



UNIVERSITAT
ROVIRA i VIRGILI

Universitat Rovira i Virgili

Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química

unir

LA UNIVERSIDAD
EN INTERNET

Universidad Internacional de La Rioja

Escuela Superior de Ingeniería y tecnología

Máster Interuniversitario en Mecánica de Fluidos
Computacional

Simulación de Flujo Molecular en Acelerador de Partículas LIPAc

Trabajo fin de estudio presentado por:	César Caballero Pérez
Tipo de trabajo:	Dinámica de Fluidos. Simulación Numérica
Director/a:	Ildefonso Cuesta Romeo
Supervisor:	Francesco Scantamburlo (F4E)
Fecha:	28/05/2023

Agradecimientos

En primer lugar, deseo expresar mi gratitud a la Universidad Internacional de la Rioja y a la Universitat Rovira i Virgili, por hacer posible que un máster tan completo y útil sea accesible para gente en todo el mundo y por brindarme la oportunidad de hacer crecer mis conocimientos y dar un paso más hacia adelante en mi carrera académica.

Este trabajo no habría sido posible sin la estancia en el acelerador de partículas LIPAc en Rokkasho. Es por ello por lo que debo agradecer tanto a la Universidad de Granada como al equipo del proyecto IFMIF/EVEDA por haber hecho posible esta gran oportunidad en la que he aprendido de primera mano el funcionamiento de los distintos y complejos sistemas que componen un acelerador de partículas. En concreto debo dar las gracias a Francesco Scantamburlo, ya que él ha sido mi mentor acerca de toda la parte teórica tanto de vacío como el resto de los sistemas auxiliares del acelerador. También quiero agradecer a Juan Manuel García por enseñarme toda la parte práctica y por compartir tan buenos momentos allí en Rokkasho. El conocimiento experto, orientación y dedicación de ambos han sido fundamentales en el desarrollo de este trabajo.

A mi familia, porque haber estado tan alejado de ellos este último año me ha hecho ver la importancia de tenerlos cerca. Sin su constante apoyo y amor no sería capaz de embarcarme en proyectos tan desafiantes.

A ti, Julia, gracias por acompañarme a aventurarnos tan lejos de casa. Tu valentía, tu alegría y tu ímpetu por viajar y explorar el mundo son cualidades contagiosas, y sin ellas no habría crecido tanto como lo he hecho hasta ahora. Le has dado color a mis semanas con cada visita que hacía a Tokio.

En resumen, hoy celebro el final de esta etapa y me siento agradecido por todas las personas que han dejado una huella imborrable en mi vida académica y personal. Este Trabajo de Fin de Máster no solo es mi logro, sino también el resultado del apoyo y la colaboración de todos vosotros.

Resumen

Simulación de flujo molecular de la presión parcial equivalente de Nitrógeno del acelerador de partículas LIPAc (Linear IFMIF Prototype Accelerator) usando el software de código libre desarrollado por CERN de simulación de TPMC (Test Particle Monte Carlo), Molflow+. En el marco de trabajo del proyecto IFMIF (International Fusion Materials Irradiation Facility), en la fase de EVEDA (Engineering Validation and Engineering Design Activities), la función de LIPAc, situado en Rokkasho, Japan, es la validación del diseño para la construcción de IFMIF/DONES (DEMO Oriented Neutron Source), cuyo uso desvelará la viabilidad de los materiales para futuros reactores nucleares de fusión, localizado en Granada, España. Esta simulación avanza en la caracterización del perfil de presiones de LIPAc, al integrar todas las secciones del acelerador, incluyendo el SRF LINAC (Super Conducting Radio Frequency Linear Accelerator). Adicionalmente se tienen en cuenta los efectos de la permeación en las juntas elásticas, añadidas en secciones críticas del acelerador, como los acopladores del RFQ (Radio Frequency Quadrupole).

Palabras clave: Acelerador de partículas, Simulación Monte Carlo, Flujo Molecular, Molflow+, IFMIF.

Abstract

Molecular Flow simulation of the equivalent partial pressure of Nitrogen in LIPAc (Linear IFMIF Prototype Accelerator) using the open-source software developed by CERN for TPMC (Test Particle Monte Carlo) simulation, Molflow+. Located in Rokkasho, Japan, and within the framework of the IFMIF (International Fusion Materials Irradiation Facility) project, in the EVEDA (Engineering Validation and Engineering Design Activities) phase, LIPAc plays a crucial role, which is to validate the design for the construction of IFMIF/DONES (DEMO Power Plant Oriented Neutron Source), which will unveil the feasibility of materials for future fusion nuclear reactors, located in Granada, Spain. This simulation advances in the characterization of the pressure profile of LIPAc by integrating all sections of the accelerator, including the SRF LINAC (Superconducting Radio Frequency Linear Accelerator). Additionally, the effects of permeation in elastomeric seals, added in critical sections of the accelerator, such as the RFQ (Radio Frequency Quadrupole) couplers, are taken into account.

Keywords: Particle Accelerator, Monte Carlo Simulation, Molecular Flow, Molflow+, IFMIF.

Índice de contenidos

1. Introducción	10
2. Fundamentos Teóricos del Flujo Molecular	12
2.1. Número de Knudsen	13
2.2. Ley de los gases ideales	14
2.3. Caudal en un flujo molecular	15
2.4. El proceso de bombeo	15
2.5. Conductancia	16
2.6. Tasa de Impacto	17
2.7. Transmisión de Probabilidad	18
2.8. Cargas de gas	18
2.8.1. Vaporización	19
2.8.2. Desorción y Difusión	20
2.8.3. Fugas	21
2.8.4. Permeación	21
2.8.5. Materiales usados en el acelerador	23
3. Metodologías de Cálculo	25
3.1. Métodos Analíticos de Cálculo	25
3.2. Métodos Numéricos de Cálculo	27
3.3. Método de Monte Carlo	28
3.3.1. Método de Monte Carlo Directo	28
3.3.2. Método de Monte Carlo Partícula Test	30
4. Modelado 3D de las Secciones del Acelerador	32
4.1. Inyector	32
4.2. RFQ	34

4.3.	MEBT	36
4.4.	SRF LINAC	37
4.5.	HEBT and Beam Dump	39
5.	Condiciones de Contorno	43
5.1.	Bombas de vacío	43
5.2.	Carga de gas	45
5.2.1.	Desgasificación de los materiales	45
5.2.2.	Permeación en juntas de Viton	46
5.3.	Temperatura	47
6.	Resultados	48
7.	Conclusión	50
7.1.	Futuro trabajo	53
	Referencias bibliográficas	54
Anexo A.	Resultados Simulación	56

Índice de figuras

Figura 1. LIPAc y sus contribuyentes (IFMIF Webpage, s.f.).....	10
Figura 2. Edificio de LIPAc. (IFMIF Webpage, s.f.)	11
Figura 3. Trayectorias Moleculares durante las distintas fases del flujo. (Pfeiferr Vacuum, s.f.)	14
Figura 4. Volumen de control en flujo molecular. (Vandoni, 2012).....	16
Figura 5. Trayectorias de una partícula en el flujo molecular entre dos cámaras de vacío. (Jitschin, 2016).....	17
Figura 6. Fuentes de gases en una cámara de vacío. (Garton, 2011)	19
Figura 7. Capas existentes en las paredes de una cámara de vacío al inicio. (Chiggiato, 2017)	20
Figura 8. Cargas de gas dominantes a lo largo del proceso de bombeo. (O'Hanlon, 2003)	21
Figura 9. Conductancia de permeación según la temperatura. Humedad del aire ambiente del 60%. (Jitschin, 2016).....	22
Figura 10. Solución analítica de un perfil de presiones (Kersevan, 2007).....	26
Figura 11. Partícula de discretización del método de principio de continuidad del caudal. (Li, 1999).....	28
Figura 12. Ejemplo de cálculo de la transmisión de probabilidad de un codo. (Davis, 1960) ..	29
Figura 13. Esquema de cálculo del método de Monte Carlo directo.....	29
Figura 14. Inyector de LIPAc. (IFMIF Webpage, s.f.).....	33
Figura 15. Modelo 3D del interior del Inyector	33
Figura 16. Interior del RFQ. (Comunian, 2014).....	34
Figura 17. Instalación del RFQ en Rokkasho. (Fusion FOr Energy, s.f.)	35
Figura 18. Modelo 3D del interior del RFQ.....	35
Figura 19. Modelo 3D de referencia de la MEBT. (IFMIF Webpage, s.f.)	36
Figura 20. Modelo 3D del interior de MEBT	37

Figura 21. Modelo 3D del SRF LINAc. (Orsini & Bazin, 2013)	38
Figura 22. Modelo 3D del interior de SRF	39
Figura 23. Modelo 3D del interior de DPLATE	40
Figura 24. Modelo 3D de referencia de HEBT. (IFMIF Webpage, s.f.).....	40
Figura 25. Modelo 3D del interior de HEBT	41
Figura 26. Modelo 3D de referencia del Beam Dump. (Kondo, 2019)	41
Figura 27. Imagen de la instalación del Beam Dump en Rokkasho. (IFMIF Webpage, s.f.)	42
Figura 28. Modelo 3D importado en Molflow+	43
Figura 29. Perfil de presiones simulado en el acelerador de partículas. Las líneas rojas verticales representan un cambio de sección del acelerador.....	48
Figura 30. Campo de presiones simulado en el acelerador de partículas desde el inyector hasta el final de SRF LINAC.	49
Figura 31. Campo de presiones simulado en el acelerador de partículas de HEBT y BD.	49
Figura 32. Campo de presiones simulado en uno de los acopladores de RFQ.	49
Figura 33. Ampliación del perfil de presiones simulado en el final de la sección del RFQ.	51

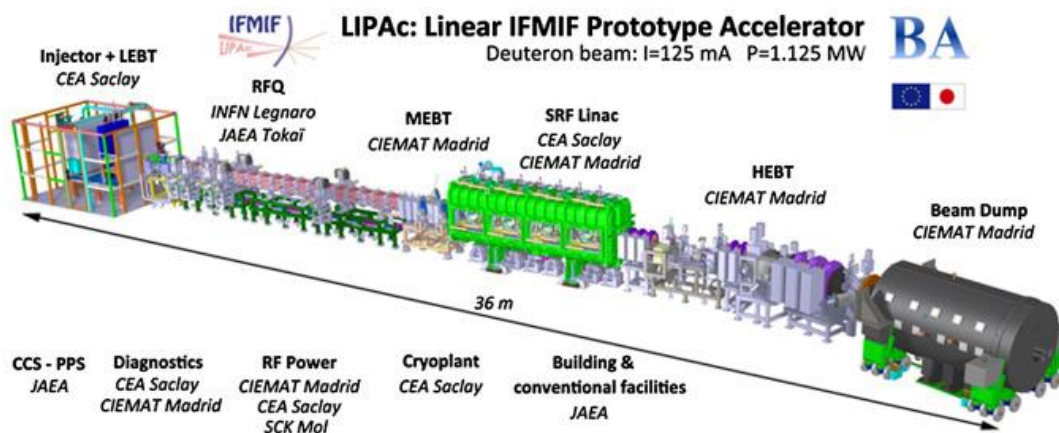
Índice de tablas

Tabla 1. Fases de un Flujo de Vacío. (Garton, 2011)	12
Tabla 2. Tasa de desgasificación del acero inoxidable.	23
Tabla 3. Condiciones de contorno de velocidades de bombeo. Valor entre paréntesis indica velocidad de bombeo de las bombas iónicas con la sublimación de titanio activada.....	44
Tabla 4. Condiciones de contorno de tasa de desgasificación.....	45
Tabla 5. Cálculo de la tasa de fuga relacionada con la permeación.....	46
Tabla 6. Condiciones de contorno de permeación.....	46

1. INTRODUCCIÓN

El Centro Internacional de Irradiación de Materiales de Fusión (IFMIF, por sus siglas en inglés) es un proyecto dirigido a desarrollar una fuente de neutrones de alta energía para probar y desarrollar materiales para la futura energía de fusión. El proyecto IFMIF es una colaboración entre la Unión Europea y Japón, con contribuciones de otros países, y está ubicado en Rokkasho, en Japón. El Acelerador Prototipo Lineal de IFMIF (LIPAc) es la instalación actual que validará el diseño de IFMIF.

