



POLITÉCNICA

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES
UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

José Gutiérrez Abascal, 2. 28006 Madrid
Tel.: 91 336 3060
info.industriales@upm.es

www.industriales.upm.es



Vicente Manuel Ledesma Albarrán

05 TRABAJO FIN DE GRADO

INDUSTRIALES

TRABAJO FIN DE GRADO

ESTIMACION DEL ESPECTRO DE NEUTRONES PRODUCIDOS EN UN BLANCO DE FUSIÓN NUCLEAR POR CONFINAMIENTO INERCIAL

SEPTIEMBRE 2021

**Vicente Manuel Ledesma
Albarrán**

DIRECTOR DEL TRABAJO FIN DE GRADO:

Manuel Cotelo Ferreiro



POLITÉCNICA

AGRADECIMIENTOS.

A mi familia, en especial a mis padres y mis hermanas, por haberme ofrecido la oportunidad de estar donde estoy y confiar en mí más que yo mismo. Sin vosotros hubiese sido imposible.

A Manuel, por despertar mi curiosidad en un ámbito que jamás imagine; por su entrega, sin la que indudablemente este trabajo no habría sido factible.

A mis amigos y compañeros, que tanto apoyo me han brindado a lo largo de los años, en los buenos y malos momentos.

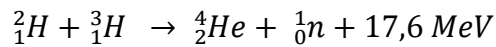
Vicente Ledesma Albarrán

Madrid, septiembre de 2021.

RESUMEN.

En un proceso de fusión nuclear – como es el proceso de fusión por confinamiento inercial (FCI) – se produce una reacción nuclear a modo de colisión en la que varias partículas tras interactuar dan lugar a otro conjunto de partículas en la que, además, la reacción por ser exotérmica genera una ganancia energética asociada a la interacción. Es por ello, por lo que es una técnica de gran interés para la fusión nuclear orientada a la generación de energía eléctrica.

Durante este proyecto se han llevado a cabo los desarrollos y estudios necesarios para estimar del espectro de neutrones producidos en un blanco de fusión por confinamiento inercial. En particular, se estudia el caso de la reacción deuterio – tritio, que produce una partícula α – que no es más que un núcleo de helio – y un neutrón.



Siendo el calor desprendido resultado del defecto másico que se produce en la reacción nuclear.

Cómo en toda colisión o reacción, se deben cumplir las leyes de conservación. Concretamente, las leyes de conservación que deben cumplirse son la de conservación de la energía y la de la cantidad de movimiento. Que responden a las siguientes expresiones:

$$m_D \cdot c^2 + m_T \cdot c^2 + T_D + T_T = m_n \cdot c^2 + m_{He} \cdot c^2 + T_n + T_{He}$$

$$m_D \cdot \vec{v}_D + m_T \cdot \vec{v}_T = m_n \cdot \vec{v}_n + m_{He} \cdot \vec{v}_{He}$$

Con estas ecuaciones – teniendo como datos iniciales los espectros energéticos de deuterio y tritio y las distribuciones angulares de los dos ángulos que particularizan la colisión – se calcula la energía de nacimiento de los neutrones en la fusión por confinamiento inercial y las partículas α , estas últimas de menor interés.

Para resolverla colisión se han utilizado simulaciones de Montecarlo, generando escenarios aleatorios que contemplen todo un espectro de soluciones posibles.

Una vez resuelta la colisión se tiene como resultado el espectro energético de los neutrones de nacimiento, que definen las posibles energías de los neutrones en el momento posterior a la colisión o reacción nuclear. Es decir, el espectro de neutrones que define el instante inicial del proceso que concierne a este proyecto.

Esta colisión se resuelve en un rango de energías que simulan diferentes condiciones iniciales. El estudio se lleva a cabo en el rango de los 5 a los 100 keV, con especial atención a la zona de energías cercana a los 15 keV, debido a su elevada sección eficaz sin comprometer su éxito con grandes pérdidas por Bremsstrahlung. Esto aumenta las probabilidades de éxito de la fusión para la reacción deuterio – tritio.

Una vez se tiene diseñado el instante inicial, se busca estudiar el cómo evolucionan esos neutrones. Tras ese instante inicial los neutrones empiezan a interactuar con partículas presentes en el blanco de fusión por confinamiento inercial como deuterio, tritio, partículas α

o incluso otros neutrones. Esas interacciones llevan a unas pérdidas energéticas que se traducen en la deposición de energía que inicialmente estaba en el neutrón y que se queda en el blanco de fusión por confinamiento inercial.

Se vio que las interacciones de mayor importancia eran las de dispersión elástica, inelástica y la captura neutrónica, siendo la elástica la más común de las tres mencionadas.

Estas interacciones se simulan mediante *Geant4*, que es un código de programación que simula las interacciones neutrón – materia utilizando la metodología de Montecarlo. Es un software de libre distribución y desarrollado por el *Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire (CERN)*.

Para llevar a cabo las simulaciones es necesario diseñar un blanco de fusión por confinamiento inercial. Se diseña un blanco por capas, que consta de 15 capas y, para cada una de ellas, se realizan cálculos de determinadas magnitudes que puedan definir a cada una de ellas de manera inequívoca. Todas las magnitudes que definen cada capa son totalmente necesarias para la concretar la simulación, siendo input de la misma. Las magnitudes calculadas y que definen cada capa son la densidad, la temperatura, el ancho de cada capa, la energía de los neutrones en esa capa y el weight. El weight no representa otra cosa que la probabilidad de nacimiento de un neutrón en una capa concreta. Adicionalmente, también es necesario tener datos acerca de las secciones eficaces, cosa contemplada internamente en *Geant4*.

El código de *Geant4* genera unos archivos de salida que recogen datos sobre las distribuciones energéticas de entrada y salida, inicial y final.

Una vez obtenidos los resultados, se utilizan para hacer comparaciones entre los estados final e inicial. Haciendo uso de las comparaciones se pueden sacar determinadas conclusiones sobre el espectro energético, su evolución a lo largo del blanco y del proceso de fusión. Estas comparaciones llevan a unas conclusiones sobre el scattering de los neutrones. Como era de esperar, se observó down – scattering mayoritariamente, aunque también con más relevancia de lo esperado se observó una zona de up – scattering que principalmente se explica mediante la participación de deuterios supratérmicos. Además, el análisis mostró que sucede un fenómeno de multiplicación neutrónica por el que se pueden encontrar más neutrones en el estado final que en el estado inicial.

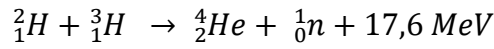
CÓDIGOS UNESCO.

- 220715 Energía nuclear
- 220705 Procesos con colisión
- 220721 Fusión termonuclear
- 332005 Reactores de fusión nuclear
- 120903 Análisis de datos

ABSTRACT.

In a nuclear fusion process – such as the inertial confinement fusion (ICF) process – a nuclear reaction is produced in the form of a collision in which several particles, after interacting, give rise to another set of particles in which, in addition, the reaction, being exothermic, generates an energy gain associated with the interaction. This is why it is a technique of great interest for nuclear fusion aimed at electricity generation.

During this project, the necessary developments and studies have been carried out to estimate the energy spectrum of neutrons produced in a fusion target by inertial confinement. Particularly, the case of deuterium – tritium reaction is researched, this process produces an α – which is a helium, nucleus – and a neutron.



The generated heat is the result of the mass defect in the nuclear reaction.

As in any collision or reaction, conservation laws must be observed. Specially, the conservation laws that must be fulfilled are the energy conservation and conservation of the momentum. Their correspondent expressions are the following ones:

$$m_D \cdot c^2 + m_T \cdot c^2 + T_D + T_T = m_n \cdot c^2 + m_{He} \cdot c^2 + T_n + T_{He}$$

$$m_D \cdot \vec{v}_D + m_T \cdot \vec{v}_T = m_n \cdot \vec{v}_n + m_{He} \cdot \vec{v}_{He}$$

With these equations – having as initial data the energy spectra of deuterium and tritium and the angular distributions of the two angles that particularise the collision – the birth energy of the neutrons in the inertial confinement fusion and the α -particles, the latter of less interest, are calculated.

Monte Carlo simulations have been used to solve the collision, generating random scenarios that consider a whole spectrum of possible solutions.

Once the collision has been solved, the result is the energy spectrum of the birth neutrons, which defines the possible energies of the neutrons at the moment after the collision or nuclear reaction. In other words, the neutron spectrum that defines the initial instant of the process that concerns this project.

This collision is resolved in a range of energies simulating different initial conditions. The study is carried out in the range from 5 to 100 keV, with special importance in the energy range close to 15 keV, due to the combination of a great effective cross section and insignificant loss owe to Bremsstrahlung, which increases the probability of successful fusion for the deuterium-tritium reaction.

Once the initial stage has been designed, the next step is to study how these neutrons evolve. After this initial instant, the neutrons start to interact with particles present in the fusion target by inertial confinement, such as deuterium, tritium, α – particles or even other neutrons. These

interactions lead to energy losses that result in the deposition of energy that was initially in the neutron and remains in the inertial confinement fusion target.

The most important interactions were found to be elastic scattering, inelastic scattering and neutron capture, with elastic scattering being the most common of the three.

These interactions are simulated using *Geant4*, which is a programming code that simulates neutron – matter interactions using Monte Carlo methodology. It is a freely distributed software developed by the *Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire (CERN)*.

To carry out the simulations, it is necessary to design an inertial confinement fusion target. A layered target, consisting of 15 shells, is designed and, for each shell, calculations are performed for certain quantities that can unambiguously define each layer. All the magnitudes that define each layer are absolutely necessary for the simulation to be carried out, being input for the simulation. The magnitudes calculated and defining each layer are the density, the temperature, the width of each layer, the energy of the neutrons in that shell and the weight. The weight represents the probability of a neutron being born in a particular shell. In addition, it is also necessary to have data about the cross-sections, which *Geant4* provides internally.

The *Geant4* code generates output files that collect data on the initial and final input and output energy distributions.

Once the results are obtained, they are used to make comparisons between the initial and final states. Using the comparisons, certain conclusions can be drawn about the energy spectrum, its evolution along the target and the fusion process. These comparisons lead to conclusions about neutron scattering. As expected, down-scattering was observed for the most part, although an up-scattering zone was also observed to a greater extent than expected, which is mainly explained by the participation of suprathermal deuterium. In addition, the analysis showed that a neutron multiplication phenomenon occurs, whereby more neutrons can be found in the final state than in the initial state.

ÍNDICE

| | |
|--|----|
| INTRODUCCIÓN..... | 11 |
| ANTECEDENTES..... | 11 |
| ÁREA DE ESTUDIO..... | 11 |
| MOTIVACIÓN..... | 11 |
| OBJETIVOS..... | 12 |
| ESTRUCTURA..... | 12 |
| 1. CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN A LA FUSIÓN NUCLEAR Y A LA FÍSICA DE PARTÍCULAS..... | 14 |
| 1. EL NÚCLEO ATÓMICO..... | 16 |
| 1.1. ENERGÍA NUCLEAR..... | 18 |
| 2. LA FUSIÓN NUCLEAR..... | 20 |
| 2.1. CONCEPTOS NECESARIOS PARA COMPRENDER LOS FENÓMENOS CUANTICOS..... | 20 |
| 3. FUSIÓN POR CONFINAMIENTO INERCIAL..... | 27 |
| 3.1. ETAPAS DE LA FCI..... | 28 |
| 3.2. ESQUEMAS DE IGNICIÓN..... | 29 |
| 3.3. ESQUEMA DE LA CENTRAL FCI..... | 32 |
| 2. CAPÍTULO 2. MODELO PARA CALCULAR EL ESPECTRO DE NEUTRONES NACIDOS POR FUSIÓN..... | 34 |
| 2.1. ELEMENTOS QUE INTEGRAN LA REACCIÓN..... | 35 |
| 2.1.1. REACTIVOS..... | 35 |
| 2.1.2. PRODUCTOS DE REACCIÓN..... | 36 |
| 2.2. LEYES DE CONSERVACIÓN..... | 38 |
| 2.2.1. CONSERVACIÓN MASA – ENERGÍA..... | 38 |
| 2.2.2. CONSERVACIÓN DE LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO..... | 39 |
| 2.3. OPERATIVA..... | 41 |
| 2.3.1. MÉTODO DE MONTECARLO..... | 41 |
| 2.3.2. ESTADÍSTICA DE MAXWELL – BOLTZMANN..... | 43 |
| 2.3.3. PLANTEAMIENTO DEL CÓDIGO..... | 45 |
| 2.4. APLICACIÓN DE MONTECARLO..... | 48 |
| 2.4.1. GENERACIÓN ENERGÉTICA..... | 48 |
| 2.4.2. GENERACIÓN ANGULAR..... | 49 |
| 2.5. RESOLUCIÓN DE LA COLISIÓN..... | 51 |
| 2.5.1. EJECUCIÓN..... | 52 |

| | | |
|--------|---|-----|
| 2.5.2. | RESULTADOS..... | 53 |
| 3. | CAPÍTULO 3. SIMULACIONES EN <i>GEANT4</i> | 53 |
| 3.1. | FÍSICA DEL <i>GEANT4</i> | 60 |
| 3.2. | INPUT PARAMETERS..... | 63 |
| 3.2.1. | SECCIONES EFICACES..... | 69 |
| 3.2.2. | RECORRIDO LIBRE MEDIO..... | 74 |
| 3.3. | OUTPUT..... | 78 |
| 3.4. | ANÁLISIS DE RESULTADOS..... | 80 |
| 3.4.1. | PARTE CENTRAL..... | 83 |
| 3.4.2. | UP – SCATTERING..... | 84 |
| 3.4.3. | DOWN – SCATTERING..... | 86 |
| 3.4.4. | NEUTRONES..... | 87 |
| 4. | CONCLUSIONES..... | 90 |
| 5. | LÍNEAS FUTURAS..... | 92 |
| 6. | PRESUPUESTO DEL PROYECTO..... | 93 |
| 6.1. | COSTE DIRECTO..... | 93 |
| 6.2. | COSTE TOTAL..... | 94 |
| 7. | PLANIFICACIÓN TEMPORAL DEL PROYECTO..... | 95 |
| | REFERENCIAS..... | 97 |
| | ANEXO I. CÓDIGOS DE PROGRAMACIÓN PYTHON..... | 98 |
| | COLLISION.PY..... | 98 |
| | MAIN_COLLISION_V02.PY..... | 107 |
| | CALCULOS.PY..... | 116 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 1.1. Esquema del modelo estándar. | 15 |
| Figura 1.2. Fuerza nuclear fuerte e interacción electromagnética. | 17 |
| Figura 1.3. Energía de ligadura por nucleón. | 18 |
| Figura 1.4. Tasas de reacción de las principales reacciones de fusión nuclear. | 23 |
| Figura 1.5. Modelo de capas del blanco | 27 |
| Figura 1.6. Analogía de Edward Teller para la fusión por confinamiento inercial. | 28 |
| Figura 1.7. Fases de la fusión por confinamiento inercial (FCI). | 29 |
| Figura 1.8. Perfiles de la densidad de masa(ρ), densidad de área(ρR), temperatura iónica (T_i) no burn), temperatura iónica de quemado (T_i) en función del radio considerando la deposición de partículas α | 30 |
| Figura 1.9. Esquema básico de funcionamiento de una central de fusión por confinamiento inercial (FCI) | 32 |
| Figura 2.1. Esquema de la reacción de fusión nuclear deuterio – tritio para dar lugar a una partícula α y un neutrón con su correspondiente liberación energética. | 34 |
| Figura 2.2. Esquema de funcionamiento interno del sistema Tritium recovery mediante Litio en una central de fusión nuclear por confinamiento inercial. Esquema de funcionamiento del intercambiador de calor | 36 |
| Figura 2.3. Esquema de la colisión deuterio tritio y los ángulos que tanto neutrón como partícula α forman tras la colisión con el sistema de referencia. | 39 |
| Figura 2.4. Función de densidad de probabilidad de la distribución de Maxwell – Boltzmann en función de la velocidad (v) de una partícula | 44 |
| Figura 2.5. Prueba de cálculo de funciones de densidad de probabilidad para la distribución de Maxwell – Boltzmann para diferentes temperaturas | 46 |
| Figura 2.6. Prueba de cálculo de funciones de distribución acumulada para la distribución de Maxwell – Boltzmann para diferentes temperaturas | 46 |
| Figura 2.7. Histograma de la generación energética mediante método de Montecarlo en base a la función de densidad de probabilidad de Maxwell – Boltzmann. Comparación de las simulaciones con la curva teórica. | 48 |
| Figura 2.8. Histograma de la generación angular mediante método de Montecarlo en base a la función de densidad de probabilidad. Comparación de las simulaciones con la curva teórica | 50 |
| Figura 2.9. Pantalla --help para la utilización del script Main_collision..... | 53 |
| Figura 2.10. Espectro de Energía de nacimiento de los neutrones para energías de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35 y 40 keV. Histograma y curva asociada a los valores de la simulación. | 54 |
| Figura 2.11. Espectro de Energía de nacimiento de los neutrones para energías de 40, 45, 50, 60, 70, 80, 90, 100 keV. Histograma y curva asociada a los valores de la simulación. | 55 |
| Figura 3.1. Esquema conceptual de un blanco por capas para fusión por confinamiento inercial. | 63 |
| Figura 3.2. Perfiles de la densidad de masa(ρ), densidad de área (ρR), temperatura iónica (T_i) no burn), temperatura iónica de quemado (T_i) en función del radio considerando la deposición de partículas α | 64 |
| Figura 3.3. Perfil de densidad ρ (g/cm^3) del blanco en función del radio (μm) a utilizar en las simulaciones. | 65 |
| Figura 3.4. Perfil de temperatura iónica de quemado (T_i) en función del radio a utilizar en las simulaciones. | 66 |
| Figura 3.5. Cálculo de las secciones eficaces asociadas a los neutrones en función de la energía incidente para las capas 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 y 8. | 71 |

| | |
|--|----|
| Figura 3.6. Cálculo de las secciones eficaces asociadas a los neutrones en función de la energía incidente para las capas 9, 10, 11, 12, 13, 14 y 15. | 72 |
| Figura 3.7. Cálculo de las secciones eficaces asociadas a los neutrones en función de la energía incidente para la capa 7. | 73 |
| Figura 3.8. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión elástica entre la capa 1 y la 15 en función de la energía del neutrón. | 74 |
| Figura 3.9. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión inelástica entre la capa 1 y la 15 en función de la energía incidente del neutrón. | 75 |
| Figura 3.10. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión inelástica entre la capa 1, 6, 9 y 15 en función de la energía del neutrón. | 76 |
| Figura 3.11. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión inelástica entre la capa 1 y la 15 en función de la energía del neutrón. | 77 |
| Figura 3.12. Ejemplo de uno de los archivos txt tipo que <i>Geant4</i> devuelve tras llevar a cabo las simulaciones. | 79 |
| Figura 3.13. Función de densidad de probabilidad de los neutrones en el momento justamente posterior a su nacimiento tras la colisión deuterio tritio. | 80 |
| Figura 3.14. Función de densidad de probabilidad de los neutrones en el momento justamente posterior a su salida del blanco de fusión por confinamiento inercial. | 80 |
| Figura 3.15. Comparación de las funciones de densidad de probabilidad de los neutrones entre el nacimiento y salida del blanco de fusión por confinamiento inercial. | 81 |
| Figura 3.16. Comparación de las funciones de densidad de probabilidad de los neutrones entre el nacimiento y salida del blanco de fusión por confinamiento inercial en escala logarítmica para la función de densidad de probabilidad. Malla energética hasta 40 MeV. | 81 |
| Figura 3.17. Comparación de las funciones de densidad de probabilidad de los neutrones entre el nacimiento y salida del blanco de fusión por confinamiento inercial en escala logarítmica para la función de densidad de probabilidad. Malla energética hasta 16 MeV. | 82 |
| Figura 3.18. Diferencia entre las funciones de densidad de probabilidad inicial y final. | 83 |
| Figura 3.19. Análisis de los procesos de down – scattering en un proceso de fusión nuclear por confinamiento inercial. | 87 |

ÍNDICE DE TABLAS.

| | |
|--|----|
| Tabla 1. Resumen de los valores más importantes asociados a la simulación del espectro energético de nacimiento de los neutrones | 56 |
| Tabla 2. Tasa de multiplicación neutrónica y porcentaje de neutrones multiplicados durante la simulación de interacción de los neutrones en el blanco de fusión por confinamiento inercial. | 88 |
| Tabla 3. Coste directo del proyecto | 93 |
| Tabla 4. Coste total del proyecto. | 94 |
| Tabla 5. Planificación temporal del proyecto. | 95 |
| Tabla 6. Diagrama de Gantt | 96 |

INTRODUCCIÓN.

El presente Trabajo Fin de grado está enfocado en el ámbito de la investigación y desarrollo de la fusión nuclear, en particular la fusión nuclear por confinamiento inercial. A lo largo del todo el trabajo se llevan a cabo los desarrollos necesarios para estimar el espectro de neutrones producidos en el un proceso de fusión nuclear por confinamiento inercial y las simulaciones que dan lugar a resultados que posteriormente se analizan en busca de conclusiones.

El proyecto comienza diseñando el escenario en el que los neutrones nacen tras la colisión deuterio – tritio. A partir de ahí, se simulan las interacciones que los neutrones experimentan a su paso por el blanco hasta que llegan a los confines del mismo y la deposición energética asociada a los distintos procesos.

ANTECEDENTES.

El presente Trabajo de Fin de Grado se ha llevado a cabo en colaboración con el Instituto de Fusión Nuclear Guillermo Velarde (IFN), perteneciente al Departamento de Ingeniería Energética de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (DIE/ETSII) de la Universidad Politécnica de Madrid. Está basado en una idea original desarrollada por el profesor Manuel Cotelo Ferreiro.

El desarrollo del presente trabajo de investigación ha sido, en parte, posible gracias al código *GEANT4* desarrollado por el *Conseil Européen pour la Recherche Nucléaire (CERN)* para estudiar las interacciones neutrón – materia.

ÁREA DE ESTUDIO.

El estudio está enmarcado en el ámbito de la física de partículas y física nuclear, que son áreas de la física moderna surgidas durante el siglo XX.

Dentro de la física nuclear – que es aquella que estudia la estructura fundamental de la materia y las interacciones entre partículas subatómicas – el trabajo se ubica en el ámbito de la ingeniería nuclear y energética. El trabajo investiga en el campo de la energía de fusión nuclear, haciendo hincapié en la fusión por confinamiento inercial (FCI), que es uno de los dos planteamientos tecnológicos existentes para conseguir dicho objetivo. Se estudiará el caso concreto en el que el deuterio y tritio forman el combustible nuclear.

MOTIVACIÓN.

El porqué de este trabajo surge de la fascinación de uno mismo por la disciplina nuclear, disciplina que, por otra parte, nunca pensó que pudiera llegar a interesarle hasta que tuvo

contacto con el departamento de energía nuclear de la esta escuela. La convicción de la necesidad de la consecución de la fusión nuclear como fuente de energía estable impulsa este trabajo. Esta creencia en la necesidad de la fusión se centra en aspectos tales como la exigencia energética, hacia la que caminamos como sociedades cada vez más embebidas en un mundo que precisa de la energía eléctrica para todo.

Además, el hecho de realizar un aporte, por minúsculo que pueda ser, para contribuir al desarrollo de una energía libre de emisiones supone un aliciente añadido.

Con este Trabajo de Fin de Grado se pretende aportar la gota de agua, de uno mismo, al mar que se necesitará llenar para conseguir el objetivo de la fusión nuclear.

OBJETIVOS.

El objetivo que se persigue con la realización de este Trabajo de Fin de Grado es doble

Por una parte, se puede hablar de objetivos docentes personales que se persiguen. Dentro de estos objetivos tenemos principalmente el objetivo de profundizar en el campo de la fusión nuclear por confinamiento inercial, acrecentar el conocimiento acerca de la interacción entre partículas y el estudio del espectro energético. Sin embargo, no es el único objetivo de este trabajo, este objetivo principal se encuentra complementado con el objetivo de adentrarse en la programación en Python, código para el que previo a la realización de este Trabajo de Fin de Grado no se tenían nociones. El interés de aprender este código de programación ha sido también pieza fundamental a la hora de tomar la decisión de llevarlo a cabo.

Por otra parte, podemos hablar de los objetivos materiales que persigue el proyecto con su realización. El objetivo básico de la realización de este Trabajo Fin de Grado es el de la consecución del desarrollo y estudio de una distribución realista del espectro de neutrones producidos en un blanco de fusión por confinamiento inercial. En otras palabras, el objetivo es ver como varía el espectro de neutrones desde que nacen tras la reacción deuterio tritio hasta que escapan del blanco. El otro objetivo principal es el de estudiar la interacción de esos neutrones dentro del blanco y cuantificar su pérdida energética.

Visto desde otro ángulo, se busca estudiar como interaccionan los neutrones que nacen de la reacción deuterio – tritio hasta que llegan a los confines del blanco. Se tratará de dar explicación a las pérdidas energéticas que se producen en su trayecto por el blanco, así como de la energía con la que estos llegan a las zonas mencionadas.

ESTRUCTURA.

El presente proyecto se encuentra dividido en tres capítulos

Durante el primero se desarrolla una introducción a la física nuclear, se explican diferentes conceptos básicos y necesarios. En él se hace hincapié especialmente en determinados conceptos que se consideran de vital importancia para poder entender y llevar a cabo posteriores análisis.

Durante el segundo se desarrolla un modelo para calcular el espectro de neutrones nacidos por fusión. Se particulariza este desarrollo para la colisión deuterio – tritio, reacción de mayor importancia y expectativas en el campo de la fusión nuclear. Con este modelo se generarán diferentes espectros dependientes de energía iniciales ambientes que posteriormente serán necesarios para llevar a cabo las simulaciones.

Durante este capítulo se realizan las simulaciones, para ello se detallarán los procedimientos necesarios para calcular determinadas variables que *Geant4* necesita para su correcta ejecución. Una vez que la simulación se ha materializado se pasa a llevar a cabo una serie de análisis de los resultados que *Geant4* arroja.

A continuación, se dibujan diferentes conclusiones acerca de los resultados de las simulaciones realizadas durante el tercer capítulo y se describen las líneas futuras que el proyecto deberá recorrer en sus próximos años de vida.

Por último, se añaden tanto la planificación temporal del proyecto como el presupuesto necesario para su ejecución.

1. CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN A LA FUSIÓN NUCLEAR Y A LA FÍSICA DE PARTÍCULAS.

La física nuclear es la disciplina de la física que estudia los constituyentes del núcleo atómico y sus interacciones. El origen del concepto del atomismo tiene origen en la antigua Grecia, con Demócrito y su doctrina del atomismo, que ya versaba sobre unas unidades “indivisibles” que formaban la materia, a las que llamarían átomos. Sin embargo, no es hasta el siglo XIX cuando se empiezan a desarrollar las primeras ideas orientadas a explicar la composición de los átomos, que surgen para explicar algunos de los resultados de los experimentos químicos, algunos de estos pioneros fueron John Dalton y Amadeo Avogadro. Al mismo tiempo, James Clerk Maxwell y Ludwig Boltzmann entre otros, basándose en esta misma idea, formulan las primeras teorías que sientan las bases de la termodinámica y mecánica estadística, para ello estudian a los átomos como partículas reales que pueden sufrir colisiones como bolas de billar. Es realmente en el año 1896, con el descubrimiento de la radiactividad natural por parte de Henry Becquerel, cuando se da el pistoletazo de salida en el desarrollo de la física nuclear. Un año después, en 1897, Sir Joseph John Thomson descubre el electrón y formula el primer modelo atómico, que inauguraría una disciplina que durante el siglo XX sufriría múltiples modificaciones con paralelismo al aumento de conocimiento sobre la estructura atómica. Un hecho importante acerca de Thomson y su primer modelo atómico, es que, por primera vez, el átomo dejaba de ser indivisible como se había pensado hasta entonces. Después del modelo atómico de Thomson, y a tenor del aumento del conocimiento de la física nuclear se fueron desarrollando otros modelos atómicos que superaban las limitaciones del anterior, explicando nuevos fenómenos. Los nombres más importantes en este sentido durante el siglo XX fueron algunos como: Rutherford, Bohr, Lewis, Sommerfeld, Chadwick, Heisenberg, Schrödinger hasta el modelo de Dirac Jordan. [7]

La culminación de esta etapa histórica de desarrollo científico fue el desarrollo del modelo estándar y las partículas elementales. El modelo estándar, aunque a día de hoy incompleto, consigue explicar con éxito las interacciones electromagnéticas, nuclear débil y nuclear fuerte. Este modelo, además, clasifica las partículas subatómicas conocidas de la siguiente forma.

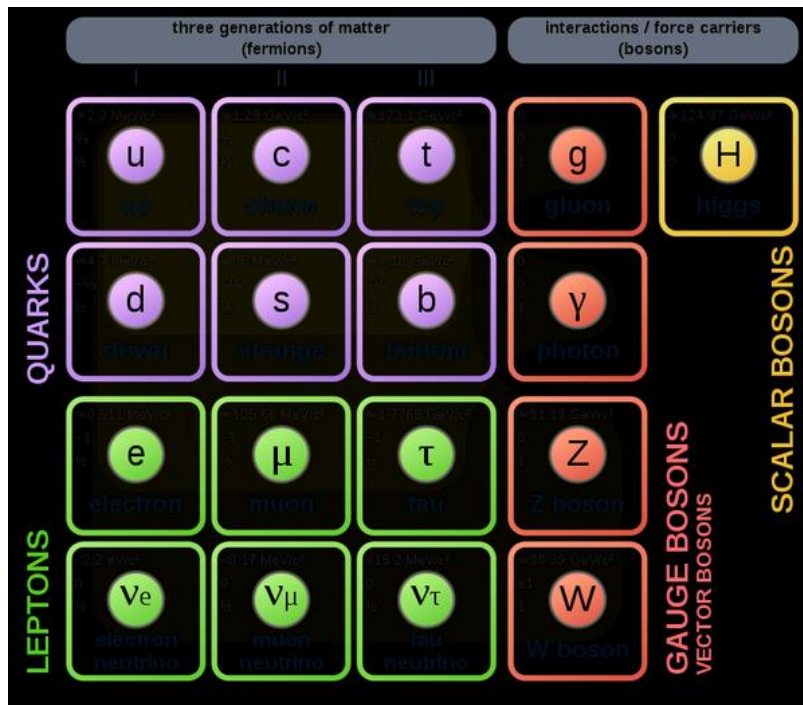


Figura 1.1. Esquema del modelo estándar.

Según este modelo podemos dividir la materia en dos tipos básicos de partículas elementales, fermiones y bosones. Los fermiones son de espín semientero $-\pm\frac{1}{2} \forall n = 1, 2, 3, \dots$ – y se caracterizan porque dos partículas idénticas no pueden ocupar el mismo estado, sometidas al principio de exclusión de Pauli. Los fermiones siguen la estadística de Fermi-Dirac y describen funciones de onda asimétricas. Son generalmente partículas masivas, las responsables de generar la densidad de materia ordinaria que conocemos. Ejemplos inmediatos de fermiones son el protón, el electrón y el neutrón. Los fermiones se dividen en un grupo de seis quarks (up, down, charm, strange, top, bottom) y seis leptones (electrón, muón, tauón, neutrino del electrón, neutrino del muón, neutrino del tauón). Además, solo los fermiones se comportan como antipartículas.

Por otro lado, se tienen los bosones. Los bosones son de espín entero y no se encuentran condicionados por el principio de exclusión de Pauli. Siguen la estadística de Bose – Einstein y describen funciones de ondas simétricas. Son partículas no masivas y su intercambio es el responsable de la interacción entre fermiones explicando las interacciones fundamentales. Se dividen en bosones gauge: ocho gluones (interacción fuerte), W^+ , W^- , Z (interacción débil) y el fotón (interacción electromagnética). Finalmente, el bosón de Higgs, que confiere masa a las anteriores partículas exceptuando a los gluones y al fotón.

Una vez definidas las partículas elementales se puede hablar de partículas compuestas, que son aquellas partículas elementales que agrupadas forman un estado ligado estable. Los bariones son un tipo de partícula compuesta, entre otras, que están formadas por tres fermiones. Se resalta la importancia de los bariones, entre otros, pues ellos así definidos engloban a los neutrones y protones; que juntos constituyen el núcleo atómico. El protón está formado por dos quarks up y un quark down y el neutrón está formado por un quark up y dos quarks down.

1.1. EL NÚCLEO ATÓMICO

El núcleo atómico, como parte del átomo, está formado por los protones y neutrones, más comúnmente conocidos conjuntamente como nucleones. Es importante destacar que el núcleo no es un todo estático, en lugar de eso, el modelo nuclear de capas define completamente el espectro energético de protones y neutrones imitando la operativa del modelo de capas electrónico. Es por ello, por lo que el núcleo es dinámico y sufre constantes cambios de estado entre capas.

