



## GRUPO DE INVESTIGACIÓN

El **Grupo MATERIALIA** mantiene una posición de liderazgo a nivel español, una importante visibilidad internacional y una amplia red de colaboraciones a nivel mundial en el campo de las transformaciones de fase en aceros. Su principal objetivo es comprender la relación entre el procesado termo-mecánico del acero, su estructura y sus propiedades mecánicas (entre otras). En este sentido, investigan los mecanismos de transformación, caracterizan la estructura del material desde la micro a la nano-escala y desarrollan herramientas de simulación que permiten describir la física y la química que gobiernan los procesos de transformación del acero y sus propiedades en condiciones reales de uso. Además, este Grupo mantiene una estrecha relación con la industria metalúrgica para el diseño y desarrollo de aceros para aplicaciones muy exigentes. Esta relación con la industria, especialmente fructífera en el desarrollo de aceros bainíticos nano-estructurados, les ha permitido validar muchas de sus herramientas y técnicas de diseño computacional.

Actualmente, contribuyen a encontrar la respuesta a los siguientes RETOS científicos con gran motivación/excitación e impacto social:

- Transformación del proceso siderúrgico para reducir las emisiones de CO<sub>2</sub>.
- Desarrollo de aleaciones para una industria 4.0. basada en la fabricación aditiva.
- Nuevos procesos avanzados de fabricación y unión de metales.
- Desarrollo de nuevos aceros para el transporte y la generación eléctrica renovable.
- Desarrollo de nuevas aleaciones resistentes a altas temperaturas.

Más información: <https://www.cenim.csic.es/materialia/>



El grupo **MATERIALIA** está formado por 1 Profesor de investigación, 3 Investigadores científicos, 3 Científicos titulares y un postdoc senior. Todos ellos han participado en proyectos regionales, nacionales e internacionales, en pequeños y grandes consorcios, y a menudo como coordinadores de estos proyectos.

Además, el grupo cuenta actualmente con 8 estudiantes de doctorado y dos técnicos (y acoge con frecuencia a varios visitantes internacionales), que contribuyen al progreso científico general de los proyectos que se llevan a cabo en el grupo. Se celebran reuniones mensuales para difundir los avances dentro del equipo y se producen interacciones cruzadas e intercambios de conocimientos entre todos los miembros de manera habitual.



## RESULTADOS PREVIOS DEL EQUIPO DE INVESTIGACIÓN

El **grupo MATERIALIA**, durante los últimos 15 años, ha participado activamente en proyectos relacionados en el campo de la energía, y específicamente en el campo de los aceros ferrítico-martensíticos y aceros ODS, diseñados para diferentes componentes en sistemas de generación de energía en ambientes extremos. La mayor parte de este trabajo se ha realizado en colaboración con los miembros de este consorcio. Como prueba de esta larga colaboración en el campo de la energía, se enumeran los proyectos anteriores:

- ENE2006-15170-C02 "Estudio de los procesos de recristalización en superaleaciones base Fe aleadas mecánicamente con óxido de ytrio para tubos de intercambiadores de calor en centrales eléctricas de biomasa"
- ENE2009-13766-C04 "Desarrollo de superaleaciones de base Fe reforzadas mecánicamente con óxido de itrio aleado para su aplicación en ventanas de blancos de sistemas de accionamiento acelerado"
- MAT2013-47460-C5 "Aleaciones base-Fe resistentes a alta temperatura para sistemas de generación de energía bajo condiciones extremas"
- MAT2016-80875-C3-R "Aplicación de las aleaciones base-Fe nanoestructuradas como solución sostenible para los sistemas de generación de energía de alta eficiencia"
- PID2019-109334RB-C31-MAT "Aceros MARTensíticos FORMadores de Alúmina para sistemas de generación de energía".

Los resultados de estos proyectos, aunque orientados a rutas de producción convencionales, representan el conocimiento base para trabajar en acero G91. El procesado AM produce de forma natural estructuras de grano muy fino (debido a las rápidas velocidades de enfriamiento) como las obtenidas por rutas de producción convencionales, y dicho conocimiento será de suma importancia para afrontar la precipitación de MX en G91 producido por AM. Adicionalmente, CENIM-CSIC (en colaboración con CIEMAT) lidera en este momento el diseño de aleaciones en el proyecto internacional INNUMAT de la convocatoria Euratom para desarrollar y cualificar aceros y aleaciones de alta entropía en el campo de la energía de fisión y fusión. Este proyecto normalizará el uso de muestras de pequeño tamaño para probar las propiedades mecánicas que también se utilizarán en este proyecto. Además, el grupo **MATERIALIA**, en el ámbito de la fabricación aditiva, ha estado ejecutando un proyecto (Mat4.0 - S2018/NMT-4381), que trata del diseño y desarrollo de nuevas aleaciones de alta entropía para fabricación aditiva (fusión láser en lecho de polvo). El diseño de aleaciones, los parámetros de impresión y la caracterización de nuevas aleaciones han formado parte de sus tareas. Se ha realizado un profundo análisis sobre los defectos encontrados en el procesado, especialmente poros, grietas y la posible asociación de estos últimos con la segregación. Dicha segregación se ha correlacionado con la historia térmica aplicada y la termodinámica de solidificación del material, proporcionando un amplio conocimiento en la defectología de las muestras. Por último, cabe destacar la colaboración del grupo **MATERIALIA** dentro de la plataforma de fabricación aditiva FAB3D (<https://pti-fab3d.csic.es/>) del CSIC para el estudio del impacto de los parámetros de procesado mediante fusión láser en lecho de polvo en la microestructura de aceros maraging, aceros de herramientas y aceros inoxidables inoculados con partículas, de la que se han publicado recientemente dos publicaciones de alto impacto. Esto a su vez ha atraído estudiantes en el marco del proyecto "Multi-scale characterization of steel structures manufactured by selective laser melting" de Erasmus+ 'Student Mobility for Traineeships, de diferentes universidades como Kaunas University of Technology (Lituania), University of Crete (Grecia), Politecnico di Milano (Italia), Università di Pisa (Italia) y TU Bergakademie Freiberg Alemania.



## MARCO EN EL QUE SE DESARROLLA EL PROGRAMA DE FORMACIÓN

El CENIM-CSIC es el único instituto de investigación del CSIC dedicado íntegramente a la investigación del metal. CENIM-CSIC cubre toda la cadena de valor del metal, desde la materia prima hasta las propiedades de uso de los productos finales para los diferentes sectores industriales. Siempre bajo una perspectiva de economía circular y en línea con los objetivos de desarrollo sostenible. El grupo **MATERIALIA** tiene más de 30 años de experiencia trabajando en transformación de fase sólido-sólido, caracterización microestructural y mecánica avanzada, así como modelización y simulación de termodinámica y comportamiento mecánico de materiales. En los últimos años, este grupo se ha especializado en el campo de la Fabricación Aditiva, y forma parte de la Plataforma FAB3D, como se ha comentado anteriormente, que es una red excepcional y única de la que un estudiante de doctorado se beneficiaría, entrando en contacto con investigadores experimentados y centros de investigación e innovación del campo.

