



UNIVERSIDAD DE GRANADA

Facultad de Ciencias

GRADO EN FÍSICA

TRABAJO FIN DE GRADO

Simulación con SIMION de un haz de deuterones enfocado usando lentes de Einzel

Presentado por:
D^a. Neus Triay Preto

Curso Académico 2023/2024

Resumen

En esta tesis se estudiará un acelerador electrostático didáctico en proceso de diseño, utilizando el software de simulación SIMION. Se comenzará con una introducción a la óptica de iones, con énfasis en el sistema óptico de las lentes de Einzel. Además, se aprenderá el uso del simulador, así como su funcionamiento interno. Finalmente, se detallarán los distintos componentes del acelerador de partículas y se simulará su comportamiento en conjunto.

Abstract

In this thesis, an educational electrostatic accelerator, currently in the design process, will be studied using the simulation software SIMION. The work will begin with an introduction to ion optics, with an emphasis on the optical system of Einzel lenses. Additionally, the use of the simulator and its internal workings will be learned. Finally, the various components of the particle accelerator will be detailed, and their combined behavior will be simulated.

Índice

1	Introducción	4
2	Fundamento teórico	5
2.1	Óptica de iones	5
2.1.1	Lentes de Einzel	10
3	El software de simulación SIMION	11
3.1	Cálculo de los campos electromagnéticos	12
3.2	Cálculo de las trayectorias de las partículas	13
3.3	Lenguaje de programación LUA	14
3.4	Ejemplo de simulación	15
4	Deuterón	17
5	Acelerador de partículas	18
5.1	Fuente de iones	19
5.1.1	Método ECR plasma	20
5.1.2	Pierce Electrode Geometry	21
5.2	Sistema de convergencia	23
5.3	Blanco	23
6	Resultados y discusión de la simulación	24
7	Conclusiones	28
	Referencias	29
A	Anexos	31
A.1	Demostración del método relaxation	31
A.2	Código LUA geometría del acelerador	33
A.3	Código LUA de la simulación	34
A.4	Tabla de datos	37

1 Introducción

Los aceleradores de partículas han sido instrumentos fundamentales para el estudio de la física desde su invención. El Gran Colisionador de Hadrones (LHC) es el ejemplo más destacado en la actualidad, pero existen numerosos aceleradores de diversos tamaños y usos. Estos dispositivos no solo se utilizan en la investigación de la física subatómica, sino que también tienen aplicaciones en campos como la medicina, donde se emplean en tratamientos oncológicos; en el estudio del medio ambiente, para monitorear la contaminación; y en la industria de materiales, mejorando su durabilidad.[1][2]

En numerosos campos de investigación, el uso de software de simulación permite reducir costos y riesgos al prever problemas potenciales antes de la construcción física de los dispositivos. Esto se logra estudiando y optimizando los componentes en un entorno controlado. En esta tesis, se utilizará el software de simulación SIMION, que es fundamental en la investigación y el diseño de aceleradores de partículas debido a su capacidad para modelar y analizar el comportamiento de las partículas en campos electromagnéticos.

El uso principal de SIMION será para estudiar un acelerador electrostático didáctico en proceso de diseño. Como primer paso, se establecerá la teoría de la óptica de iones, que es fundamental para comprender el comportamiento de estas partículas dentro del acelerador. El sistema central de estudio serán las lentes de Einzel, que se utilizarán en el acelerador propuesto. Seguidamente, se aprenderá a manejar el simulador, estudiando tanto su funcionamiento interno como su interfaz de usuario.

Un aspecto importante del estudio será el análisis de los distintos componentes del acelerador por separado. El programa SIMION proporcionará las herramientas necesarias para comprender estos componentes. Este conocimiento permitirá no solo replicar y analizar el funcionamiento de un acelerador real, sino también identificar y proponer mejoras en su diseño.

Finalmente, se simulará el comportamiento del acelerador en su conjunto. A través de estas simulaciones, se discutirán las posibles mejoras que podrían implementarse para optimizar el rendimiento y la eficiencia del acelerador.

2 Fundamento teórico

2.1 Óptica de iones

La óptica de iones es una subdisciplina de la física que se ocupa de manipular y controlar los iones utilizando campos electromagnéticos. Con el fin de estudiar las distintas características de las partículas cargadas, se utilizan distintos sistemas ópticos formados por lentes electrostáticas que permiten la aceleración, el transporte y la separación del haz, entre otros. Las principales aplicaciones de la óptica de iones son la espectrometría de masas, la microscopía de iones y los aceleradores de partículas. En este apartado se desarrollarán los conceptos necesarios para comprender las trayectorias de los iones en el interior de un acelerador de partículas. [3]

Analogía entre óptica de iones y de fotones

Para poder entender el funcionamiento de la óptica de iones de manera sencilla, conviene establecer un paralelismo con la óptica geométrica. El comportamiento de las lentes y los espejos es algo común en el día a día y puede ayudarnos a generar una visión conceptual de como funciona la óptica de iones.[4]

En la óptica de fotones la propiedad capaz de modificar la trayectoria del rayo es el índice de refracción. La Ley de Snell proporciona la relación entre los ángulos de los rayos incidente y emergente en la frontera de dos medios con distintos índices de refracción:[4]

$$n_1 \sin(\alpha_1) = n_2 \sin(\alpha_2) \quad (2.1)$$

En cuanto a la óptica de iones, la propiedad que altera la trayectoria de los rayos es el potencial eléctrico. En este apartado, con ayuda de ejemplos, se analizarán las similitudes y las diferencias de ambas ópticas: la de iones y la de fotones. Empezando con el caso más simple, la transición de los rayos de un medio a otro a través de una frontera planar. [4]

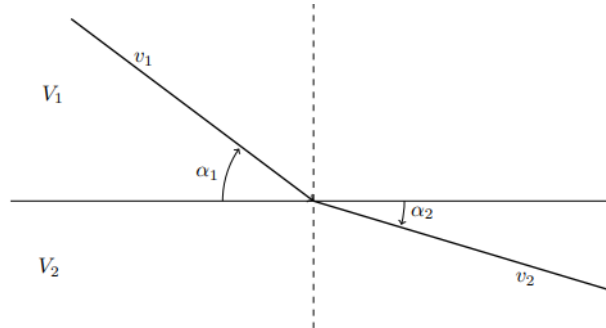


Figura 1: Transición de un haz de iones entre dos medios con potenciales V_1 y V_2 a través de una frontera planar

Este primer ejemplo (Figura 1) es análogo a la refracción de un haz de fotones.

Ambos rayos tienen su propia velocidad (v_1, v_2) y ángulos con respecto a la normal (α_1, α_2); pero, a diferencia de la óptica de fotones, en cada medio hay un valor del potencial distinto (V_1, V_2). Como la frontera entre ambos medios se encuentra en el eje $\hat{x}$, la componente $\hat{y}$ de la velocidad permanecerá constante a lo largo de toda la transición. En esta interacción se conservan tanto la energía total como el momento angular: [4]

$$\frac{1}{2}mv_1^2 + eV_1 = \frac{1}{2}mv_2^2 + eV_2 \quad (2.2)$$

$$mv_{1\hat{x}} = mv_{2\hat{x}} \rightarrow mv_1 \sin(\alpha_1) = mv_2 \sin(\alpha_2) \quad (2.3)$$

Desarrollando las expresiones 2.2 y 2.3 se obtiene la relación entre el rayo incidente y el rayo emergente del sistema de estudio. Esta no es más que la Ley de Snell pero con el término $V_i^{\frac{1}{2}}$ en lugar del índice de refracción.[4]

$$V_1^{\frac{1}{2}} \sin(\alpha_1) = V_2^{\frac{1}{2}} \sin(\alpha_2) \quad (2.4)$$

En general la expresión que relaciona las trayectorias de los rayos incidente y transmitido es más difícil de obtener y se discutirá con más detalle en los siguientes apartados. A continuación se muestra otro ejemplo de la óptica de iones para ilustrar la dificultad del estudio de las trayectorias de los iones.

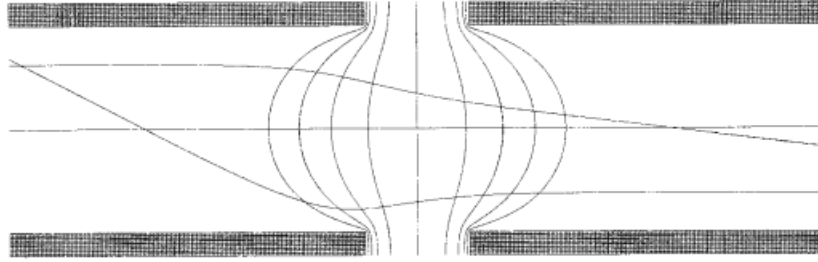


Figura 2: Transición de un haz de iones entre dos medios con potenciales V_1 y V_2 a través de una frontera esférica de radio R (Heddle, 2000, p. 3)

El segundo ejemplo (Figura 2) que estudiaremos es la transición entre dos medios con distintos potenciales eléctricos separados por una frontera esférica de radio R . Este sistema óptico consiste en dos cilindros coaxiales, cada uno con un potencial distinto (V_1, V_2) y separados por una distancia igual a la de su radio común, R . En el interior del cilindro los potenciales son prácticamente iguales al de los electrodos, pero a medida que nos acercamos a los extremos de los cilindros este varía. Se ilustran las líneas equipotenciales en el exterior de ambos cilindros, que son simétricas con respecto a una línea equipotencial central de valor $\frac{V_1+V_2}{2}$. Las trayectorias de los rayos son curvas cuando cruzan el área de transición, y solo dentro del cilindro tienen trayectorias rectas. [4]

Formalismo matricial

Debido al último ejemplo, se ha comprobado que no es inmediato ni trivial obtener una expresión para la relación entre los rayos incidente y transmitido para

cualquier configuración de lentes electrostáticas. Se requiere de un formalismo lo más general posible para estudiar todos los casos. Este formalismo consiste en utilizar el álgebra de matrices.