Numerosos experimentos hasta la fecha han puesto de manifiesto que el tamaño del núcleo tiene dimensiones del orden de diámetros entre 10^{-15} y 10^{-14} m. Si se pone el foco sobre el átomo completo se puede observar que el diámetro del átomo del orden de 10^{-10} m. Estos datos ponen de manifiesto el diminuto porcentaje, en términos de volumen, que representa el núcleo dentro del contexto átomo. Sin embargo, lejos de ser poco importante o despreciable, el núcleo representa prácticamente la totalidad de masa del átomo; este es un hecho que fue demostrado mediante los experimentos de dispersión a principios del siglo XX.

Antes del nacimiento de la física nuclear, los tipos de fuerzas conocidos por el que dos cuerpos separados una distancia dada podían interactuar eran la fuerza gravitacional y la fuerza electromagnética. Estas fuerzas tienen en común que su intensidad varía con la inversa del cuadrado de la distancia, esto implica que estas fuerzas son capaces de afectar a grandes distancias. Como es conocido, la fuerza gravitacional es la responsable de la atracción entre cuerpos en función de su masa; la fuerza electromagnética es la que se responsabiliza de la atracción, o repulsión, que explica la interacción entre cargas.

Sin embargo, las propiedades de los núcleos no se pueden explicar en base a estas fuerzas. El núcleo atómico está formado por protones y neutrones, si intentásemos explicar la cohesión del núcleo mediante estas dos fuerzas conocidas resultaría que la fuerza electromagnética entre protones generaría a repulsión e imposibilitaría la cohesión del núcleo. Es en este punto, dónde nace la interacción fuerte o fuerza nuclear fuerte con el objetivo de justificar la cohesión del núcleo.

Como se comentó anteriormente, los nucleones que constituyen el núcleo son bariones. El protón lo forman dos quarks up y uno down; el neutrón está formado por dos quarks down y uno up. Los bosones encargados de mantener la cohesión fuerte son los gluones – del inglés glue, pegamento – partículas de masa nula y espín unidad.

La interacción fuerte es la responsable de la cohesión del núcleo ejerciendo una atracción muy intensa entre los nucleones. Esta fuerza fuerte es realmente la que compensa las repulsiones coulombianas de los protones del núcleo. Solo se ejercen a distancias muy cortas, del orden de femtometros¹. A estas distancias, la fuerza nuclear fuerte entre dos protones es del orden de 50 veces más intensa que la repulsión coulombiana. A distancias de 4 femtometros las fuerzas

¹ 1 femtómetro (fm) equivale a 10^{-15} m

fuerte y coulombiana se igualan; al llegar a 25 fm, a causa de su corto alcance, la fuerza fuerte es del orden de 10^6 veces menor que la coulombiana y por tanto despreciable. [7]

Por lo tanto, a modo de resumen se puede afirmar que la fuerza fuerte:

- Solo se manifiesta en el interior del núcleo, siendo su alcance del orden de fermi.
- Es la más intensa de todas las fuerzas conocidas.
- Es de carácter atractivo.

Como se observa, por contraposición, la fuerza nuclear fuerte tiene un rango de acción muy reducido, esto implica que solo actúa entre partículas que únicamente se encuentran muy cerca. En cambio, la fuerza electromagnética a pesar de tener una intensidad menor tiene un rango de acción mayor, esto significa que entre partículas que se encuentran a una distancia mayor de 25 femtómetros la fuerza que gobierna la interacción entre ellas es principalmente la electromagnética. Es en este juego de intensidad de campo y rango de acción en el que se mueve la física nuclear, el que evita que la fusión sea un proceso común, pero lo hace excelente en su particularismo.

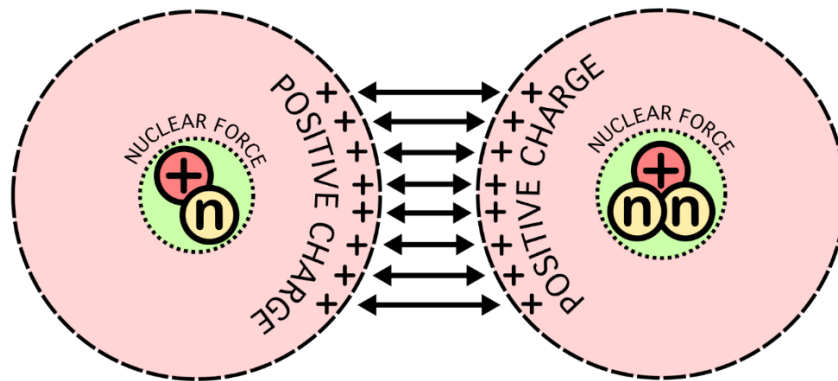


Figura 1.2. Fuerza nuclear fuerte e interacción electromagnética.

1.1.2. ENERGÍA NUCLEAR.

La energía nuclear o atómica es la energía que se libera espontánea o artificialmente producto de las reacciones nucleares. Este término engloba otro significado, que es el de aprovechamiento de dicha energía para otros fines tales como la obtención de energía eléctrica, térmica y mecánica a partir de reacciones atómicas. Así, es común referirse a la energía nuclear no solo como el resultado de una reacción, sino como un concepto más amplio que incluye los conocimientos y técnicas que permiten la utilización de esta energía por parte del ser humano.

Dentro de la propia energía nuclear se diferencian dos posibilidades:

- Fisión. Consiste en la división del núcleo atómico en dos núcleos más ligeros además de otros subproductos como neutrones libres, fotones o partículas alfa entre otros. Hoy en día es el proceso que se materializa en las centrales nucleares para la obtención de energía.
- Fusión. Consiste en la unión de dos núcleos que liberan energía para formar un núcleo más grande, generalmente liberando partículas. Este preciso proceso es el que permite a las estrellas liberar energía.

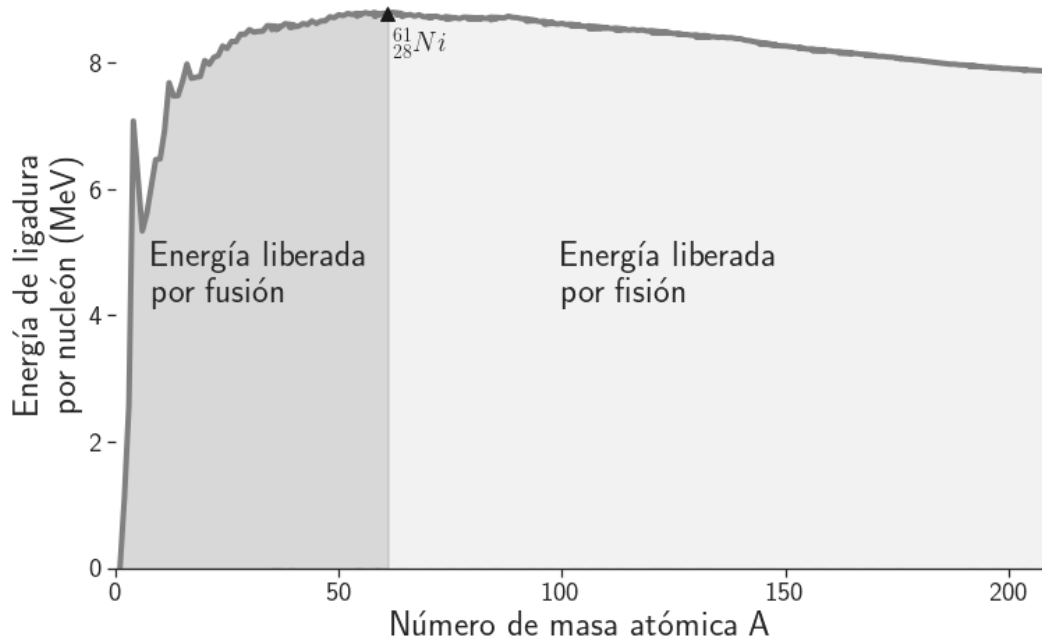


Figura 1.3. Energía de ligadura por nucleón.

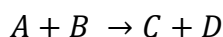
Cabe preguntarse cómo puede ser que dos procesos, aparentemente inversos, son capaces de liberar energía. Para dar respuesta a esta pregunta se debe introducir el concepto de energía de ligadura por nucleón, $E_n = \frac{E_b}{A}$.

Por definición, la energía de ligadura es la energía que se libera cuando los nucleones constituyentes del núcleo se unen, desde el infinito, para formar el núcleo o, también, la energía necesaria para romper el núcleo totalmente. Por tanto, la curva de energía de enlace por nucleón se obtiene dividiendo la energía de enlace nuclear global entre el número de nucleones, A , que conforman el núcleo. En la Figura 1.3 se puede ver que existe un máximo en la región de estabilidad en el Níquel. Este pico de estabilidad diferencia dos regiones, una que caracteriza la zona de la curva que libera energía por fusión y otra que libera energía por fisión. La zona a la derecha del pico de estabilidad libera energía por procesos de fisión nuclear, mientras que los elementos situados en la zona izquierda liberan energía al fusionarse entre ellos. Así por ejemplo la fusión de elementos más pesados que el hierro requiere energía, en lugar de liberarla, este tipo de reacción es el que se conoce como reacción endotérmica.

Pero, como se explica el proceso de liberación de energía a ambos lados del pico de estabilidad por procesos que, en primera instancia, parecen inversos. Para estudiar este fenómeno se acude al concepto del defecto másico. En toda reacción nuclear que libera energía – exotérmica – tenemos que fracción de la masa se pierde entre el sistema inicial, previo a la reacción, y el sistema final, posterior a la reacción. Esta cantidad de masa que desaparece se transforma en energía siguiendo una de las ecuaciones más famosas en la historia de la ciencia:

$$E = m \cdot c^2$$

Planteando un sistema productos – reactivos se puede hallar la energía desprendida, o requerida, en una reacción nuclear. De manera ilustrativa, se estudia la siguiente reacción:



Para calcular el defecto másico productos – reactivos de esta manera

$$E_i = (m_A + m_B) \cdot c^2$$

$$E_f = (m_C + m_D) \cdot c^2$$

Estableciendo el balance energía final, E_f , y energía inicial, E_i , calculamos la energía desprendida en la reacción, Q , estableciendo el balance de energía

$$Q = E_i - E_f$$

O lo que es lo mismo

$$Q = (\Delta m) \cdot c^2$$

Para poner en contexto la magnitud de esta energía, las energías de enlace de los nucleones están en el rango de millones de electrón – voltios, en comparación con decenas eV de los electrones atómicos. Mientras una transición atómica podría emitir un fotón, con un rango de unos pocos electrones voltios posiblemente en la región de luz visible, las transiciones nucleares pueden emitir rayos gamma, con energías cuánticas en el rango MeV.

1.2. LA FUSIÓN NUCLEAR.

De manera general, reacción de fusión nuclear es toda aquella reacción en la que intervienen uno núcleos dando lugar a un núcleo de número másico mayor que cualquiera de los iniciales.

La mayor dificultad técnica en el proceso de fusión es conseguir que los núcleos se acerquen lo suficiente como para que la fuerza nuclear fuerte interaccione y pueda ocurrir este fenómeno.

Como se verá posteriormente, para conseguir una reacción de fusión eficiente, será necesario confinar el combustible durante un determinado tiempo. Para conseguir el correcto confinamiento, a nivel tecnológico, existen dos estrategias principales

- Fusión por confinamiento inercial (FCI). Confinar el combustible mediante la presión que ejerce la radiación proyectada por un conjunto de láseres.
- Fusión por confinamiento magnético (FCM). Haciendo uso de campos magnéticos se es capaz de mantener al plasma confinado durante un tiempo determinado.

La investigación y desarrollo que se lleva a cabo en el presente Trabajo de Fin de Grado está orientada a la FCI.

1.2.1. CONCEPTOS NECESARIOS PARA COMPRENDER LOS FENÓMENOS CUANTICOS.

Para poder comprender el proceso de fusión en mayor profundidad se necesita de ciertos conceptos considerados básicos relacionados con la mecánica cuántica en base a la interpretación de Copenhague y su principio de complementariedad, propuesto por Niels Bohr.

En mecánica cuántica hay una forma muy particular de describir el estado físico de un sistema, es mediante la denominada función de onda $\Psi(q,t)$, siendo q las coordenadas generalizadas del sistema y t la variable temporal. La función de onda cobra de más utilidad si elevamos su módulo al cuadrado, $|\Psi(q,t)|^2$, el cual representa la densidad de probabilidad de las variables q en un instante t . [7]

De manera concreta, si reducimos las anteriores variables a posición ($q = r$) y tiempo, entonces $|\Psi(r,t)|^2$ es la densidad de probabilidad por unidad de volumen de encontrar la partícula en un punto e instante concretos.

1.2.2. EFECTO TÚNEL.

El principio de complementariedad de Niels Bohr implica que, tanto la visión corpuscular de la materia como la visión ondulatoria son necesarias para entender y explicar la visión cuántica. De la naturaleza ondulatoria de la materia surgen diversas consecuencias, una de ellas es el efecto túnel, que se amplía a continuación.

Se tiene un pozo de potencial finito V_0 en un intervalo de longitud L . Según la física clásica, si la energía que caracteriza a la partícula E es inferior a V_0 la partícula nunca podrá salir de dicha región ya que si $E = V + E_c$, siendo E_c la energía cinética de la partícula, implicaría, de manera directa, que E_c tendría que ser negativa, lo cual es imposible.

En cambio, según la física cuántica existe una cierta probabilidad de encontrar a esta partícula fuera de los límites establecidos por el pozo de potencial. Dicho de otra forma, la partícula confinada en el pozo de potencial puede atravesar los límites de pozo – no infinitos – dando lugar a una probabilidad de que la partícula escape del pozo atravesando la barrera sin el aporte de energía adicional que la física clásica exige para superarla. Este fenómeno adquiere gran importancia en los procesos de fusión nuclear.

Para que se dé la fusión nuclear, las partículas implicadas deben superar la repulsión eléctrica, que denominaremos barrera coulombiana, con el fin de acercarse lo suficiente como para que la fuerza nuclear fuerte permita fusionarse a las partículas. En este punto es donde el efecto túnel cobra importancia, ya que en su ausencia serían necesarias temperaturas extremadamente altas para poder superar la barrera coulombiana. Es por ello, que debido al efecto túnel, algunas partículas pueden superar esta barrera a pesar de tener una temperatura más baja que la que normalmente requerirían, compatibilizando este proceso con las presiones alcanzables en laboratorio.

1.2.3. SECCIÓN EFICAZ.

Otro concepto que conviene ilustrar antes de entrar en materia más avanzada es el de sección eficaz. La sección eficaz es un concepto que representa la probabilidad de que una reacción nuclear particular ocurra, su unidad en el sistema internacional es el barn² y se representa mediante el símbolo σ . Visto de otro modo es la sección efectiva que opone un núcleo blanco a las partículas incidentes para producir una reacción determinada. Un mismo núcleo tendrá distintas secciones eficaces para distintos tipos de reacción o energías de las partículas incidentes. La sección eficaz depende de tres factores:

- Energía de la partícula incidente.
- Tipo de núcleo blanco.
- Tipo de reacción.

1.2.4. TASA DE REACCIÓN.

Muy relacionado con la idea de sección eficaz nace el concepto de tasa de reacción. La tasa de reacción nuclear se define como el número de colisiones o reacciones de fusión por unidad de

² 1 barn = 10^{-24} cm²

volumen y por unidad de tiempo. El cálculo de potencia de fusión producida por unidad de volumen y tiempo es inmediato una vez calculado el valor de la tasa de reacción. La expresión de la que se puede deducir la tasa de reacción es la siguiente

$$R = n_1 \cdot n_2 \cdot \sigma \cdot v$$

Siendo:

- R la tasa de reacción en $\frac{1}{cm^3 \cdot s}$
- n_1 la densidad de partículas incidentes en $\frac{1}{cm^3}$
- n_2 la densidad de partículas en el blanco en $\frac{1}{cm^3}$
- σ la sección eficaz de reacción de fusión en cm^2
- v la velocidad relativa de las partículas en $\frac{cm}{s}$

La expresión anterior es correcta, pero tiene el inconveniente de ser solo válida para una velocidad conocida y constante de las partículas reaccionantes, algo que no es cierto ni sencillo para toda reacción nuclear. La realidad es que las partículas blanco no siempre están inmóviles ni las partículas proyectil tienen idéntica velocidad entre ellas. Para superar esta limitación se define el concepto parámetro de tasa de reacción, $\langle \sigma v \rangle$, que realmente representa el promedio calculado con una función de distribución dada de las velocidades relativas de las partículas interactuantes. De esta forma la tasa de reacción generalizada se puede expresar como:

$$R = n_1 \cdot n_2 \cdot \langle \sigma v \rangle$$

Las expresiones que dan forma a $\langle \sigma v \rangle$, son del tipo:

$$\langle \sigma v \rangle = a \cdot T^{-\frac{2}{3}} \cdot e^{-\frac{b}{T^{\frac{1}{3}}}}$$

En la Figura 1.4 se representan las tasas de reacción para las principales reacciones que hoy se contemplan en el ámbito de la fusión nuclear.

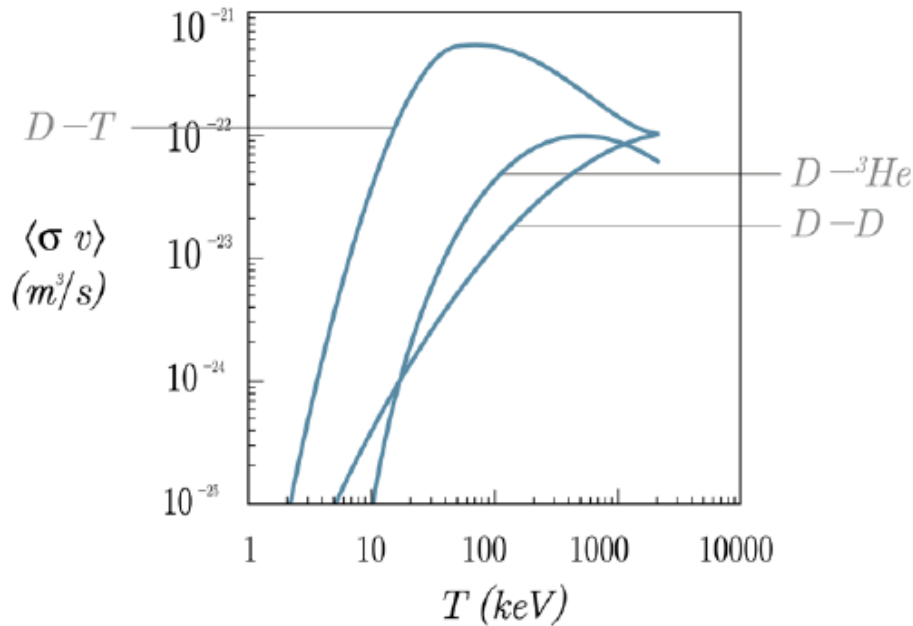


Figura 1.4. Tasas de reacción de las principales reacciones de fusión nuclear.

Se puede observar que para la reacción deuterio – tritio existe un máximo entorno a la temperatura de 812,7 millones de Kelvin. Sin embargo, como se verá más adelante la temperatura óptima de la reacción deuterio tritio es de 174,15 millones de Kelvin, unos 15 keV, este fenómeno es debido a que a mayores temperaturas el plasma pierde energía principalmente por radiación de bremsstrahlung. Además, se puede ver de forma clara como la reacción deuterio – tritio tiene una mayor sección eficaz respecto a sus competidoras, esta será una de las razones por las que es, a día de hoy, la reacción nuclear de referencia en investigación de la fusión nuclear.

1.2.5. PLASMAS Y GENERACIÓN DE PLASMAS.

Si se clasificaran los estados de la materia según la energía cinética de las partículas encontraríamos en el más bajo nivel de energía, al estado sólido de la materia, el que tiene las partículas más ordenadas. Si se decidiera aumentar la energía de ese conjunto de partículas pasaríamos al estado líquido de la materia y si el aumento de energía aplicada continuase llegaríamos hasta el estado gaseoso.

En el estado gaseoso las partículas pierden toda cohesión entre ellas y tienen una movilidad elevada. Durante muchos años se creyó que este era el estado energéticamente más elevado de la materia; sin embargo, en el siglo XX se descubrió que las partículas gaseosas en presencias de altas energías podían desprenderse de un electrón, quedando ionizadas. Este estado de la materia se definió como plasma, y es conocido como el cuarto estado de la materia.

Una definición más exacta y que sintetiza esta idea es la que recoge la Real Academia Española “Gas ionizado que se produce a temperaturas extremadamente elevadas y que contiene cargas positivas y negativas en un número aproximadamente igual”. [14]

Debido a su ionización, los plasmas presentan muy buena conductividad eléctrica y es debido a esta conductividad que frente a campos eléctricos constantes el plasma está apantallado, sin embargo, frente a campos magnéticos no resulta así, pudiendo estos penetrar el plasma, este fenómeno se aprovecha para confinarlo en la tecnología de fusión por confinamiento magnético FCM.

Como se ha visto en la Figura 1.4 las temperaturas necesarias para alcanzar la fusión son del orden de las decenas de keV, estas temperaturas exceden los potenciales de ionización de la materia. Debido a esto, se deduce que el combustible deuterio – tritio es plasma.

Para describir un plasma se definen tres parámetros:

- Longitud de Debye, λ_D
- Frecuencia de plasma ω_p
- Parámetro de plasma, Λ

El plasma ideal es aquel que presenta las siguientes características

- Valor de pequeño de λ_D y grande de ω_p , esto garantiza un apantallamiento efectivo frente a campos eléctricos.
- Elevado valor de Λ , garantizará que los efectos colectivos de largo alcance son mucho más importantes que las colisiones coulombianas de corto alcance.

En el seno de un plasma cualquier partícula cargada atraerá a otras partículas de carga opuesta, repeliendo las de misma carga. Este hecho genera una especie de nube de carga opuesta alrededor de cada partícula que produce un blindaje respecto de las otras partículas del plasma, este efecto se conoce como autoblandaje de Debye. Este fenómeno explica que, al introducir una carga de cualquier signo en el plasma, esta tiene a reordenarse de tal manera que para una distancia $r > \lambda_D$ la carga se encuentra apantallada y no se detecta su efecto. La longitud de Debye es tan importante porque en todo plasma define la distancia de autoapantallamiento y sirve como escala espacial característica de la separación de carga, así como para definir la condición espacial de cuasi neutralidad.

La longitud de Debye entonces es tan crucial ya que define la distancia de autoapantallamiento en el plasma del campo electrostático de cada partícula y sirve para escalar la separación de partículas.

1.2.6. GENERACIÓN DE PLASMAS PARA LA OBTENCIÓN DE ENERGÍA. CRITERIO DE LAWSON.

El requisito fundamental que cualquier reactor de fusión debe cumplir, es proporcionar una temperatura suficientemente elevada para producir reacciones de fusión y garantizar un elevado número de núcleos por unidad de volumen, es decir, una densidad de plasma lo suficientemente alta para maximizar las probabilidades de colisión de las partículas. Estos dos requerimientos se complementan con el temporal. Esto quiere decir que las condiciones de temperatura y densidad deben mantenerse el tiempo suficiente para que se den suficientes reacciones de fusión para obtener una ganancia de energía neta, que conducirá a la rentabilidad del proceso.

La idea de concurrir estas tres propiedades, desemboca en la materialización del *criterio de Lawson*. Lawson establece un criterio de ignición haciendo uso de un balance un simple balance de energía en el que aparecen como variables la temperatura (T), la densidad (n) y el tiempo de confinamiento (T).

En primera instancia, el criterio de ignición establece el valor mínimo de la temperatura para que el sistema sea autosostenido. Esto significa que establece el valor de la temperatura para el que la potencia de calentamiento, debido a la deposición de energía de las partículas cargadas en el plasma, supera a las pérdidas de potencia en el sistema. Las pérdidas de potencia son principalmente debidas a la radiación de bremsstrahlung que se debe a su vez, a la desviación de las trayectorias electrónicas en el campo colombiano formado por lo iones. Para la reacción deuterio – tritio este balance se resuelve con una temperatura de ignición $T = 4,8$ keV; una temperatura menor que para la reacción deuterio - deuterio $T = 27$ keV. [7]

Por otra parte, el tiempo de confinamiento se define como el tiempo que el plasma es mantenido a una temperatura por encima de la temperatura de ignición crítica. Este criterio se fundamenta en que, para garantizar la rentabilidad energética del proceso, el medio debe ser mantenido a esta temperatura durante un periodo de tiempo mínimo.

Por último, para lograr un rendimiento neto de energía de la reacción, debe mantenerse una densidad crítica de iones para asegurar una probabilidad de colisión lo suficientemente elevada. En conclusión, una vez lograda la temperatura de ignición necesaria para la fusión nuclear de la reacción deuterio – tritio, se debe mantener esa temperatura durante un tiempo de confinamiento lo suficientemente largo y con una densidad de iones suficientemente alta para obtener una ganancia neta de energía.

Con todo ello, el criterio de Lawson condensa este concepto como el producto del tiempo de confinamiento y la densidad de iones. Para la reacción deuterio – tritio resulta:

$$n \cdot T \geq 2 \cdot 10^{14} \frac{s}{cm^3}$$

En la fusión por confinamiento inercial se consiguen densidades muy elevadas, del rango de 10^{31} m^{-3} , por lo que siguiendo el criterio de Lawson se necesitarán tiempos de confinamiento muy reducidos, en torno a 10^{-11} s . [7]

1.3. FUSIÓN POR CONFINAMIENTO INERCIAL.

Como se ha comentado anteriormente el presente proyecto se enfoca en el desarrollo del ámbito de la fusión por confinamiento inercial, por lo que, para entender en que línea se trabaja es necesario saber cómo opera la tecnología de confinamiento inercial, así como un breve repaso del estado del arte de esta misma.

La fusión por confinamiento inercial se basa en la presión que la radiación puede ejercer sobre la materia para comprimir una cantidad de combustible determinada en un espacio lo más reducido posible, desencadenando de esta manera la reacción de fusión. El plasma se contiene por muy poco tiempo, microsegundos, pero a densidades muy elevadas, produciendo muchas reacciones. Dentro de esta disciplina se distinguen dos modalidades en función de cómo este diseñada la capsula que almacena el combustible.

La cápsula de combustible, normalmente conocida como blanco, está formada por un núcleo de deuterio tritio gas en equilibrio térmico con una capa de hielo del mismo combustible deuterio tritio que está en contacto con goma espuma de un polímero. En la última capa, la que encapsula todo el combustible, se tiene el mismo polímero con un fino recubrimiento de oro.

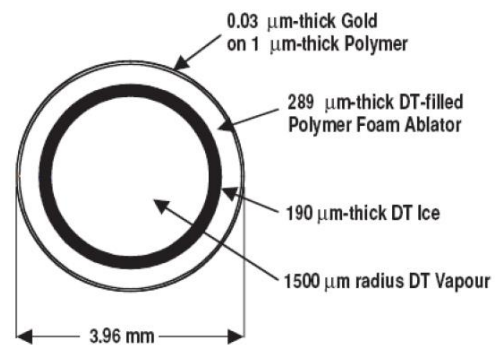


Figura 1.5. Modelo de capas del blanco

La primera y en la que este proyecto se centra es blanco directo, en la que la cápsula esférica que contiene al combustible es directamente irradiada y se comprime

El segundo enfoque es blanco indirecto, donde la capsula esférica se introduce en otra geometría cilíndrica.

Hace 60 años ya que fue demostrada que la fusión termonuclear podía iniciarse a través de la presión ejercida por varios áaser. Sin embargo, a día de hoy no se ha conseguido alcanzar el punto de rentabilidad energética que pueda denotar de utilizar a la fusión nuclear como fuente de energía para la generación eléctrica. En otras palabras, la fusión nuclear como fenómeno a día de hoy, es posible y se ha conseguido en sistemas laboratorio; sin embargo, la energía que necesita invertirse en el proceso es mayor que la energía que se recupera de la reacción de fusión. Este hecho arrebató de todo interés energético comercial a la fusión nuclear, cuyo objetivo es poder abastecer de energía a la sociedad, pero que, actualmente genera pérdidas energéticas.

1.3.1. ETAPAS DE LA FCI.

De manera didáctica, Edward Teller describió que el proceso de fusión por confinamiento inercial tendría un funcionamiento análogo al de un motor de cuatro tiempos MEP [9]. En el motor de cuatro tiempos, como su nombre indica, existen cuatro etapas diferenciadas durante el funcionamiento. Estas etapas son: (1) admisión de la mezcla aire y combustible, (2) compresión, (3) ignición del combustible mediante una bujía y (4) combustión de la mezcla que genera la expansión del pistón generando una transformación de energía química en mecánica.

Desde esta perspectiva se puede entender la fusión por confinamiento inercial como la secuencia lógica siguiente: (1) se inyecta el pellet de deuterio - tritio en la cámara de combustión, (2) el pellet se comprime hasta una elevada densidad mediante un láser o haz de partículas, (3) la elevada densidad induce la ignición de la reacción termonuclear y (4) la energía termonuclear liberar por medio de neutrones, partículas α y rayos X depositando energía calorífica en las paredes de la cámara.

Este planteamiento puede observarse de manera más gráfica en la Figura 1.6

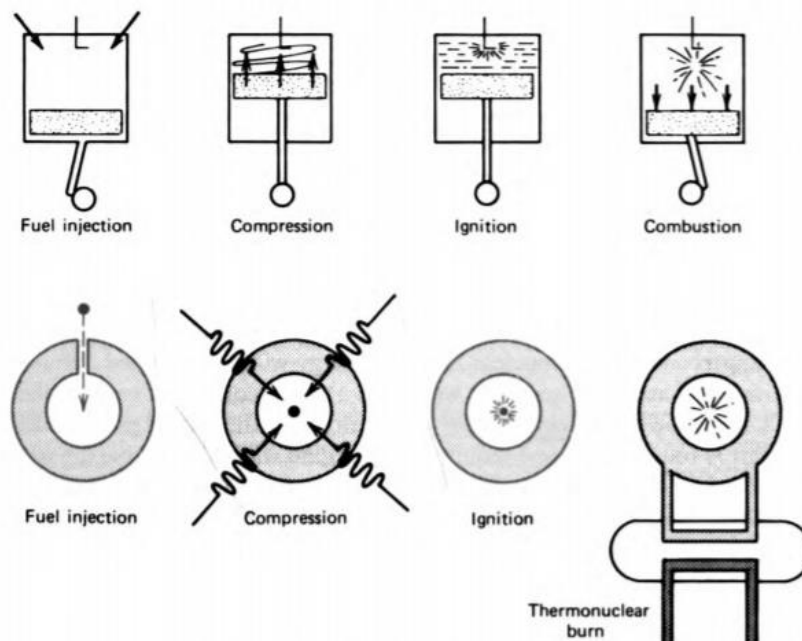


Figura 1.6. Analogía de Edward Teller para la fusión por confinamiento inercial.

De ahora en adelante se denominará *ablator* a la superficie exterior o capsula que confina al combustible y *pusher* al contenido interior de la capsula. En términos más técnicos las cuatro etapas de la fusión por confinamiento inercial son las siguientes:

1. Durante la primera etapa la energía que el láser proyecta sobre el blanco hace que comience la ablación del blanco, en la denominada superficie de ablación para formar plasma caliente. La ablación es el nombre que se le da al proceso de cambio de estado de sólido a plasma en los materiales. En esta primera fase suele irradiarse con tres pulsos láser de baja intensidad

2. Al comienzo de la segunda fase la intensidad del haz láser aumenta. En la superficie de ablación las modulaciones empiezan a crecer de manera exponencial debido a la inestabilidad de Rayleigh – Taylor (RT) mientras la onda de choque principal converge hacia el centro del blanco. El crecimiento exponencial continúa hasta que la amplitud de la perturbación alcanza alrededor del 10% de la perturbación de la longitud de onda, cuando el crecimiento de la inestabilidad se vuelve no lineal. La mayor preocupación es la integridad de la capsula. La idea es alcanzar miles de veces la presión del hidrógeno en condiciones estándar.
3. La tercera etapa comienza cuando la onda principal se refleja al llegar al centro del blanco dando inicio a la fase de deceleración. Según la carcasa se decelera su energía cinética se convierte en energía térmica y el combustible deuterio tritio es comprimido y calentado. La mayor preocupación durante esta fase es la estabilidad hidrodinámica de la superficie interna de la carcasa de la cápsula.
4. Los picos en los niveles de compresión se producen durante la última fase. Los neutrones y rayos X se producen en esta fase junto con las partículas α . [1]

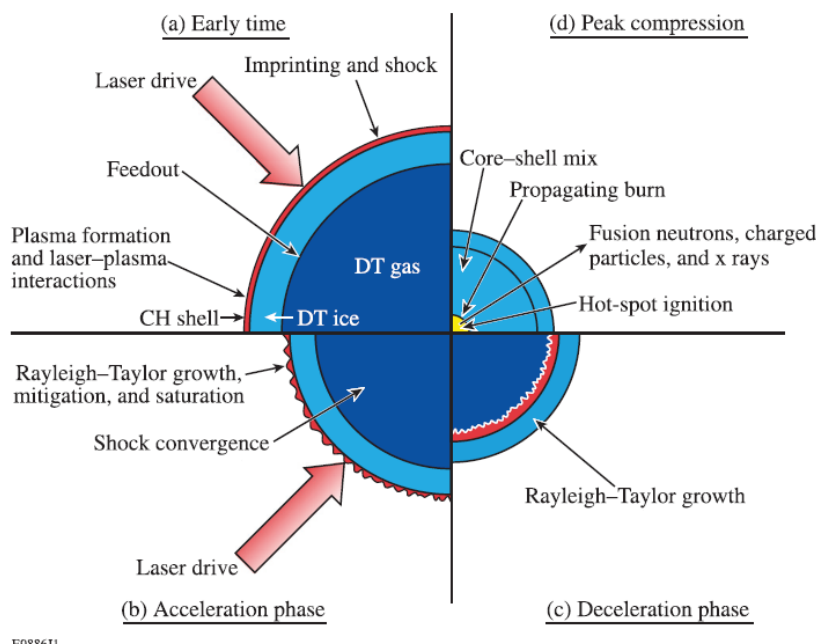


Figura 1.7. Fases de la fusión por confinamiento inercial (FCI).

