



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

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

Descripción general (resumen y metodología):

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. Otro de los materiales más prometedores y que también se está estudiando intensamente es el tungsteno.

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) de alguno de estos materiales (Fe o W) como material ideal (sin desorden ni solutos) para, a partir de ahí, estudiar la influencia de las impurezas más comunes en sus propiedades (energías de formación de defectos tales como vacantes, defectos intersticiales y sustitucionales.) En función del interés del alumno o alumna se elegirán los materiales y defectos a estudiar.

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.
- 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

[3] 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

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

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:

Correo electrónico: