

AVANCES EN LA SIMULACIÓN MULTIESCALA DEL DANO POR IRRADIACION DE MATERIALES

J.M. PERLADO - M.J. CATURLA - J. MARIAN - C. ARÉVALO - E. DOMÍNGUEZ -
D. LODI - E. MARTÍNEZ - F. MOTA - M. SALVADOR

Se presentan nuevos avances y áreas de Investigación del daño de materiales por irradiación basados en la Simulación Computacional Multiescala en España y centrados en la Universidad Politécnica Madrid y la Universidad de Alicante, y sus colaboraciones. Los resultados permiten concluir la consolidación de esta investigación como herramienta predictiva. La última fase de la secuencia multiescala, determinación de las magnitudes macroscópicas como es la determinación de curvas de tensión-deformación, se ha comenzado a realizar con éxito para el Fe y FeCu. La descripción de los mecanismos de difusión de defectos en el carburo de silicio (SiC, material de baja activación fundamental para la fusión nuclear) se ha resuelto generando los coeficientes necesarios con un nuevo modelo cuasi mecano-cuántico. El mecanismo básico de desplazamiento atómico y su umbral energético en la sílice amorfa (SiO₂) se ha comenzado a describir, después de abordar la formación de cascadas y tipos de defectos existentes en este material, fundamental como óptica en los sistemas de fusión. El estudio del Zr, como primer paso para la comprensión de los efectos de la irradiación en el ZrNb (combustibles de alto quemado en fisión) se ha comenzado, estableciendo la morfología de los defectos así como las necesidades de datos básicos.

New advances and research areas in Multiscale Modeling of Materials Radiation Damage are presented considering work performed in Universidad Politécnica Madrid, Universidad de Alicante and their collaborations. Results allow to conclude this research is being well proved as a key predictive tool. Last phase of sequential Multiscale Modeling, which corresponds to obtain macroscopic responses, has been started with good results in Fe and FeCu. Defects diffusion mechanisms in silicon carbide (SiC, low activation material in nuclear fusion) can now be solved obtaining defects energetic with a new quasi-quantum-mechanics code. Basic mechanisms of atomic displacement and threshold energies in amorphous silica (SiO₂) are being understood by using molecular dynamics, after cascade formation and type of defects was assessed in this key optical material in nuclear fusion. Study of Zr has been started as a first approach to understand effects of irradiation in ZrNb (high burnup fuels in nuclear fission), and morphology of defects and basic diffusion data needed has been summarised.

INTRODUCCIÓN

Desde que se presentaron en el año 2000 en Nuclear España [1] las bases de la **Simulación Computacional Multiescala** para investigar los mecanismos

de daño por irradiación en materiales desde su fase atómica hasta la macroscópica, hasta la fecha, el progreso y las prioridades de esta investigación se han desarrollado y sistematizado de manera muy significativa, ligando su validación a los experimentos propuestos en cada fase.

Su característica de metodología predictiva y alternativa/complementaria con los experimentos se ha confirmado, pero acotando ahora de manera mucho más ordenada las necesidades existentes de datos básicos para cumplir con dicha misión; lo que recuerda en algunos aspectos la "construcción" de las bien establecidas, desde hace años, bases de datos nucleares. La extensión de la escala atómica, conectada con la microscópica, hasta los resultados macroscópicos se está realizando con éxito, y la aplicación a nuevos materiales no-metálicos, o estructuralmente menos estudiados avanza de manera significativa. No sólo la Investigación y los Proyectos en el Área de Fisión Nuclear, sino en el de Fusión Nuclear y en el de la explicación de los efectos que acaecen en los Blancos y Ventanas de Espalación de los Sistemas Subcríticos guiados por Acelerador, incluyen cada vez de manera más intensa en fondos y laboratorios la Simulación Multiescala del Daño por Irradiación de sus Materiales.

El número de Proyectos Internacionales en esta Investigación se ha visto incrementado de manera muy importante en estos últimos años: Red Temática ITEM de la Unión Europea pa-

ra la coordinación de los trabajos en el Área de Simulación Multiescala del daño por irradiación (5º Programa Marco); Proyecto Integrado SIRENA Unión Europea (5º Programa Marco) para el estudio del ZrNb; Proyecto Internacional REVE para la producción de una herramienta multiescala de simulación desde la escala micro a la macroscópica que estudie desde aleaciones metálicas simples hasta aceros de vasija; Proyecto Integrado PERFECT Unión Europea (6º Programa Marco) para la sistematización de los modelos de simulación multiescala con los experimentos parcialmente generados en ese Proyecto y los extraídos de otros similares sobre aceros de vasija e internos de los reactores; Proyecto Español VENUS-II financiado y auspiciado por el Consejo de Seguridad Nacional (CSN) y la Asociación de la Empresas Eléctricas (UNESA). En todos estos Proyectos participan de manera protagonista tanto el Instituto de Fusión Nuclear de la UPM como el Departamento de Física de la Universidad de Alicante, y en algunos de ellos científicos de la Universidad Politécnica de Cataluña, con su contribución de modelos y teoría multiescala de materiales, así como el CIEMAT, y en alguno la Universidad Complutense de Madrid y la Universidad Carlos III, desde la perspectiva experimental.