El grupo **MATERIALIA** ha publicado más de 150 Publicaciones en revistas de prestigio en los últimos 5 años, y ha presentado unas 50 comunicaciones en congresos internacionales y nacionales, como resultado del trabajo de investigación realizado en más de 22 Proyectos Nacionales e Internacionales. El grupo ha establecido colaboraciones estables en el Laboratorio Nacional de Los Álamos (LANL) y en el Laboratorio Nacional de Oak Ridge (ORNL) en EEUU, que ha formalizado el Programa SHaRE, un Programa de Intercambio de Personal, desde el que se facilita al Personal del CENIM-CSIC el acceso a instalaciones de primer nivel mundial. En este proyecto está prevista la caracterización de la nanoestructura de los aceros impresos utilizando tomografía de sonda atómica del Laboratorio Nacional de Oak Ridge. Asimismo, existen colaboraciones fluidas con muchas instituciones de investigación de prestigio como con Culham Center for Fusion Energy (Reino Unido), Warsaw University of Technology (Polonia), Southampton University (Reino Unido), Delft University of Technology (Holanda), National Taiwan University (Taiwán), Helmholtz-Zentrum at Dresden-Rossendorf (Alemania) y empresas del sector siderúrgico como Thyssen Stahl AG (Alemania), ArcelorMittal (Francia-Alemania) y Bosch GmbH (Alemania). Dispone por tanto del entorno adecuado para el desarrollo de una carrera científica de los doctorandos donde se garantizan publicaciones de alto impacto, actividades de difusión y acceso a una amplia variedad de conocimientos para su proyección internacional. Todos los doctorandos anteriores han realizado comisiones de servicio y estancias cortas en estas u otras instituciones. La investigación prevista en este proyecto abarca la caracterización avanzada de la microestructura y propiedades mecánicas utilizando distintas técnicas que permitirán al doctorando adquirir destreza en su uso. El estudiante tendrá la oportunidad de desarrollar una carrera (científica, I+D o ingeniería) en Fabricación Aditiva, un tema emergente y de alto interés para futuros puestos post-doctorales en todo el mundo, acceso de becas/contratos (nacionales o internacionales) o diversas industrias tecnológicas.

Por último, mencionar que existe un fuerte compromiso y vocación formativa en este grupo. Los doctorandos presentes y pasados del grupo **MATERIALIA** han presentado sus tesis en distintas universidades: la Universidad Complutense de Madrid, la Universidad Internacional Menéndez Pelayo o la Universidad Carlos III de Madrid. En los últimos 10 años se han defendido 9 tesis doctorales dirigidas en el grupo, 5 de las cuales estaban realizadas en el marco de proyectos nacionales I+D+i, y hay otras 8 tesis doctorales en curso. La mayoría de los estudiantes de doctorado que han pasado por el grupo se encuentran trabajando ahora en empresas (AcelorMittal), Centros Tecnológicos (Lortek), universidades (TUDelft, UCM), centros de investigación (Colorado School of Mines). Y algunos han vuelto al CENIM y están desarrollando sus carreras científicas en este grupo de investigación después de una etapa post-doctoral en centros de investigación en el extranjero.



**CVA DE LOS INVESTIGADORES  
PRINCIPALES Y/O MÁS DIRECTAMENTE  
IMPLICADOS EN EL PROYECTO**

**CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)**

**IMPORTANT** – The Curriculum Vitae cannot exceed 4 pages. Instructions to fill this document are available in the website.

**Part A. PERSONAL INFORMATION**

First name	David Marcos		
Family name	San Martín Fernández		
Gender (*)	Male	Birth date (dd/mm/yyyy)	28/03/1973
Social Security, Passport, ID number			51415780Q
e-mail	<a href="mailto:dsm@cenim.csic.es">dsm@cenim.csic.es</a>	<a href="https://www.cenim.csic.es/materialia/">https://www.cenim.csic.es/materialia/</a>	
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0001-6720-3599		

**A.1. Current position**

Position	Científico Titular		
Initial date	18/07/2008		
Institution	Consejo Superior de Investigaciones Científicas		
Department/Center	Physical Metallurgy	CENIM	
Country	Spain	Teleph. number	915538900 (445285)
Key words	Steels, high entropy alloys, thermo-mechanical treatments, phase transformations, microstructural & mechanical characterization, kinetic modelling.		

**A.2. Previous positions (research activity interruptions, indicate total months)**

Period	Position/Institution/Country/Interruption cause
22/09/2021 – to date	Editor-in-Chief Revista de Metalurgia
18/07/2008 – to date	Tenured Scientist (CENIM-CSIC)
16/03/2008 - 18/07/2008	Postdoctoral Researcher (JAE Grant)/CENIM-CSIC/Spain
12/02/2008 - 15/03/2008	Postdoctoral Researcher (contract)/ CENIM-CSIC/Spain
01/04/2004 - 12/01/2008	Postdoctoral Researcher (contract)/TUDelft/Netherlands
01/02/1998 - 15/10/2003	PhD student (grant/contract)/CENIM-CSIC/Spain

**A.3. Education**

PhD, Licensed, Graduate	University/Country	Year
Bachelor Physics	Autonomous University of Madrid/Spain	1997
PhD Physics	Complutense University of Madrid/Spain	2003

**Part B. CV SUMMARY** (max. 5000 characters, including spaces)

David San-Martin obtained his Bachelor in Physics from the Autonomous University of Madrid in 1997. In 1998, he joined the Materialia group (Physical Metallurgy department, CENIM) to work on the characterization and modelling of solid-solid phase transformation of microalloyed steels under the supervision of Prof. Carlos García de Andrés. He gained his PhD in Physics (Materials Science, Cum Laude) for this research in 2003 from the Physics Faculty of the Complutense University of Madrid.

In 2004, he joined the Faculty of Aerospace Engineering in the Delft University of Technology (NOVAM group headed by Prof. Sybrand van der Zwaag, The Netherlands). As a postdoctoral researcher, he was involved in the characterization of: i) Metastable semi-austenitic stainless steels, studying its metastability, the martensitic transformation, and precipitation reactions. ii) Thermo-mechanical behaviour of beta-phase metastable titanium alloys, optimizing the processing route and the strength-ductility balance. iii) Production by hot-extrusion and microstructural/mechanical characterization of novel aluminium matrix composites.