Figura 1. LIPAc y sus contribuyentes (IFMIF Webpage, s.f.)



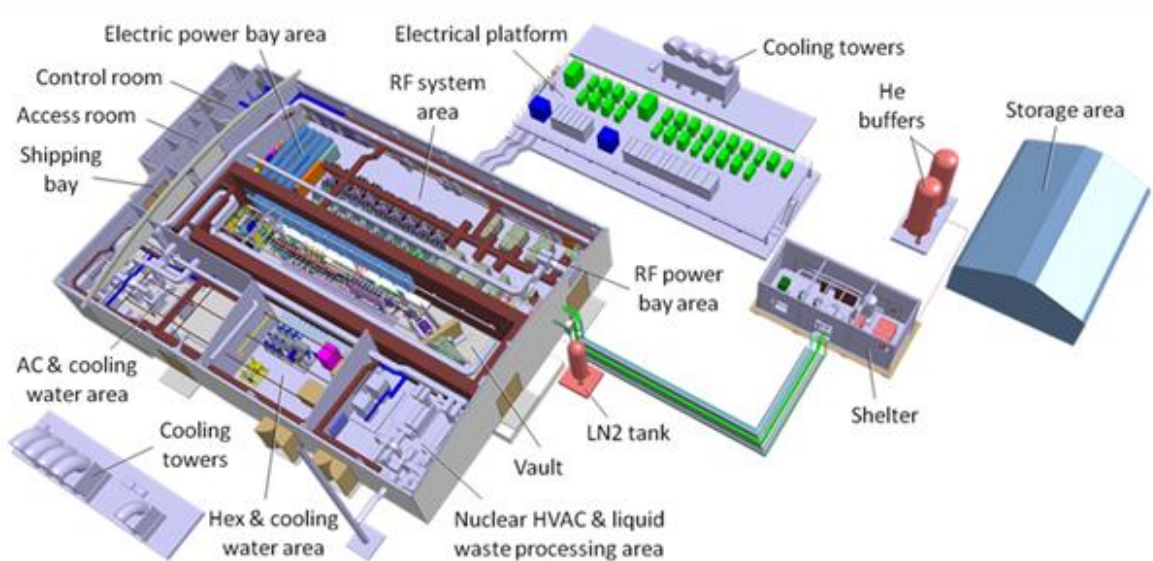
Uno de los componentes clave de todos los aceleradores de partículas es el sistema de vacío, se debe mantener ultra alto vacío para permitir que las partículas viajen a través del acelerador sin chocar con otras moléculas. En este proyecto final, se utilizará una técnica de simulación de Monte Carlo para modelar el comportamiento del vacío en LIPAc utilizando el software de código abierto desarrollado por el CERN, Molflow+. El objetivo es desarrollar una estimación de la distribución de presión parcial equivalente de Nitrógeno, o gases equivalentes al aire, a lo largo de la línea del acelerador, sin considerar factores complejos como las pérdidas de haz que ocurren en la presión parcial equivalente de Hidrógeno, al ser un acelerador de partículas de Deuterio. Esta segunda parte de la simulación se dejará para trabajos posteriores a esta publicación.

- Gases pesados. Masa atómica $A=28$. Para representar el aire, es el pico principal que se observa en el gas residual para una cámara de acero inoxidable sin tratamientos térmicos y es dónde se pueden analizar los fenómenos de posibles fugas y permeación.

En primer lugar, se realizará una revisión bibliográfica de la tecnología de vacío para establecer las bases para la simulación de flujo molecular. Luego se presentarán todas las secciones del acelerador de partículas y se desarrollará un modelo 3D de sus cavidades interiores para la simulación. Se estudiarán minuciosamente las condiciones de contorno necesarias para establecer la simulación, que comprenden las tasas de desgasificación de los diferentes materiales utilizados en el acelerador y las velocidades de bombeo de las bombas de vacío instaladas. Finalmente, se obtendrán y se discutirán los resultados.

En general, este proyecto proporcionará una oportunidad para explorar el papel crítico que juega la tecnología de vacío en el funcionamiento de LIPAc. Utilizando el software Molflow+, se obtendrán conocimientos valiosos sobre el comportamiento de un sistema de vacío complejo como LIPAc. Además, todos los resultados serán utilizables para los próximos pasos del proyecto en IFMIF-DONES (fuente de neutrones orientada a DEMO).

Figura 2. Edificio de LIPAc. (IFMIF Webpage, s.f.)



2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS DEL FLUJO MOLECULAR

El flujo molecular ocurre cuando se extrae el fluido de una cavidad. Es un régimen de flujo de gas que ocurre a bajas presiones, donde la longitud libre media de las moléculas de gas es mucho más grande que el tamaño de la cavidad en la cual fluye el gas. En este régimen, las moléculas de gas se mueven casi independientemente entre sí, haciendo muchas más colisiones con las paredes que entre ellas mismas. Como resultado, el flujo de gas está determinado por el movimiento de moléculas individuales, en lugar de las propiedades del gas.

Tabla 1. Fases de un Flujo de Vacío. (Garton, 2011)

Bombeo	Fase del fluido		Descripción	Tipo de Vacío	Caudal pV Pa·l/sec
Inicio del bombeo	Viscoso	Flujo Turbulento	Flujo inicial experimentado al inicio del bombeo o en un entorno de vacío bajo donde la caudal es alta. Movimiento caótico de moléculas. Se producen torbellinos y otros flujos no paralelos.	Bajo Vacío	>1.01
		Flujo Laminar	Flujo inicial experimentado al inicio del bombeo o en un entorno de vacío bajo donde la caudal es baja. Moléculas de gas chocando con otras moléculas de gas (gas-gas) en el sistema de vacío. Camino libre medio corto. Moléculas que salen del sistema.	Medio vacío	10.1 to 1.01 x 10 ⁻⁴
		Flujo Transición (Knudsen)	Flujo intermedio entre laminar y molecular. El flujo está dominado por colisiones tanto gas-gas como gas-pared.	Medio a Alto Vacío	1.01 x 10 ⁻² to 1.01 x 10 ⁻⁵
Vacío base alcanzado	Flujo Molecular		Las moléculas de gas restantes rebotan en las paredes (gas-pared) del sistema de vacío y no entre sí. Camino libre medio largo. Caudal muy pequeño.	Alto a Ultra Alto Vacío	<1.01 x 10 ⁻⁵

Un sistema de vacío experimenta varias fases de flujo durante el proceso de bombeo. En primer lugar, el aire dentro de la cavidad experimenta un flujo turbulento. Seguido por un flujo laminar cuando la presión comienza a disminuir. El tiempo que esta fase tarda en ocurrir depende del volumen de la cavidad que se desea bombear y las velocidades de bombeo utilizadas. A continuación, ocurre el flujo de transición o flujo de Knudsen en el que aun la cantidad de colisiones intramoleculares son tan altas como las colisiones con las paredes. Por último, ocurre el flujo molecular. Las diferentes fases pueden predecirse evaluando el número de Knudsen y el número de Reynolds.

En esta sección se asentarán las bases para el estudio de un flujo molecular y con las cuales se pueden hacer las primeras estimaciones del valor de la presión en el interior de una estructura unidimensional como un acelerador de partículas.

- Se explorarán los conceptos básicos para el flujo molecular que son el número de Knudsen, la ley de los gases ideales y el *throughput*.
- Se aplicará la ecuación de balance de masas a un volumen de control para obtener una primera ecuación con la cual estimar los valores de presión.
- Se definirán las ecuaciones que gobiernan el cálculo de la conductancia, necesario para propagar el cálculo de la presión a lo largo de tubos que unen dos o varias cámaras de vacío.
- Se estudiarán las posibles fuentes de gas que pueden existir en una cámara de vacío. Entrando en detalle de la estimación de la desgasificación de los materiales y sus causas. Adicionalmente, se explorarán las ecuaciones para estimar la carga de gas asociada a la permeación de juntas elastómeras de Viton.

2.1. NÚMERO DE KNUDSEN

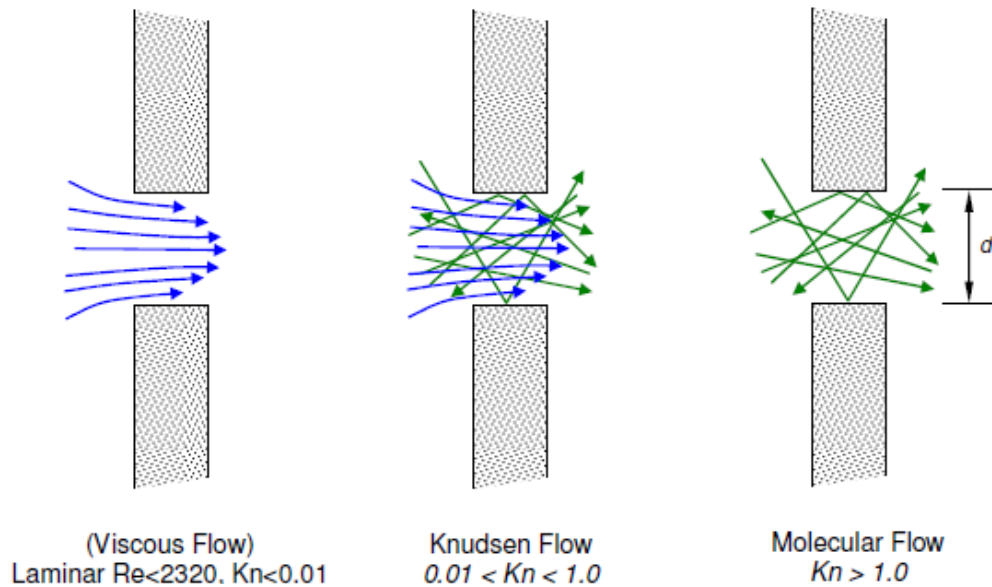
El número de Knudsen es un número adimensional definido como la relación entre la longitud media libre de recorrido molecular y una escala de longitud física representativa. El número de Knudsen (Kn) se puede expresar matemáticamente como:

$$Kn = \lambda/L \quad \text{Eq. 1}$$

donde λ es la longitud media libre de recorrido de las moléculas de gas y L es una escala de longitud característica del sistema. El número de Knudsen mide el impacto de las colisiones

moleculares en comparación con las colisiones con las paredes del sistema. Cuando el número de Knudsen es pequeño (es decir, $Kn \ll 1$), el gas se encuentra en el régimen de flujo viscoso. Cuando el número de Knudsen es grande (es decir, $Kn \gg 1$), el gas se encuentra en el régimen de flujo molecular.

