

Algunos casos del papel que la simulación computacional multiescala desarrolla para comprender la irradiación de materiales en la fusión nuclear

J. M. Perlado, C. Arévalo, M.J. Caturla, B. Gámez, L. Gámez, J. Marian, E. Martínez, F. Mota, M. Victoria

La simulación computacional multiescala ha demostrado suficientemente su tremendo valor como herramienta del conocimiento básico de las propiedades de los materiales y de su modificación cuando son irradiados. El eficaz uso computacionalmente de las teorías mecano-cuánticas y su capacidad de conexión con las escalas micro / meso y macroscópicas, cuyo desarrollo ha sido espectacular en los últimos años, sitúa el auténtico problema más en “*el saber buscar*” los mecanismos decisivos a estudiar, que en las propias técnicas. La conexión con los experimentos “*ad hoc*” en cada escala espacio-tiempo ha sido una realidad en estos últimos años y fundamento de la solidez del conocimiento adquirido. Por otra parte, su carácter predictivo se ha puesto de manifiesto al dar pie a la búsqueda experimental de parámetros no comprendidos. Este artículo presenta algunos nuevos estudios realizados como continuación de los artículos previos, ampliando los resultados a materiales no-metálicos.

Multiscale Modeling has already demonstrated sufficiently its very large value as a tool to basically understand the properties of materials and their modification when they are under irradiation. The efficient computational use of the quantum-mechanics theories, and its connection with micro/meso/macroscopic scales, also with spectacular development, places now the real question in the “*know what to look*” among the mechanisms to really study, more than in the techniques themselves. The connection with “*ad hoc*” scale experiments is a successful reality, and its predictive characteristic has been demonstrated, advancing theories that drove to new experiments looking for envisioned results not previous experimentally expected. In this article some new results are given on different materials under irradiation, as a continuation of previous articles and looking for understanding also non-metallic materials.

INTRODUCCIÓN

La simulación computacional ha sido desde hace ya bastantes años, soportada por cada vez mejores conocimientos teóricos contrastados por experimentos, la herramienta perfecta para el conocimiento básico de los mecanismos íntimos que explican el daño por irradiación de los materiales. Además, posee la gran (y exclusiva) ventaja de su capacidad predictiva, al usarse en su metodología multiescala, frente a la ausencia de experimentos integrales a final de vida, para conocer el comportamiento de los materiales en las nuevas instalaciones nucleares (fusión, fisión avanzada y transmutación). Curiosamente la simulación computacional multiescala ha resultado ser una *provocación* para introducir a la experimentación microscópica en el punto de mira con trabajo por hacer. Sobre los artículos ya escritos en la Sociedad Nuclear Española en el pasado [1, 2], esta nueva contribución constituye un repaso solo de algunos de los nuevos progresos en esta pieza del conocimiento a través de trabajos realizados en el Instituto de Fusión Nuclear y otras instituciones colaboradoras.

La enorme capacidad computacional disponible en los últimos años ha per-

mitido llegar a usar de forma efectiva los modelos mecano-cuánticos más detallados logrando obtener parámetros básicos de daño a nivel atómico y conocer el grado de fiabilidad de algunos de los potenciales de fuerzas semi-empíricos usados en las simulaciones de dinámica molecular (DM) clásica. En el caso de aceros ó aleaciones metálicas con base de Fe ha sido importante el reconocimiento del papel que puede jugar la condición ferromagnética del mismo y la motivación para el desarrollo de nuevos modelos. Así mismo la mejora de los parámetros de difusión y la descripción de mecanismos fuente y sumidero de defectos (transformación de la estructura de defectos) ha permitido llegar a una aproximación más fiable de los mecanismos a corto y largo plazo a través de técnicas de Teoría de Tasas y Cinética de MonteCarlo (KMC), con un mejor acuerdo con los experimentos. El próximo desarrollo con éxito de modelos de simulación en paralelo de KMC dará a esta última técnica la capacidad de llegar a muy altas dosis (final de vida) sabiendo que goza de una mayor precisión que las otras teorías existentes. Por otra parte el enorme desarrollo que en los últimos tiempos se ha conseguido en

el área de la Dinámica de Dislocaciones sitúa el problema a escala mesoscópica como abordable a falta de incluir la interacción final de defectos y dislocaciones para conectar con “lo macroscópico”, y el uso final de las ecuaciones constitutivas de los materiales en los elementos finitos. Y todos estos desarrollos en el estudio de la modificación de las propiedades de diversos tipos de materiales, desde las mecánicas en los estructurales metálicos en base *fcc*, *bcc*, de larga vida ó *hcp* de uso en vida más corta, ó los de base cerámica como los materiales compuestos SiC, ó eléctricas y de transmisión de la luz en materiales aislantes u ópticos como la sílice de naturaleza amorfa.

