

Simulación mediante dinámica molecular de la irradiación de sílice con iones rápidos pesados

Workshop Technofusion
18-19 junio 2012, UC3M

A. Rivera, O. Peña, A. Prada, J. Olivares,
F. Agullo-Lopez, M.J. Caturla



TechnoFusión
Centro Nacional de
Tecnologías para la Fusión

INDUSTRIALES
ETSII | UPM



Método	Aproximación	Átomos	Tamaño	Tiempo
<i>Ab initio</i> - DFT	E. Schrödinger a través de aproxi.	Todos	Unos pocos cientos de átomos	Estático Car-Parinello \ll ns
Tight-binding	Repulsion - empírica	Todos	Unos miles de átomos	$<$ ns
Dinámica Molecular clásica	Potenciales Empíricos	Todos	Millones de átomos $\sim (100\text{nm})^3$	\sim ns
Monte Carlo cinético	Probabilidades de reacción	Sólo defectos	$\sim (1000\text{nm})^3$	Horas - años
Rate theory	Campo medio	Sólo defectos	Sin límites	Horas - años
Dinámica de dislocaciones	Elasticidad + reglas corto alcance	Sólo dislocaciones	$\sim (1000\text{nm})^3$	----
Elementos finitos	Ecuaciones constitutivas	Discretización del sistema	-----	-----

Experimentos

Gonzalez, Gordillo, Panizo, Melgar, Peña, Olivares (CSIC), Pastor (Camino), Fdez (IMM)

Modelos fenomenológicos

Ab initio

MD

MC

Disloc.

FE

eMC

BC

T diff.

Moral, Alvarez

18
investigadores
IFN

Boltzmann

Apostolova

FDTD

Peña

Experimentos

Fenomenológicos

- Altas presiones
- Propiedades de defectos
- Estudios de intercaras
- Baterías de Li

Guerrero, Río, Iglesias (U. Oviedo)

Ab initio

MD

MC

Disloc.

FE

eMC

BC

Boltzmann

FDTD

• **Cinética de intersticiales en sistema**

Fe:Cr

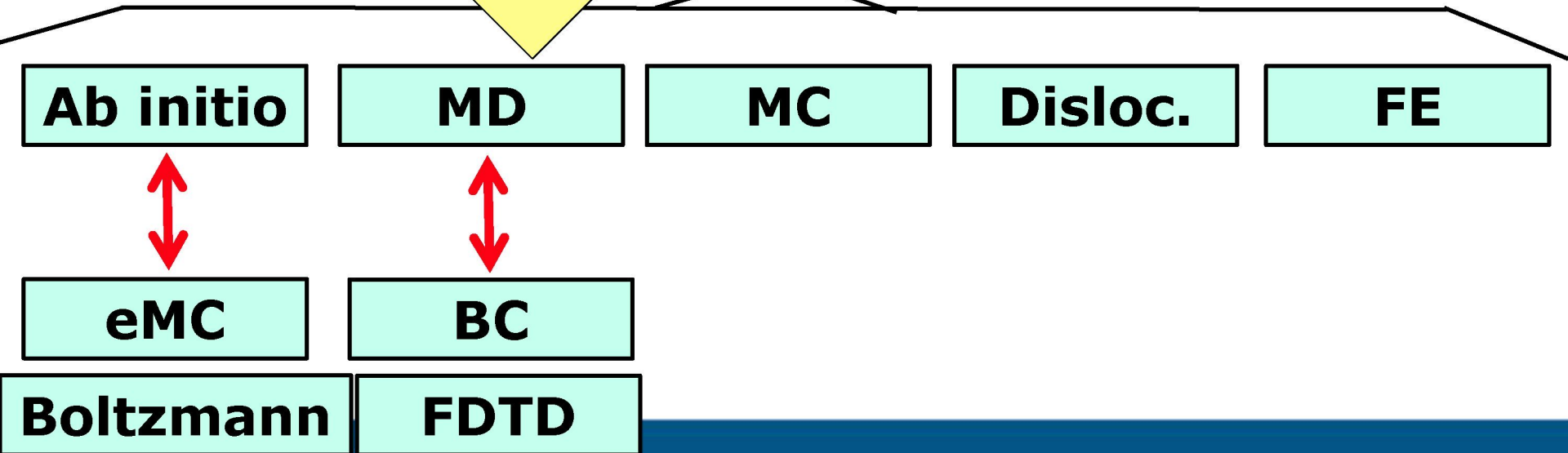
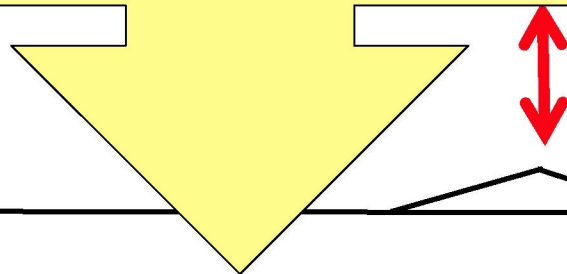
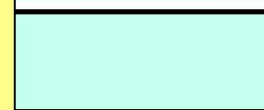
• **Efectos de alta densidad electrónica en dieléctricos**

• **Potencial LiPb**

• **Dislocaciones en W**

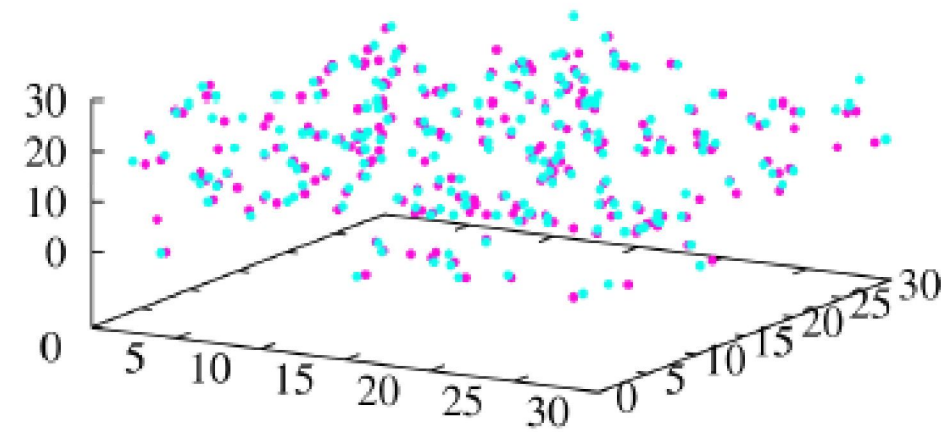
Río, Rivera, Prada, Peña, Fraile, Cereceda, Caturla (U. Alicante)