Figura 3. Trayectorias Moleculares durante las distintas fases del flujo. (Pfeiferr Vacuum, s.f.)



2.2.LEY DE LOS GASES IDEALES

Para el cálculo de las primeras estimaciones de la presión en flujos moleculares es necesario partir de la ley de los gases ideales (Jitschin, 2016).

$$pV = N_{mol}RT \quad \text{Eq. 2}$$

$$pV = nk_bT \quad \text{Eq. 3}$$

Donde p es la presión (Pa), V es el volumen (l), N_{mol} es el número de partículas expresadas en moles, R es la constante de los gases ideales ($8.314 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) y T es la temperatura (K), para la ecuación expresada para el número de partículas en moles. Si se usa la ecuación sin usar el concepto de mol, n es el número de partículas y k_b es la constante de Boltzmann ($k = 1.381 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$).

2.3. CAUDAL EN UN FLUJO MOLECULAR

La definición del caudal en un flujo molecular es la cantidad de gas, expresada en unidades de presión por volumen, a una temperatura específica, que fluye por unidad de tiempo a través de un área transversal dada (Al-Dmour, 2017). Debido a que en un flujo molecular es más sencillo medir la presión que la densidad de un gas, se utiliza el concepto de *throughput* ($\text{mbar}\cdot\text{l}\cdot\text{s}^{-1}$), es el equivalente al caudal, pero medido en unidades de presión. Sin embargo, para evitar anglicismos, en este estudio se le referirá como caudal. Podemos obtener la ecuación del caudal en un flujo molecular expresando la ley de los gases ideales de la teoría cinética de gases por unidad de tiempo.

$$Q = \frac{d(pV)}{dt} = \frac{dN_{mol}}{dt} RT = \frac{dN}{dt} k_b T \quad \text{Eq. 4}$$

Donde Q es el caudal de partículas o *throughput*, R es la constante de los gases ideales, usada cuando la ecuación se expresa con el número de moles N_{mol} ; y k_b es la constante de Boltzmann usada cuando la ecuación se expresa con el número de partículas.

El caudal volumétrico, en concreto en la entrada de una bomba de vacío, adquiere el nombre de velocidad de bombeo. Otra definición del caudal usando el concepto del caudal volumétrico y la primera parte de la ecuación anterior es:

$$Q = p \cdot S \quad \text{Eq. 5}$$

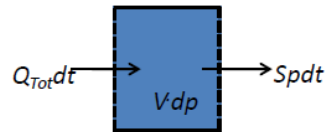
Donde S es la velocidad de bombeo o caudal volumétrico (l/s), depende de la presión y de la especie del gas.

2.4. EL PROCESO DE BOMBEO

En un flujo molecular estacionario se conserva la masa, por lo tanto, se puede aplicar la ecuación de la continuidad en un volumen de control (Vandoni, 2012).

$$V \cdot dp = Q_{tot} \cdot dt - S \cdot p \cdot dt \quad \text{Eq. 6}$$

Figura 4. Volumen de control en flujo molecular. (Vandoni, 2012)



Donde el primer término de la ecuación expresa el cambio de la presión del gas en el volumen de control constante. El segundo término es la cantidad de gas que se introduce en el volumen en un tiempo dt a una presión p y velocidad S , los gases se introducen por diferentes métodos, los más comunes en un régimen estacionario son la tasa de desgasificación de un material y posibles fugas en el sistema. Por último, el tercer término expresa la cantidad de gas que es bombeada fuera del volumen de control en un tiempo dt , en una presión p y velocidad S dadas. Normalmente, la cantidad de gas decrece con el tiempo, por lo que la ecuación anterior se puede expresar de mejor manera como:

$$-V \cdot \frac{dp}{dt} = S \cdot p - Q_{tot} \quad \text{Eq. 7}$$

Esta ecuación permite calcular primeras estimaciones de tiempos de bombeo, tasas de desgasificación de una cámara de vacío o cambios en la presión; dependiendo de los datos de los que se disponga. Aunque hay que tener en cuenta que el caudal de gas que sale del volumen depende de muchos factores como el tiempo, el estado anterior del sistema o la especie del gas. También hay que tener en cuenta que esta ecuación está aplicada a un volumen de control y, por lo tanto, no aparecen términos relacionados con la conductancia, que sí aparecen cuando se plantea la ecuación de la continuidad unidimensionalmente a un tubo de vacío.

2.5.CONDUCTANCIA

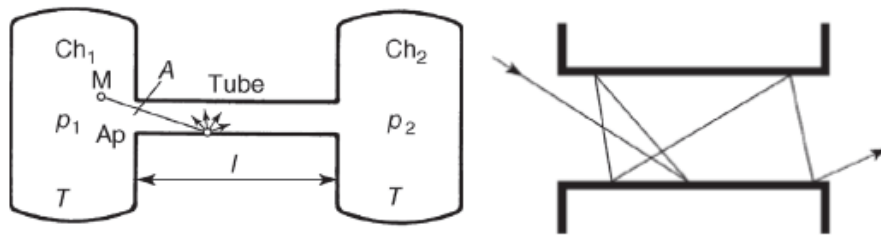
La conductancia es la capacidad de un sistema de vacío para conducir gas a través de los conductos que unen cámaras de vacío. Se puede definir como:

$$Q = C(p_1 - p_2) \quad \text{Eq. 8}$$

Donde C es la conductancia (l/s). De esta ecuación es común realizar una analogía con la ley de Ohm (Leybold Webpage, s.f.), en la que Q corresponde a la corriente; Δp , a la tensión, y C ,

al valor de conductancia eléctrica. Las conexiones entre conductos pueden sumarse en serie o en paralelo como si se trataran de resistencias eléctricas. De esta manera se puede establecer estimaciones de la presión en distintos puntos del sistema, aplicando la ecuación de continuidad en régimen estacionario.

Figura 5. Trayectorias de una partícula en el flujo molecular entre dos cámaras de vacío. (Jitschin, 2016)



2.6.TASA DE IMPACTO

La tasa de impacto se define como el número de impactos moleculares en una superficie por unidad de tiempo y de superficie.

$$J = \frac{n\bar{c}}{4} = \frac{p}{\sqrt{2\pi mk_b T}} \quad \text{Eq. 9}$$

Donde n es el número de partículas y \bar{c} es la velocidad media estas ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$), la cual se puede obtener mediante:

$$\bar{c} = \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} = \sqrt{\frac{8k_b T}{\pi m}} \quad \text{Eq. 10}$$

Donde R es la constante de los gases ideales, M el peso molar ($\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$), k_b es la constante de Boltzmann y m es la masa molecular(kg).

Debido a la naturaleza de un flujo molecular, podemos deducir que el flujo neto de partículas a través de un orificio de área A puede definirse usando el concepto de tasa de impacto como:

$$\frac{dN}{dt} = (J_1 - J_2)A \quad \text{Eq. 11}$$

A partir de esta ecuación y la ecuación del caudal en un flujo volumétrico se puede obtener la ecuación de la conductancia enunciada anteriormente.

$$Q = \sqrt{\frac{RT}{2\pi M}} A(p_1 - p_2) = C(p_1 - p_2) \quad \text{Eq. 12}$$

De donde se halla el valor de la conductancia, y para aire a $T=20^\circ\text{C}$ y una sección A en cm^2 :

$$C = \sqrt{\frac{RT}{2\pi M}} A = \frac{\bar{c}}{4} A = 11.8 \cdot A \quad \text{Eq. 13}$$

2.7. TRANSMISIÓN DE PROBABILIDAD

Para el cálculo de conductancias para geometrías distintas a un orificio se utiliza el concepto de transmisión de probabilidad, el cual se basa en multiplicar la conductancia por un factor de corrección (Clausing, 1932).

$$C = \alpha \cdot C_a \quad \text{Eq. 14}$$

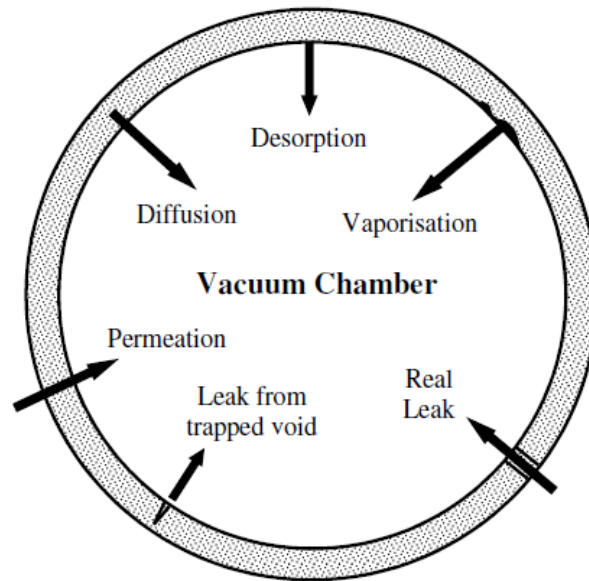
Donde α es la transmisión de probabilidad y C_a es la conductancia de la apertura equivalente. Los distintos valores de α pueden ser consultados en tablas para cada tipo de sección (O'Hanlon, 2003).