In 2008, David San Martin was awarded a JAE-doc fellowship and re-joined the Materialia research group CENIM and since July 2008 he is a permanent staff scientist at this research centre. During these years he has developed his activities mostly (but not only) on the characterization of solid-solid phase transformations in different types of steels, titanium alloys,





aluminium metal matrix composites and, more recently on high entropy alloys HEAs. He has been involved since 2019 in the study of additive manufacturing (AM) of HEAs by LPBF via the participation as PI in a 4 year project coordinated by IMDEA Materials and funded by the Autonomous Community of Madrid (CAM). He has strong collaborations with institutions in UK to investigate AM-LPBF of austenitic steels. He has led or participated as part of the research team in more than 30 national/international projects or contracts with industry. He has co-authored 76 publications in international peer-reviewed journals (*Acta Mater.*, *Scripta Mater.*, *Mater. Sci. Eng. A*, *Mater. Design*, *Metals*...) which have been cited (Scopus: 1543; Google: 2046) times and has an h-index of (Scopus: 22; Google: 26). In addition, he has co-authored 6 chapter books (Taylor & Francis, Springer Nature, MPDI, IntechOpen), and has participated in more than 70 contributions to national/international conferences. He has supervised or co-supervised several (17) PhD(4)/Mater(5)/Undergraduate(8) thesis projects and has hosted foreign internships of several (6) PhD students from institutions worldwide. Finally, he has participated in national and international committees for the evaluation of scientific proposals and academic positions in Spain, Sweden, Poland and Denmark. He is a member of the Editorial Board of the scientific journal *Metals* (MPDI) and the Editor-in-Chief of the *Revista de Metalurgia* (Editorial CSIC). As a reviewer, he has actively participated in the peer-to-peer process of more than 100 papers. He is also the representative of CENIM in 3 AENOR quality certification committees since January 2021: i) CTC-017 – Productos de Acero para Hormigón (Steel Products for Concrete); ii) CTC-017AP – Armaduras Pasivas de Acero para Hormigón (Passive Steel Reinforcements for Concrete); iii) CTC-046 – Perfiles, barras y Chapas de Acero Laminado en Caliente para Aplicaciones Estructurales (Hot Rolled Steel Profiles, Bars and Sheets for Structural Applications). He scientific activities have been recognized via the positive evaluation of 4 “Sexenios” and 4 “Quinquenios” (one more currently under evaluation in 2023).

## **Part C. RELEVANT MERITS** (sorted by typology)

### **C.1. Publications** (see instructions)

- Feiyu Zhao, Lucía Morales-Rivas, Qian Yu, Guodong Wang, Francisca G. Caballero, **David San-Martin**, **2023**, “Unforeseen influence of the prior austenite grain size on the mechanical properties of a carbide-free bainitic steel”, *Mater. Sci. & Eng. A* 881, 145388.
- Hossein Eskandari Sabzi, Xiao-Hui Li, Chi Zhang, Hanwei Fu, **David San-Martín**, Pedro E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, **2022**, “Deformation twinning-induced dynamic recrystallization during laser powder bed fusion”, *Scripta Materialia*, 207, 114307.
- **David San Martin**, C. Celada Casero, J. Vivas, C. Capdevila, **2021**, “Stainless Steels”, High Performance Ferrous Materials, Chapter 11, Ed by Radhakanta Rana, Springer, Cham, Print ISBN 978-3-030-53824-8, Online ISBN 978-3-030-53825-5.
- Hossein Eskandari Sabzi, Everth Hernandez-Nava, Xiao-Hui Li, Hanwei Fu, **David San-Martín**, Pedro E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, **2021**, “Strengthening control in laser powder bed fusion of austenitic stainless steels via grain boundary engineering”, *Materials & Design*, 212, 110246.
- Isaac Toda-Caraballo, J.A. Jiménez, S. Milenkovic, J. Jimenez-Aguirre, **David San-Martín**, **2021**, “Microstructural stability of the CoCrFe<sub>2</sub>Ni<sub>2</sub> High Entropy Alloys with additions of Cu and Mo”, *Metals*, 11, 1994.
- Yong Li, **David San Martín**, Jinliang Wang, Chenchong Wang, Wei Xu, **2021**, “A review on the thermal stability of metastable austenite in steels: martensite formation”, *Journal of Materials Science and Technology*, 91, 200–214.
- Li Yong, Shan Chen, Chenchong Wang, **David San Martin**, Wei Xu, **2020**, “Modeling retained austenite in Q&P steels accounting for the bainitic transformation and correction of its mismatch on optimal conditions”, *Acta Materialia*, 188, 528-538.
- C. Celada-Casero, B.M. Huang, J.-R. Yang and **D. San-Martin**, **2019**, “Microstructural mechanisms controlling the mechanical behaviour of ultrafine grained martensite/austenite microstructures in a metastable stainless steel”, *Materials and Design*, 181, 107922.



- J. Vivas, D. de-Castro, J.D. Poplawsky, **D. San-Martin**, C. Capdevila, **2019**, “Direct observation of creep strengthening nanoprecipitate formation in ausformed ferritic/martensitic steels”, **Scripta Materialia** 164, 76-81.
- Javier Vivas, Carlos Capdevila, Eberhard Altstadt, Mario Houska, Marta Serrano, David De-Castro, **David San-Martin**, **2018**, “Effect of Ausforming Temperature on Creep strength of G91 investigated by means of Small Punch Creep Tests”, **Materials Science and Engineering A**, 728, 259-265.
- Wen Cui, **David San-Martín**, Pedro E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, **2017**, “Towards efficient microstructural design and hardness prediction of bearing steels — an integrated experimental and numerical study”, **Materials & Design**, 133, 464-475.
- C. Celada-Casero, B.M. Huang, M.M. Aranda, J.-R. Yang, **D. San Martin**, **2016**, “Mechanisms of ultrafine-grained austenite formation under different isochronal conditions in a cold-rolled metastable stainless steel”, **Materials Characterization**, 118, 129–141.
- C. García de Andrés, C. Capdevila y **D. San Martin**, **2016**, “Structural Steels”, Encyclopedia of Iron, Steel, and Their Alloys, Ed. By Prof. Rafael Colas & George Totten, Taylor and Francis Group, pp. 3388-3409. Print ISBN: 978-1-4665-1104-0; eBook ISBN: 978-1-4665-1105-7.
- B. Kim, E. Boucard, T. Sourmail, **D. San Martín**, N. Gey, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, **2014**, “The influence of silicon in tempered martensite: understanding the microstructure-properties relationship in 0.5-0.6 wt% C steels.”, **Acta Materialia**, 68, 169-178.

**C.2. Congress**, indicating the modality of their participation (invited conference, oral presentation, poster)

- Javier Vivas, **David San-Martin**, David De-Castro, Eberhard Altstadt, Mario Houska, Rebeca Hernández, Marta Serrano, Jonathan D. Poplawsky, E. Urones-Garrote, Carlos Capdevila, “Creep Strength Improvement in 9Cr Ferritic/Martensitic Steels Via MX Precipitation Optimization by Thermomechanical Treatments”, International Symposium on Metal Processing (ISMP2021), August 24-26, 2021, Shenyang, China. ([www.ismp2021.com](http://www.ismp2021.com)). Invited Oral Presentation.
- David De-Castro, Adriana Eres-Castellanos, Javier Vivas, Francisca G. Caballero, **David San-Martín**, Carlos Capdevila, “Description of bainite morphologies during anisothermal transformation in a microalloyed steel”, European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes, EUROMAT, 12-16 September 2021, Graz, Austria. Oral Presentation
- Carola Celada-Casero, Esteban Urones-Garrote, Jesús Chao, Jen-Ren Yang, Isaac Toda-Caraballo & **David San-Martin**, “Tailoring the mechanical properties through control heat treatments in a precipitation hardening metastable stainless steel”, 10th European Stainless Steel Conference and 6th European Duplex Stainless Conference & Exhibition (ESSC & Duplex 2019), 30 September – 2 October 2019, Vienna, Austria ([www.stainlesssteel2019.org](http://www.stainlesssteel2019.org)). Oral Presentation. Invited Keynote Lecture.

