

## 1. Resumen

- Reactores nucleares (ITER) → radiación en las paredes.
- Tungsteno (W): ¿resistente a la radiación?
- Dinámica Molecular: bombardeo con deuterio → daño local.
- Interacciones atómicas → Defectos, daño del material.

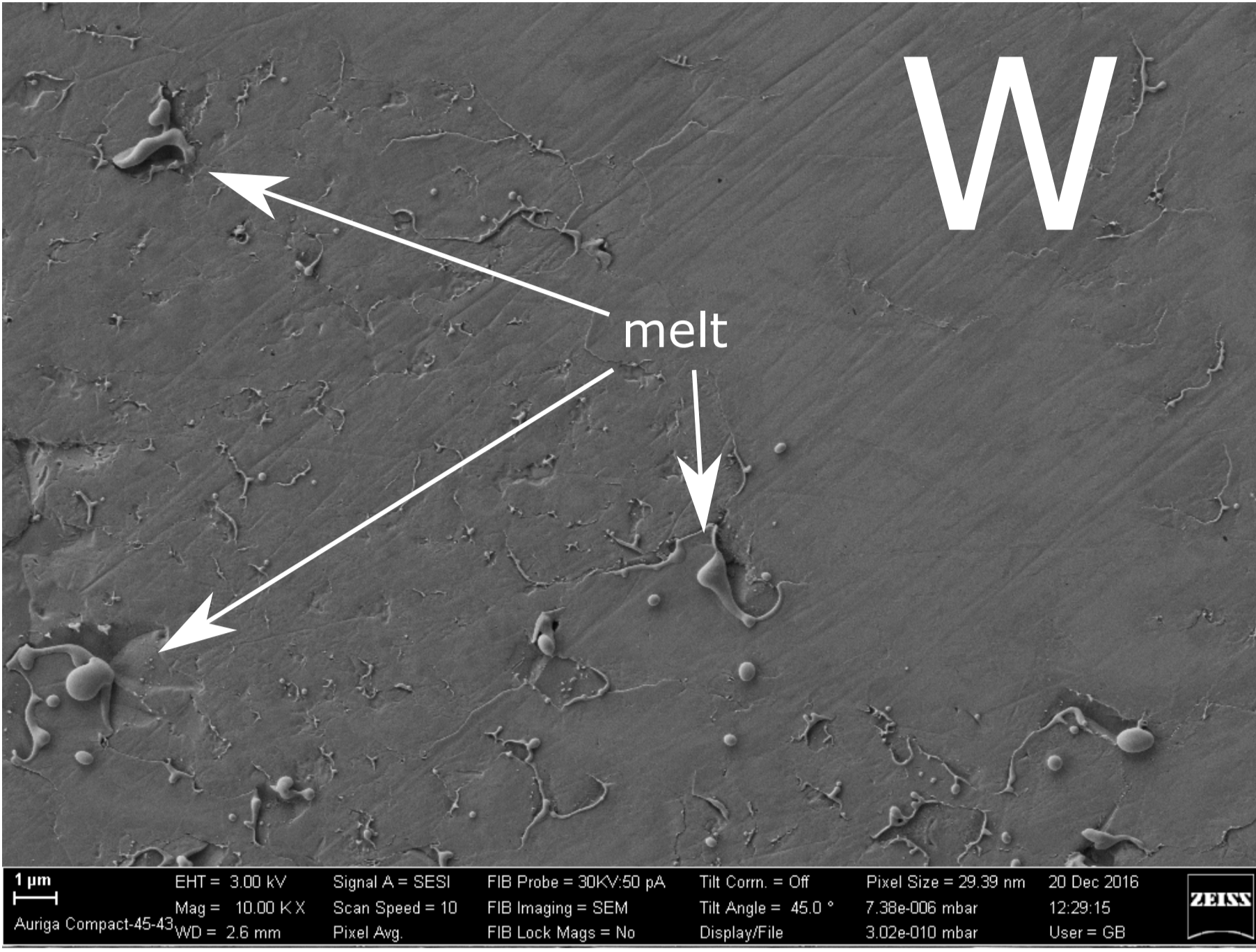


Figura 1: Imagen STM: Superficie de tungsteno irradiada con deuterio, usando nuestro plasma focus PF400J (CCHEN) [1, 2].