Se utiliza un sistema de 6 coordenadas para definir las trayectorias de los rayos y las modificaciones que estas sufren. Los rayos se definen mediante vectores de tamaño 6×1 , donde cada componente especifica la posición, el ángulo o la desviación relativa del momento, con respecto a una trayectoria de referencia:[5]

$$\vec{r}(s) = \begin{pmatrix} x \\ a \\ y \\ b \\ l \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{desplazamiento horizontal} \\ \text{desviación angular horizontal} \\ \text{desplazamiento vertical} \\ \text{desviación angular vertical} \\ \text{diferencia de camino óptico} \\ \text{desviación relativa del momento} \end{pmatrix}.$$

Donde se define la desviación relativa del momento como $\delta = \frac{p-p_0}{p_0}$ con p_0 el momento de la partícula de referencia.[5]

La obtención de un nuevo rayo que acaba de atravesar una frontera entre dos valores de potencial distintos, pasando de una posición s_1 a s_2 se obtiene a través de la siguiente operación matricial: $\vec{r}(s_2) = R(s)\vec{r}(s_1)$. La matriz $R(s)$ es de dimensión 6×6 y representa la acción de la lente electrostática sobre el rayo. Su expresión general es la siguiente:[5]

$$\vec{R} = \begin{pmatrix} (x/x) & (x/a) & 0 & 0 & 0 & (x/\delta) \\ (a/x) & (a/a) & 0 & 0 & 0 & (a/\delta) \\ 0 & 0 & (y/y) & (y/b) & 0 & (y/\delta) \\ 0 & 0 & (b/y) & (b/b) & 0 & (b/\delta) \\ (l/x) & (l/a) & (l/y) & (l/b) & 1 & (l/\delta) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Los elementos de la diagonal hacen referencia a las magnificaciones. La última columna hace referencia a las dispersiones. Los elementos fuera de la diagonal hacen referencia al enfoque.[5]

Trabajar con sistemas de 6 variables no es muy práctico, por lo que la matriz genérica puede descomponerse en matrices más simples. Si en un sistema óptico solo nos interesa conocer el comportamiento del desplazamiento y desviación angular horizontales, entonces se podría trabajar con una submatriz de la matriz genérica cuyos elementos serían los siguientes:[5]

$$\vec{R} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (x/x) & (x/a) \\ (a/x) & (a/a) \end{pmatrix}$$

Para calcular las componentes de esta matriz de transferencia se debe resolver la ecuación paraxial. En el siguiente apartado se llevará a cabo la resolución en la aproximación a primer orden.

Ecuación paraxial

En el contexto de la óptica de iones, la ecuación paraxial es una ecuación diferencial que describe la trayectoria de partículas cargadas en sistemas electromagnéticos bajo la aproximación paraxial. Esta aproximación asume que las trayectorias de las partículas están cerca del eje central y que los ángulos de desviación son pequeños.[4]

A continuación se obtiene la ecuación paraxial para el sistema conocido como tubo acelerador (Figura 2), el cual corresponde con el ejemplo que se ha estudiado al principio del apartado. Este sistema óptico es conocido por ser el elemento central de la óptica de iones. El punto de partida es la ecuación del movimiento de Newton.[4]

$$\frac{d}{dt}\vec{p} = -e\vec{\nabla}V = e\vec{E} \quad (2.5)$$

Siendo e la carga eléctrica del electrón, V el potencial eléctrico y $\vec{E}$ el campo eléctrico. Teniendo en cuenta la geometría del tubo acelerador, se nos simplifica el cálculo utilizando coordenadas cilíndricas. Escribimos la expresión anterior por componentes:[6]

$$\frac{d}{dt}(\gamma m \dot{r}) = -e \frac{\partial V}{\partial r}, \quad \frac{d}{dt}(\gamma m \dot{z}) = -e \frac{\partial V}{\partial z} \quad (2.6)$$

Donde se define el término γ como factor de Lorentz, y se utiliza la notación de Newton para designar las primeras derivadas de las variables ($\frac{dx}{dt} = \dot{x}$). Realizamos el siguiente cambio de variable:[6]

$$v_z = \dot{z} = \frac{dz}{dt}, \quad \frac{d}{dt} = v_z \frac{d}{dz} \quad (2.7)$$

Redefiniendo a las variables como sigue:

$$\dot{r} = v_z r', \quad v^2 = v_z^2 (1 + r'^2) \quad (2.8)$$

Sustituyendo estos cambios de variable en la expresión 2.6, se obtiene la ecuación paraxial:

$$r'' = \frac{e}{\gamma m v^2} \left(r' \frac{\partial V}{\partial z} - \frac{\partial V}{\partial r} \right) \quad (2.9)$$

Para derivar la ecuación paraxial de primer orden, debemos expandir el potencial en una serie de potencias. Para ello, tendremos en cuenta la ecuación de Laplace en coordenadas cilíndricas:[4]

$$\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial V}{\partial r} \right) = 0 \quad (2.10)$$

Debido a la simetría rotacional del tubo acelerador, las rotaciones en θ no varían el potencial, por lo que todos los términos impares en la serie de potencias de V desaparecen:[4]

$$V(r, z) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n(z) r^{2n} \quad (2.11)$$

Si introducimos 2.11 en 2.10, se obtiene el siguiente resultado:

$$V(r, z) = V(0, z) - \frac{r^2}{4} V^{(2)}(0, z) + \frac{r^4}{64} V^{(4)}(0, z) + \dots \quad (2.12)$$

Donde el exponente entre paréntesis representa el orden de derivación respecto a z . Al introducir esta última expresión (2.12) en el orden más pequeño dentro de la ecuación paraxial (2.9) obtenemos la ecuación paraxial en la aproximación lineal no relativista ($\gamma = 1$):[6]

$$r'' = \frac{e}{pv} \left(r' V'(z) + \frac{r}{2} V''(z) \right) \quad (2.13)$$

Se puede obtener una solución aproximada de la ecuación paraxial utilizando el tratamiento refinado sobre esta; éste método se conoce como segmentación. La solución aproximada para el potencial nos indica la transformación de un rayo $\vec{r}(z_2) = R\vec{r}(z_1)$, donde la matriz R se define como sigue:[4]

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{E_2 - E_1}{2p_2 v_2} \frac{1}{L} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & L_{\text{eff}} \\ 0 & \frac{p_1}{p_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{E_2 - E_1}{2p_1 v_1} \frac{1}{L} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Donde E_i es la energía total del rayo ($E = T + V$); los subíndices 1, 2 hacen referencia al punto inicial y final del rayo; el factor L es la distancia de separación entre ambos puntos; y la longitud efectiva L_{eff} se define como:[4]

$$L_{\text{eff}} = L \frac{p_1 c}{E_2 - E_1} \ln \left(\frac{p_2 c + E_2}{p_1 c + E_1} \right) \quad (2.15)$$

La matriz R de la expresión 2.14 está separada en 3 submatrices. La primera y la última indican la aceleración/desaceleración que sufren las partículas, dependiendo de la diferencia de energía en los puntos iniciales y finales: si la partícula pasa de un medio de menor energía a mayor energía ($E_2 > E_1$, cuando $V_2 > V_1$), entonces la primera matriz será de enfoque y la última de desenfoco, tal y como se muestra en la Figura 3. En el caso contrario, se invierten los comportamientos. La segunda matriz es una matriz de desplazamiento.[3][4]

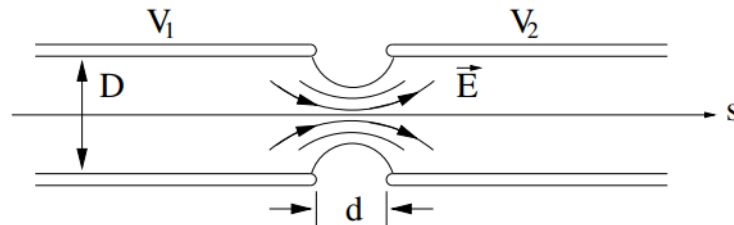


Figura 3: Esquema del funcionamiento de un tubo acelerador con potenciales V_1 y V_2 . La separación entre ambos cilindros igual al radio de estos. Se muestran las líneas del campo eléctrico que se generan. (Hinterberger, 2005, p. 29)

2.1.1 Lentes de Einzel

Las lentes de Einzel son un sistema óptico con consiste en 3 o más lentes en serie (de cualquier geometría: cilíndrica, rectangular, etc), de las cuales las lentes exteriores tienen el mismo valor del potencial, y la lente interior tiene un valor distinto. Este tipo de lentes se utiliza para converger iones sin cambiar su energía. Esto se consigue mediante la manipulación de los campos eléctricos que las lentes producen, ya que el sistema óptico es simétrico.[7]

Existen dos tipos de lentes de Einzel: las que primero aceleran y luego frenan a las partículas; y las que tienen el comportamiento opuesto. Esta clasificación depende de la distribución de los potenciales en las lentes. [8]

Este sistema óptico se estudia como la composición de tubos aceleradores con polaridades opuestas (el primero acelera y el segundo frena, o viceversa). Por lo que, la matriz de transporte del sistema puede escribirse como el producto de dos matrices de transporte:[8][9]

$$\vec{r}(z_2) = R_1(V_1, V_2)R_2(V_2, V_1)\vec{r}(z_1) \quad (2.16)$$

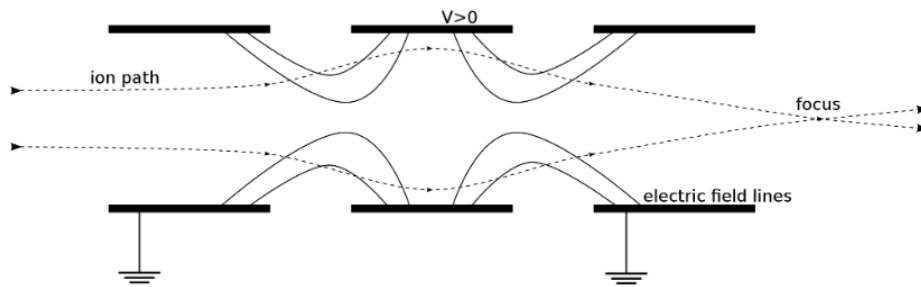


Figura 4: Esquema de unas Lentes de Einzel. Se muestra que el potencial central es mayor que el de los extremos, lo que hace converger a las partículas. Se muestran las líneas del campo eléctrico generado, y las trayectorias de las partículas. (Wikipedia, 2008)

3 El software de simulación SIMION

Gran parte del trabajo se llevará a cabo con **SIMION**, un software de simulación de partículas utilizado principalmente para simular el movimiento de partículas cargadas en campos electromagnéticos. Para llevar a cabo las simulaciones, el usuario debe diseñar los potenciales eléctricos y/o magnéticos y establecer las condiciones iniciales de las partículas; con esto, el simulador se encarga de llevar a cabo la simulación. A continuación se esquematizará el procedimiento de realizar una simulación.[6][10][11][12]

1. **Potential array:** Lo primero es crear un *potential array* (PA) que almacenará toda la información referente a las características del entorno en el que trabajaremos: tipo de campo (eléctrico o magnético), sistema de coordenadas, dimensión del espacio, etc.
2. **Potenciales electromagnéticos:** Para definir los potenciales, se debe definir la geometría de cada componente que formará el potencial (por ejemplo, para las lentes de Einzel, se deben definir 3 discos planos de igual dimensión, separados una distancia d). Estos potenciales serán los que luego crearán los campos electromagnéticos.
3. **Campos electromagnéticos:** Mediante la función *refine* se obtienen los valores de los campos electromagnéticos. Estos valores se pueden ajustar haciendo uso de la función *fast adjust*.
4. **Partículas/iones:** Se debe conocer la masa, carga, número de partículas y energía inicial del haz de partículas para poder llevar a cabo la simulación.
5. **Simulación:** Antes de correr la simulación, hay que seleccionar los resultados que se quieran guardar: posiciones, velocidades, partículas colisionadas, etc. Después de correr la simulación, se puede repetir el proceso cambiando las características tanto de los campos como de las partículas.