1.3.2. ESQUEMAS DE IGNICIÓN.

En el apartado 1.3.1 se hizo referencia al esquema básico de la ignición en confinamiento inercial; sin embargo, existen diferentes formas de plantear este proceso.

La primera forma lógica de plantear el proceso sería comprimir y calentar todo el combustible para provocar las fusiones en el seno de todo el combustible. A pesar de ser un planteamiento

valido a nivel técnico es invalido si planteamos el rendimiento energético. Es decir, se necesitaría más cantidad de energía para producir la fusión del blanco que energía se generaría.

La idea que da solución a esta problemática es la ignición por *Hotspot*, este enfoque consiste en generar la fusión en una pequeña parte del núcleo que se conoce precisamente con el nombre de *Hotspot*, punto caliente. La base del planteamiento *Hotspot* es la de tener en cuenta que las partículas α producidas en las reacciones de fusión depositan su energía en el seno del combustible. Como se conoce, las reacciones de fusión producen neutrones y partículas α , los primeros escapan del seno del combustible depositando su energía en la cámara del reactor y realmente serán los que aporten energía para el ciclo térmico involucrado en la generación eléctrica, las partículas α no tienen recorrido más allá del combustible.

Según [1] al llegar a una densidad por unidad de área $\sim 0,2 \text{ g/cm}^2$ las partículas α comienzan a depositar una cantidad significativa de energía en el *Hotspot* aumentando de esta forma su temperatura y densidad. En la siguiente figura, se puede advertir la diferencia que supone contemplar la deposición energética de las partículas α frente al no planteamiento de este fenómeno. Contemplar la deposición de estas partículas aumenta la temperatura.

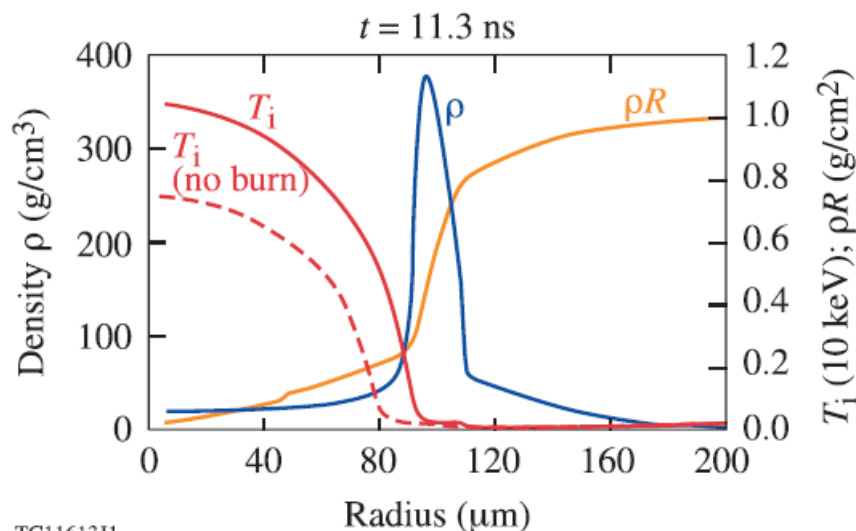


Figura 1.8. Perfiles de la densidad de masa(ρ), densidad de área(ρR), temperatura iónica (T_i no burn), temperatura iónica de quemado (T_i) en función del radio considerando la deposición de partículas α .

Según este aumento de temperatura, aumenta en el hotspot, más partículas realimentando este proceso hasta que se dispara una onda de quemado que se propaga por el combustible desde el hotspot.

1.3.3. HOTSPOT.

El esquema Hotspot es una estrategia que busca la ignición del blanco utilizando la menor energía inicial posible, maximizando así la ganancia energética del proceso y por ello su eficiencia. Esta estrategia busca comprimir y generar un punto caliente que funcione como una chispa, y que este a temperatura superior a la de ignición.

Realmente el hot spot es una zona que se crea en el centro del blanco de fusión cuando se encuentra en la cuarta fase del proceso. Es una región que se caracteriza por su elevada temperatura y baja densidad, que está rodeada por una capa de mayor densidad y menor temperatura. El Hotspot resulta de la compresión del combustible ya caliente en la fase de deceleración y suele representar un 10 % de la masa del blanco comprimido.

Es muy importante en el proceso que el Hotspot tenga suficiente producción energética y densidad de área ρR – dónde ρ es la densidad y R el radio – para que una deposición energética de partículas alfa significativa ocurra. La deposición de partículas alfa, al final lo que va a conseguir es que el autocalentamiento sea mayor que su enfriamiento por radiación y expansión hidrodinámica. Como resultado se tiene una onda de quemado disparada en el propio blanco.

La física de ignición detrás de este proceso es la siguiente

Para el estudio del mantenimiento de la ignición de forma autosostenido siguiendo el esquema Hotspot, se vio anteriormente el criterio de Lawson. Particularizando para el caso que en el presente proyecto se estudia, la expresión queda de la siguiente forma:

$$P_{hs} \cdot \tau = \frac{24}{\epsilon_{\alpha} \cdot S(T_i)}$$

Dónde P_{hs} representa la presión en el Hotspot en Mbar, τ el tiempo de confinamiento del hotspot en segundos. $\epsilon_{\alpha} = 3,5 \text{ MeV}$ representa la energía de nacimiento de la partícula alfa y $S(T_i)$ la función de la temperatura iónica en el centro del Hotspot.

Lo ideal, y por tanto lo que se buscan en este proceso, es trabajar con una temperatura iónica de 15 keV. Esto es así porque 15 keV, de esta manera se reducen el producto $P \cdot \tau$, presión por tiempo de confinamiento, se minimiza.

Es común en la literatura encontrar la expresión anterior escrita utilizando lo que se conoce como el parámetro de ignición X :

$$X = P_{hs} \cdot \tau \cdot \epsilon_{\alpha} \cdot \frac{S(T_i)}{24}$$

Para que la ignición del Hotspot sea una realidad es necesario $X > 1$

1.2.3. ESQUEMA DE LA CENTRAL FCI.

En los anteriores apartados se ha podido observar como la reacción de fusión deuterio – tritio produce partículas α y neutrones. También como se ha comentado en el apartado 1.3.2 las partículas alfa no tienen mayor recorrido que el propio blanco, donde depositan su energía. Es por ello, que son los neutrones los responsables de las ganancias energéticas que las centrales de FCI pretenden aprovechar para generar energía eléctrica.

La energía de los neutrones que nace en las reacciones de fusión se aprovechará de manera que depositen su energía en la cámara de reacción que, mediante un circuito hidráulico que realiza un ciclo térmico, consiga generar la energía eléctrica. En otras palabras, una vez obtenida la fusión sostenida los neutrones calentarán el agua y, a partir de ese punto, no existirá gran diferencia entre la central de FCI y cualquier central térmica actual.

Para este tipo de centrales FCI además se contempla rodear la cámara de un manto de litio con el objetivo de poder producir tritio aprovechando también el proceso de fusión. Esta idea se comentará en posteriores apartados de este proyecto relacionados con la obtención de las materias primas que conforman el combustible, el deuterio y el tritio.

A continuación, se muestra un esquema propuesto para un centro de fusión por confinamiento inercial.

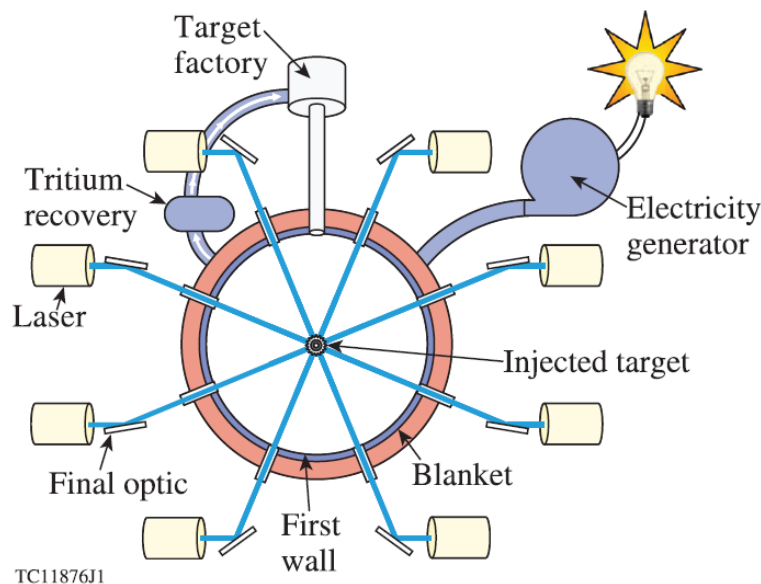


Figura 1.9. Esquema básico de funcionamiento de una central de fusión por confinamiento inercial (FCI)

En este esquema básico se puede ver como el blanco se sitúa en el centro de la cámara de combustión, donde los láseres están orientados para poder generar la presión necesaria para la fusión. Una vez que la fusión se materializa los neutrones escapan del blanco llegando a los confines de la cámara de combustión.

En los confines de la cámara se tiene, por una parte, el circuito hidráulico que aprovechará la energía e los neutrones para finalmente transformar esa energía en energía eléctrica; y por otra parte, un sistema – *tritium recovery* – que va a nutrir al litio con neutrones de tal manera que el ciclo pueda ser autosostenido al generar el tritio.

2. CAPÍTULO 2. MODELO PARA CALCULAR EL ESPECTRO DE NEUTRONES NACIDOS POR FUSIÓN.

El cometido de la primera parte de la investigación será aproximar de forma experimental datos del punto de partida, que no será otro que el momento o instante inicial después de la colisión deuterio – tritio cuando ya se ha producido la fusión y su consecuente liberación de energía.

En el presente capítulo, y en lo que resta de proyecto, se estudiará la colisión Deuterio – Tritio (D – T) para la fusión nuclear. La reacción deuterio – tritio es por muchas razones la reacción con más proyección en el ámbito de la fusión nuclear. Es favorable ya que tiene la sección transversal de fusión más grande, siendo esta sección transversal alcanzada con la energía más baja de cualquier combustible de fusión potencial. Este es uno de los principales motivos por los que la reacción D – T es considerada la forma más sencilla, en términos económicos y tecnológicos, de obtener la fusión nuclear.

La reacción deuterio – tritio produce un átomo estable de helio y un neutrón, generando con ella 17.6 MeV de forma exotérmica. De esos 17,6 MeV, 3,5 MeV serán parte de la energía cinética de la partícula de Helio y aproximadamente 14,1 MeV serán los correspondientes a la energía cinética del neutrón.

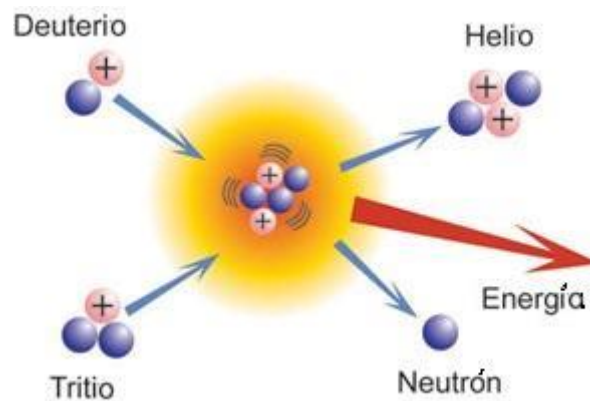
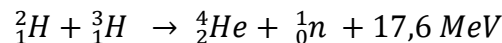


Figura 2.1. Esquema de la reacción de fusión nuclear deuterio – tritio para dar lugar a una partícula α y un neutrón con su correspondiente liberación energética.

2.1. ELEMENTOS QUE INTEGRAN LA REACCIÓN.

A continuación, se detallan algunas de las características más importantes de los elementos que intervienen en la reacción

2.1.1. REACTIVOS.

DEUTERIO ^2H .

El deuterio es un isótopo del hidrógeno cuyo núcleo está compuesto por un protón y un neutrón, dando lugar a un número másico 2. En la naturaleza la proporción de deuterio representa 1 de cada 6700 átomos de hidrógeno. Su forma más frecuente es el agua pesada.

En el agua de mar esta proporción aumenta hasta una proporción de 1 entre 5000 del hidrógeno del agua de mar. Aplicado a toda el agua de mar del planeta equivale a 1015 toneladas de deuterio disponibles en la naturaleza. Esta es una de las razones que refieren a la fusión nuclear como una fuente prácticamente inagotable de energía. [7]

TRITIO ^3H .

El Tritio es un isótopo del hidrógeno cuyo núcleo consiste en un protón y dos neutrones, conformando un núcleo de número másico 3. Fue descubierto en 1934 por Rutherford, Oliphant y Harteck en el estudio del bombardeo del deuterio con deuterones. En la naturaleza la proporción de tritio es realmente baja, representando uno de cada 1017 átomos de hidrógeno en la atmósfera. Su formación es debida a las reacciones nucleares que se producen en las capas superiores de la atmósfera inducidas por los rayos cósmicos. [13]

En la actualidad es posible producir tritio desde reactores de fisión ya existentes que usan agua pesada D_2O como moderador, como CANDU. El proceso por el que se produce el tritio en este tipo de reactores es la captura de un neutrón por parte del deuterio presente en el agua pesada.

Sin embargo, el proceso que a futuro parece más viable es el de generarlo a partir de reacciones nucleares con Litio. El Litio representa una solución realista por ser un elemento muy presente en la corteza terrestre (20 ppm) y en el agua de mar (0,17 ppm). Los isótopos que presentan mayor viabilidad son los siguientes: ^6Li (7,4%) y ^7Li (92,6%)

- $^6\text{Li} (n, \alpha) \text{T}$
- $^7\text{Li} (n, \alpha) \text{T}$

Estas reacciones pretenden ser implementadas en las futuras centrales de fusión nuclear. La idea será aprovechar parte de los neutrones generados en las reacciones de fusión para que, al combinarlos con el litio, generen tritio. En la Figura 2.2 se presenta un posible modelo de ciclo de Litio asociado a la cámara de combustión en el ámbito de la central nuclear de fusión por confinamiento inercial.

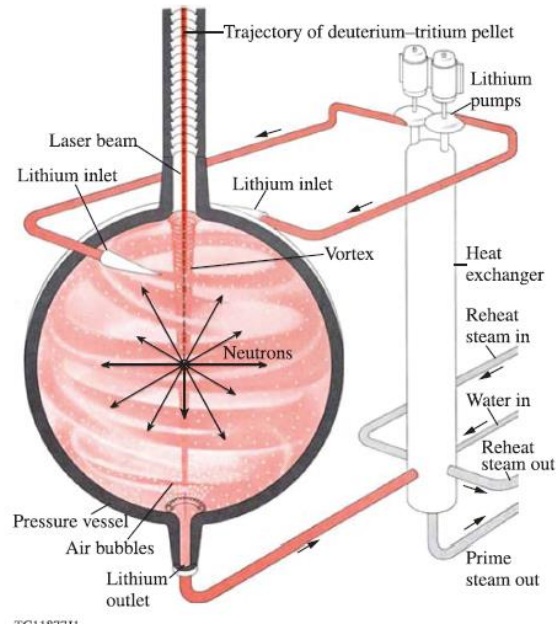


Figura 2.2. Esquema de funcionamiento interno del sistema Tritium recovery mediante Litio en una central de fusión nuclear por confinamiento inercial. Esquema de funcionamiento del intercambiador de calor

El tritio presenta una vida media de 12,4 años y emite radiación beta de muy baja energía (0,018MeV), totalmente libre de radiación y, por lo que no presenta prácticamente radiotoxicidad. [1]

2.1.2. PRODUCTOS DE REACCIÓN.

El resultado la reacción que se estudia en este proyecto da lugar a un neutrón y una partícula α .

PARTÍCULA α .

Partícula α es el nombre con el que se conocen a los núcleos de helio. Está formada por dos neutrones y dos protones, siendo su masa cercana a las 4 uma. Al quedar libre de los electrones que conformarían al helio en su totalidad se trata de una partícula ionizada con una carga eléctrica de $+2qe$

La partícula α , que nace con una energía promedio de 3.5 MeV debido a su pesadez y menor energía se deposita en el interior del combustible, teniendo poco o nulo recorrido fuera de él. Como se vio anteriormente cuando la densidad en el hot-spot supera los $0,2 \text{ g/cm}^2$ las partículas alfa comienzan a depositar una fracción significativa de su energía dentro del hot-spot [1], aumentando la temperatura y presión. Este fenómeno favorece la fusión, en otras palabras, realimenta el proceso.

NEUTRÓN.

Por definición el neutrón es una partícula subatómica – dos quarks up y un quark down – de masa cercana la unidad de uma y con carga nula, lo que la hace bastante particular. En el núcleo atómico el neutrón es una partícula estable; sin embargo, el neutrón aislado tiene una vida

media de 879,4 s, momento en el que se desintegra para dar lugar a un protón, un electrón y un antineutrino electrónico.

El neutrón es el objeto de estudio principal en este proyecto, nace con una energía promedio de 14.1 MeV y escapa llegando hasta los confines de la cámara de reacción, no sin pérdidas energéticas

A lo largo de este proyecto se estudiarán las pérdidas energéticas que tiene al interactuar hasta que escapa del blanco de fusión por confinamiento inercial.

CALOR GENERADO.

No menos importante es el calor que genera la reacción. Una reacción exotérmica es, por defecto, una particularización de un proceso exotérmico, que a su vez es todo aquel proceso que libera energía del sistema a su entorno en forma de calor. En otras palabras, una reacción exotérmica es aquella que libera más energía de la que precisa para llevarse a cabo.

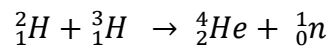
El hecho de que la reacción D – T sea exotérmica es un requisito mínimo para poder considerarla como reacción candidata para la fusión nuclear en el ámbito de la generación de energía eléctrica.

2.2. LEYES DE CONSERVACIÓN.

El primer paso para resolver la colisión es resolver las ecuaciones de conservación de la reacción nuclear tomando como situaciones inicio y final las situaciones exactamente previas y posteriores a la colisión. De esta manera se plantean las siguientes ecuaciones.

2.2.1. CONSERVACIÓN MASA – ENERGÍA.

Es conocido que en cualquier reacción nuclear se cumple la ley de conservación de la masa – energía, de tal manera que para la reacción que se estudia:



A aplicar la conservación de masa – energía se va a realizar una valoración de las energías cinéticas tanto como de la energía intrínseca de la partícula, equivalencia masa – energía (Albert Einstein 1915)

$$E = mc^2$$

Si se aplica la ley de conservación, siendo T la energía cinética de una partícula en cualquiera y m la masa de cada una de las partículas, resulta de la siguiente forma:

$$m_D \cdot c^2 + m_T \cdot c^2 + T_D + T_T = m_n \cdot c^2 + m_{He} \cdot c^2 + T_n + T_{He}$$

Los subíndices D, T, n y He se refieren a Deuterio, Tritio, neutrón y Helio respectivamente; las partículas que participan de la reacción en concreto.

Con esta consideración, se puede calcular la energía que desprenderá la reacción de forma exotérmica. Para ello se aplica la igualdad:

$$Q = \Delta(m \cdot c^2)$$

Conocidas las masas de cada uno de los elementos que participan de la reacción se puede calcular el calor desprendido en esta.

- $m_D = 2,01410178$ uma
- $m_T = 3,0160492$ uma
- $m_n = 1,0086649156$ uma
- $m_{He} = 4,002602$ uma

Por tanto, para la reacción estudiada:

$$Q = (m_D + m_T - m_n - m_{He}) \cdot c^2$$

$$Q = 17,5903926 \text{ MeV}^3$$

2.2.2. CONSERVACIÓN DE LA CANTIDAD DE MOVIMIENTO.

La conservación de la cantidad de movimiento plantea un balance que en este caso, por ser vector da pie a más posibilidades. En este balance entrará en juego la dirección del neutrón y del Helio después de la reacción. Es por ello que :

$$\vec{p}_D + \vec{p}_T = \vec{p}_n + \vec{p}_{He}$$

$$m_D \cdot \vec{v}_D + m_T \cdot \vec{v}_T = m_n \cdot \vec{v}_n + m_{He} \cdot \vec{v}_{He}$$

A priori, el neutrón y la partícula α salen con direcciones dependientes de ángulos diferentes que sin embargo posteriormente demostrarán ser equivalentes. La foto en dos dimensiones del momento de la colisión podría ser la siguiente:

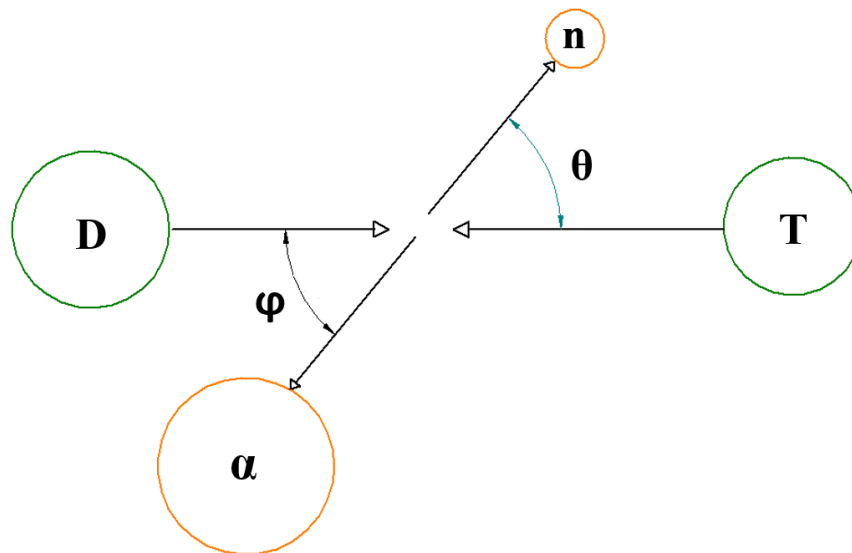


Figura 2.3. Esquema de la colisión deuterio tritio y los ángulos que tanto neutrón como partícula α forman tras la colisión con el sistema de referencia.

En la Figura 2.3 se aprecian las 4 partículas y se detallan los ángulos del momento justamente posterior a la colisión.

³ Se recuerda la equivalencia $1 \text{ uma} = 931,494 \cdot 10^6 \text{ eV}$

En base a las ecuaciones anteriores y conociendo los ángulos, se puede utilizar la siguiente expresión.

El planteamiento en dos dimensiones nos lleva a plantear el sistema de ecuaciones basado en los ejes del sistema de referencia x, y:

- En el eje x

$$m_n \cdot v_n \cdot \cos(\theta) - m_{He} \cdot v_{He} \cdot \cos(\varphi) = m_D \cdot v_D - m_T \cdot v_T$$

- En el eje y

$$m_n \cdot \vec{v}_n \cdot \sin(\theta) - m_{He} \cdot \vec{v}_{He} \cdot \sin(\varphi) = 0$$

Si se convierte estas expresiones por expresiones dependientes de la energía cinética sabiendo que para una partícula x:

$$T_x = \frac{1}{2} \cdot m_x \cdot v_x^2$$

y, por lo tanto

$$v_x = \pm \sqrt{\frac{2T_x}{m_x}}$$

Aplicando estas expresiones se obtiene

$$\sqrt{2T_n \cdot m_n} \cdot \cos(\theta) - \sqrt{2T_D \cdot m_D} \cdot \cos(\varphi) = \sqrt{2T_D \cdot m_D} - \sqrt{2T_T \cdot m_T}$$

Es de esta expresión de la que se obtendrán los distintos valores de la energía cinética de los neutrones que permitirán conformar el espectro de neutrones nacidos por fusión, además de también obtener el de las partículas α .

Hay que recalcar que la denominación de φ en este apartado no tiene nada que ver con el futuro uso que se hará de φ . De aquí en adelante φ representará el ángulo sólido de la colisión

2.3. OPERATIVA.

Como se indico con anterioridad, en esta primera fase del proyecto tratará de resolver la colisión deuterio – tritio, de la que resulta un neutrón y una partícula α . El principal objetivo de la resolución de esta colisión es el obtener el espectro energético de los neutrones que nacen tras la colisión.

La física moderna, que es aquella rama de la física sobre la que se sustenta el desarrollo acerca de la física nuclear y de partículas. La gran diferencia que la física moderna presentó frente a la física clásica fue que se apoyó de una manera fuerte en las probabilidades, siendo especialmente la teoría cuántica quién describía y hacía uso de el cálculo de las probabilidades.

Un espectro energético representa la distribución de energía en un gran conjunto de partículas, es decir no es más que una representación estadística de la onda de energía como función de la frecuencia de la onda y un estimado empírico de la función espectral.

Mediante el método de Montecarlo – que se explicará a continuación – se diseñará una muestra de elevado número de partículas, que al simularse, nacerán con una determinada energía en cada caso. La representación de todas esas partículas junto con sus valores energéticos será la que dará forma al espectro de energías de nacimiento de fusión por confinamiento inercial.

En otras palabras, al resolver la colisión se necesita conocer como dato de partida la energía de partículas con una energía incidente, energía que depende de una distribución conocida. Al ser una distribución no se tiene un valor fijo de energía como dato inicial, sino un rango de valores más o menos probables.

Es por ello que la resolución de la colisión deuterio – tritio no da lugar a un valor único de energía, en lugar de eso, la resolución de la colisión da como resultado un espectro de energías que con mayor o menor probabilidad son posibles para el caso concreto.

2.3.1. MÉTODO DE MONTECARLO.

El método de Montecarlo es un método que fue concebido durante el desarrollo del proyecto Manhattan. El proyecto Manhattan fue el proyecto que integraba a varios de los científicos mas ilustres de la física nuclear del siglo XX que, financiados por el gobierno de los Estados Unidos quienes buscaban dar forma al desarrollo de la bomba atómica. El método de Montecarlo es un método de simulación que permite calcular estadísticamente el valor final de una secuencia de sucesos no deterministas, es decir, sujetos a variabilidad. Este método de simulación se basa en crear modelos de posibles resultados mediante la sustitución de un rango de valores, que viene dado por una distribución de probabilidad, para cualquier factor con incertidumbre.

El método de Montecarlo será utilizado durante el proyecto tanto en el capítulo 2 dónde se modelará la colisión, como en el capítulo 3 donde se llevarán a cabo las simulaciones de *Geant4*.

A continuación, se ha incluido un extracto de *The Montecarlo Method*, artículo original por el que se presentó el método ante la comunidad científica en el año 1949.

“Imaginemos que tenemos un conjunto de partículas, cada una de ellas representadas por un conjunto de números. Estos números especifican el tiempo, componentes de posición y vectores de velocidad, también un índice que identifica la naturaleza de cada partícula. Con cada uno de esos sets de números, se inician procesos aleatorios que llevan a la determinación de un nuevo set de valores. Existe ciertamente, un set de distribuciones de probabilidades para los nuevos valores de los parámetros tras un intervalo de tiempo especificado Δt . Imagine que dibujamos aleatoria e independientemente, valores de una colección preparada que vienen de dadas distribuciones. Aquí se debe hacer una distinción, entre aquellos parámetros que se cree que varían de manera independiente a los demás, y aquellos valores que están estrictamente determinados por los valores de otros parámetros.

Para ilustrar esta idea: Asuma por un momento, que en los procesos de fisión la dirección del neutrón emitido es independiente de su velocidad. O de nuevo, que la dirección un neutrón en un medio homogéneo no tiene influencia en la distancia al origen y el lugar de su primera colisión. Por otra parte haber ideado, de distribuciones apropiadas, la velocidad de neutrones de nuevo nacimiento y la distancia recorrida hasta su primera colisión es la distancia, el tiempo transcurrido en el viaje está completamente determinado y debe ser calculado consecuentemente.

Considerando un gran número de partículas con sus sets de parámetros correspondientes obtenemos de esta manera otra colección de partículas y una nueva clase de set de valores para sus parámetros. La esperanza es, por supuesto, que de esta manera obtengamos una buena muestra de las distribuciones transcurrido $t + \Delta t$. Este procedimiento se repite cuantas veces sea requerido para la duración del proceso real o para problemas donde creamos que la distribución estacionaria existe hasta que nuestra distribución ‘experimental’ no muestre cambios significativos de un paso al siguiente.

La característica esencial del proceso es que se evita tratar con integraciones múltiples o multiplicaciones de matrices de probabilidad, en lugar de ello se trabaja con cadena simple de eventos. Obtenemos una muestra del set de todas esas posibles cadenas y de esta manera, en ella, podemos hacer un estudio estadístico de las propiedades genealógicas y varias distribuciones en un tiempo dado.

De hecho, será suficiente con producir una secuencia de números aleatorios comprendidos entre 0 y 1 con una distribución uniforme pero que por otra parte no tengan correlación; aquellos correlacionados se podrán calcular algebraicamente.

Una vez que la distribución uniforme aleatoria está disponible, se complementa con una función de densidad probabilística que puede ser obtenida de ella primeramente dibujando de una distribución no correlacionada uniforme, y posteriormente usar en lugar del valor x que fue dibujado, otro valor $y=g(x)$ donde $g(x)$ fue computado previamente de tal manera que los valores y poseen la distribución $f(y) \dots$ [2]

Como se puede concluir del texto extraído del artículo original, el método de Montecarlo es un método que, de manera sencilla, es capaz de conseguir simular procesos aleatorios complejos sin necesidad de hacer uso de herramientas matemáticas excesivamente avanzadas.

De este texto se puede también ver como se describía el método de funcionamiento de Montecarlo, su base operativa que servirá para poder implementarlo a lo largo del presente proyecto.

Para la resolución de la colisión y la obtención de la energía del neutrón aplicando el método de Montecarlo se necesita cierta información sobre el estado inicial del sistema. Es por ello por lo que serán variables de entrada iniciales las siguientes:

- Masa del Deuterio
- Masa del Tritio
- Masa del neutrón
- Masa del Helio
- Energía incidente de las partículas de Deuterio y Tritio
- La distribución espacial angular de las partículas

Este último fenómeno se explica como la necesidad de diferenciar todas las posibles formas en las que dos partículas chocan. Para ello necesitamos la distribución estadística de la función de densidad de los dos ángulos:

- Angulo de dispersión θ
- Angulo de dispersión φ

2.3.2. ESTADÍSTICA DE MAXWELL – BOLTZMANN.

Originalmente propuesta por James Clerk Maxwell y Ludwig Boltzmann, es una distribución que fue desarrollada para modelar sistemas físicos regidos por la mecánica clásica. Su concepción, en el siglo XIX, buscaba desarrollar una distribución de un conjunto de partículas dependientes de posibles valores de energía de los estados que estas pueden ocupar. Es decir, buscaban caracterizar en espectro energético de las partículas

Por ello, la expresión que da forma a la distribución de Maxwell – Boltzmann estipula la densidad de probabilidad como función de la velocidad de la partícula. La densidad de probabilidad depende de la temperatura del medio (T), la constante de Boltzmann (k) y la masa de la partícula (m). La expresión originalmente formulada es la siguiente:

$$f(v) = \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3} \cdot 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$$

Esta expresión puede ser transformada de tal manera que quede en función de la energía cinética de la partícula, dependiente esta de la masa y velocidad al cuadrado. La expresión transformada queda de la siguiente forma:

$$f(E) = 2 \sqrt{\frac{E}{\pi}} \left(\frac{1}{kT}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}}$$

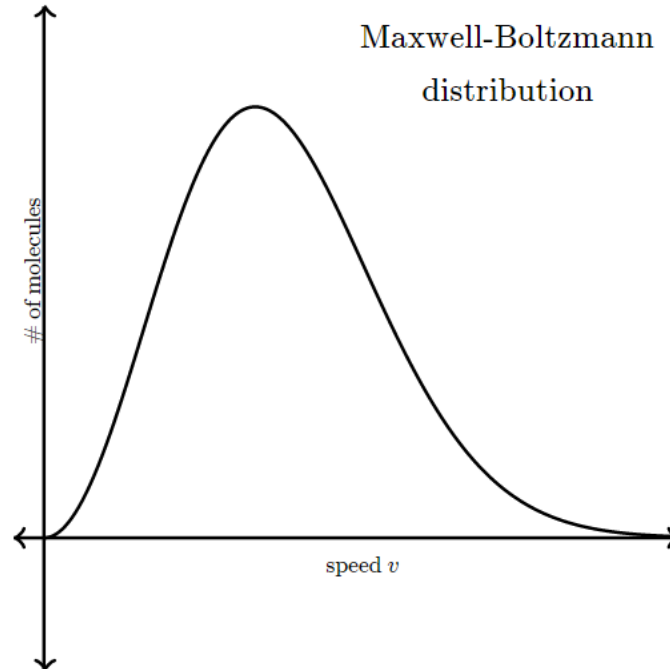


Figura 2.4. Función de densidad de probabilidad de la distribución de Maxwell – Boltzmann en función de la velocidad (v) de una partícula

Esta distribución permite modelar el comportamiento energético de las partículas incidentes en la colisión.