**C.3. Research projects**, indicating your personal contribution. In the case of young researchers, indicate lines of research for which they have been responsible.

- Project Title: Aceros Diseño y fabricación de un acero Sostenible resistente a alta temperatura por fabricación aditiva (DESEADA). Funding body: Ministerio de Ciencia e Innovación (Proyectos I+D+i 2022). Reference: PID2022-138332NB-C41. Participants: CENIM-CSIC (Coordinador), UC3M, CIEMAT, AIMEN. Role: Principal Investigator of CENIM with Dr. Carlos Capdevila. Financiación CENIM: 222.5 k€ (Total: 578.75 k€). Dates: 09.2022 – 08.2026.
- Project Title: Aceros MARTensíticos FORMadores de Alúmina para sistemas de generación de energía (AFORMAR). Funding body: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (Proyectos I+D+i 2019). Reference: PID2019-109334RB Participants: CENIM-CSIC (Coordinator, Dr. Carlos Capdevila/Dr. Isaac Toda), UC3M, CIEMAT.



Role: Member of the research team of CENIM.

Budget CENIM: 145.2 k€ (Total: 399.3 k€). Dates: 06.2020 – 05.2023.

- Project Title: Fabricación Inteligente de Materiales Avanzados para el Transporte, la Energía y la Salud (MAT4.0-CM). Funding body: Comunidad de Madrid. Call: Programas de I+D en Tecnología 2018. Reference: P2018/NMT4381. Participants: Fundación IMDEA Materiales (Coordinador), CENIM-CSIC, FIDAMC, IdiPAz-PITI3D, UC3M-GPP, UPM-GRIAL, UPM-MIDAS, UPM-MMEAN.

Project Coordinator: Dr. Jon Molina Aldareguía (IMDEA).

Role: Principal Investigator CENIM.

Budget CENIM: 151 K€ (Total: 934 k€. Dates: Ene 2019 – April 2023.

- Project Title: Aleaciones base-Fe resistentes a alta temperatura para sistemas de generación de energía bajo condiciones extremas (Ferro-GENESYS). Subproject title (CENIM): Aceros ferrítico-martensíticos 9-12%Cr avanzados por medio de la optimización de su procesado termomecánico. Funding body: Ministerio de Economía y Competitividad. Plan Nacional I+D, Programa “EXCELENCIA”, subprograma de generación del conocimiento 2013. Reference: MAT2013-47460-C5-1-P.

Participants: CENIM-CSIC (Coordinador), UC3M, IMDEA, CIEMAT, CEIT.

Role: Member of the research team of CENIM.

Budget CENIM: 178.529 €. Dates: 1.2014 – 12.2016.

- Project Title: Aplicación de las aleaciones base-Fe nanoestructuradas como solución sostenible para los sistemas de generación de energía de alta eficiencia (Ferro-NESS). Project Title (CENIM): Fe-base nanostructured alloys as sustainable solution for future energy generation systems. Funding body: Ministerio de Economía y Competitividad. Convocatoria: Plan Nacional I+D+i, Programa Retos de la Sociedad; Convocatoria 2016. Reference: MAT2016-80875-C3-1-R.

Participants: CENIM (coordinador), UC3M, CIEMAT.

Role: Member of the research team of CENIM.

Budget CENIM: 121.000 € (+ contrato FPI). Dates: 01.2017 – 31.2019.

- Project Title: Prediction of stainless steel performance after forming and finishing (PressPerfect). Funding body: RFCS Programme 2010-2013 (Commission of the European Communities). Reference: RFSR-CT-2012-00021.

Participants: Philips (Países Bajos), Sandvik AB (Suecia), M2i (Países Bajos), Universidad Técnica de Dinamarca (Dinamarca), CENIM-CSIC (España), Universidad Técnica de Lulea (Suecia).

Role: Principal Investigator CENIM.

Budget CENIM: 154 k€ (Total: 1.337 k€). Dates: 09.2012 - 09.2015.

- Project Title: Estabilidad térmica y mecánica de la austenita en aceros inoxidables metaestables austeníticos endurecibles por precipitación: influencia de la nano y microestructura (INOXEMTA). Funding body: Ministerio de Economía y Competitividad. Plan Nacional I+D+I (2008-2011). Reference: MAT2010-19522.

Role: Principal Investigator.

Budget: 72.6 k€. Dates: 1.2011 - 12.2013.

#### **C.4. Contracts, technological or transfer merits**

- Title: Complex steel microstructures for wire applications. Company: NV Bekaert SA (Bélgica). Participants: CENIM-CSIC, Universidad de Cambridge (Reino Unido)

Role: Member of the research team of CENIM. IP: Carlos García-Mateo

Budget: 330.976 €. Dates: 15/11/2015 -15/11/2018.

- Title: Assessment of Properties after Heat Treatments on Stainless Steel for Cutting Applications. N° VATC: 20171899

Company: Leica Biosystems Eisfeld GMBH. Participants: CENIM-CSIC

Role: Principal Investigator.

Budget: 10.600 €. Dates: 02/2017-02/2019.

- Title: Study and modelling of solid-solid phase transformations in steels.

Company: USIMINAS S.A., Brasil. Participants: CENIM-CSIC

Role: Principal Investigator with Dr. Carlos Capdevila.

Budget: 111.693,40 €. Dates: 05.2010 – 11. 2011



Fecha del CVA	01/05/2023
---------------	------------

## Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	Carlos		
Apellidos	Capdevila Montes		
Sexo	Hombre	Fecha de Nacimiento	09/05/1969
DNI/NIE/Pasaporte	11812389A		
URL Web			
Dirección Email	ccm@cenim.csic.es		
Open Researcher and Contributor ID (ORCID)	0000-0002-1869-4085		

### A.1. Situación profesional actual

Puesto	Director de ICU		
Fecha inicio	2021		
Organismo / Institución	Consejo Superior de Investigaciones Científicas		
Departamento / Centro	/ Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas (CENIM)		
País		Teléfono	
Palabras clave			

### A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora - indicar meses totales, según texto convocatoria-)

Periodo	Puesto / Institución / País
2015 - 2021	Vicedirector Científico / Consejo Superior de Investigaciones Científicas
1998 - 2001	Research Associated / University of Cambridge