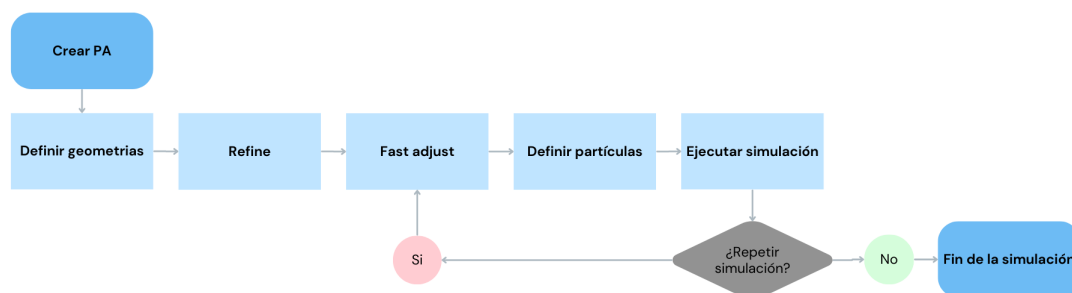


Figura 5: Diagrama de flujo del proceso de simulación en SIMION

El proceso de simulación explicado anteriormente se puede realizar desde la interfaz de usuario del programa, haciendo uso de ficheros *.gem* mediante el lenguaje de programación Lua, o una combinación de ambos métodos anteriores.

Para la simulación que se estudiará en esta tesis, los cálculos que realiza SIMION constan de dos partes diferenciadas: el cálculo de los campos electromagnéticos y el cálculo de las trayectorias de las partículas. A continuación se explicarán los métodos numéricos detrás de estos procesos.

3.1 Cálculo de los campos electromagnéticos

Para poder calcular el campo eléctrico, SIMION necesita recibir un array (*PA*), el cual le proporcione la información sobre que puntos del espacio tienen un potencial ya definido, y que puntos no lo tienen. Con esto creado, es la función *refine* del simulador la que se encarga de calcular el valor del potencial eléctrico en los puntos del espacio del array en los que no se había definido. Para obtener esos valores, SIMION utiliza el método iterativo de las diferencias finitas (FDM) conocido como *relaxation*. [10]

Para llevar a cabo éste método, el simulador tomará las ecuaciones diferenciales de Poisson (3.1) o de Laplace (3.2), (dependiendo de si hay presencia o ausencia de carga en el dominio de estudio, respectivamente) y las aproximará a una diferencia finita. [10]

$$\nabla \cdot (\epsilon_r \nabla \phi) = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (3.1)$$

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (3.2)$$

Con esto, el potencial no definido por el usuario se calculará como el promedio de los 4 (o 6) puntos que lo rodean. La dempstración se encuentra en el Apéndice A.1. Así se consigue definir un número p de puntos en la *PA*. Este proceso se repite iterativamente, hasta que el número de puntos con valor de potencial definido es igual al número total de puntos de la *PA*, y hasta que el valor del potencial entre iteraciones no varíe más del $c = 0.005 \text{ V}$ (donde c es el *converge objective*). [10]

Además del método de diferencias finitas, también se tiene en cuenta las condiciones de contorno; estas provienen de los potenciales definidos en los bordes del dominio de la simulación o de las simetrías de las geometrías representadas, entre otros. [10]

Con todo esto, SIMION es capaz de calcular, en un primer instante, los valores aproximados del potencial en todos los puntos del espacio definido en la *PA*. A continuación se enumeran algunos de los factores que ayudan a mejorar el rendimiento del *refine*: [10]

- **Convergence Objective:** Es el valor que determina cuando debe finalizar la función *refine*. Este parámetro afecta tanto a la precisión como al tiempo de cómputo del cálculo de los potenciales.
- **Max Over Relaxation:** Modifica el valor del potencial en cada iteración con el fin de acelerar la convergencia hacia una solución.

- **Historical Memory Factor:** Afecta en la importancia que tienen los valores previamente calculados.
- **Iteration Limit:** Es el valor máximo de iteraciones que el simulador llevará a cabo antes de dar por finalizado el cálculo de los potenciales.
- **Skipped Point Refining:** Esta opción permite al simulador omitir puntos específicos de la PA que no requieran refinamiento.

Por lo general es suficiente con modificar el *convergence objective* para mejorar la precisión y el tiempo de cómputo de las simulaciones, ya que los valores predefinidos ofrecidos por SIMION ofrecen buenos resultados.[10]

3.2 Cálculo de las trayectorias de las partículas

Para el cálculo de las trayectorias de las partículas, SIMION calcula primero la fuerza aplicada a las partículas para luego calcular la aceleración que esta fuerza eléctrica produce a los iones de estudio. Finalmente aplica el método numérico de Runge Kutta para predecir sus trayectorias.[10]

Para el cálculo de la fuerza eléctrica debemos conocer el valor del campo eléctrico. Para obtenerlo, SIMION utiliza el método de las diferencias finitas. Este método consiste en considerar una función diferencial, como una diferencia conocida. Para un caso ejemplo como el de la derivada, se obtendría el valor aproximado como sigue:[10]

$$f'(a) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \rightarrow f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \quad (3.3)$$

La relación entre el campo y el potencial eléctricos se muestra en la expresión 3.4. Aplicando el método de las diferencias finitas, se nos quedaría como se muestra en la expresión 3.5:[10]

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} V \quad (3.4)$$

$$E = -(V_i - V_j) \quad (3.5)$$

Siendo i, j dos puntos contiguos en la malla. Con esto, ya podemos calcular la fuerza eléctrica que las partículas sufrirán. Para ello, es necesario conocer el valor de la carga de los iones, que lo ha proporcionado el usuario:[10]

$$\vec{F}_e = q\vec{E} \quad (3.6)$$

Para calcular las trayectorias de los iones, se utiliza el método numérico Runge Kutta, el cual a partir de la posición (r_0), velocidad (v_0) y aceleración (a_0) iniciales de las partículas, calcula su posición (r_n), velocidad (v_n) y aceleración (a_n) un tiempo t posterior; repitiendo el proceso iterativamente hasta obtener la trayectoria completa de los iones. Para establecer la posición y velocidad inicial de los

iones, es el usuario el que introduce los datos de posición y energía cinética de las partículas en el instante $t = 0s$. Para obtener la aceleración inicial, SIMION hace uso de la fuerza eléctrica calculada anteriormente, y obtiene la aceleración de la siguiente forma:[13][14]

$$F_e = q\vec{E} = m \cdot \vec{a} \rightarrow \vec{a} = \frac{q\vec{E}}{m}$$

Con ello, calcula la posición en un instante t posterior. El tiempo varía como sigue:

$$t_{n+1} = t_n + h$$

Donde h es el intervalo de tiempo discreto. Y la velocidad y la posición se calculan con las siguientes expresiones:

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (3.7)$$

$$r_{n+1} = r_n + \frac{1}{6} (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \quad (3.8)$$

Donde las funciones utilizadas se definen como sigue:

$$\begin{cases} k_1 = h \cdot a(r_n, v_n, t) \\ k_2 = h \cdot a(r_n + \frac{l_1}{2}, v_n + \frac{k_1}{2}, t_n + \frac{h}{2}) \\ k_3 = h \cdot a(r_n + \frac{l_2}{2}, v_n + \frac{k_2}{2}, t_n + \frac{h}{2}) \\ k_4 = h \cdot a(r_n + l_3, v_n + k_3, t_n + h) \end{cases} \quad (3.9)$$

$$\begin{cases} l_1 = h \cdot v_n \\ l_2 = h \cdot \left(v_n + \frac{k_1}{2} \right) \\ l_3 = h \cdot \left(v_n + \frac{k_2}{2} \right) \\ l_4 = h \cdot (v_n + k_3) \end{cases} \quad (3.10)$$

Al obtener los valores de la posición y la velocidad en el nuevo tiempo $t_n + h$, el simulador vuelve a calcular la aceleración en ese punto. Con estos nuevos datos, ya pueden calcularse la posición y velocidad en un tiempo $t_n + 2h$. Este proceso se repite iterativamente hasta obtener la trayectoria completa. [10][13][14]

3.3 Lenguaje de programación LUA

Para definir la PA mediante los ficheros *gem*, se debe emplear el lenguaje de programación LUA. Con ello se pueden controlar y personalizar algunos aspectos de la simulación. En nuestro caso concreto, se utilizará para definir la geometría del

acelerador de partículas de manera que sea más fácil cambiar el valor de ciertas variables. Esto proporciona más versatilidad a la hora de simular, que si se utilizara la interfaz de usuario de SIMION.[10][15][16]

A continuación se resumen brevemente las funciones principales utilizadas en el código LUA de nuestro acelerador de partículas.