MD

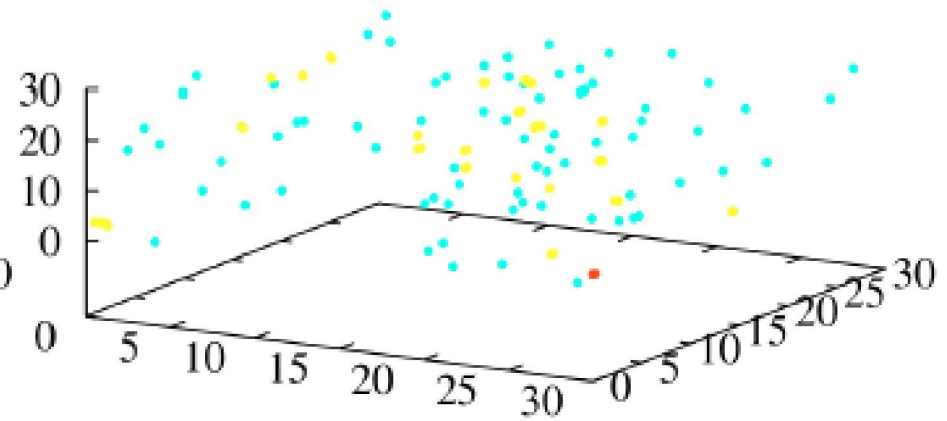


- Nucleación de defectos en los sistemas W:C:He y Fe:He
- Acumulación de He

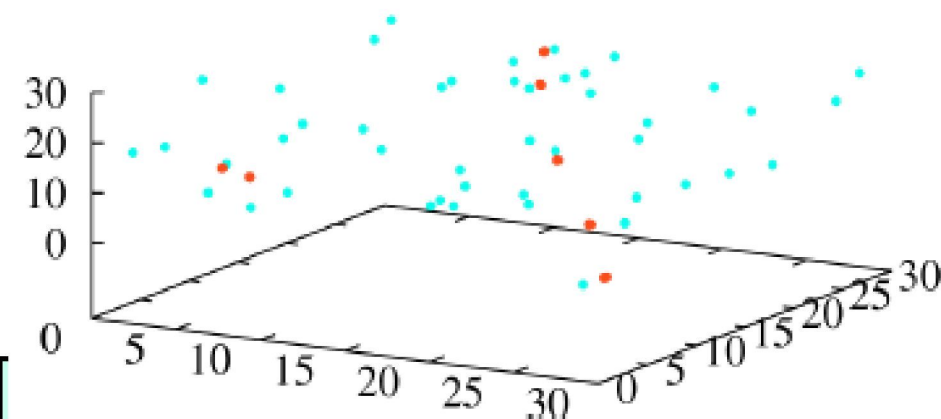
a) 107 K



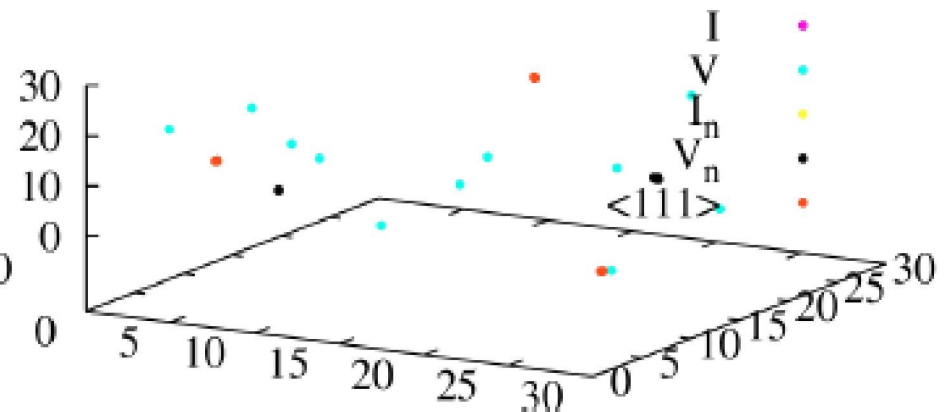
b) 146 K

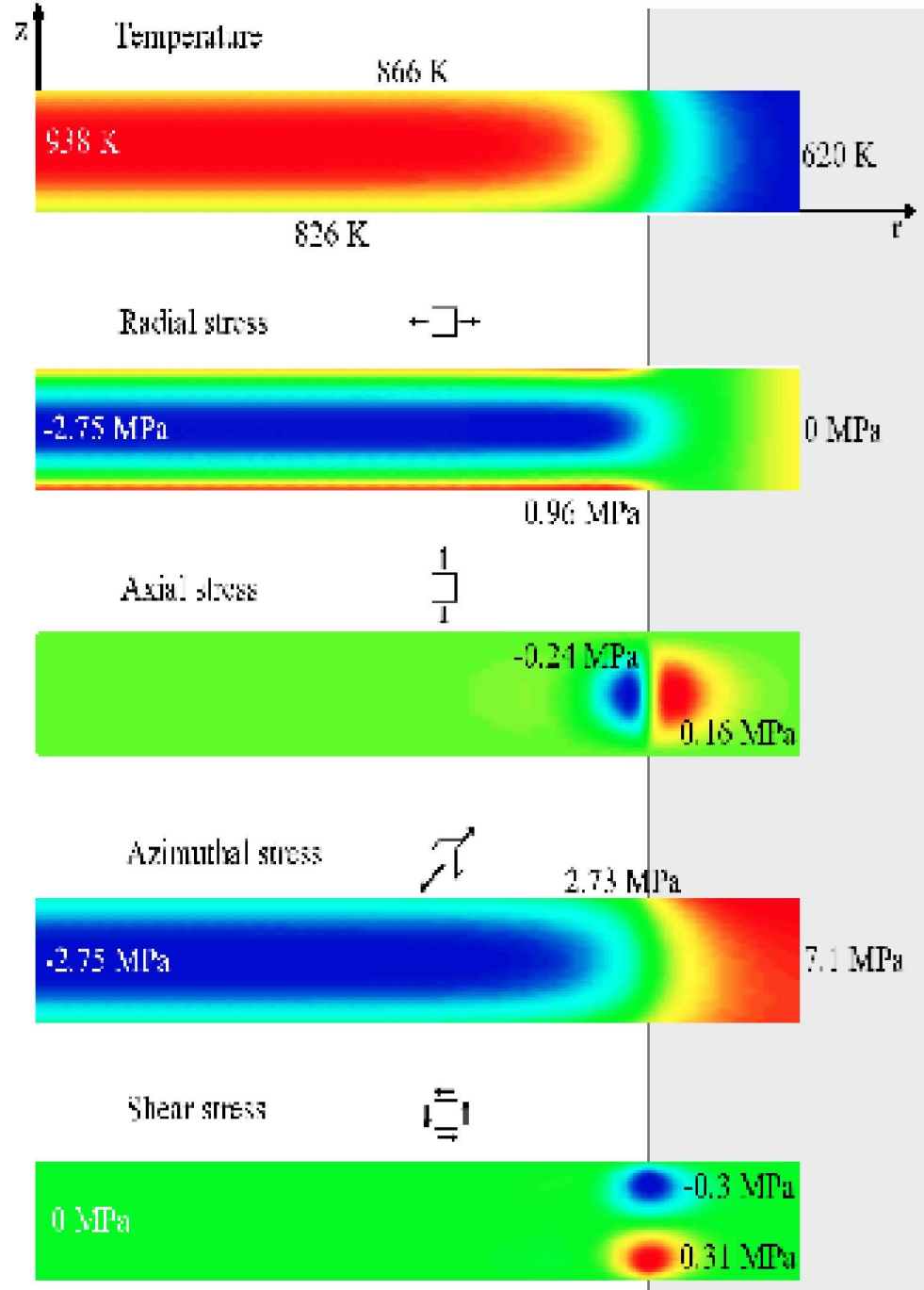


c) 186 K



d) 277 K





mentos

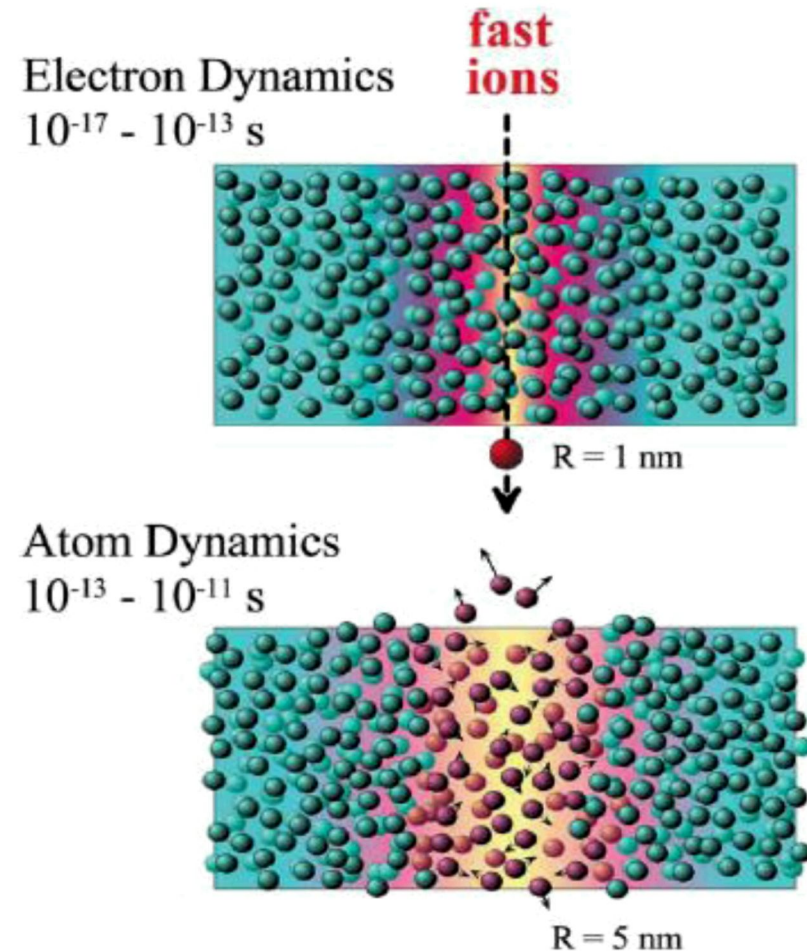