En la Figura 2.4 puede observarse el aspecto típico o forma que presenta la función de densidad en función de la velocidad.

Es de esta forma, de la forma en la que tanto deuterio como tritio se comportan energéticamente antes de la colisión. Las posibles energías se encuentran caracterizadas por las distribuciones energéticas de ambas partículas y se rigen por esta función. De tal manera, se simularán cuantas muestras se consideren necesarias para crear un espectro energético lo suficientemente fiable y realista.

Comúnmente las distribuciones probabilísticas están caracterizadas por dos funciones: la función de densidad de probabilidad (PDF) y la función de distribución de probabilidad acumulada (CDF). Ambas funciones se encuentran directamente relacionadas y no se entiende una sin la otra, ya que la CDF nace como resultado de integrar la PDF en todo su dominio.

De forma práctica, la PDF representa la probabilidad de encontrar a un núcleo de deuterio o tritio con una determinada energía. Debido a la forma de la PDF se puede advertir de manera sencilla, como se puede ver en la figura anterior, que las mayores probabilidades se encuentran

en la parte “central” de la distribución. Realmente no es una distribución simétrica, sino que se puede decir que tiene “cola” hacia la derecha o zona de mayor energía.

La CDF debido a su relación directa con la PDF representa la probabilidad acumulada y está representada por una curva creciente.

En otras palabras, si se quisiera conocer la probabilidad de encontrar un núcleo de deuterio con una determinada energía acudiríamos a la PDF. Si por el contrario existe interés por la misma cuestión pero en un intervalo de valores; es decir que probabilidad hay de encontrar un núcleo, por ejemplo, por debajo de una temperatura dada lo correcto sería trabajar con la CDF. Al final no deja de ser un poco la relación de integración directa lo que rige este comportamiento.

2.3.3. PLANTEAMIENTO DEL CÓDIGO.

Con el objetivo de poder redactar un código consecuente con la solución que se espera obtener, se inicia una primera fase conceptual, en la que principalmente se diseña el algoritmo a implementar en forma de razonamiento lógico.

El código se programará en el lenguaje de programación Python debido a, como se comentó anteriormente, lo sencillo de su implementación, así como el extendido conocimiento que hay de él, lo que lo hará más accesible a posibles interesados.

Como ya se conoce, la idea es obtener las distribuciones energéticas simuladas de deuterio y tritio antes de la colisión. Para ello se van a realizar simulaciones de Montecarlo en base a un espectro energético que siga la distribución de Maxwell – Boltzmann, que como anteriormente se indicó es la distribución que caracteriza a ambas partículas.

El método conceptual se plantea de la siguiente manera:

1. En primer lugar se debe definir la función de densidad de Maxwell – Boltzmann en función de la energía.
2. Al definir la PDF puede parecer que se cometa un absurdo, pues la energía es la incógnita que se quiere resolver con todo este procedimiento.
3. Sin embargo, la operativa será generar números aleatorios comprendidos entre 0 y 1. Con estos números vamos a invertir la función de densidad con el fin último de obtener el valor energético.

En un primer momento se programó un código en python para comprobar el buen funcionamiento de la función de densidad de Maxwell – Boltzmann , para ello se creó la función y se probó en un rango energético para distintas temperaturas. Se pudo observar claramente una de las características principales de este tipo de funciones como es el aumento del ancho de la distribución con el aumento de temperatura.

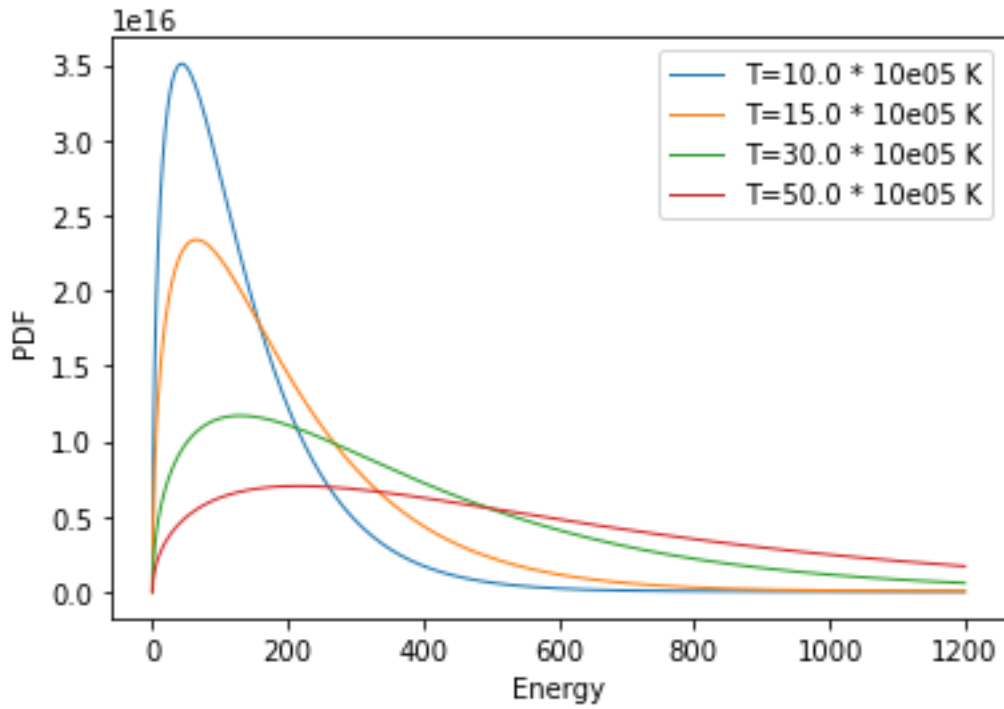


Figura 2.5. Prueba de cálculo de funciones de densidad de probabilidad para la distribución de Maxwell – Boltzmann para diferentes temperaturas

Seguidamente se procedió al cálculo de la función de distribución de probabilidad acumulada mediante la integración de la función de densidad anteriormente definida.

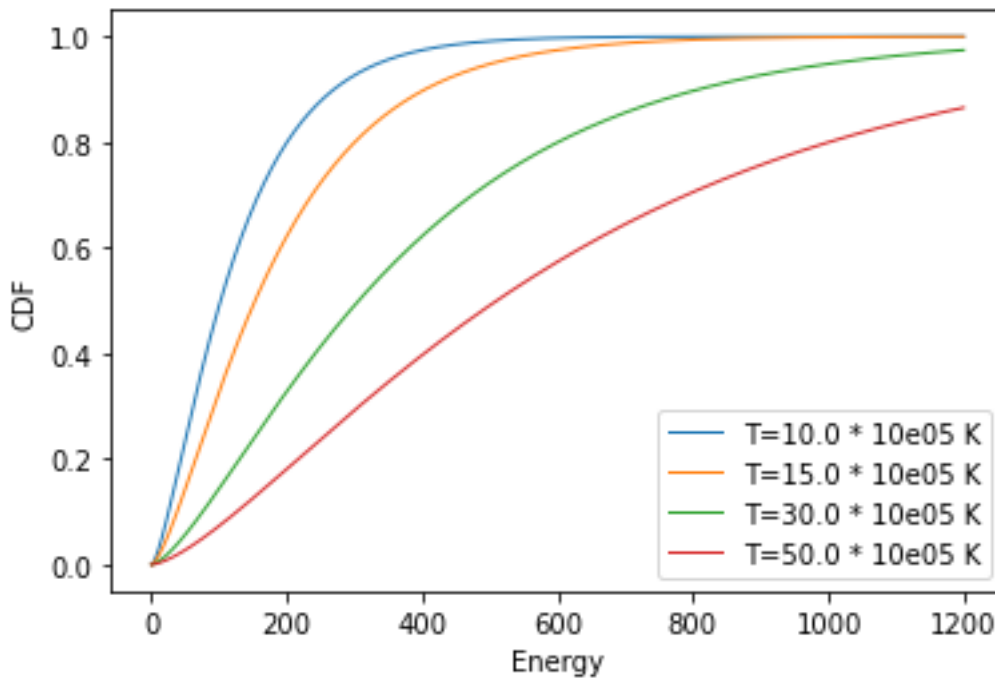


Figura 2.6. Prueba de cálculo de funciones de distribución acumulada para la distribución de Maxwell – Boltzmann para diferentes temperaturas

De las anteriores figuras se pueden realizar varios comentarios que derivan en una conclusión. El primer comentario es que indudablemente tanto la PDF como la CDF se asemejan a lo que deberían ser, es decir, a pesar de haber sido trazadas para temperaturas sin ningún criterio práctico real, se observa que la distribución toma la forma teórica que sigue la distribución de Maxwell – Boltzmann expresada en términos energéticos. El segundo comentario consiste en el análisis de la relación entre las dos figuras, la de PDF y la de CDF. Se puede observar como las PDF naranja y azul, de 10^6 y $15 \cdot 10^5$ respectivamente se puede decir que en el rango de la figura toman valor nulo en cierto momento de avance de la energía (teóricamente la función PDF tiende a 0 en el infinito). Si se analizan los mismos casos mediante la CDF se observa que la probabilidad acumulada alcanza la unidad mediante comportamiento asintótico, simbolizando de esta manera que, al cubrir el dominio de la PDF hasta dónde esta alcanza el valor nulo la probabilidad acumulada alcanza el valor 1, reflejado en su asíntota.

Comportamiento contrario muestran las curvas restantes verde y roja, que en mayor o menor medida, no llegan a reflejar completamente el comportamiento asintótico que en realidad se pueden suponer por la evolución que presentan. El análisis de la CDF de nuevo toma verosimilitud al no presentar un comportamiento asintótico en el dominio estudiado. Si el dominio hubiese sido mayor, ambas deberían haber presentado el mismo comportamiento que las curvas naranja y azul.

Se ha pretendido presentar los dos escenarios con el objetivo de comprobar el buen comportamiento de las funciones y, también, con el de comprender y hacer comprender mejor el comportamiento de las funciones mediante sus curvas.

El siguiente paso será utilizar estos espectros energéticos para poder resolver la colisión de ambas partículas, es por ello que era esencial garantizar que son distribuciones correctas. A la hora de resolver la colisión se trabajará con la función de densidad de probabilidad de Maxwell – Boltzmann y se estudiará para diferentes kT , es decir para diferentes ambientes en los que las partículas se pueden encontrar antes de la colisión.

2.4. APLICACIÓN DE MONTECARLO.

Una vez que se ha demostrado que la función de Maxwell – Boltzmann se ha implementado correctamente, se procede a desarrollar el método de Montecarlo para el caso concreto relativo al proyecto.

Para ello se hace uso de la función de densidad de probabilidad PDF. Mediante el uso del lenguaje de programación Python se aplica el método de Montecarlo. Se hará uso de la función *random.uniform()* para poder generar un rango de números aleatorios con los que comenzar. A continuación, haciendo uso de una función inversión anteriormente diseñada y junto con los valores aleatorios se invierte la función hallando los valores de las energías que se han obtenido en base a la generación de unos números aleatorios. Para representar la distribución de los valores generados se hace uso del histograma. Se simularán un millón de muestras en cada caso ya que se sabe que el error en simulaciones de Montecarlo disminuye al aumentar el número de muestras.

2.4.1. GENERACIÓN ENERGÉTICA.

En la siguiente figura se puede apreciar la comparación entre los valores reales de energía generados y los valores que sigue la curva de distribución Maxwell – Boltzmann.

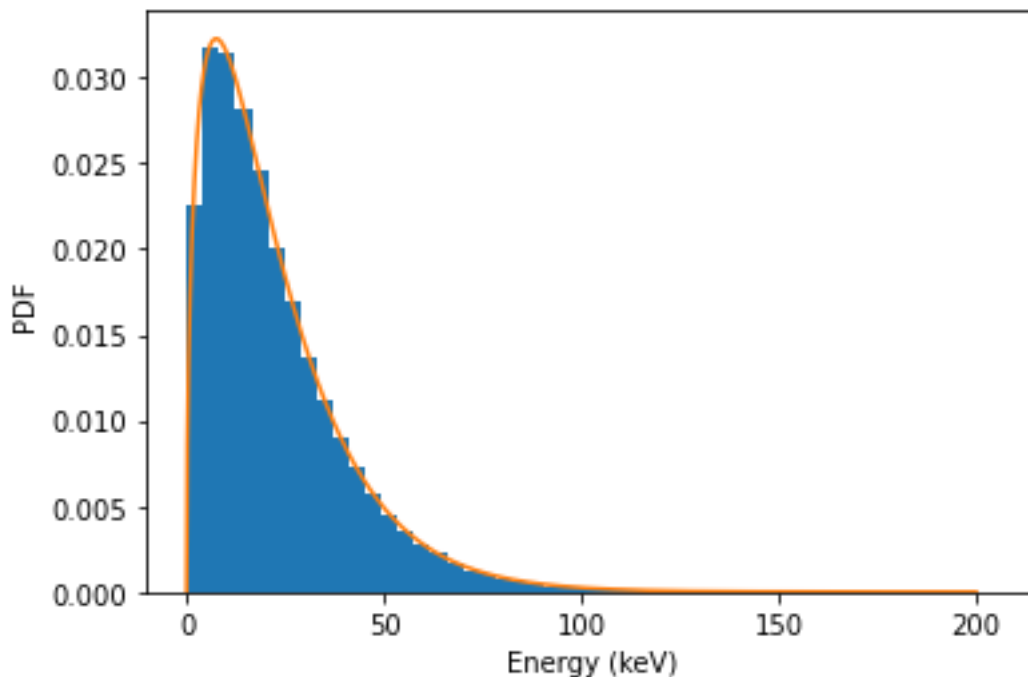


Figura 2.7. Histograma de la generación energética mediante método de Montecarlo en base a la función de densidad de probabilidad de Maxwell – Boltzmann. Comparación de las simulaciones con la curva teórica.

Además, como comentario adicional se calculó el error, es decir la diferencia entre las energías generadas por montecarlo y la función de densidad de Maxwell – Boltzmann resultando de un 0,01 %

Para ello se ha calculó analizando cada bin menos el valor medio de la función de densidad de probabilidad de Maxwell – Boltzmann entre los límites de cada bin.

2.4.2. GENERACIÓN ANGULAR.

También será necesario definir los ángulos con los que van a salir tanto la partícula α como el neutrón tras la colisión. Para ello se va a utilizar el método de Montecarlo nuevamente, conociendo la distribución de ambos ángulos.

Para el ángulo theta se conoce que la función de densidad de theta tiene el siguiente aspecto:

$$pdf(\theta) = \frac{1}{2} \cdot (1 - \cos(\theta))$$

El primer paso será normalizar la función de la siguiente manera:

En primer lugar se aplica una constante de normalización K , que se buscará hallar :

$$pdf(\theta) = \frac{1}{2} \cdot K(1 - \cos(\theta))$$

Para ello se integra $pdf(\theta)$ en todo su dominio, sabiendo que el resultado – por estar normalizada – debe ser la unidad.

$$\int_0^{\pi} \frac{K}{2} (1 - \cos(\theta)) d\theta = 1$$

$$\frac{K}{2} [\theta - \text{sen}(\theta)]_0^{\pi} = 1$$

Si se resuelve la anterior igualdad resulta que $K = \frac{2}{\pi}$

Por lo que ya se tiene la función de densidad de probabilidad normalizada.

$$pdf(\theta) = \frac{1}{\pi} \cdot (1 - \cos(\theta))$$

Para obtener la función de distribución se integra la $pdf(\theta)$ resultando de la siguiente manera:

$$cdf(\theta) = \frac{1}{\pi} \cdot (\theta - \text{sen}(\theta))$$

Por lo que operando de la misma manera que anteriormente se operó se obtiene una serie de ángulos que se muestran a modo de histograma en la siguiente figura, en la que además se compara con la gaussiana que los define.

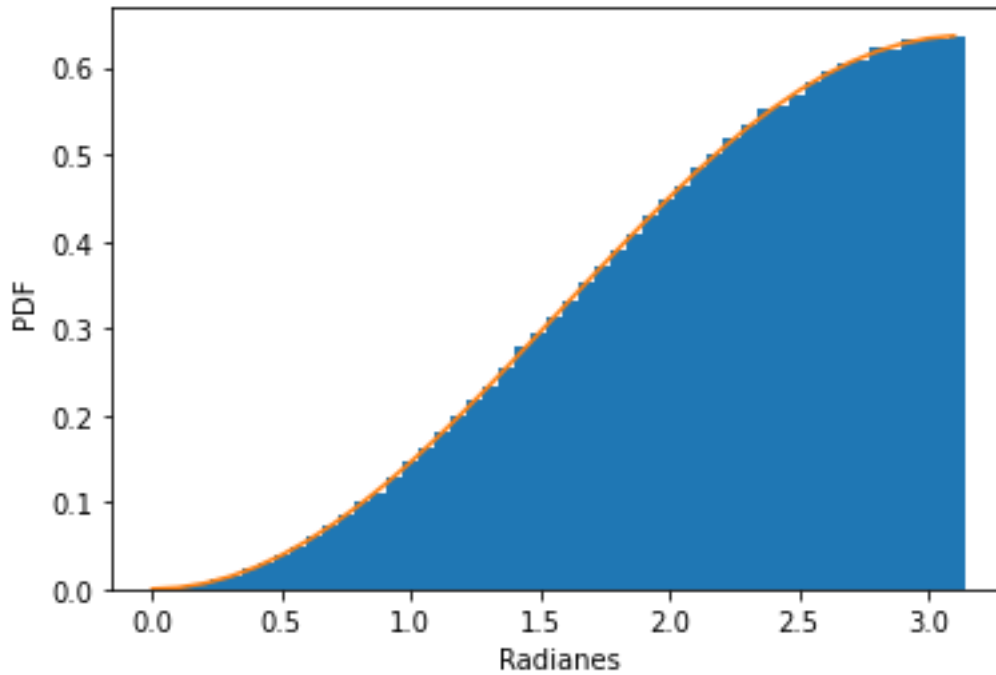


Figura 2.8. Histograma de la generación angular mediante método de Montecarlo en base a la función de densidad de probabilidad. Comparación de las simulaciones con la curva teórica

En este desarrollo también se calculó el error de la misma manera obteniendo un 0,054 % .

El ángulo theta representa lo que sería el ángulo azimutal en las coordenadas esféricas, por ello su dominio es $[0, \pi]$

Para el ángulo phi (φ) sabemos que la distribución es constante, por lo que el método será directo, siendo su dominio $[0, 2\pi)$

Es importante señalar la diferencia entre los dos ángulos para comprender mejor lo que sucede y el por qué son así las distribuciones.

- El ángulo theta se refiere a el ángulo de dispersión de los productos de reacción en referencia a las partículas incidentes, es el ángulo que se calculó en la conservación de cantidad de movimiento.
- El ángulo phi representa el ángulo de dispersión de los productos de reacción en referencia a la rotación sobre el incidente.

Ambos conforman los ángulos referentes a las coordenadas esféricas.

2.5. RESOLUCIÓN DE LA COLISIÓN.

Una vez resuelto el problema de las variables iniciales podemos pasar a resolver la colisión entre el deuterio y el tritio con el objetivo de obtener resultados prácticos. Para resolver la colisión se diseñan varios scripts que se relacionan entre si para poder resolver satisfactoriamente el problema. Los scripts son los siguientes:

1. En primer lugar vamos a tener una base de datos nucleares de dónde sacar valores para los elementos deuterio, tritio, neutrón y partícula α .
2. En segundo lugar tenemos el script `collision`, que actuará resolviendo la colisión.
3. Por último tenemos el script `main_collision` que será el script que llamaremos y provocará la reacción en cadena llamando a los otros scripts.

A continuación se explican de manera más detallada cada uno de ellos

BASE DE DATOS NUCLEAR.

Se trata de una base de datos de diferentes elementos que recogen las principales características de los elementos necesarios para la resolución de la colisión. Algunas de las características que se recogen en la base de datos son número másico, atómico y valor de la masa en u.m.a. entre otras.

En el script `main_collision` se trabajará llamando a esta base de datos para poder cargar la información necesaria del neutrón, partícula α , deuterio y tritio.

COLLISION.

En este script es donde se resuelve de manera efectiva la reacción que producirá las dos nuevas partículas. Para la resolución se definen los vectores q , que representan vectores de momentos para las partículas. También en este script, a modo de comprobación, se validan ciertas magnitudes como las masas en reposo.

Una de las funciones definidas es la de `solve_lab`, en la que se resuelve la colisión en el sistema laboratorio

Además en este script se consideran las transformaciones de Lorentz necesarias para resolver la colisión planteada.

El punto central de todo es la función `solve`. Esta función toma como variables de entrada las masas en reposo de las 4 partículas, las dos energías iniciales y las direcciones y ángulos de ellas. La función nos devuelve cuatro vectores q .

MAIN_COLLISION.

En este script se implementan las distribuciones anteriormente calculadas y con las que, al implementarse, se obtendrán las generaciones aleatorias de energías y ángulos.

Al ser el script con el que el usuario interactúa se deben definir una serie de argumentos de entrada.

1. El primer argumento de entrada son el número de samples que queremos hacer, en todas las simulaciones que haremos serán siempre de un millón de muestras con el objetivo de obtener una muestra representativa.
2. El segundo argumento trata sobre el medio en el que se produce la colisión, sobre la energía en ese medio expresada como kT en keV.
3. Se añade un argumento que --help que da información sobre como utilizar el script, su copyright, fechas y versión.

Una vez especificados los argumentos de entrada se obtienen tantas soluciones como samples se han especificado.

La idea es generar un millón de muestras para diferentes energías iniciales. Con ello se conseguirá un espectro energético de los neutrones lo suficientemente fiable del que se podrán sacar algunas conclusiones.

2.5.1. EJECUCIÓN.

Se han simulado diferentes ambientes desde 5 keV hasta 100 keV en intervalos de 5 keV hasta los 50 keV y de 10 keV en adelante hasta llegar a los 100 keV. Los intervalos de menor longitud en energías menores a 50 keV son debidos a que se sabe que la reacción de fusión del deuterio tritio de manera frecuente tiene mayor probabilidad a 15 keV, como se indica en numerosas publicaciones como [1]. Para facilitar el análisis de la información se han creado archivos de texto que almacenan la información de todas las samples de la colisión. Los archivos txt que se han obtenido para cada uno de los escenarios, almacenan la siguiente información:

1. Argumentos de entrada utilizados y partículas que entran en juego.
2. Calor de reacción obtenido para la colisión.
3. Energía cinética para cada una de las partículas que participan en la colisión.

En análisis se va a centrar en condensar la información de cada sample, con la energía del neutrón en particular. De tal manera que, en otras palabras, se analizará la columna correspondiente a la energía del neutrón y se materializará la distribución energética buscada.

Una vez materializada la distribución se estudiará de cara a obtener algunas conclusiones.

```
run calculos.py --help
usage: calculos.py [-h] file_energy

Calculos estadísticos de distribuciones energéticas de los neutrones para
distttinas energías

positional arguments:
  file_energy  Energy data file

optional arguments:
  -h, --help  show this help message and exit

Copyright (C) 2020-2021 Universidad Politécnica de Madrid,
vicente.ledesma.albarran@alumnos.upm.es
```

Figura 2.9. Pantalla --help para la utilización del script Main_collision

2.5.2. RESULTADOS.

Una vez realizadas las simulaciones en 15 escenarios distintos entre los 5 y los 100 keV, cada una de ellas contemplando el millón de muestras, se obtienen los siguientes resultados.

En las próximas figuras se muestran las distribuciones del espectro de neutrones nacidos por fusión para diferentes temperaturas iniciales.

En todas las gráficas se tiene, por una parte, un histograma de color verde que agrupa por bins las energías de nacimiento de los neutrones. Todos estos histogramas están normalizados.

En azul se tiene la curva que resultaría de la unión de los puntos medios de los bins.

Para ello se ha procedido de la siguiente forma para dibujar la figura

$$f(bin) = \frac{1}{2} \cdot (f(i) + f(i + 1))$$

Siendo [i] el límite inferior del bin e [i+1] el límite superior.

De la unión de esos puntos nace la curva.

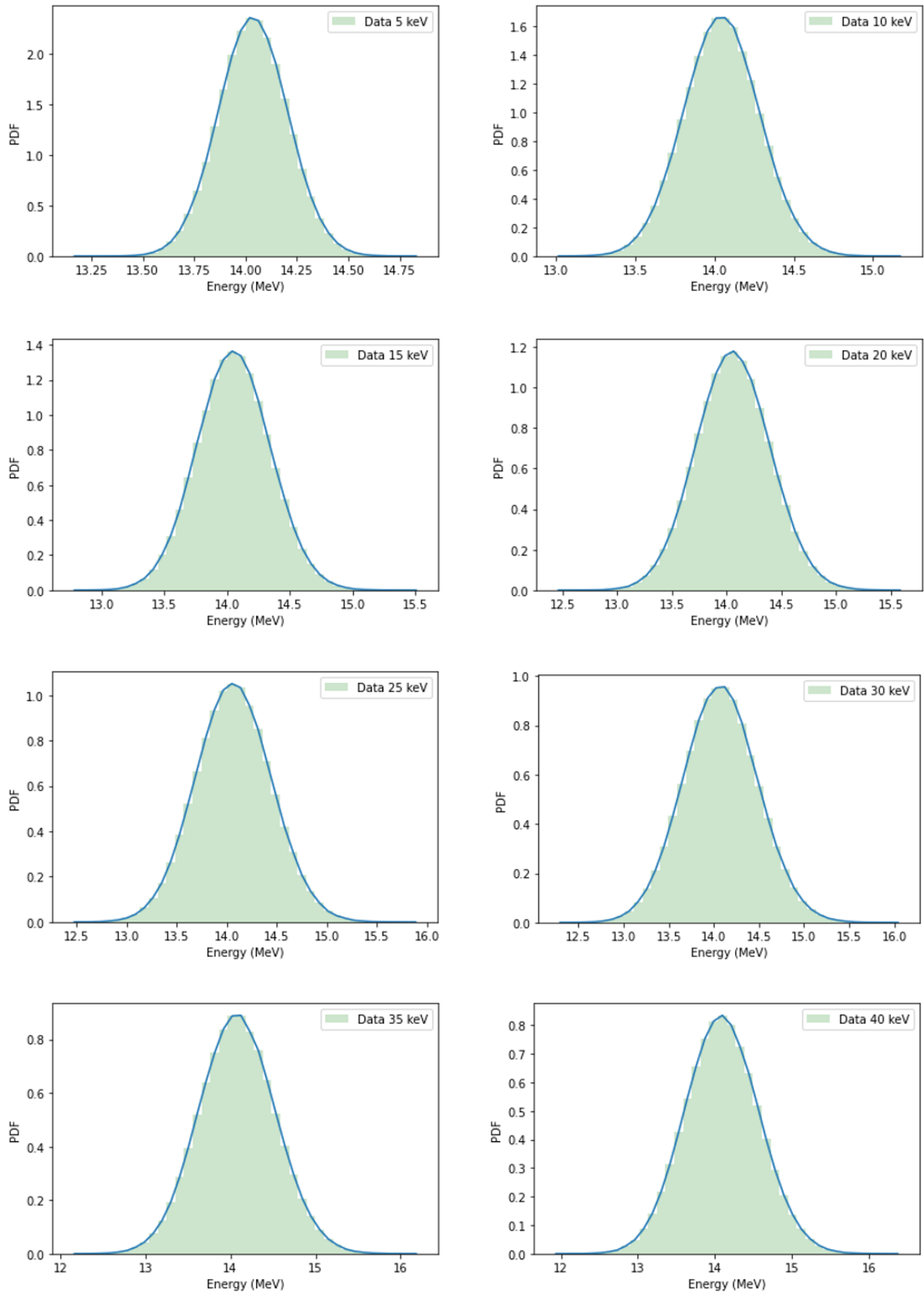


Figura 2.10. Espectro de Energía de nacimiento de los neutrones para energías de 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35 y 40 keV. Histograma y curva asociada a los valores de la simulación.

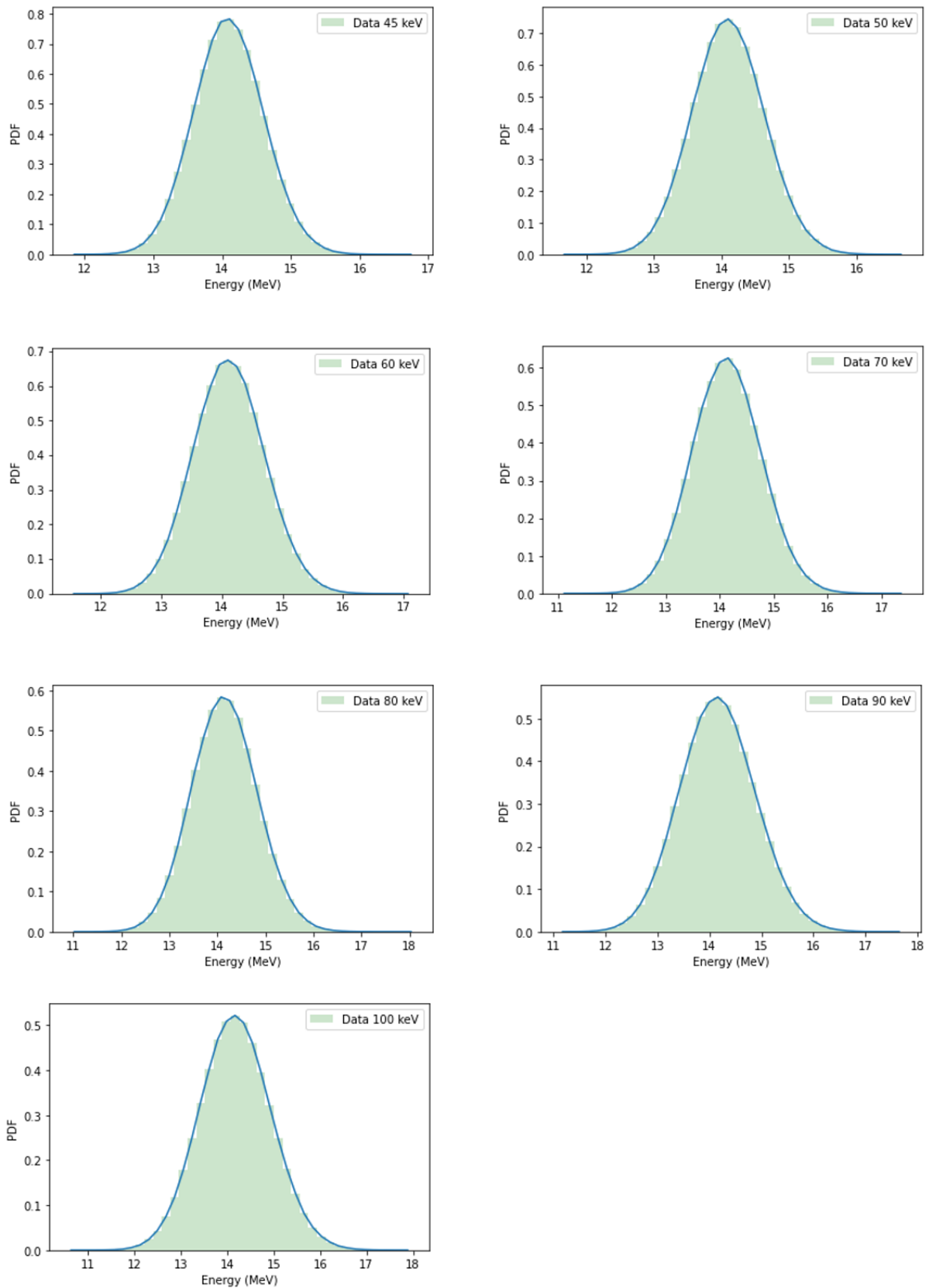


Figura 2.11. Espectro de Energía de nacimiento de los neutrones para energías de 40, 45, 50, 60, 70, 80, 90, 100 keV. Histograma y curva asociada a los valores de la simulación.