- *pa_define()*: La primera función que se encuentra en un fichero *gem*, y sirve para definir las características de la PA: tipo de campo (eléctrico o magnético), dimensión del espacio de trabajo y simetría utilizada.
- *locate()*{}: Determina la ubicación de las geometrías que se han definido en su interior.
- *e()*{}: Especifica el valor del potencial de las geometrías que se definen en su interior.
- *nothin_inside_or_on()*: Función que determina que parte de la geometría en su interior debe representarse. En este caso, se debe representar la frontera y el interior.
- *box()*: Función geométrica que permite dibujar una caja.
- *polyline()*: Función geométrica que dibuja una línea como conexión de los puntos especificados en su interior.

3.4 Ejemplo de simulación

Para introducir el uso de SIMION se llevará a cabo una simulación del sistema óptico de las lentes de Einzel, distinguiendo 2 casos: aceleración y frenado de las partículas. El objetivo es familiarizarse con el simulador, a la vez que se validan los conceptos teóricos explicados en apartados anteriores.

Se hará una comparación y descripción cualitativa de la capacidad de convergencia de ambos tipos de lentes. Se utilizarán los mismos valores del potencial, pero simplemente se van a distribuir de manera distinta: para las lentes de tipo frenado-acelerado, las lentes externas están a potencial nulo, y la lente interna a potencial positivo; mientras que para las lentes de tipo acelerado-frenado, es la lente interna la que está a potencial nulo, y las lentes externas las que tienen un potencial positivo.

Se necesitarán definir los electrodos (dimensión y voltaje), y las partículas (energía cinética y posición iniciales) que se van a simular. Los datos utilizados se han sacado del vídeo de ejemplo (*DeepMind*, 2009) y pueden verse en las tablas (1) y (2). Las partículas seleccionadas para el estudio son protones, debido al amplio conocimiento existente sobre sus propiedades.

Geometría	Cilíndrica
Radio interior	40 mm
Radio exterior	50 mm
Anchura	100 mm
Voltaje de electrodos no nulos	1000 V

Tabla 1: Información de los electrodos utilizados en la simulación

Energía cinética inicial	900 eV
Número de partículas	21
Posición inicial	$\vec{r} = (0, y)$ mm $\forall y \in [-40, 40]$
Dirección inicial	$\hat{x}$

Tabla 2: Información de los protones utilizados en la simulación

Las lentes de Einzel de tipo frenado-aceleración son las más comunes, debido a su comodidad y efectividad. Para lanzar las partículas hacia el sistema, estas deberán ser aceleradas mediante un potencial producido por la fuente. Como el potencial del electrodo central tendrá un valor parecido y de mismo signo que el potencial de la fuente, ambos pueden ser alimentados a través de un divisor de voltaje. Además, se pueden obtener buenos resultados de convergencia (una longitud focal menor) utilizando un voltaje central parecido al voltaje de la fuente.[9]

Por otro lado, las lentes de tipo aceleración-frenado necesitan dos fuentes de voltaje distintas y con polaridad opuestas para alimentar al sistema. Además, se necesitan voltajes bastante más elevados para conseguir la misma potencia refractiva que en las lentes de tipo frenado-aceleración. Estos comportamientos se reflejan en las simulaciones realizadas que se muestran en las figuras (6), (7), (8) y (9). Las líneas azules representan las trayectorias de los protones, y las líneas rojas son líneas equipotenciales. Por lo que, con las mismas características en cuanto a partículas y valores numéricos del potencial, las lentes de Einzel de tipo frenado-aceleración tienen una mayor capacidad de convergencia.[9][17]

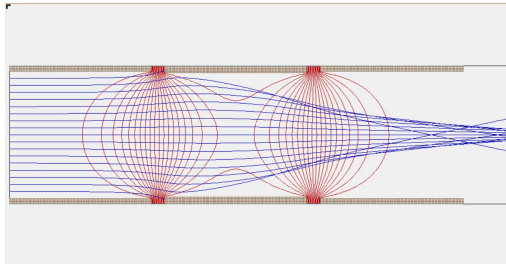


Figura 6: Vista 2D de un haz de protones en una lente frenado-aceleración.

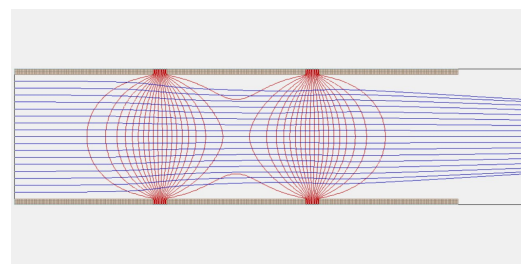


Figura 7: Vista 2D de un haz de protones en una lente aceleración-frenado.

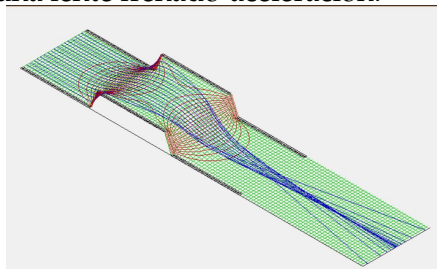


Figura 8: Vista 3D de un haz de protones en una lente frenado-aceleración.

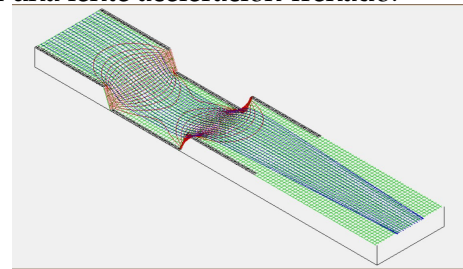


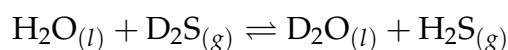
Figura 9: Vista 3D de un haz de protones en una lente aceleración-frenado.

4 Deuterón

Las partículas utilizadas en nuestra simulación son los deuterones. Estos son el núcleo del átomo de deuterio, el cual es un isótopo del hidrógeno. Este átomo está compuesto por un protón, un neutrón y un electrón, por lo que su núcleo será mas pesado que un átomo de hidrógeno, $m_D = 2.014 u$. Además, es estable, por lo que no se desintegra. El deuterón es un ion y tiene carga positiva, $q_D = +1,602 \times 10^{-19} C$.

Se ha utilizado el deuterón como ion en este experimento debido a la facilidad de obtención y de ionización. Este puede extraerse de toda sustancia natural que contenga hidrógeno, ya que se obtiene principalmente mediante la separación de los isótopos en una mezcla hidrógeno-deuterio. Las principales fuentes del deuterio son el agua y los hidrocarburos.[18] [19]

Uno de métodos de obtención de Deuterio más utilizados es el método de Geib-Spevack (GS), que consiste en obtener grandes cantidades de agua pesada, también conocida como Óxido de Deuterio (D_2O). Este proceso se lleva a cabo con la siguiente reacción química:[19]



En cuanto a la ionización del deuterio, al tener éste una estructura simple con solo un electrón en el nivel de energía más bajo ($1s$), su energía de ionización es prácticamente la misma que la del átomo de hidrógeno ($13.6eV$), por lo que facilita la extracción del electrón, ya que no se requiere de altas energías. En apartados posteriores se indagará en el proceso de ionización del deuterio.[18]

5 Acelerador de partículas

Los aceleradores de partículas constan de varias partes, dependiendo de la complejidad en el diseño. Sin embargo, todos ellos deben tener las siguientes componentes:

1. Fuente que produce las partículas cargadas
2. Un sistema que suministra energía al haz de partículas y las acelera mediante campos electromagnéticos.
3. Estructura metálica que genera el vacío en su interior y permite a las partículas moverse libremente.
4. Un sistema electromagnético para definir la trayectoria del haz de partículas.

Además, dependiendo del tipo de acelerador que se quiera construir, puede tener un blanco o no. Esta componente es una característica básica para los aceleradores de partículas lineales, ya que permite a las partículas colisionar en un entorno controlado. Para el caso de los aceleradores de partículas circulares, también sería posible que una de sus componentes fuera un blanco. Sin embargo, este tipo de aceleradores se utiliza normalmente para colisionar partículas entre si.[20]

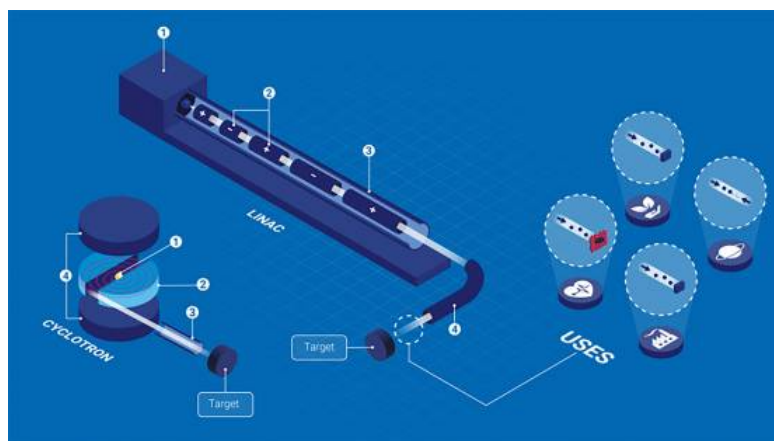


Figura 10: Esquema de los componentes de dos tipos de aceleradores: uno lineal y otro circular. (International Atomic Energy Agency, 2024)

Los aceleradores que se muestran en las imágenes corresponden a uno de tipo lineal (LINAC) y el otro de tipo circular (CICLOTRÓN). Ambos pueden medir desde unos escasos metros hasta decenas de kilómetros. Existen muchas variaciones de estos tipos de aceleradores. Estos solo son ejemplos para visualizar las componentes de los aceleradores, y la conexión que hay entre ellas.[20]

El acelerador de partículas que se está estudiando en este trabajo es de tipo lineal y bastante simple. Sus componentes pueden dividirse en 4 partes: la fuente de iones, las lentes de Einzel, el blanco, y el sistema metálico que encierra a las componentes anteriores. A continuación se muestra un esquema de bloques de las distintas componentes del simulador:

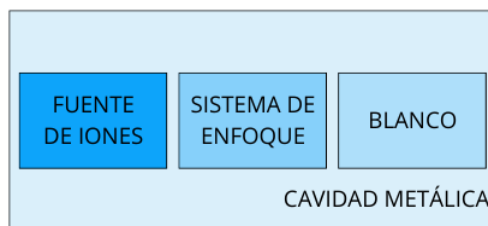


Figura 11: Descripción sistemática de las componentes del acelerador en estudio.