DAÑO EN MATERIALES ÓPTICOS: SÍLICE AMORFA

En estos trabajos [3, 4, 5] se han usado técnicas de simulación de dinámica molecular para conocer el daño por irradiación de neutrones de alta energía (14 MeV) en Sílice amorfa en ambientes de Fusión por confinamiento inercial y magnético. La sílice amorfa es un candidato importante para formar parte de la óptica final de un reactor de fusión inercial, así como

de ventanas de diagnóstico en reactores de fusión por confinamiento magnético (ITER). En estos ambientes los materiales estarán expuestos tanto a radiación ionizante, como rayos gamma, o radiación de neutrones e iones. Esta radiación puede provocar la modificación de las propiedades mecánicas y ópticas, provocando el oscurecimiento en el material; es pues muy importante hacer un buen estudio de cómo se comportarán estos materiales frente a este tipo de radiaciones. La investigación se ha centrado en el daño por desplazamiento generado por la radiación neutrónica ya que los potenciales usados no permiten describir fenómenos de irradiación ionizante, lo que será constitutivo de estudios futuros.

La herramienta computacional que hemos utilizado para desarrollar esta investigación es el código de dinámica molecular MDCASK. Es bien sabido que la base de unos buenos cálculos con un código de dinámica molecular es la elección de un fiable potencial de interacción entre los átomos constitutivos capaz de describir las situaciones que se pueden generar con el desplazamiento y generación de defectos en el material, asumiendo que es capaz de describir el material de partida. Se ha usado el potencial de Feuston y Garofalini para representar la sílice amorfa, que ha demostrado su eficiencia para describir la naturaleza intrínseca de la sílice amorfa, y que ha sido utilizado en numerosos trabajos anteriores como densificación bajo presión. El potencial de Feuston y Garofalini es un potencial de tres cuerpos donde se describe la interacción de pares con un potencial de BMH, junto a un tercer término de naturaleza covalente para poder representar correctamente los ángulos tetraédricos de la estructura básica de la sílice amorfa. Los resultados que se han obtenido de la distribución angular entre los átomos enlazados en la sílice amorfa muestran una muy buena compatibilidad con los experimentales, tabla 1.

Además, para dar cuenta de las interacciones que se dan a distancias muy cortas se incluye el Potencial Universal, que las describe mucho mejor. Para unir el potencial universal y el potencial de Feuston y Garofalini se ha usado polinomios de ajuste. Por ello para comprobar lo sensible que son los resultados a la modificación de los parámetros de ajuste de los polinomios se han realizado todos los cálculos con distintos juegos de parámetros.

Para obtener una caja de simulación de sílice amorfa hemos partido de una caja de

	Modelo	Experimento
Si-O-Si	158	160
FWHM Si-O-Si	31	38
O-Si-O	109	109.5
FWHM O-Si-O	14	14