Además, en el desarrollo de la fusión nuclear y a través de las tareas EFDA del Programa EURATOM / Unión Europea en el 5º y 6º Programa Marco, esta investigación es considerada y financiada en el Área de Materiales

desde el año 2002 dentro de la Investigación a largo plazo ("Long Term"), con una importante contribución de dichos grupos españoles tanto en lo que se refiere al daño en los aceros de Activación Baja y Reducida de naturaleza Ferrítico-Martensítica y los procesos de fabricación para aumentar su temperatura de operación, como en los materiales cerámicos de ventana, y en los materiales compuestos de baja activación más avanzados basados en el SiC. Además en esta investigación de fusión sobre los materiales mencionados, el Programa Nacional de Investigación y Desarrollo del Ministerio de Ciencia y Tecnología contribuye de manera importante.

DETERMINACIÓN POR SIMULACIÓN MULTIESCALA DE LA DUREZA EN Fe- α

Esta investigación cuyos sucesivos hitos en la secuencia multiescala han ido siendo publicados [2,3,4], llega en su última fase a la determinación de la magnitud macroscópica de interés: dureza del material y su curva tensión-deformación [5]. Es esta perspectiva la que se desea poner de relieve aquí.

Los aceros ferrítico-martensíticos de activación reducida son considerados materiales estructurales candidatos para los reactores de fusión nuclear por su resistencia al endurecimiento y fragilización a temperaturas inferiores a 400 °C, temperatura de trabajo que se podría ver incrementada bajo el proceso de fabricación en desarrollo conocido como "Oxide Dispersion Strength (ODS)" en el que se busca una estructura nanocristalina. Las experiencias sobre los materiales irradiados indican que la existencia de grandes bucles de dislocación de naturaleza intersticial y de vector de Burgers (*medida de su orientación*) $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ y $\langle 100 \rangle$ son fundamentales al explicar los efectos de endurecimiento y fragilización a bajas temperaturas. Se ha estudiado el efecto que tiene una alta densidad de agrupaciones de defectos, huecos y pequeños precipitados al impedir el libre movimiento de las dislocaciones en el material. El desarrollo de nuevas teorías, fundadas en los resultados de simulación, en las que se describe la naturaleza de dichos bucles de dislocaciones intersticiales, el efecto de las impurezas sustitucionales en la migración de las agrupaciones $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, y el estudio de la formación y crecimiento de los de tipo $\langle 100 \rangle$ a partir de los más pequeños $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, que aparecen en las cascadas de desplazamiento iniciales, ha permitido conciliar los conocimien-

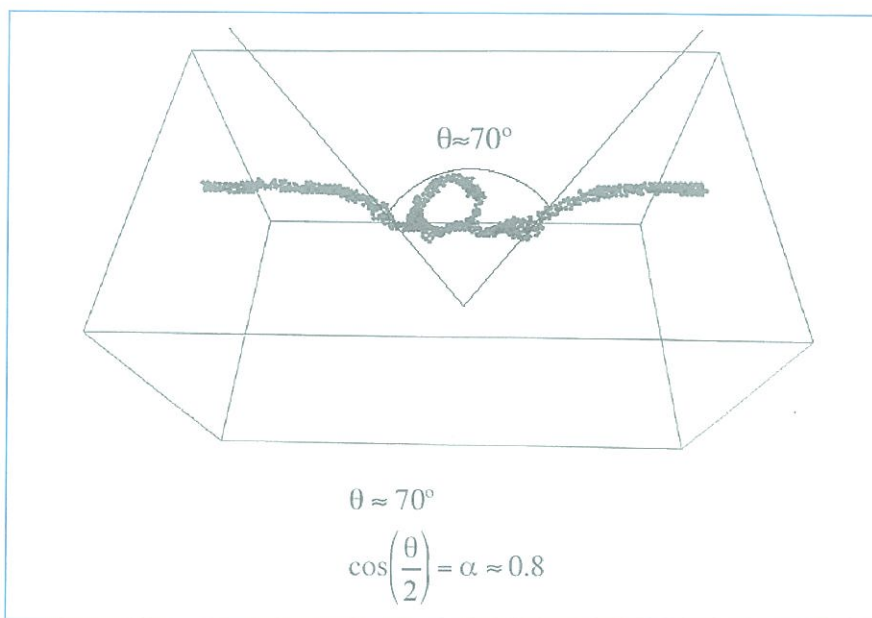


Figura 1.- Última imagen temporal antes de que la dislocación pase a través del obstáculo (agrupación defectos), dejando atrás un lazo $[100]$ y dos espirales muy curvadas de la línea de dislocación. El ángulo crítico es de $\theta = 70^\circ$, necesario para estimar la resistencia del obstáculo α .

