

After the COVID-19, SAM re-start organizing scientific-academic events to promote close contact between researchers, students and industry interested in Materials Science fields. Each year, the topics of the conferences include modeling and simulation associated with thermodynamics and kinetics of phase transformations, like the last ones:

- SAM-CONAMET-2022, (<https://interna.gob.ar/sam2022/bienvenida.html>). Mar del Plata, 02 to 06 May 2022
- JIM-2023 (Encuentro de Jóvenes Investigadores en Ciencia y Tecnología de Materiales-JIM). DOI: <https://doi.org/10.33414/ajea.1299.2023>. Córdoba, 07 to 08 September 2023
- CONAMET-SAM / IBEROMET 2023 (<https://conamet-sam.cl/>). Viña del Mar, 05 to 10 November 2023

The next event SAM-CONAMET-2024 (<https://wp.df.uba.ar/sam-conamet2024/>) will be held in Buenos Aires from 6 to 9 August 2024

Gathered below are some topic worked out by Argentine groups on modeling and simulation in thermodynamics, which were presented at recent conferences organized by the SAM-CONAMET.

Topic	Authors	Group
ATOMIC AND MAGNETIC ORDER TRANSITIONS IN Ni-Al-Mn ALLOYS WITH SHAPE MEMORY: MODELING THROUGH MONTECARLO SIMULATIONS	Facundo Arriaga (1,2)*, Alejandro Alés (1,2), Osvaldo Fornaro(1,2,3), Fernando Lanzini (1,2)	(1) Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT), Universidad Nacional Del Centro de La Provincia de Buenos Aires (UNCPBA), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina (2) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina. (3) CIFICEN (UNCPBA-CICPBA-CONICET), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina * farriaga@ifimat.exa.unicen.edu.ar
TRANSICIONES DE ORDEN ATÓMICO Y MAGNÉTICO EN ALEACIONES Ni-Al-Mn CON MEMORIA DE FORMA: MODELADO MEDIANTE SIMULACIONES DE MONTECARLO	Alejandro Alés(1,2)*, Facundo Arriaga (1,2), Fernando Lanzini (1,2)	(1) Instituto de Física de Materiales Tandil (IFIMAT), Universidad Nacional Del Centro de La Provincia de Buenos Aires (UNCPBA), Pinto 399, 7000 Tandil, Argentina (2) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina. * aales@ifimat.exa.unicen.edu.ar
ELECTRONIC PROPERTIES of C-TiO (B) and B-TiO (B) FOR PHOTOCATALYTIC APPLICATIONS DFT	Herman Heffner (1) *, Ricardo Faccio (2), Ignacio López-Corral (1)	(1) Instituto de Química del Sur (INQUISUR, UNS-CONICET), Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina. (2) Área Física & Centro NanoMat, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Av. Gral. Flores 2124, CC1157, CP 11800 Montevideo, Uruguay. * hheffner@inquisur-conicet.gob.ar
EVALUATION BY DFT OF ALUMINUM NITRIDE NANOSURFACE AS A POTENTIAL GAS SENSOR IN HIGH VOLTAGE EQUIPMENT VASP	Alejandro González Fá (1)*, Herman Heffner (1), Ricardo Faccio (2), Ignacio López Corral (1)	(1) Instituto de Química del Sur (INQUISUR, UNS-CONICET), Departamento de Química, Universidad Nacional del Sur, Av. Alem 1253, B8000CPB Bahía Blanca, Argentina. (2) Área Física & Centro NanoMt, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República. Av. Gral. Flores 2124, CC1157, CP 11800 Montevideo, Uruguay. * alejandro.gonzalezfa@uns.edu.ar
STUDY OF THE MECHANICAL BEHAVIOR OF DENSE AND POROUS TITANIA USING MOLECULAR	Juan Ignacio Ramallo(1,2)*, María Cecilia Fuertes(1),	(1) Gerencia Química (CNEA) e Instituto de Nanociencia y Nanotecnología (CNEA-CONICET), CAC, CNEA, Avda. Gral. Paz 1499 (B1650KNA) San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina.

