

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL MULTI-ESCALA DEL DAÑO INDUCIDO EN LOS MATERIALES POR LA RADIACIÓN

J.M. PERLADO - L. MALERBA - J. MARIAN

La *simulación computacional* es en la actualidad una herramienta fundamental en el conocimiento de los más variados principios de la física, química y tecnología. En particular, la simulación *multiescala* supone un paso más, fundamental, en la conexión de los fenómenos microscópicos y los macroscópicos, permitiendo el saber más íntimo de los procesos observables.

Su aplicación al conocimiento del daño por irradiación en materiales estructurales (propiedades mecánicas) pasa por elementos atomísticos Mecánico-Cuánticos, atomísticos clásicos de Dinámica Molecular, mesoscópicos y microscópicos de Difusión y Transporte de los Defectos, e interacción de éstos con las Dislocaciones, para poder concluir en las reglas macroscópicas clásicas continuas de la ingeniería. La relación coordinada de estas técnicas, avaladas por los imprescindibles experimentos parciales, se describe a continuación, así como algunos ejemplos de su éxito en la interpretación de fenómenos físicos observables a escala microscópica.

INTRODUCCIÓN

Es bien conocido que la radiación puede provocar en los materiales una importante modificación (degradación) de las propiedades que de ellos se requieren (mecánicas, ópticas, eléctricas,...). En particular, en los sistemas nucleares de fisión y fusión los mecanismos de *daño inducido por los neutrones* son los protagonistas fundamentales del empeoramiento sustancial de las *propiedades mecánicas de los materiales estructurales*. La experimentación macroscópica *pre* y *post*-irradiación ha sido el único método para obtener conclusiones de diseño hasta muy recientemente. Desde hace algunas décadas comienza a ser habitual la realización y presentación simultánea de la experimentación microscópica y macroscópica sobre las probetas *pre* y *post*-irradiación, con el deseo de cuantificar tanto la modificación *visible* de la propiedad estudiada, como el estado íntimo de la estructura, y establecer, con variables a una escala mucho más reducida, las razones del cambio. Existe así una correlación entre magnitudes a una escala más pequeña y el cambio de la propiedad estudiada, pero sin embargo no se dispone de la relación entre el origen (naturaleza e intensidad de la radiación) y la

propiedad. Es aquí donde la simulación computacional multiescala viene en nuestra ayuda (cargada de un conocimiento teórico-experimental) y permite conectar el origen, los pasos sucesivos en el tiempo y espacio, y.. La propiedad.

La simulación mediante computadoras no es, en el fondo, más que un saber contar lo que nos dicen determinadas expresiones matemáticas. Requiere de una teoría básica a *simular* que se sustenta en sí misma ó (lo correcto) en una experimentación previa. Sin lugar a duda existe la *teoría computacional*, ó el saber hacerlo eficientemente con las computadoras (técnicas y algoritmos, lenguajes). Además, es posible el *establecimiento de una nueva teoría basándose en la flexibilidad para obtener resultados que permite el cálculo, con la modificación de variables y magnitudes*. ¡Cómo la experimentación más convencional pero más barata y con capacidad de repetición!

La vieja ilusión de conseguir el cálculo de la producción de defectos inducidos por una cierta *intensidad de radiación*, su transporte e interacción, y la influencia que tuvieran en la evolución de la microestructura del *materias nuclear* a una *temperatura* dada, así como el cambio de sus propiedades mecánicas, está actualmente cerca de convertirse en una realidad. El tremen-

do desarrollo en la potencia de los ordenadores, y en la llamada física computacional, con la generación y manejo de potenciales interatómicos fiables y tratables, permite concluir el cierre del círculo, de muchos órdenes de magnitud en la escala espacial y temporal, en que se desarrollan todos los procesos involucrados.

El daño debido a la irradiación por neutrones se debe a *dos* mecanismos básicos:

- Los neutrones transfieren momento a los átomos del material, que pueden ser extraídos de su posición en la celda elemental del cristal, generándose los *Átomos Primarios de Retroceso (APR)*. Estos átomos en movimiento pueden interaccionar con otros átomos de la red produciendo una secuencia de pares de defectos o pares Frenkel, con el resultado final (dependiendo de la energía del APR original) de la *cascada de desplazamiento*. Si la energía es suficientemente alta (¡cómo ocurriría en el caso de fusión!) se producirán "ramificaciones" de la misma ó subcascadas, ver [Olander 76], [Perlado 93-95], [Averback 98], [Ullmaier 80], [Kelly 66], [Garner 88].

- Los neutrones inducen reacciones nucleares (*Transmutación Nuclear*), motivando la variación de la composición del material en cantidades que,

EVOLUCIÓN DEL DAÑO POR IRRADIACIÓN

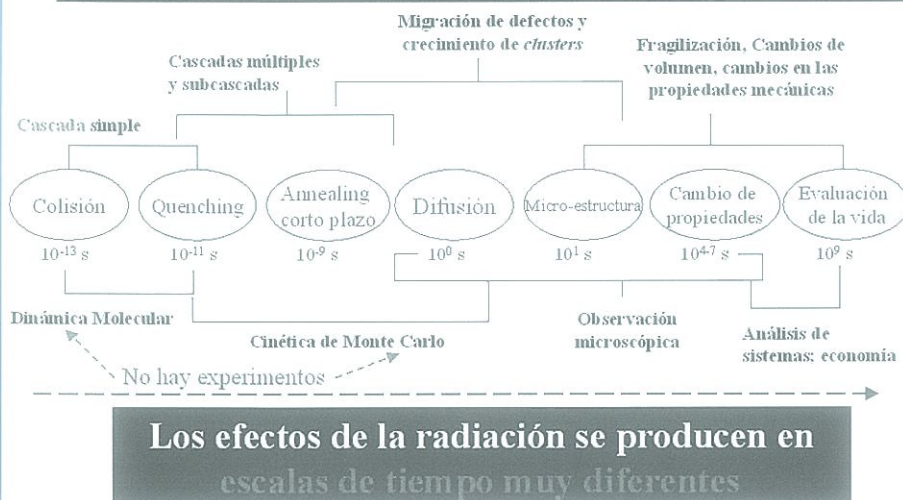


Figura 1.- Representación de las escalas de espacio y tiempo del Daño por Radiación.

aunque pequeñas, pueden modificar el comportamiento del material [Sanz 88]. La producción de "impurezas" no deseadas provoca la aparición de "nuevos" mecanismos microscópicos, que conducen a una variación del comportamiento del material. Un ejemplo claro y contundente de este hecho es el efecto del *hincharse* muy superior al habitual, debido a la formación de He en el material, que se da preferentemente para energías elevadas de los neutrones (reacciones umbral), como es el caso de los reactores rápidos y *fusión nuclear*. Se provoca así una disminución drástica de la vida de las piezas irradiadas.