tos que se tenían del endurecimiento y fragilización en Fe-a con los experimentos [2, 3, 4, 5]. Con ser esto crítico, **lo que se presenta en esta revisión es la última parte de la secuencia multiescala** relativa a la interacción de las dislocaciones del tipo tornillo (ya existentes en el material original y que se sabe son las responsables del control de la respuesta plástica de los materiales tipo bcc a baja temperatura y bajo tensión externa) con los anillos de dislocación de intersticiales $\langle 100 \rangle$, lo que además de permitir describir estos mecanismos mediante Dinámica Molecular, **permite asomarse a la estimación/cuantificación de la respuesta macroscópica de la dureza** expresada a través de la curva de tensión deformación en ese material; esto supone responder a *lo prometido* por la Simulación Multiescala.

La determinación de dicha magnitud macroscópica se puede realizar de manera simple a través del modelo de Orowan que da el cambio en la tensión $\Delta\tau$, $\Delta\tau = \alpha G b (Nd)^{1/2}$, como consecuencia de la aparición de un conjunto regular de defectos (*obstáculo*) en el plano de deslizamiento de las dislocaciones. Las variables que aparecen son: módulo de cizalladura (G); vector de Burgers de la dislocación (b); densidad de defectos (N); diámetro de los defectos (d), y un parámetro α ($= \cos(\theta/2)$) conocido como *resistencia del obstáculo* en los modelos de mecánica continua, y que viene medido a través del ángulo θ para el que la dislocación es capaz de sobrepasar el obstáculo y seguir su camino de deslizamiento.

La tensión de cizalladura aplicada originalmente fue de 750 MPa observándose que a esa tensión la dislocación permanecía atrapada por el obstáculo [5]. Usando los resultados obtenidos por la simulación multiescala, en los que se observa que el paso del obstáculo por la dislocación se produce para un ángulo de 70° (figura 1), de manera que la resistencia del obstáculo es de $\alpha = \cos(\theta/2) = 0,82$, y para una densidad de defectos de $1,2 \times 10^{23} \text{ m}^{-3}$, un diámetro de 2 nm, y un valor del módulo de cizalladura anisotrópico de 64 GPa, se determina un valor de $\Delta\tau = 195 \text{ MPa}$. Los valores de N y d son consecuencia del tipo de simulación, escala atómica de la dinámica molecular, y de lo que en ella se admite computacionalmente, de manera que se sabe que están sesgados para incluirlos en nuestra caja de simulación. El valor de $\Delta\tau$ es, en consecuencia, una primera aproximación, que se puede relacionar con la tensión real aplicada $\Delta\sigma_r (=T\Delta\tau)$, donde T es el factor de Taylor con un valor de 3,06, cuyo valor sería de 590 MPa. **Estos valores calculados por primera vez usando la metodología atomista son superiores a los experimentales en un 50%, pero demuestran por primera vez (aún con la imprecisión cuantitativa que necesita ser refinada) la posibilidad de relacionar los puntos de la curva de tensión a través de cálculo atomísticos y aproximaciones de la teoría continua.**

Un aspecto fundamental ha sido ser capaces de obtener imágenes equivalentes a las visibles mediante la Microscopía por Transmisión Electrónica