Tabla 1

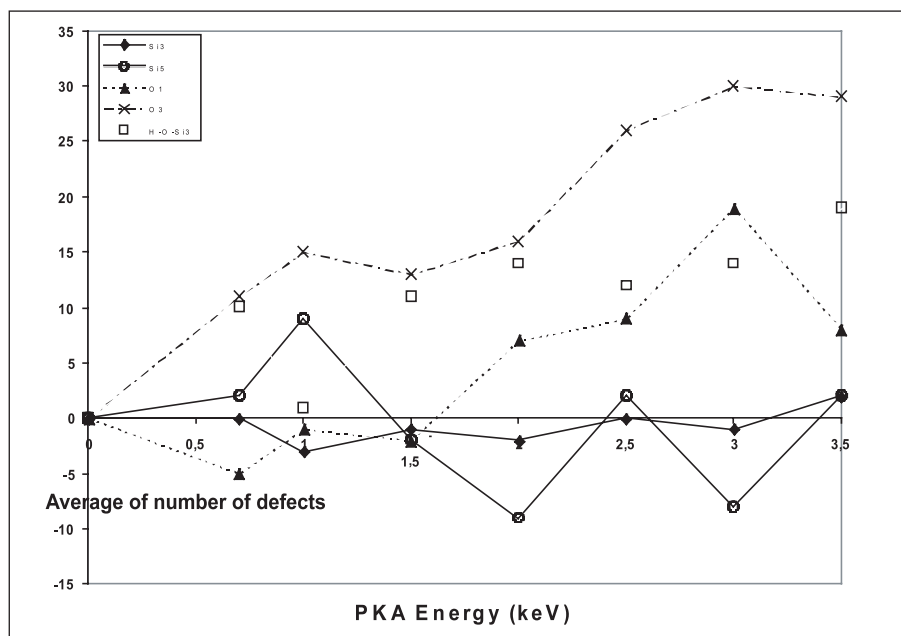


Figura 1. Numero de defectos en función de la energía en una caja con un 1% de átomos de H.

β -cristobalita cristalina y la hemos sometido a un proceso de fundido de manera que se lleve el material a temperaturas altas (7000 K) durante unos 25 ps para que pierda toda reminiscencia de orden y un posterior proceso de enfriado lo más lento posible para que los átomos vayan encontrando sus nuevas posiciones más estables.

La parte fundamental es finalmente la caracterización del daño que se produce debido a la radiación neutrónica para lo que (como en un experimento) **hay que saber mirar y el qué mirar:**

- Hemos caracterizado todos los defectos que se encuentran en el material por el hecho de ser un material amorfo y que nuestro potencial puede definir. Hemos encontrado tres cuatro tipos de defectos según la coordinación de los átomos. Los hemos llamado Si3, Si5, O1, y O3 que corresponden a Silicios con coordinación

3 y 5 y oxígenos con coordinación 1 y 3 respectivamente. Además, cuando introducimos un porcentaje de Hidrógeno en el material encontramos que aparecen otros dos tipos de defectos, los -OH, que son hidrógenos ligados a oxígenos que tenían coordinación 1, y los H libres. Aunque comprobamos que la tendencia de los H es a unirse a los oxígenos con coordinación 1 que haya en el material. En la tabla 2 podemos ver un estudio de variación de la estequiometría de la caja de simulación para observar de que manera se distribuye el número de defectos según la carencia o exceso de los átomos de la especie contraria.

- Hemos lanzado átomos primeros de retroceso (Primary knock-on Atom, PKA) con diferentes energías para averiguar el efecto que tienen sobre el número de defectos ya existentes y si se generan nue-

O atoms added	Si atoms added	x	Si5	O1	Si3	O3
-303		-0.0740	0	0	24	588
	+157	-0.0738	3	1	18	614
-80		-0.0195	5	16	5	176
	+40	-0.0193	10	15	4	181
0	0	0	22	67	2	87
+80		+0.0195	70	125	1	34
	-40	+0.0197	63	130	0	33
+303		+0.0740	221	383	0	1
	-157	+0.0797	210	418	0	0