Con referencia exclusiva al daño colisional, la Figura 1 representa la variedad de escalas espacio-tiempo en las que se producen los fenómenos de daño por radiación en los materiales. Añadida a esa Figura, en el caso de la irradiación con neutrones, se encuentra la escala aún más pequeña (10^{-16} s) de los procesos de *interacción nuclear*, en la que se generan los APR (ó *Primary Knock-on Atoms, PKA*), que concluyen (según la partícula y su energía) en la cascada colisional. Mientras que las cascadas colisionales producen defectos en una escala temporal de *decenas de picosegundos*, los procesos de difusión ocurren en tiempos mucho más largos del orden de *segundos*. Naturalmente, los efectos microestructurales y la modificación de las propiedades se dan en escalas temporales mucho más largas. En las escalas más reducidas espacio-tiempo es esencial el conocimiento detallado de las cascadas de desplazamiento (fase

posterior a las originales cascadas de colisión) generadas por el recorrido de los átomos sucesivamente "arrancados" de sus posiciones por el inicial. El resultado es una distribución de defectos generados en el cristal, ó *estado de daño primario*. Sin embargo, su pequeño volumen ($\approx 4 \times 10^6 \text{ \AA}^3$) y su corta vida ($\approx 10^{-11}$ s) hacen su visualización experimental tremendamente difícil, de manera que *solo de forma indirecta* usando, por ejemplo, microscopía de transmisión electrónica (*Transmission Electron Microscopy, TEM*) se pueda inferir dicho estado de daño primario. El método de Dinámica Molecular (DM) es, debido a su simplicidad conceptual y a la escala en que se mueve (una red típica cúbica de $2 \times 10^8 \text{ \AA}^3$ contiene 10^7 átomos), una herramienta a escala atómica de gran potencia y capaz de producir una gran información de la física del daño a esa escala. La realidad es que la DM ha sido utilizada profusamente en la última década, aunque su origen es mucho más antiguo, con simulaciones de APR de cientos de eV hasta la visualización de cascadas de desplazamiento de hasta 50 keV. Si nos fijamos en las magnitudes que se pueden tratar, dado el desarrollo actual de los ordenadores (procesadores masivamente paralelos), nos encontramos con que sistemas de hasta 100 millones de átomos y tiempos de procesos físicos de decenas de picosegundos, e incluso centenas, son aborables.

A temperaturas para las que los defectos generados en las cascadas son móviles, la difusión de los defectos da lugar a mecanismos de interacción en-

tre ellos a escala micro-macroscópica que requieren de soluciones distintas de DM. Para predecir la evolución de la microestructura en periodos largos de tiempo, nuestro interés se centra en el conocimiento del *número y tipo de defectos* que se escapan de la cascada de desplazamiento y que se desplazan a través de la red provocando cambios en la composición original, en la microestructura, y en las propiedades.

Tradicionalmente, las conocidas *Ecuaciones de Tasas*, basadas en una resolución analítica de las ecuaciones de difusión con sus términos fuente y sumidero de defectos [Mansur 87, Ryazanov 96], han sido usadas con relativo éxito para el conocimiento de la evolución de la microestructura. Sin embargo, esta aproximación asume un sistema homogéneo e isótropo. Gracias a la aparición de ordenadores más potentes, la resolución de la cinética de los defectos asociada a la evolución de la microestructura se puede realizar usando el método de MonteCarlo, dando lugar a la técnica de *Cinética por MonteCarlo (Kinetic MonteCarlo, KMC)* [Besco 67, Doran 70, Beeler 83, Heinisch 83-94, Díaz de la Rubia 97]. KMC tiene muchas ventajas sobre las técnicas convencionales: i) es capaz de describir la naturaleza "atómica" (individual) de la difusión de defectos; ii) puede de manera natural describir las inhomogeneidades de tipo espacial y temporal que realmente aparecen en las cascadas de desplazamiento; iii) considera la anisotropía del proceso de transporte; iv) los términos fuente y sumidero de los defectos consideran agrupaciones de defectos de todos los tipos y tamaños; v) hay una consideración dimensional de la migración de los defectos; vi) es factible la inclusión de tensiones en el modelo; y vii) se consideran estructuras no-homogéneas. El resultado de la simulación KMC da información sobre la evolución espacial y temporal de los defectos en la microestructura, incluyendo la tasa de precipitación de impurezas, de acumulación de anillos de dislocación en la matriz, la tasa de asociación (aproximación/llegada) de anillos de dislocaciones móviles y defectos a las dislocaciones intrínsecas, nucleación y crecimiento de huecos, y otras características microscópicas.

La denominación "*trascendente*", *multiescala*, aparece al ser capaces de *ligar* las técnicas mencionadas de manera eficiente y natural. Existe una conexión de los cálculos *ab initio*, primeros principios mecánico-cuánticos para la determinación de la estructura e interacción electrónica, con la Dinámica Molecular y de ésta con la

Cinética por MonteCarlo. Todo ello nos permite describir dimensiones desde nanómetros a cientos de micras, y desde picosegundos a años. Sin entrar todavía en la última técnica de procedimiento que sería la *interacción de defectos y dislocaciones a través de la dinámica de dislocaciones*, veamos como se relacionan entre sí las metodologías previamente mencionadas.

Cálculos ab-initio y Dinámica Molecular: La fase que hemos descrito como estado de daño primario representa la primera etapa del cálculo y la fuente de datos para el conocimiento de la evolución de la microestructura, y se determina mediante Dinámica Molecular. Ahora bien, DM precisa del conocimiento de un *potencial interatómico* adecuado de *naturaleza analítica simple y semiempírica*, que esté ajustado a la energética de los defectos y a las constantes del material. Estas magnitudes son determinadas de manera precisa con los cálculos de la estructura electrónica de primeros principios mecano-cuánticos; es decir, resolución de las ecuaciones de ondas con pseudo-potenciales cuánticos, lo que se realiza en los ordenadores masivamente paralelos.

Conexión Dinámica Molecular y Cinética por MonteCarlo (KMC): Ese estado de daño primario de la Dinámica Molecular es el dato de entrada para los cálculos KMC, siendo descrito mediante la distribución espacial de los defectos puntuales, las impurezas y las agrupaciones de defectos de diversos tipos. Por otra parte, los cálculos ab initio calculan los datos de las barreras de activación que se precisan para establecer las probabilidades de sucesos de los defectos en KMC.

Cinética de MonteCarlo: La difusión de los defectos, su acumulación en la celda, y su interacción con los componentes químicos del material y su microestructura es una responsabilidad de KMC. EL *resultado* es una distribución *macroscópica* del daño acumulado en la celda para unas condiciones de irradiación definidas por un espectro de energía de los átomos primarios de retroceso, un flujo y fluencia, y una cierta temperatura. Eso incluye la densidad y tamaño de los huecos, la densidad de las agrupaciones de defectos de tipo vacante e intersticial, así como de los anillos de dislocaciones, segregación de átomos de impurezas, y distribución de precipitados.

Falta un eslabón que nos conecte con las técnicas de cálculo de plasticidad en ingeniería de los materiales (*elementos finitos*), y cuyo eje central es la ecuación constitutiva del elemento basada en teorías elásticas, plásti-

cas, ó viscoplásticas. Es justo aquí donde aparece la *Dinámica de Dislocaciones (DD)*. La técnica se desarrolla en principio en dos dimensiones [Ghoniem 88], y es extendida posteriormente a tres dimensiones mediante la discretización de las dislocaciones en segmentos. El objetivo es obtener la curva tensión-deformación en monocristales de micras de tamaño, precisando para su ejecución las constantes elásticas del material, la movilidad de las dislocaciones de diferente tipo, y un conocimiento de las reacciones entre las dislocaciones. Estos elementos de entrada son de nuevo *proporcionados por las técnicas atomísticas tipo Dinámica Molecular*. La aparición en el modelo del daño por irradiación supone la necesidad de algún dato adicional: microestructura generada por la irradiación y la energética de las interacciones ahora con las dislocaciones. El cálculo en este punto de la distribución de agrupaciones en el material constituirá la entrada de obstáculos existentes en el material al movimiento de las dislocaciones (*Interacción de Defectos y Dislocaciones*)

DINÁMICA MOLECULAR: TEORÍA Y ALGUNOS RESULTADOS

En general se puede decir [Adams 94] que los modelos atomísticos justifican su uso por algunas muy claras motivaciones: *i)* permiten el estudio de sistemas relativamente complejos, sin que sea necesario recurrir a aproximaciones demasiado "groseras"; *ii)* nos permiten establecer una correlación entre resultados experimentales y teóricos en un gran rango de aplicaciones, completando el hueco que existe en tantas ocasiones entre teoría y experimento; *iii)* tienen la inmensa particularidad de permitir determinar magnitudes físicas en una escala espacio-temporal completamente fuera de la base experimental actual, lo que da pie al establecimiento de parámetros básicos de utilidad para las correlaciones posteriores.