A diferencia del acelerador lineal mostrado en la figura (10), nuestro acelerador de partículas no consta de un sistema de aceleración, ya que este forma parte de la propia fuente de iones.

En nuestro simulador se estudiarán solo las primeras 3 componentes, ya que la cavidad metálica que proporciona un espacio libre de partículas de aire y de polvo, para que el haz de iones pueda desplazarse fácilmente, es una característica que puede definirse en SIMION sin necesidad de concretar la geometría de la cavidad. Un esquema a escala del acelerador que vamos a simular sería el siguiente:

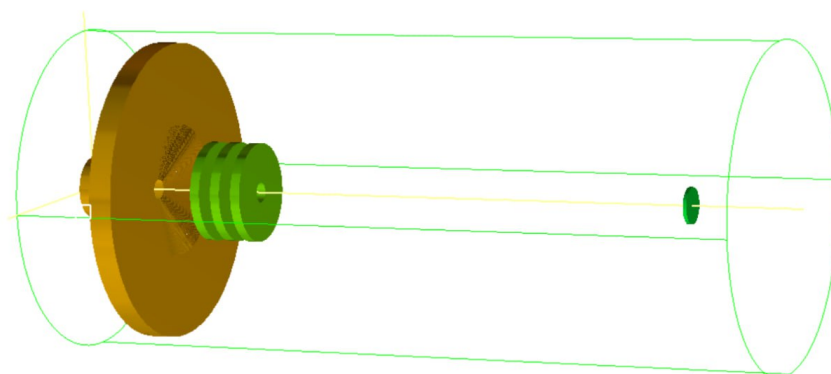


Figura 12: Esquema a escala de nuestro acelerador de estudio. En naranja la fuente de iones; en verde el sistema de convergencia; en azul el blanco.

En los siguientes subapartados se detallará el funcionamiento de cada parte del acelerador. Se explicarán los procesos físicos que ocurren en cada componente, y se comprobarán haciendo uso del simulador SIMION.

5.1 Fuente de iones

La fuente de iones es el primer paso en el proceso de acelerar un haz de partículas, ya que su función es obtener los iones. Dependiendo del tipo de partícula que se quiera acelerar se utilizará un tipo de fuente de iones u otro. Por ejemplo, en el caso de electrones o protones, se utilizaría un cañón de electrones o un duoplasmatrón, respectivamente. Aunque el objetivo final de ambos sistemas sea la obtención de ciertas partículas cargadas, su funcionamiento no es el mismo,

debido a las características intrínsecas de cada partícula. En nuestro acelerador particular, la fuente de iones no solo es la responsable de obtener las partículas cargadas, sino que también es la que le suministrará la energía necesaria al haz para que se acelere.[24]

5.1.1 Método ECR plasma

Como ya se ha comentado en apartados anteriores, el deuterón no puede encontrarse de forma natural, sino que debe obtenerse a partir del deuterio. La fuente de iones será la encargada de extraerlos. Se utilizará el método conocido como *Electron cyclotron resonance plasma* (ECR plasma). Este proceso consiste en obtener un plasma de deuterones y electrones a partir del gas deuterio.[25][26]

Para comprender el proceso, se debe conocer que es el plasma. Éste es el cuarto estado de la materia y tiene un comportamiento muy similar al de un fluido. Se obtiene al calentar un gas a una temperatura tan alta que causa el desprendimiento de los electrones de su órbita, debido a que estos obtienen una energía mayor a la energía de enlace. La composición del plasma son iones.[25][26]

El método del ERC plasma consiste en convertir en plasma un gas. Para ello, se debe introducir el gas en una cámara de plasma, la cual será capaz de soportar las condiciones necesarias del experimento. Una vez introducido el gas, se le aplica un campo magnético, el cual provocará que los pocos electrones libres que había en el gas experimenten una fuerza magnética y produzcan un movimiento cicloidal. Este movimiento viene determinado por la ley de Lorentz, (5.1), y tiene asociado una frecuencia, que se obtiene de la expresión (5.2). [25][26]

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (5.1)$$

$$\omega_{ce} = \frac{eB}{m_e} \quad (5.2)$$

Una vez que los electrones están en movimiento, se aplica una radiofrecuencia con la misma frecuencia que tienen el movimiento de los electrones. Esto creará un estado de resonancia, el cual calentará suficientemente al gas, haciendo que los electrones se separen del núcleo, obteniendo así un plasma de iones y electrones.[25][26]

Seguidamente después de obtener el plasma, hay que separar a los iones de los electrones. Para ello, se necesita un sistema de imanes sofisticados que sean capaces de almacenar al plasma, mientras un sistema de extracción se encarga de extraer a los iones. Así se consiguen las partículas de deuterones necesarias para llevar a cabo el experimento del acelerador de partículas.[25][26]

Las frecuencias de las microondas en el espectro electromagnético pertenecen al rango $[10^6, 10^9] Hz$. En el acelerador de partículas real que se quiere construir, los

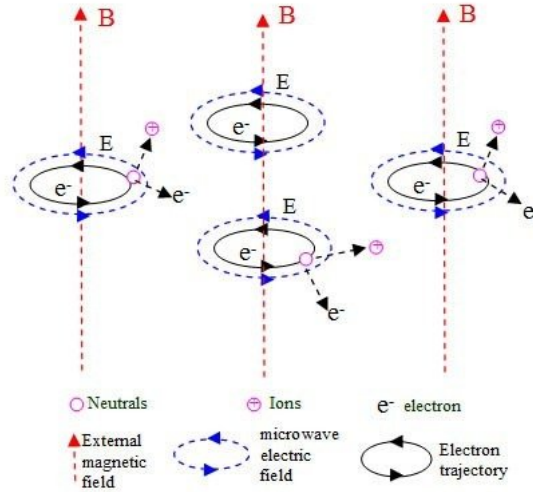


Figura 13: Esquema del movimiento cicloidial de los electrones en el método ECR plasma. (PIE Scientific, 2022)

valores utilizados rondarán alrededor de $\omega_{ce} = 2.54\text{GHz}$ y $B = 0.0875\text{T}$, que son los valores típicos utilizado para frecuencias de microondas.

Sin embargo, en la simulación que estamos estudiando, nos centramos más en el estudio del sistema de convergencia del haz de iones. Por lo que, a la hora de simularlo, se definen las partículas como iones directamente en el simulador.

5.1.2 Pierce Electrode Geometry

Al obtener los iones de deuterón, estos se encuentran en una distribución aleatoria, con una densidad espacio-carga muy alta, es decir, con bajas velocidades y muy cerca entre sí. Esto provoca que su estado evolucione a una posición de divergencia, lo cual no es apropiado para trabajar en un acelerador de partículas. Esto se debe a la interacción coulombiana entre las partículas. Se necesita un sistema capaz de darles energía cinética a las partículas, y que además las separe para que la interacción entre ellas disminuya.[21][22][23]

La geometría específica del electrodo de Pierce genera un campo eléctrico capaz de enfocar los iones hacia el eje del haz, proporcionandoles a estos una gran velocidad, y modificando sus trayectorias a las de un haz colimado. La geometría estandar de Pierce que proporciona este tipo de campos eléctricos consiste en un electrodo de ángulo $\alpha = 67,5^\circ$ respecto al eje del haz. En la siguiente imagen puede verse la geometría de Pierce representada como un electrodo cilíndrico con un hueco generado por un cono con ángulo α respecto al eje.[21][22][23]

Las dimensiones del electrodo de Pierce utilizadas en el acelerador de estudio son las de un cilindro de radio 112mm y altura 18.8mm . El hueco dentro de este cilindro tiene un radio mínimo de 8mm y un radio máximo de 53.4mm , que generan la

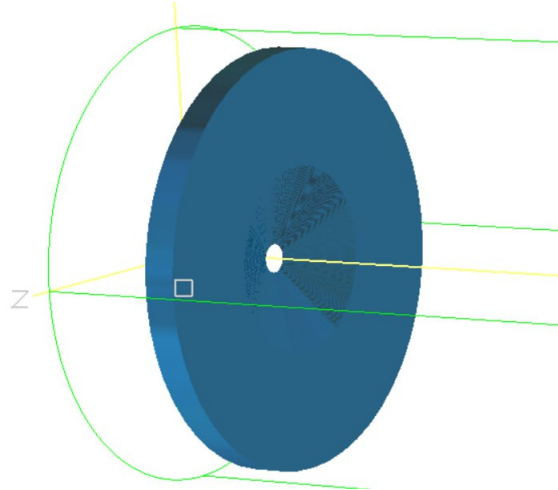


Figura 14: Vista 3D de un electrodo con geometría Pierce.

forma cónica del electrodo de Pierce. [21][22][23]

La expresión analítica del campo eléctrico que genera este electrodo se obtiene resolviendo la ecuación de Laplace (3.2) mediante métodos numéricos, lo cual es bastante complejo. Sin embargo, se puede hacer un estudio cualitativo de las líneas equipotenciales que crea el electrodo, con ayuda del software de simulación SIMION.

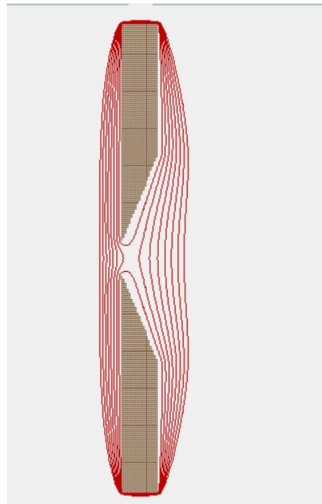


Figura 15: Líneas equipotenciales del campo eléctrico generado por un electrodo con geometría de Pierce.

El objetivo de este electrodo es generar un campo eléctrico que solo tenga componente $\hat{z}$ (en cilíndricas). Con esto se consigue que las partículas avancen a lo largo del eje central del cilindro, adquiriendo velocidad en esa dirección, y formando así un haz colimado.[21][22][23]

5.2 Sistema de convergencia

Como ya se ha dicho anteriormente, el sistema de convergencia del haz que se ha utilizado en el acelerador de estudio han sido las lentes de Einzel. En otros apartados se han explicado las características fundamentales, así como su funcionamiento. En nuestro acelerador de estudio se ha impuesto que la geometría de las tres lentes sea la misma, para evitar estudiar un gran número de variables a la hora de encontrar mejoras.