Tabla 2

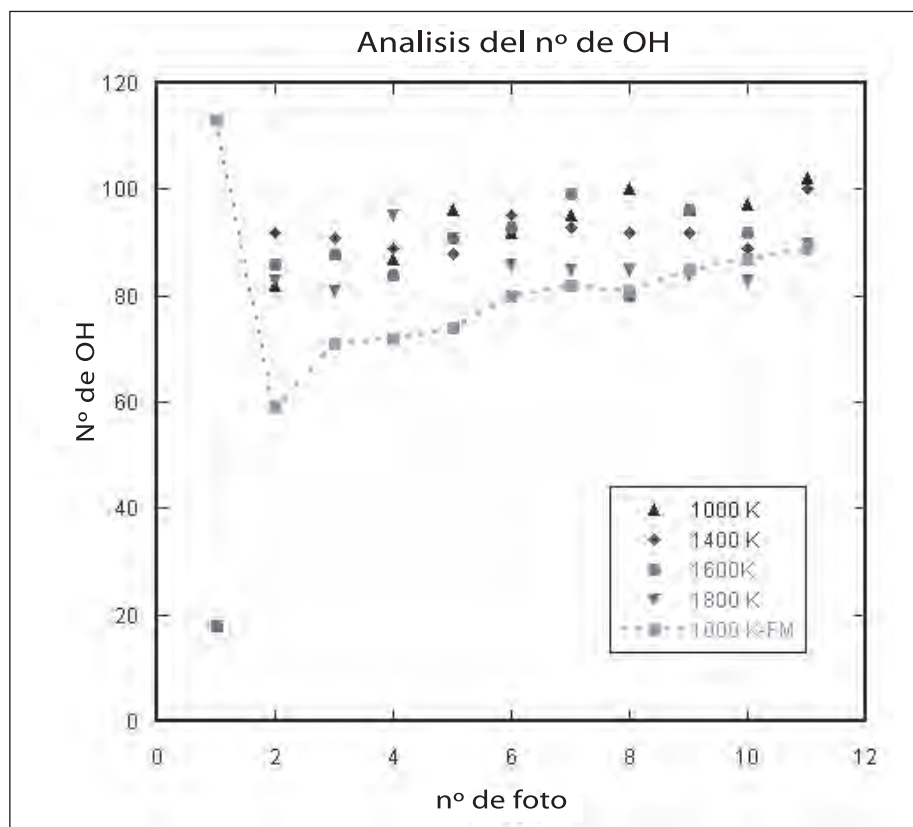


Figura 2 El número de fotos corresponde a fotos grabadas cada 10000 pasos de 0.1 fs, así que estamos hablando de un millón de paso (500 ps en total). La serie con el nombre 1000 K-FM es la que corresponde al caso de introducir los átomos de H después de haber fundido y todas las demás series corresponden al caso de introducir los H antes de fundir la caja de simulación. El número que aparece en el nombre de cada serie es la temperatura de la simulación en Kelvin.

vos. Estos átomos son una representación de lo que ocurriría cuando un neutrón colisiona con un átomo del material. Este neutrón comunicará una cierta energía al átomo y empezará a moverse creando una cascada de desplazamiento. Este átomo con el que colisiona el neutrón es el que nosotros llamamos PKA. Las energías utilizadas para este estudio son de 10 hasta 400 eV para el cálculo de la energía mínima de desplazamiento y de 400 a 3500 eV para el análisis de cascadas de desplazamiento. Se han realizado cálculos mostrando el crecimiento del número de defectos al aumentar la energía del PKA, y como se modifican cuando se tiene un 1% H en la figura 1.

- Se ha realizado un estudio de la movilidad de los átomos de H que implantamos en el material. Lo hemos hecho de dos maneras, implementando los átomos de H antes de fundir la caja de simulación y después de fundirla. En el primer caso está claro que se le ha dado más tiempo a los átomos de H para encontrar sus posiciones más estables mientras que en el segundo caso, como están en posiciones mucho menos estables, estos tienen muchas más movilidad por lo que el desplazamiento cuadrático medio de los átomos de H tienen pendientes mayo-

res en este segundo caso que el primero. En la figura 2 se puede ver que en los casos en que introducimos el H y después fundimos, encontramos que el número de OH es más o menos estable, mientras que en el caso en el que introducimos el H después de haber fundido la caja, el número de OH va creciendo hasta igualarse con el primer caso.

SIMULACIÓN CUASI-MECANO-CUÁNTICA EN SiC: ACTIVACIÓN Y MOVILIDAD DE DEFECTOS

Los desarrollos que se habían realizado en el pasado sobre SiC y que fueron mencionados en un artículo previo en esta revista de la SNE [1], llevaron al conocimiento de parámetros básicos de daño por desplazamiento en función de la dirección de movimiento y energía del PKA (Átomo Primario de Retroceso), y a la generación de un modelo capaz de entender de la amorfización de dicho material bajo irradiación. Sin embargo, una pregunta que quedaba siempre por contestar (aún sigue en gran medida) era la determinación de los defectos estables y sus características de generación y difusión. Para ello se desarrolló un modelo cuasi mecano-cuántico (Tight-Binding)

que ha sido aplicado a los ocho defectos elementales y originales previstos en el SiC. Con este estudio se ha observado la significación del potencial químico y de las componentes estequiométricas de la mezcla original elegida. Los resultados de las energías de formación de los defectos se han contrastado con modelos más detallados, *Density Functional Theory (DFT)* y *Local Density Approximation (LDA)*, así como la dinámica molecular (DM) clásica con el potencial de Tersoff. El parámetro buscado en las comparaciones ha sido la entalpía de formación de los defectos. Se ha visto que la difusión de las vacantes de carbono y de silicio ocurre en el SiC a alta temperatura lo que es coherente con los resultados más detallados, pero fuera de la observación existente con DM clásica (donde no ocurre esa difusión).