Una clasificación de los modelos de simulación atomística, en los que encuadrar el de Dinámica Molecular, se podría realizar sobre la base de la relación existente entre los resultados obtenidos a escala microscópica y aquellos macroscópicos relativos a los resultados de los experimentos. En los resultados atomísticos nuestra información tiene que ver con la identificación de *posiciones y velocidades de las partículas en función del tiempo* (a partir

de la resolución de las ecuaciones de Newton de fuerzas para todos los átomos), pero nuestro interés siguiente y progresivo es el de *determinar magnitudes medias de parámetros macroscópicos del sistema estudiado*. La clave está en lo que conocemos de Mecánica Estadística, y en nuestro conocimiento de conceptos como *variables de estado, espacio de las fases, microestado, determinación de los valores del observable como promedio temporal, colectivo (Gibbs), promedio sobre el colectivo [microcanónico N, V, E ; canónico, N, V, T], función de partición, hipótesis ergódica*. Desde esta perspectiva, los métodos de simulación pueden ser: *deterministas, estocásticos, híbridos*. En los métodos deterministas (en los que se encuentra el de *dinámica molecular*) la evaluación de una magnitud O del sistema se realiza mediante un promedio temporal, y reciben este nombre porque hacen uso de la *dinámica del sistema* para conseguir determinar la evolución del microestado $\Omega(t)$ a través del espacio de las fases; de manera que $O = O[\Omega(t)]$. En los estocásticos la determinación de O se realiza mediante el pesado sobre el colectivo, de manera que partiendo de una situación inicial y moviendo aleatoriamente las partículas (procesos de Markov), se obtienen los sucesivos microestados que corresponden al colectivo que se está estudiando; este sería un *modelo de MonteCarlo típico*. Los modelos híbridos [Ceperley 79, Pangali 78] pueden ser como el *"force biased"* MonteCarlo, donde los movimientos de las partículas no son completamente aleatorios, sino que se tiene en cuenta las fuerzas sobre las partículas, ó el método de la *dinámica browniana* en el que se usan fuerzas aleatorias [Turq 77].

Al calcular el promedio en dinámica molecular nos encontramos con una determinación discreta en el tiempo del observable (integración de las ecuaciones del movimiento no infinita):

$$O_{obs} = \langle O \rangle_{temp} = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M \Delta t} \sum_{i=1}^M O(\Omega(i \Delta t)) = \frac{1}{M \Delta t} \sum_{i=1}^M O(\Omega(i \Delta t))$$

Una limitación será el tamaño finito del sistema [Heerman 86, Allen 87], lo que obligará a considerar con cuidado las condiciones de contorno que se aplican al sistema para que la simulación sea realista. Por otra parte, la respuesta a la posibilidad actual (número de partículas, periodos de tiempo de simulación) de simular sistemas por dinámica molecular que den promedios estadísticos, comparables con los experimentos, es claramente afirmativa.

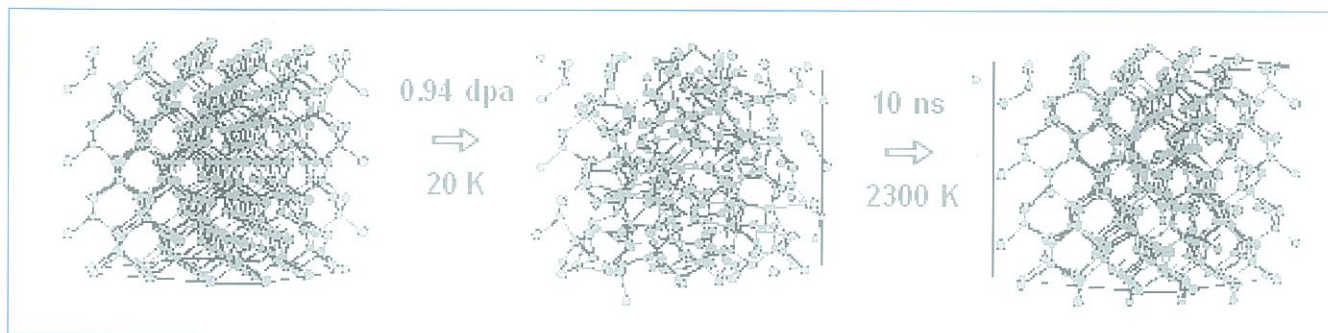


Figura 2.- Amortización del β -SiC por Acumulación de Daño. Simulación equivalente a experimento con electrones. Momento Inicial, Estructura Amorfa y Desordenada con anticipaciones después del Annealing.

La historia de las simulaciones por ordenador de este tipo de problemas se remonta a los años '50, donde se simulaban las propiedades termodinámicas de un líquido bidimensional [Metropolis 53]. Ya entonces se introdujeron conceptos como celda básica, condiciones de contorno periódicas, bajo el uso de potenciales simples del tipo de esferas duras [Alder 57]. En los años '60 se comienza a simular por dinámica molecular con potenciales tipo Born-Mayer, y Lennard-Jones sobre cobre [Verlet 68], y comienzan a aparecer las bases de las simulaciones de colisiones binarias, en las que la partícula sigue trayectorias rectas hasta que sufre una interacción con otra partícula (como en las simulaciones de dinámica molecular de esferas rígidas). De aquí aparecen soluciones, que comienzan a aplicarse en el comienzo de los 70 al daño por irradiación, como el código MARLOWE de colisiones binarias [Robinson 72, y versiones siguientes] para sólidos cristalinos. Otro de los representantes de esta técnica es el código TRIM [Biersack 80, Ziegler 85]. A partir de aquí el desarrollo es espectacular, y en paralelo con el de las herramientas de computación: Líquidos diatómicos [Barojas 73], agua [Stillinger 75], sólidos moleculares [Nosé 83], soluciones iónicas [Turq 77], hidrocarburos [Ryckaert 75], proteínas [McCammon 77], interfases [Chapela 77], transiciones de fase [Pawley 82], situaciones de no-equilibrio [Ciccotti 79], dinámica Browniana [Turq 77], inclusión de fenómenos cuánticos [Corbin 82], simulaciones a temperatura y/o presión constante con variación del volumen [Andersen 80], modificación de la forma de la celda [Parrinello 81-83], y los primeros grandes cálculos de daño por radiación [Díaz de la Rubia 91]. Desarrollos que en el tiempo se han extendido de manera muy amplia hasta el momento actual. Aparecen para el análisis de daño por radiación nuevos potenciales en los años 80 y 90, que comienzan permitiendo la simulación de metales, y del

que destacamos el de Daw, Foiles y Baskes [Daw 83-84, Foiles 86] conocido con el nombre de "Embedded Atom Model (EAM)", y modificaciones para otros materiales [Finnis&Sinclair 84], y el grupo de potenciales para tratar el más complejo enlace covalente, entre los que se encuentra el usado para simulaciones de SiC [Tersoff 86-88-89-90-94], y Si [Stillinger&Weber 85].