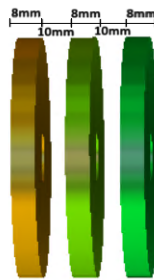


Figura 16: Medidas longitudinales de las lentes de Einzel utilizadas en la simulación.

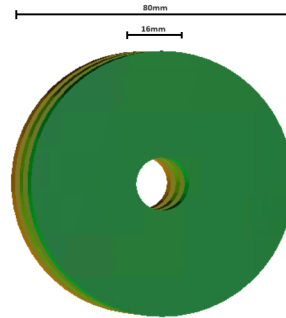


Figura 17: Medidas radiales de las lentes de Einzel utilizadas en la simulación.

5.3 Blanco

El blanco es la parte final del acelerador de partículas en estudio. Debido a la geometría cilíndrica utilizada en el simulador SIMION, éste tiene también forma cilíndrica: radio igual a 29mm y altura de 3mm , por lo que el área de choque es de $28,27\text{mm}^2$. Se encuentra a una distancia de 462mm del sistema de convergencia.

6 Resultados y discusión de la simulación

Una vez analizados cada uno de los componentes de nuestro acelerador de partículas, ya tenemos la capacidad de simular su funcionamiento en conjunto. El objetivo de este apartado será encontrar una configuración de potenciales adecuada para que la mayoría de partículas simuladas, es decir, los deuterones, colisiones contra el blanco.

En esta simulación se desprecian ciertos aspectos que a la hora de realizar el experimento real si se deben tener en cuenta. Para empezar, en el simulador se supone que el espacio es el vacío perfecto. Sin embargo, en la realidad es imposible crear un vacío perfecto, por lo que habría que tener en cuenta las posibles interacciones entre los iones y las partículas de aire. Otra consideración que se está haciendo es que los elementos del acelerador de partículas en el simulador se encuentran "flotando". En la realidad, todos los elementos deben estar sujetos o fijos por algo, que puede interferir y/o interactuar con ellos. Por ejemplo, en el caso de las lentes de Einzel, depende de como esten sujetas, se puede modificar el campo eléctrico que estas generan.

Se ha generado el acelerador de partículas utilizando un fichero *.gem* con el código LUA del Apéndice A.2. Las medidas de separación entre cada componente pueden verse en el siguiente esquema:

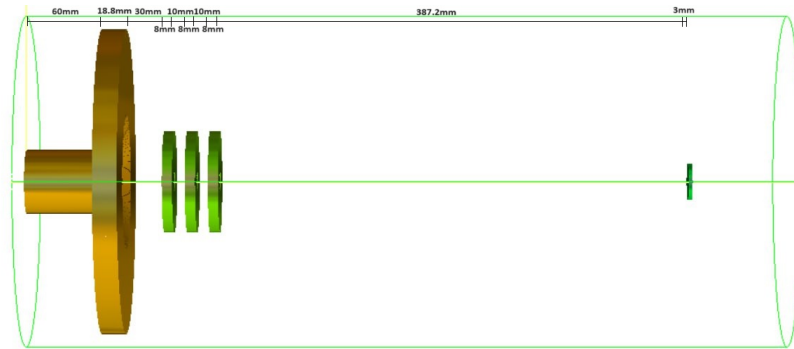


Figura 18: Esquema a escala y con medidas de nuestro acelerador de estudio.

Se ha realizado el estudio para 216 configuraciones de potencial distintas, utilizando el código del Anexo A.3. Se ha lanzado la simulación para potenciales cuyos valores pertenecen al intervalo de $[-100000, 0]V$, con saltos de potencial de $-20000V$. Se han lanzado un total de 200 deuterones, con una energía cinética inicial de $E_c = 100keV$ y cuyo posición inicial es una distribución gaussiana.

Tras obtener los resultados de los distintos casos simulados, se ha observado que colisionan todas las partículas lanzadas en el 84.3 % de los casos. En los casos en los que no se obtiene una colisión total, puede verse una dependencia entre el valor nulo del primer potencial, tal y como se muestra en la figura (19).

Este comportamiento se debe a que, al tener la primera lente de Einzel un potencial nulo, no crea ningún campo eléctrico que atraiga a las partículas cargadas hacia él, por lo que estas siguen su trayectoria de haz colimado, colisionando la mayoría con la primera lente.

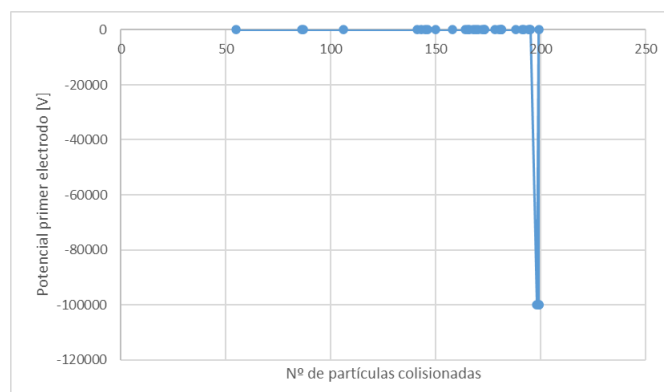


Figura 19: Relación entre el potencial del primer electrodo y el número de partículas colisionadas.

De los 182 casos restantes en los que todas las partículas colisionan, se han estudiado solo aquellos en los que la distribución de los potenciales sigue la estructura clásica de las lentes de Einzel, es decir que el potencial del primer y del tercer electrodo sea el mismo. No se han considerado los casos en los que el potencial de los tres electrodos coincide, ya que esa configuración no realiza ningún tipo de convergencia sobre el haz. Las configuraciones de potenciales que se estudian pueden verse en la tabla del Apéndice A.4.

A continuación se muestra la sección del área en la que las partículas han colisionado, para distintas configuraciones del potencial. Se compararán las características de los sistemas con áreas de colisionado mínimas, con los sistemas de grandes áreas de colisionado.

En las figuras (20), (21) y (22) se muestran las áreas de colisionado mínimas obtenidas en la simulación.

Como se ha visto en el ejemplo de Lentes de Einzel de la sección 3.4, la capacidad de convergencia es mayor, si el valor del potencial de la lente central es mayor que el de los extremos. Esto puede verse comparando las figuras anteriores con la figura (23): la diferencia de potencial entre ésta última y la figura (21) es la misma, sin embargo hay las áreas de colisión cambian.

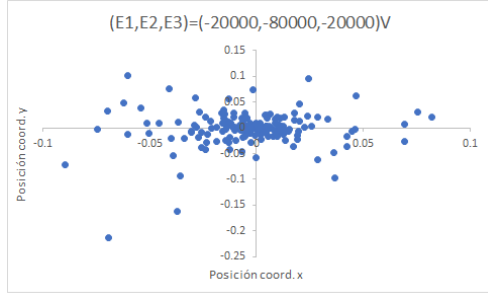


Figura 20: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 60000V$.

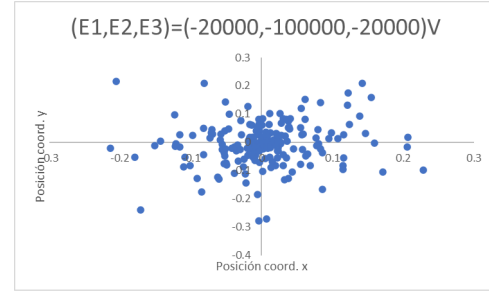


Figura 21: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 80000V$.

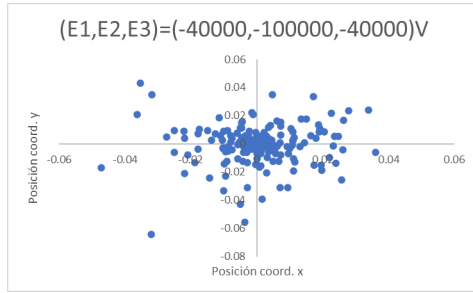


Figura 22: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 60000V$.

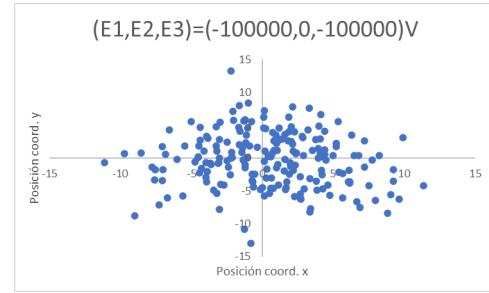


Figura 23: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 80000V$.

También se observa que, cuanto más se asemeja la energía de los iones acelerados con el valor del potencial central, mayor es la capacidad de convergencia y, por tanto, menor es el área de colisionado. Esto se comprueba comparando las figuras (20) y (22), ya que en ambas la diferencia de potencial es la misma, sin embargo las partículas colisionadas en el caso del potencial central igual a $E_2 = -100000V$ están mas centradas en un mismo rango tanto en el eje $\hat{x}$ como en el eje $\hat{y}$. Mientras que en el caso cuyo potencial central es $E_2 = -80000V$, las partículas están muy cerca del origen respecto al eje $\hat{y}$, pero más dispersas en el eje $\hat{x}$.

Estos resultados pueden comprobarse también en el caso contrario. En las figuras (24) y (25) se representan áreas de colisionado para configuraciones de lentes con diferencia de potencial pequeña. En ambos casos el área es grande, ya que la capacidad de convergencia es mínima. Por lo que tambien se demostrará que a mayor diferencia de potencial, mayor capacidad de convergencia de las lentes.

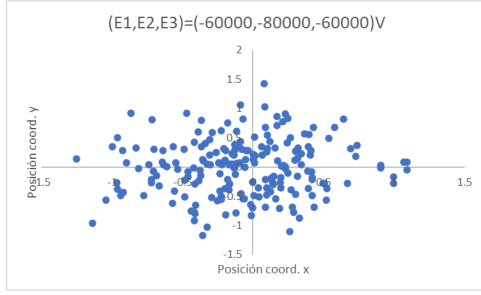


Figura 24: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 20000V$.