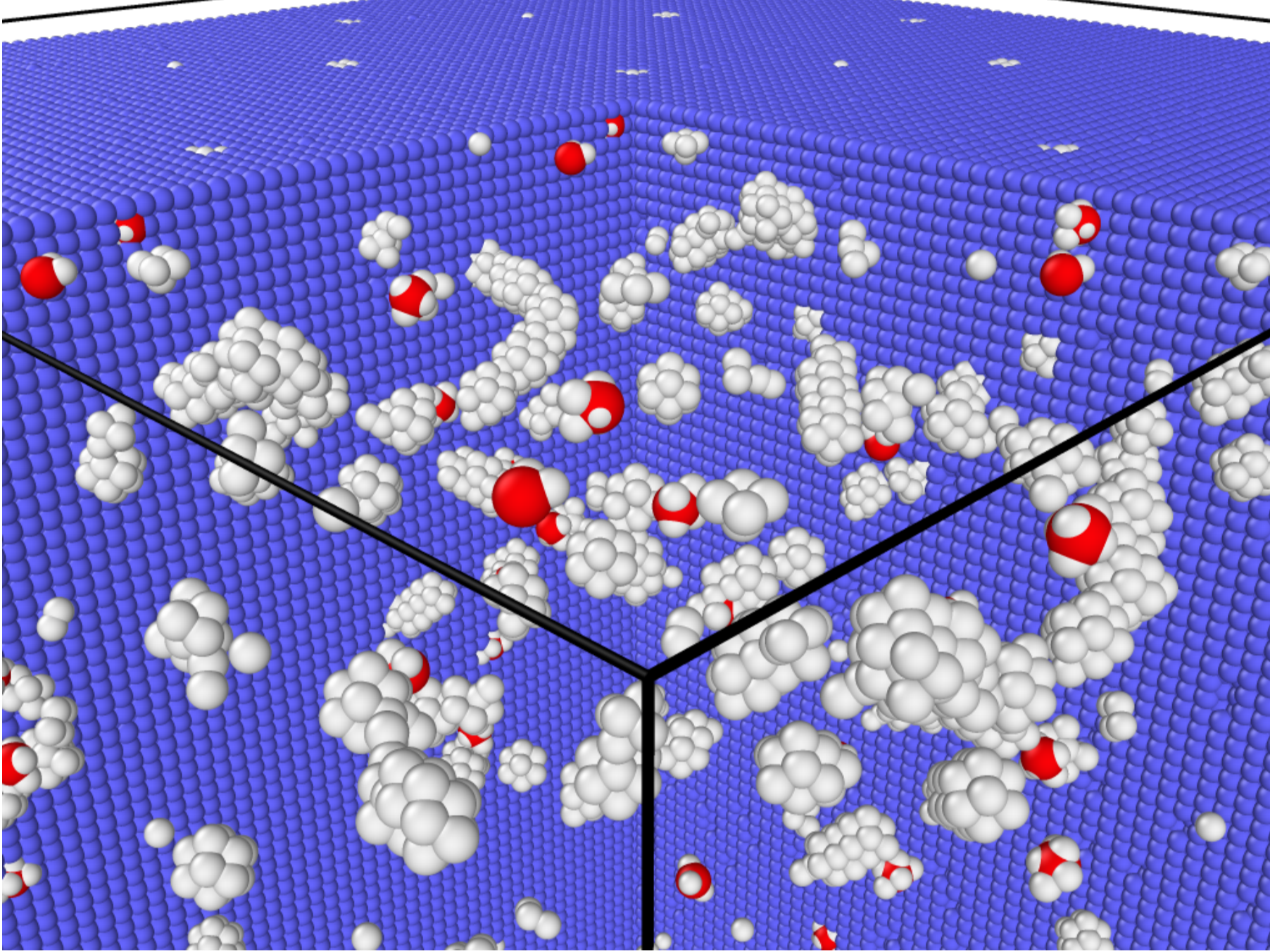


Figura 2: Irradiación de tungsteno (azul) con átomos de deuterio (rojo) generan vacancias al desplazar átomos (blanco).

⇒ Nuestros experimentos logran densidades de energía de grandes reactores.

⇒ Factor de daño

$$F = \frac{E}{A\tau^{1/2}} = q\tau^{1/2}$$

comparable al de grandes reactores, usando poca energía.

⇒ Fusión (melting) local del material.

**DINÁMICA MOLECULAR**  
¿Podemos simular explícitamente irradiación de deuterio en tungsteno?

## 2. Stopping Power

Deuterio en tungsteno pierde energía a una tasa dada por

$$S(E) = -\frac{dE}{dx} \quad (1)$$

donde  $x$  es la distancia recorrida en el material.