Todos estos potenciales son empíricos, y deben definir de manera correcta las fuerzas entre las partículas. El ya mencionado ajuste de los coeficientes que los componen se realiza para reproducir las propiedades estáticas y dinámicas del material: *energía cohesiva, módulo de elasticidad, configuraciones geométricas estables del material, valores de las energías de formación de defectos en el material, constante de celda, y otros*. No suministran una información electrónica del material, y son ciertamente una aproximación del mismo. Para subsanar esta situación, aparecen soluciones en las que las fuerzas entre las partículas tienen en cuenta las consideraciones cuánticas [Car 85-88], y cuya idea fundamental consiste en la resolución de la ecuación de Schrödinger para el conjunto del sistema con hipótesis simplificadoras: I) aproximación de Born-Oppenheimer asumiendo que los núcleos permanecen fijos y resolviendo solo la componente electrónica; II) teoría del funcional de densidad, donde la densidad electrónica del sistema es quien determina el estado de energía mínima, sin tener en cuenta qué orbitales en concreto; III) aproximación de la densidad local, en la que un sistema con una densidad electrónica no uniforme se aproxima por un conjunto de pequeñas regiones con distintas densidades electrónicas. Todos estos métodos son particularmente "intensos" desde el punto de vista de tiempos de computación, de manera que solo sistemas de pocos átomos y cortos periodos de tiempo pueden ser resueltos. Como solución menos costosa aparece el método de "Tight Binding" [Slater

54, Goodwin 89], en el que los enlaces entre los átomos se describen por combinación lineal de orbitales, y los términos repulsivos por potenciales de dos cuerpos. Se han usado para Si y estudios de "clusters" y superficies [Khan 89], amorfización producida por acumulación de defectos [Colombo 95], interacción entre defectos.

Como un ejemplo de la potencia del método en sí mismo, se ha elegido dos simulaciones sobre dos materiales de distinta naturaleza (SiC, FeCu).

El SiC es la base de los materiales compuestos que se consideran como candidatos estructurales óptimos desde la perspectiva de baja activación neutrónica [Sanz 92a-b, 94, 96] en los futuros reactores de fusión nuclear. Durante los últimos años se ha abordado el conocimiento de sus características básicas bajo irradiación [Wong 94, Huang 95, Díaz de la Rubia 96, Perlado 97-98, Devanatham 98, Perlado 99a-b, Malerba 2000], añadiendo saber teórico al meramente experimental macroscópico (por otra parte no demasiado intenso). El caso que aquí se describe [Malerba 2000] es el correspondiente al entendimiento de la *amorfización por acumulación de daño del SiC*. Se ha simulado un experimento con electrones de 2 MeV [Inui 92] en el que se encontró que la transición en β -SiC de la estructura cristalina a la amorfa se inducía hasta 340 K, y que la dosis acumulada necesaria para producirla era constante y de 0.98 dpa (equivalente a $\approx 1.6 \times 10^{26}$ e.m⁻²) para temperaturas inferiores a 250 K. La simulación, que se ha realizado usando el código de Dinámica Molecular MD-CASK con el potencial de Tersoff [Malerba 2000], supuso introducir átomos primarios de retroceso de Si y C de solo 100 eV (correspondientes a los que se esperarían de los electrones) a una temperatura criogénica (20 K) en una caja de simulación de solo 512 átomos. El tiempo de simulación fue de 1 ns y el número total de átomos de 120, lo que da una tasa enorme de 10^9 dpa/s, cuya ausencia de realidad queda

corregida por la muy baja temperatura a la que se ha efectuado la simulación (*movilidad*). Como herramienta de comparación se simuló una estructura amorfa, llegando a ella mediante un proceso de calentamiento y enfriamiento cuidadoso y progresivo sobre una estructura α -SiC. Al comparar las funciones de distribución de pares (funciones de probabilidad de encontrar átomos vecinos entorno a uno dado) de la estructura amorfa con la que acumula daño a 0.94 dpa se observó una muy buena concordancia. De manera que se puede concluir ese valor como el crítico para la amorfización con un fantástico acuerdo con el experimental. En la Figura 2 se representa la visualización de los fenómenos que se dan en el tiempo, pasando por una estructura amorfa, y llegando hasta una estructura final desordenada con relación a la estructura cristalina original. Esta visualización computacional nos permitirá proponer mecanismos de amorfización que expliquen este fenómeno.

El otro ejemplo de simulación se basa en la aleación metálica FeCu, representante de la constitución de un tipo de aceros ferríticos habitual en las vasijas de los reactores de agua a presión. Es conocido el importante efecto de los átomos de Cu en la evolución de la microestructura bajo irradiación neutrónica. A pesar de la baja concentración de Cu, se forman precipitados dentro de la matriz de α -Fe impidiendo el desplazamiento de las dislocaciones, y siendo uno de los mecanismos que contribuyen al endurecimiento y fragilización. La aparición de agrupaciones de defectos ricos en átomos de Cu podría ser uno de los elementos de nucleación de precipitados adicionales post-annealing de la cascada de desplazamiento provocada por la irradiación. Para entender mejor estos mecanismos, se ha comenzado a simular [Perlado 99c, Marian 2000] por Dinámica Molecular, usando el código MDCASK con el potencial del tipo Finnis-Sinclair [Ackland 97] previamente implementado y validado, cascadas con energías que van desde 1 a 20 keV y temperaturas de 100 - 600 K en un sistema Fe-1.3%Cu. Entre otros mecanismos se ha comenzado por la interpretación de las características de los átomos auto-intersticiales (*self-interstitial atoms*, SIA) metaestables de Cu y su capacidad de recombinación, la diferencia entre las redes de Fe y FeCu en la generación de defectos en la cascada, el efecto que la formación de vacantes debido a la cascada de colisión tiene en la difusión de los átomos de Cu, y la nucleación preliminar

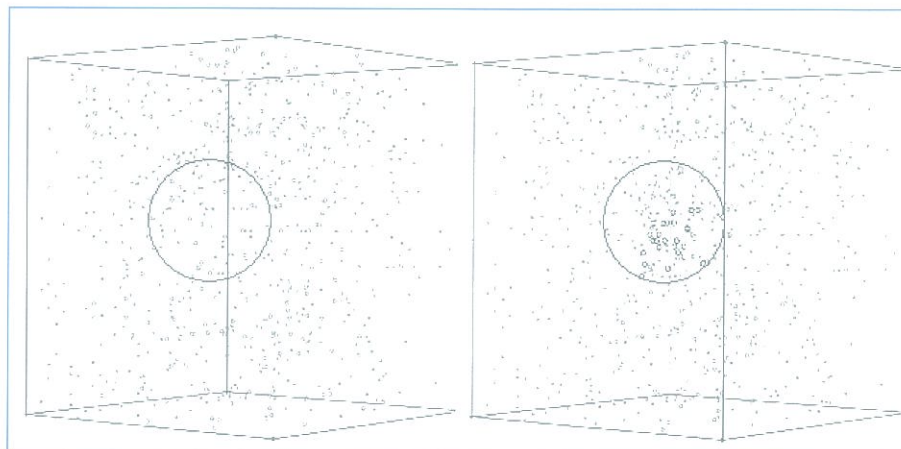


Figura 3.- Visualización de la caja de simulación atómica inicial del Fe-1.3%Cu (izquierda) donde solo se representan los átomos de soluto Cu. Distribución final (derecha) de los átomos de Cu y vacantes (grandes círculos) 1.15 ns después del impacto de un átomo primario de 10 keV. Se remarca el aumento de la densidad de soluto en el núcleo de la cascada (área enmarcada en el círculo).

al proceso más lento de formación de precipitados de Cu en la estructura. Al comparar los volúmenes de las cascadas de desplazamiento (definidos por el radio de una esfera que contenga el 90 % de los defectos) en el caso de Fe y FeCu para cascadas de 10 keV (celda de $45a_0 \times 45a_0 \times 45a_0$), se obtiene $14.5a_0$ para Fe y solo $12.5a_0$ para FeCu. Se puede concluir que existe un menor número de defectos asociados a la aleación, lo que puede atribuirse parcialmente a la mayor energía umbral de desplazamiento del Cu en la red bcc de Fe que del Fe en Fe. Algunas de las cascadas de 10 keV de energía fueron simuladas durante un tiempo de relajación posterior de 1.5 ns a 600 K observando, Figura 3, la existencia de nubes ricas en átomos de Cu que tienden a formarse en torno al núcleo de la cascada como habían anticipado otros autores [Odette 97]. Esta visualización confirma la limitada capacidad de agrupación de las vacantes en los metales bcc, lo que se debe a que los átomos excitados de Cu, si existe un tiempo suficiente de annealing, forman capas alrededor de un núcleo rico en vacantes. Este mecanismo se relaciona con el aumento de la difusión de los átomos de Cu cercanos al núcleo de la cascada por conducto de las vacantes generadas.