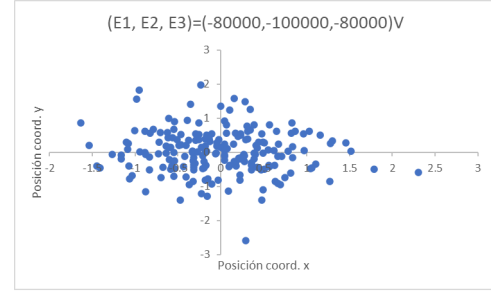


Figura 25: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 20000V$.

Por otro lado, en las figuras (26) y (27) se refleja la relación entre el valor del potencial central y la energía cinética de las partículas. La diferencia de potencial es muy grande, pero el área de colisionado también, implicando que la convergencia es más óptica cuanto más parecidos sean la energía cinética de los iones y el potencial de la lente central.

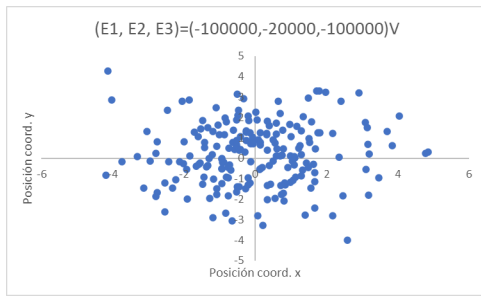


Figura 26: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 80000V$.

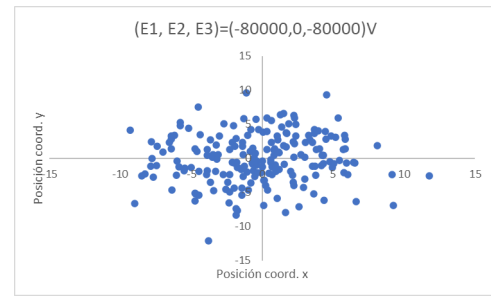


Figura 27: Área de colisionado para una lente de Einzel con diferencia de potencial $\Delta V = 80000V$.

Finalmente, se puede afirmar que la configuración de potenciales más óptima para utilizar el sistema óptico de las lentes de Einzel como sistema de convergencia en nuestro acelerador de partículas debe cumplir las siguientes condiciones: el potencial de las lentes externas debe ser distinto de cero y menor, en valor absoluto, que el potencial de la lente central; y el valor del potencial central debe ser lo más similar posible al valor de la energía cinética de los iones acelerados.

7 Conclusiones

A lo largo del desarrollo de este trabajo, se ha adquirido una comprensión profunda y detallada del proceso de simulación del comportamiento de un acelerador de partículas y de todos los aspectos relacionados con él. En primer lugar, se ha estudiado el formalismo de la óptica de iones, lo que ha permitido comprender el efecto que el sistema óptico de las lentes de Einzel tiene sobre un haz de iones.

Se han adquirido también habilidades prácticas en el uso del lenguaje de programación LUA, que ha sido fundamental para definir distintas geometrías mediante ficheros *.gem*.

La aplicación de conocimientos físicos y de métodos numéricos ha sido crucial para entender el funcionamiento interno del software de simulación SIMION. Esto ha permitido tener una visión más amplia del funcionamiento de las simulaciones, así como los aspectos permitidos en estas.

Además, a partir de este estudio detallado y de las simulaciones realizadas, se ha logrado obtener una configuración óptima de potenciales adecuados para las lentes de Einzel en nuestro acelerador de partículas específico. Demostrando con esto la aplicabilidad de los conocimientos adquiridos previamente.

Finalmente se enumeran posibles fuentes de estudio para futuro que permitirán comprender más profundamente el funcionamiento de nuestro acelerador. Se propone estudiar los casos en los que la configuración de potenciales no es la estándar de las lentes de Einzel, es decir que el potencial de las lentes externas pueda ser distinto. También se considera interesante estudiar la influencia que tiene la modificación de las dimensiones del sistema, como la anchura, los radios y/o la separación de las lentes.

Referencias

- [1] Amaldi, U. (2000). *The importance of particle accelerators*. Europhysics News, 31(6), 5-9. <https://doi.org/10.1051/eprn:2000601>
- [2] ¿Qué son los aceleradores de partículas? OIEA. <https://www.iaea.org/es/bulletin/que-son-los-aceleradores-de-particulas>
- [3] Hinterberger, F. *Ion optics with electrostatic lenses*. CAS 2005 - CERN Accelerator School: Small Accelerators, Proceedings.
- [4] D. W. O. Heddle, *Electrostatic Lens Systems*, 2nd ed., Institute of Physics Publishing, 1991.
- [5] Bazin, D. *Ion Optics Lecture 1. National Superconducting Cyclotron Laboratory*, Michigan State University. Accessed at <https://indico.ihep.ac.cn/event/9962/contributions/113925.pdf>
- [6] Álvaro Bermejillo Seco, *Optical system for low energy proton beams: Extraction, focusing and transport.*, Bachelor Final Thesis, Universidad del País Vasco, 221 https://addi.ehu.es/TFG_Bermejillo_Seco_Alvaro.pdf
- [7] Einzel Lens | Mass Spec Pro. (s. f.). <http://www.massspecpro.com>
- [8] *Functionality of an Einzel lens*. (s. f.-b). Physics Stack Exchange. <https://physics.stackexchange.com>
- [9] *New books*. (2008). Physics Today, 61(5), 59-62. <https://doi.org/10.1063/1.2930743>
- [10] *SIMION 8.1 User Manual*, <https://simion.com/info/manual.html>
- [11] I. Arredondo, *Introducción a SIMION*, Simulación Electromagnética con ANSYS para el diseño electrónico, Universidad del País Vasco, España, 2023.
- [12] Really Fast Ions, *Really Fast Ions* [Canal de YouTube], <https://www.youtube.com/@reallyfastions8881>
- [13] Universidad Veracruzana, *Unidad 6*, <https://www.uv.mx/anmarin/html-src/curses/unidad6.pdf>
- [14] Vadillo, F. (n.d.). *Métodos de un paso. Métodos Runge-Kutta*. Universidad del País Vasco. Recuperado de <https://www.ehu.eus>
- [15] Grana, C. H. (2017). *Gem files - a quick guide*. Scribd. Recuperado de <https://es.scribd.com>

- [16] *The programming language LUA*.
(s. f.-b). <https://lua.org/>
- [17] Really Fast Ions. (2020c, abril 28).
Tutorial: Simulation einer Einzellinse mit SIMION [Vídeo]. YouTube.
<https://www.youtube.com>
- [18] Universidad de Sonora. (s.f.). *Extracción de deuterio*. Recuperado de
<http://tesis.uson.mx/digital/tesis>
- [19] Pedron, F. N. (2011). *Método de Geib-Spevack para la generación de agua pesada*.
<https://pedronilu.blogspot.com/2011/09/metodo-de-geib-spevack-para-la.html>
- [20] *What are particle accelerators?* (s. f.). IAEA.
<https://www.iaea.org/bulletin/what-are-particle-accelerators-0>
- [21] Faircloth, D.. (2021). *Particle Sources*.
https://www.researchgate.net/publication/350371411_Particle_Sources
- [22] *Pierce Electron Gun*. (s.f.).
<https://doc.comsol.com/5.6/doc/com.comsol>
- [23] Seoul National University. (s.f.). *Electron guns*. Recuperado de
https://ocw.snu.ac.kr/sites/default/files/NOTE/10_Electron%20guns.pdf
- [24] HITRIplus. (2022c, junio 29). *Ion sources by Nadia Gambino* [Vídeo]. YouTube.
<https://www.youtube.com/watch?v=yyfMeSBVGoY>
<https://www.youtube.com/watch?v=hWN8xgGnqow>
- [25] Stern, D. P. (s.f.-b). *Plasma*.
<https://pwg.gsfc.nasa.gov/Education/Mplasma.html>
- [26] Tanarro, I. (s.f.). *Plasma, el cuarto estado de la materia*.
Dpto. de Física Molecular, Inst. Estructura de la Materia, CSIC.
Recuperado de <http://hdl.handle.net/10261/42203>

A Anexos

A.1 Demostración del método relaxation

Se demostrará que al aplicar el método *relaxation* a la ecuación de Laplace para calcular el potencial en un punto de una malla es equivalente a calcularlo como suma de los potenciales de los 4 puntos adyacentes.[4]

Primero de todo se escribe la ecuación de Laplace en coordenadas cilíndricas:

$$\frac{d^2V}{dz^2} + \frac{d^2V}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = 0 \quad (\text{A.1})$$

Consideramos una malla rectangular de tamaño $m \times n$, cuyos puntos están separados una distancia h . Esta malla nos proporcionará los puntos (z, r) de un cilindro. Esto se consigue utilizando al eje $\hat{x}$ como eje de revolución del rectángulo. El eje $\hat{y}$ definirá el eje radial.[4]

Utilizando la expansión en serie de Taylor se calcula la expresión general del potencial en los cuatro puntos adyacentes:

1. $V(z + d, r) = V(z, r) + h \frac{dV}{dz} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2V}{dz^2} + \frac{1}{6} h^3 \frac{d^3V}{dz^3} + \dots$
2. $V(z, r + d) = V(z, r) + h \frac{dV}{dr} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2V}{dr^2} + \frac{1}{6} h^3 \frac{d^3V}{dr^3} + \dots$
3. $V(z - d, r) = V(z, r) - h \frac{dV}{dz} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2V}{dz^2} - \frac{1}{6} h^3 \frac{d^3V}{dz^3} + \dots$
4. $V(z, r - d) = V(z, r) - h \frac{dV}{dr} + \frac{1}{2} h^2 \frac{d^2V}{dr^2} - \frac{1}{6} h^3 \frac{d^3V}{dr^3} + \dots$

Por conveniencia, se calculan las siguientes operaciones entre los potenciales anteriores:

$$V(z + h, r) + V(z - h, r) = 2V(z, r) + h^2 \frac{d^2V}{dz^2} \rightarrow \frac{d^2V}{dz^2} = \frac{V(z + h, r) + V(z - h, r) - 2V(z, r)}{h^2} \quad (\text{A.2})$$

$$V(z, r + h) + V(z, r - h) = 2V(z, r) + h^2 \frac{d^2V}{dr^2} \rightarrow \frac{d^2V}{dr^2} = \frac{V(z, r + h) + V(z, r - h) - 2V(z, r)}{h^2} \quad (\text{A.3})$$

$$V(z, r + h) - V(z, r - h) = 2h \frac{dV}{dr} \rightarrow \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{V(z, r + h) - V(z, r - h)}{2hr} \quad (\text{A.4})$$