- Estudios termomecánicos
- Aplicación en nanoestructuras
- Desarrollo de grietas

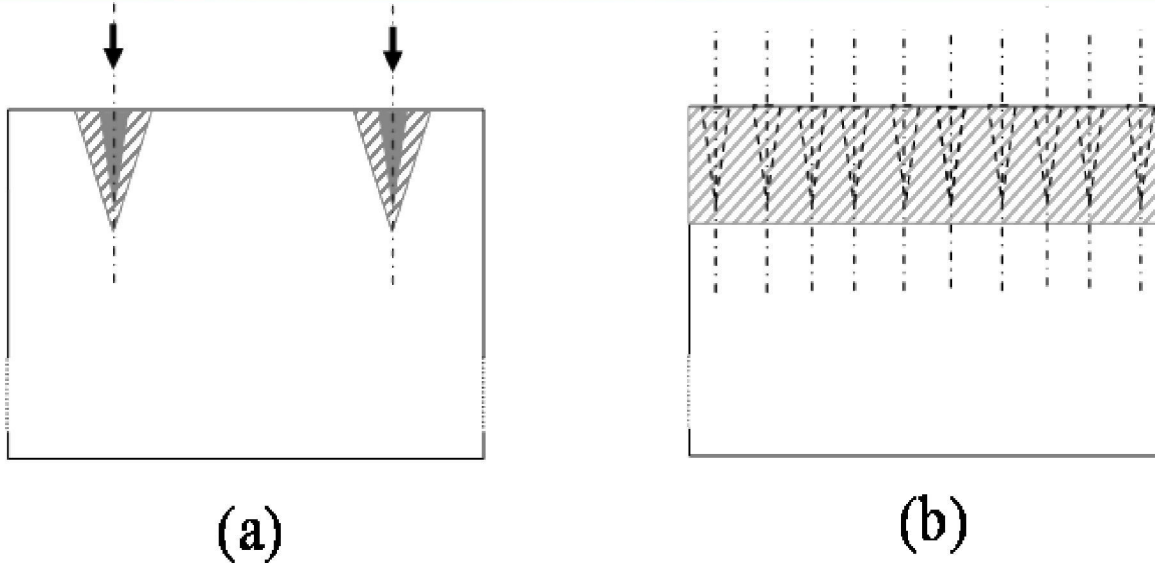
Garoz, Rodríguez-Páramo, Sordo (ESS)

Disloc.

FE

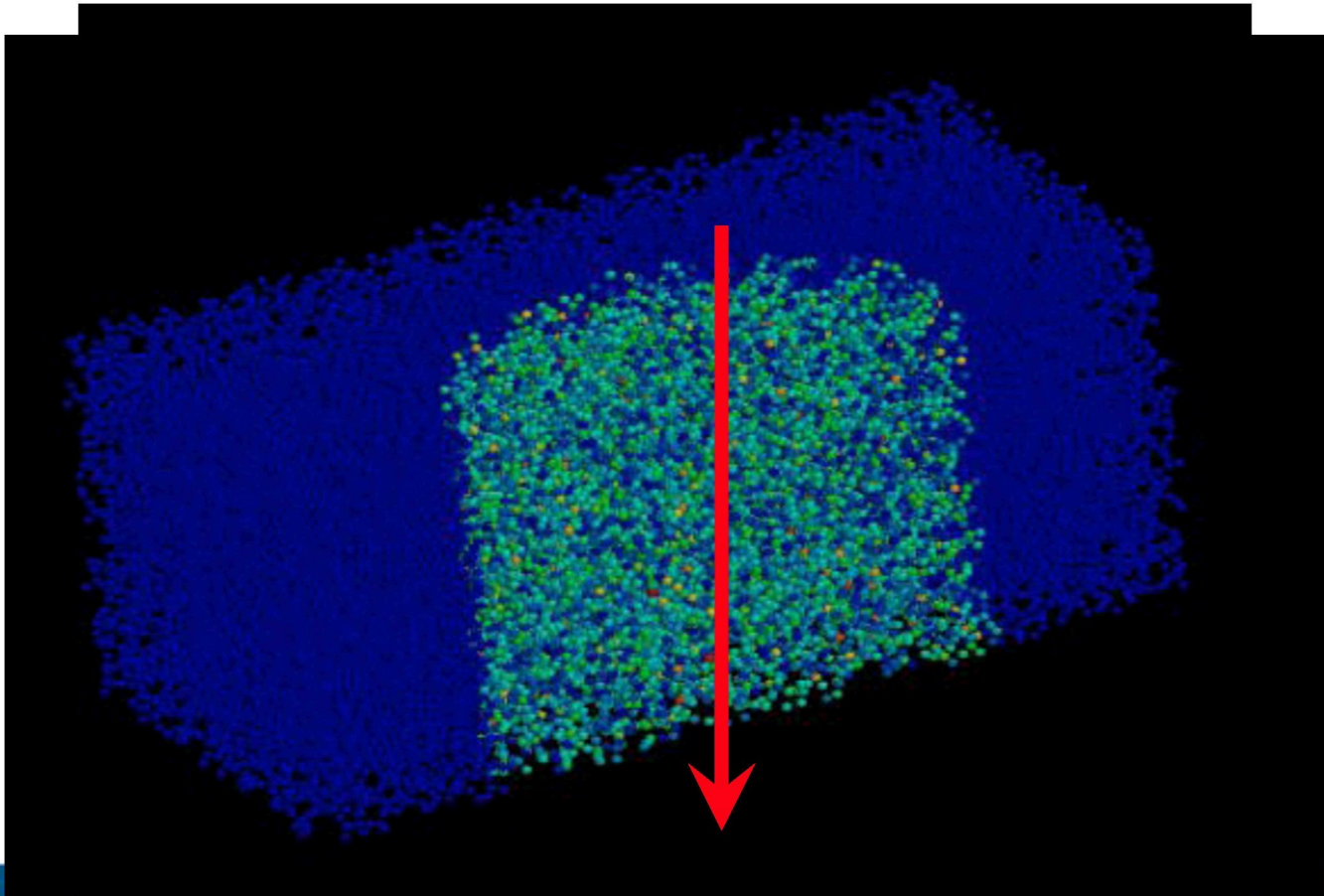
- Not well understood
- Permanent damage
- Modification of properties
- Defect annealing
- Nano-track formation
- Complex energy transfer mechanisms