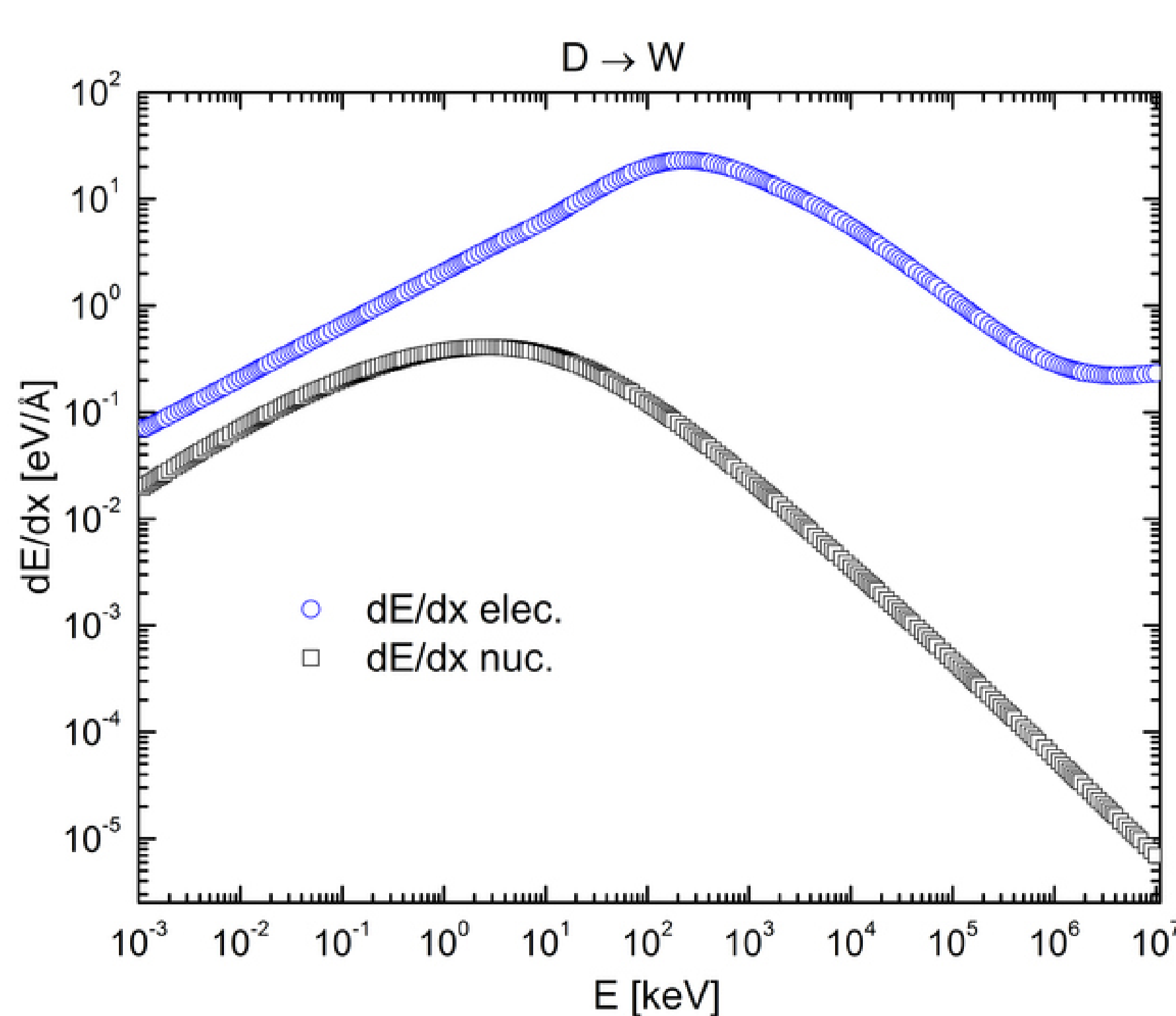
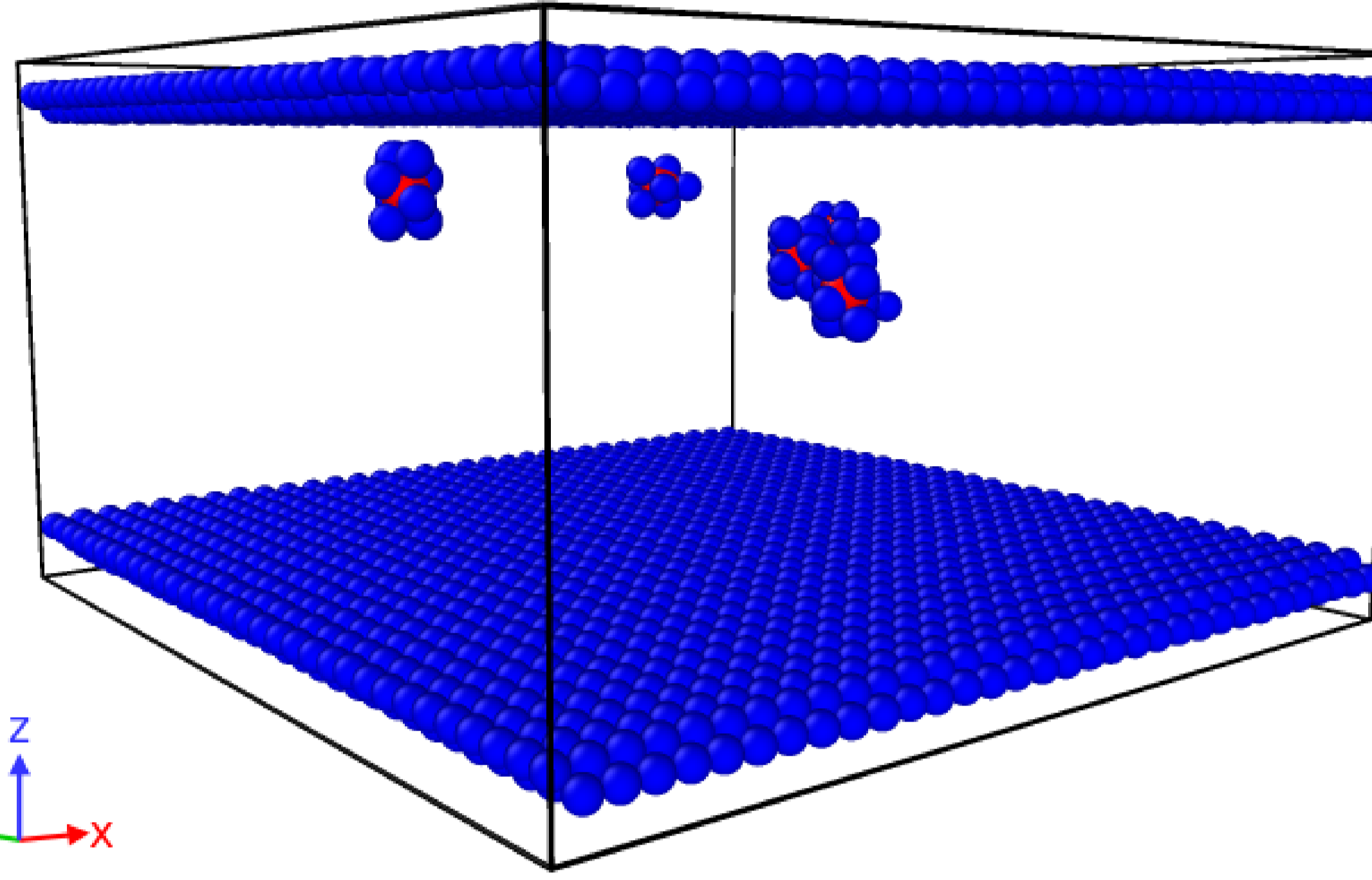