Con la idea de darle forma a los datos se diseña un tabla que agrupa los resultados referentes a 4 variables que se consideran indispensables y necesarias.

Para cada energía inicial calculamos:

- Energía media en MeV.
- Varianza .
- Desviación estándar.
- Coeficiente de variación.

Tabla 1. Resumen de los valores más importantes asociados a la simulación del espectro energético de nacimiento de los neutrones

| Energía inicial (keV) | Energía media (MeV) | Varianza | Desviación estándar | Coeficiente de variación |
|------------------------------|----------------------------|-----------------|----------------------------|---------------------------------|
| 5 | 14.03682222 | 0.028387182 | 0.16848496 | 0.01200307 |
| 10 | 14.04415564 | 0.056920749 | 0.238580697 | 0.016987899 |
| 15 | 14.05219944 | 0.085175861 | 0.291849038 | 0.020768922 |
| 20 | 14.05898878 | 0.113911308 | 0.337507493 | 0.024006527 |
| 25 | 14.06651621 | 0.142554993 | 0.377564555 | 0.026841369 |
| 30 | 14.07403926 | 0.171786368 | 0.41447119 | 0.029449342 |
| 35 | 14.08171691 | 0.200609367 | 0.44789437 | 0.031806801 |
| 40 | 14.08936719 | 0.229393066 | 0.478949962 | 0.033993717 |
| 45 | 14.09665522 | 0.257769309 | 0.507709867 | 0.036016336 |

| | | | | |
|------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 50 | 14.10377958 | 0.286615819 | 0.535365127 | 0.037958983 |
| 60 | 14.1187632 | 0.34506552 | 0.587422778 | 0.041605824 |
| 70 | 14.13453585 | 0.404348336 | 0.635883902 | 0.044987958 |
| 80 | 14.14899779 | 0.462995241 | 0.680437536 | 0.048090865 |
| 90 | 14.16439151 | 0.523992966 | 0.723873585 | 0.051105166 |
| 100 | 14.17904928 | 0.582355975 | 0.763122517 | 0.053820429 |

Las principales conclusiones extraídas de la generación energética del espectro neutrónico se pueden agrupar de la siguiente manera:

- Según aumenta la temperatura del medio la energía resultante media aumenta, siendo para 100 keV la mayor de todas.
- Del coeficiente de variación se puede concluir la homogeneidad de los datos, debido a que para todos los casos este es menor al 30 %⁴. La homogeneidad del sistema significará que el promedio es una variable representativa del conjunto de datos. Se puede encontrar el mayor coeficiente de variación en la temperatura de 100 keV con un valor del 5,3 %.
- Se puede observar como la variación y desviación estándar aumentan con la temperatura, esto implica mayores anchos de distribución a medida que la temperatura aumenta. Esta característica se conoce como el ancho Doppler. Se detallará a continuación.

⁴ Por convenio, coeficientes de variación inferiores al 30 % dan lugar a sistemas homogéneos mientras que coeficientes superiores resultan sistemas heterogéneos.

ANCHO DOPPLER.

En cuántica, todo estado excitado tiene un tiempo de vida antes de decaer espontáneamente a un estado de menor energía. En el estado fundamental, una transición entre dos estados no significará la absorción o emisión de luz de una única longitud de onda. En lugar de eso, un rango de longitudes de onda podrá excitar o desexcitar las transiciones cuánticas. Este ensanchamiento natural surge como resultado del principio de incertidumbre de Heisenberg, el cuál indica que hay una incertidumbre en el estado energético del sistema ΔE , debido a la incertidumbre asociada a la vida del estado Δt . La relación, ya conocida, es la siguiente:

$$\Delta E \cdot \Delta t \approx \frac{h}{2\pi}$$

Dónde h es la constante de Planck, de valor $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \frac{m^2 \cdot kg}{s}$

Además del ensanchamiento natural – que realmente es despreciable a efectos prácticos – una distribución puede ensancharse por lo que se conoce como ensanchamiento Doppler, consecuencia del efecto Doppler.

El efecto Doppler – de origen relativista – es el responsable de la variación de frecuencia que percibiría un observador en el sistema de coordenadas de la partícula al desplazarse con una velocidad v con respecto al sistema de medición.

Si la partícula, en este caso el neutrón en cuestión se moviese alejándose del instrumento de medida con velocidad -v la frecuencia de la radiación observada por la molécula v' viene dada por:

$$v' = v \left(1 - \frac{v}{c}\right)$$

En el caso que se esté acercando al aparato de medición:

$$v' = v \left(1 + \frac{v}{c}\right)$$

De esta manera se puede afirmar que dependiendo de la dirección del movimiento del neutrón la frecuencia se puede desplazar hacia frecuencias mayores o menores. Para el conjunto total del espectro de neutrones esto se materializará en un ensanchamiento de la distribución.

Es decir, al tener un número de neutrones o partículas elevado, cada una de ellas con una dirección de movimiento aleatoria e independiente se creará un ensanchamiento de la banda o la distribución que se puede advertir en la gráfica de la distribución

Este efecto, como sea visto, debe ser más acusado en la medida en la que la velocidad aumente; o lo que es lo mismo, en la medida que la energía aumente.

Por ello se puede afirmar que el ancho Doppler no es más que el ensanchamiento que sufre la distribución de energía de los neutrones nacidos por fusión según aumenta la energía. Este

ensanchamiento es mayor que la anchura natural, por lo que enmascara su perfil lorentziano que caracteriza a esta y adopta una forma gaussiana que se aprecia.

Este ensanchamiento se puede ver por una parte se puede ver en las gráficas, y por otro lado en la tabla de resultados, reflejado en la desviación estándar y variación. [3]

3. CAPÍTULO 3. SIMULACIONES EN *GEANT4*.

Geant4 es un programa informático desarrollado por la Organización Europea para la Investigación Nuclear (CERN) que posee un conjunto de herramientas para la simulación del paso de partículas a través de la materia. Sus usos son variados, incluyendo campos relacionados con la física de altas energías, espacio y radiación o tecnología médica. Además, *Geant4* es un software de libre distribución, por lo que puede ser utilizado sin necesidad de licencia

Geant4 es el software que se ha sido utilizado durante la ejecución del presente proyecto para estudiar la interacción de los neutrones desde que nacen hasta que escapan del blanco de fusión por confinamiento inercial.

3.1. FÍSICA DEL *GEANT4*.

Dentro de *Geant4* existen diferentes módulos, cada uno de ellos centrados en una física en particular. A estos módulos se les llamará paquetes y en este caso se ha decidido utilizar de manera específica el paquete *physics.package = "QGSP_BERT_HP"*

Este paquete está formado por *QGSP_BERT* que es el paquete más recomendado para parametrizar altas y bajas energías. A menos de 10 GeV, el caso de este proyecto, trabaja con cascadas de Bertini. Las cascadas de Bertini son un modelo que determina los secundarios producidos en la interacción de la partícula y calcula el momento de las partículas implicadas.

El añadir *_HP* al paquete significará particularizarlo en un modelo de alta precisión para neutrones, lo que hace evidente su selección. Además, este paquete complementario es muy útil para el transporte de neutrones menores a 20 MeV hacia energías térmicas, como sucede en el presente estudio.

Si se bucea en la física que incluye este paquete se puede concretar qué tipo de interacciones se van a considerar, de esta forma se podrá, en futuras conclusiones, dar forma y explicación a posibles fenómenos que dependerán de las interacciones neutrón materia.

Interacciones con las que trabaja el paquete:

Efecto foto eléctrico para radiación gamma. El efecto foto eléctrico significará la emisión de electrones por un material al incidir sobre él la radiación electromagnética.

Efecto Compton para radiación gamma. El efecto Compton conlleva la pérdida energética de gamma a la vez que su longitud de onda aumenta

Dispersión Rayleigh para radiación gamma. La dispersión Rayleigh es la dispersión de la radiación electromagnética por partículas cuyo tamaño es mucho menor que la longitud de onda de los fotones dispersados y es resultado de la polarización eléctrica de las partículas

Multiple Scattering (MSC) Para electrones, protones, partículas α y positrones. La dispersión múltiple, por su traducción al castellano, se refiere al fenómeno en el que las partículas dispersadas se vuelven a dispersar por otras partículas vecinas.

Ionización para electrones, protones, positrones, partículas α e iones genéricos⁵. La ionización significará la alteración de las partículas por la alteración de las capas electrónicas y el movimiento de los electrones

Radiación de frenado (Bremsstrahlung) para electrones, protones y positrones. La radiación de frenado afectará a las partículas cargadas que se desviarán al pasar cerca de otra partícula cargada, que la desviará generando una deposición de energía

Dispersión coulombiana – de Rutherford – para electrones, protones y positrones. Materializa la dispersión que sufren las partículas eléctricamente cargadas al acercarse a un centro de dispersión también eléctricamente cargado

Aniquilación para positrones. La aniquilación electrón – positrón ocurre cuando ambas partículas colisionan, el resultado es la aniquilación de ambas partículas y la creación de dos fotones de rayos gamma.

Producción de pares para protones. La producción de pares es un fenómeno que consiste en un fotón que se convierte en un electrón y un positrón cuando el rayo gamma ingresa en el campo eléctrico intenso cercano al núcleo de un átomo. Este fenómeno está estrechamente relacionado con la aniquilación.

Todos estos fenómenos quedan definidos en *Geant4* para un rango de energías variable según el tipo de partícula.

Es importante conocer estos efectos ya que tras la fusión deuterio – tritio se darán muchos fenómenos e interacciones que *Geant4* simula y tiene en cuenta. Aunque las interacciones de las partículas anteriormente analizadas son remarcables y se deben tener en cuenta a la hora de explicar posibles efectos que terminen por afectar a los neutrones, las interacciones más importantes a tener en cuenta son las relacionadas con los neutrones.

Para Tritio hay dispersión elástica e inelástica, para alfa hay dispersión elástica e inelástica mientras que para iones genéricos hay dispersión inelástica y decaimiento radiactivo

Para el neutrón *Geant4* considera los siguientes fenómenos:

- Dispersión elástica
- Dispersión inelástica
- Captura neutrónica
- Fisión

⁵ Los iones genéricos, en este caso, serán tanto deuterio como tritio.

- Decay

El decaimiento del neutrón no se considera de aquí en adelante porque el tiempo en el que se produce la simulación no es comparable con la vida media del neutrón.

3.2. INPUT PARAMETERS.

Para lanzar las simulaciones es necesario definir unos parámetros de entrada para que *Geant4* pueda llevar a cabo las simulaciones. Es por ello que durante la primera fase de este tercer capítulo se van a definir todos los parámetros de entrada necesarios, así como la justificación del cálculo de cada uno de ellos. Posteriormente se procederá a lanzar la simulación para que por último se puedan sacar las conclusiones derivadas de todo el trabajo que se presenta en este proyecto.

Los parámetros de entrada definen el blanco y, por lo tanto, son los responsables de definir aspectos como la composición material del blanco, su geometría y la energía. En términos de composición material se define un blanco cuyos elementos componentes son 50 % de deuterio y 50 % de tritio.

Se define el blanco por capas de densidad constante y concéntricas. Visualmente se puede apreciar un esquema básico del blanco diseñado en la siguiente Figura 3.1.

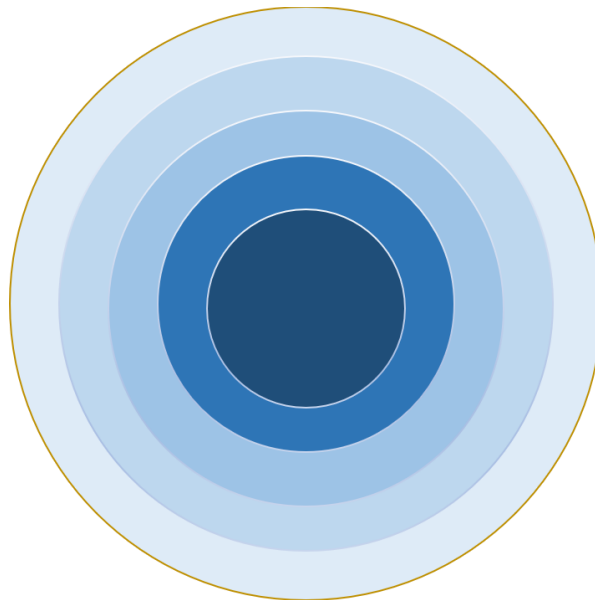


Figura 3.1. Esquema conceptual de un blanco por capas para fusión por confinamiento inercial.

Es por ello que los parámetros de entrada a definir por capas son los siguientes:

- Radio.
- Densidad
- Temperatura
- Energía media
- Desviación estándar
- Weight

Se definen 15 capas para el caso a estudiar, ello se debe a que se considera que información acerca de la temperatura y densidad en el momento estudiado queda correctamente definida y representada por ese número de capas.

El radio en cada capa se define mediante el radio exterior, entendiéndose que el radio interior coincide con la capa interior. Para el caso de la capa más interior se entiendo que el radio interior el nulo.

Como se ha comentado tanto la densidad como la temperatura se han extraído del artículo mencionado en [1].

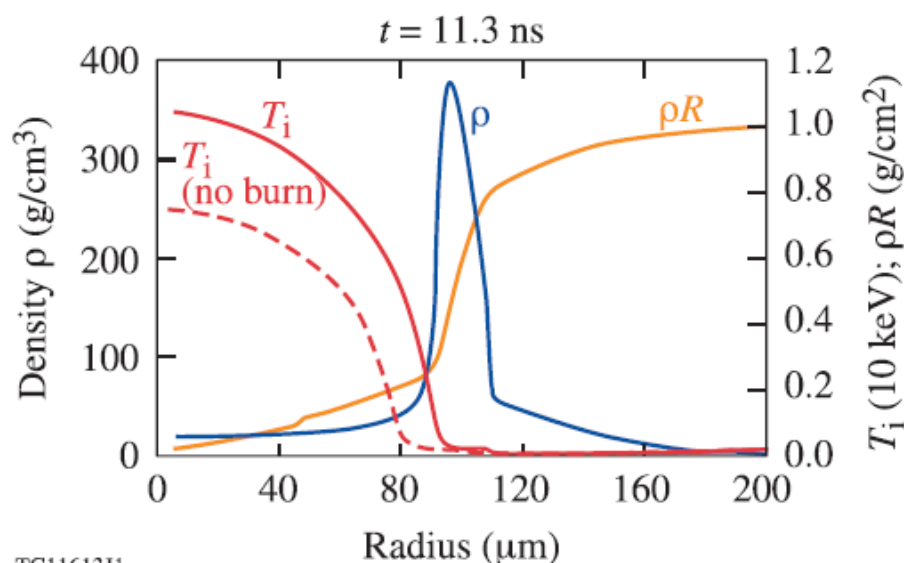


Figura 3.2. Perfiles de la densidad de masa (ρ), densidad de área (ρR), temperatura iónica (T_i) no burn), temperatura iónica de quemado (T_i) en función del radio considerando la deposición de partículas α .

En la figura extraída del artículo se pueden apreciar varias curvas interesantes para un instante $t = 11,3$ ns. En ese instante de la compresión es en el que vamos a centrar nuestro estudio de la primera aproximación del espectro neutrónico.

En la figura se contempla la deposición de partículas alfa y su efecto en la elevación de temperatura. La aproximación sin contemplar las partículas se muestra en la curva de trazo discontinuo, mientras que la que contempla esa deposición energética es la de trazo continuo.

Las curvas de mayor interés para nuestro proyecto son: la curva azul que define la densidad (ρ) y la curva roja de la temperatura iónica continua (T_i)

La información que se obtiene de la figura de [1] es meramente cualitativa, es decir se pueden extraer algunas conclusiones del estado del blanco de fusión por confinamiento inercial pero no se tiene información cuantitativa. Esto último significa que, si para un radio concreto se quiere saber la densidad, con la información aportada por el artículo es imposible.

Para resolver este inconveniente se acude a *G3Data*, que es un código software que permite dar valores numéricos a los puntos de la curva que se requieran. Para ello únicamente se debe cargar la gráfica a analizar, se seleccionan los ejes y valores de los intervalos en ellos – que pueden verse en [1] – y se seleccionan cuidadosamente el número de puntos que se estimen necesarios para poder representar a la curva.

En nuestro caso seleccionamos un total de 30 puntos para cada curva, el software devuelve como información unos vectores con los que construir la curva. Con estos vectores se va a construir la curva en Python, y se va a realizar una interpolación para poder tener información sobre temperatura y densidad para cualquier radio.

Cabe mencionar que también hubo que realizar una extrapolación para poder obtener información en el radio nulo, ya que de la figura de [1] no se pudo extraer la información necesaria para interpolar hasta ese valor.

Gráficamente se representaron las figuras en base a los datos obtenidos de *G3Data*.

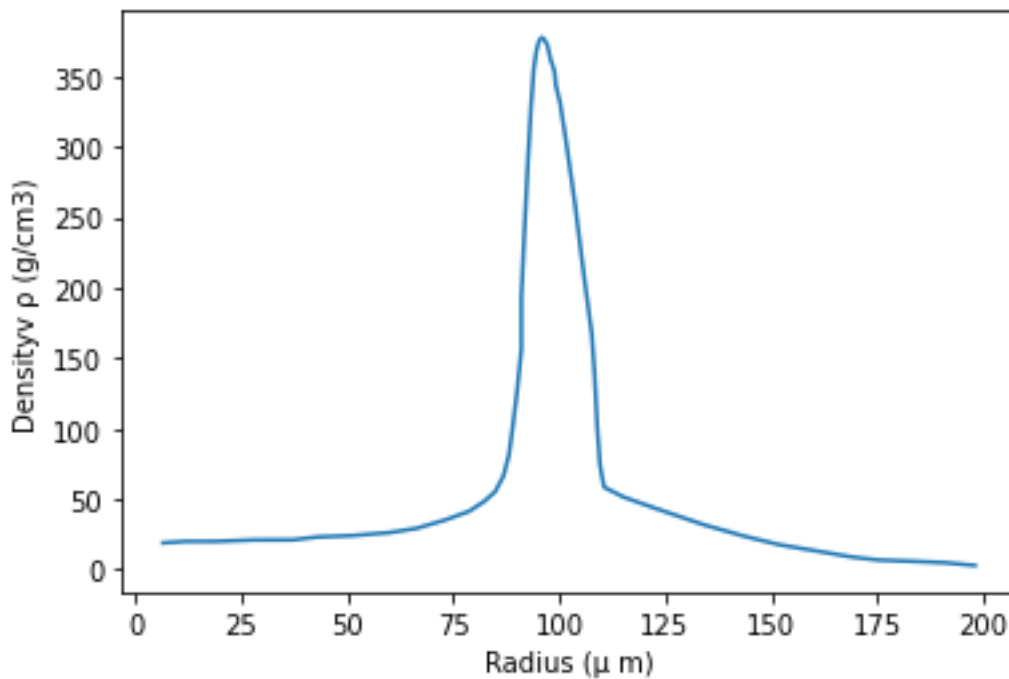


Figura 3.3. Perfil de densidad ρ (g/cm^3) del blanco en función del radio (μm) a utilizar en las simulaciones.

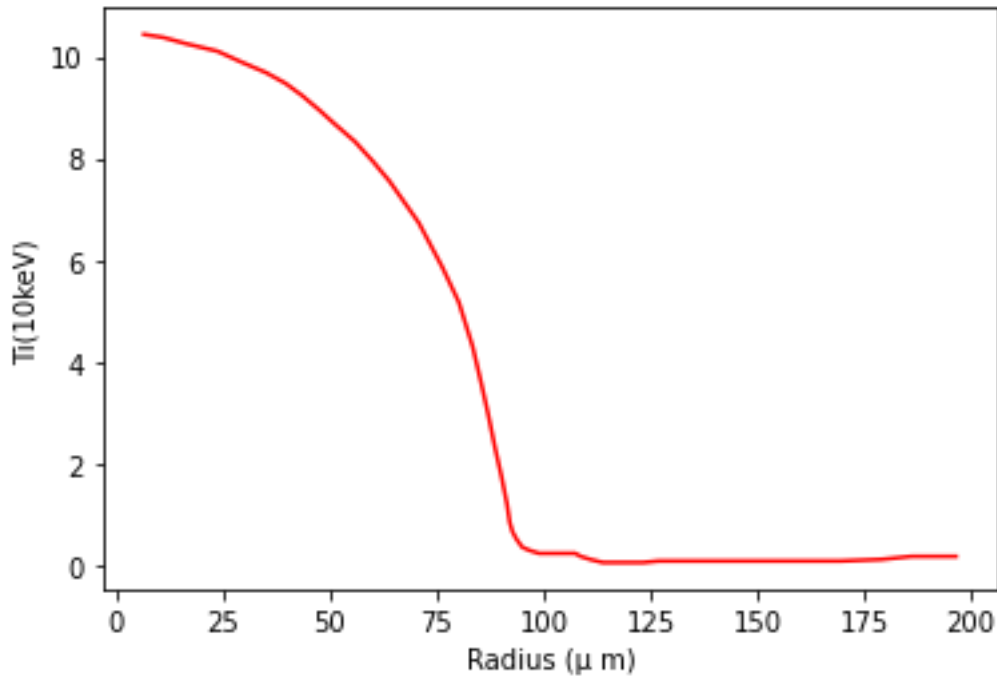


Figura 3.4. Perfil de temperatura iónica de quemado (T_i) en función del radio a utilizar en las simulaciones.

En este punto se debe resaltar la metodología que se ha seguido en el proceso de interpolación, ya que ha sido un proceso necesario para el cálculo de los inputs. La interpolación ha sido necesaria porque, al tener de cada uno de los inputs información de determinados puntos, era completamente vital obtener información de la curva completa. Al dividir en 15 capas se hizo una división uniforme del radio del blanco diseñado, una vez hecha la división de todas las capas se debía calcular el valor para cada radio de las magnitudes de entrada.

Otro punto importante a destacar en el desarrollo de cálculo por capas ha sido que una vez interpolado hemos obtenido los valores de las magnitudes en los límites de cada capa, que al final es lo que el array de los radios simboliza.

A pesar de no ser rigurosamente cierto, como aproximación se ha tomado que cada capa tiene una temperatura y densidad constante, así como de las demás variables. Dicho de otra forma, entre dos radios que delimitan una capa se ha asumido que la densidad y temperatura no varían.

Al tener los valores de densidad y temperatura en los puntos que delimitan la capa se han calculado los valores medios en cada capa. Este cálculo no es directo, no es proporcional por motivos obvios derivados de la caracterización del volumen de la capa. Por lo que el calculado promedio de la temperatura y densidad ha requerido de la siguiente integración. En el siguiente ejemplo se trata el cálculo promedio de la densidad.

$$den_{prom} = \frac{\int_{r_1}^{r_2} f den(x) \cdot f vol(x) dx}{\int_{r_1}^{r_2} f vol(x) dx}$$

Siendo:

- den_{prom} : la densidad promedio de la capa comprendida entre r_1 y r_2 .
- $fden(x)$: la función de densidad interpolada.
- $fvol(x)$: el diferencial de volumen de la capa.

$$fvol(x) = 4\pi \cdot x^2$$

A pesar de haberse relatado el caso particular de la densidad, este mismo cálculo se realizó de manera análoga para el cálculo de la temperatura promedio, energía promedio y desviación estándar promedio.

Por otra parte, la energía que caracteriza cada capa se calculó partiendo de la información que durante el capítulo 2 se recabó. A lo largo de todo ese capítulo se desarrolló el método de cálculo que posteriormente dio lugar a la creación de diferentes espectros neutrónicos iniciales.

Para poder crear la curva energética se creó en primer lugar un archivo de texto compuesto por dos columnas de datos. En una primera columna se situó la energía del ambiente inicial en keV mientras que en la segunda estaba compuesta por las energías medias de salida de los neutrones de cada espectro.

De esta manera se tenía una relación entre temperatura – energía ambiente inicial – y energía de salida de los neutrones. Una vez que ya se habían calculado anteriormente el array de 15 temperaturas – una por capa – se procedió a interpolar de igual manera a la expresada anteriormente y se halló la energía de salida de los neutrones para cada capa en función de la temperatura a la que estaba la capa determinada. Esto generó de nuevo un array de 15 componentes, uno por capa.

Siguiendo idéntico planteamiento se calcula el array compuesto la desviación estándar de cada capa. Se creó el archivo de texto que relacionaba desviaciones estándar con las temperaturas del medio para posteriormente interpolar y construir el array con la desviación estándar de cada capa.

Por último, se calculó Weight, que no es otra cosa que la probabilidad de que un neutrón nazca en una capa concreta. Este cálculo de la probabilidad de nacimiento debe incluir el efecto de la tasa de reacción.

$$P = K \cdot (r_2^3 - r_1^3) \cdot W$$

Dónde:

- P es la probabilidad de nacimiento del neutrón en una capa delimitada entre r_1 y r_2 .
- K es una constante de normalización. *Geant4* normaliza por sí mismo por lo que no se calculará.
- r_2 y r_1 simbolizan los radios que definen la capa concreta.
- W es la tasa de reacción, que se define de la siguiente forma´

$$W = \langle x_s \cdot v \rangle \cdot n_D \cdot n_T$$

$\langle x_s \cdot v \rangle$ representa la sección eficaz y se calcula aplicando la formula de Duane de 5 parámetros. La fórmula de Duane se ha extraído de [4] y es la siguiente:

$$\sigma_f(E) = \frac{1}{E} \cdot \left(\frac{1}{\exp\left(\frac{A_1}{\sqrt{E}}\right) - 1} \right) \cdot \left(\frac{A_2}{(A_3 \cdot E - A_4)^2 + 1} + A_5 \right)$$

En [4] se especifica para la reacción deuterio tritio los valores de los coeficientes:

- $A_1 = 45,95$
- $A_2 = 50200$
- $A_3 = 0,01368$
- $A_4 = 1,076$
- $A_5 = 409$

Una vez realizado esto se tiene la sección eficaz únicamente dependiendo de la energía. Como la energía ya se tiene calculada por capas, ya se tiene las secciones eficaces por capas

Para completar el cálculo de la tasa de reacción W calculo n_D y n_T , que representan el número de deuterios y tritios por unidad de volumen respectivamente; de nuevo el cálculo será por capas por lo que necesito conocer la densidad de cada capa, que anteriormente ha sido calculada.

Al ser el blanco una mezcla al 50% de deuterio tritio sé conoce que su peso atómico será el siguiente

$$m_{prom} = \frac{1}{2}m_D + \frac{1}{2}m_T$$

Si se quiere calcular el número de partículas para una capa n_i por unidad de volumen – que es el objetivo de este cálculo – se puede realizar de la siguiente manera:

$$n_i = \frac{den_{prom}}{m_{prom}} \cdot N_A$$

Dónde N_A es el número de Avogadro, $6,022 \cdot 10^{23}$.

Se sabe que, si n_{TOT} es el número de partículas totales, entonces:

$$n_{TOT} = n_D + n_T$$

Adicionalmente, como $n_D = n_T$

$$n_{TOT} = 2n_D$$

$$n_D = \frac{n_{TOT}}{2}$$

Y por consiguiente la tasa de reacción quedaría de la siguiente forma:

$$W = \langle x_s \cdot v \rangle \cdot \frac{n_{TOT}^2}{4}$$

Por lo que ya se tiene toda la información para calcular la probabilidad de nacimiento del neutrón en cada una de las 15 capas.

Se debe destacar el hecho de que en este cálculo no hay que promediar – integrar – como en los anteriores ya que para el cálculo de los iones totales por unidad de volumen ya se utiliza la densidad promedio de cada capa; y para el cálculo de la sección eficaz se utiliza la energía promedio de cada capa.

Aun así, con el fin de asegurar el correcto cálculo de una variable tan sensible y de tanta importancia en las simulaciones, se recalculó integrando para ver si los cálculos eran correctos, concluyendo de manera satisfactoria.

Es por ello que con toda la información necesaria para el input correctamente calculada se podrá definitivamente construir el archivo de entrada para que *Geant4* lleve a cabo las simulaciones y genere un output que se pueda analizar y del que se puedan sacar conclusiones relacionadas con el presente proyecto.

3.2.1. SECCIONES EFICACES.

Otro de los puntos a tener en cuenta de cara un posterior análisis de los resultados es el de las secciones eficaces de los fenómenos relacionados con los neutrones.

De *Geant4* se sacan los archivos con los que, de manera interna, trabajan las simulaciones. Se sacarán por lo tanto archivos de texto que tienen que ver con los siguientes fenómenos para el caso particular que atañe este proyecto.

Interpretando los archivos de texto que utiliza *Geant4* se han dibujado las gráficas correspondientes a las distintas secciones eficaces contempladas para los neutrones en cada una de las 15 capas en las que se divide el blanco.

El primer comentario que se puede hacer es que a pesar de haber tenido en cuenta la fisión y haber tratado el archivo de texto correspondiente a este fenómeno, no se aprecia su sección eficaz.

Además, la sección eficaz microscópica sería la misma para todas las capas del blanco si no se tiene en cuenta el efecto de la temperatura, que podría tener algo que decir; es la macroscópica – dependiente de la densidad – la que varía en cada capa y se define con la letra Σ .

Una manera de entender la sección eficaz macroscópica es la de relacionarla con el recorrido libre medio. El recorrido libre medio es la distancia que una partícula puede recorrer sin interaccionar. La relación que existe entre ambas magnitudes es inversamente proporcional, es decir, a mayor sección eficaz macroscópica menor recorrido libre medio. Se expresa de la siguiente manera:

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma}$$

A continuación, en la Figura 3.5 y Figura 3.6 se dibujan las gráficas correspondientes a las secciones eficaces de todas y cada una de las capas del blanco. Ambos ejes se encuentran expresados en escala logarítmica, dando como resultado:

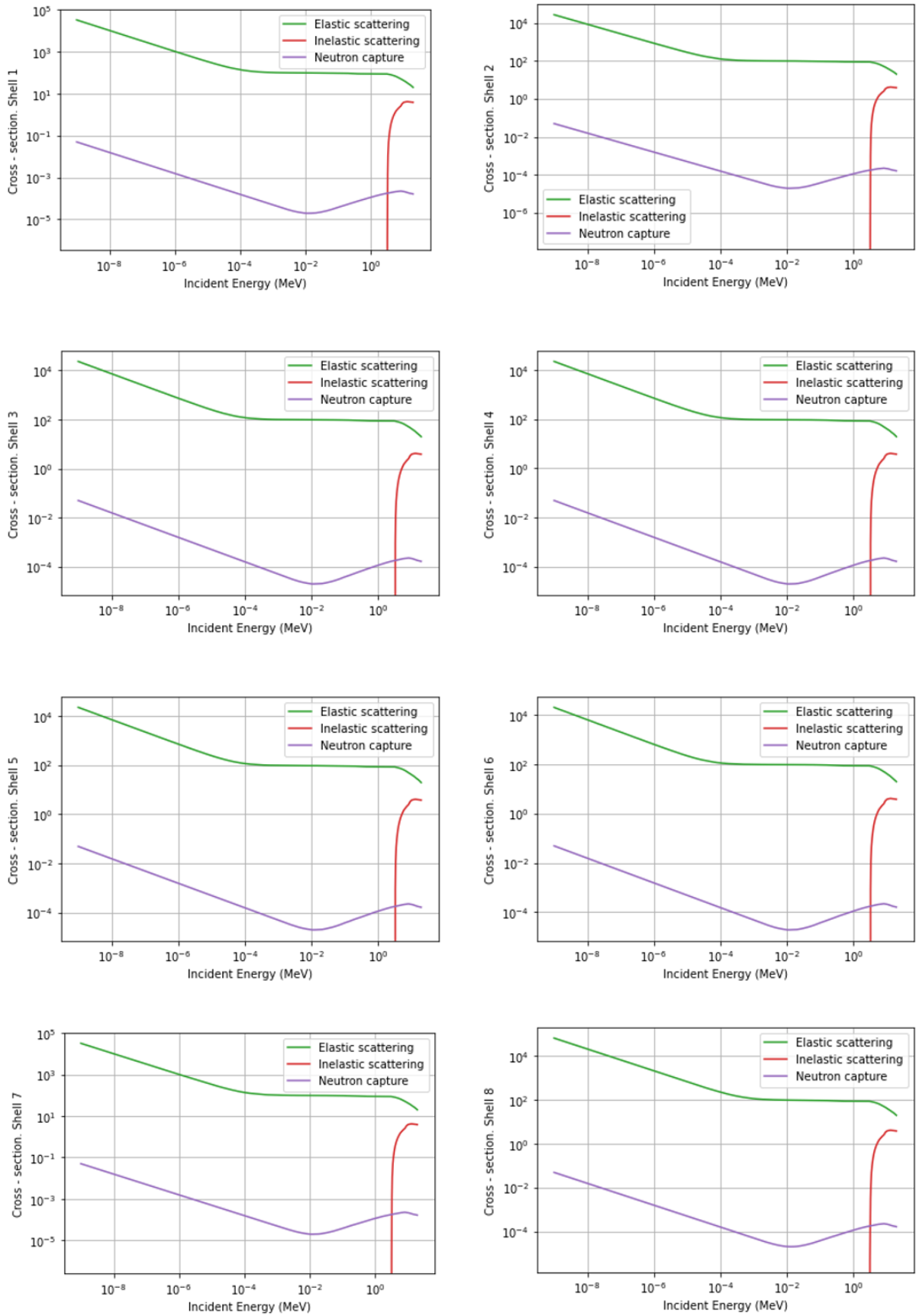


Figura 3.5 Cálculo de las secciones eficaces asociadas a los neutrones en función de la energía incidente para las capas 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7 y 8.