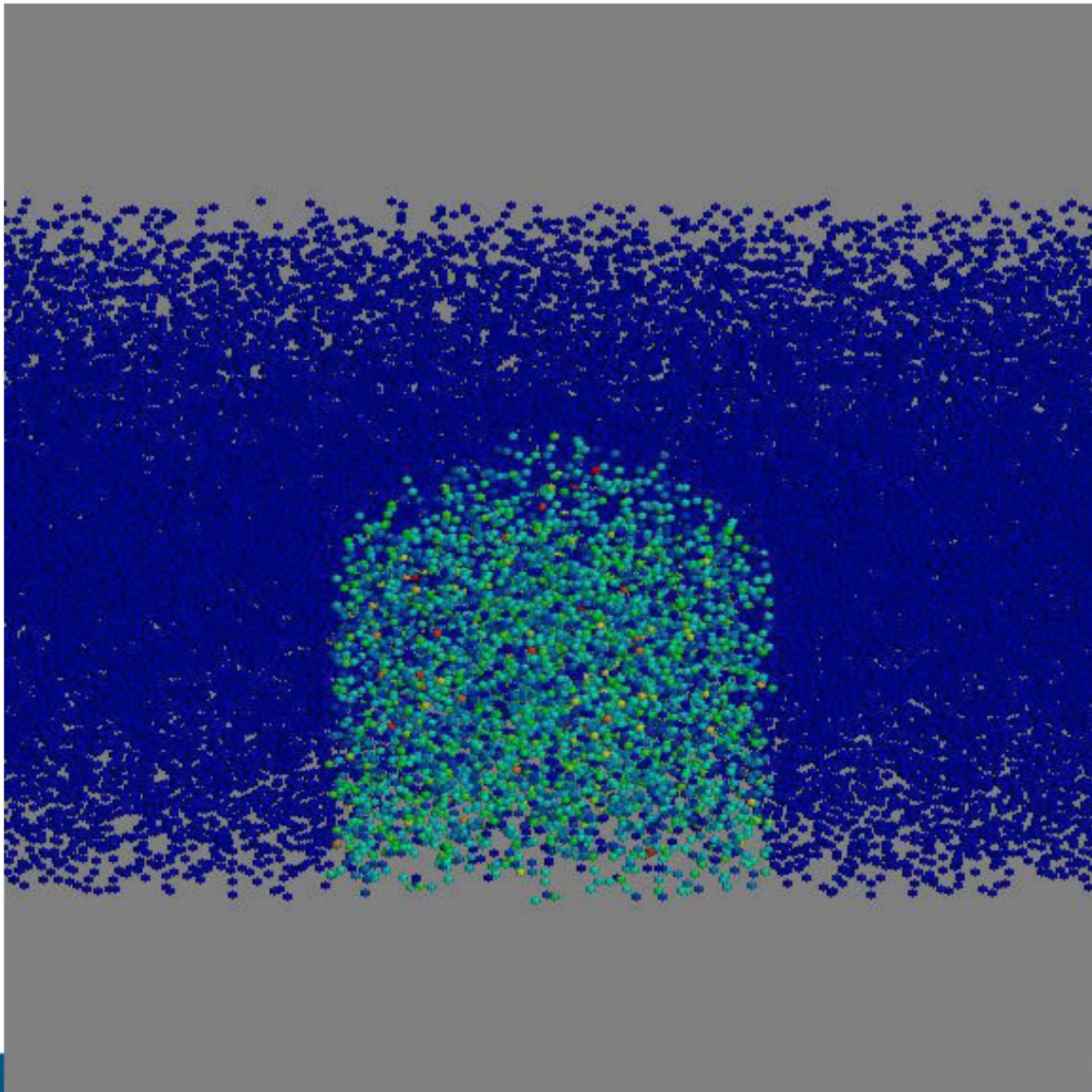




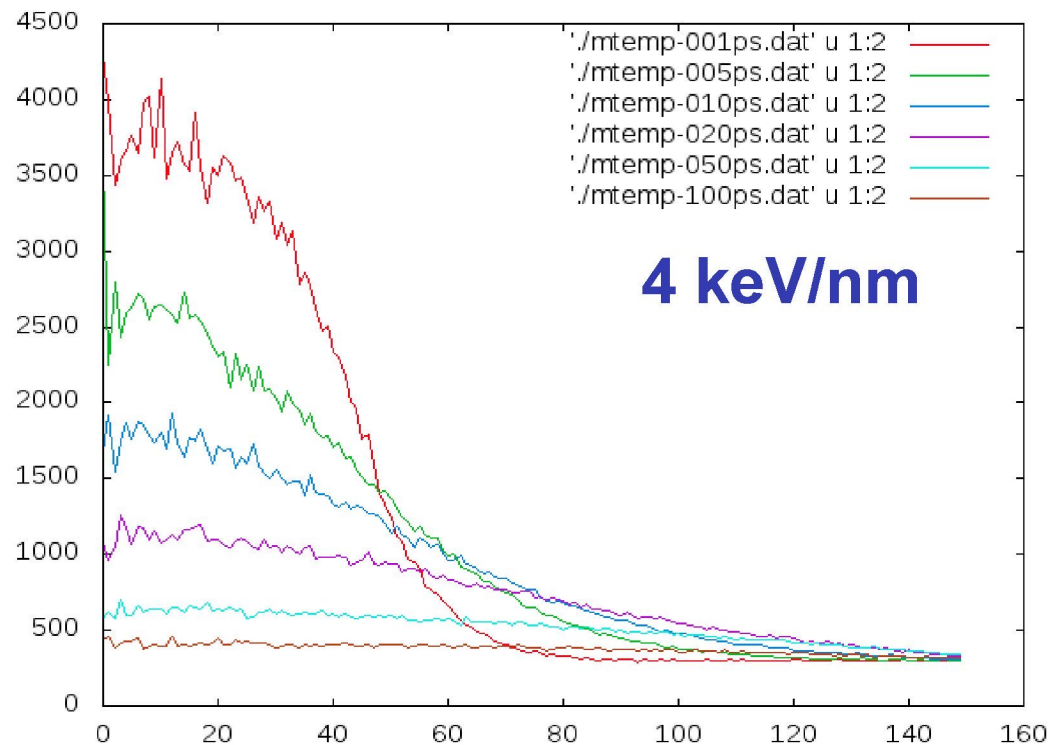
- Swift ion irradiation =>
 - Electronic sputtering
 - Density variation
 - Defect production
- Relevant effects in nuclear fusion