CINÉTICA POR MONTECARLO: TEORÍA Y ALGUNOS EJEMPLOS

El uso del método de MonteCarlo para resolver la ecuación del transporte (y de manera más sencilla "la de difusión") de partículas es tan viejo como la aparición de los primeros ordenadores, y los primeros problemas nucleares. En secciones anteriores se ha dado alguna referencia sobre la

aplicación histórica de esta técnica al problema del estudio de los mecanismos de daño por irradiación a escala microscópica. Se puede concluir que los elementos claves que "un neutrónico" espera encontrar en el desarrollo de la técnica se encuentran también aquí. El sistema de partículas resulta ser tipos de defectos, de los que habrá que saber como nacen, como se mueven y como mueren. Es decir, como siempre, y con la suficiente (¡ay!) estadística.

El código que se está usando para realizar este tipo de cálculos KMC, y que es representativo de la última generación de estos programas, es el BIGMAC [Caturla 99a] desarrollado en el Laboratorio Nacional Lawrence Livermore (LLNL) y que ha sido aplicado a diferentes materiales, V, Fe, Cu, Au, Ni, Al [Díaz de la Rubia 97, Soneda 98, Caturla 99b, Alonso 99a]. El punto de partida es la definición del estado primario de daño (posiciones de vacantes e intersticiales) obtenidas de las cascadas de desplazamiento. Cada defecto, incluyendo las agrupaciones, tiene una energía de activación que deberá de ser calculada u obtenida del conocimiento experimental. Se producen saltos de los defectos en 1-2-3 dimensiones dependiendo del tipo, con una probabilidad proporcional a su difusividad, que es una función de la temperatura, de un pre-factor exponencial y de la energía de migración ($D = D_0 \cdot \exp(-E_m/kT)$). Al considerar la disociación de las agrupaciones aparece una expresión similar donde la energía de migración es sustituida por la energía de disociación que depende de la energía de ligadura (E_b) de un defecto en la agrupación. Las Tablas de estos factores son determinadas previamente, y no necesitan ser modificadas, por Dinámica

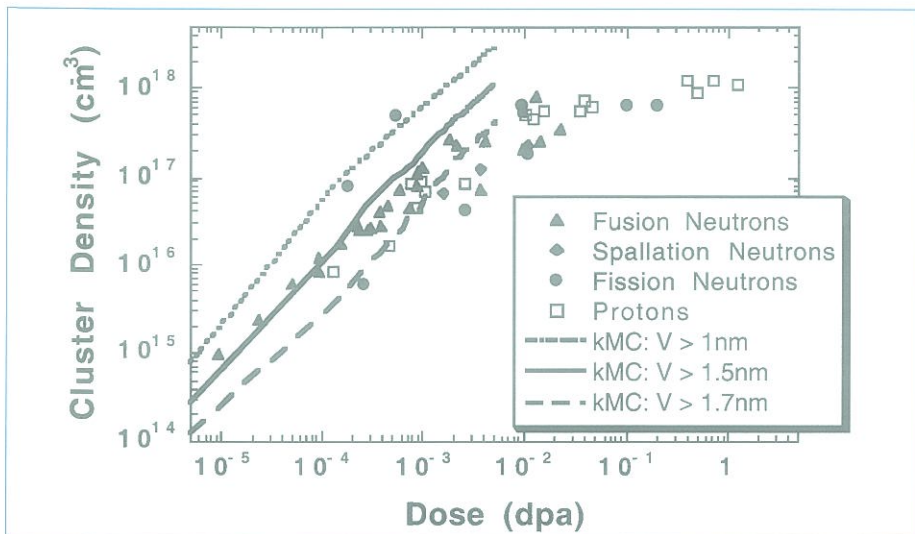


Figura 4.- Densidad de Agrupaciones "Visibles" de Cu. Comparación con los resultados experimentales obtenidos con diversas fuentes de partículas. Se consideran tres tamaños de agrupaciones "visibles" en las simulaciones: agrupaciones de vacantes de tamaños 1, 1.5 y 1.7 nm.

Molecular ó experimentalmente. La tasa con la que las cascadas son introducidas en la simulación se obtiene del flujo de partículas que generan daño en la irradiación. Con estos datos, en cada paso de tiempo se elige aleatoriamente un posible suceso, para lo que se le asigna una probabilidad proporcional a la tasa de acaecimiento. Elegido el suceso se procede a continuar de manera *determinista* con los mecanismos físicos a los que se sabe da lugar el mismo. El tiempo de simulación se incrementa teniendo simplemente en cuenta la inversa de la suma de las tasas de todos los sucesos susceptibles de darse en el sistema (*por lo que aparece el producto de la tasa del suceso por el número de defectos/partí-*

culas en los que se puede producir). Obsérvese que esa inversa no es sino un "tiempo para un suceso". Un proceso físico se da en cada paso de KMC, de manera que el cálculo final puede extenderse por un tiempo muy largo de computación. Un último factor necesario es el del *radio de captura* de la interacción defectos.

Los ejemplos que se presentan a continuación se centran en: i) el cálculo de daño sobre Fe y Cu [Caturla 99b] donde se puede visualizar una muy buena comparación con los experimentos hasta ahora existentes en el caso del Cu, y ii) el cálculo que sobre Fe se realizó por primera vez para estudiar el efecto de una irradiación pulsada típica de un reactor de fusión por

confinamiento inercial [Alonso 99b]. La descripción de los parámetros y eventos considerados en cada caso se puede encontrar en las referencias dadas.

Para la simulación del daño en Cu y Fe [Caturla 99b] se usaron hasta 20 cascadas diferentes previamente calculadas (para poder disponer de una suficiente estadística), con una tasa de introducción en la celda geométrica de KMC de 10^{-4} dpa/s, y con unas temperaturas de simulación de $T = 0.25 T_{\text{fusión}}$, lo que significa $T_{\text{Cu}} = 340$ K, $T_{\text{Fe}} = 363$ K. En el caso del Fe se consideró un total de 5 partes por millón de átomos intersticiales de impurezas para dar cuenta de la existencia *típica* de las mismas en los metales bcc, de manera diferente a la alta pureza posible en Cu. Centrándonos en el resultado más espectacular, la Figura 4 representa la densidad de agrupaciones *visibles* en Cu como una función de la dosis acumulada, y su comparación con los resultados experimentales obtenidos con neutrones y protones [Dai 97]. Se consideran tres tamaños de agrupaciones visibles, correspondientes a las de vacantes de 10, 20 y 25 defectos, y que se corresponden a *stacking fault tetrahedral*, SFT de 1, 1.5 y 1.7 nm de tamaño respectivamente. La resolución microscópica se estimó en ≈ 1 nm. El resultado muestra un fantástico acuerdo entre la simulación hasta dosis ya elevadas, y los resultados experimentales cuando se consideran agrupaciones con tamaños superiores a 1.5 nm como visibles. Los resultados del cálculo por KMC tienen un muy buen acuerdo hasta dosis de $\approx 10^{-2}$ dpa, debiendo extenderse para dosis superiores y considerar efectos de solapamiento que pueden ser importantes en esos casos. Aunque la dosis de simulación es superior a la de los experimentos a la hora de acumular el daño, la temperatura de comparación es solo de 340 K, por lo que las vacantes se encuentran típicamente formando agrupaciones, y los resultados no deben presentar diferencias apreciables.