Figura 3: Stopping power de deuterio en tungsteno.

Un ion de deuterio con energía  $E(0) = E_0$  pierde energía a una tasa  $S(E)$ . Distancia necesaria para que un ion de deuterio con energía inicial  $E(0) = E_0$  quede con energía 10 eV ( $x_{10}$ ) o 1 eV ( $x_1$ ):

$E_0$ (keV)	$x_{10}$ (nm)	$x_1$ (nm)
0.1	10.5	13.8
1.0	43.7	43.7
10.0	148.9	148.9
33.0	274.4	274.4
100.0	481.4	481.4

$t = 10.800$  ps



Displaced particles: 48

Figura 4: Iones de baja energía son detenidos en la superficie. Son también el estado final de iones de alta energía.

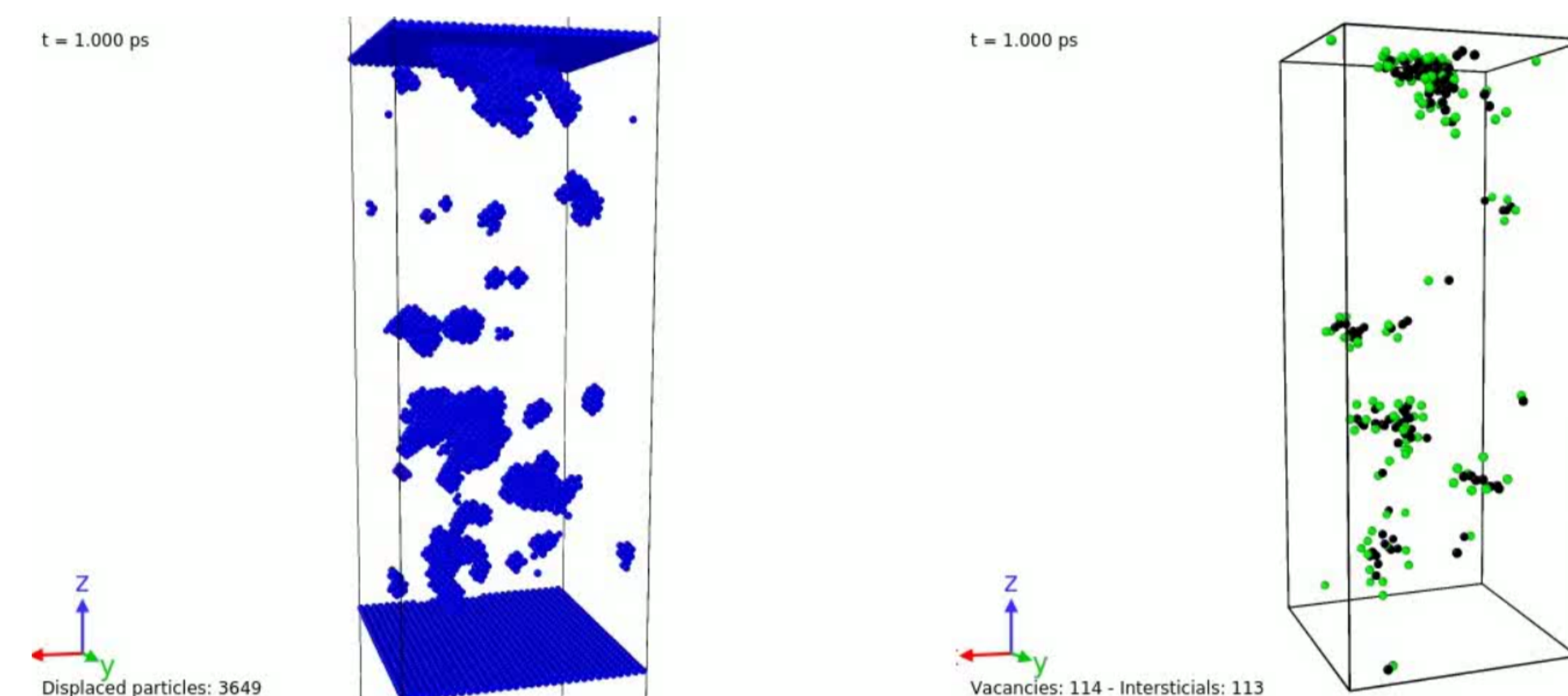


Figura 5: Iones de alta energía recorren largas distancias (~nm) en el cristal de tungsteno, dejando considerable daño en el material, como clusters de vacancias.