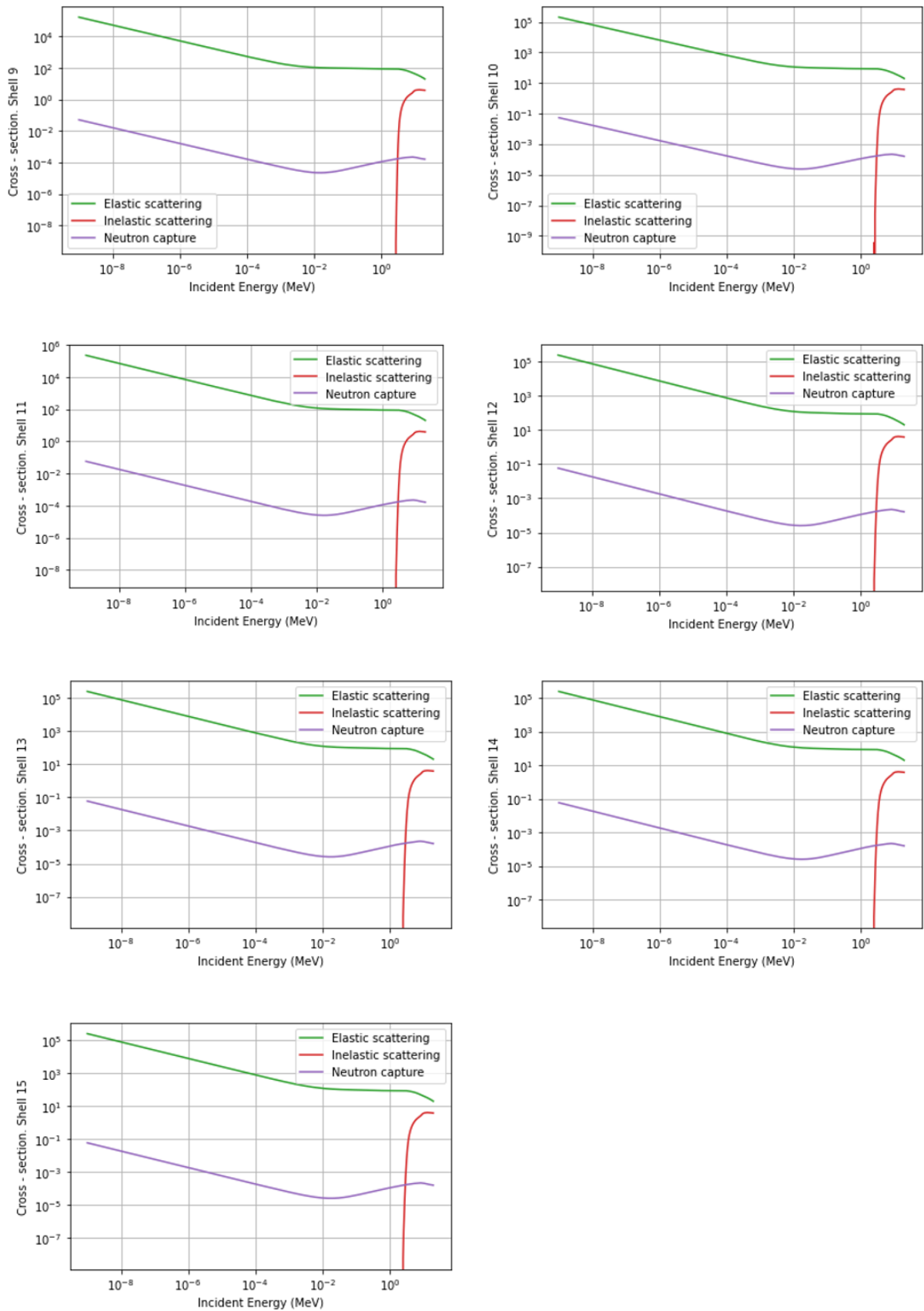


Figura 3.6. Cálculo de las secciones eficaces asociadas a los neutrones en función de la energía incidente para las capas 9, 10, 11, 12, 13, 14 y 15.

Para las 15 capas diseñadas se observa que las secciones eficaces son semejantes a nivel cualitativo. Para entender un poco lo que sucede con las secciones eficaces se pasa a comentar una de ellas a modo de muestra. Por ejemplo, para la capa 7 se tienen las siguientes secciones eficaces:

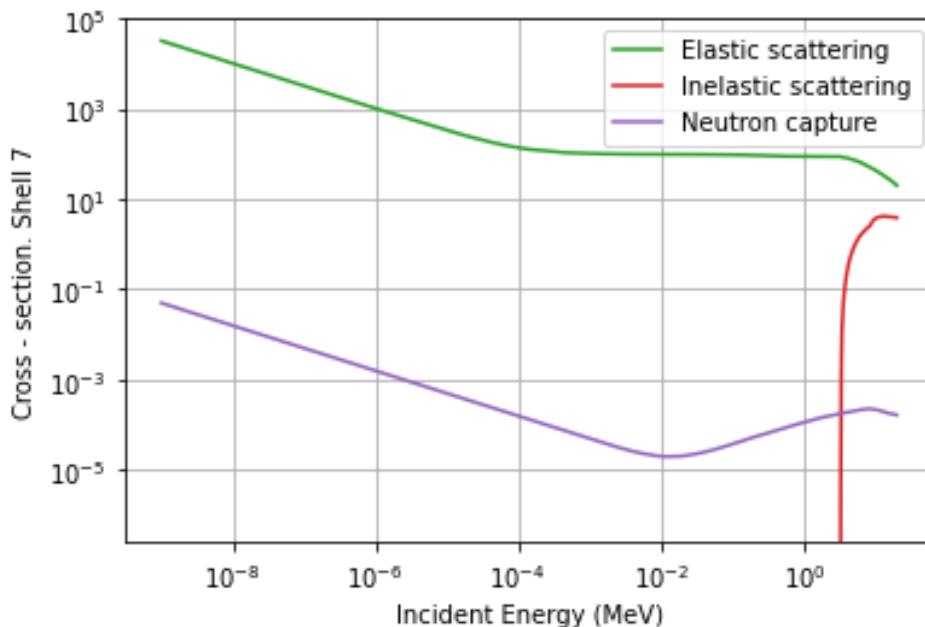


Figura 3.7. Cálculo de las secciones eficaces asociadas a los neutrones en función de la energía incidente para la capa 7.

Para esta capa se pueden advertir 3 fenómenos:

El primero de ellos es el scattering elástico – dispersión elástica – que es el fenómeno por el cual el neutrón va perdiendo energía según choca con otras partículas de manera elástica. Si se analiza su curva se puede ver como la probabilidad de que suceda la dispersión elástica disminuye según aumenta la energía. A pesar de esa disminución es el fenómeno, más probable de ocurrir.

Para el inelastic scattering – dispersión inelástica – se observa que tan solo a energías elevadas está presente

Por otra parte, el neutrón capture – captura neutrónica – parece ser un proceso que en principio evoluciona como la dispersión elástica en zonas de menores energías, aunque siendo su probabilidad considerablemente menor. Sin embargo, se puede ver claramente como en la zona de energías elevadas la curva cambia su tendencia y crece con la energía aumentando su sección eficaz con esta a energías elevadas.

A grandes rasgos, todas las capas del blanco se comportan de igual manera; diferenciándose en la magnitud de las secciones eficaces para cada energía.

3.2.2. RECORRIDO LIBRE MEDIO

A continuación, en base a los datos de secciones eficaces microscópicas se han estudiado los recorridos libres medio para cada fenómeno por capas. Se hicieron comparaciones de como variaba, entre diferentes capas, el recorrido del neutrón antes de interactuar. La comparación visual dio los resultados que se muestran a continuación.

Para calcular un recorrido libre medio se necesita hacer uso de las secciones eficaces macroscópicas. Para su cálculo se necesitará de datos como la densidad, masa del neutrón, sección eficaz microscópica y el número de Avogadro.

El recorrido libre medio responde a la siguiente expresión para una capa cualquiera i:

$$\lambda = \frac{1}{\frac{N_{av} \cdot \rho_i \cdot \sigma_i}{m_n}}$$

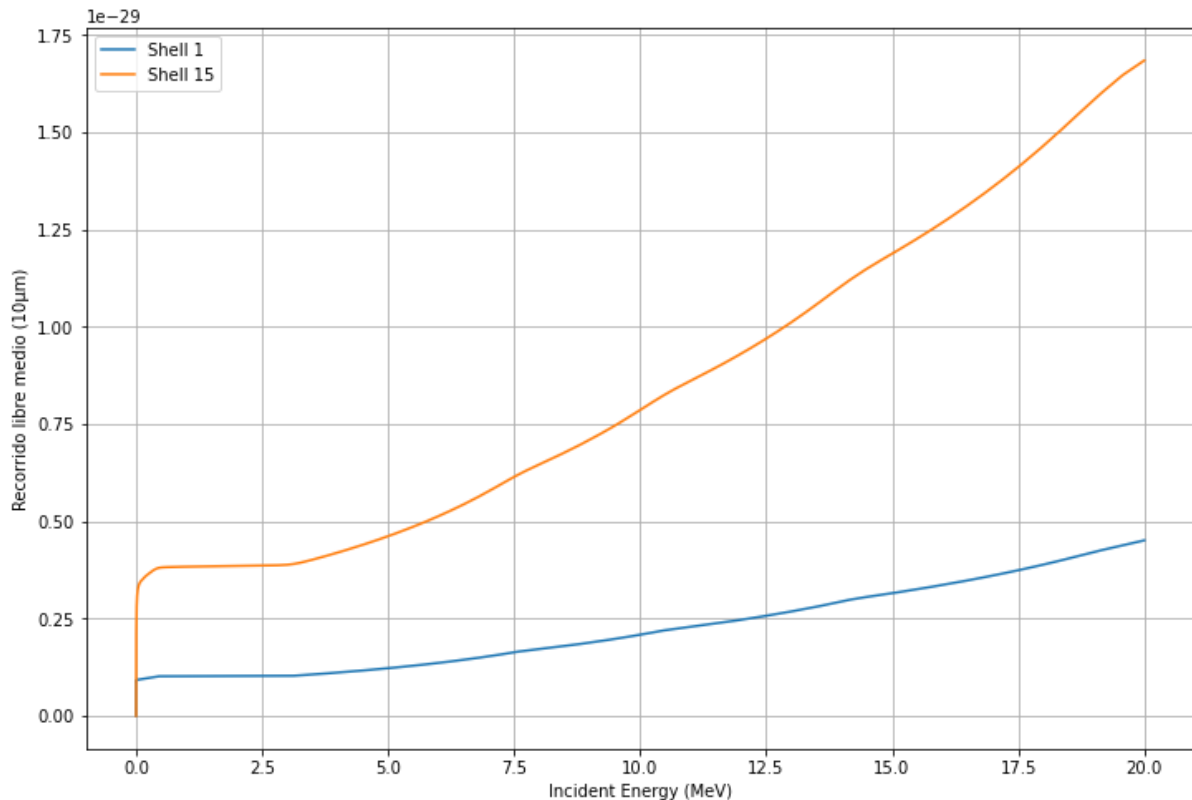


Figura 3.8. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión elástica entre la capa 1 y la 15 en función de la energía del neutrón.

En esta primera Figura 3.8 que representa el recorrido libre medio de un neutrón frente a una posible dispersión elástica – se observa cómo según aumenta la energía del neutrón el recorrido libre medio es mayor, es decir, tarda más en interactuar o recorre más distancia teóricamente antes de hacerlo. También se puede apreciar que la interacción es posible para cualquier energía.

Además, se puede destacar la diferencia entre la capa 1 – más interior – y la capa más exterior número 15. Se observa que de normal en la capa interior es mucho más probable la dispersión elástica del neutrón que en la exterior.

Las capas entre la interior y exterior presentar un comportamiento análogo situado entre ambas y se ha decidido no representarla con el objetivo de, por ser un análisis cualitativo, se más claros y poder apreciar mejor las diferencias

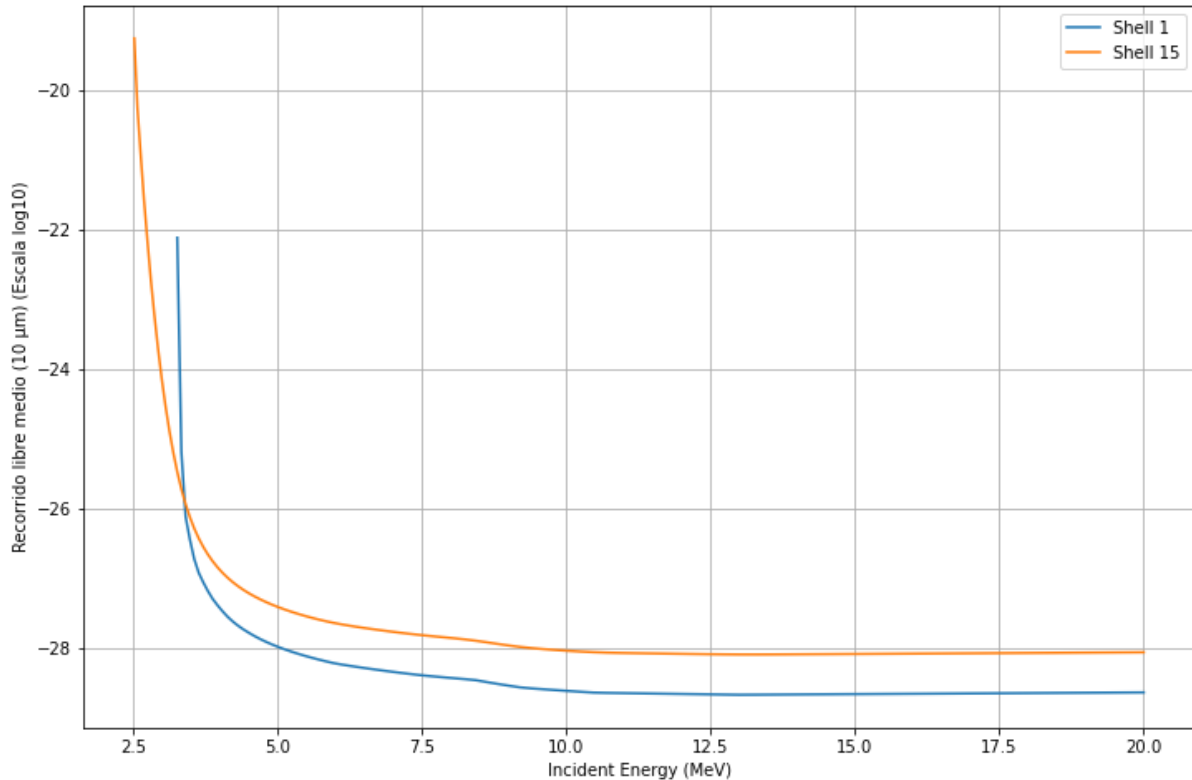


Figura 3.9. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión inelástica entre la capa 1 y la 15 en función de la energía incidente del neutrón.

Para la dispersión inelástica de la Figura 3.9 – representada en escala logarítmica – se observa un fenómeno distinto, se pintarán más curvas para poder analizarlo en profundidad.

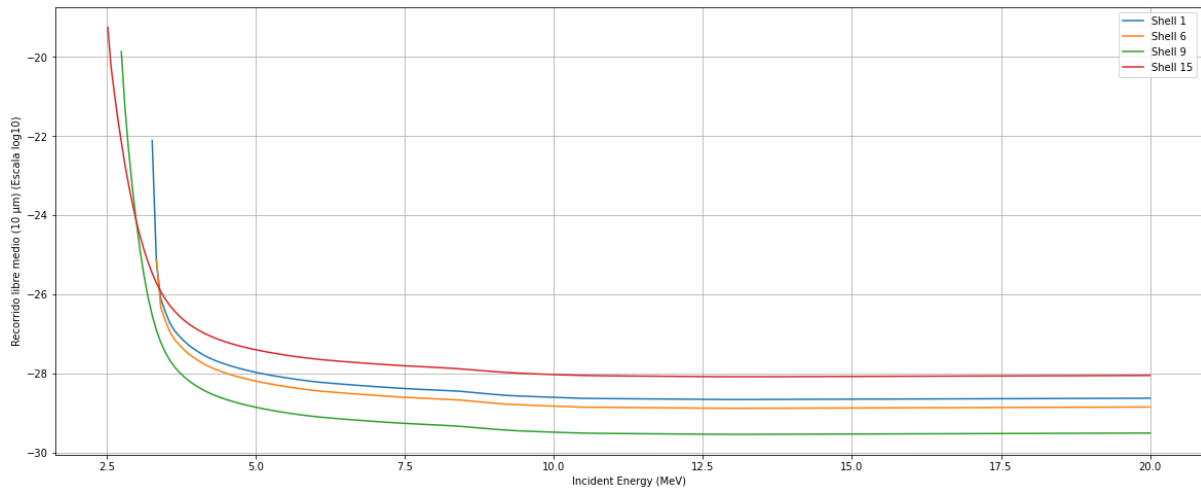


Figura 3.10. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión inelástica entre la capa 1, 6, 9 y 15 en función de la energía del neutrón.

En la Figura 3.10 ya se comienzan a apreciar claramente algunos patrones. En primer lugar, se observa como para energías más bajas el recorrido libre en capas más externas es mayor. Se puede ver como la capa 15 seguida de la 9 son las capas menos probables de ocurrir la dispersión inelástica a energías de 2,5 MeV.

Por otra parte, a altas energías, se puede ver como todas las curvas se estabilizan en torno a un valor de recorrido libre medio; sin embargo, no se puede establecer un patrón según las capas ya que, por ejemplo, la capa 9 y 15 son la que más y menos recorrido libre medio tienen respectivamente, mientras que la capa 6 y 9 se encuentran en un punto medio.

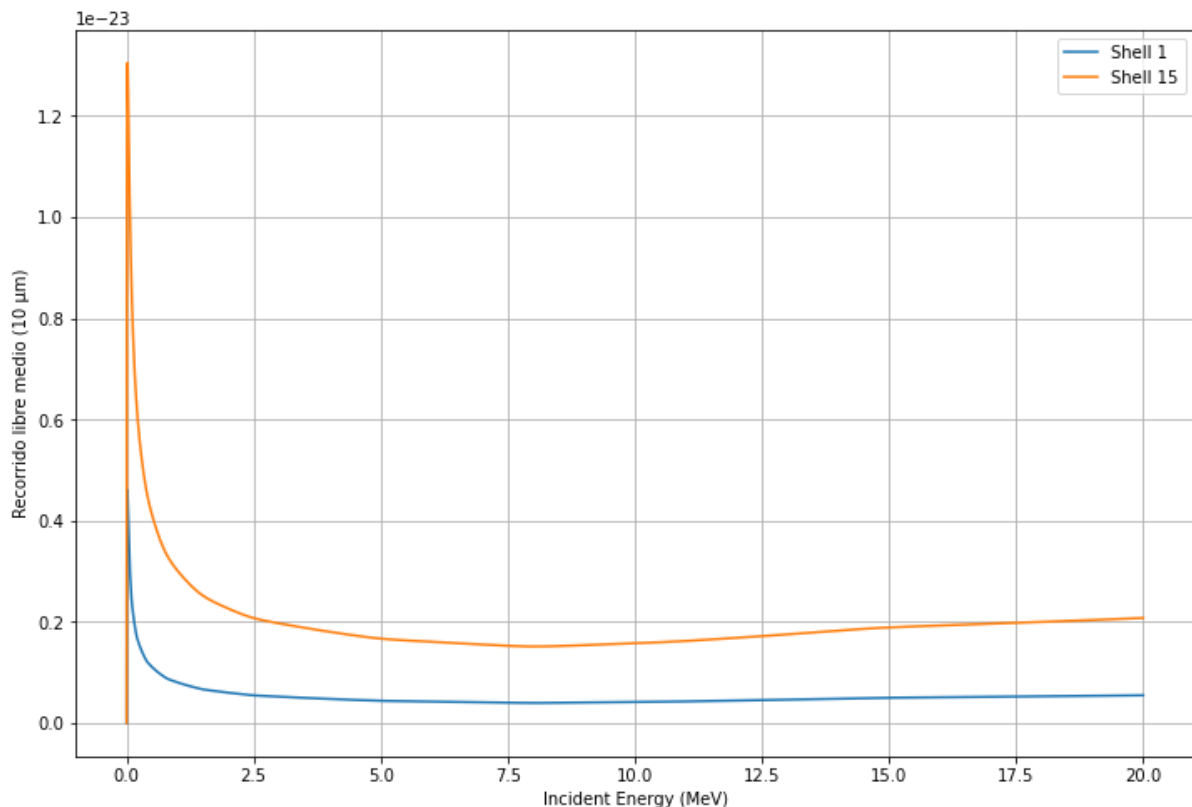


Figura 3.11. Comparación del recorrido libre medio asociado con la dispersión inelástica entre la capa 1 y la 15 en función de la energía del neutrón.

La captura neutrónica por su parte tiene un comportamiento entre capas parecido al de la dispersión elástica, es decir, sus capas tienen un comportamiento parecido y proporcional. Es por ello que se han pintado únicamente las capas límite con la idea de ilustrar el comportamiento límite.

De las curvas se puede concluir que la captura neutrónica es más probable en capas interiores que en exteriores, y que además para bajas energías es un suceso muy poco probable aumentando su repercusión a elevadas energías.

Como conclusión se puede advertir que el factor temperatura solo marca una pequeña diferencia en los procesos de captura neutrónica

3.3. OUTPUT.

Una vez se tuvo lista toda la información se procedió a lanzar la simulación del proceso en *Geant4*. Las simulaciones se llevaron a cabo con el apoyo técnico de un ordenador emplazado en el *Instituto de Fusión Nuclear Guillermo Velarde (IFN)* que podía aportar una mayor capacidad de computación.

La simulación dio como resultado un archivo de texto con alrededor de 13 millones de historias, eso significa que se generaron 13 millones de neutrones y cada uno tuvo su historia particular.

Es decir, se generaron los 13 millones de neutrones y se siguió la historia individual de cada uno de ellos con sus interacciones.

En forma de output el software nos genera dos archivos, el de energía inicial – *init_energy* – y el de energía de salida – *output_energy*. El de energía inicial agrupa la simulación de las energías de nacimiento de los neutrones mientras que el de energía de salida agrupa las energías con las que los neutrones abandonan el sistema, tras diferentes procesos en los que hay transferencia.

El capítulo 2 y lo llevado a cabo en *init_energy* es diferente. En el capítulo 2 calculamos una distribución energética y se simuló el nacimiento de los neutrones; sin embargo, en *init_energy* para una temperatura determinada nacen con una distribución, es decir, cada Shell que conforma el blanco tiene una temperatura distinta, depende de si nace en una Shell o en otra la distribución cambia un poco y ya no es asimilable a lo que se vio en el capítulo 2.

El aspecto del archivo de texto es un archivo con información, estructurado en cinco columnas de la siguiente forma:

- *Edge_left*. Límite izquierdo del bin energético
- *Edge_delta*. Ancho del bin, será uniforme dando lugar a bins de idéntico ancho
- *Counts*. Número de cuentas. Representa el número de neutrones que aparecen en un bins energético
- *Accumulated variable*. Variable acumulada, es una cuneta por el peso estadístico de la partícula. Al no estar trabajando con ninguna técnica de aceleración de convergencia, siempre coincidirá con el valor de las cuentas.
- *PDF*. Función de densidad de probabilidad.
- *CDF*. Función de distribución acumulada.

Un ejemplo del *output_energy* se ve a continuación


```

column_000 = edge_left
column_001 = edge_delta
column_002 = counts
column_003 = accumulated variable
column_004 = PDF
column_005 = CDF

0.00000000e+00 1.60160160e-02 10497 1.04970000e+04 4.58804170e-02 7.34821494e-04
1.60160160e-02 1.60160160e-02 9129 9.12900000e+03 3.99011457e-02 1.37387888e-03
3.20320320e-02 1.60160160e-02 8610 8.61000000e+03 3.76326941e-02 1.97660471e-03
4.80480480e-02 1.60160160e-02 8083 8.08300000e+03 3.53292760e-02 2.54243896e-03
6.40640640e-02 1.60160160e-02 7628 7.62800000e+03 3.33405564e-02 3.07642185e-03
8.00800800e-02 1.60160160e-02 7315 7.31500000e+03 3.19724922e-02 3.58849380e-03
9.60960961e-02 1.60160160e-02 6972 6.97200000e+03 3.04733035e-02 4.07655472e-03
1.12112112e-01 1.60160160e-02 6744 6.74400000e+03 2.94767583e-02 4.54865495e-03
1.28128128e-01 1.60160160e-02 6613 6.61300000e+03 2.89041819e-02 5.01158479e-03
1.44144144e-01 1.60160160e-02 6103 6.10300000e+03 2.66750676e-02 5.43881310e-03
1.60160160e-01 1.60160160e-02 6174 6.17400000e+03 2.69853953e-02 5.87101163e-03
1.76176176e-01 1.60160160e-02 5936 5.93600000e+03 2.59451420e-02 6.28654944e-03
1.92192192e-01 1.60160160e-02 6014 6.01400000e+03 2.62860653e-02 6.70754748e-03
2.08208208e-01 1.60160160e-02 6049 6.04900000e+03 2.64390438e-02 7.13099563e-03
2.24224224e-01 1.60160160e-02 5975 5.97500000e+03 2.61156036e-02 7.54926356e-03
2.40240240e-01 1.60160160e-02 5837 5.83700000e+03 2.55124315e-02 7.95787107e-03
2.56256256e-01 1.60160160e-02 5686 5.68600000e+03 2.48524389e-02 8.35590813e-03
2.72272272e-01 1.60160160e-02 5496 5.49600000e+03 2.40219845e-02 8.74064462e-03
2.88288288e-01 1.60160160e-02 5485 5.48500000e+03 2.39739056e-02 9.12461108e-03
3.04304304e-01 1.60160160e-02 5267 5.26700000e+03 2.30210685e-02 9.49331688e-03
3.20320320e-01 1.60160160e-02 5164 5.16400000e+03 2.25708748e-02 9.85481237e-03
3.36336336e-01 1.60160160e-02 4974 4.97400000e+03 2.17404205e-02 1.02030073e-02
3.52352352e-01 1.60160160e-02 5095 5.09500000e+03 2.22692888e-02 1.05596725e-02
3.68368368e-01 1.60160160e-02 4825 4.82500000e+03 2.10891695e-02 1.08974370e-02
3.84384384e-01 1.60160160e-02 4603 4.60300000e+03 2.02300000e-02 1.12300000e-02

```

Figura 3.12. Ejemplo de uno de los archivos txt tipo que *Geant4* devuelve tras llevar a cabo las simulaciones.

Como comentario, se resalta que *Geant4* no tiene proceso de extinción de neutrones por lo que los 10497 neutrones que hay en el primer bin nunca podrán tener energía nula. Es una de las características de este archivo está organizado en bins, es un histograma, por lo que no se conoce las energías exactas de cada neutrón, sino que se conoce el pequeño rango en el que se encuentra. Estas cinco columnas de información conforman tanto el archivo de datos energéticos y el de datos energéticos de salida.

3.4. ANÁLISIS DE RESULTADOS.

Una vez obtenidos los resultados, se pasa a su análisis para darle sentido y forma a los números. De gran interés es la columna de la función de densidad de probabilidad PDF que para los datos iniciales toma la siguiente forma:

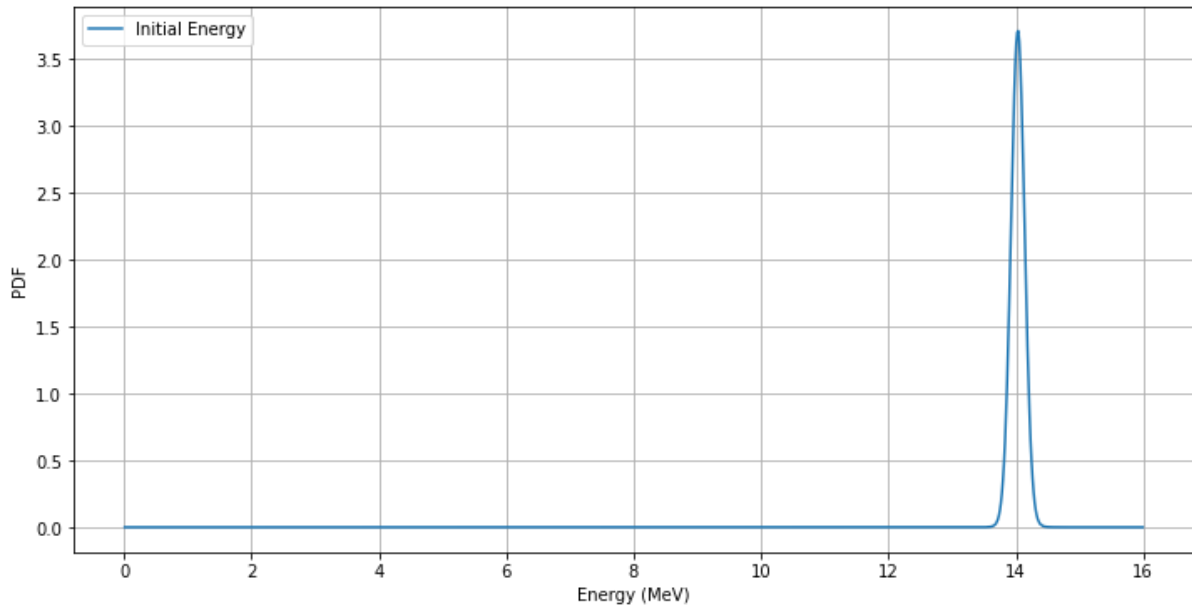


Figura 3.13. Función de densidad de probabilidad de los neutrones en el momento justamente posterior a su nacimiento tras la colisión deuterio tritio.

Por su parte la de salida toma la siguiente forma:

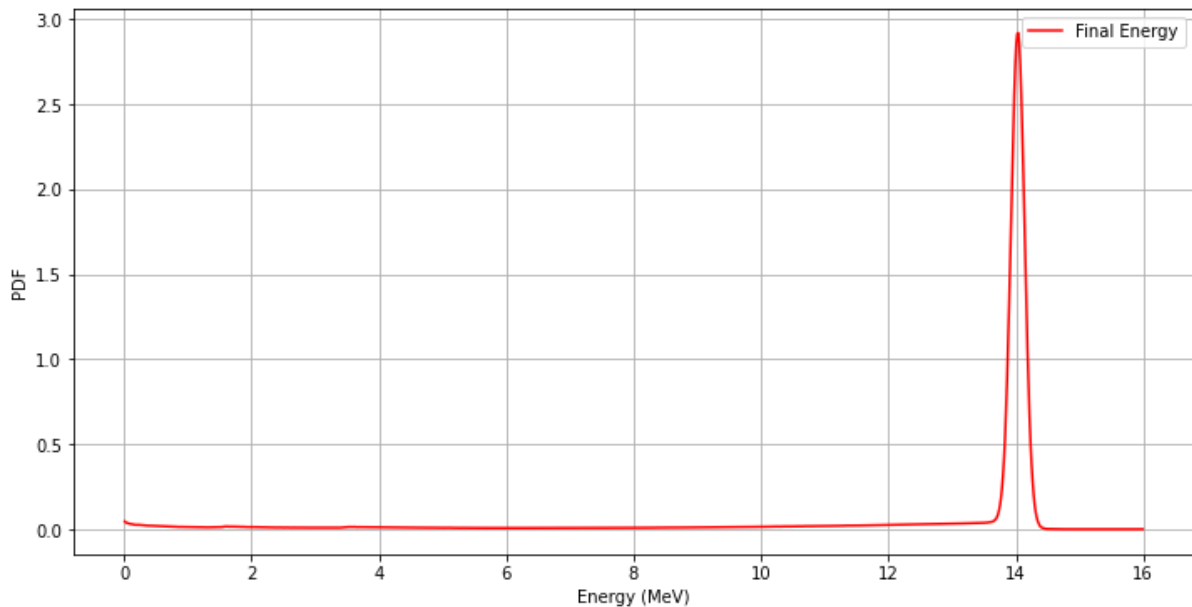


Figura 3.14. Función de densidad de probabilidad de los neutrones en el momento justo posterior a su salida del blanco de fusión por confinamiento inercial.