2.8. CARGAS DE GAS

En un sistema de vacío, las cargas de gas se refieren a la cantidad de gas que se introduce en el sistema a partir de diversas fuentes. La carga de gas es la limitación de los sistemas de vacío, ya que, asumiendo un sistema libre de fugas, una gran cantidad de materiales desgasifica. Por lo tanto, siempre entrará gas a la cámara de vacío sin importar cual sea la capacidad de bombeo. Los diferentes mecanismos por lo que las moléculas de gas entran en una cámara de vacío se pueden clasificar de la siguiente manera:

- Desgasificación
 - Desorción
 - Difusión
 - Vaporización
- Fugas
- Permeación

Figura 6. Fuentes de gases en una cámara de vacío. (Garton, 2011)

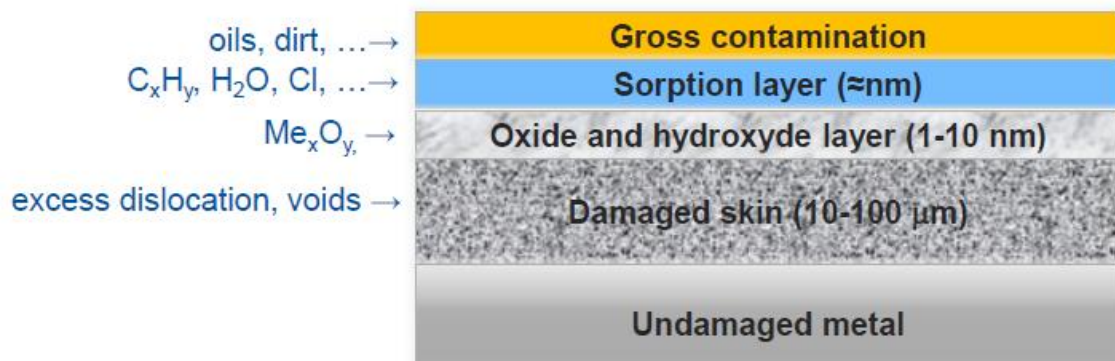


2.8.1. Vaporización

La vaporización se refiere al cambio de fase de las moléculas hacia el estado gaseoso. En una cámara de vacío que ha sido expuesta al aire ambiente, la presencia de vapor de agua absorbida en todas las superficies internas de la cámara es inevitable, ya que esta se condensa en las paredes. Esto es debido a la fuerte polaridad de las moléculas de agua. (Garton, 2011) Los gases son absorbidos por las superficies debido a procesos de absorción química o física (fuerzas de van der Waals) (Riihimaki, 2019). Por lo tanto, esta primera capa de vapor de agua es recargada cada vez que se ventea con aire la cámara de vacío. Además, cualquier presencia de contaminantes como fibras poseen una gran cantidad de agua absorbida que estará presente durante una gran cantidad de tiempo en el proceso de bombeo.

En un proceso de bombeo estacionario suficientemente largo estos gases residuales son eliminados prácticamente en su totalidad. El tiempo de bombeo necesario para eliminar los gases residuales depende de varios factores como la temperatura, la presencia de contaminantes o fugas, el volumen de la cavidad o incluso la rugosidad del material. Para reducir el tiempo en el que se elimina esta primera capa se suele recurrir a procesos de calentamiento de la cámara de vacío para estimular la desorción de estas moléculas. Gran parte de estos residuos puede evitarse con una correcta limpieza y selección de los materiales. (Chiggiato, 2017)

Figura 7. Capas existentes en las paredes de una cámara de vacío al inicio. (Chiggiato, 2017)



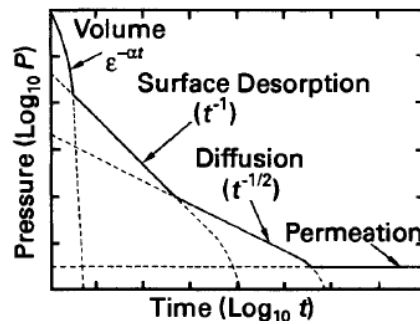
2.8.2. Desorción y Difusión

La desorción se refiere a la liberación de gases que están atrapados en los materiales de las superficies internas de la cámara de vacío. Mientras que la difusión se refiere al transporte de estos gases a través de los materiales. La presión del gas en el interior del sólido crea un gradiente de concentración que hace que las moléculas o átomos se muevan hacia la superficie interna de la cámara de vacío donde se produce la desorción. La difusión es normalmente un fenómeno más lento que la desorción, por lo tanto, en un proceso estacionario la difusión es la dominante. (O'Hanlon, 2003) El proceso de desorción puede ser estimulado al aumentar la temperatura ya que se reduce el tiempo de permanencia de las partículas en la superficie.

Tras la eliminación del vapor de agua en el proceso de bombeo, la presión parcial del hidrógeno (H) suele ser la principal contribuyente. Esto es debido a que los materiales de la cámara de vacío, normalmente acero inoxidable, contienen una concentración de hidrógeno que proviene de los procesos de fabricación. La solubilidad del hidrógeno en estos materiales en estado líquido es alta y tras una rápida solidificación, el hidrógeno queda atrapado en ellos. A diferencia del vapor de agua el hidrógeno no se recarga al exponer la cámara de vacío al ambiente. (Chiggiato, 2017)

Valores estimados de desgasificación de los materiales pueden ser encontrados en tablas y bases de datos para su uso en cálculos de la presión en una cámara de vacío.

Figura 8. Cargas de gas dominantes a lo largo del proceso de bombeo. (O'Hanlon, 2003)



2.8.3. Fugas

Las fugas son otra fuente de gas en una cámara de vacío. Las fugas se producen cuando existe una brecha o un orificio en la estructura de la cámara que permite la entrada de gas desde el exterior. Existen dos tipos de fugas:

- Fuga real: referente a orificios por los que el aire del exterior puede atravesar la pared y penetrar en la cámara de vacío. Estas fugas disminuyen la calidad del vacío y pueden ser detectadas mediante detectores de fugas de Helio. Su origen puede provenir de muchas maneras, sin embargo, suelen ser comunes las fugas de uniones de vacío contaminadas, grietas debido a estrés o ensamblajes mal alineados.
- Fugas de vacío atrapados: estas fugas provienen de pequeñas oquedades que puede tener el interior de la cámara de vacío provenientes de la fabricación de esta. Son fugas indetectables y deben prevenirse asegurando una buena calidad de los métodos de fabricación de la cámara.

2.8.4. Permeación

La permeación se refiere a la capacidad de los materiales para permitir el paso de gases a través de ellos. Es un efecto que ocurre en tres fases. En una pared que separa dos gases a distinta presión, primero, el gas es absorbido por la capa externa, difunde a través del material y finalmente es expulsado en la capa interna (Sonderegger, 2006).

Los materiales poseen un valor de permeación intrínseca, que está determinada por su estructura molecular y propiedades físicas. Algunos materiales, como el vidrio o ciertos polímeros, pueden tener una permeación inherente a los gases, lo que significa que permiten

su difusión a través de ellos. Aunque, la permeación también puede estar influenciada por la presencia de poros, grietas u otras imperfecciones en el material.

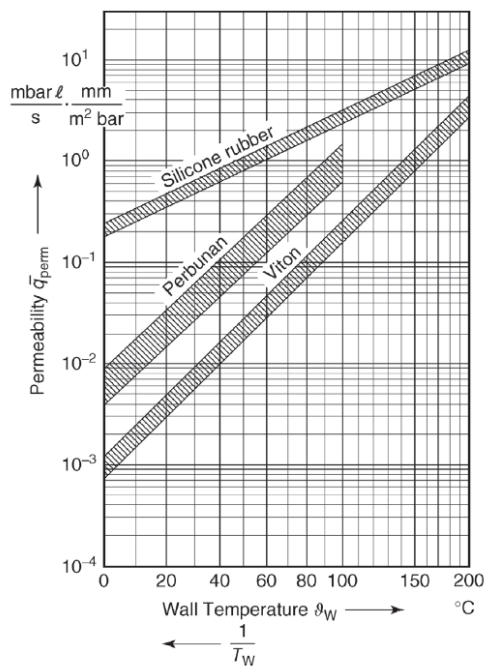
A pesar de que el efecto de la permeación en una cámara de vacío es apreciable solo en alto vacío. Si los materiales utilizados tienen una permeación relativamente alta, se producirá una fuga gradual de gas hacia el interior de la cámara.

El acelerador de partículas que va a ser estudiado posee algunas uniones de juntas elastómeras de Viton, en concreto en los ocho acopladores del RFQ. El cálculo de la tasa de fuga asociada a la permeación se puede estimar usando un enfoque similar a la ley de Ohm (Jousten, 2016), asumiendo que existe una conductancia de permeación que es función de la diferencia de presión, la temperatura y el área y espesor de la pared que se permea.

$$Q = \overline{q_{perm}} \frac{A}{d} \Delta p \quad \text{Eq. 15}$$

Donde q_{perm} es la conductancia de permeación ($\text{mbar} \cdot \text{l} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{mm} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{bar}^{-1}$), Q es la tasa de flujo de permeación ($\text{mbar} \cdot \text{l} \cdot \text{s}^{-1}$), A es el área de la pared que se permea (m^2), d es el espesor de la pared (mm) y Δp es la diferencia de presión entre los dos lados de la pared (bar).

Figura 9. Conductancia de permeación según la temperatura. Humedad del aire ambiente del 60%. (Jitschin, 2016)



El término de la conductancia de permeación se puede consultar en la gráfica anterior, donde se representan los distintos valores de conductancia de permeación según la temperatura para un valor de humedad del aire ambiente del 60%.

2.8.5. Materiales usados en el acelerador

Para estimar la tasa de desgasificación que van a tener los distintos materiales del acelerador se necesita consultar las referencias bibliográficas adecuadas. Existen principalmente tres materiales en el acelerador, la gran mayor parte es acero inoxidable. La segunda y más larga sección del acelerador, el RFQ está hecho entero de cobre OFE (Oxygen Free) con algunas partes más pequeñas de acero con cobre electrodepositado. Por último, el interior de la cuarta sección del acelerador, el SRF LINAC, está hecho de Niobio. Aunque la tasa de desgasificación depende tanto de la velocidad de bombeo como el tiempo de bombeo, para este estudio se han considerado valores constantes para un proceso de bombeo largo (entre 50 y 100 horas).

2.8.5.1. Acero Inoxidable

El acero inoxidable posee una capa externa de CR_2O_3 que lo protege contra la corrosión (Sgobba, 2006). El gas producido por la desorción en un acero inoxidable sin haber usado un tratamiento térmico es el vapor de agua. Sin embargo, para aceros que se han calentado a $300^\circ C$ en vacío, el Hidrógeno es el mayor contribuyente de la desorción. (Nuvolone, 1977). En la simulación se ha usado un valor conservativo de $2 \cdot 10^{-12} \text{ mbar} \cdot \text{l} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$.

Tabla 2. Tasa de desgasificación del acero inoxidable.