## 3. Análisis

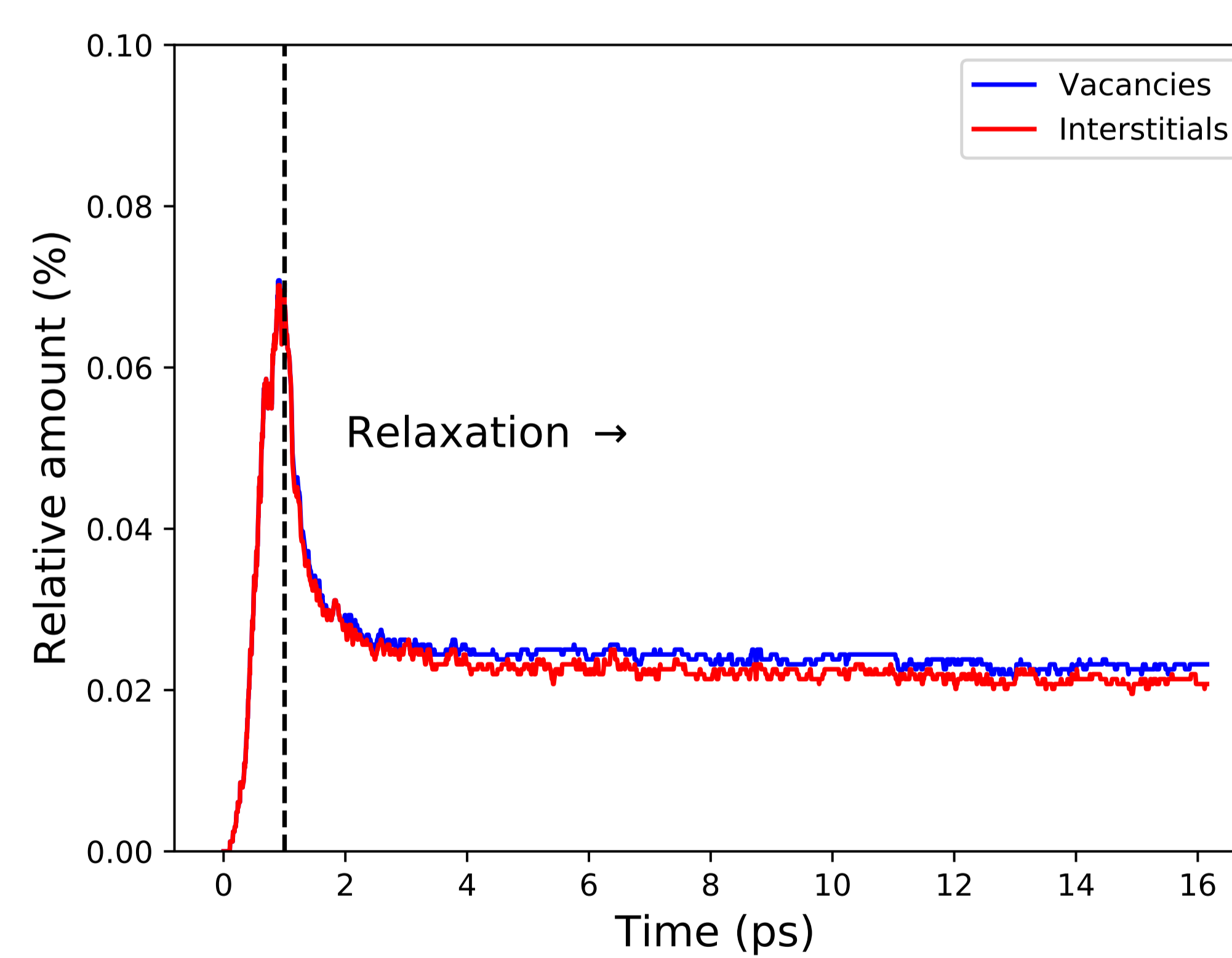


Figura 6: Vacancias e intersticiales formados en el cristal de tungsteno, en función del tiempo. Flujo de iones de deuterio de 33 keV: 1 partícula por 100 nm<sup>2</sup> cada 6 fs ( $Q = 8,81 \times 10^5$  MW/cm<sup>2</sup>).