Con el estudio de los intersticiales de silicio y carbono en posiciones tetraédricas (simulaciones con 64 y 217 átomos) se ha buscado también una comparación con DM clásica, donde se sabe que dichos intersticiales no difunden hasta los 2200 K. Con el nuevo modelo se observa el movimiento de los intersticiales mucho antes de dicha temperatura (a los 1000 K), obteniendo correctamente las energías de activación de dichos intersticiales de Si y C. Se ha descrito como dichos intersticiales se difunden mediante un mecanismo de "kick out", que consiste en que la migración se realiza a través de la red cristalina, estando ligado cada intersticial de una determinada especie con los átomos posicionales de su misma especie, de manera que al cabo de un tiempo considerable esos intersticiales expelen el átomo al que estaban ligados. Las energías de activación encontradas han sido de 0.81 eV para el silicio y de 0.85 eV para el carbono lo que corresponde de manera muy buena con los resultados experimentales disponibles.

Simulación del daño en estructuras hcp: Zirconio y/o Titanio

En el caso de las vainas de los reactores de fisión formadas por aleaciones de zirconio se producen precipitados de hidrógeno debido a la irradiación, la corrosión por agua y las propiedades del material. Fenómenos de modificación similares en lo que se refiere a su irradiación pueden ser esperables en materiales para fusión como Titanio también de estructura hcp. Para considerar estos fenómenos de manera adecuada se ha estudiado [referencias 8-15 donde se encuentran todos los trabajos aquí resumidos] por primera vez la evolución del daño producido por neutrones y electrones en un metal hcp utilizando un código de MonteCarlo cinético. Para realizar este trabajo ha sido necesario modificar el código de MonteCarlo ya

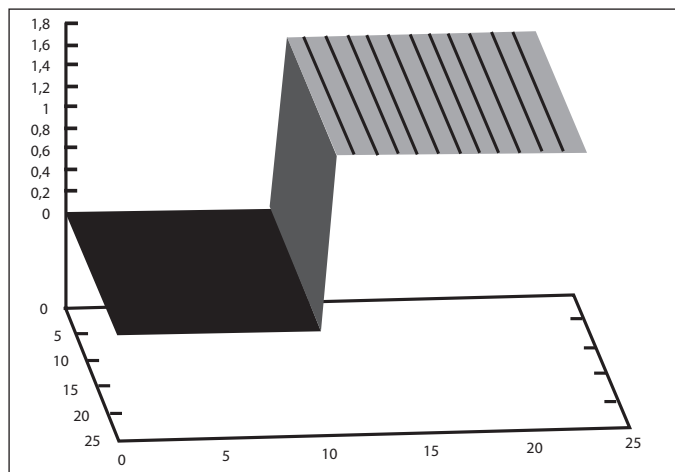


Figura 3. Campo de tensiones aplicado al material hcp (Zirconio)

existente, incluyendo la estructura hcp y la anisotropía en la difusión de defectos. Se han evaluado los distintos mecanismos y parámetros de difusión de defectos bajo distintas condiciones de irradiación, comparando con resultados experimentales con electrones (existentes en la literatura). Los resultados de estos cálculos muestran la influencia de la anisotropía en el cristal en la concentración de defectos, en la forma de recombinación entre vacantes e intersticiales muy pequeña, la desaparición de muchos intersticiales en bordes de grano y, debido a esto, la existencia de muchos aglomerados de vacantes en el cristal; todo esto conduce al fenómeno de crecimiento bajo irradiación típico en materiales hcp. En el estudio de la anisotropía en el movimiento de los intersticiales se puede concluir una recombinación mayor y crecimiento de aglomerados de intersticiales cuando la anisotropía en el movimiento disminuye (pasa de una dimensión en el plano basal y saltos entre planos basales, a un movimiento en tres dimensiones). Además, se ha observado experimentalmente que el estrés que se produce alrededor de estos precipitados atrae a los defectos puntuales del cristal, aumentando el precipitado y provocando el fallo final de la vaina. A un nivel más general, las dislocaciones, aglomerados de defectos puntuales y/o precipitados, producen un campo de tensión a su alrededor que atrae a otros defectos. Se pretendió estudiar este efecto a nivel microscópico, y conocer sus efectos y sus causas. Además los materiales estructurales de los reactores nucleares están sometidos a una tensión externa; y es necesario conocer los efectos a nivel microscópico para ser capaces de interpretar cambios en las propiedades mecánicas de los materiales. El efecto de un campo de tensiones en un material lleva a cambios microscópicos que se traducen en la variación de los parámetros que definen los defectos del