En el funcionamiento de la Fusión por Confinamiento Inercial (FCI) aparece intrínsecamente la *naturaleza pulsada de la generación de energía*. Durante mucho tiempo se ha especulado sobre la repercusión que este mecanismo tendría sobre el sistema de ingeniería en general, y sobre los materiales en particular. Consecuencias en su respuesta térmica, activación neutrónica y efectos del daño. Muy recientemente se abordó en primera el estudio de las bases de este conocimiento [Alonso 99b], simulando en un metal puro (Fe) el efecto de la

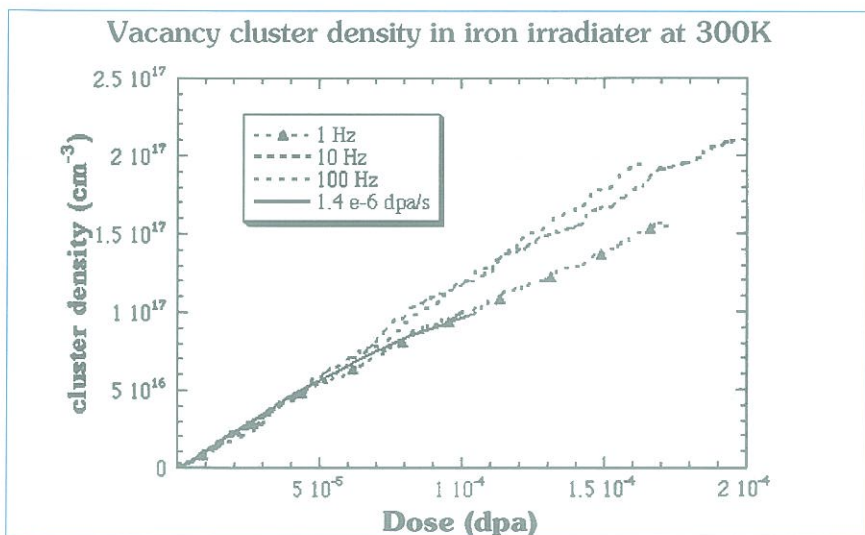


Figura 5.- Concentración de agrupaciones de vacantes en función de la dosis para la irradiación pulsada de Fe con neutrones de 14 MeV a 300K. Se consideran tres frecuencias de irradiación: 1, 10, 100 Hz, comparadas con una irradiación continua de 1.4×10^{-6} dpa/s.

radiación pulsada en FCI en una escala microscópica abarcada por DM y KMC. Las cascadas de desplazamiento introducidas en el cálculo de Cinética por MonteCarlo fueron determinadas de manera realista usando DM y un espectro de Átomos Primarios de Retroceso correspondiente al generado por el espectro de neutrones en primera pared de un reactor de fusión. Se consideraron energías de APR de 150, 250 y 300 keV, con un flujo (tasa de dosis) de 1.4 dpa/s en el pulso y una duración de 1 μ s. Asumiendo una frecuencia de disparo FCI de 4 Hz, se tiene una dosis total anual de 150 dpa/año, que se corresponde con lo esperado en esos reactores en primera pared. El cálculo se realizó para diversas condiciones de frecuencia de disparo, y cada pulso (1 μ s) se simuló con seis cascadas extraídas de forma aleatoria según el espectro de APR antes mencionado. Se incluyen impurezas (5 appm) con una energía de ligadura de intersticial e impureza de 1.1 eV, y el tamaño de la celda de simulación fue cúbica de lado 300 nm, lo que implica en su conjunto un total de dosis acumulada de $\approx 10^{-4}$ dpa. La Figura 5 representa la densidad de agrupaciones de vacantes en Fe irradiado a diferentes frecuencias a la temperatura de 300 K y comparadas con el caso de irradiación estacionaria en un caso de fusión por confinamiento magnético donde el espectro es el mismo. La conclusión fundamental es que la densidad de agrupaciones es inferior cuanto menor es la frecuencia del pulso, y también se observó que el tamaño de dichas agrupaciones es mayor al disminuir la frecuencia. En general el efecto de la pulsación no se aprecia a altas tasas de frecuencia pero sí para los valores inferiores de 1 Hz que son comparables con la hipótesis continua, siendo claramente el tiempo entre pulsos (inverso a la frecuencia) quien controla íntimamente el desarrollo observado de las agrupaciones, dando (ó no) tiempo para que se produzcan agrupaciones de mayor tamaño. Estos efectos pueden tener consecuencias en la fragilización previsible de las vasijas de los reactores que deben de ser estudiados con la consideración de este aspecto.

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean reconocer la ayuda y colaboración fundamental en el conocimiento y uso de las técnicas aquí expuestas, así como el trabajo conjunto que está reflejado en este artículo, de los Dres. Tomás Díaz de la Rubia (Director del Grupo de Computación), María José Caturla, y Eduardo Alonso, de la División de Química y Materiales del Laboratorio Nacional Lawrence Livermore

(LLNL/EE.UU.). Al Dr. Naoki Soneda (CRIEPI, Japón), al Dr. Max Victoria (PSI Villigen, Suiza), y al Prof. L. Colombo (Universidad de Milan, Italia) por las fructíferas conversaciones en algunos aspectos aquí reseñados. Al Prof. G. Velarde por su permanente entusiasmo en impulsar esta línea de investigación dentro del Programa de Fusión por Confinamiento Inercial. Al Dr. Carlos Alejandre (CIEMAT) por hacer posible la imprescindible realidad de un ordenador capaz, y por creer en lo que hacemos. Una parte de este trabajo ha sido realizado dentro del Programa Coordinado de Investigación del Consejo de Seguridad Nuclear y UNESA, Proyecto VENUS; desde aquí agradecer la confianza científica que en esta línea han depositado todos los responsables y colegas del CSN, UNESA, CIEMAT y TECNATOM, y muy especialmente a los coordinadores A. Esteban y J.F. Calvo por su inmensa labor de asimilación, y a la Dra. Dolores Gómez Briceño y su equipo del CIEMAT por estar en nuestro presente y futuro.