- Can't explain ion-solid energy transfer
- We assume S_e (keV/nm) is transferred to lattice



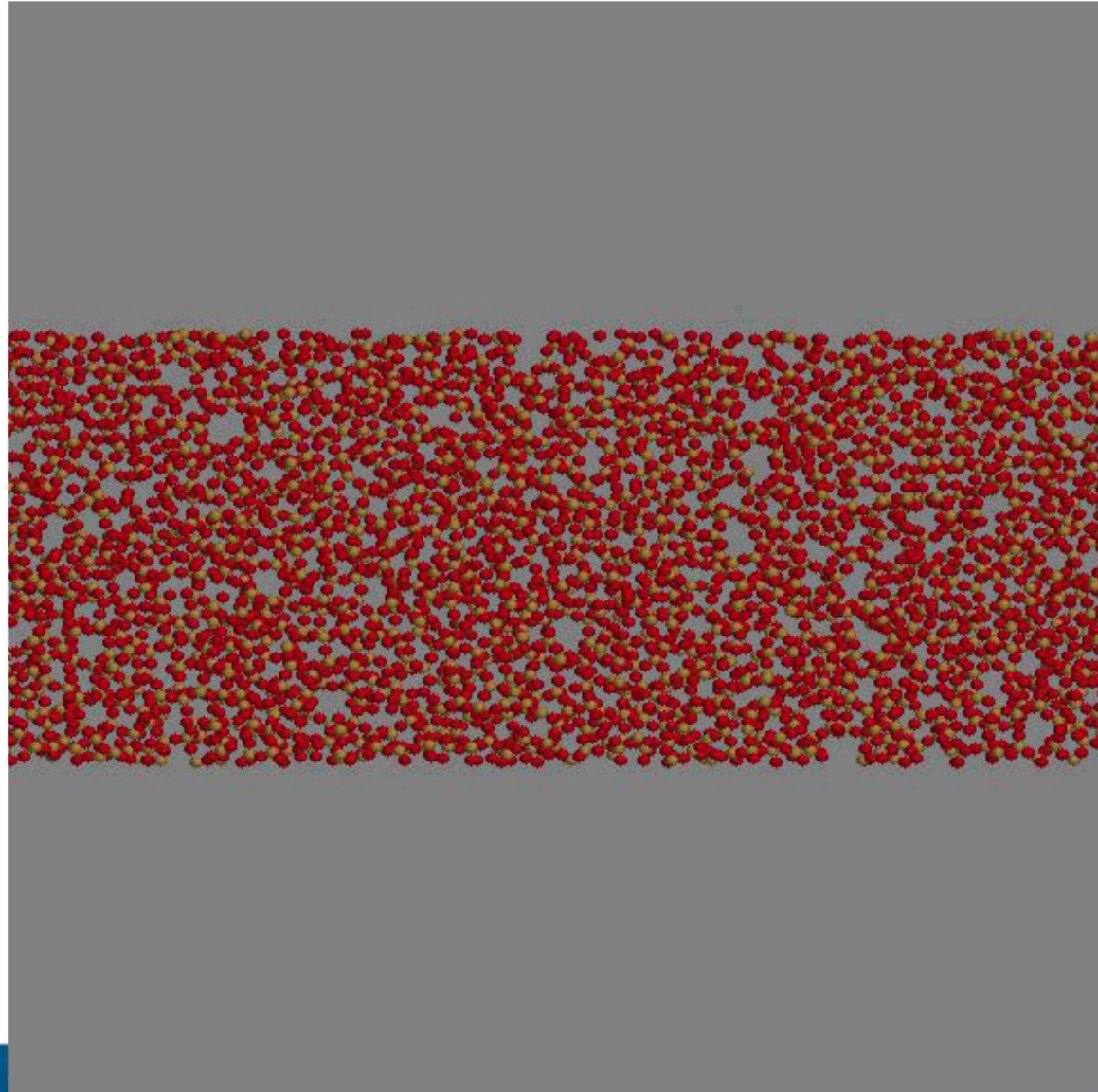


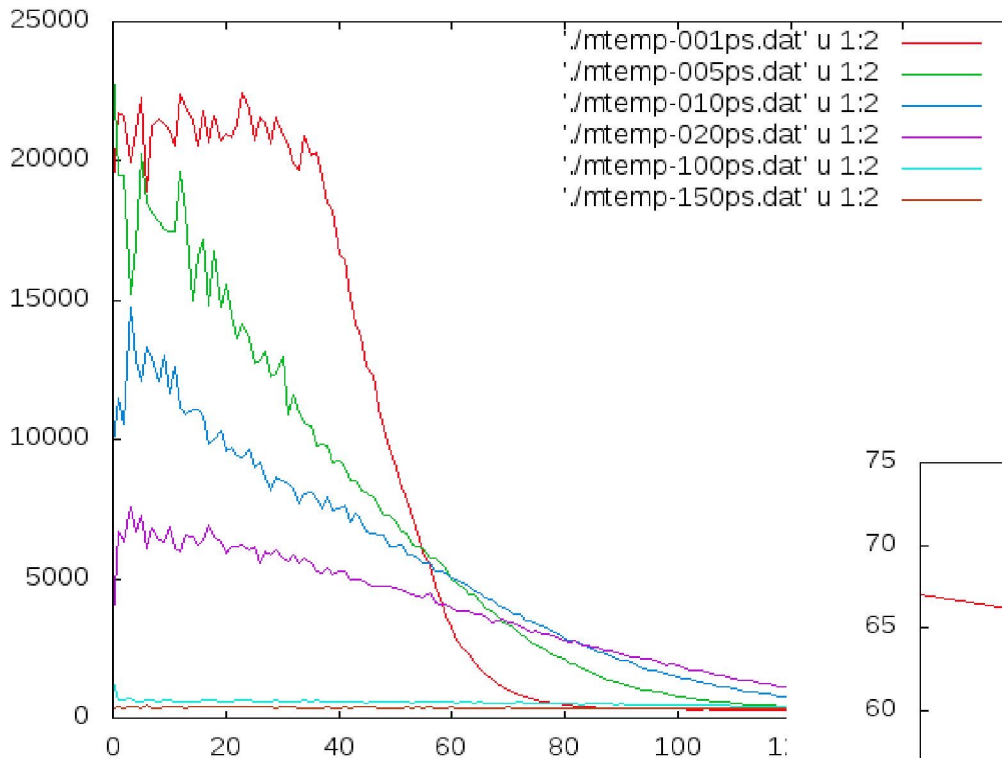
- Resulting temperature profiles compatible with electron MC simulations