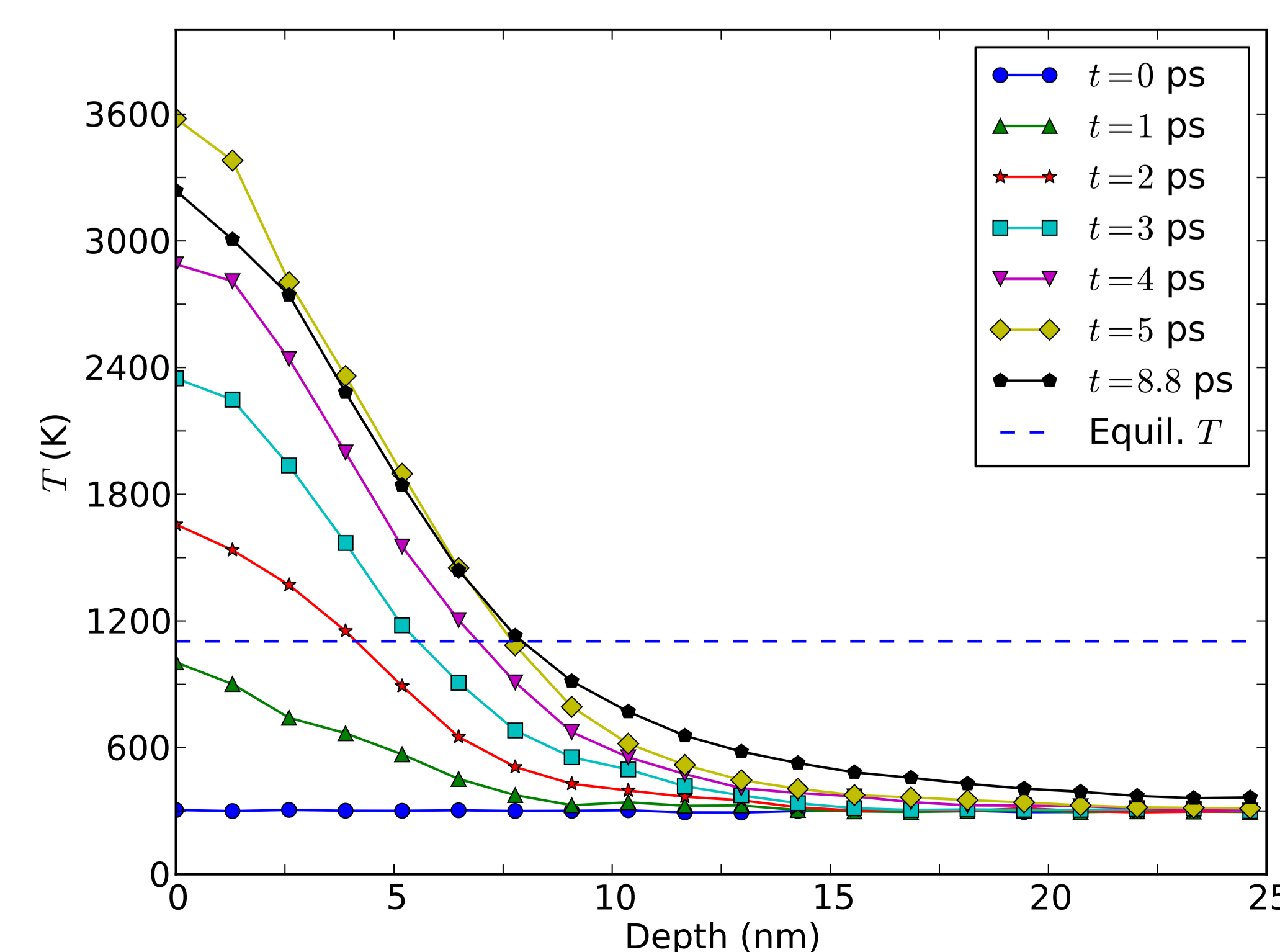


Figura 7: Perfiles de temperatura en función de la profundidad en el material a distintos tiempos.