REFERENCIAS

- [Adams 94] Adams, J.B., Rockett, A., Kieffer, J., Xu, W., Nomura, M., Kilian, K.A., Richards, D.F., Ramprasad, R. *J. of Nucl. Mater.* 216 (1994) 265
 [Ackland 97] Ackland, G.J., Bacon, D.J., Calder, A.F., Harry, T., *Philos. Mag. A* 75 (1997) 713
 [Alder 57] Alder, B.J., Wainwright, T.E., *J. Chem. Phys.* 27 (1957) 1208
 [Alonso 99a] Alonso, E., Caturla, M.J., Díaz de la Rubia, T., Perlado, J.M., en *Proceedings of the International Workshop on the Basic Aspects of the Differences in Radiation Damage between FCC and BCC metals and alloys*, Octubre 1998, a publicar en *J. Nucl. Mater.* (1999)
 [Alonso 99b] Alonso, E., Caturla, M.J., Díaz de la Rubia, T., Marian, J., Perlado, J.M., Stoller, R., *Flux Effects on defect production and damage accumulation in Cu and Fe to exposed IFE-like conditions*, Informe Lawrence Livermore National Laboratory UCRL-JC-135448 (1999); presentado en 1st International Conference on Inertial Fusion Science and Applications (IFSA99), Burdeos, Septiembre 1999, a publicar en el Libro de la Conferencia [Elsevier Pub 2000].
 [Allen 87] Allen, M.P., Tildesley, D.J., *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press, Nueva York, (1987)
 [Andersen 80] Andersen, H.C., *J. Chem. Phys.* 72 (1980) 2384
 [Averback 98] Averback, R.S., Díaz de la Rubia, T., *Displacement damage in irradiated metals and semiconductors*, *Solid State Physics*, 51 (1998)
 [Barojas 73] Barojas, J., Levesque, D., Quentre, B., *Phys. Rev. A* 7 (1973) 1092
 [Besco 67] Besco, D.G., *Computer Simulation of Point Defect Annealing in Metals*, USA-AEC Report GEMP-644, Octubre 1967
 [Beeler 83] Beeler, J.R., Jr., *Radiation Effects Computer Experiments*, North-Holland, Amsterdam, 1983
 [Biersack 80] Biersack, J.P., Haggmark, L.G., *Nucl. Instr. Meth.* 174 (1980) 257
 [Car 85] Car, R., Parrinello, M., *Phys. Rev. Lett.* 55 (1985) 2471
 [Car 88] Car, R., Parrinello, M., *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988) 204
 [Caturla 99a] Caturla, M.J., comunicación privada (1999)
 [Caturla 99b] Caturla, M.J., Soneda, N., Alonso, Wirth, B.D., Díaz de la Rubia, T., Perlado, J.M., *Comparative study of radiation damage accumulation in Cu and Fe*, *Journal of Nuclear Materials* (1999) en prensa.
 [Ceperley 79] Ceperley, D., Tully, J., Eds., *Proc. Nat. Resource comp. Chem.* 6 (1979)
 [Ciccotti 79] Ciccotti, G., Jacucci, G., McDonald, I.R., *J. Stat. Phys.* 21 (1979) 1
 [Colombo 95] Colombo, L., Maric, D., *Europhys.*

- Lett.* 29 (1995) 623
 [Corbin 82] Corbin, N., Singer, K., *Mol. Phys.* 46 (1982) 671
 [Chapela 77] Chapela, G.A., Saville, G., Thompson, S.M., Rowlinson, J.S., *J. Chem. Soc. Faraday II* 73 (1977) 1133
 [Dai 97] Dai, Y., Victoria, M., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol 439* (1997) 319.
 [Daw 83] Daw, M.S., Baskes, M.I., *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983) 1285
 [Daw 84] Daw, M.S., Baskes, M.I., *Phys. Rev. B* 29 (1984) 6443
 [Devanathan 98] Devanathan, R., Díaz de la Rubia, T., Weber, W.J., *J. Nucl. Mater.* 253 (1998) 47-52
 [Díaz de la Rubia 91] Díaz de la Rubia, T., Guinan, M., *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 2766.
 [Díaz de la Rubia 96] Díaz de la Rubia, T., Perlado, J.M., Tobin, M., *J. Nucl. Mater.* 233-237 (1996) 1096
 [Díaz de la Rubia 97] Díaz de la Rubia, T., Soneda, N., Caturla, M.J., Alonso, E., *J. Nucl. Mater.* 251 (1997) 13
 [Doran 70] Doran, D.G., *Rad. Eff.* 2 (1970) 249
 [Finnis&Sinclair 84] Finnis, M.W., Sinclair, J.E., *Philos. Mag.* 50, (1984) 45
 [Foiles 86] Foiles, S.M., Baskes, M.I., Daw, M.S., *Phys. Rev. B* 33 (1986) 7983
 [Garner 88] Garner, F.A., *The influence of both major and minor element composition on void swelling in simple austenitic steels*, 13th ASTM Int. Symp. On Effects of Radiation Materials, Seattle, WA 1988, HEDL-SA-3433 (1986), *J. Nucl. Mater.* 155-157 (1988) 833
 [Ghoniem 88] Ghoniem, N., Amodeo, R.J., *Sol. Stat. Phenom.* 3 & 4 (1988) 379
 [Goodwin 89] Goodwin, L., Skinner, A.J., Pettiford, D.G., *Europhys. Lett.* 9 (1989) 701
 [Heinisch 83] Heinisch, H., *J. Nucl. Mater.* 117 (1983) 46
 [Heinisch 94] Heinisch, H., Singh, B.N., Díaz de la Rubia, T., *J. Nucl. Mater.* 212-215 (1994) 127
 [Heermann 86] Heermann, D.W., *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*, Springer-Verlag, Berlin, (1986)
 [Huang 95] Huang, H., Ghoniem, N.M., Wong, J.K., Baskes, M.I., *Model. Sim. Mater. Sci. Eng.* 3, (1995) 615
 [Inui 92] Inui, H., Mori, H., Suzuki, A., Fujita, H., *Phil. Mag.* B65 (1992) 1-14
 [Kelly 66] Kelly, B.T., *Irradiation damage to solids*, Pergamon Press, New York (1966)
 [Khan 89] Khan, F.S., Broughton, J.Q., *Phys. Rev. B* 39 (1989) 3688
 [Malerba 2000] Malerba, L., Perlado, J.M., Sánchez-Rubio, A., Pastor, I., Colombo, L., Díaz de la Rubia, T., *Molecular Dynamics Simulation of Defect Production in irradiated b-SiC*, aceptado para su publicación en *J. Nucl. Mater.* (2000).
 [Mansur 87] Mansur, L.K., in *Kinetics of Non Homogeneous Processes*, ed. G.R. Freeman (J. Wiley, New York, 1987) p. 377
 [Marian 2000] Marian, J., Perlado, J.M., Lodi, D., Gómez-Briceño, D., deDiego, G., Hernández, M., Díaz de la Rubia, T., Caturla, M.J., A direct comparison between experiments and computer simulation of irradiation damage evolution in metals. Introduction of the effect of Copper solute atoms in the simulation of ferritic steels, aceptado para presentación oral en 20th Symposium on Effects of Radiation on Materials ASTM, Williamsburg, June 6-8 (2000), a publicar en *ASTM Series Book*.
 [McCammon 77] McCammon, J.A., Gelin, B.R., Karplus, M., *Nature* 267 (1977) 585
 [Metropolis 53] Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H., Teller, E., *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087
 [Nosé 83] Nosé, S., Klein, M.L., *J. Chem. Phys.* 78 (1983) 6928
 [Odette 97] Odette, G.R., Wirth, B.D., *J. Nucl. Mater.* 251 (1997) 157

[Olander 76] Olander, D.R., *Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements*, TID 26711-P1, Technical Information Center, Office of Public Affairs Energy Research and Development Administration (1976)

[Pangali 78] Pangali, C., Rao, M., Berne, B.J., *Chem. Phys. Lett.* 55 (1978) 413

[Parrinello 81] Parrinello, M., Rahman, A., *J. Appl. Phys.* 52 (1981) 7182

[Parrinello 83] Parrinello, M., Rahman, A., Vashishta, P., *Phys. Rev. Lett.* 50 (1983) 1073

[Pawley 82] Pawley, G.S., Thomas, G.H., *Phys. Rev. Lett.* 48 (1982) 410

[Perlado 93] Perlado, J.M., Sanz, J., *Irradiation effects and activation in structural materials*, chapter 24 en *Nuclear Fusion by Inertial Confinement*, Velarde, G., Martínez-Val, J.M., Ronen, Y. (Eds.) CRC Press (1993)

[Perlado 95] Perlado, J.M., Guinan, M.W., *Structural Materials*, Capítulo en el Libro *Energy from Inertial Fusion*, Hogan, W. et al (Editores) IAEA (1995), y Perlado, J.M., Tobin, M., Kalin, B. Mori, S., *Induced Activity Production in Inertial Fusion Reactors*, Capítulo en el libro referenciado anteriormente.