Si se comparan ambas en la misma figura pueden empezar a observarse algunas diferencias

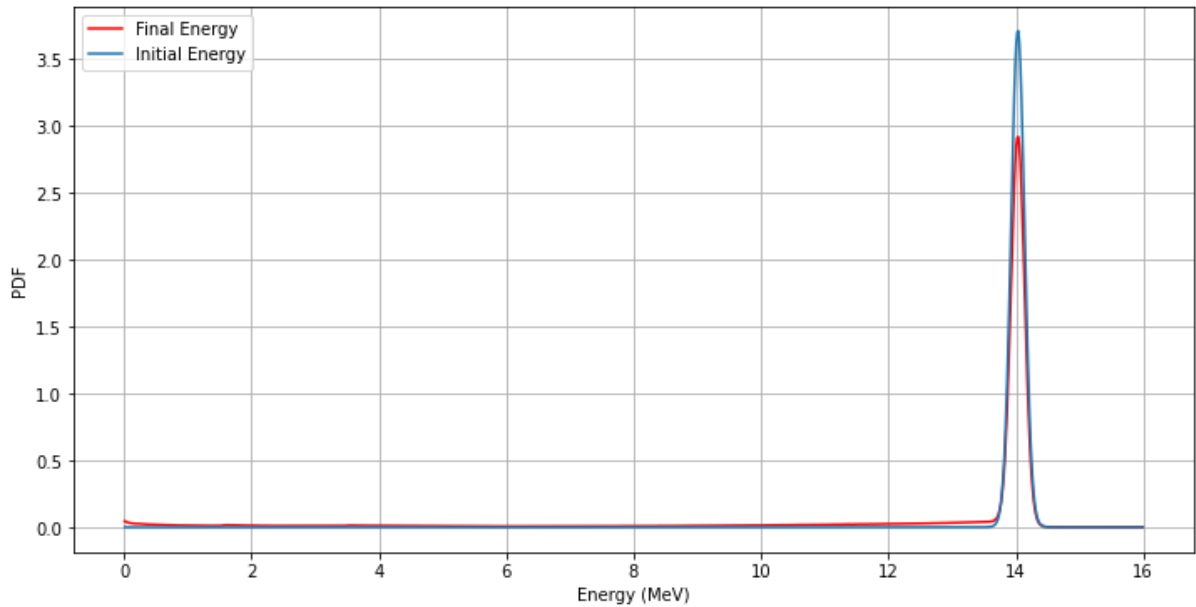


Figura 3.15. Comparación de las funciones de densidad de probabilidad de los neutrones entre el nacimiento y salida del blanco de fusión por confinamiento inercial.

Para tratar de apreciar mejor las diferencias se pasan ambas gráficas a la escala logarítmica en la función densidad de probabilidad. Es necesario apuntar que los valores nulos desaparecerán en la gráfica de escala logarítmica.

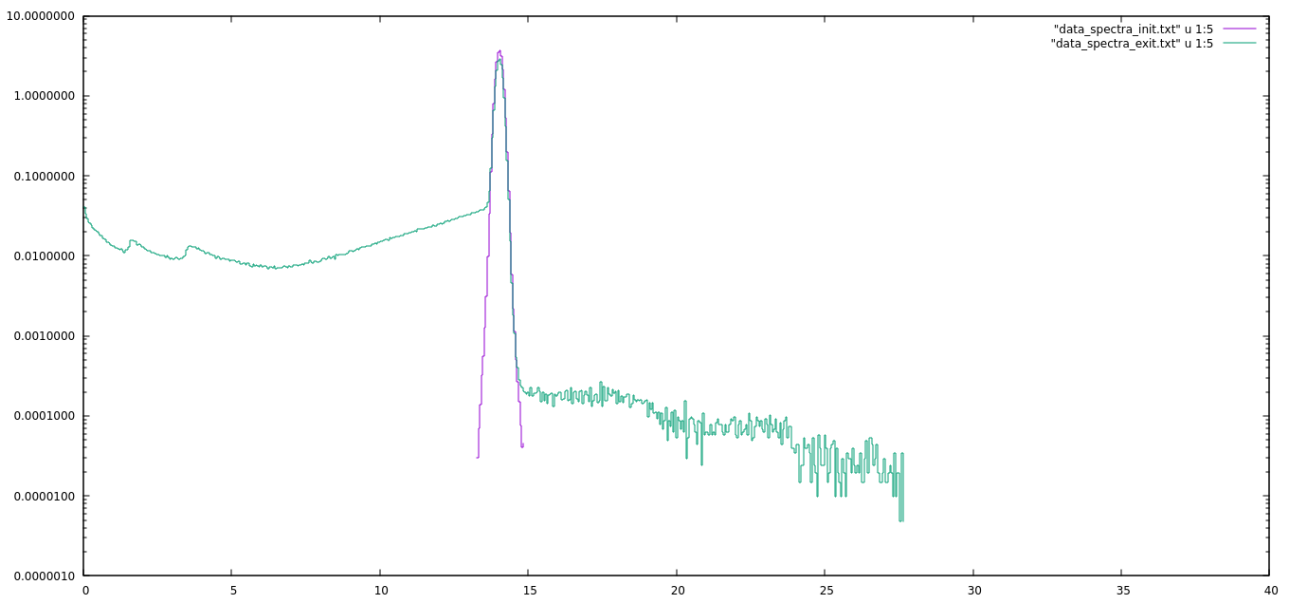


Figura 3.16. Comparación de las funciones de densidad de probabilidad de los neutrones entre el nacimiento y salida del blanco de fusión por confinamiento inercial en escala logarítmica para la función de densidad de probabilidad. Malla energética hasta 40 MeV.

La figura representa una simulación en la que la malla energética se extiende hasta los 40 MeV. Esta simulación se hizo de manera posterior a unas simulaciones en las que la malla energética llegaba hasta los 16 MeV. Se conocía que la zona de upscattering era decreciente y no muy significativa, además su tendencia parecía confirmarlo; sin embargo, pareció totalmente

necesario asegurar los resultados diseñando una malla que cubriese hasta los 40 MeV; aunque tuviese menos historias.

En próximas figuras se analizará una gráfica con una zona de up – scattering menor, es decir, con una malla energética que comprende hasta los 16 MeV. Se procede de esa forma ya que el comportamiento es el predicho y la información que aporta carece de valor añadido.

Por lo tanto, de ahora en adelante se pasará a trabajar sobre el análisis de la siguiente Figura 3.17:

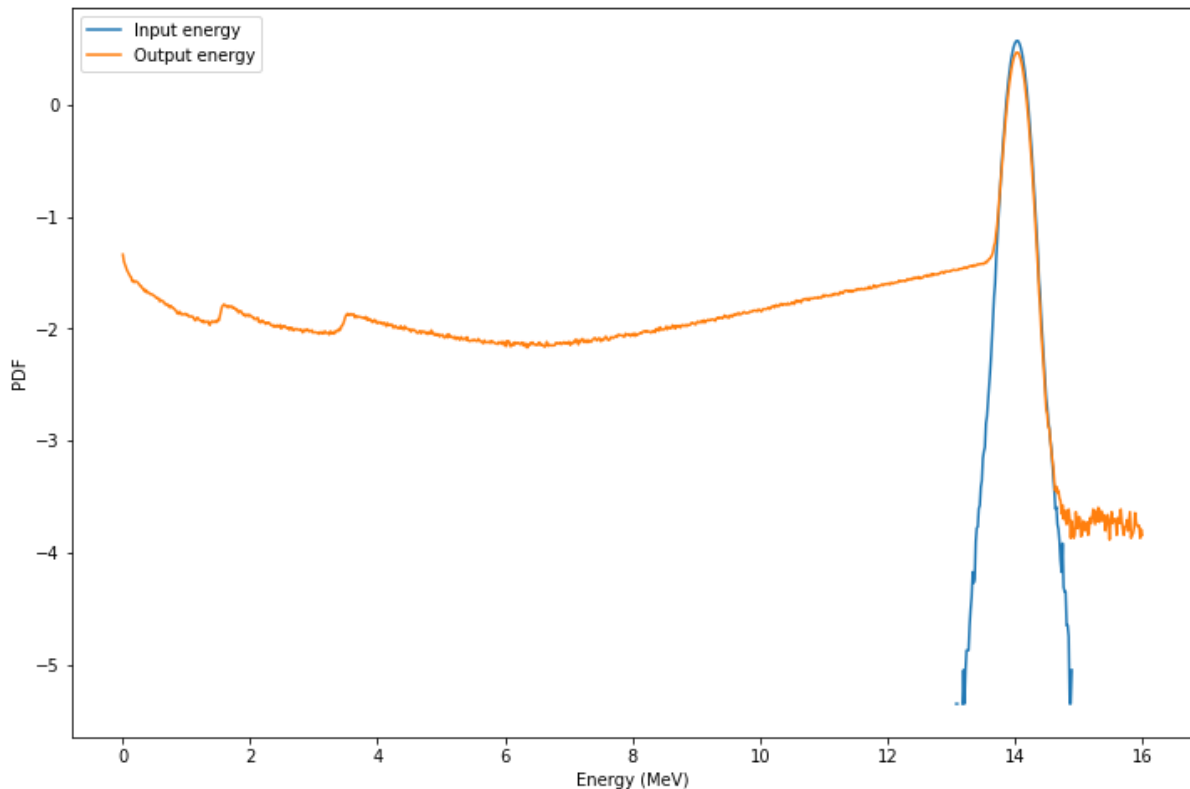


Figura 3.17. Comparación de las funciones de densidad de probabilidad de los neutrones entre el nacimiento y salida del blanco de fusión por confinamiento inercial en escala logarítmica para la función de densidad de probabilidad. Malla energética hasta 16 MeV.

En primer lugar, se harán unos comentarios generales, para después analizar 3 zonas distintas de la curva dando sentido y forma a lo que aquí ocurre.

En este punto se trata de estudiar las diferencias que existen entre la curva de energía inicial – Input energy – y la curva de energía final – output energy – de colores azul y naranja respectivamente. Tras estudiar las diferencias evidentes a nivel visual se tratará de explicar el porqué de esas diferencias, es decir, que fenómenos causan esos comportamientos

En un primer y generalista análisis se puede advertir como partiendo de una energía inicial de espectro comprendido entre los 13 y 15 MeV se pasa a tener un espectro de salida que comprende desde los 0 hasta casi los 30 MeV, sin embargo y como se comentó con anterioridad de aquí en adelante el espectro de salida estudiado comprende hasta los 16 MeV.

Se podría decir que el espectro neutrónico se expande o se estira. Después de sufrir distintos fenómenos los neutrones principalmente sufren una “pérdida” energética que principalmente los lleva a zonas de energías menores.

También por el lado derecho de la campana se aprecia una zona dónde las energías parecen aumentar, significando que algunos de los neutrones tendrían una ganancia de energía.

Esta expansión de la curva repercute en la zona de los 14 MeV dónde se puede apreciar una diferencia entre la curva inicial y final.

Uno de los comentarios que es importante resaltar es que no hay pérdida energética como tal, es decir, es cierto que hay neutrones que decaen a energías menores; sin embargo, la energía total es constante. Esto se puede demostrar de una manera muy sencilla, integrando ambas curvas se comprueba que ofrecen idéntico resultado.

3.4.1. PARTE CENTRAL.

La parte central es la zona que se asemeja a la forma de la campana, es decir la zona que la energía de salida comparte con la energía inicial.

En primer lugar, es inmediato observar como es lógico, que la curva de la energía de salida es menor que la curva de energía inicial. Esto era un efecto que se esperaba que sucediese ya que después de nacer los neutrones sufrirán interacciones con el blanco que les harán perder parte de su energía depositándola en el blanco de fusión.

Para analizar y comparar ambos espectros se dibuja la diferencia de sus funciones de densidad de salida y entrada, se observa lo siguiente:

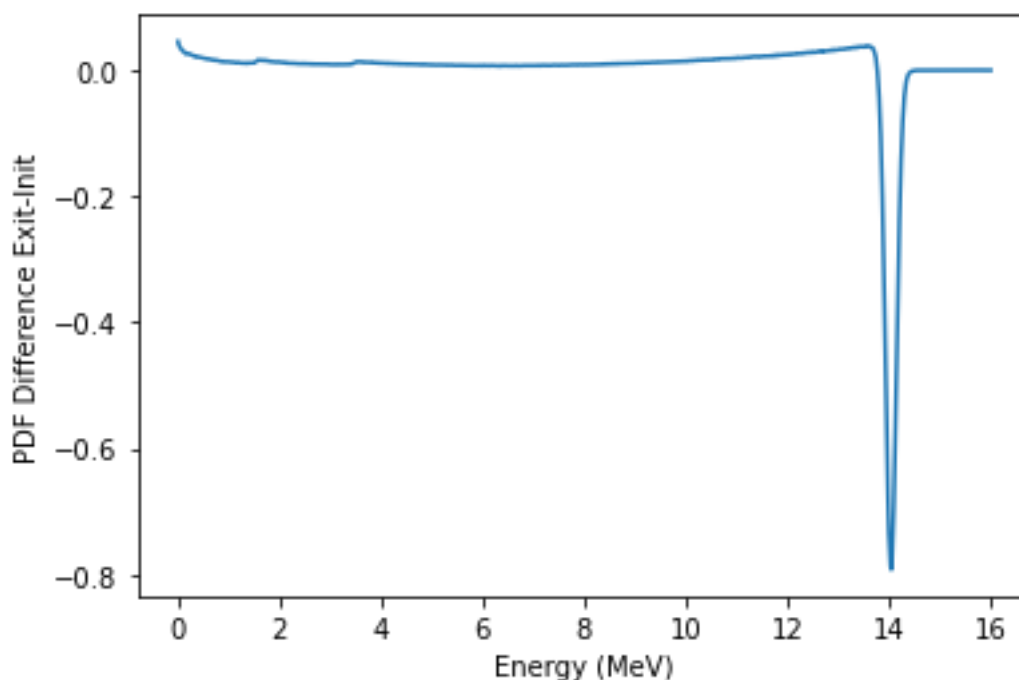


Figura 3.18. Diferencia entre las funciones de densidad de probabilidad inicial y final.

Se observa como la única zona negativa es la zona que correspondería con la campana o parte central. Esto viene a confirmar lo que ya era visible en la Figura 3.17, que los neutrones depositan una cantidad de energía en el blanco tras interactuar con él.

A continuación, se calculó qué porcentaje de energía se depositaba en el blanco de fusión procedente de los neutrones, que de manera simple consistía en calcular el área existente entre ambas curvas en la zona de campana

Para ello se integró esa área llegando a la conclusión de que hasta un 20 % de los neutrones varían su estado energético tras interactuar con el blanco. Hay un 20% de neutrones que se han movido de su energía, un 20% de los neutrones han interactuado.

En términos energéticos, para calcular la energía que se pierde – que se queda en el blanco – necesitamos calcular la energía total inicial y final.

Para calcular esta energía se calculará el promedio energético inicial – final y se multiplicará por el número de neutrones en cada estado

El promedio energético se calcula de la siguiente forma:

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{\infty} E \cdot pdf \cdot dE}{\int_0^{\infty} pdf \cdot dE}$$

Resultando de 14,03 MeV para el estado inicial y de 12,775 MeV para el estado final.

Una vez calculada la energía promedio, se calcula la energía total en cada estado:

$$E_{Ti} = n_{ni} \cdot \bar{E}_i$$

$$E_{Tf} = n_{nf} \cdot \bar{E}_f$$

Calculando la diferencia de energía entre ambos estados y expresándola de manera porcentual.

$$\Delta E = \frac{E_{Ti} - E_{Tf}}{E_{Ti}}$$

Se concluye que la deposición energética de los neutrones en el blanco es únicamente de 6,3 %

3.4.2. UP – SCATTERING

La zona de Up – scattering es la zona que en la Figura 3.17 aparece a la derecha de la zona central o zona de campana, representa una zona de energías mayores a la energía de nacimiento de los neutrones y es, sin duda, una de las zonas más llamativas de la simulación. Es interesante debido a que su existencia implica que podrían existir neutrones que en el proceso adquieran energía, terminando el proceso con una energía mayor.

Antes de entrar en un análisis más exhaustivo de esta zona, se debe aclarar el porqué del ruido en la gráfica. Se debe principalmente a que, al ser un histograma y tener menor número de cuentas, sucede que tiene una convergencia menor y por ello se genera ese ruido; no tiene mayor importancia a la hora de interpretar los resultados. Se puede ver fácilmente como en la Figura 3.16, en la zona que tiene ruido, a pesar del ruido coinciden muchos de sus picos entre sí, esto es debido a que tienen el mismo número de cuentas.

Lo primero que se puede advertir si analizamos la zona de up – scattering es que se trata con diferencia de la zona que toma valores menores para la función de densidad de probabilidad de todo el proceso, a la vez que representa los neutrones con mayor energía de todo el espectro. Este hecho hace que sea el fenómeno menos probable una vez la fusión por confinamiento inercial ha ocurrido; sin embargo, la baja función de densidad asociada no lo hace inexistente y por lo tanto se debe tener en cuenta.

Analizando la Figura 3.16 se puede ver cómo además de ser la zona que toma los menores valores para la función de densidad es decreciente llegando, en esa simulación, a estar en valores de factores de 10 tres veces por debajo que el resto de zonas de la curva⁶.

A parte de esos dos apuntes, es imperativo analizar el porqué de ese lado de la curva; es decir, se debe responder a preguntas como ¿Qué sentido físico tiene esa zona de la curva? ¿Cómo es posible que aparezcan neutrones con mayor energía que la inicial? Lo que sucede es lo siguiente:

En primer lugar, nace un neutrón en el espectro morado – espectro inicial – de la Figura 3.16, dentro de su rango. De pronto se produce un scattering elástico con el deuterio, cediendo parte de esa energía al deuterio.

Por ejemplo, al suceder ese scattering elástico podría quedar el neutrón con una energía del rango de los 3 MeV y el deuterio con una energía de 8 o 10 MeV. Ese deuterio de mayor energía comienza moverse por el plasma hasta que finalmente se encuentra a un tritio, con quién se fusiona de nuevo. En esa fusión se produce una partícula α y un nuevo neutrón.

Geant4 sigue trazando esa partícula α y ese neutrón. Centrándonos en el neutrón, ocurre que tiene asociado, en condiciones normales, un calor de reacción de alrededor de 17 MeV; sin embargo, como el deuterio venía con una energía mayor de lo normal, como pueden ser 10 MeV, la energía total ascendería hasta 27 MeV aproximadamente.

Estos 27 MeV son a repartir entre la partícula α y el neutrón. El sampling de las partículas es independiente, es decir, no se comprueba la conservación del momento ni de energía. Esto puede hacer que el neutrón se lleve los 27 MeV completos.

⁶ La escala logarítmica es decimal

Por lo que, a modo de conclusión breve, lo que explicaría la zona de Up – scattering serían reacciones de fusión con deuterios supratérmicos, con energías cinéticas fuera de la distribución térmica que tendrían.

Aparentemente podría parecer un fallo por violar la ley de la conservación de la energía. Puede poner energía máxima a ambas partículas, lo cual no tendría sentido en absoluto rompiendo la conservación de la energía. De la misma manera al no tener datos sobre distribución angular hace que no sea obligatoria la conservación de la cantidad de movimiento. A priori esta situación es físicamente incorrecta, sin embargo, se explica de la siguiente forma:

Se está haciendo una simulación de Montecarlo en la que se lanzan muchas historias. Cada historia no tiene significado de por sí, es decir, no se podría coger una única historia y querer sacar conclusiones de por sí de una sola historia. Lo que hace siempre es sacar promedios y estadísticas. En concreto, en una historia no se conserva energía y momento, pero si se coge el promedio de todas las historias con el mismo proceso y todos los eventos, si se va a conservar, que es lo importante.

Historia a historia no hay conservación de energía y momento, pero en el global, haciendo promedio tiende a la conservación, lo que valida indiscutiblemente la validez de los resultados de la simulación.

3.4.3. DOWN – SCATTERING.

Por definición la zona de down – scattering es aquella que representa a los neutrones que han experimentado una pérdida o deposición energética en el blanco y que, por tanto, en el estado final tienen una energía menor a la de nacimiento.

Antes de entrar en mayor detalle, conviene aclarar que en la Figura 3.19 se tienen diferentes procesos precedidos de unas iniciales, por un parte *PN* significa *Primary Neutron* y, por otra parte, *SN* significa *Secondary Neutron*. Esto quiere representar *PN* neutrones primarios, los que se lanzan, y los *SN* son los neutrones secundarios, representan un neutrón que ha aparecido, que no es inicial. En la figura se ve cada fenómeno por separado, la suma de todos ellos daría lugar a la forma representativa de la Figura 3.17.

En primer lugar, se observa la curva *PN – No interaction*, esta curva representa el espectro de neutrones de nacimiento, momento a partir del cual comienzan a sufrir interacciones. Una vez comienzan a sufrir interacciones se tienen dos casos.

Por un lado, se tiene representada la dispersión elástica mediante la curva la curva *PN – Elastic scattering*. A la vista está que es el proceso de mayor importancia en el espectro de la zona down – scattering. Es una curva que decrece según lo hace la energía hasta un punto alrededor de los 6 MeV donde cambia totalmente su tendencia volviéndose creciente y creando un par de máximos locales a bajas energías. La dispersión elástica es el único fenómeno que sufren los neutrones primarios.

Por otro lado, los neutrones secundarios sufren tanto dispersión elástica, *SN – Elastic scattering* como dispersión inelástica *SN – Inelastic scattering*. En este caso se observa como la dispersión inelástica es el fenómeno de mayor importancia, decreciendo según aumenta la energía y dejando de existir del entorno de los 12 MeV en adelante. Además, también hay dispersión elástica que, aunque de menor valor, se mantiene durante todo el espectro decreciendo según la energía aumenta.

El hecho de que en este caso no exista la captura neutrónica no se debe a su inexistencia, sino a que se ha lanzado una simulación con alrededor de 70.000 eventos. Como se vio en el apartado 3.2.1 la sección eficaz del neutrón comparada con la de la dispersión elástica se advierte que queda unos 5 o 6 órdenes de magnitud por debajo de ella. Por ello, se deberían considerar entre cien mil y un millón de historias para poder ver una captura neutrónica en promedio.

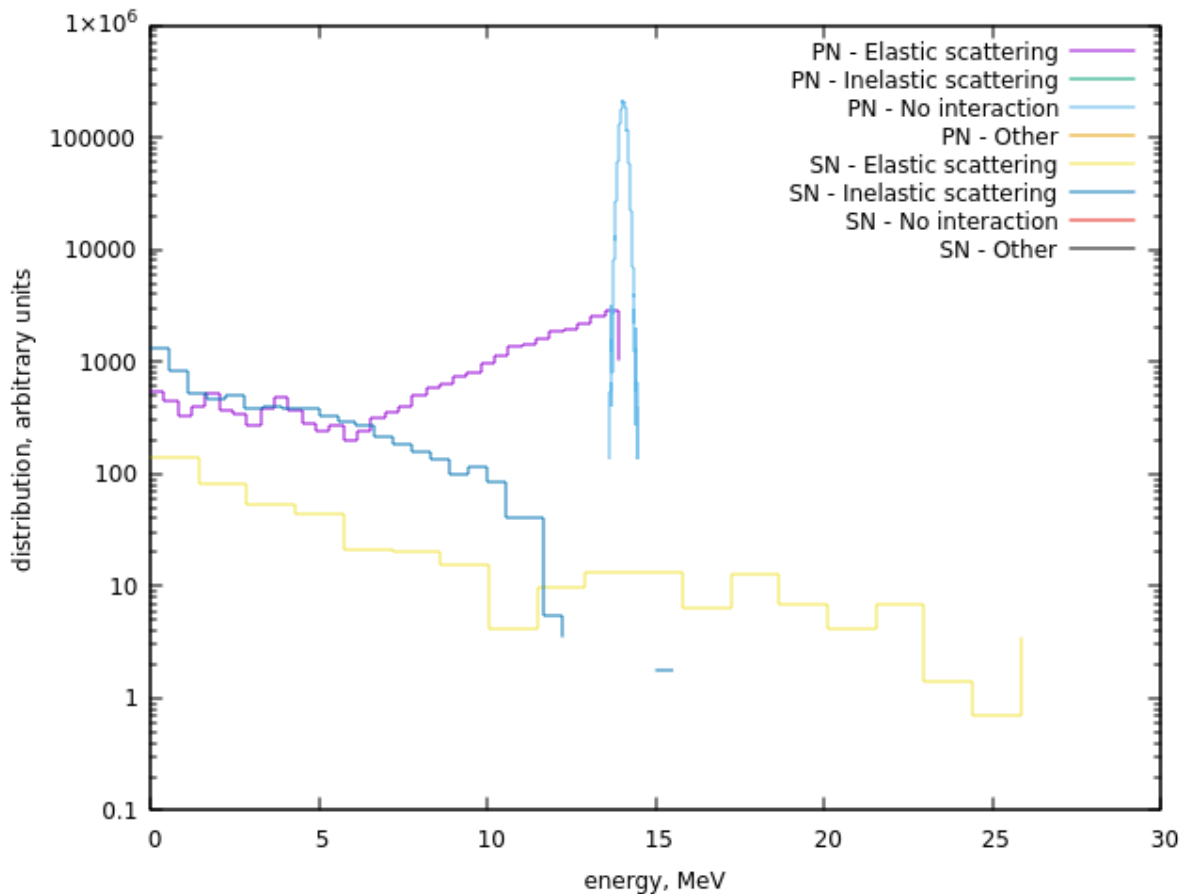


Figura 3.19. Análisis de los procesos de down – scattering en un proceso de fusión nuclear por confinamiento inercial.

3.4.4. NEUTRONES.

Un análisis interesante es el de ver los neutrones que tenemos en el espectro de nacimiento neutrónico y en el espectro neutrónico final.

Para ello se coge `init_energy` y se suman todas las cuentas de los bins del sistema resultando un total de 13.880.085 neutrones.

Por otra parte, se coge `output_energy` y se suman todas las cuentas de los bins del sistema una vez que se ha trazado las historias resultando un total de 14.285.102 neutrones, queda claro que algo tiene que suceder para que se haya dado una multiplicación neutrónica.

El factor de multiplicación neutrónica, calculado dividiendo los neutrones totales a la salida entre los neutrones totales iniciales, da como resultado la Tabla 2.

Tabla 2. Tasa de multiplicación neutrónica y porcentaje de neutrones multiplicados durante la simulación de interacción de los neutrones en el blanco de fusión por confinamiento inercial.

| | |
|--|---------------------------|
| Tasa de multiplicación neutrónica | 1.0291797204411932 |
| Porcentaje de neutrones multiplicados (%) | 2,92 % |

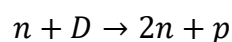
Se aprecia claramente que ha existido un aumento del número de neutrones en el sistema final frente al inicial. Pero, ¿cómo es posible este fenómeno?

La respuesta antes esta pregunta se encuentra en la reacción ($n,2n$).

Esta reacción se justifica en *Geant4* como una reacción dependiente del scattering inelástico. Revisando los archivos de *Geant4* se puede ver que el scattering inelástico es la reacción ($n,2n$) y se libera energía. Esto significa que la suma de energías cinéticas de los productos puede ser mayores que la del neutrón incidente, dando lugar a neutrones con energías mayores a los 14 MeV iniciales.

Es cierto que una de las cosas más llamativas que se pueden ver en la Figura 3.16 es la cola que presenta el espectro de neutrones en la zona que sobrepasa los 14 MeV. Esta cola aparentemente rompería la conservación energética

Estos sucesos lo más probable es que tengan su origen en la forma en la que *Geant4* trata a las reacciones en las que hay múltiples neutrones en el estado final, como es el caso. Esta cantidad de neutrones en *Geant4* pueden terminar desencadenando la reacción de ruptura del Deuterio



Si no hay información en *Geant4* acerca de la correlación energía – ángulo, como es el caso, de los productos de reacción cada partícula en el estado final se samplea independientemente que, en algunos casos, pueda derivar en que todos los productos reciban la máxima cantidad de energía rompiendo así la conservación de energía. [11]. Sin embargo, este fenómeno es totalmente correcto y válido como ya se trató en mayor detalle en el apartado 3.4.2.

La reacción ($n,2n$) se presentan para umbrales entre 9 MeV y 20 MeV, umbral que cuadra perfectamente con la zona que se define de `Up – scattering`, zona que, a grandes rasgos, estaría definida por encima de los 14,1 MeV y hasta los 16 MeV [5].

Además de este proceso, y a pesar de no ser estrictamente un proceso de multiplicación neutrónica como se entiende por definición, existe otro fenómeno que tiene como consecuencia el aumento del número de neutrones en el estado final. Este fenómeno es el que tiene que ver con los deuterios supratérmicos que se mencionaron en el apartado 3.4.2, los cuáles tras colisionar con un neutrón acaban produciendo otro más a energías elevadas.

4. CONCLUSIONES.

Una vez llevado a cabo el desarrollo y que se han obtenido unos resultados, es imperativo extraer una serie de conclusiones que permitan condensar el trabajo realizado en una serie de afirmaciones. Es por ello que en base a todo el desarrollo previo se puede afirmar lo siguiente:

En primer lugar, se puede asegurar que una vez nacidos los neutrones, durante su estancia en el interior del blanco van a perder energía depositándola en el mismo blanco. Por las características del proceso que se investiga, fusión por confinamiento inercial (FCI), se puede admitir que prácticamente toda la energía que los neutrones pierden desde que nacen hasta que escapan del blanco representa en su totalidad a las pérdidas energéticas del proceso global. Es decir, prácticamente toda la energía que un neutrón pierde hasta llegar a los confines de la cámara de reacción es la que se deposita en el blanco de fusión por confinamiento inercial, más allá de él no hay pérdidas significativas. Esta deposición se debe a las interacciones que el neutrón sufre en su camino hacia los límites del blanco de fusión. En el estado final los neutrones tienen una energía promedio de 12,775 MeV frente a los alrededor de 14 MeV de promedio en el nacimiento.

Si se analiza el espectro neutrónico de salida, con respecto al de nacimiento, se puede asegurar que la mayoría de neutrones se establecerán en lo que se conoce como la zona central o de campana. Únicamente un 20 % de los neutrones escapa camino a, principalmente, la zona de down – scattering y en menor medida la zona de up – scattering. Analizando esta zona se concluye que la deposición energética en porcentaje asciende a un 6,3 % de la inicial.

La zona de down – scattering representa la zona compuesta por neutrones que en el proceso – y debido a diversas interacciones entre partículas – han perdido energía. Analizando en detalle se observa que el fenómeno de mayor importancia en esta zona es la dispersión elástica, siempre y cuando se hable de neutrones primarios. Si se observan los neutrones secundarios, se advierte que el fenómeno de interacción más probable a bajas energías es la dispersión inelástica, aunque es cierto que también existe presencia de dispersión elástica para estos últimos.

Por otra parte, la zona de Up – scattering representa a aquellos neutrones que han experimentado una ganancia energética en el proceso. Este fenómeno es posible debido a los deuterios supratérmicos. Los deuterios supratérmicos tienen su origen las colisiones elásticas de deuterios en el rango de los keV con neutrones nacidos por fusión nuclear. Una vez se produce la colisión puede darse el caso de gran parte de la energía del neutrón se transfiera al deuterio llevándolo al rango de los MeV. Este deuterio, ya en estado supratérmico, finalmente fusionará con un tritio produciendo de nuevo un neutrón que en este caso podrá nacer con una energía mayor debido a que la condición inicial del deuterio se encuentra el rango de los MeV y no de los keV, dotando al proceso de una mayor energía total.