cristal, fundamentalmente las energías de migración aumentan o disminuyen si el defecto siente, respectivamente, una contracción o una tensión producida por un campo de tensiones en la zona donde se encuentra el defecto. Se ha creado un nuevo código de Cinética de MonteCarlo para incluir estrés en el cristal. Basándose en la aplicación de un valor de estrés para cada celda considerada en el sistema, en este modelo se puede incluir de forma general cualquier campo de tensiones. Se han considerado diversas situaciones (ver referencias mencionadas al comienzo de este apartado). Presentamos a continuación una situación en la que se han supuesto dos partículas, cada una situada en un lado cuasi-opuesto de la caja, $x = 20$ nm y $y = 80$ nm. La caja de simulación tiene un tamaño de $100 \times 100 \times 100$ nm³. Se permite a las partículas que se muevan en una dimensión en el plano basal con posibilidad de rotación. La simulación se sigue hasta que las partículas alcanzan la superficie. Se consideran $100 \times 100 \times 100$ celdas enlazadas en el sistema. Si no se considera estrés las partículas realizan su movimiento normal hasta alcanzar la superficie con una trayectoria en una dirección con cambios en la misma debido a la rotación de las partículas. Posteriormente, en las mismas condiciones se introduce un estrés en la segunda mitad de la caja de simulación de la forma que viene dada en la figura 3 con un valor de 1.6 % en todas las celdas cuyo valor de x es mayor de 50. Se considera que las partículas tienen un valor de α para la rotación de 10. La trayectoria de las partículas se presenta en la figura 4 (proyección en Z del camino recorrido por las dos partículas hasta alcanzar la superficie, una de ellas situada en la parte inferior de la gráfica y otra en la parte superior). Como conclusión si se tienen dos partículas una

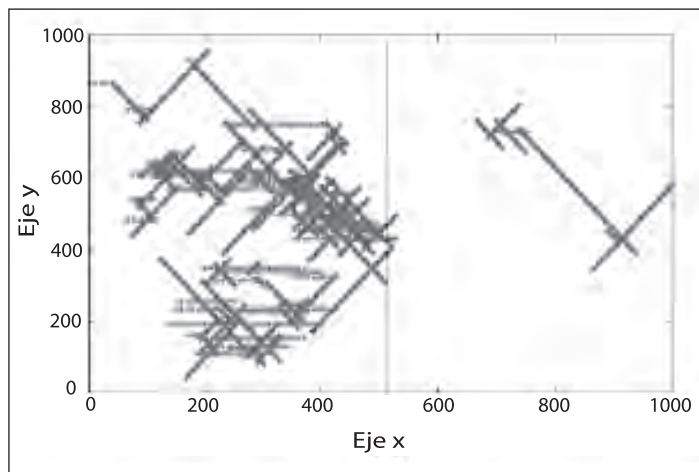


Figura 4. Desplazamiento de las partículas incluidas en la caja de simulación sometida a un campo de estrés descrito en la Figura 3. Véase la enorme diferencia de rotaciones a las que están sometidas

dentro de la zona de estrés y otra fuera, la situada dentro de la zona de estrés realiza menos rotaciones que la situada fuera de la zona, ya que la energía de rotación ha aumentado su valor. El objetivo final de este trabajo es estudiar como el campo de tensiones que genera la presencia de una dislocación en el material va a afectar a la trayectoria de las partículas.

Simulación Computacional de la Irradiación de Metales

Una buena revisión actual sobre el estado del conocimiento en el área de la Simulación Multiescala para el caso de materiales estructurales de fusión con base metálica se puede encontrar en la Referencia [16]. Siguiendo el comentario realizado en la introducción la labor sistemática de progreso en las distintas áreas conduce a una situación muy buena en esta parcela, insistiendo en la importancia que el avance en las técnica *ab initio* ha tenido en la obtención de las energías de formación y migración de las diversas configuraciones esperables. Se han producido resultados en Fe-C, Fe-He, y aleaciones modelo Fe-Cr generando para ellas información sobre los distintos defectos estables y sus energías de difusión. Toda esta información puesta de manera apropiada dentro de un modelo que contemple una aleación Fe-Cr-C (-He), sitúa a la simulación multiescala en condiciones de conocer detalles del comportamiento de los aceros de Activación Reducida en un Sistema de Fusión. Todo ello apoyado en nuevas instalaciones experimentales de irradiación, que suponen un salto cualitativo y cuantitativo muy importante sobre las existentes (antes de que llegue IFMIF) como JANNUS que se espera esté en funcionamiento en el Segundo Semestre de 2007 con la posibilidad de realizar irradiaciones con un triple haz

simultaneo (daño, H y He).