- Ion irradiation strongly affects the material

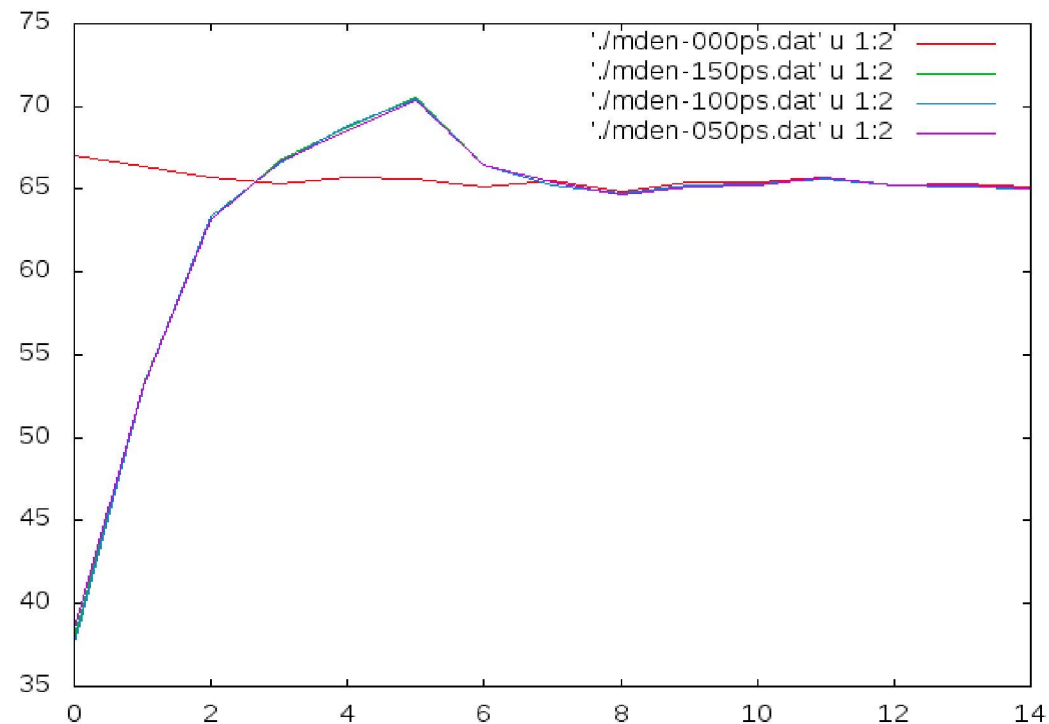
30 keV/nm

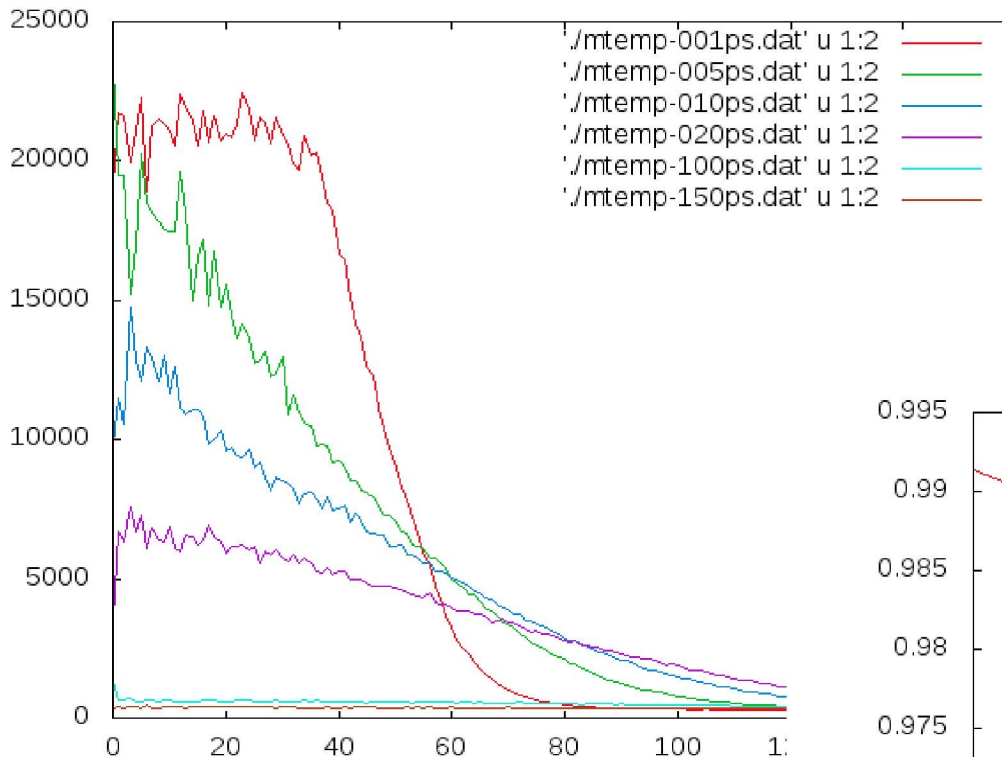




30 keV/nm

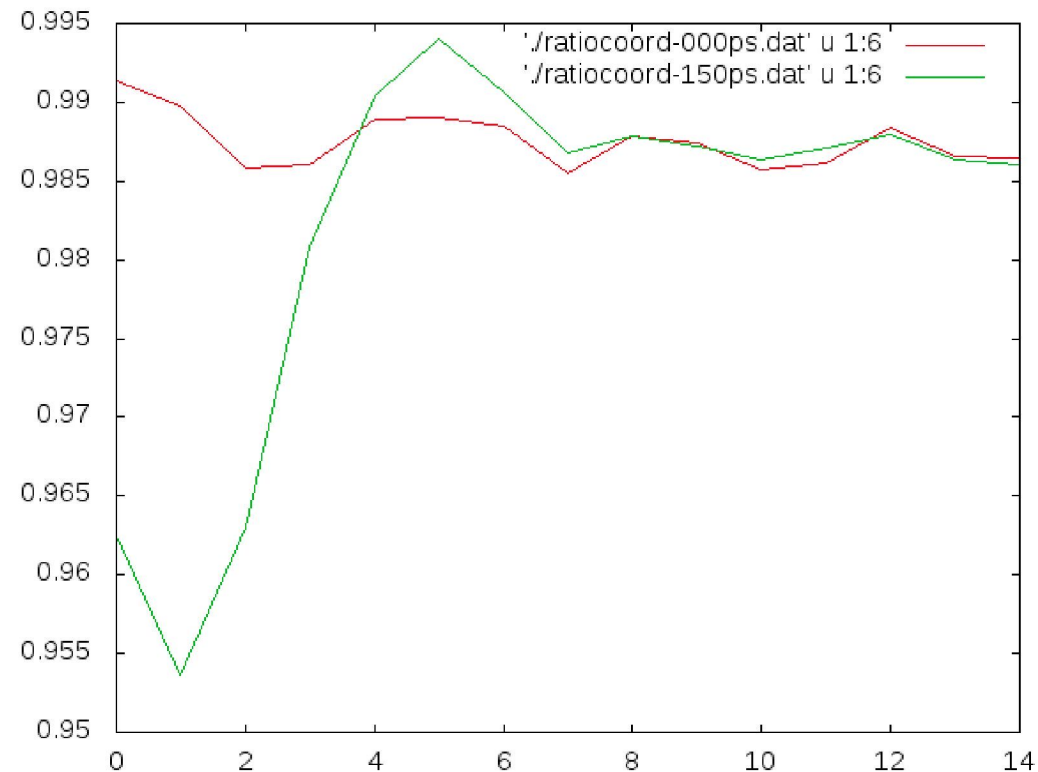
- Density variation
- At the surface
- electronic sputtering
- Refractive index

