



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

**Tutor/a:** Blanca Biel Ruiz

**Departamento y Área de Conocimiento:** Física Atómica, Molecular y Nuclear

**Correo electrónico:** biel@ugr.es

**Cotutor/a:** Pablo Canca López

**Departamento y Área de Conocimiento:** Física Atómica, Molecular y Nuclear

**Correo electrónico:** pcanca@ugr.es

**Título del Trabajo:** Uso de técnicas *ab-initio* para el análisis de la estabilidad de defectos en aceros

<b>Tipología del Trabajo:</b> (Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)	(Marcar con X)	1. Revisión bibliográfica		4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	
		2. Estudio de casos teórico-prácticos	X	5. Elaboración de un proyecto	
		3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

### Breve descripción del trabajo:

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.

El material propuesto para la construcción de ITER, DEMO y, también, uno de los que será más estudiado en IFMIF-DONES, los EUROFER97, es un acero formado, principalmente, por Fe, C y Cr, además de otros muchos compuestos disueltos en menor cantidad.

En este Trabajo de Fin de Grado se estudiarán las propiedades electrónicas y cristalinas (bandas, densidad de estados, efecto del spin, geometría de la red) del Fe como material ideal (sin desorden ni solutos) para, a partir de ahí, estudiar la influencia del C y el Cr en varias de sus propiedades. Además, se estudiará la estabilidad de defectos puntuales de C ante la presencia de Cr y sin él, calculando energías de formación para vacantes, defectos intersticiales y sustitucionales. En función del interés del alumno o alumna se podrán plantear cuestiones más avanzadas.

### 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.

### **Metodología:**

- Selección de materiales y defectos a estudiar. Estudio de sus propiedades a partir de bibliografía básica facilitada por la tutora.
- Simulación de ejemplos/tutoriales mediante el código de simulación elegido.
- Simulación de material y defecto(s) elegidos mediante el código de simulación elegido.
- Opcional: Efecto del Cr con y sin efectos de spin.
- 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).

### **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.

### **Bibliografía:**

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).



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de Ciencias  
Sección de Físicas

*A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG*  
*Alumno/a propuesto/a:*

Granada, de 2023

Sello del Departamento