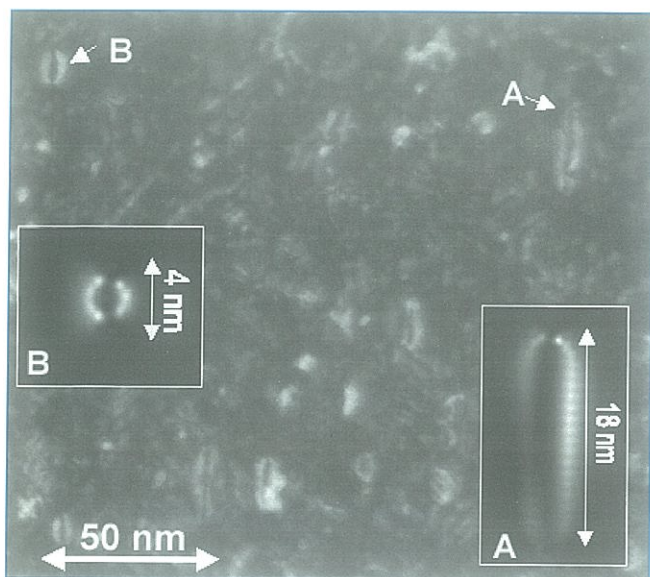


Figura 2.- Imagen experimental TEM de Fe-9Cr irradiado con neutrones hasta 8.8 dpa a 302°C. Las imágenes interiores representan el resultado de convertir vía computación los resultados de simulación multiescala (A) lazo rectangular de 18 nm, (B) lazo hexagonal de 4 nm, a la visualización experimental. Obsérvese el gran acuerdo existente entre experimento y simulación.

("TEM") a partir de los resultados que se alcanzan mediante la simulación multiescala a escala microscópica. Esto es hoy posible según se muestra en la figura 2, donde se comparan las imágenes obtenidas a partir de nuestros resultados de simulación con aquellos visibles mediante TEM siguiendo la técnica desarrollada en el Paul Scherrer Institute [6].

ENERGÍAS PARA LA DIFUSIÓN DE DEFECTOS EN SiC: NUEVO MODELO CUASI MECANO-CUÁNTICO

El carburo de silicio (SiC) es firme candidato junto a los aceros ferrítico-martensíticos, y a las aleaciones de vanadio a ser material estructural de primera pared de la cámara de reacción de un reactor de fusión nuclear. Los materiales estructurales deberán ser capaces de soportar las condiciones de irradiación extremas en un tiempo de vida que haga eficiente la operación de la planta, y un bajo índice de activación neutrónica tal que cuando la planta complete su ciclo (desmantelamiento) los materiales utilizados puedan ser reciclados, evitando así, un almacenamiento durante centenares de años.

La investigación sobre los materiales compuestos basados en el SiC se desarrolla en los programas de fusión de Europa/Euratom, Japón y EE.UU, pero de manera casi exclusiva en las áreas de procesos de manufactura eficientes y en la investigación experimental de las consecuencias de la irradiación en dichos materiales (ver números del

"Journal of Nuclear Materials" relativos a las conferencias "International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRMs)" o las "Fusion Energy Conferences" de la "International Atomic Energy Agency"). Sin embargo, el conocimiento de los procesos básicos del daño en el componente fundamental, (SiC), no recibe la misma atención y está lejos de ser alcanzado. Además, si bien en la escala atómica se han realizado muy diversos estudios y obtenido conclusiones [7, 8], la progresión en la simulación multiescala se ve interrumpida por la escasez (falta de existencia) de datos que permitan avanzar hacia

la escala microscópica.

En nuestro artículo del año 2000 [1] se explicaban los diferentes modelos de la metodología multiescala y se hacía notar la "perfección" de los métodos puros mecano-cuánticos ("ab initio") junto a su terrible coste y la limitación en el tamaño de las estructuras a manejar y el tiempo real a simular. Se ofrecía la posibilidad de otros modelos que, rescatando la precisión mecano-cuántica en una parte de la interacción, usasen a la vez "algunos" componentes semiempíricos reduciendo el coste de la simulación. Estos métodos aplicados al movimiento de los átomos se conocen como "tight binding molecular dynamics". Un modelo de este tipo se ha desarrollado con éxito ajustado al SiC, de manera que el término atractivo entre átomos del sistema reciba toda la atención mecano-cuántica (ahí está la componente más importante de fuerzas que agrupa a toda la estructura incluyendo los electrones), y la parte repulsiva entre ellos sea ajustada con un término semiempírico. El objetivo fundamental ha sido disponer por primera vez de una herramienta capaz de calcular las energías de formación, migración, activación, y coeficientes de difusión de todos los tipos de defectos posibles existentes en SiC, algo que se había demostrado inalcanzable usando la dinámica molecular clásica, y que como única alternativa tenía recurrir a los cálculos *ab initio* con un tremendo esfuerzo de computación. El código (TBSIC) ha sido desarrollado con éxito [9, 10] y comprobado frente a los resultados fundamentales de la estructura

