



## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

**Título:** Simulaciones a escala atómica de defectos en materiales para fusión

**Descripción general** (resumen y metodología):

### Resumen

El daño por irradiación es uno de los mayores retos que se presentan en el desarrollo de la fusión nuclear. Actualmente, se desconoce de qué manera cambia la estructura atómica de los materiales a someterse a una irradiación neutrónica de alta energía. Una de las formas de resolver esta incógnita es mediante el uso de técnicas avanzadas para el cálculo de estructuras electrónicas, como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).

La DFT se basa en la aplicación de la Mecánica Cuántica a sistemas de muchas partículas, combinando la precisión en los cálculos con su facilidad de aplicación para el estudio de sistemas complejos.

Uno de los materiales más prometedores la construcción de partes de los reactores nucleares ITER y DEMO y, también, uno de los que será estudiado en el acelerador IFMIF-DONES, es el tungsteno. El tungsteno se caracteriza por tener un punto de fusión extraordinariamente alto y una excelente resistencia a la corrosión con respecto a numerosos metales. Este material es además especialmente resistente al calor y al desgaste, por lo que es muy utilizado en aplicaciones de altas temperaturas, como es el caso de los reactores de fusión .

En este Trabajo de Fin de Grado se estudiarán, utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad, las propiedades electrónicas y cristalinas del tungsteno (estructura de bandas, densidad de estados, efecto del acoplamiento spin-órbita, geometría de la red). Partiremos de su caracterización como material ideal (sin desorden ni solutos) y continuaremos estudiando el efecto de los defectos más comunes (vacantes, defectos intersticiales y sustitucionales, ...) en sus propiedades electrónicas y mecánicas (energías de formación de defectos, efecto de la tensión mecánica, etc.)

### Metodología

- Estudio de las características del tungsteno a partir de bibliografía básica facilitada por la tutora.
- Simulación de ejemplos/tutoriales mediante el código de simulación elegido.
- Simulación del material y defecto(s) elegidos mediante el código de simulación elegido.
- Análisis de las propiedades estructurales y electrónicas del material y defecto(s) seleccionados. Comparación con el caso ideal. Comparación con otros materiales y defectos (si el tiempo lo permite).

**Tipología:** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

### Objetivos planteados:

- Familiarizarse con el trabajo en un entorno UNIX/LINUX: editores de texto, herramientas gráficas de visualización de datos, herramientas para la manipulación de estructuras atómicas, etc.
- Aprender a manejar de forma básica métodos de simulación de estructura electrónica basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).
- Estudiar el efecto en las propiedades estructurales (longitud y ángulos de enlaces entre átomos) y electrónicas (estructura de bandas, densidad de estados) de la inclusión de

defectos (vacantes de átomos), dopantes, o combinación de distintos materiales.

### **Bibliografía básica:**

#### **Introducción:**

[1] <https://ifmif-dones.es/dones-program/>

[2] [https://es.wikipedia.org/wiki/Teor%C3%ADa\\_del\\_funcional\\_de\\_la\\_densidad](https://es.wikipedia.org/wiki/Teor%C3%ADa_del_funcional_de_la_densidad)

[3] [https://en.wikipedia.org/wiki/Vienna\\_Ab\\_initio\\_Simulation\\_Package](https://en.wikipedia.org/wiki/Vienna_Ab_initio_Simulation_Package)

#### **Para profundizar:**

[4] [https://www.vasp.at/wiki/images/5/5d/VASP\\_lecture\\_Basics.pdf](https://www.vasp.at/wiki/images/5/5d/VASP_lecture_Basics.pdf)

Malerba, L., Anento, N., Balbuena, J. P., Becquart, C. S., Castin, N., Caturla, M. J., ... & Serra, A. (2021). Physical mechanisms and parameters for models of microstructure evolution under irradiation in Fe alloys–Part I: Pure Fe. *Nuclear Materials and Energy*, 29, 101069.

Gaganidze, E., & Aktaa, J. (2013). Assessment of neutron irradiation effects on RAFM steels. *Fusion Engineering and Design*, 88(3), 118-128.

[https://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1998/index.html](https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/index.html)

Electronic Structure Basic Theory and Practical Methods

Richard M. Martin

Cambridge University Press (2004).

### **Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:**

#### **Conocimientos requeridos:**

- Conocimiento del entorno LINUX/UNIX (nivel usuario).
- Conocimientos de Estado Sólido y Física Cuántica.
- Conocimientos de un lenguaje de programación (Python, Fortran, C++, etc.) a nivel básico pueden ser útiles.

**Plazas:** 1

## **2. DATOS DEL TUTOR/A:**

**Nombre y apellidos:** BLANCA BIEL RUIZ

**Ámbito de conocimiento/Departamento:** FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

**Correo electrónico:** biel@ugr.es

## **3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):**

**Nombre y apellidos:**

**Ámbito de conocimiento/Departamento:**

**Correo electrónico:**

## **4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):**

**Nombre y apellidos:**

**Correo electrónico:**

**Nombre de la empresa o institución:**

**Dirección postal:**

**Puesto del tutor en la empresa o institución:**

**Centro de convenio Externo:**

**5. DATOS DEL ESTUDIANTE:**

**Nombre y apellidos:** LOLA CASTELLON RUIZ

**Correo electrónico:** locasru0420@correo.ugr.es