Dentro del contexto de los Programas Nacionales sobre aceros, y en colaboración con la experimentación del CIEMAT, se ha abordado el estudio del Fe. Usando los nuevos parámetros obtenidos con ab initio en la cinética de MonteCarlo se han estudiado [17] las diferencias en la acumulación de daño al comparar los resultados con los obtenidos con los antiguos parámetros obtenidos mediante DM clásica. Simulaciones de irradiación de auto-iones de Fe de 150 keV en Fe de ultra alta pureza (UHP) con alrededor de 20 appm y mayor grado de impurezas, han sido realizadas. Se han implementado nuevas energías de difusión para SIA's, di-SIA's y 3-4-5SIA's, considerando su movimiento aleatorio en tres dimensiones. También han sido implementadas nuevas energías de migración para el caso de agrupaciones de 3-4 vacantes y para el caso de las impurezas de C o N con datos procedentes de simulaciones *ab initio*. Se han encontrado diferencias en los resultados al usar los nuevos y los antiguos parámetros. La diferencia mas pronunciada se ha observado en el tamaño de los lazos de intersticiales resultantes de la irradiación, siendo el tamaño máximo hallado en los experimentos de 350 nm mientras que en las simulaciones no supera los 9 nm. Con la simulación de cajas computacionales más grandes y una nueva consideración de los efectos superficiales se ha llegado a explicar el acuerdo entre experimentos y simulación a bajas dosis, quedando aún la explicación de los mecanismos a altas dosis de irradiación. Para completar este estudio se han realizado simulaciones de experimentos con neutrones diagnosticados con Microscopía Electrónica y Aniquilación de Positrones [18], encontrando un buen acuerdo con dichas experiencias cuando se incluyó de manera adecuada el efecto de sumideros que representaban el efecto de dislocaciones ó bordes de grano.

Existen actualmente dos áreas donde los avances están siendo por parte de la colaboración entre el Instituto de Fusión Nuclear y el Laboratorio Nacional Lawrence Livermore realmente espectaculares y con repercusiones significativas:

- Paralelización con éxito de la Cinética de MonteCarlo [19] lo que conduciría, con una técnica potente y contando con los parámetros oportunos, a la posibilidad de simular la irradiación de los materiales a muy altas dosis (final de vida del material)

- Uso eficiente de la Dinámica de Dislocaciones con parámetros suministrados por resultados atomísticos y demostrados con éxito ya en materiales fcc [20], dando en una escala mesoscópica resultados más completos que los propios que daría la simulación más reducida atomística, y en proceso de realización para los bcc (Fe).

Referencias

[1] J.M. Perlado, L. Malerba, J. Marian, *Simulación computacional multi-escala del daño inducido en los materiales por la radiación*, Revista SNE (2000).

[2] J. M. Perlado, M.J. Caturla, J. Marian, C. Arévalo, E. Domínguez, D. Lodi, E. Martínez, F. Mota, M. Salvador, *Avances en la simulación multiescala del daño por irradiación de materiales*, Revista SNE (2003).

[3] F. Mota, M. J. Caturla, J.M. Perlado, E. Domínguez, A. Kubota, *Atomistic simulations of threshold displacement energies in SiO₂*, J. Nucl. Mater. 329-333 (2004) 1190-1193.

[4] F. Mota, M.J. Caturla, J.M. Perlado, A. Ibarra, M. León, J.Mollá, *Identification and characterization of defects produced in Irradiated Fused Silica through Molecular dynamics*, aceptado para su publicación en J. Nucl. Mater (2006).

[5] J.Molla, F. Mota, M.Leon, A. Ibarra, M.J. Caturla, J. M. Perlado, *The role of fused silica stoichiometry on the intrinsic defects concentration*, aceptado para su publicación en J. Nucl. Mater (2006).

[6] M. Salvador, J.M. Perlado, L. Colombo, A. Mattoni, F. Bernardini, P. Alippi *Journal of Nuclear Materials* 329-33: 1219-1222 Part B, August 1 2004.