## Parte B. RESUMEN DEL CV

Carlos Capdevila Montes obtained a PhD in Physics at Universidad Complutense de Madrid in 1999 and its current position is Senior Researcher at National Center for Metallurgical Research (CENIM-CSIC). He was formerly Deputy Director for Science (2015-2021) and currently is Director of CENIM. Carlos Capdevila research topics include phase transformations in steels, characterisation of the microstructure and optimisation of the mechanical properties of steels, thermodynamics and kinetics modelling of phase transformations in steels, and design of steels for industrial applications with high requirements. Before joining CENIM-CSIC in 2002, Carlos Capdevila was Research Associate (1998-2001) in the Phase Transformation Research Group lead by Prof. Bhadeshia at the Department of Materials Science and Metallurgy of the University of Cambridge-UK. In this post-doctoral position, he initiated in the research of heat-resistant steels for biomass indirect Combined Cycle Gas Turbine (CCGT) power generation systems. Once Carlos Capdevila joins CENIM, he becomes part of the solid-solid phase transformation group (MATERIALIA) leading the research line on the development of heat-resistant steels for its application in power generation systems under extreme conditions. In this line of research, the development of steels is explored through alloy design, microstructural optimization and through the controlled dispersion of nano-sized ceramic particles; applying technologies ranging from powder metallurgy to controlled thermomechanical processing. These concepts allowed assembly a consortia of research centers (CIEMAT, IMDEA Materiales, etc.), Universities (Universidad Carlos III de Madrid and Polytechnic University of Catalunya) and several steel-sector companies (ArcelorMittal, Thyssen Krupp, etc.) to collaborate in several national and European work-frame projects (see C2 section) to develop strategies that improves the creep performance of conventional 9-12Cr steels and FeCrAl steels for applications in the Generation IV fission nuclear reactors, power plants of different technologies like fossil fired boiler/steam turbine, and Concentrating Solar Power (CSP). Carlos Capdevila played the role of coordinator and/or IP for CENIM-CSIC subprojects (i.e., coordinator of 5 projects, PI in 6 international projects and 14 national projects). Carlos Capdevila carried out activities of knowledge transfer in the framework of 35

contracts with private sector. Within the framework of Industry 4.0 Carlos Capdevila participates in an ambitious project to investigate the role of AM as a technological disruption to fight against rural depopulation and social and spatial inequalities aiming at bring employment back to rural places. Driven by the urgent need of steelmaking industry to reduce its carbon footprint Carlos Capdevila is participating in the breakthrough HEROES project (TED2021-131623B-I00) in the framework of Next-Generation funds from EU. The main goal of this project is to explore the potential of hydrogen to reduce the iron oxides and other compounds in EAF steel slags and rolling mill scales, providing: 1) ideal systems for the investigation of the hydrogen reduction of wüstite, the rate-limiting process in the H-DR EAF route; and 2) a sustainable alternative to efficiently recover the iron lost to the slag due to incomplete reduction of H-DR process.

AEI EVALUATION CRITERIA FOR INTERNAL PROMOTION IN OPIS NOT INCLUDED IN CVA FECYT-FORMAT:

- (Apartado B1) Carlos Capdevila accredited 4 sexenios by CNEAI and 5 quinquenios by CSIC
- (Apartado B2.1) Carlos Capdevila is co-coordinator of PTI FAB3D (Plataforma Temática Interdisciplinar de Fabricación Aditiva at CSIC)
- (Apartado B2.2) Carlos Capdevila has supervised 7 PhDs and 8 MPhil
- (Apartado B3) 30 months postdoctoral stay at Univ. of Cambridge (UK), and several short stays in Oak-Ridge National Laboratory (USA). Carlos Capdevila has organized 3 international symposiums in the framework of EUROMAT and TMS international conferences

## Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

### C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y); posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

- 1 **Artículo científico.** A. Eres-Castellanos; A. Santana; D. De-Castro; J.A. Jimenez; R. Rementeria; C. Capdevila; F.G. Caballero. (6/). 2022. Effect of processing parameters on texture and variant selection of as-built 300 maraging steel processed by laser powder bed fusion. *Scientific Reports*. 12-1. SCOPUS (0)
- 2 **Artículo científico.** J. Vivas; J.D. Poplawsky; D. De-Castro; D. San-Martín; C. Capdevila. (5/ ). 2021. Examining the creep strengthening nanoprecipitation in novel highly reinforced heat resistant steels. *Materials Characterization*. 174. SCOPUS (0)
- 3 **Artículo científico.** J. Vivas; D. De-Castro; E. Altstadt; M. Houska; D. San-Martín; C. Capdevila. (6/). 2020. Design and high temperature behavior of novel heat resistant steels strengthened by high density of stable nanoprecipitates. *Materials Science and Engineering A*. 793. SCOPUS (2)
- 4 **Artículo científico.** R. Rementeria; R. Domínguez-Reyes; C. Capdevila; C. Garcia-Mateo; F.G. Caballero. (3/). 2020. Positron Annihilation Spectroscopy Study of Carbon-Vacancy Interaction in Low-Temperature Bainite. *Scientific Reports*. 10-1. SCOPUS (2)
- 5 **Artículo científico.** J. Vivas; D. De-Castro; J.D. Poplawsky; D. San-Martín; C. Capdevila. (5/ ). 2019. Direct observation of creep strengthening nanoprecipitate formation in ausformed ferritic/martensitic steels. *Scripta Materialia*. 164, pp.76-81. SCOPUS (6)
- 6 **Artículo científico.** J. Vivas; C. Capdevila; E. Altstadt; M. Houska; M. Serrano; D. De-Castro; D. San-Martín. (2/). 2018. Effect of ausforming temperature on creep strength of G91 investigated by means of Small Punch Creep Tests. *Materials Science and Engineering A*. 728, pp.259-265. SCOPUS (10)
- 7 **Artículo científico.** C. Capdevila; M.M. Aranda; R. Rementeria; J. Chao; E. Urones-Garrote; J. Aldazabal; M.K. Miller. (1/). 2016. Strengthening by intermetallic nanoprecipitation in Fe-Cr-Al-Ti alloy. *Acta Materialia*. 107, pp.27-37. SCOPUS (11)

- 8 **Artículo científico.** M.M. Aranda; R. Rementeria; J. Poplawsky; E. Urones-Garrote; C. Capdevila. (5/). 2015. The role of C and Mn at the austenite/pearlite reaction front during non-steady-state pearlite growth in a Fe-C-Mn steel. Scripta Materialia. 104, pp.67-70. SCOPUS (14)
- 9 **Artículo científico.** C. Capdevila; M.K. Miller; J. Chao. (1/). 2012. Phase separation kinetics in a Fe-Cr-Al alloy. Acta Materialia. 60-12, pp.4673-4684. SCOPUS (42)
- 10 **Capítulo de libro.** [1]: (Carlos Capdevila) Autores/as (p. o. de firma) [2]: (Rosalía Rementeria) Autores/as (p. o. de firma). 2021. Nanostructured Steels. High-Performance Ferrous Alloys. Springer. pp.--327 - 387. ISBN (ISBN) 978-3-030-53824-8.