del SiC y su dinámica. La figura 3 a) y b) representa las estructuras del SiC en equilibrio (0K) y la existente a una temperatura de 1.600 K, para la que se ha comprobado la validez de las posiciones relativas de los átomos en la red a través (cuantitativamente) de las correlaciones de pares de los mismos que miden las distancias relativas de los átomos vecinos, y su naturaleza, a uno dado. Además, y a través de la visualización de la conservación de energía en el tiempo y la energía cohesiva de los átomos de la red se han ajustado los parámetros de naturaleza empírica del término repulsivo de fuerzas. Con este modelo se han empezado a determinar las energías de movimiento de los defectos en SiC, así como las de formación y disolución de sus agrupaciones, con el objetivo último de, como ya hemos realizado para metales, poder pasar al estudio de su difusión e interacción a escala microscópica y en periodos de tiempo observables experimentalmente [11]. Junto a estos datos básicos, el modelo desarrollado ha permitido mostrar por primera vez mediante simulación que el mecanismo de difusión de los defectos intersticiales simples de C y de Si es el conocido como de "kick-out", por el que en su movimiento el intersticial reemplaza a otro átomo de su misma naturaleza en la red, provocando que éste sea el nuevo intersticial. En la figura 3 c) se ve la evolución con el tiempo de un intersticial de C en SiC, mostrando que tan sólo otro átomo de C es removido de su posición en la red sin alteración de los átomos de Si. La misma naturaleza preferente se observa en el caso del intersticial de Si y, en este caso, los átomos de Si de la red, con la diferencia de que el recorrido cuadrático medio es de solo 150 Å, inferior al del C, consecuencia del tamaño de los átomos de C y Si.

SIMULACIÓN DEL DAÑO POR IRRADIACIÓN EN SÍLICE AMORFA MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR

La sílice (SiO₂) en su estructura amorfa es el componente fundamental de gran parte de las ópticas usadas en los dispositivos láser de los sistemas de fusión por confinamiento inercial, como material de su focalización final, así como en las ventanas de calentamiento de los aparatos de fusión magnética. En consecuencia, resulta importante conocer cuál es el efecto que tiene la radiación sobre sus propiedades ópticas. Un esfuerzo importante se ha realizado en el ámbito experimental para preparar la entrada en funcionamiento de las nuevas instalaciones de demostración de

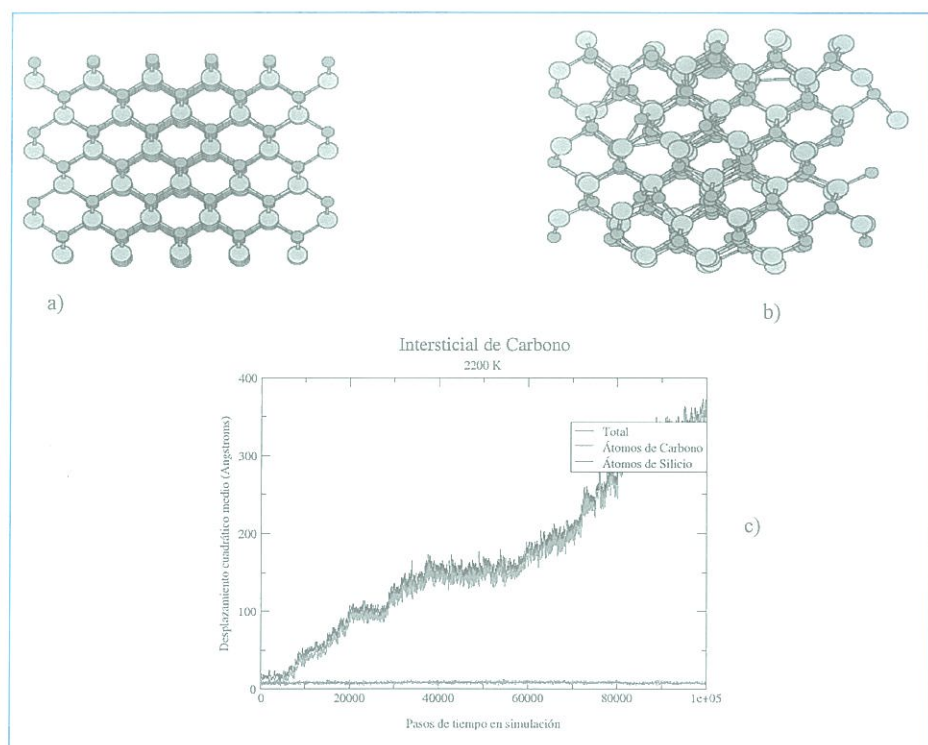


Figura 3.- Simulaciones usando el nuevo modelo cuasi mecano-cuántico para SiC: a) representación del cristal de SiC a temperatura 0K; b) visualización estructural de SiC a 1600K; c) desplazamiento cuadrático medio de un intersticial de carbono en SiC en función del tiempo, donde se observa el movimiento preferente de desplazamiento de átomos de su propia naturaleza como ocurre también con los Silicios a través del mecanismo de "kick out".