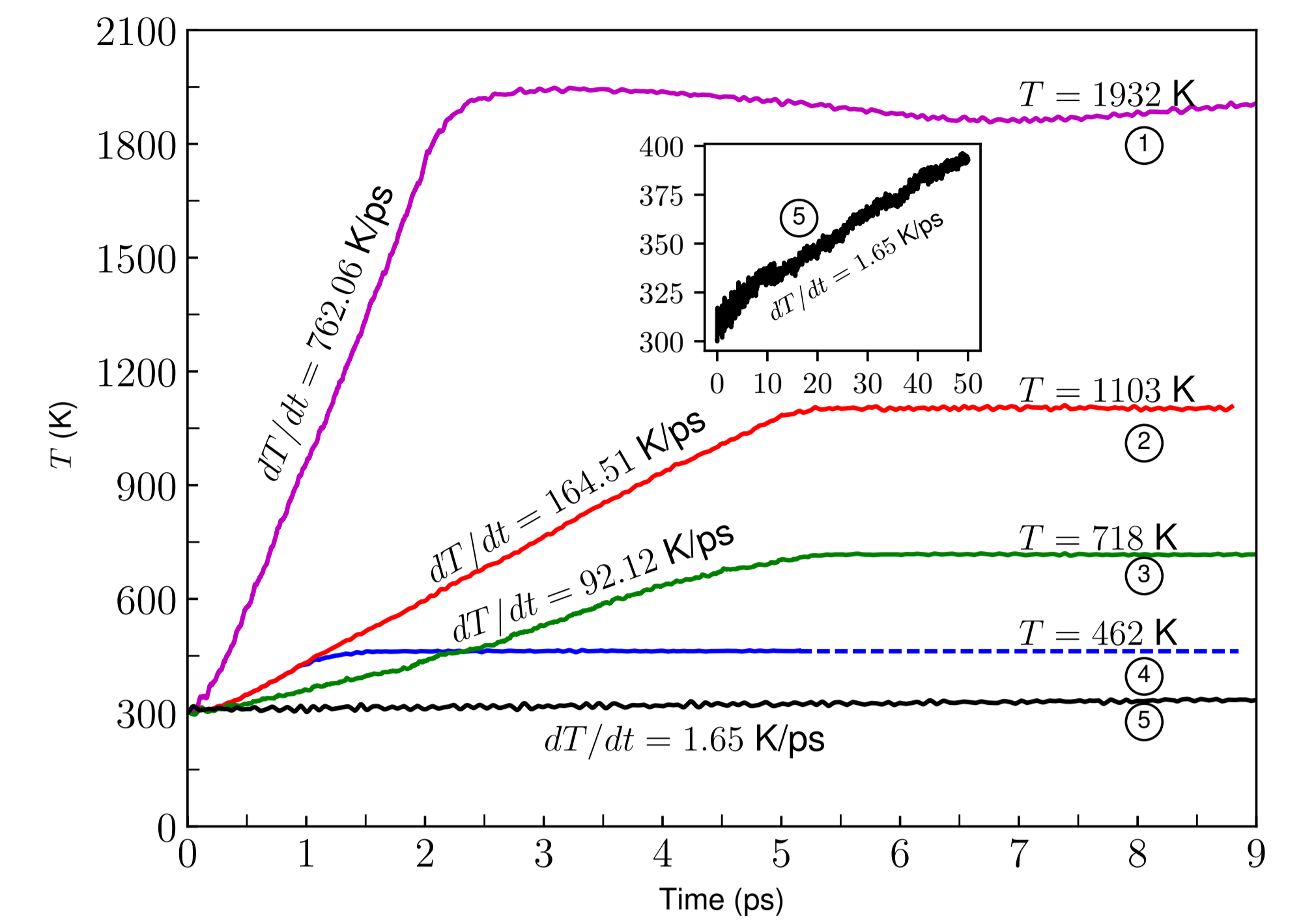


Figura 8: Temperatura en función del tiempo de exposición para diferentes dosis y rangos de energía:

- ①:  $J = 1,67 \times 10^{30} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  (1 keV).
- ②:  $J = 1,67 \times 10^{29} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  (1 keV).
- ③:  $J = 1,67 \times 10^{30} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  (100 eV).
- ④:  $J = 1,67 \times 10^{30} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  (100 eV).
- ⑤:  $J = 1,00 \times 10^{28} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$  (60 eV).

Hemos construido un modelo [3] que permite predecir la fracción de defectos en función del tiempo de exposición,  $t$ , y el flujo de energía por unidad de área por unidad de tiempo,  $Q$ ,

$$\langle x \rangle_{t,Q,\beta} = \frac{Q}{1+Q} (1 - \exp(-t(1+Q))) + x_{eq}(\beta), \quad (2)$$

y encontramos que existe un tiempo de exposición óptimo que permite obtener la máxima fracción de defectos para un factor de daño  $F$  dado, como mostramos en la Figura 9.