Por tanto, la ecuación de Laplace en coordenadas cilíndricas (A.1) puede reescribirse como combinación de las expresiones anteriores (A.2), (A.3) y (A.4). Despejando el término $V(z, r)$ se obtiene el potencial en un punto cualquiera (z, r) calculado con el valor de los potenciales adyacentes:[4]

$$\begin{aligned} & \frac{V(z+h, r) + V(z-h, r) - 2V(z, h)}{h^2} + \frac{V(z, r+h) + V(z, r-h) - 2V(z, h)}{h^2} + \\ & + \frac{V(z, r+h) - V(z, r-h)}{2hr} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V(z, r) = & \frac{1}{4} [V(z+h, r) + V(z-h, r) + V(z, r+h) + V(z, r-h) \\ & + \frac{h}{2r} (V(z, r+h) - V(z, r-h))] \end{aligned}$$

Esta expresión es válida para cualquier punto, excepto puntos en el eje de rotación, ya que eso haría que el último término tuviera valores infinitos. En este caso, deberían considerarse 6 puntos: los 2 axiales (que pertenecen a los adyacentes) y 4 puntos adyacentes que pertenezcan al plano perpendicular. La expresión sería la siguiente:[4]

$$V(z, 0) = \frac{1}{6} [V(z+h, 0) + V(z-h, 0) + 4V(z, h)] \quad (\text{A.5})$$

A.2 Código LUA geometría del acelerador

Código LUA proporcionado por el grupo de investigación GRANASAT que genera un fichero *.gem* con la geometría del acelerador.

```

1 local TAN675 = 2.414213562
2
3 pa_define{(600)*mm, (130)*mm, dx=0.1, symmetry='cylindrical',
4           type='electric', refinable=true}
5
6 ; box(x0, y0, xf, yf)
7
8 locate(0,0,0) {
9     e(1) { box (0,0,5, 25) ; Opposite wall from the plasma chamber
10    }
11 }
12 locate(ch_width,0,0) {
13     e(2) { box(0, 15, 5, 25) ; Iris
14    }
15 }
16
17 locate(5 + 5,0,0) {
18     e(3) { box(0, 20, 50, 25) ; Plasma chamber outer
19    }
20 }
21
22 locate(5 + 5 + 50, 0, 0) {
23     e(4){ box(0, 8, 18.8, 120) ; Plasma electrode
24         notin_inside_or_on {polyline(0,8,
25         18.8,18.8*TAN675 + 8,
26         18.8, 8)}
27    }
28 }
29
30 locate(108.8, 0, 0) {e(5){ box(0, 8, 8, 40) ; First electrode
31 }}
32
33 locate(126.8, 0, 0) {e(6){ box(0, 8, 8, 40) ; Second electrode
34 }}
35
36 locate(144.8, 0, 0) {e(7){ box(0, 8, 8, 40) ; Third electrode
37 }}
38
39 locate(522, 0, 0) {e(8){ box(0, 0, 3, 14.5) ; Target electrode
40 }}

```

A.3 Código LUA de la simulación

Código LUA proporcionado por el grupo de investigación GRANASAT que genera la simulación de nuestro acelerador de partículas para distintas configuraciones del potencial.

```

1  simion.workbench_program()
2  local painst = simion.wb.instances[1] -- PA with the plasma chamber,
3  lenses and target
4  ----- User variables -----
5  adjustable V1_start = 0 -- Initial first electrode voltage
6  adjustable V2_start = 0 -- Initial second electrode voltage
7  adjustable V3_start = 0 -- Initial third electrode voltage
8  adjustable V1_step = -20000 -- First electrode voltage step size
9  adjustable V2_step = -20000 -- Second electrode voltage step size
10 adjustable V3_step = -20000 -- Third electrode voltage step size
11 adjustable V1_stop = -100000 -- Final first electrode voltage steps
12 adjustable V2_stop = -100000 -- Final second electrode voltage steps
13 adjustable V3_stop = -100000 -- Final third electrode voltage steps
14 -- Maximum time in microseconds to fly particles
15 adjustable max_time = 30
16 local V1_voltage -- present voltage on first electrode
17 local V2_voltage -- present voltage on second electrode
18 local V3_voltage -- present voltage on third electrode
19 local V1_sign -- polarity of V1_voltage
20 local V2_sign -- polarity of V2_voltage
21 local V3_sign -- polarity of V3_voltage
22 local target_voltage = -100000
23 adjustable x_pos = 30 -- mm
24 _G.x_pos = x_pos
25 -----
26 function generate_load_refine_pa(x_width)
27     print("Generating electrode related pa")
28     print("Returns: " .. os.execute("python gen_pit30_einzel_box.py"))
29     print("0 means all Ok. Otherwise an error occurred.")
30     -- Load pa
31     -- pafilepath = "pas\\rep_pch_PE_w4_32_D11_w4_7_D12_w8_6_D10_w4\\"
32     pafilename = "pa_electrodos_python.pa#"
33     print("Loading pa")
34     painst.pa:load(pafilename)
35     painst:_debug_update_size()
36     -- update PA instance in case size changed (TODO: shouldn't be necessary)
37     simion.redraw_screen()
38     -- Refine pa
39     print("Refining pa")
40     painst.pa:refine{convergence=0.005
41         --removed: , skipped_point=rebuild
42     }
43 end
44 -- Function run every time the Fly'm action starts
45 function segment.flym()
46     sim_trajectory_image_control = 1 -- don't keep trajectories
47     generate_load_refine_pa()

```

```

48  -- Step through all combinations of voltages V1 and V3.
49  for V1_pos = 1,math.ceil(math.abs((V1_start-V1_stop)/V1_step))+1 do
50      -- Update V1 voltage
51      V1_voltage = V1_start + (V1_pos - 1) * V1_step
52      for V2_pos = 1,math.ceil(math.abs((V2_start-V2_stop)/V2_step))+1 do
53          -- Update V1 voltage
54          V2_voltage = V2_start + (V2_pos - 1) * V2_step
55          for V3_pos = 1,math.ceil(math.abs((V3_start-V3_stop)/V3_step))+1 do
56              -- Update V1 voltage
57              V3_voltage = V3_start + (V3_pos - 1) * V3_step
58              run() -- Run the ion beam flight
59          end
60      end
61  end
62  file:close() -- Close the .csv file where the data is being recorded
63 end
64 -- called on start of each run.
65 local first
66 function segment.initialize_run()
67     first = true
68     file =
69         io.open("data\\Ion_Source_v03_E1"..tostring(V1_voltage).. "V_E2_"..tostring(V2_voltage).. "V_E3_"..tostring(V3_voltage).. ".csv",
70             'w') -- Provisional file name
71     --file:write("Generated from Ion_Source_v02.iob -- V1 = ",tostring(V1_voltage),"V -- V2 = ",tostring(V2_voltage),"V -- V3 = ",tostring(V3_voltage),"V\nInitial X pos (mm), Initial Y pos (mm),Initial Z pos (mm),Final X pos (mm),Final Y pos (mm), Final Z pos (mm)")
72     file:write("Generated from Ion_Source_v03.iob -- V1 = ",tostring(V1_voltage),"V -- V2 = ",tostring(V2_voltage),"V -- V3 = ",tostring(V3_voltage),"V\nFinal X pos (mm),Final Y pos (mm), Final Z pos (mm)")
73 end
74 -- called multiple times per time-step to adjust voltages.
75 function segment.fast_adjust()
76     adj_elect05 = V1_voltage -- Adjust the voltage from the first electrode, as in the GEM file was declared as the electrode 5
77     adj_elect06 = V2_voltage -- Adjust the voltage from the second electrode, as in the GEM file was declared as the electrode 6
78     adj_elect07 = V3_voltage -- Adjust the voltage from the third electrode, as in the GEM file was declared as the electrode 7
79     adj_elect08= target_voltage -- Adjust the voltage from the target, as in the GEM file was declared as the electrode 8
80 end
81 -- called on every time-step for each particle in PA instance.
82 function segment.other_actions()
83     -- Update the PE surface display on first time-step of run.
84     if first
85     then
86         first = false
87         sim_update_pe_surface = 1
88     end
89 end
90 -- These two if conditionals are checked each time-step on each ion in the run.
91     Very useful for recording individual ion data at some point in the run.

```

```
88  -- Record initial position for each ion (once the new ion is created, the
      position is recorded at the first time-step)
89  if (ion_number ~= old_ion_num)
90  then
91      old_ion_num = ion_number
92      --file:write("\n"..tostring(ion_px_mm)..","..tostring(ion_py_mm)..","..tostring(ion_pz_mm))
93  end
94  -- Limit flight time.
95  if ion_time_of_flight > max_time then
96      ion_splat = 1
97  end
98  -- Record splat location for each ion (specifically leaving workbench)
99  if (ion_splat == -1) -- setting ion_splat to a non-zero value causes it to
      splat. If ion_splat = -3 records ion leaving workbench
100  then
      file:write("\n"..tostring(ion_px_mm)..","..tostring(ion_py_mm)..","..tostring(ion_pz_mm))
      -- Record the coordinates for the ion splat
101  end
102 end
```

A.4 Tabla de datos

En este apéndice se muestran los datos respecto a los potenciales de las lentes de Einzel que han conseguido colisionar con el blanco todas las partículas de deuterón simuladas.

E_1 [V]	E_2 [V]	E_3 [V]
-20000	0	-20000
-20000	-40000	-20000
-20000	-60000	-20000
-20000	-80000	-20000
-20000	-100000	-20000
-40000	0	-40000
-40000	-20000	-40000
-40000	-60000	-40000
-40000	-80000	-40000
-40000	-100000	-40000
-60000	0	-60000
-60000	-20000	-60000
-60000	-40000	-60000
-60000	-80000	-60000
-60000	-100000	-60000
-80000	0	-80000
-80000	-20000	-80000
-80000	-40000	-80000
-80000	-60000	-80000
-80000	-100000	-80000
-100000	0	-100000
-100000	-20000	-100000
-100000	-40000	-100000
-100000	-60000	-100000
-100000	-80000	-100000

Tabla 3: Valores de los potenciales de los electrodos para los casos en los que han colisionado todas las partículas.