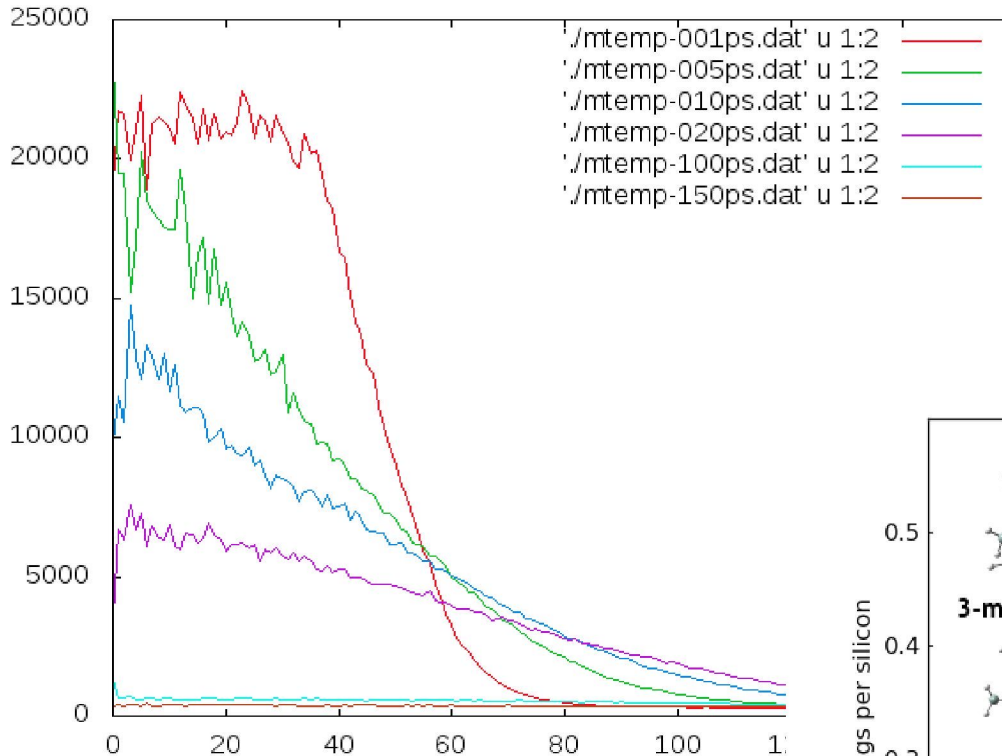




30 keV/nm

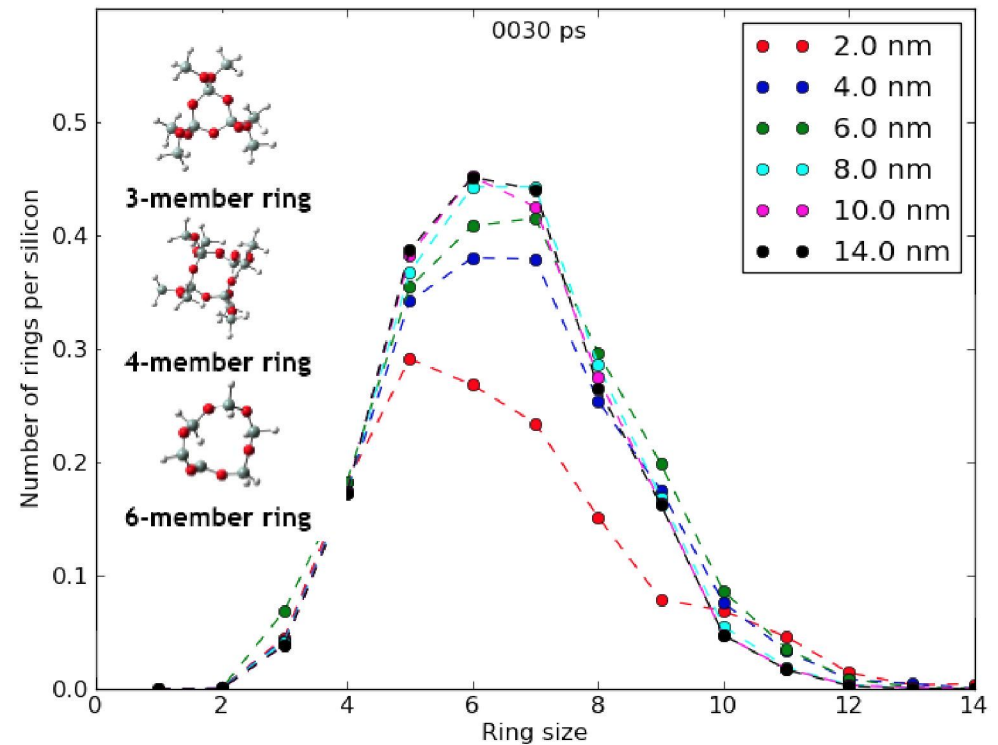
- %Si con nº coord. 4
- Point defects





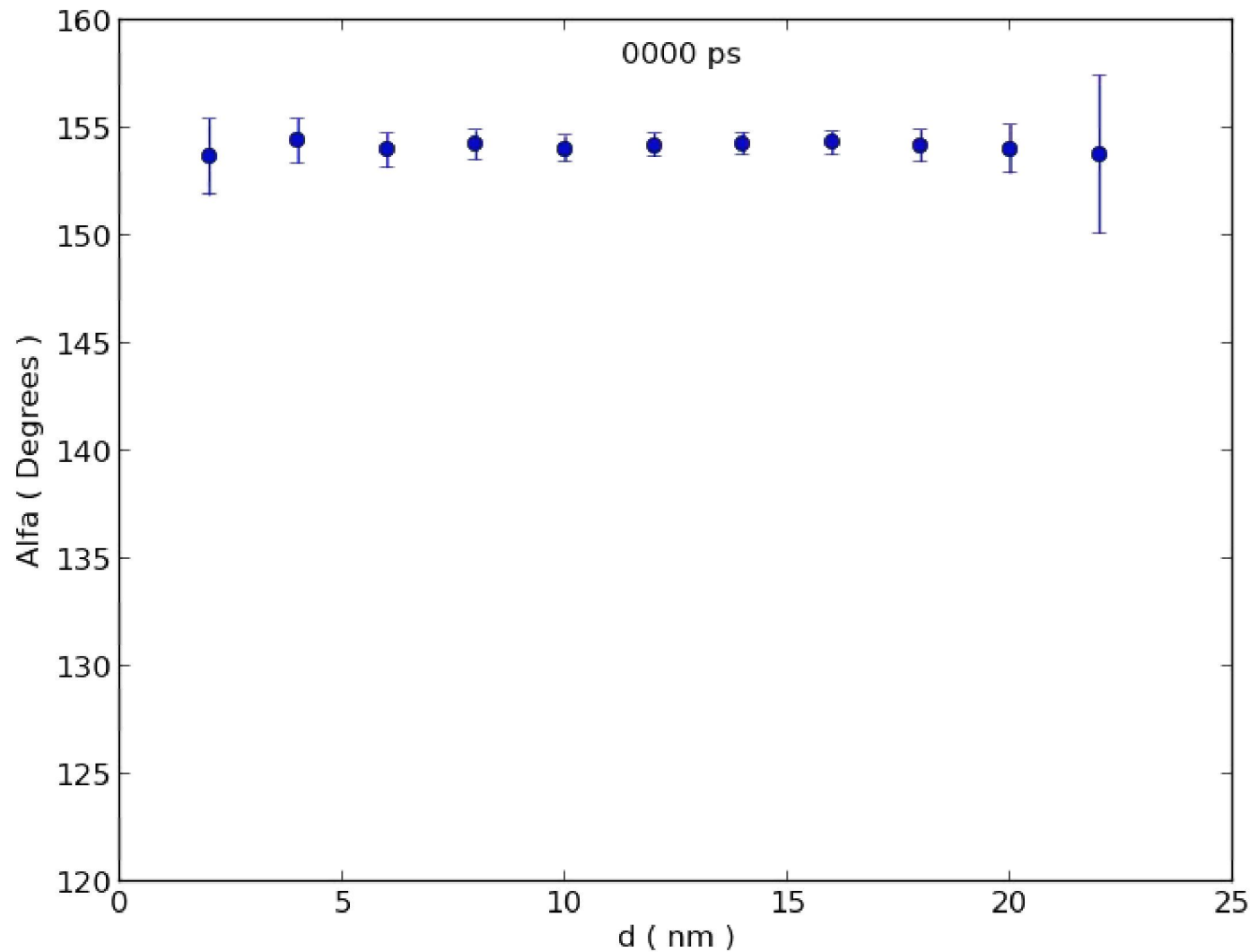
30 keV/nm

- Ring distribution
- Raman effects

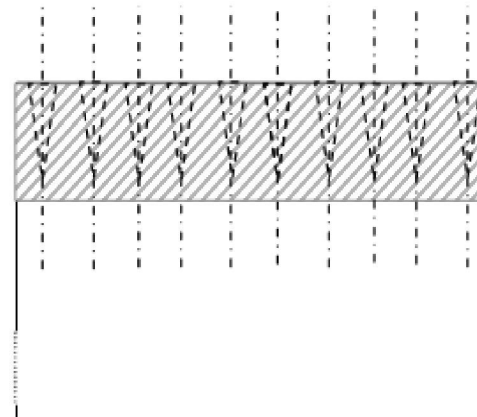
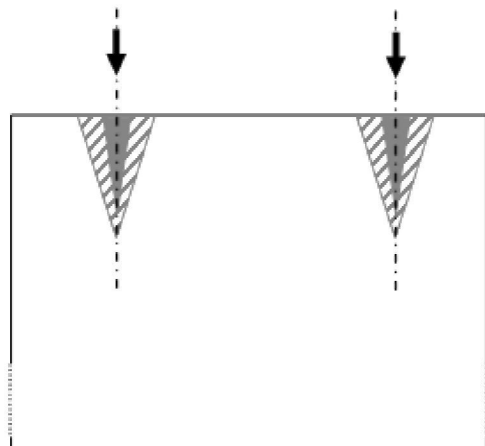
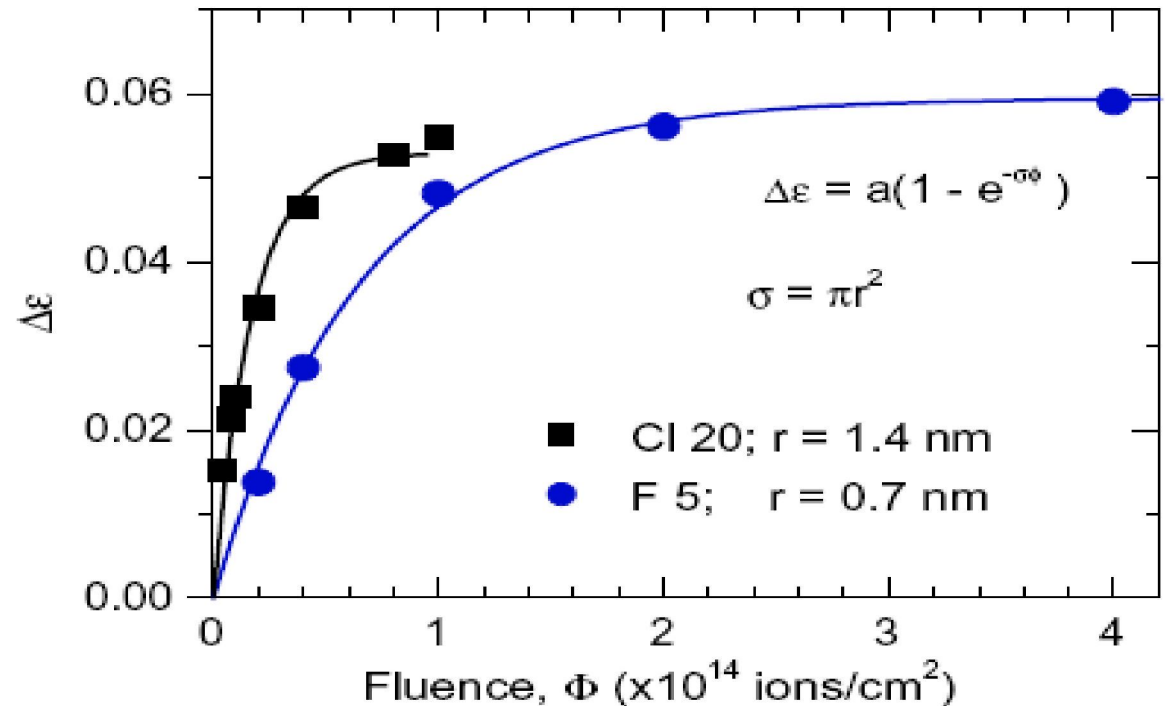




30 keV/nm



- Related to refractive index



- Excitación electrónica afecta a la sílice
 - Cambio en densidad
 - Cambio en índice de refracción
 - Cambio en distribución de anillos
 - Cambio en distribución de ángulos
 - Generación de defectos puntuales
- Con ciertas hipótesis MD permite cuantificar los efectos de la irradiación
- Aparte del estudio fundamental esto tiene implicaciones en fusión y technofusion



INDUSTRIALES
ETSII | UPM



Gracias