[Perlado 97] Perlado, J.M., *Behavior and computer simulation of SiC under irradiation with energetic particles*, *J. Nucl. Mater.* 251 (1997) 98-106

[Perlado 98] Perlado, J.M., Malerba, L., Díaz de la Rubia, T., *Fus. Tech.* 34 (1998) 279-1194

[Perlado 99a] Perlado, J.M., Malerba, L., Díaz de la Rubia, T., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 540 (1999) 171-176

[Perlado 99b] Perlado J.M., Malerba L., Sánchez-Rubio A., Díaz de la Rubia T., *Analysis of displacement cascades and threshold displacement energies in b-SiC*, *J. Nucl. Mater.* 276 (1999) 235-

242

[Perlado 99c] Perlado, J.M., Marian, J., Lodi, D., Díaz de la Rubia, T., *Computer simulation of the effect of copper on defect production and damage evolution in ferritic steels*, *Materials Research Society, Fall Meeting (1999)*, aceptado publicación en *Mat. Res. Soc. Proc. Series Book* (2000)

[Robinson 72] Robinson, M.T., *The dependence of radiation effects on the primary recoil energy, in Radiation induced voids in metals*, Corbett, J.W., Ianiello, L.C. (Eds.), *US Atomic Energy commission, Series, No. 26 (CONF-71061)*, (1972) 397

[Ryckaert 75] Ryckaert, J.P., Bellemans, A., *Chem. Phys. Lett.* 30 (1975) 123

[Ryazanov 96] Ryazanov, A., Braski, D., Schroeder H., Trinkaus, H., *J. Nucl. Mater.* 233-237B (1996) 1076

[Sanz 88] Sanz, J., de la Fuente, R., Perlado, J.M., *Impact of the neutron flux on transmutation products at fusion reactor first-walls*, *J. Nucl. Mater.* 155-157 (1988) 592

[Sanz 92a] Sanz, J., Perlado, J.M., Guerra, D., Pérez, A.S., *First structural wall materials for attractive waste management in ICF reactors*, *Fusion Technol.* 21 (1992) 2009-2016

[Sanz 92b] Sanz, J., Perlado, J.M., Pérez, A.S., Guerra, D., *Low activation structural materials for ICF reactors: differences with MCF environments*, *J. Nucl. Mater.* 191-194 (1992) 1450-1454

[Sanz 94] Sanz, J., Pérez, A.S., Perlado, J.M., Zucchetti, M., *Accidental release characteristics of activated materials in inertial and magnetic fusion reactors*, *J. Nucl. Mater.* 212-215 (1994) 673-677

[Sanz 96] Sanz, J., Juan, J., Łatkowski, J.F., *Uncertainty analysis in fusion activation calculations: Applications to the waste disposal assessment of HYLIFE-II structure*, *Fusion Technol.* 30

(1996) 1557-1563

[Slater 54] Slater, J.C., Koster, G.F., *Phys. Rev.* 94 (1954) 1498

[Soneda 98] Soneda, N., Díaz de la Rubia, T., *Phil. Mag.* A78 (1998) 995

[Stillinger 75] Stillinger, F.H., *Adv. Chem. Phys.* 31 (1975) 1

[Stillinger&Weber 85] Stillinger, F.H., Weber, T., *Computer simulation of local order in condensed phase of silicon*, *Phys. Rev. B* 31 (1985) 5262-5271

[Tersoff 86] Tersoff, J., *New empirical model for the structural properties of silicon*, *Phys. Rev. Lett.* 56 (1986) 632-635

[Tersoff 88] Tersoff, J., *New empirical approach for the structure and energy of covalent systems*, *Phys. Rev. B.* 37 (1988) 6991-7000

[Tersoff 89] Tersoff, J., *Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems*, *Phys. Rev. B* 39 (1989) 556-558

[Tersoff 90] Tersoff, J., *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990) 1757

[Tersoff 94] Tersoff, J., *Phys. Rev. Lett.* 49 (1994) 16349

[Turq 77] Turq, P., Lantelme, F., Friedman, H.L., *J. Chem. Phys.* 66 (1977) 3039

[Ullmaier 80] Ullmaier, H., Schilling, E., *Radiation damage in metallic reactor materials*, in *Physics of Modern Materials*, International Atomic Energy Agency, Vienna (1980) 301

[Verlet 68] Verlet, L., *Phys. Rev.* 165 (1968) 201

[Wong 94] Wong, J., Díaz de la Rubia, T., Guinan, M.W., Tobin, M., Perlado, J.M., Pérez, A.S., Sanz, J., *J. Nucl. Mater.* 212-215 (1994) 143

[Ziegler85] Ziegler, J.F., Biersack, J.P., Littmark, U., *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, Oxford (1985)



J. Manuel Perlado Martín, es Doctor Ingeniero Industrial (Universidad Politécnica de Madrid / UPM). Catedrático de Física Nuclear de la ETS Ingenieros Industriales Madrid (UPM). Miembro desde su fundación del Instituto de Fusión Nuclear (DENIM) de la UPM. Profesor invitado del Instituto de Ingeniería del Láser (ILE, Universidad de Osaka). Científico visitante del Lawrence Livermore National Laboratory, del CERN y otros. Su interés se centra en Métodos de Transporte de partículas, Fusión por Confinamiento Inercial (diseño de blancos y envolturas, y activación neutrónica), Transmutación de Residuos Radiactivos, Simulación Computacional del Daño por Radiación en los materiales de fusión, y en los aceros de vasijas de los reactores nucleares.



Lorenzo Malerba, es Ingeniero Nuclear por el Politécnico de Milán. Ingeniero Industrial por la ETS Ingenieros de Madrid (UPM). Lectura de la Tesis Doctoral, desarrollada en el Instituto de Fusión Nuclear (UPM), en la ETSII/UPM sobre el Daño por Radiación en el Carburo Silicio en el año 2000. Becario de la Unión Europea dentro del Programa Marie Curie para la Fusión Termonuclear, a través de la Asociación CIEMAT/EURATOM y del convenio Instituto de Fusión Nuclear/CIEMAT. Ha publicado diversos artículos en revistas (*Journal of Nuclear Materials*, *Fusion Technology* y *Materials Research Society*), en libros, y participado en diversas conferencias. Su trabajo se desarrolla en el área de la Simulación por Dinámica Molecular y "Tight Binding" de la producción y acumulación de daño, así como de la amorfización del carburo de silicio.



Jaime Marian de Diego, es Ingeniero Industrial por la ETS Ingenieros Industriales de Madrid (UPM). Realiza el Doctorado (1999-2000) en el Departamento de Ingeniería Nuclear de la ETSII de la UPM. Becario de la UPM en el marco del Convenio VENUS del Consejo de Seguridad Nuclear, UNESA, CIEMAT, TECNATOM e Instituto de Fusión Nuclear, desde el año 1998 hasta la actualidad. Becario asociado al Lawrence Livermore National Laboratory / Materials and Chemistry Division durante el año 2000. Ha publicado diversos artículos en revistas (*Nuclear Technology*, *Materials Research Society*, *Fusion Engineering Design*), en libros, y presentaciones en Gordon Conference (1999) y otras. Su trabajo se desarrolla en la Activación Neutrónica en la fusión inercial; Neutrónica 3D por MonteCarlo; y Daño por radiación en metales y aleaciones metálicas con Simulaciones por Dinámica Molecular y Cinética por MonteCarlo.