## C.2. Congresos

- 1 /as (p. o. de firma) [1]: (Javier Vivas) Autores/as (p. o. de firma) [2]: (Carlos Capdevila) Autor. Improving the Creep Strength of 9Cr Ferritic/martensitic Steels via MX Precipitation Optimization. 6th International Conference on ThermoMechanical Processing. The State Key Lab of Rolling and Automation - Northeastern University. 2022. Congreso.
- 2 /as (p. o. de firma) [1]: (J. Vivas) Autores/as (p. o. de firma) [2]: (; M-Hernandez-Mayoral) Autores/as (p. o. de firma) [3]: (M Serrano) Autores/as (p. o. de firma) [4]:. Effect of ausforming temperature on TMT optimization in G91. European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT 2017). FEMS Federación Europea de Materiales. 2017. Congreso.
- 3 /as (p. o. de firma) [1]: (R. Rementeria) Autores/as (p. o. de firma) [2]: (C. Capdevila) Autores/ . INFLUENCE OF PLASTIC DEFORMATION ON RECRYSTALLIZED MICROSTRUCTURE OF Fe-Cr-Al ODS ALLOY. International Conference on PROCESSING & MANUFACTURING OF ADVANCED MATERIALS Processing, Fabrication, Properties, Applications (THERMEC 2016). TECHNISCHE UNIVERSITAET GRAZ. 2016. Congreso.
- 4 /as (p. o. de firma) [1]: (J. Chao) Autores/as (p. o. de firma) [2]: (C. Capdevila) Autores/as (p.. New Developments in ODS Steels for Energy Generating Systems under Extreme Environments. NANOTECHNOLOGY APPLIED TO STEELS. FUNDACION TECNALIA R&I. 2015. Congreso.
- 5 /as (p. o. de firma) [1]: (C. Capdevila) Autores/as (p. o. de firma) [2]: (M. K. Miller) Autores/a . Effect of nano-scale precipitation on strengthening of ferritic ODS Fe-Cr-Al alloy. EUROMAT2013 European Congress and Exhibition onAdvanced Materials and Processess. SOCIEMAT. 2013. Congreso.

## C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 **Proyecto.** H2020-RFCS-2022 GRANT AGREEMENT NUMBER — 101112371, New Approach to Additive Manufacturing of Microstructurally Optimized Steels. EUROPEAN COMMISSIONDIRECTORATE-GENERAL FOR RESEARCH & INNOVATION. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/07/2023-31/12/2026. 388.517,5 €. Miembro de equipo. 1 FUNDACIO EURECAT ES Coordinator 2 AGENCIA ESTATAL CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIO ES Partner 3 DEUTSCHE EDELSTAHLWERKE SPECIALTY STEEL GMBH & C DE Partner 4 INNOMAQ 21 SL ES Partner 5 Amazemet sp....
- 2 **Proyecto.** TED2021-131623B-I00, EL HIDROGENO COMO REDUCTOR DE OXIDOS DE HIERRO EN LA ESCORIA DE ACERIA DE HORNO ELECTRICO. Plan de Recuperación, Transformación y Resiliencia. (Agencia Estatal de Investigación). 01/12/2022-30/11/2024. 326.610,35 €.
- 3 **Proyecto.** : H2020-RFCS-2019 GRANT AGREEMENT NUMBER — 899268, Advanced metallurgical and micromechanical modelling to deploy the microstructural tailoring potential of press hardening (MIPRE). EUROPEAN COMMISSIONDIRECTORATE-GENERAL FOR RESEARCH & INNOVATION. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/07/2020-31/12/2023. 257.181 €. Coordinador.
- 4 **Proyecto.** PLEC2021-007750, Trastocando la despoblación: La Fabricación Aditiva como disrupción tecnológica para luchar contra la despoblación rural y las desigualdades sociales y espaciales. PROYECTOS LÍNEAS ESTRATÉGICAS. (Consejo Superior de Investigaciones Científicas). 01/06/2021-31/05/2023. 415.015 €. Miembro de equipo.

- 5 **Proyecto.** PID2019-109334RB-C31, Aceros MARTensíticos FORmadores de Alúmina para sistemas de generación de energía (AFORMAR). MICIU, Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2017-2021. Programa estatal de investigación, desarrollo e innovación orientada a los Retos de la Sociedad.. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/06/2020-31/05/2023. 145.200 €. Coordinador.
- 6 **Proyecto.** MAT2016-80875-C3-0-R, Aplicación de las aleaciones base-fe nanoestructuradas como solución sostenible para los sistemas de generación de energía de alta eficiencia. MINECO, Plan Estatal de Investigación Científica y Técnica y de Innovación 2013-2016. Programa estatal de investigación, desarrollo e innovación orientada a los Retos de la Sociedad.. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 30/12/2016-31/12/2020. 121.000 €. Coordinador.
- 7 **Proyecto.** Improved formability in 3rd generation AHS steels by nanosize precipitation and microstructure control during and after hot rolling. European Commission. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/07/2016-31/12/2019. 145.612 €. Investigador principal.
- 8 **Proyecto.** Diseño multiescala de materiales avanzados. Comunidad de Madrid. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/10/2014-31/12/2018. 31.567 €. Investigador principal.
- 9 **Proyecto.** MAT2013-47460-C5-1-P, Aceros ferrítico-martensíticos 9-12%Cr avanzados por medio de la optimización de su procesado termomecánico. MINECO, Plan Nacional I+D+i 2010-2014. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/01/2014-31/12/2016. 118.530 €. Coordinador.
- 10 **Proyecto.** ENE2009-13766-C04-01, Mecanismos de Deformación a Alta Temperatura en las Aleaciones Fe-Cr Endurecidas por Dispersión de Óxidos. MICINN, Plan Nacional I+D+i 2008-2011. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/01/2010-31/03/2013. 151.250 €. IP
- 11 **Proyecto.** ENE2006-15170-C02-01, Estudio de los procesos de recristalización en superaleaciones base Fe aleadas mecánicamente con óxido de ytrio para tubos de intercambiadores de calor en centrales eléctricas de biomasa. MEC, Plan Nacional I+D+i 2004-2007. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 01/10/2006-01/10/2009. 125.598 €.
- 12 **Contrato.** CARACTERIZACIÓN DE MICROESTRUCTURAS IMPRESAS DE ACEROS POR TECNOLOGÍA WLAM Y LPBF ArcelorMittal Innovación, Investigación e Inversión, SL. 17/02/2023-17/02/2025. 48.000 €.
- 13 **Contrato.** CARACTERIZACIÓN AVANZADA DE MICROESTRUCTURAS BAINITICAS/MARTENSITICAS AUTOTECH ENGINEERING SPAIN SL. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 27/07/2022-26/12/2024.
- 14 **Contrato.** UNDERSTANDING HOW THE L-PBF PROCESS PARAMETERS IMPACT THE MICROSTRUCTURE IN LOW ALLOYED STEELS ArcelorMittal Innovación, Investigación e Inversión, SL. (Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas). 18/05/2022-18/05/2024. 57.000 €.
- 15 **Contrato.** ESTUDIO DE LA MEJORA DEL COMPORTAMIENTO EN CALIENTE DE LOS MATERIALES METÁLICOS UTILIZADOS EN LA FABRICACIÓN DE ENVASES DE VIDRIO VERALLIA SPAIN, SA. 01/07/2020-31/12/2021. 36.300 €.
- 16 **Contrato.** ENSAYOS DE CARACTERIZACIÓN MECÁNICA Y MICROESTRUCTURAL DE MATERIALES METÁLICOS FABRICADOS MEDIANTE FABRICACIÓN ADITIVA ArcelorMittal. 24/07/2019-23/01/2021. 48.400 €.
- 17 **Contrato.** CHARACTERIZATION OF NEW STEELS PRODUCED BY ADDITIVE MANUFACTURING TECHNOLOGIES ArcelorMittal. (CENIM-CSIC). Desde 13/07/2018. 67.760 €.