[7] J.M. Perlado, J. Sanz, M. Velarde, S. Reyes, M.J. Caturla, C. Arévalo, O. Cabellos, E. Domínguez, J. Marian, E. Martínez, F. Mota, A. Rodríguez, M. Salvador, G. Velarde, *Activation and damage of fusion materials and tritium effects in inertial fusion reactors: strategy for adequate irradiation*, Laser & Particle Beams (2005) 23, 345-349.

[8] C. Arévalo, M.J. Caturla, J.M. Perlado, *Defect diffusion in hcp zirconium: kinetic Monte Carlo approach*, Published in MRS Symposium Proceedings (2003). Vol. 792, 642-645.

[9] C. Arévalo, M.J. Caturla, J.M. Perlado, *Long-term behaviour of irradiated hcp Zr using MonteCarlo simulations*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B Vol. 228 (2005) 176-180.

[10] C. Arévalo, M.J. Caturla, J.M. Perlado, *Long-term behaviour of irradiated hcp Zr coupling molecular dynamics and MonteCarlo simulations*, Second International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM) proceedings (2004).

[11] J.M. Perlado, M. Victoria, C. Arévalo, E. Martínez, P. Cepas, G. Velarde, M.J. Caturla, J. Marian, D. Gómez, M. Hernández, *Microstructure simulation of radiation damage in metals using improved kinetic MonteCarlo defect diffusion modeling*, en Proceedings of Micromechanics and Microstructure Evolution: Modeling Simulation and Experiments, 2005.

[12] C. Arévalo, M.J. Caturla, J.M. Perlado, *Estudio del daño por radiación en metales hcp mediante un modelo de Mon-*

te-Carlo cinético, 31 Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española 2005, Publicado en la revista 258 de la sociedad Nuclear Española.

[13] C. Arévalo, M.J. Caturla, J.M. Perlado, *Monte Carlo simulations of radiation damage in hcp metals*, Aceptado para publicación en Journal of Nuclear Materials.(2006).

[14] C. Arévalo, M.J. Caturla, J.M. Perlado, *Fission spectra for cladding formed by Zirconium alloys: application to Monte Carlo simulations*, aceptado para publicación en Nuclear Instruments and Methods B (2006).

[15] C. Arévalo, M.J. Caturla, J.M. Perlado, *Influence of self-interstitials mobility on damage accumulation in zirconium under fission irradiation conditions*, aceptado para publicación en Journal of Nuclear Materials (2007).

[16] M. Victoria, S. Dudarev, J. L. Boutard, E. Diegele, R. Lässer, A. Almazouzi, M. J. Caturla, C. C. Fu, J. Källne, L. Malerba, K. Nordlund, M. Perlado, M. Riech, M. Samaras, R. Schaeublin, B. Singh, F. Willaime, *Modelling irradiation effects in fusion materials*, aceptado para su publicación en Fusion Engineering and Design (2006).

[17] E. Martínez, J.M Perlado, M.Victoria, M.J.Caturla, P.Cepas, J.Marian, D.Gomez, M.Hernandez, *Accumulation damage in Fe using kinetic MonteCarlo implemented with the last Ab-initio parameters*, presentado en el ICFRM-12, Santa Barbara (Dic. 2005)

[18] L. Gamez, E. Martínez, J.M. Perlado, P. Cepas, M.J. Caturla, M. Victoria, J. Marian, C. Arévalo, M. Hernández, D. Gómez, *Damage in Fe using Kinetic Monte Carlo: modeling neutron irradiation*, aceptado para publicación en Fusion Engineering and Design (2006).

[19] E. Martínez, J. Marian, M. H. Kalos, J. M. Perlado, *Synchronous Parallel Kinetic Monte Carlo*, aceptado para su publicación en Journal of Computacional Physics (2007).

[20] E. Martínez, J. Marian, A. Arsenlis, M. Victoria, and J. M. Perlado, *Atomistically-informed dislocation dynamics in fcc crystals*, aceptado para su publicación en Journal of the Mechanics and Physics of Solids (2006).

J. M. Perlado, C. Arévalo, B. Gámez, L. Gámez, E. Martínez, F. Mota, M. Victoria trabajan en el Instituto de Fusión Nuclear (DENIM), ETSII, Universidad Politécnica de Madrid (UPM).

M.J. Caturla, en el departamento de Física Aplicada de la Universidad de Alicante y J. Marian y E. Martínez trabajan en el Lawrence Livermore National Laboratory.