Tratamiento Superficial	Tasa de desgasificación ($10^{-12} \text{ mbar} \cdot \text{l} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$)			
	H ₂	H ₂ O	CO	CO ₂
Vacío 75 horas	89.3	57.3	8.7	1.3
Vacío 50 horas 150°C	38.7	1.7	0.6	0.04
Vacío 40 horas 300°C	8.3	0.06	0.22	0.001

2.8.5.2. Cobre OFE (Oxygen Free)

El cobre es utilizado en el acelerador de partículas debido a su alta conductividad eléctrica y térmica. El cobre OFE es fabricado manteniéndolo libre de moléculas de Oxígeno, reduciendo así considerablemente los valores de la tasa de desgasificación. La desgasificación del cobre después de un calentamiento a 100°C durante 20 horas es de $1.5 \cdot 10^{-12}$ mbar·l·s⁻¹·cm⁻² (Elsay, 1975). Las moléculas que aparecen en mayor cantidad en la desorción a esa temperatura y mismo tiempo es el monóxido de Carbono con $1.183 \cdot 10^{-12}$ mbar·l·s⁻¹·cm⁻² (Dobrozemsky & Moraw, 1973). En la simulación se ha usado un valor conservativo de $1.2 \cdot 10^{-12}$ mbar·l·s⁻¹·cm⁻².

2.8.5.3. Acero con cobre electrodepositado

El acero recubierto de cobre electrodepositado se usa en cámaras de vacío grandes ya que se obtienen las ventajas de las propiedades físicas del acero inoxidable o al carbono junto con las buenas propiedades de conductividad eléctrica del recubrimiento de cobre. Sin embargo, durante el proceso de electrodeposición se introduce una cantidad significativa de Hidrógeno en el interior del material (Gaudet, 1981), resultando en tasas de desgasificación relativamente altas en comparación con los demás materiales y siendo un 80% de las moléculas desgasificadas Hidrógeno. El valor de la tasa de desgasificación para una pieza que se ha sometido a un tratamiento térmico a 120°C durante 24 horas es de $48 \cdot 10^{-12}$ mbar·l·s⁻¹·cm⁻² (Ratnakala), este es el valor usado en la simulación.

2.8.5.4. Niobio

Las superficies de Niobio del acelerador de partículas se encuentran solo en el SRF Linac. Todas ellas están a una temperatura de trabajo de 4.45 Kelvin, por lo tanto, la tasa de desgasificación de todas estas superficies se considera nula. Las temperaturas criogénicas aumentan el tiempo medio de estancia de las partículas en las paredes de esta cámara o hace que las partículas condensen en su superficie, actuando el crio-módulo como una bomba criogénica, ya que se basa en los mismos principios.

3. METODOLOGÍAS DE CÁLCULO

Con los fundamentos teóricos que han sido revisados en la sección anterior ya es posible hacer primeras estimaciones de la presión en el interior de una cámara de vacío. Pero estas estimaciones pueden cometer errores de cálculo severos, ya que requieren de que se cumplan varias suposiciones. En este apartado estudiaremos cómo calcular con precisión el perfil de presiones en conductos esbeltos, cómo los de un acelerador de partículas. Se revisarán diversos métodos de cálculo, pero el elegido para este estudio y el que es utilizado por el software Molflow+ es el método de Monte Carlo de test de partículas. Esto es debido a su sencillez de aplicación y capacidad de aplicar a estructuras grandes sin una gran carga computacional. Los métodos de cálculo que van a ser expuestos en este estudio son:

- Métodos analíticos de cálculo.
- Métodos numéricos de cálculo.
- Método de Monte Carlo.
 - Directo.
 - Test de partículas.

3.1. MÉTODOS ANALÍTICOS DE CÁLCULO

Para calcular los perfiles de presión que ocurren en el interior de un acelerador de partículas se debe definir la ecuación de la continuidad unidimensional para el flujo molecular (Kersevan, 2007):

$$V \frac{dP(x, t)}{dt} = Q(x, t) - S(x, t) \cdot P(x, t) + c(x, t) \cdot \frac{d^2P(x, t)}{dx^2} \quad \text{Eq. 16}$$

Donde V es el volumen, P es la presión, Q es la tasa de desgasificación, S la velocidad de bombeo y c la conductancia específica ($\text{l}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}$). Normalmente se puede asumir que la presión dentro de un acelerador está en condiciones estacionarias. Por lo tanto, la se puede simplificar de la siguiente manera:

$$c(x) \cdot \frac{d^2P(x)}{dx^2} - S(x) \cdot P(x) = -Q(x) \quad \text{Eq. 17}$$

Cuando la velocidad de bombeo S y la conductancia es constante la solución se obtiene integrando la ecuación diferencial de segundo orden. Un ejemplo simple donde aplicar la resolución analítica sería en un tubo de área A y longitud $2L$, con tres bombas de vacío conectadas a las alturas 0 , L y $2L$ respectivamente. Las condiciones de contorno son:

$$\begin{cases} \frac{dP}{dx}(x = L, 3L) = 0 \\ P(x = 0) = QL/S \end{cases} \quad \text{Eq. 18}$$

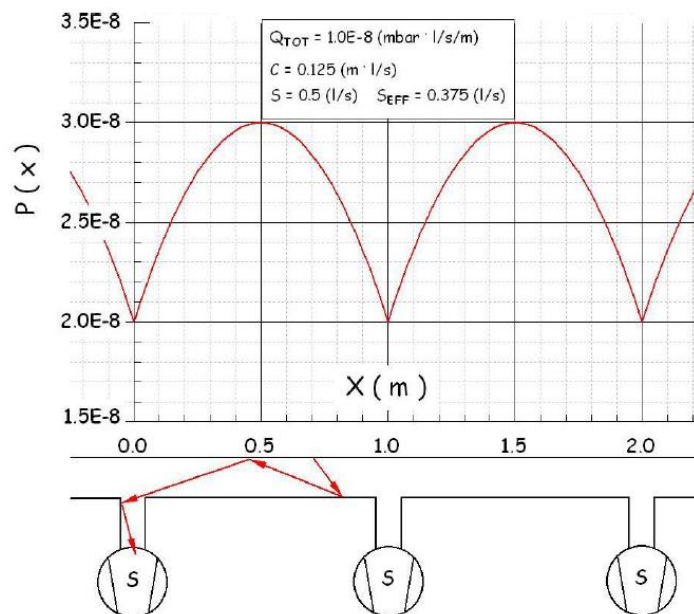
El resultado tras integrar es el siguiente:

$$P(x) = \frac{Q}{2c}(Lx - x^2) + \frac{QL}{S} \quad \text{Eq. 19}$$

El resultado es un perfil de presiones parabólico y periódico, donde el periodo es L .

No obstante, no siempre la conductancia y la velocidad de bombeo son constantes y, además, en los aceleradores de partículas hay que tener en cuenta más fenómenos como las pérdidas del haz.

Figura 10. Solución analítica de un perfil de presiones (Kersevan, 2007)



3.2. MÉTODOS NUMÉRICOS DE CÁLCULO

Para geometrías distintas de un tubo recto y valores de conductancia c , desgasificación Q y velocidad de bombeo S variables, la ecuación diferencial de segundo orden se puede discretizar mediante el método de diferencias finitas (Sullivan, 1993). Este método es útil para estudiar el perfil de presión de aceleradores que tienen secciones claramente diferenciables y separables, pero no complejas. Para ello, primero la ecuación diferencial del balance de masas se reescribe como:

$$\frac{d}{dx} \left(c \frac{dP}{dx} \right) - S \cdot P + Q = 0 \quad \text{Eq. 20}$$

El primer término de la ecuación puede discretizarse de la siguiente manera.

$$\frac{d}{dx} \left(c_i \frac{dP}{dx} \right) = \frac{(c_{i+1} - c_i)P_{i+1} + (c_i - c_{i-1})P_{i-1}}{2\Delta x^2} - \frac{(c_{i+1} - c_{i-1} + 2c_i)P_i}{2\Delta x^2} \quad \text{Eq. 21}$$

Por lo que la ecuación discretizada queda.

$$\frac{(c_{i+1} - c_i)P_{i+1} + (c_i - c_{i-1})P_{i-1}}{2\Delta x^2} - \frac{(c_{i+1} - c_{i-1} + 2c_i)P_i}{2\Delta x^2} - s_i P_i + q_i = 0 \quad \text{Eq. 22}$$

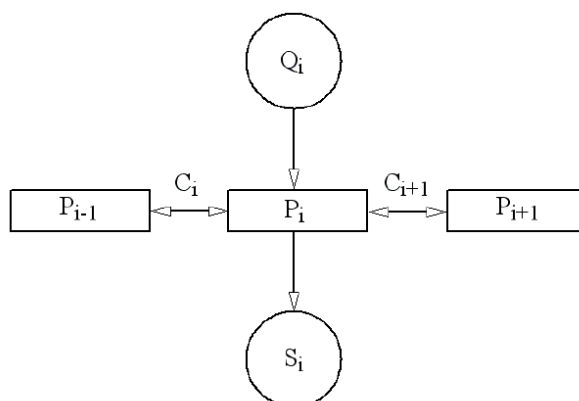
Al añadir condiciones de contorno como la siguiente la ecuación se convierte en una matriz tri-diagonal que es multiplicada por el vector de presiones P_i . Se puede resolver con métodos de eliminación de Gauss, por ejemplo.

$$Q_i = c_i \frac{P_{i+1} - P_{i-1}}{2\Delta x^2} \quad \text{Eq. 23}$$

Otro método de resolución numérica es el llamado principio de continuidad del caudal (Li, 1999). En este método se discretiza el sistema de vacío, asignándole a cada segmento una velocidad de bombeo S , un valor de desgasificación Q y una conductancia C , quedando la ecuación del balance de masas como.

$$c_i(P_{i-1} - P_i) + c_{i+1}(P_{i+1} - P_i) + Q_i = S_i P_i \quad \text{Eq. 24}$$

Figura 11. Partícula de discretización del método de principio de continuidad del caudal. (Li, 1999)



3.3.MÉTODO DE MONTE CARLO

El método de cálculo de Monte Carlo se utiliza en las simulaciones de vacío, como en el programa de código abierto Molflow+, para obtener resultados numéricos aproximados mediante el uso de técnicas estocásticas. Anteriormente usado para el cálculo de conductancias en secciones complejas empleando el método directo de Monte Carlo. En la actualidad usado por el software Molflow+, usando el método de Monte Carlo de partícula test, para la estimación de presión en sistemas de vacío con geometrías más complejas, como aceleradores de partículas.