CV date	12/09/2023
---------	------------

## Part A. PERSONAL INFORMATION

First name	Isaac		
Family name	Toda Caraballo		
Gender (*)	Male	Birth date	12/02/1979
Social Security, Passport, ID number	50/10149594/72	PAI832071	25176617N
e-mail	isaac.toda@cenim.csic.es	URL Web: <a href="#">link</a>	
Open Research and Contributor ID (ORCID)(*)	0000-0002-0322-4099		

(\*) Mandatory

### A.1. Current position

Position	Tenured Scientist		
Initial date	01/12/2021		
Institution	CSIC		
Department/Center	CENIM		
Country	Spain	Teleph. number	+34 91 5538900
Key words	Simulation, Modelling, Steels, High Entropy Alloys		

### A.2. Previous positions (research activity interruptions, art. 45.2.c))

Period	Position/Institution/Country/Interruption cause
2017-2021	Research Fellow – <i>Programa de Atracción de Talento</i> (Comunidad de Madrid) CENIM-CSIC, Madrid - Spain
2012-2017	Member of the Computing Committee University of Cambridge, Cambridge - UK
2011-2017	Research Associate, University of Cambridge, Cambridge - UK
2007-2011	PhD Student, CENIM-CSIC, Madrid – Spain.

### A.3. Education

PhD, Licensed, Graduate	University/Country	Year
PhD - Physics. Materials Science	Complutense University. Madrid -Spain	2013
Licensed – Statistics ( <i>Ciencias y Técnicas Estadísticas</i> )	Complutense University. Madrid -Spain	2011
Licensed – Mathematics	University of Zaragoza, Zaragoza - Spain	2003



## Part B. CV SUMMARY (max. 5000 characters, including spaces)

Dr. Isaac Toda Caraballo is Tenured Scientist at the Spanish National Centre for Metallurgical Research (CENIM-CSIC). He has two degrees, one in Mathematics (University of Zaragoza) and another in Statistics (Complutense University of Madrid). He obtained his PhD in Physics from the Complutense University of Madrid, with the thesis developed in CENIM-CSIC with a comprehensive multiscale simulation, using ab-initio, Molecular Dynamics, Microstructural evolution simulations, statistical analysis and Finite Element Modelling to study the recrystallization and grain growth in ODS steels.

After this, he joined Department of Materials Science and Metallurgy of the University of Cambridge (UK) as a Research Associate for 6 years (2011-2017), where he started working in High Entropy Alloys developing physical based modelling for thermal stability and mechanical properties. He also performed research in fatigue in bearing steels and hydrogen embrittlement in austenitic steels. Other systems he has explored are Mg-alloys, modelling mechanical properties, and Al-alloys simulating microstructural evolution. During this postdoctoral period, he was member of the Computing Committee of the Dep. of Materials Science and Metallurgy, where a group formed to be in charge of the communications between the researchers and the computing officer, network issues and maintenance of the server room.

Subsequently, he re-joined CENIM with a fellowship (2017-2021) from the *Programa de Atracción de Talento* (Regional Government of Madrid). He continued his research line in High Entropy Alloys, where he investigates now the production of these alloys by Additive Manufacturing, via the Mat4.0 project (MAT4.0-CM P2018/NMT-4381) from the Regional Government of Madrid. He was the PI of a pilot project from the Joint Programme on Nuclear Materials of the European Energy Research Alliance (JPNM – EERA) combining 24 partners from Europe to develop new High Entropy Alloys for energy applications, where he is in charge of the WP responsible for modeling and design. He was also the PI2 of a Spanish national project (AFORMAR - PID2019-109334RB-C31) focused on the design of new alumina forming martensitic alloys, where he is applying massively thermodynamic calculations to obtain compositions allowing both the creation of the alumina layer while martensitic transformation is still possible. He is currently the PI of a Horizon European project (101061241-HORIZON-EURATOM-2021-NRT-01) involving 36 international partners which is focused in the development of new alloys for fusion and fission. Also, he is the PI of a national project (TED2021-132214B-I00) dealing with the use of machine learning techniques in the field of metallurgy. Additionally, to these projects, he has participated in 2 Spanish National projects, 4 international projects and one regional from the regional government of Madrid.

He has published 47 papers, with 75% in the Q1, with more than 1200 citations and a h-index of 17. He has co-supervised 7 master students in his postdoctoral stay, 4 master students in his current position and 2 PhD visiting international students. He is currently supervising three PhD.

He has two registered software in the Cambridge Enterprise (Knowledge transfer & research impact office from the Univ. of Cambridge) concerning prediction of physical parameters for multicomponent alloys and the prediction of mechanical properties of steels. He has participated in 33 international conferences with giving more than 19 oral presentations (2 invited). In addition to his postdoctoral stay, he has performed short stays in the Univ. of Cambridge (UK), Univ. of Lulea (Sweden) and CEIT (Spain), as well as visits and invitations to Univ. of Granada, Rouen University (France), IMDEA Materials (Spain), Culham Centre for Fusion Energy (UK), Univ. of Sheffield (UK), Technique Univ. of Varsaw (Poland) and GIFT-Postech (Korea).

## Part C. RELEVANT MERITS

### C.1. Publications

[1] I. Toda-Caraballo<sup>CA</sup>, J.S. Wróbel, D. Nguyen-Manh, **2022**, *Generalized universal equation of states for magnetic materials: A novel formulation for an interatomic potential in Fe*, Physical Review Materials, 64, 043806