la ignición en fusión inercial, como la *National Ignition Facility (EE.UU.)*, pero dicha investigación se ha centrado en el problema más inmediato que era conocer la razón de la modificación de propiedades cuando la radiación era la del propio láser que se transmite a través de esas ópticas. Asociado a ese estudio experimental se realizaron las primeras simulaciones computacionales [12] usando la Dinámica Molecular que permitían conocer la estructura de las cascadas de desplazamiento en ese material a baja energía (Figura 4). Sin embargo, el objetivo actual es conocer los efectos de los neutrones emergentes de la fusión nuclear y su interacción con esos componentes ópticos. En trabajos anteriores [13] se determinaron los flujos y espectros de energía que se podían esperar en esos sistemas para un caso particular de diseño conceptual; no hace falta decir que esos valores se ven modificados por el concepto de reactor. En la primera fase de dicha investigación se ha considerado muy importante saber más sobre cómo se produce el desplazamiento de los átomos en esta estructura amorfa (es decir, saber sus energías umbrales de desplazamiento y dependencias de las mismas). Usando dinámica molecular como se describe en [12], y con un conjunto nuevo de modelos de diagnóstico computacional de la estructura, se

ha podido comenzar a simular el material provocando el movimiento de átomos de Si y O desde energías bajas de 25 eV hasta 200 eV, siguiendo incrementos pequeños de energía y buscando la existencia de defectos puntuales estables en cada caso. La primera condición necesaria ha sido determinar con exactitud que la estructura sobre la que se trabaja es realmente la sílice amorfa, reconocida a través de su típica morfología de anillos con distinto

número de coordinación. El procedimiento de "fabricación" computacional del material ha sido validado con los resultados de ángulos de enlace de los experimentos (Figura 5). Los resultados actuales [14, 15] se resumen indicando que parece claro que el valor único hasta ahora asumido de energía umbral (117 eV) no corresponde a la realidad que presenta que esa energía umbral tiene valores más reducidos (25 – 30 eV) y una gran dependencia de la dirección de movimiento del Átomo Primario de Retroceso generado por el neutrón.

DAÑO POR IRRADIACIÓN EN EL Zr / ZrNb

Conocer los mecanismos de daño por irradiación en el ZrNb (Zr/2.5%Nb) es fundamental para abordar con garantías el uso de este material como componente de las vainas de los combustibles de alto quemado de futuros reactores de fisión. No existe nada más que un escaso conocimiento de los efectos de la irradiación en ZrNb incluso a escala experimental cuando menos desde la perspectiva teórico-fundamental. El primer paso que se está dando es conocer lo que sucede para el Zr (existen más datos) y desarrollar un modelo de simulación multiescala que llegue hasta el nivel microscópico, haciendo uso de lo que se sabe de cascadas de desplazamiento en ese material *hcp* a distintas temperaturas y generando un nuevo banco de datos para conocer de la difusión de los defectos en el material [ver revisión en 16]. Estos datos incluidos en un nuevo modelo de difusión por Monte Carlo que tenga en cuenta las características del

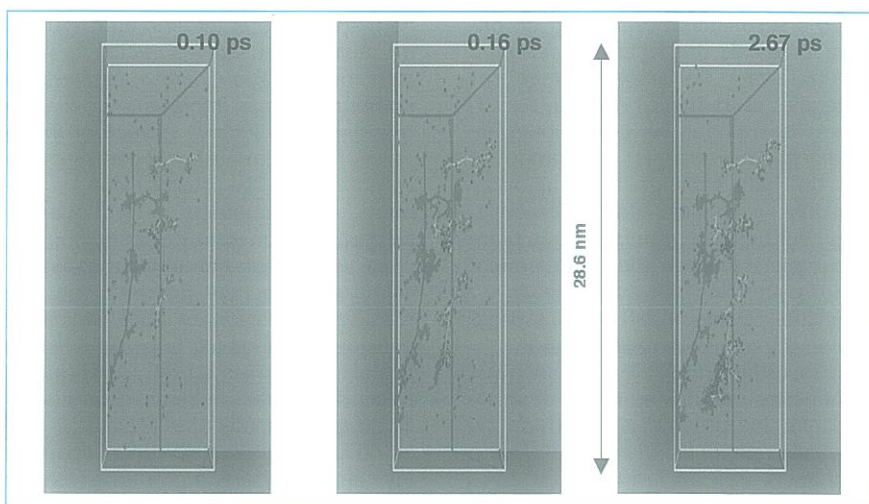


Figura 4.- Evolución temporal de la formación de cascadas de desplazamiento en SiO₂ para un Átomo Primario de Retroceso de 5 keV. Identificación de defectos "Oxygen Deficient Centers" y defectos residuales en las últimas etapas.