DYNAMICS AND REACTIVE POTENTIAL	Eduardo Bringa(3)	(2) Instituto Sabato (CNEA-UNSAM), CAC, CNEA, Avda. Gral. Paz 1499 (B1650KNA) San Martín, Pcia. de Buenos Aires, Argentina. (3) CONICET y Facultad de Ingeniería, Universidad de Mendoza, Dr. Emilio Descotte 750, (M5500) Mendoza, Argentina. * juanramallo@cnea.gov.ar
ATOMIC SIMULATIONS OF Xe RELEVANT TO THE UMo AS FUEL LAMMPS María Inés Pascuet(1)*, Julián R. Fernández(1,2)*, Viviana Ramunni(1), Roberto Pasianot(1,2)	María Inés Pascuet(1)*, Julián R. Fernández(1,2)*, Viviana Ramunni(1), Roberto Pasianot(1,2)	1) Gerencia Materiales CAC, CONICET/CNEA, Av. Gral Paz 1499, B1650LWP, Gral. San Martín, Argentina. (2) Instituto Sabato UNSAM/CNEA pascuet@cnea.gov.ar
ADSORPTION OF H2O ON THE SURFACE (111) OF c-ZrO2 VASP	Saúl Pérez Beltrán(1), Pablo H. Gargano(2)*, Mariano D. Forti(2), Gustavo E. Ramírez Caballero(3), Perla B. Balbuena(1), Gerardo H. Rubiolo(2,4), Paula R. Alonso(2)	(1) Texas A&M University College of Engineering, 3127 TAMU, College Station, TX 77843-3127 (ZACH), E.E.U.U. (2) Comisión Nacional de Energía Atómica – Universidad Nacional de San Martín, Avenida General Paz 1499, B1650KNA, San Martín, Buenos Aires, Argentina. (3) Escuela de Ingeniería Química, Universidad Industrial de Santander, Cra 27 calle 9, Bucaramanga, Colombia. (4) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Buenos Aires, Argentina. * gargano@cnea.gov.ar
EVALUATION OF THE SEPARATION WORK OF ZIRCONIUM OXIDE TETRAGONAL TO THE METAL ZIRCONIUM SURFACE Ab-initio	Pablo H. Gargano(1), Mariano D. Forti(1), Laura Kniznik(1), Gerardo H. Rubiolo(1,2), Paula R. Alonso (1)*	(1) Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA), Instituto Sabato UNSAM-CNEA), Av. Gral. Paz 1499, B1650 Villa Maipú, Buenos Aires, Argentina (2) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Buenos Aires, Argentina. * pralonso@cnea.gov.ar
MODELING OF PRECIPITATION KINETICS AND CHARACTERIZATION OF AN AL-SI-CU-MG ALLOY FOR CASTING Matcalc	C. Gonzalez(1), R. Wang(2) (3), B. Stauder(4), R. Fernández Gutiérrez(4), S. Sommadossi (1)*, M. C. Poletti(2) (3)	(1) Instituto de Investigación en Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería (IITCI), Universidad Nacional del Comahue, CONICET-UNCo, Buenos Aires 1400, 8300 Neuquén Capital, Argentina. (2) Institute of Materials Science, Joining and Forming, Graz University of Technology, Kopernikusgasse 24/I, A-8010 Graz, Austria. (3) Christian Doppler Laboratory for Design of high-performance alloys by thermomechanical processing, Boltzmanngasse 20/1/3, 1090 Wien, Austria. (4) Nematik Linz GmbH, Zeppelinstraße 24, A-4030 Linz, Austria. * silvana.sommadosi@fain.uncoma.edu.ar
PHASE TRANSFORMATIONS IN TITANIUM ALLOYS TI-17	Emilia Guntsche(1), Ricardo Henrique	(1) Instituto de Investigación en Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería (IITCI CONICET-UNCo), Neuquén, Argentina.

JMatPro	Buzolin(2,3), Mariana Rodrigues (3), Matthias Miltzer(3), Alfred Krumphals(4), Silvana Sommadossi (1) and Maria Cecilia Poletti(2,3)	(2) Christian Doppler Laboratory for Design of High-Performance Alloys by Thermomechanical Processing, Graz, Austria. (3) Institute of Materials Science, Joining and Forming, Graz University German of Technology, Graz, Austria. (4) Advanced Materials and Process Engineering Laboratory, University of British Columbia, Vancouver, Canada. (5) Voestalpine BÖHLER Aerospace GmbH & Co KG, Kapfenberg, Austria. * silvana.sommadossi@fain.uncoma.edu.ar
EFFECT OF Cr ON PHASE STABILITY, PROPERTIES STRUCTURAL AND THERMODYNAMICS IN Fe-Mn ALLOYS	Lina Maria Guerrero (1,2)*, Paulo La Roca (2,3), Alberto Baruj (2,4), Marcos Sade (2,4)	(1) Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Rosario, Santa Fé, Argentina. (2) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Buenos Aires, Argentina. (3) Instituto para Materiales Avanzados (INAMAT), Universidad Pública de Navarra, Campus de Arrosadía, Pamplona, España. (4) Centro Atómico Bariloche - Instituto Balseiro (CNEA), Bariloche, Rio Negro, Argentina. * guerrerosalazar@ifir-conicet.gov.ar