3.3.1. Método de Monte Carlo Directo

En el método directo de Monte Carlo (DSMC) se generan moléculas una a una y se monitoriza desde la fuente hasta el sumidero. (Kersevan, 2007). Se basa en el cálculo de trayectorias aleatoriamente generadas en cada punto, mediante *ray tracing*, en el cual una partícula es generada o rebota con una de las paredes internas de la cavidad. Este cálculo se repite hasta que la partícula es absorbida por una superficie a la que se le ha asignado un coeficiente de pegado (sticking coefficient). Este coeficiente representa la probabilidad de que una molécula impactando en una pared sea permanentemente evacuada de la cavidad de vacío. La relación entre la velocidad de bombeo S y el coeficiente de pegado s es dada por la siguiente ecuación.

$$S = s \cdot A \cdot \frac{\bar{v}}{4} \quad \text{Eq. 25}$$

Esta ecuación tiene la misma forma que la ecuación de la conductancia incluyendo la transmisión de la probabilidad (Eq. 14).

La transmisión de probabilidad sigue una distribución binomial con la siguiente desviación estándar.

$$\sigma = \sqrt{\frac{w \cdot (1 - w)}{N}} \quad \text{Eq. 26}$$

Siendo N el número de partículas generadas. La conductancia C de un tubo con cualquier sección transversal se obtiene calculando w usando el método de Monte Carlo directo e insertándolo en lugar de la transmisión de probabilidad en la ecuación de la conductancia.

Figura 12. Ejemplo de cálculo de la transmisión de probabilidad de un codo. (Davis, 1960)

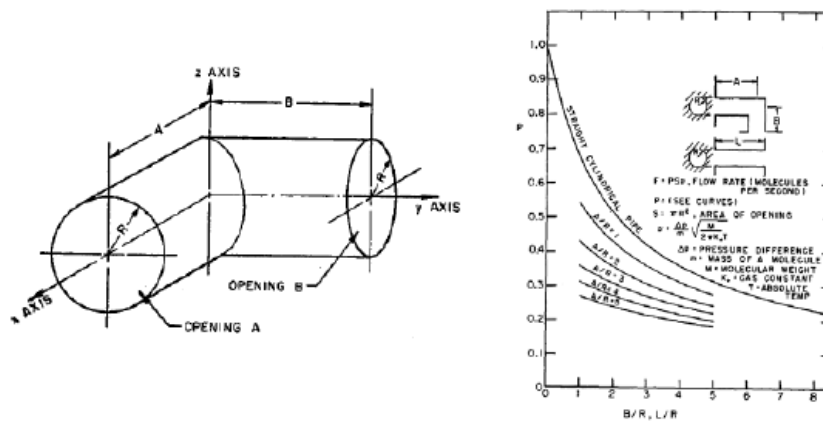


Figura 13. Esquema de cálculo del método de Monte Carlo directo

$$\begin{cases} X'' = L \sin \theta \cos \varphi \\ Y'' = L \sin \theta \sin \varphi \\ Z'' = L \cos \theta \end{cases} \quad \theta = \sin^{-1}(\sqrt{r})$$

Se genera una partícula con un ángulo aleatorio. r es una variable aleatoria

$$\begin{cases} X_i = X_i + L_i (\sin \theta \cos \varphi \cos \beta_i - \sin \theta \sin \varphi \sin \alpha_i \sin \beta_i - \cos \theta \cos \alpha_i \sin \beta_i) \\ Y_i = Y_i + L_i (\sin \theta \sin \varphi \cos \alpha_i - \cos \theta \sin \alpha_i) \\ Z_i = Z_i + L_i (\sin \theta \cos \varphi \sin \beta_i + \sin \theta \sin \varphi \sin \alpha_i \cos \beta_i + \cos \theta \cos \alpha_i \cos \beta_i) \end{cases}$$

Se calcula dónde impacta y su trayectoria.

$$\begin{cases} L_i = -(A_i X_i + B_i Y_i + C_i Z_i + D_i) / U \\ U = A_i (\sin \theta \cos \varphi \cos \beta_i - \sin \theta \sin \varphi \sin \alpha_i \sin \beta_i - \cos \theta \cos \alpha_i \sin \beta_i) + \\ \quad + B_i (\sin \theta \sin \varphi \cos \alpha_i - \cos \theta \sin \alpha_i) + \\ \quad + C_i (\sin \theta \cos \varphi \sin \beta_i + \sin \theta \sin \varphi \sin \alpha_i \cos \beta_i + \cos \theta \cos \alpha_i \cos \beta_i) \end{cases}$$

Se repite múltiples veces.

3.3.2. Método de Monte Carlo Partícula Test

El método de Monte Carlo de partícula test (TPMC) es usado por el software desarrollado por el CERN, Molflow+, en 1990, para calcular perfiles de presión y conductancias en sistemas de vacío complejos. Posee algunas diferencias (Ady M. , 2016) con respecto al método directo:

- Usa una cantidad de partículas “test” para representar una cantidad de partículas real mayor. El cálculo de las propiedades físicas de esta cantidad mayor de partículas se realiza escalando las partículas test.
- No se tiene en cuenta las colisiones intermoleculares, solo las colisiones con las paredes, y las trayectorias son rectilíneas.
- En TPMC se calcula el tiempo en el que impactan las partículas en las paredes, en lugar de avanzar en pasos de tiempo determinados.
- Las partículas test son independientes, por lo que se pueden calcular de manera totalmente paralela.
- La importación del mallado es simple, usando el formato STL.
- No es necesario el cálculo de las conductancias de un sistema. Solo añadir desgasificación y velocidad de bombeo.

La presión en una superficie de una simulación TPMC (Ady & Kersevan, 2014) viene dada por la siguiente ecuación:

$$p = \frac{4 \cdot 10}{\sqrt{\frac{8RT}{\pi \cdot m \cdot 0.001}}} \cdot \frac{Q \cdot hits}{N} \cdot \frac{1}{A \cdot opacity \cdot 2_sided} \quad \text{Eq. 27}$$

Donde p es la presión (mbar), Q es la desgasificación total ($\text{mbar} \cdot \text{l} \cdot \text{s}^{-1}$), $hits$ es el número de impactos que se han registrado en la superficie, N es el número total de partículas generadas, A es el área de la pared (cm^2) y m es la masa molecular ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$). Esta ecuación no posee las unidades en el sistema métrico, es por lo que aparece un factor de 10 en el denominador, es debido al cambio de metros cuadrados a centímetros cuadrados, de kilogramos a gramos y de litros a metros cúbicos. Opacity es un factor para representar menos impactos debido a la opacidad de una superficie. Por último 2_sided es igual a uno o dos dependiendo si se cuentan los impactos de una sola cara o las dos de una superficie, respectivamente.

Para la generación de números aleatorios Molflow+ utiliza el algoritmo Mersenne Twister y para el cálculo de *ray tracing* usa un algoritmo optimizado que construye un árbol de cajas alineadas por un eje (AABB) y después calcula la distancia de colisión.

4. MODELADO 3D DE LAS SECCIONES DEL ACELERADOR

En esta sección se describirán las diversas secciones del acelerador LIPAc además de presentar los modelos 3D de las cavidades internas de estas. Los modelos 3D se han realizado individualmente siguiendo esas secciones y después se han ensamblado todos juntos. Tras ello los modelos han sido exportados en formato “.stl” ya que es el formato de entrada de Molflow+. Las siguientes secciones componen el acelerador:

- Inyector.
- RFQ (Radio Frequency Quadrupole).
- MEBT (Medium Energy Beam Transport).
- SRF (Superconducting Radio Frequency) LINAC (Linear Accelerator).
- DPLATE (Diagnostic Plate).
- HEBT (High Energy Beam Transport).
- Beam Dump.

Los modelos 3D deben de cumplir una serie de condiciones para asegurar buenos y eficientes resultados de la simulación de Monte Carlo. Todos los modelos representan el interior de la cavidad que se va a someter a vacío, tal y como se haría en una simulación de flujo interno de un fluido. Todas las aristas que contienen redondeos o geometrías complejas han sido simplificadas para reducir la carga computacional del cálculo.

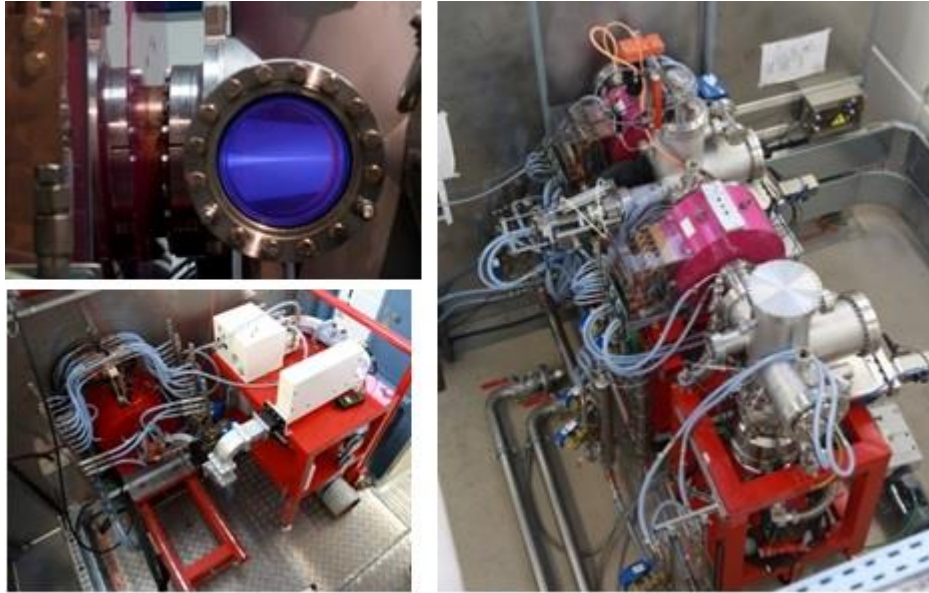
4.1. INYECTOR

Esta sección es donde se inicia el acelerador de partículas LIPAc. Consiste en la fuente de iones, dos tubos solenoides, un tubo de diagnósticos y, por último, una sección cónica. El volumen es evacuado por dos bombas turbo-moleculares, ITP01 e ITP02, la primera estando localizada debajo del tanque de diagnósticos y la segunda al final de la sección cónica. Entre el tanque de diagnóstico y el cono hay una válvula de puerta que separa las dos cavidades en caso de mantenimiento. Ambas bombas turbo-moleculares poseen también una válvula de puerta en su entrada. El material de la sección cónica es cobre y el resto es acero inoxidable.

Tanto el tanque de diagnóstico como la unión entre el cono y la segunda bomba de vacío poseen varias uniones KF. Estas uniones se han sellado usando juntas elastómeras de Viton, por lo que el efecto de la permeabilidad será notable en esta sección del acelerador.