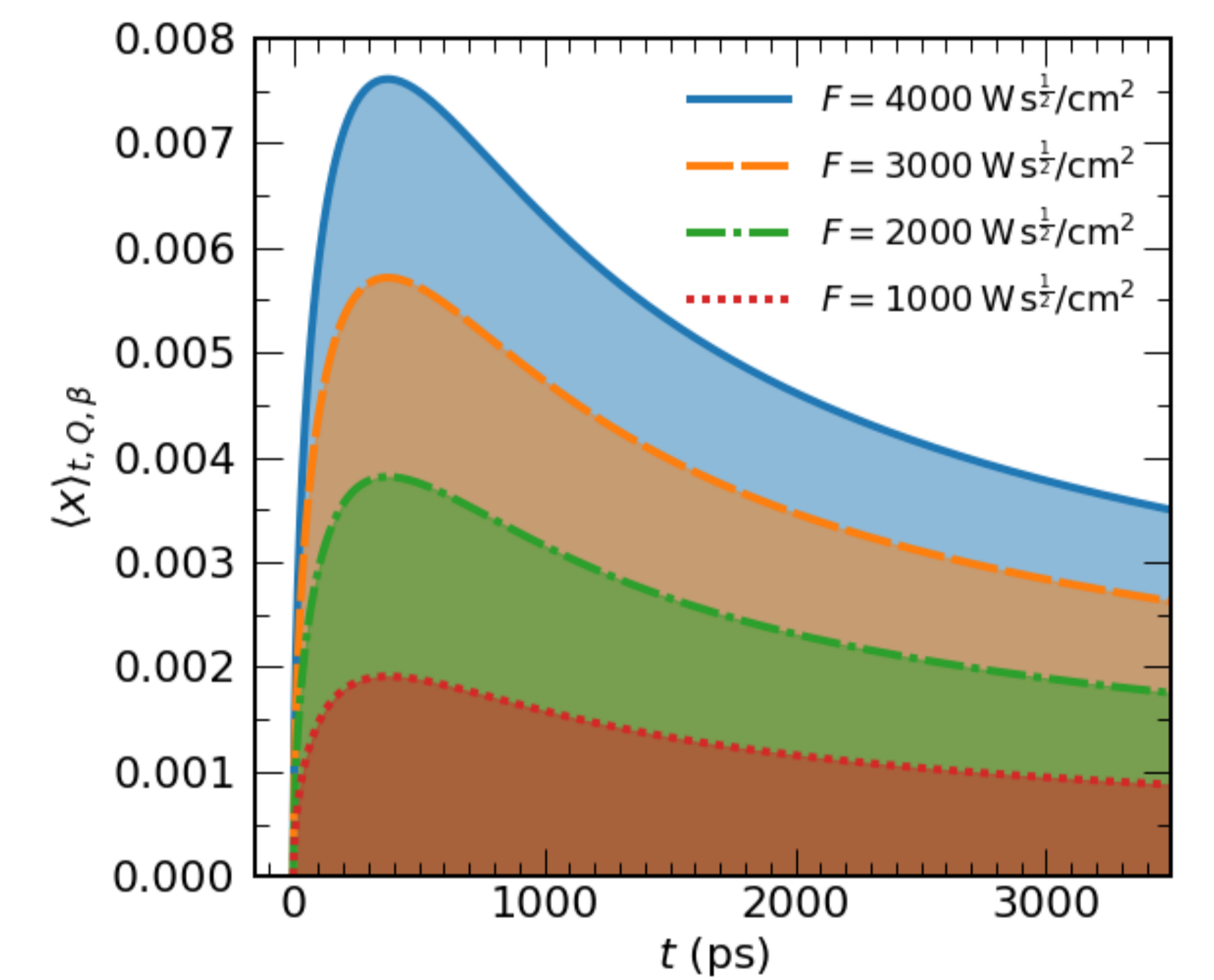


Figura 9: Fracción de defectos en función del tiempo de exposición para distintos factores de daño,  $F$ .

## 4. Conclusiones

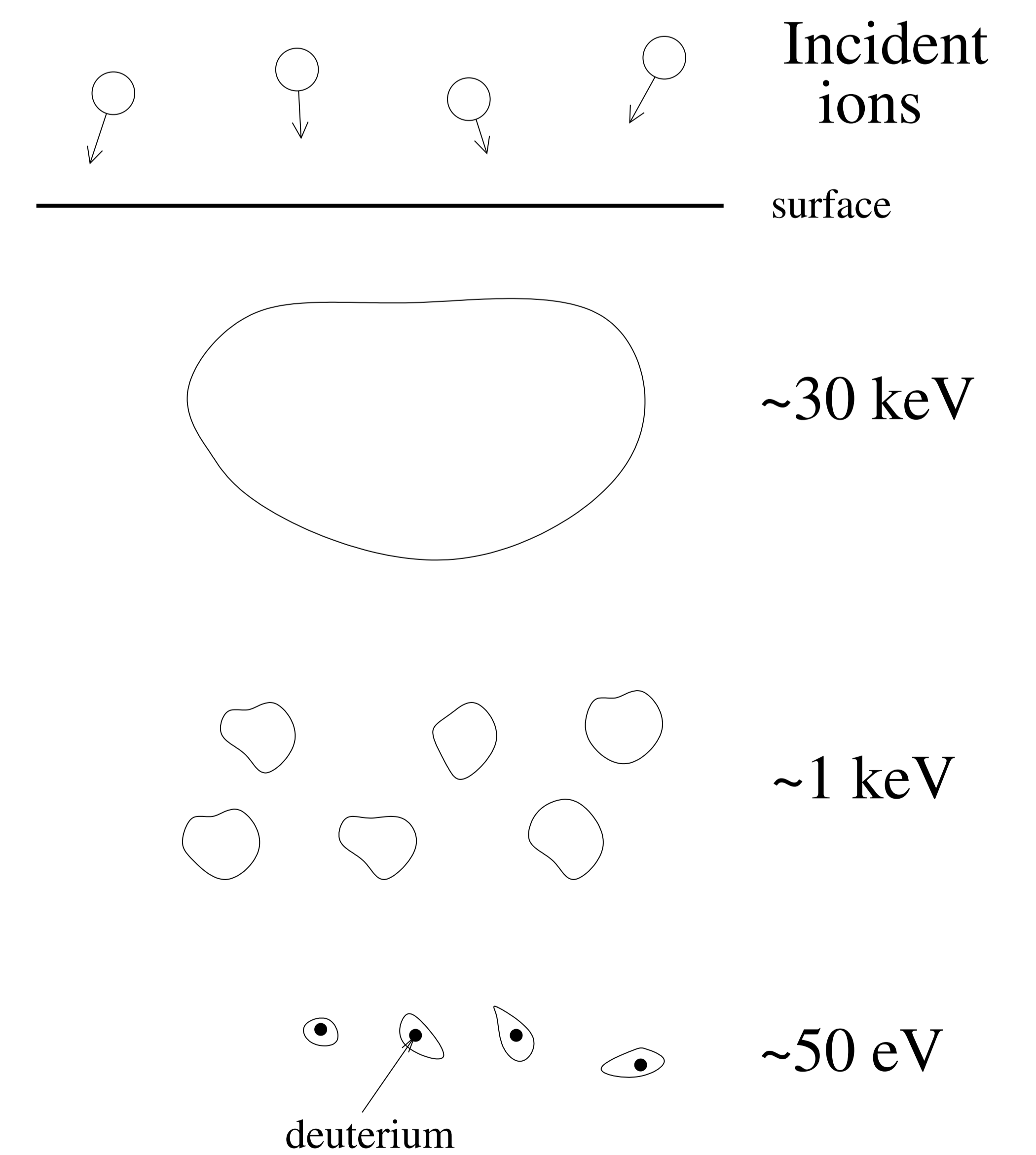


Figura 10: Regimen de daño.

1. Iones de 50 eV quedan implantados como intersticiales, debilitando el material.
2. Iones de 1 keV generan vacancias.
3. Iones de 30 keV logran clusters de vacancias.

## Referencias

- [1] M. J. Inestrosa-Izurietta *et al*, Nuclear Fusion 55, 093011 (2015).
- [2] L. Soto *et al*, Physics of Plasma 21, 122703 (2014).
- [3] S. Davis *et al*, Matter and Radiation at Extremes (accepted, 2020).