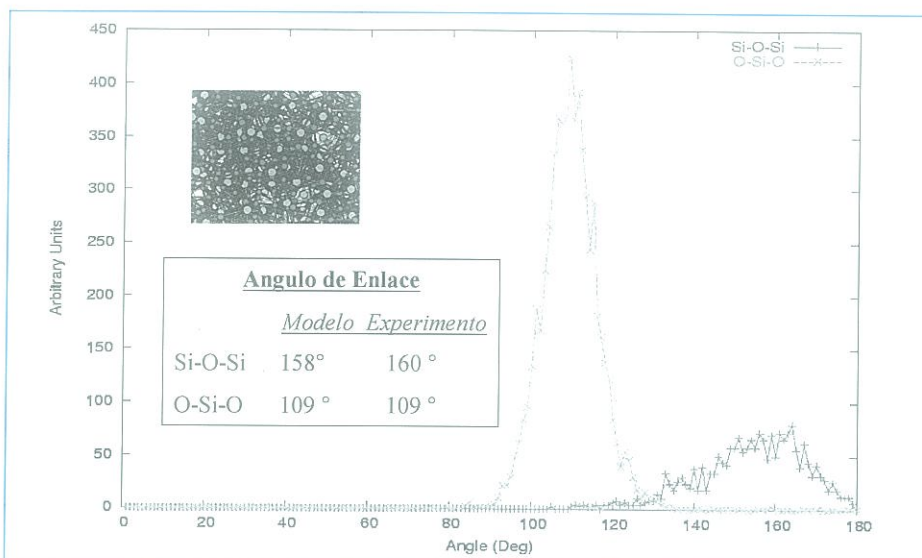


Figura 5.- Representación de los ángulos de enlace determinados por Dinámica Molecular y su comparación, muy buena, con los resultados experimentales. Indicación de la representación correcta de la estructura amorfa de la Sílice mediante la Simulación Atomística.

Zr puede servir para comprender la evolución microscópica del Zr. Ya se ha realizado el reconocimiento de los tipos de defectos en Zr, así como la evaluación de los datos de energías de formación y difusión que existen en la literatura, y se ha generado un programa sistemático de determinación de los parámetros aún necesarios en colaboración con la Universidad de Liverpool. Además, estos modelos de difusión incluyen la anisotropía del movimiento de los defectos en el Zr pudiendo próximamente comenzar el cálculo de transporte.

AGRADECIMIENTOS

Estos trabajos son fruto de la participación en la Red Temática ITEM de la Unión Europea (5º Programa Marco) FIR1-CT—2001-20136; Proyecto Integrado Unión Europea SIRENA (5º Programa Marco) FIS5-CT-2001-00032, Proyecto Internacional REVE, Proyecto Español VENUS-II CSN-UNESA P000531499, Programa Unión Europea/EURATOM (5º Programa Marco) "keep in touch" Fusión Inercial, Tarea EFDA Fusión / EURATOM TW3-TTMS-007 (2003), Proyecto Nacional Ministerio Ciencia y Tecnología FTN2001-3886-C02-01 (2002-2005), IAEA Coordinated Research Program on Elements of Power Plants Design for Inertial Fusion Energy (2002-2005). Los autores quieren agradecer a Dña. Dolores Gómez Briceño y Dña. Mercedes Hernández Mayoral del CIEMAT, Drs. Máximo Victoria y Robin Schaublin de l'Ecole Polytechnique Federal Lausanne/Paul Scherrer Institute, Drs. Tomás Díaz de la Rubia y Vasily Bulatov del Lawrence Livermore National Laboratory, Dr. Brian Wirth de University California Berkeley, Prof. Robert Odette de University California Santa Barbara, Prof. Luciano Colombo de l'Università di Cagliari, Prof. David Bacon de University

of Liverpool por tantas discusiones y consejos en los temas de que se trata en este artículo.