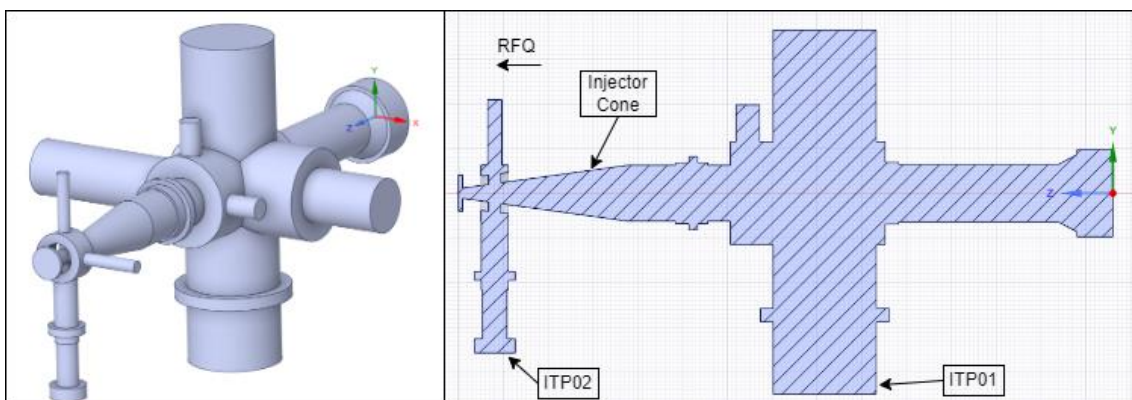
El requisito de trabajo del inyector es no sobrepasar una presión de 10^{-6} mbar. La interfaz con la siguiente sección del acelerador, el RFQ, es una pequeña entrada de 12mm de diámetro, por lo que la conductancia entre estas dos secciones es muy baja. (Gobin, 2010)

Figura 14. Inyector de LIPAc. (IFMIF Webpage, s.f.)



El modelo 3D usado para la simulación puede encontrarse en la imagen a continuación. Puede observarse que se ha modelado todas las partes del inyector con excepción de la fuente de iones, ya que en operación posee un valor de presión dominado por la inyección de gas (Deuterio) y está fuera del objetivo de este estudio.

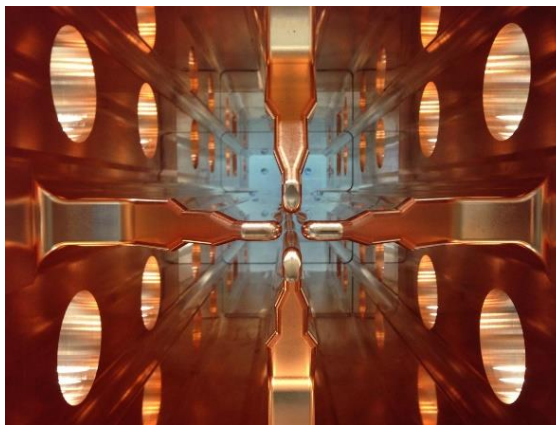
Figura 15. Modelo 3D del interior del Inyector



4.2.RFQ

El RFQ es una estructura de cobre de 9.8 metros que es usada para acelerar el haz de deuterio hasta 130 mA. Está compuesto por 18 módulos unidos entre sí por una unión de vacío especial. El material con el que está fabricado cada módulo es cobre OFE (Oxygen Free). Cada módulo posee cuatro puertos de entrada a cada lado, usados para la inyección de radiofrecuencia (CF100) o para el bombeo de vacío (CF160). Los módulos 1,2,4,5 y 13 poseen estaciones de bombeo a cada lado, usando dos puertos de entrada para cada estación. Las estaciones de bombeo son cilíndricas de acero inoxidable y poseen una bomba criogénica. Además, las estaciones de bombeo 5 y 13 poseen bombas iónicas en su parte superior. Todas las bombas criogénicas pueden aislarse con una válvula de puerta.

Figura 16. Interior del RFQ. (Comunian, 2014)



En la parte central del RFQ se encuentran instalados los ocho acopladores. Estas piezas son usadas para inyectar la potencia de radio frecuencia al RFQ, son piezas de acero con cobre electrodepositado, con excepción de un disco de cerámica que posee un recubrimiento de nitruro de titanio. El disco de cerámica actualmente se instala sobre dos juntas de Viton, cuya permeabilidad afectará negativamente al vacío de esta sección.

La interfaz con la siguiente sección, la MEBT, es a partir de una válvula de puerta de un tamaño estándar CF 40 por lo que la conductancia entre estas dos secciones vuelve a ser baja.

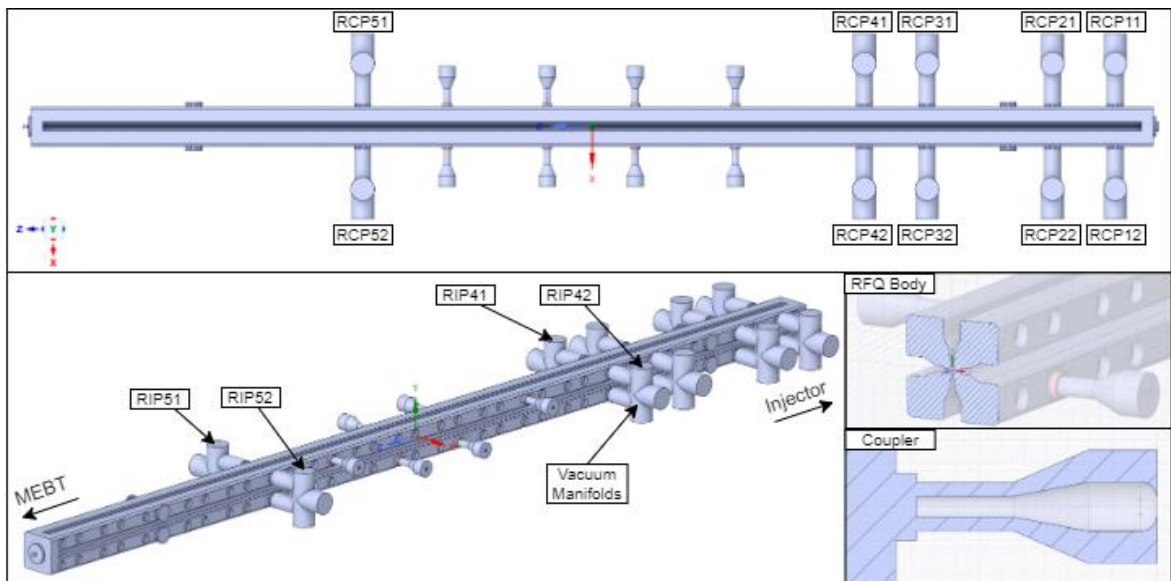
Figura 17. Instalación del RFQ en Rokkasho. (Fusion FOr Energy, s.f.)



El requisito del nivel de vacío del RFQ es ser menor que $5 \cdot 10^{-7}$ mbar en toda su cavidad (INFN (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare), 2011).

El modelo 3D usado para la simulación puede encontrarse en la imagen a continuación. Se puede observar que se ha modelado la totalidad del interior de la cavidad, incluyendo las estaciones de bombeo y los acopladores. Cabe destacar que este modelo posee una geometría compleja en su sección.

Figura 18. Modelo 3D del interior del RFQ



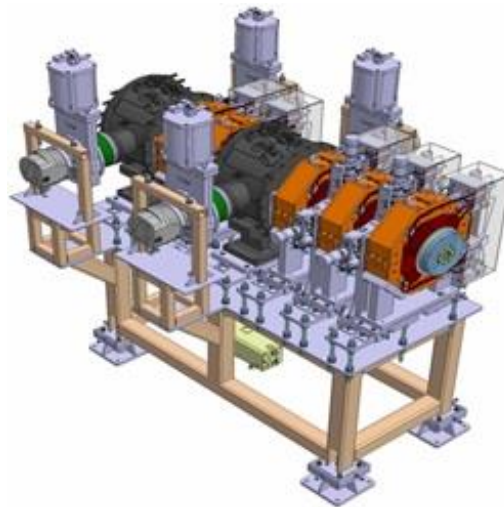
4.3.MEBT

Esta sección consiste primero en dos cavidades pequeñas, donde se encuentran los *scrappers*, y en dos cavidades más grandes llamadas *bunchers*. Los *bunchers* son estructuras cilíndricas acero inoxidable recubierto por una capa de cobre electrodepositado. Ambos tienen dos puertas laterales en las que se encuentran instaladas bombas de vacío a cada lado. El primer *buncher* posee dos bombas turbo-moleculares y el segundo posee una bomba iónica y otra turbo-molecular. Todas las bombas pueden aislarse de la cavidad con una válvula de puerta. El resto de la cavidad interna está fabricado en acero inoxidable 316L.

La interfaz con la siguiente sección, el SRF LINAC, es una válvula de puerta de tamaño estándar CF63.

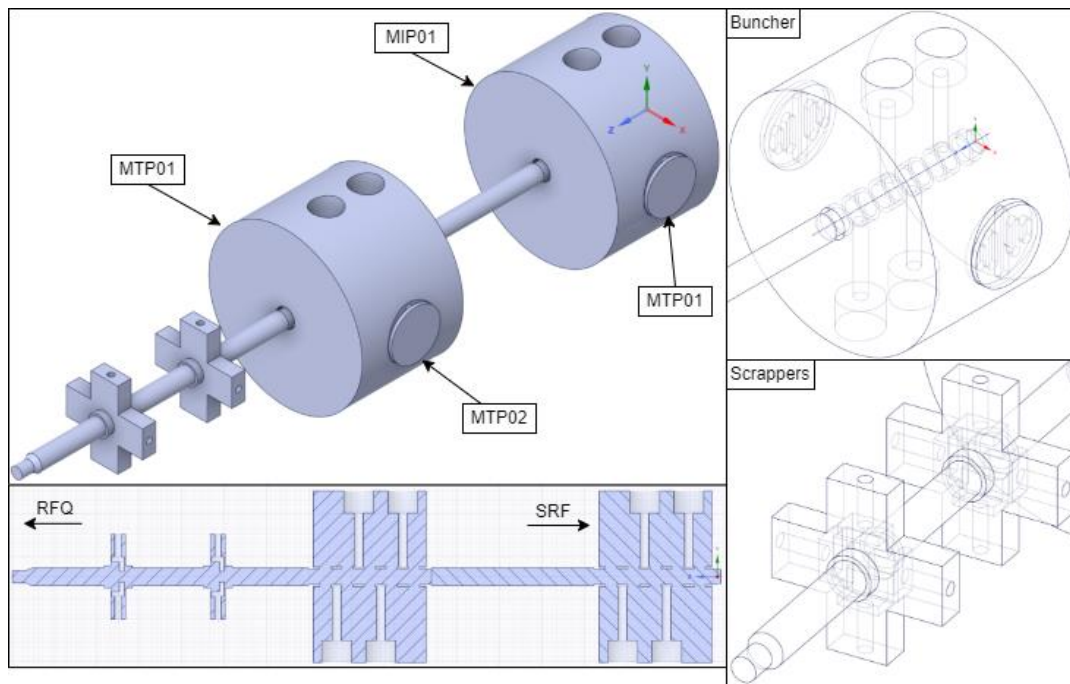
El requisito del nivel de vacío de la MEBT es ser menor que $5 \cdot 10^{-7}$ mbar a la salida del RFQ y $5 \cdot 10^{-7}$ mbar a la entrada del SRF Linac (Ciemat, LIPAc EU-HT, 2014).

