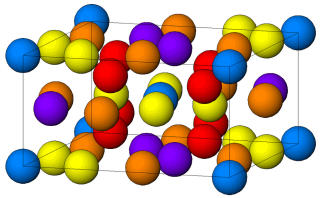
Univ. Bourgogne – F

CNR-ICMATE - GE

Ansaldo Energia - GE

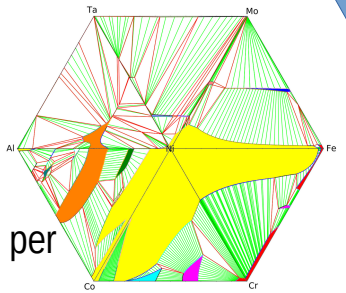
Il gruppo COMAT https://comatresearchgroup.unige.it/ si occupa di modellizzazione di materiali complessi (High Entropy Alloys, Superleghe, Ceramici, ecc.), soprattutto per applicazioni ad alta temperatura. Comportamento, proprietà, interazioni dei materiali sono previsti con metodologie CALPHAD, DFT, ecc. La **modellizzazione** è combinata con **misure sperimentali** di equilibri di fase, interazioni superficiali, ecc.

Possibili argomenti di tesi



Esplorazione di nuove High Entropy Alloys per applicazioni ad alta temperatura

Sviluppo di GHEA (Genoa High Entropy Alloys), database termodinamico per la simulazione e previsione di nuove HEA. (possibili collaborazioni con PennState, KTH)

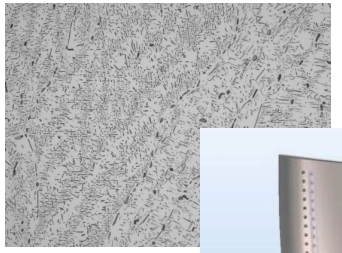


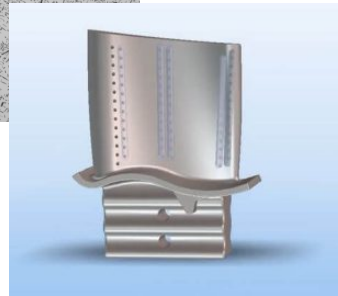
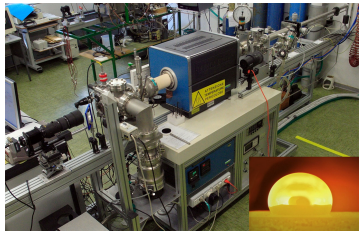
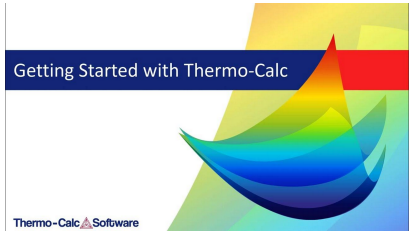
Nuove Refractory HEAs

Modellizzaione e validazione sperimentale di R-HEAs basate su Al-Co-Cr-Fe-Ni con aggiunta di elementi refrattari (Mo,Ta,W). (possibili collaborazioni con CNR-ICMATE, Univ. Bourgogne)

Simulazione del comportamento termochimico di materiali per l'energia

Modellizzazione di materiali impiegati in pale di turbine (superleghe, rivestimenti metallici, ceramici) per la simulazione del comportamento in esercizio. (possibili collaborazioni con Ansaldo Energia)



Interazioni superficiali tra R-HEAs e substrati ceramici / R-HEAs per biomateriali

Indagine combinata sperimentale/computazionale di interazioni superficiali tra R-HEAs e substrati ceramici. (possibili collaborazioni con CNR-ICMATE, Univ. Laval)