- [2] I. Toda-Caraballo<sup>CA</sup>, J.A. Jiménez, S. Milenkovic, J. Jimenez-Aguirre, D. San-Martín, **2021**, *Microstructural stability of the CoCrFe<sub>2</sub>Ni<sub>2</sub> high entropy alloys with additions of Cu and Mo*, Metals, 11, 1994
- [3] A. Eres-Castellanos, I. Toda-Caraballo<sup>CA</sup>, A. Latz, F.G. Caballero, C. Garcia-Mateo, **2020**, *An integrated-model for austenite yield strength considering the influence of temperature and strain rate in lean steels*, Materials and Design, 188, 108435
- [4] E. Menou, F. Tancret<sup>CA</sup>, I. Toda-Caraballo, G. Ramstein, P. Castany, E. Bertrand, N. Gautier, P.E.J. Rivera Díaz-Del-Castillo, **2018**, *Computational design of light and strong high entropy alloys (HEA): Obtainment of an extremely high specific solid solution hardening*, Scripta Materialia, 156, pp. 120-123
- [5] E. Menou, I. Toda-Caraballo, P.E.J. Rivera Díaz-Del-Castillo, C. Pineau, E. Bertrand, G. Ramstein, F. Tancret<sup>CA</sup>, **2018**, *Evolutionary design of strong and stable high entropy alloys using multi-objective optimisation based on physical models, statistics and thermodynamics*, Materials and Design, 143, pp. 185-195
- [6] I. Toda-Caraballo<sup>CA</sup>, J. S. Wróbel, D. Nguyen-Manh, P. Pérez, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, **2017**, *Simulation and Modeling in High Entropy Alloys*, JOM, 69, pp 2137-2149
- [7] I. Toda-Caraballo<sup>CA</sup>, *A general formulation for solid solution hardening effect in multicomponent alloys*, **2017**, Scripta Materialia 127, pp 113-117
- [8] I. Toda-Caraballo, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo<sup>CA</sup>, *Modelling solid solution hardening in high entropy alloys*, **2015**, Acta Materialia 85, pp14-23
- [9] I. Toda-Caraballo, J. Wrobel, S. L. Dudarev, D. Nguyen-Manh, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo<sup>CA</sup>, *Interatomic spacing distribution in multicomponent alloys*, **2015**, Acta Materialia 97, pp 156-169
- [10] I. Toda-Caraballo, E. Galindo-Nava, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo<sup>CA</sup>, *Understanding the factors influencing yield strength on Mg alloys*, **2015**, Acta Materialia 75, pp 287-296

## C.2. Congress

- 1.- Highlighted oral presentation, I. Toda-Caraballo, S. Wróbel, D. Nguyen-Manh **09/2023**, Euromat2013 (Frankfurt – Germany)
- 2.- Invited oral presentation, I. Toda-Caraballo, NEA Workshop on high entropy alloys for nuclear applications, **10/2021**, Remotely hosted (Madrid-Spain)
- 3.- Invited oral presentation, I. Toda-Caraballo, 02/2019, Reunión Española de Modelado (Madrid – Spain)
- 4.- Oral presentation, I. Toda-Caraballo, D. San Martín, S. Milenkovic, T. Perez-Prado, **09/2019**, Euromat2019 (Stockholm – Sweden)
- 5.- Invited oral presentation, I. Toda-Caraballo, D. San Martín, H. Valles, M. Valcarcel, S. Milenkovic, T. Perez Prado, C. Capdevila Montes, **12/2018**, ICHEM2018 (Jeju – Korea)
- 6.- Oral Presentation, I. Toda-Caraballo, J. Wróbel, D. Nguyen-Manh, **07/2018**, Thermec 2018 (Paris – France)
- 7.- Oral presentation, I. Toda-Caraballo, J. Jelita Rydel, G. Guetard, P.E.J. Rivera Díaz-del-Castillo, **09/2017**, Euromat 2017 (Thessaloniki – Greece)
- 8.- Oral presentation, I. Toda-Caraballo, H.W. Fu, P.E.J. Rivera Díaz-del-Castillo, **06/2016**, Thermec2016 (Graz – Austria)
- 9.- Oral presentation, I. Toda-Caraballo, P.E.J. Rivera Díaz-del-Castillo, **02/2016**, TMS2016 (Nashville – USA)
- 10.- Oral presentation, I. Toda-Caraballo, J. Wróbel, S. Dudarev, D. Nguyen-Manh, P.E.J. Rivera Díaz-del-Castillo, **09/2015**, Euromat2015 (Warsaw – Poland)

## C.3. Research projects

- 1.- Ref TED2021-132214B-I00 | Project Title: DIGImeTAL:  
Funding body: Ministerior deCiencia e Innovación | Proyectos Estratégicos Orientados a la Transición Ecológica y a la Transición Digital 2021  
Participants: CENIM  
Dates: 1/2023-12/2024 Budget: 219.420 €  
Coordinator: I. Toda-Caraballo & Lucia Morales-Rivas
- 2.- Ref 101061241 | Project Title: INNUMAT: INNovative Nuclear MATerials for fision and fusion  
Funding body: European Commission | Euratom Research and Training Programm 2021  
Participants: 36 partners from research institutions and universities from Belgium, Czech Republic, EU, Finland, France, Germany, Hungary, Italy, Poland, Romania, Slovakia, Spain, Sweden, Switzerland, Ukraine  
Dates: 9/2023-8/2027 Budget: 7,999,957€ (total); 370,000 € (CENIM)  
Coordinator: J. Aktaa (KIT-Germany). PI: I. Toda-Caraballo & D. San Martín (CENIM-CSIC).
- 3.- Ref: PID2019-109334RB-C31 | Project Title: AFORMAR: Alumina FORMing MARtensitic heat-resistant steels for energy generation systems  
Funding body: Spanish National Programme | Call: Convocatoria 2019 «Proyectos de I+D+i»  
Participants: CENIM-CSIC, University Carlos III of Madrid, CIEMAT  
Dates: 1/2020-12/2023 Budget: 399,300 € (total); 145,200 € (CENIM)  
Coordinator: C. Capdevila (CENIM-CSIC).PI: C.Capdevila & I. Toda-Caraballo (CENIM-CSIC).
- 4.- Ref: S2018/NMT-4381 | Project Title: Mat4.0: Smart Manufacturing of advanced materials for energy, transport and health.  
Funding body: Regional Government of Madrid | Call: Technology Convocatoria de Programas de I+D Tecnologías 2018  
Participants: IMDEA Materials, CENIM-CSIC, FIDAMC, Univ. Carlos III of Madrid, Polytechnic Univ. of Madrid  
Dates: 8/2021-7/2022 Budget: 934,750 € (total); 170,425 € (CENIM)  
Coordinator: J. Molina (IMDEA) | PI: D. San Martin & I. Toda-Caraballo (CENIM-CSIC).
- 5.- Project Title: High Entropy Alloys for Nuclear Applications (HEAFNA)  
Funding body: European Energy Research Alliance (EERA) - Joint Programme on Nuclear Materials (JPNM) | Call: EERA-JPNM Subprogramme SP2  
Participants: 24 partners from research institutions and university of Belgium, Czech Republic, Finland, France, Germany, Italy, Romania, Slovak, Spain, Sweden, Switzerland, UK, Ukraine  
Dates: 01/2019 – 12/2022 | Budget: 8,300,000 € (total); 290,000 € (CENIM)  
Coordinator: A. Weisenburger (KIT - Germany) | PI: I. Toda-Caraballo (CENIM-CSIC).

#### C.4. Contracts, technological or transfer merits

1. Registered Software. Title: MultiComp Software for alloy discovery based on physical models and artificial intelligence methods. Registered at Cambridge Enterprise (2013)
2. Registered Software.. Title: PropMechStats Software for thermostatistical modelling of plasticity in engineering alloys. Registered at Cambridge Enterprise (2013)