REFERENCIAS

- [1] J.M. Perlado, L. Malerba, J. Marian, "Simulación Computacional Multi-Escala del Daño inducido en los materiales por la Radiación", Nuclear España **194** (Febrero 2000).
- [2] J. Marian, B. D. Wirth and J. M. Perlado, *Physical Review Letters* **88** (2002) p. 255507/1-4.
- [3] J. Marian, B. D. Wirth, A. Caro, B. Sadigh, G. R. Odette, J. M. Perlado and T. Díaz de la Rubia, *Physical Review B* **65** (2002) p. 094303/1-5.
- [4] J. Marian, B. D. Wirth, J. M. Perlado, G. R. Odette and T. Díaz de la Rubia, *Physical Review B* **64** (2001) p. 144102/1-11.
- [5] J. Marian, B. D. Wirth, R. Schaublin, G. R. Odette and J. M. Perlado, "MD modelling of defects in Fe and their interactions", aceptado para publicación en *Journal Nuclear Material*, NUMA 14404 (2003).
- [6] R. Schaublin, Y. Dai, M. Victoria, *Proceedings of the 14th International Congress on Electron Microscopy*, Volume I, Eds. H. A. Calderón Benavides and M. J. Yacamán, Inst. Phys. Pub. (1998) 173-174.
- [7] L. Malerba, J.M. Perlado, "Molecular dynamics simulation of irradiation-induced amorphization of cubic silicon carbide", *Journal of Nuclear Materials* **289** (2001) 57-70.
- [8] L. Malerba, J.M. Perlado, "Basic mechanisms of atomic displacement production in cubic silicon carbide: a molecular dynamics study", *Physical Review B* **65** (2002) 045202/1-10.
- [9] J.M. Perlado, D. Lodi, J. Marian, A. Glez. Plata And M. Salvador, L. Colombo, M.J. Caturla And T. Diaz De La Rubia, "Time-dependent neutronics in structural materials of inertial fusion reactors and simulation of defect accumulation in pulsed Fe and SiC", *Fusion Science and Technology* **43** (2003) 384-392.
- [10] J.M. Perlado, E. Domínguez, L. Malerba, J. Marian, D. Lodi, M. Salvador, E. Alonso, Ma. J. Caturla, T. Diaz De La Rubia, "Results from systematic modeling of neutron damage in inertial fusion energy reactors", *Fusion Eng. and Design* **60** (2002) 55-63, "Modelling of time-dependent damage in structural wall of inertial fusion reactors and new tight binding model for SiC", *Fus. Eng. Des.* **69** (2003) 795-801.
- [11] M. Salvador, J.M. Perlado, A. Mattoni, F. Bernardini, L. Colombo, "Defects energetics of β -SiC using a new Tight Binding Molecular Dynamics Model", 11 International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM), Kyoto Diciembre 2003, a publicar en *Journal of Nuclear Materials* (2004).
- [12] A. Kubota, M. J. Caturla, J. F. Latkowski, S. Reyes-Suarez, *Nuclear Inst. Methods B* **202** (2003) 88-92.
- [13] J.M. Perlado, K. Mima, S. Nakai, E. Alonso, E. Muñoz, J. Sanz, "Activation Analysis and Materials Choice in the Laser Fusion Reactor KOYO", *J. Nuclear Materials* **233-237** (1996) 1523-1529.
- [14] J.M. Perlado, M.J. Caturla, L. Colombo, T. Díaz de la Rubia, E. Domínguez, D. Lodi, J. Marian, F. Mota, M. Salvador, "Assessment of Structural and Silica Materials under irradiation in Inertial Fusion Reactors: comparison of Multiscale Modelling and Microscopy", *Inertial Fusion Science and Applications (IFSA03)*, September 8-12, 2003 Monterey, aceptado para publicación en *Fusion Science and Technology*.
- [15] F. Mota, M.J. Caturla, J.M. Perlado, E. Domínguez, A. Kubota, "Atomistic simulations of threshold displacement energies in SiO₂", 11 International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM), Kyoto Diciembre 2003, a publicar en *Journal of Nuclear Materials* (2004).
- [16] C. Arévalo, J.M. Perlado, "State of art of diffusion parameters for Zr: preparing the KMC simulations", Informe Instituto Fusión Nuclear (DENIM) / Intermediate Report EURATOM SIRENA Project Marzo 2003.

J. Manuel PERLADO es catedrático de Física Nuclear de la ETSI Industriales de la Universidad Politécnica de Madrid y director del Departamento de Ingeniería Nuclear. M.J. CATURLA es profesora asociada Ramón y Cajal del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Alicante. J. MARIAN es doctor ingeniero industrial UPM y post-doc. del California Institute of Technology (CALTECH) EE.UU. C. AREVALO es licenciado en Ciencias Físicas por la Universidad de Sevilla y becario asociado al Proyecto EURATOM SIRENA (5 Programa Marco). E. DOMÍNGUEZ es ingeniero industrial por la UPM y profesor ayudante de la Universidad Carlos III. D. LODI es ingeniero nuclear por la Universidad Politécnica de Milán y becario de la Unión Europea en el Programa de Movilidad EURATOM/FUSION. E. MARTÍNEZ es ingeniero industrial y trabaja para el Proyecto VENUS-II y REVE. F. MOTA es licenciado en Ciencias Físicas por la Universidad de La Laguna y becario del Plan Nacional de Formación de Personal Investigador. M. SALVADOR es ingeniero mecánico electricista por la Universidad de Nuevo León (México) y estudiante de doctorado en el Departamento de Ingeniería Nuclear/UPM como becario del Gobierno Federal de México.