Además de esto, también se observa que se producen fenómenos de multiplicación neutrónica, por los que en el estado final se encuentran un mayor número de neutrones que en el estado inicial. Este fenómeno parece tener su origen en la reacción ($n,2n$). Esta reacción se produce

cuando un neutrón nacido por fusión nuclear colisiona contra un deuterio y, en este caso, lo disgrega dando como productos dos neutrones y un protón

5. LÍNEAS FUTURAS.

El presente Trabajo Fin de Grado, como su propio nombre indica, ha tratado de dar forma y explicación al espectro de neutrones surgido en un blanco de fusión por confinamiento inercial e iluminación directa. Aunque lo ha conseguido de manera exitosa, al ser una primera aproximación – un primer trabajo – en este ámbito deja abierta numerosas puertas de cara a investigaciones futuras.

Esta estimación tiene algunas carencias asociadas a su desarrollo que, por otra parte, son totalmente lógicas teniendo en cuenta que es una primera aproximación y no busca obtener la mayor precisión.

Lo cierto es que este Trabajo Fin de Grado supone el pistoletazo de salida de futuros estudios en este campo, que deberán – basándose en el presente proyecto – mejorar y generalizar en la medida de lo posible el trabajo aquí realizado.

Es por todo esto, por lo que se considera que el proyecto tendrá las siguientes líneas futuras a desarrollar.

- La primera de ellas será la de mejorar los códigos que se han utilizado en el cálculo, tratando de mejorarlos tanto en precisión como en velocidad de computación.
- La segunda consistirá en tratar de generalizar los resultados. Como se pudo ver, la simulación de *Geant4* se basa en una situación concreta 1 ns después de la ignición. Una de las líneas futuras deberá ser estudiar para todo el espectro temporal en el blanco.
- Otra de las posibles líneas futuras a investigar es la de realizar estos desarrollos para un confinamiento inercial por iluminación indirecta, que atisba a ser la técnica de mayor futuro de cara a conseguir la rentabilidad energética.

6. PRESUPUESTO DEL PROYECTO.

6.1. COSTE DIRECTO

El desglose del presupuesto del proyecto es el siguiente:

Tabla 3. Coste directo del proyecto

| COSTE DIRECTO DEL PROYECTO | | | |
|---|-----------------|-----------------------------|---------------------|
| CONCEPTO | CANTIDAD | VALOR UNITARIO (€/h) | SUBTOTAL (€) |
| RECURSOS HUMANOS | Horas | (€/h) | |
| Investigador Junior | 324 | 20 | 6,480.00 € |
| Investigador Senior | 35 | 40 | 1,400.00 € |
| LICENCIAS | Meses | (€/mes) | |
| MS Office | 12 | 9,16 | 110.00 € |
| HORAS DE COMPUTACIÓN | Horas | (€/h) | |
| Ordenador del Instituto de Fusión nuclear | 576 | 0.01872 | 10.78 € |
| MATERIAL AMORTIZABLE | Meses | (€/mes) | |
| Ordenador personal de trabajo | 12 | 31.25 | 375.00 € |
| TOTAL SIN IVA (21%) | | | 8,375.78 € |
| IVA (21 %) | | | 1,758.91 € |
| TOTAL CON IVA (21 %) | | | 10,134.69 € |

6.2. COSTE TOTAL.

Asumiendo que los costes indirectos, como pueden ser agua, electricidad o material de escritorio entre otros, suponen un 30 % del valor de los costes directos

$$CT = CD + CI = CD + 0,3CD = 1,3 \cdot CD$$

Tabla 4. Coste total del proyecto.

| PRESUPUESTO DEL PROYECTO | |
|---------------------------------|--------------------|
| COSTE DIRECTO (€) | 10,134.69 € |
| COSTE INDIRECTO (€) | 3,040.41 € |
| COSTE TOTAL (€) | 13,175.10 € |

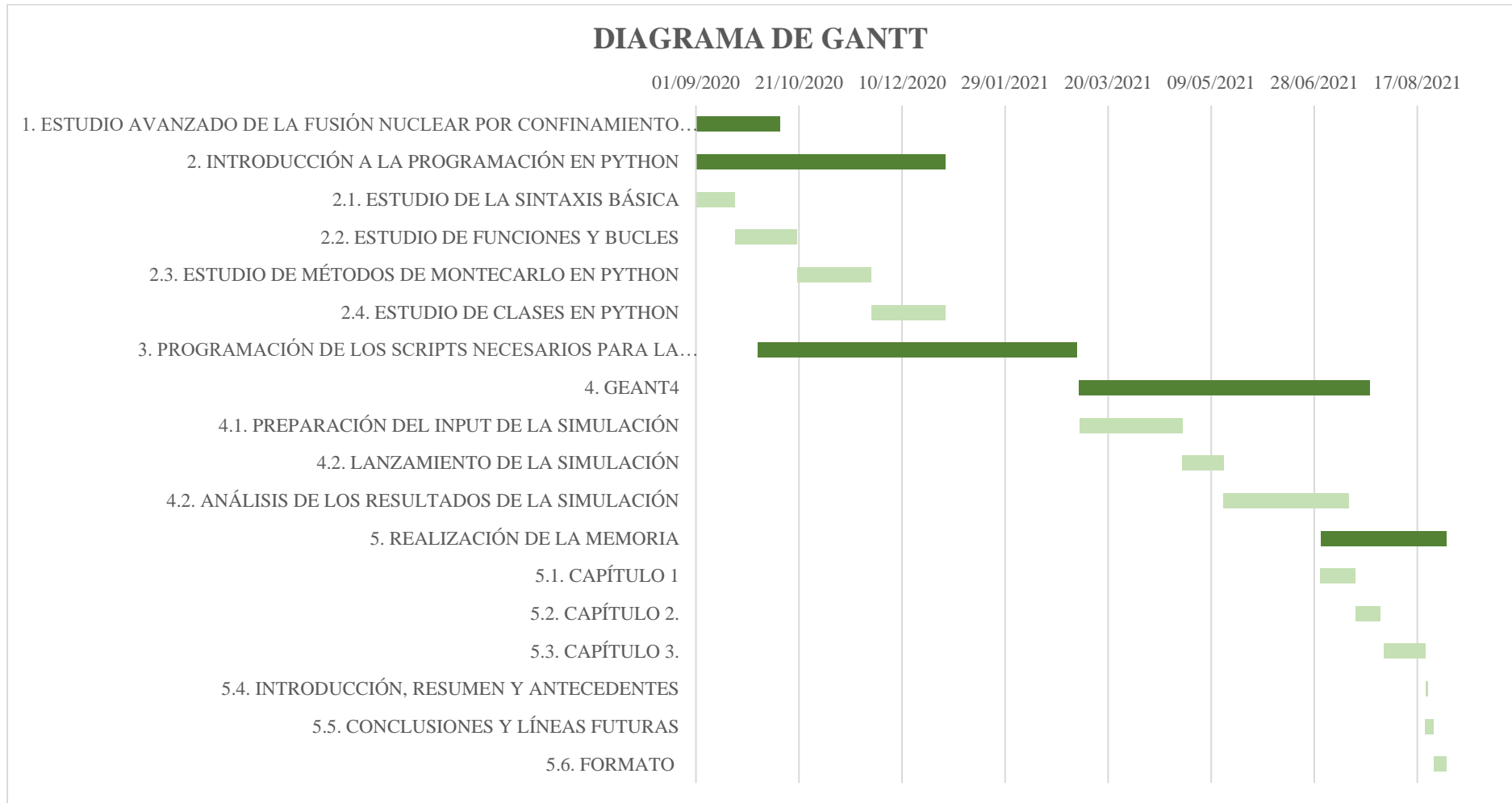
Por lo que se concluye que el coste total final del proyecto ascenderá a **13.175,1 €**.

7. PLANIFICACIÓN TEMPORAL DEL PROYECTO.

Tabla 5. Planificación temporal del proyecto.

| ACTIVIDAD | FECHA DE INICIO | FECHA DE FINALIZACIÓN | DURACIÓN (DÍAS) |
|--|-----------------|-----------------------|-----------------|
| 1. ESTUDIO AVANZADO DE LA FUSIÓN NUCLEAR POR CONFINAMIENTO INERCIAL | 01/09/2020 | 12/10/2020 | 41 |
| 2. INTRODUCCIÓN A LA PROGRAMACIÓN EN | 01/09/2020 | 31/12/2020 | 121 |
| 2.1. ESTUDIO DE LA SINTAXIS BÁSICA | Sep-20 | 20/09/2020 | 19 |
| 2.2. ESTUDIO DE FUNCIONES Y BUCLES | 20/09/2020 | 20/10/2020 | 30 |
| 2.3. ESTUDIO DE MÉTODOS DE MONTECARLO EN PYTHON | 20/10/2020 | 25/11/2020 | 36 |
| 2.4. ESTUDIO DE CLASES EN PYTHON | 25/11/2020 | 31/12/2020 | 36 |
| 3. PROGRAMACIÓN DE LOS SCRIPTS NECESARIOS PARA LA RESOLUCIÓN DE LA COLISIÓN | 01/10/2020 | 05/03/2021 | 155 |
| 4. GEANT4 | 06/03/2021 | 25/07/2021 | 141 |
| 4.1. PREPARACIÓN DEL INPUT DE LA SIMULACIÓN | 06/03/2021 | 25/04/2021 | 50 |
| 4.2. LANZAMIENTO DE LA SIMULACIÓN | 25/04/2021 | 15/05/2021 | 20 |
| 4.2. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN | 15/05/2021 | 15/07/2021 | 61 |
| 5. REALIZACIÓN DE LA MEMORIA | 01/07/2021 | 31/08/2021 | 61 |
| 5.1. CAPÍTULO 1 | 01/07/2021 | 18/07/2021 | 17 |
| 5.2. CAPÍTULO 2. | 18/07/2021 | 30/07/2021 | 12 |
| 5.3. CAPÍTULO 3. | 01/08/2021 | 21/08/2021 | 20 |
| 5.4. INTRODUCCIÓN, RESUMEN Y | 21/08/2021 | 22/08/2021 | 1 |
| 5.5. CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS | 21/08/2021 | 25/08/2021 | 4 |
| 5.6. FORMATO | 25/08/2021 | 31/08/2021 | 6 |
| TOTAL | 01/09/2020 | 31/08/2021 | 364 |

Tabla 6. Diagrama de Gantt



REFERENCIAS.

- [1] Craxton, Stephen & Anderson, K. & Boehly, Thomas & Goncharov, Valeri & Harding, D.R. & Knauer, J. & Mccrory, Robert & McKenty, Patrick & Meyerhofer, David & Myatt, J. & Schmitt, A. & Sethian, J. & Short, R. & Skupsky, S. & Theobald, W. & Kruer, W. & Tanaka, Kazuo & Betti, R. & Collins, T. & Zuegel, Jonathan. (2015). Direct-drive inertial confinement fusion: A review. *Physics of Plasmas*.
- [2] Metr6polis, N., & Ulam, S. (1949). The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247), 335-341.
- [3] E. San Fabi3n. Qu3mica cu3ntica y espectroscopia.20 de enero de 2021, consulta [07-07-2021] Disponible en: <https://web.ua.es/cuantica/docencia/QCE/node130.html>
- [4] Ramos Pascual, Miguel. (2020). Fusion cross-sections for deuterium cycle fusion reactors (D-cycle): an analysis of geometric, Gamow-Sommerfeld and astrophysical S-factors.
- [5] Carlos S3nchez Del R3o, Mario Aranzazu Vig3n, Francisco Verdaguer, Eduardo Rodr3guez Mayquez y Julio Montes. F3sica del neutr3n. Madrid 1958.
- [6] Benjamin Eriksson. Simulations of a back scatter time of flight neutron spectrometer for the purpose of concept testing at the NESSA facility.
- [7] Eduardo Oliva Gonzalo, Adriana Ortiz G3mez, Nuria Moral Fern3ndez, Alejandro Carrasco S3nchez, Jos3 Manuel Perlado Mart3n, Raquel Su3rez Hontoria, Manuel Cotelos Ferreiro. Curso b3sico de fusi3n nuclear. 2017
- [8] Jos3 Tadeu Arantes. Las danzas del n3cleo at3mico. Mayo 2001, consulta en [20-12-2020]. Disponible en: <https://revistapesquisa.fapesp.br/es/las-danzas-del-nucleo-atomico/>
- [9] James J. Duderstadt, Gregory A. Moses. Inertial confinement fusion / Duderstadt, James J., 1942- New York : Wiley, [1982].
- [10] M. A. Abdou, E. L. Vold, C. Y. Gung, M. Z. Youssef & K. Shin (1986) Deuterium-Tritium Fuel Self-Sufficiency in Fusion Reactors, *Fusion Technology*, 9:2, 250-28
- [11] Geant4, a simulation toolkit. Book for application developers, release 10.7. Rev. 5.0 4 de diciembre 2020.
- [12] What is Multiple scattering. Consulta en [07-07-2021] Disponible en: <https://www.malvernpanalytical.com/en/learn/knowledge-center/faqs/160719FAQmultiplescattering>
- [13] Oriol Planas, ¿Qu3 es el tritio? Febrero de 2019, consulta en [12-2-2021] Disponible en: <https://energia-nuclear.net/funcionamiento-central-nuclear/combustible-nuclear/tritio>
- [14] REAL ACADEMIA ESPAÑOLA: *Diccionario de la lengua española*, 23.^a ed., [versi3n 23.4 en l3nea]. Fecha de consulta: [05-07-2021]. Disponible en: <https://dle.rae.es>

ANEXO I. CÓDIGOS DE PROGRAMACIÓN PYTHON.

COLLISION.PY

```
# Copyright (C) 2020 Universidad Politécnica de Madrid
#
# collision.py is free software: you can redistribute it and/or modify
# it under the terms of the GNU General Public License as published by
# the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
# (at your option) any later version.
#
# collision.py is distributed in the hope that it will be useful,
# but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of
# MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the
# GNU General Public License for more details.
#
# You should have received a copy of the GNU General Public License
# along with collision.py. If not, see <https://www.gnu.org/licenses/>.
#
# Version control
# 2021.04.06 :: Manuel Cotelo Ferreiro (manuel.cotelo@upm.es)
# - improve residual calculation
# 2020.12.16 :: Manuel Cotelo Ferreiro (manuel.cotelo@upm.es)
# - move lorentz transformation to new module
# 2020.11.14 :: Manuel Cotelo Ferreiro (manuel.cotelo@upm.es)
# - Initial version
#
```

```
import numpy

import scipy.optimize

import utils.linalg as linalg

import utils.lorentz as lorentz

from utils.space import dim_x, dim_y, dim_z, num_dim

from utils.lorentz import var_ene, var_px, var_py, var_pz, num_var

# module info

info = { 'name': 'collision',

        'desc': 'Solve a collision of two particles with reaction',

        'author': 'Manuel Cotelo Ferreiro',

        'email': 'manuel.cotelo@upm.es',

        'year': 2021,

        'version': [ 1, 2, 0, ],

        'license': 'Copyright (C) 2020-2021 Universidad Politécnica de Madrid',

        }

# axis of the system in the COM frame

def com_axis(q):

    # get system axis

    dir = linalg.array2dir(q[1:])

    if numpy.dot(dir,dir) == 0.0:

        # there is no momentum, select random axis (this sampling is not uniform!!!)

        dir = linalg.array2dir(numpy.random.random_sample( ( 3, )))

    return dir
```

```
# solve collision in COM frame

def solve_com(q1_com,q2_com,m3,m4,theta,phi):

'''

Solve binary collision with reaction to produce two new particles

in the COM frame

-> in

q1_com: 4-vector momentum for particle 1 in COM frame

q2_com: 4-vector momentum for particle 2 in COM frame

m3: rest mass of product particle 3, float

m4: rest mass of product particle 4, float

theta: dispersion angle of reaction products relative to incident particles

      in COM frame, float

phi: dispersion angle of reaction products, rotation around incident

     particles in COM frame

<- out

(1) q3_com, 4-vector momentum for particle 3 in COM frame

(2) q4_com, 4-vector momentum for particle 4 in COM frame

NOTE:

- Due to the axis symmetry of the problem, angle phi is not well defined. It

  is no possible to define a system of coordinates to define phi properly.

'''
```

```
# validation of rest masses

assert( m3>=0.0 and m4>=0.0 )

# validation of momentums in COM frame

dp = q1_com[1:] + q2_com[1:]

dp = numpy.dot(dp,dp)

tol = 1.0e-12

assert( dp < tol )

# get total energy

e0 = q1_com[var_ene] + q2_com[var_ene]

# define function for energy conservation

fun = lambda pc: lorentz.pc2ene(m3,pc) + lorentz.pc2ene(m4,pc) - e0

# find modulus of momentum that holds energy conservation, pc for fun(pc) = 0.0

pc = scipy.optimize.brentq(fun,0.0,e0,maxiter=200)

# get system axis

dir = linalg.array2dir(q1_com[1:])

if numpy.dot(dir,dir) == 0.0:

    # there is no momentum, select random axis (this sampling is not uniform!!!)

    dir = linalg.array2dir(numpy.random.random_sample( ( 3, )))

# compute direction of propagation of products

du = linalg.array2dir(com_axis(q1_com))

dv = linalg.array2dir(linalg.array_ortho(du))
```

```
dw = linalg.rotation(du,dv,theta)
```

```
dw = linalg.rotation(dw,du,phi)
```

```
# 4-vector momenta
```

```
q3_com = lorentz.pc2vector(m3, pc*dw)
```

```
q4_com = lorentz.pc2vector(m4,-pc*dw)
```

```
return q3_com, q4_com
```

```
# solve collision in Lab frame
```

```
def solve_lab(q1_lab,q2_lab,m3,m4,theta,phi):
```

```
'''
```

```
Solve binary collision with reaction to produce two new particles
```

```
in the LAB frame
```

```
-> in
```

```
q1_lab: 4-vector momentum for particle 1 in LAB frame
```

```
q2_lab: 4-vector momentum for particle 2 in LAB frame
```

```
m3: rest mass of product particle 3, float
```

```
m4: rest mass of product particle 4, float
```

```
theta: dispersion angle of reaction products relative to incident particles
```

```
in COM frame, float
```

```
phi: dispersion angle of reaction products, rotation around incident
```

```
particles in COM frame
```



```
<- out
```

```
(1) q3_lab, 4-vector momentum for particle 3 in LAB frame
```

```
(2) q4_lab, 4-vector momentum for particle 4 in LAB frame
```

```
NOTE:
```

```
- Due to the axis symmetry of the problem, angle phi is not well defined. It
```

```
is no possible to define a system of coordinates to define phi properly.
```

```
'''
```

```
# Center of Mass frame
```

```
qc_lab, q1_com, q2_com = lorentz.lab2com(q1_lab,q2_lab)
```

```
# solve collision in COM frame
```

```
q3_com, q4_com = solve_com(q1_com,q2_com,m3,m4,theta,phi)
```

```
# back from COM to lab frame
```

```
q3_lab, q4_lab = lorentz.com2lab(qc_lab,q3_com,q4_com)
```

```
return q3_lab, q4_lab
```

```
# solve collision
```

```
def solve(m1,m2,m3,m4,k1,k2,d1,d2,theta,phi):
```

```
'''
```

```
Solve binary collision with reaction to produce two new particles
```

-> in

m1: rest mass of incident particle 1, float

m2: rest mass of incident particle 2, float

m3: rest mass of product particle 3, float

m4: rest mass of product particle 4, float

k1: kinetic energy of particle 1, float

k2: kinetic energy of particle 2, float

d1: propagation direction of particle 1, array(3) of floats

d2: propagation direction of particle 2, array(3) of floats

theta: dispersion angle of reaction products relative to incident particles

in COM frame, float

phi: dispersion angle of reaction products, rotation around incident

particles in COM frame

<- out

(1) q1_lab, 4-vector momentum for particle 1

(2) q2_lab, 4-vector momentum for particle 2

(3) q3_lab, 4-vector momentum for particle 3

(4) q4_lab, 4-vector momentum for particle 4

NOTE:

- Due to the axis symmetry of the problem, angle phi is not well defined. It

is no possible to define a system of coordinates to define phi properly.

'''

validate parameters

```
assert( m1>=0.0 and m2>=0.0 and m3>=0.0 and m4>=0.0 )
```

```
assert( k1>=0.0 and k2>=0.0 )
```

```
# reaction heat
```

```
q = (m1 + m2) - (m3 + m4)
```

```
assert ( (k1 + k2 + q) > 0.0 )
```

```
# initial momentum
```

```
pc1_lab = linalg.array2dir(d1)*lorentz.kin2pc(m1,k1)
```

```
pc2_lab = linalg.array2dir(d2)*lorentz.kin2pc(m2,k2)
```

```
# 4-vector momentum in lab frame
```

```
q1_lab = lorentz.pc2vector(m1,pc1_lab)
```

```
q2_lab = lorentz.pc2vector(m2,pc2_lab)
```

```
# solve collision
```

```
q3_lab, q4_lab = solve_lab(q1_lab,q2_lab,m3,m4,theta,phi)
```

```
# validate results
```

```
q_tot_1 = q1_lab[var_ene] + q2_lab[var_ene]
```

```
q_tot_2 = q3_lab[var_ene] + q4_lab[var_ene]
```

```
if q_tot_1 > 0.0:
```

```
    res = numpy.abs(1.0 - q_tot_2/q_tot_1)
```

```
else:
```

```
    res = numpy.abs(q_tot_2)
```

```
tol = 1.0e-12
```

```
assert( res < tol )
```

return q1_lab, q2_lab, q3_lab, q4_lab

MAIN_COLLISION_V02.PY

```
# Copyright 2020 Universidad Politécnica de Madrid

#

# This file is part of gadgets

#

# gadgets is free software: you can redistribute it and/or modify

# it under the terms of the GNU General Public License as published by

# the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or

# (at your option) any later version.

#

# gadgets is distributed in the hope that it will be useful,

# but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of

# MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the

# GNU General Public License for more details.

#

# You should have received a copy of the GNU General Public License

# along with gadgets. If not, see <https://www.gnu.org/licenses/>.

#

# Version control

# 2021.04.16 :: Manuel Cotelo Ferreiro (manuel.cotelo@upm.es)

# - include more output

# - add Maxwell-Boltzmann distribution for particle energy

# 2021.04.06 :: Manuel Cotelo Ferreiro (manuel.cotelo@upm.es)

# - complete distributions, use uniform distribution for energy

# - include more info in output

# 2020.12.16 :: Manuel Cotelo Ferreiro (manuel.cotelo@upm.es)

# - update script to last changes in modules
```

```
# 2020.11.14 :: Manuel Cotelo Ferreiro (manuel.cotelo@upm.es)

# - Initial version

#

import sys

import argparse

import json

import numpy

import utils.units as units

import utils.linalg as linalg

import utils.lorentz as lorentz

import utils.maxwell as maxwell

import collision

# info

info = { 'name': 'main_collision_v02',

        'desc': 'Solve collision in a binary nuclear reaction',

        'author': 'Manuel Cotelo Ferreiro',

        'email': 'manuel.cotelo@upm.es',

        'year': 2021,

        'version': [ 1, 2, 0, ],

        'license': 'Copyright (C) 2020-2021 Universidad Politécnica de Madrid',

        }
```

```
# program default parameters

defs = { 'db': 'dbnuc.json',

        'angle': numpy.pi/6.0,

        'samples': 10000,

        'kt': 1.0e-02, # in MeV

        }

# read command line arguments

def get_args(info):

    """

    Define command line arguments and parse them

    """

    # create argument parser

    parser = argparse.ArgumentParser(description='{desc}'.format(** info), epilog='{license},

{email}'.format(** info))

    # optional arguments

    parser.add_argument( '--db', help='Select nuclear database file, default "{}".format(defs['db']),

default=defs['db'], type=str, )

    parser.add_argument( '--samples', help='Define number of samples, default

"{}".format(defs['samples']), default=defs['samples'], type=int, )

    parser.add_argument( '--kt', help='Temperature of the media in MeV, default "{}".format(defs['kt']),

default=defs['kt'], type=float, )

    return parser.parse_args()

# load database of nuclear data
```

```
def dbload(file_name):  
    return json.load(open(file_name,'r'))  
  
# write program info to string  
def wrinfo(info,args):  
    s = '\n'  
    s = s + '# info ::\n'  
    for ki, vi in info.items():  
        s = s + '# {:>24s} = {}\n'.format(ki,vi)  
    s = s + '\n'  
    s = s + '# args ::\n'  
    for ki, vi in vars(args).items():  
        s = s + '# {:>24s} = {}\n'.format(ki,vi)  
    s = s + '\n'  
    return s  
  
# create random normalized direction  
def dir_random(dist_theta=lambda: numpy.arccos(1.0 - 2.0*numpy.random.random()),dist_phi=lambda:  
2.0*numpy.pi*numpy.random.random()):  
    t, p = dist_theta(), dist_phi()  
    return linalg.array2dir(numpy.array( [ numpy.sin(t)*numpy.cos(p), numpy.sin(t)*numpy.sin(p),  
numpy.cos(t), ]))  
  
# driver function  
def main():  
  
    # read command line arguments  
    args = get_args(info)
```



```
# print program info
print(wrinfo(info,args),end=")

# load database
data = dbload(args.db)

# particles
p1 = 'h2'
p2 = 'h3'
p3 = 'n1'
p4 = 'he4'

# get mass of reactives from DB
m1 = data[p1]['mass_value'] # deuterium
m2 = data[p2]['mass_value'] # tritium

# get mass of products from DB
m3 = data[p3]['mass_value'] # neutron
m4 = data[p4]['mass_value'] # alpha

# change units, AMU to MeV
m1 = m1*units.mass.amu_to_MeV
m2 = m2*units.mass.amu_to_MeV
m3 = m3*units.mass.amu_to_MeV
m4 = m4*units.mass.amu_to_MeV
```

```
# get reaction heat

q = (m1 + m2) - (m3 + m4)

# define number of samples

num_samples = args.samples

# create distributions

mbdist = maxwell.dist_maxwell_c(args.kt)

dist_ene = lambda: mbdist.sample(1)[0]

theta_lo = 0.0

theta_hi = numpy.pi

theta_delta = theta_hi - theta_lo

f_lo = 0.5*(1.0 - numpy.cos(theta_lo))

f_hi = 0.5*(1.0 - numpy.cos(theta_hi))

f_delta = f_hi - f_lo

dist_angle_theta = lambda: numpy.arccos(1.0 - 2.0*(f_lo + f_delta*numpy.random.random()))

phi_lo = 0.0

phi_hi = 2.0*numpy.pi

phi_delta = phi_hi - phi_lo

dist_angle_phi = lambda: phi_lo + phi_delta*numpy.random.random()

# print parameters

s = ""

s = s + '# particles :'\n'

s = s + '# p1 = {}'\n'.format(p1)
```

```
s = s + '# p2 = {}'.format(p2)
s = s + '# p3 = {}'.format(p3)
s = s + '# p4 = {}'.format(p4)
s = s + '\n'
s = s + '# masses ::\n'
s = s + '# m1 = {:.15.7e} MeV\n'.format(m1)
s = s + '# m2 = {:.15.7e} MeV\n'.format(m2)
s = s + '# m3 = {:.15.7e} MeV\n'.format(m3)
s = s + '# m4 = {:.15.7e} MeV\n'.format(m4)
s = s + '\n'
s = s + '# reaction heat ::\n'
s = s + '# q = {:.15.7e} MeV\n'.format(q)
s = s + '\n'
print(s,end='')

# print header
s = '# descriptipon ::\n'
s = s + '# column_00 = kinetic energy for particle 1, MeV\n'
s = s + '# column_01 = kinetic energy for particle 2, MeV\n'
s = s + '# column_02 = kinetic energy for particle 3, MeV\n'
s = s + '# column_03 = kinetic energy for particle 4, MeV\n'
s = s + '# column_04 = cosine of the dispersion angle between products\n'
s = s + '# column_05 = residual, res = |((E1 + E2) - (E3 + E4))/(E1 + E2)|\n'
s = s + '\n'
print(s,end='')

# loop over samples
```

```
for _ in range(num_samples):

    # get kinetic energy

    k1 = dist_ene()

    k2 = dist_ene()

    # define angle of dispersion of products

    theta = dist_angle_theta()

    phi = dist_angle_phi()

    # define direction of propagation of incident particles

    d1 = dir_random(dist_angle_theta,dist_angle_phi)

    d2 = dir_random(dist_angle_theta,dist_angle_phi)

    # solve collision

    q1, q2, q3, q4 = collision.solve(m1,m2,m3,m4,k1,k2,d1,d2,theta,phi)

    # validate results

    ene_tot_1 = q1[lorentz.var_ene] + q2[lorentz.var_ene]

    ene_tot_2 = q3[lorentz.var_ene] + q4[lorentz.var_ene]

    if ene_tot_1 > 0.0:

        res = numpy.abs(1.0 - ene_tot_2/ene_tot_1)

    else:

        res = numpy.abs(ene_tot_2)

    # kinetic energy of products

    k3 = q3[lorentz.var_ene] - m3
```

```
k4 = q4[lorentz.var_ene] - m4

# direction of propagation of reaction products

d3 = linalg.array2dir(q3[1:])
d4 = linalg.array2dir(q4[1:])

# angle between products

w = numpy.dot(d3,d4)

# print results

s = ''
for xi in [ k1, k2, k3, k4, w, res, ]:
    s = s + '{:15.7e}'.format(xi)

print(s)

return

# launch program

if __name__=='__main__':
    sys.exit(main())
```

CALCULOS.PY

```
# Copyright (C) 2021 Universidad Politécnica de Madrid

#

# calculos.py is free software: you can redistribute it and/or modify
# it under the terms of the GNU General Public License as published by
# the Free Software Foundation, either version 3 of the License, or
# (at your option) any later version.

#

# calculos.py is distributed in the hope that it will be useful,
# but WITHOUT ANY WARRANTY; without even the implied warranty of
# MERCHANTABILITY or FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. See the
# GNU General Public License for more details.

#

# You should have received a copy of the GNU General Public License
# along with collision.py. If not, see <https://www.gnu.org/licenses/>.

#

# Version control

# 2021.06.13 : Vicente Manuel Ledesma Albarran (Vicente.ledesma.albarran@alumnos.upm.es)

# - Initial version

import sys

import argparse

import numpy as np

import matplotlib.pyplot as plt

import scipy.stats

# module info

info = { 'name': 'calculos',
```

```
'desc': 'Calculos estadísticos de distribuciones energéticas de los neutrones para distintas energías',  
'author': 'Vicente Manuel Ledesma Albarrán',  
'email': 'vicente.ledesma.albarran@alumnos.upm.es',  
'year': 2021,  
'version': [ 1, 0, 0, ],  
'license': 'Copyright (C) 2020-2021 Universidad Politécnica de Madrid',  
}
```

```
# write program info
```

```
def wrinfo(info):
```

```
    s = '# info ::\n'
```

```
    for ki, vi in info.items():
```

```
        s = s + '# {:>24s} = {}\n'.format(ki,vi)
```

```
    return s
```

```
# write program command line arguments
```

```
def wrargs(args):
```

```
    s = '# args ::\n'
```

```
    for ki, vi in vars(args).items():
```

```
        s = s + '# {:>24s} = {}\n'.format(ki,vi)
```

```
    return s
```

```
#Carga de datos
```

```
def get_args(info):
```

```
    # create argument parser
```

```
    parser = argparse.ArgumentParser(description='{desc}'.format(** info),epilog='{license},  
{email}'.format(** info))
```

```
# positional arguments
parser.add_argument( 'file_energy', help='Energy data file', type=str, )

return parser.parse_args()
```

```
# Carga de los datos
```

```
def load_file(file_name):
    data=np.loadtxt(file_name)
    return data[:,2]
```

```
def main(info):
```

```
    args = get_args(info)
    data=load_file(args.file_energy)
    energy = data
```

```
#Dibujos
```

```
h, bin_edges = np.histogram(energy,bins=40,density=True)
plt.figure()
plt.step(bin_edges[:-1],h)
loc, scale =scipy.stats.norm.fit(energy)
x=np.linspace(loc-4*scale,loc+4*scale,num=1000)
fx=scipy.stats.norm.pdf(x,loc=loc,scale=scale)
plt.figure()
plt.plot(0.5*(bin_edges[:-1]+bin_edges[1:]),h)
```



```
n1, bins_position, _ = plt.hist(energy,bins=40,density=True,fc='g',alpha=0.2,)
plt.legend(loc=0)
plt.xlabel('Energy (MeV)')
plt.ylabel('PDF')
plt.show()

#Cálculos estadísticos

mean, var, skew ,kurt = scipy.stats.norm.stats(moments='mvsk',loc=loc,scale=scale)

#Media estadística
print('Media = ', mean)

#Varianza
print('Variación = ',var)

# Desviación estandar
std=np.sqrt(var)
print('Desviación estandar = ',std)

#Ancho de la distribución
Wide=std/mean
print('Ancho de la distribución = ',Wide)

return

if __name__=='__main__':
    sys.exit(main(info))
```