Figura 19. Modelo 3D de referencia de la MEBT. (IFMIF Webpage, s.f.)



El modelo 3D usado para la simulación puede encontrarse en la imagen a continuación. Se puede observar que se ha modelado el interior de la cavidad incluyendo todas las geometrías internas.

Figura 20. Modelo 3D del interior de MEBT



4.4.SRF LINAC

La cámara de vacío de esta sección está formada por ocho cavidades superconductoras en las que se encuentra los acopladores en su inferior y están unidas por un tubo que es rodeado por un solenoide. Todo el tubo interior del haz está contenido a su vez por una cámara de vacío más grande. Todas las superficies de la cavidad, con excepción de los extremos inferiores de los acopladores, están a una temperatura de trabajo de 4.45 K. Esto tiene dos efectos en el vacío:

- Condensación de las moléculas en las paredes. Al llegar a temperaturas criogénicas y a presiones de alto vacío se llega a rangos cercanos o menores al punto triple de las presiones de saturación de los gases. Esto quiere decir que las curvas de saturación del gas se convierten idéntica a la curva de sublimación. Por lo tanto, las moléculas de gas sufren una transformación directa hacia el estado sólido. (Day, 2007)
- Aumento del tiempo de estancia de las partículas en las paredes internas de la cavidad, ya que es una propiedad que depende altamente de la temperatura (Chiggiato, 2017). Esto hace que las moléculas que no sean condensadas en la pared por el efecto anterior estén considerablemente más tiempo antes de ser expulsadas, ralentizando el movimiento de las moléculas y por lo tanto bajando la presión.

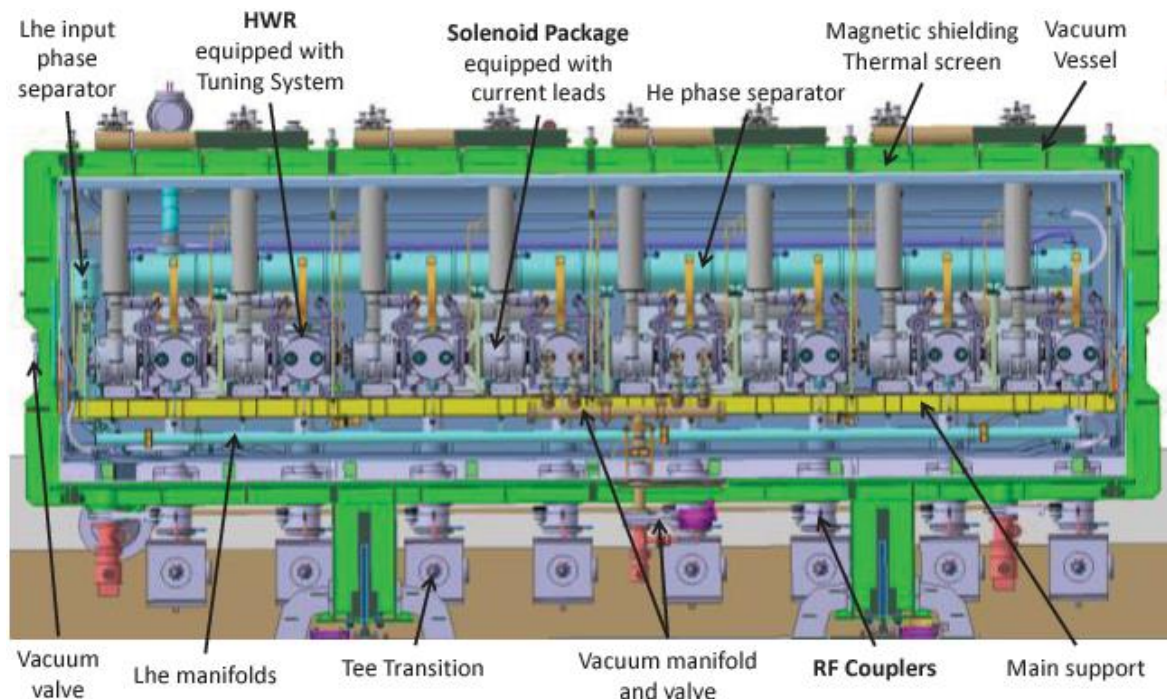
Además, la cavidad interna tiene dos puertos que conectan a una bomba turbo-molecular. El uso de esta bomba es crear el alto vacío previo a la operación del crio-módulo para asegurar su limpieza. Durante la operación estos puertos están cerrados mediante una válvula.

Los acopladores del SRF LINAC sufren una transición térmica entre la temperatura ambiente y temperaturas criogénicas, por lo tanto, en la zona cercana al extremo de los acopladores el valor de la tasa de desgasificación no será nulo.

La interfaz con la siguiente sección vuelve a ser una válvula de puerta de tamaño estándar CF63.

No existen requisitos de vacío para esta sección porque son parte de su definición. El crio-módulo tiene que estar en ultra-alto vacío para su operación. Todas las demás secciones tienen requisitos de niveles de vacío para asegurar un vacío limpio de contaminantes en esta sección (Ciemat, CEA Saclay, 2013).

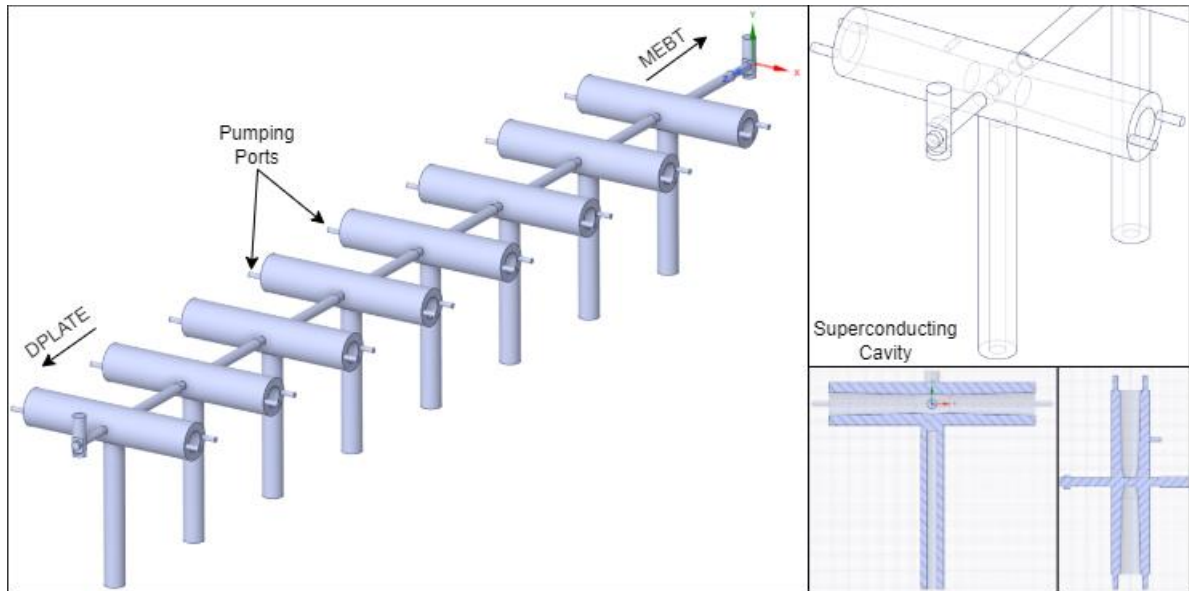
Figura 21. Modelo 3D del SRF LINAc. (Orsini & Bazin, 2013)



El modelo 3D usado para la simulación puede encontrarse en la imagen a continuación. Se ha modelado toda la cavidad por donde pasa el haz. No se ha modelado la cámara de vacío externa ya que está fuera del estudio de este trabajo. Además, tampoco la estación de

bombeo donde se sitúa la bomba turbo-molecular, ya que esta bomba durante la operación estará apagada o aislada de la cavidad del crio-módulo.

Figura 22. Modelo 3D del interior de SRF

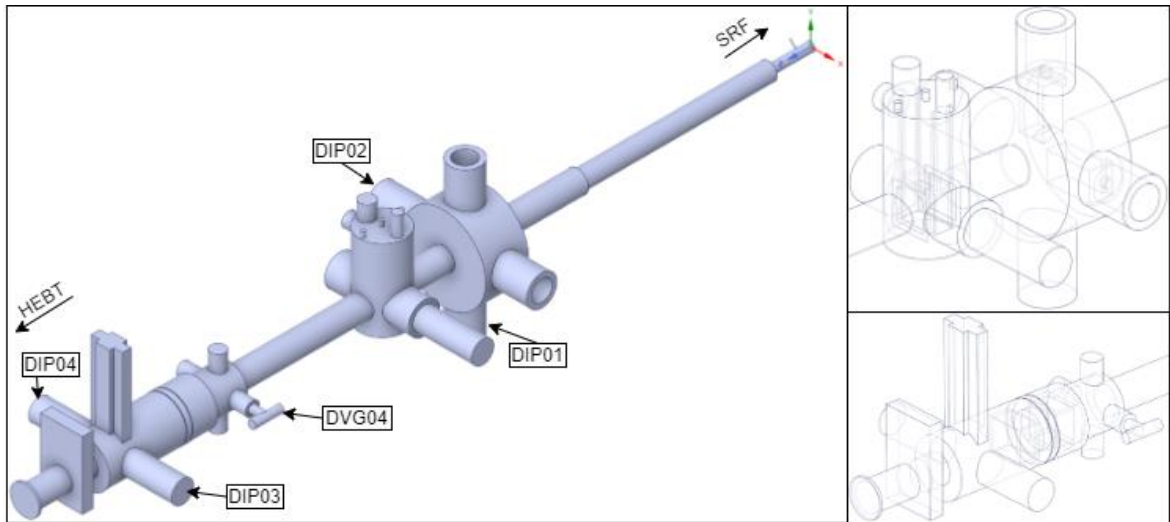


4.5. HEBT AND BEAM DUMP

HEBT es la última sección del acelerador de partículas, que empieza en el final del SRF LINAC y acaba a la entrada del *Beam Dump*. Para este estudio se ha separado la primera parte de HEBT debido a su compleja geometría interna y en el segundo modelo se ha hecho el resto de HEBT y el *Beam Dump*.

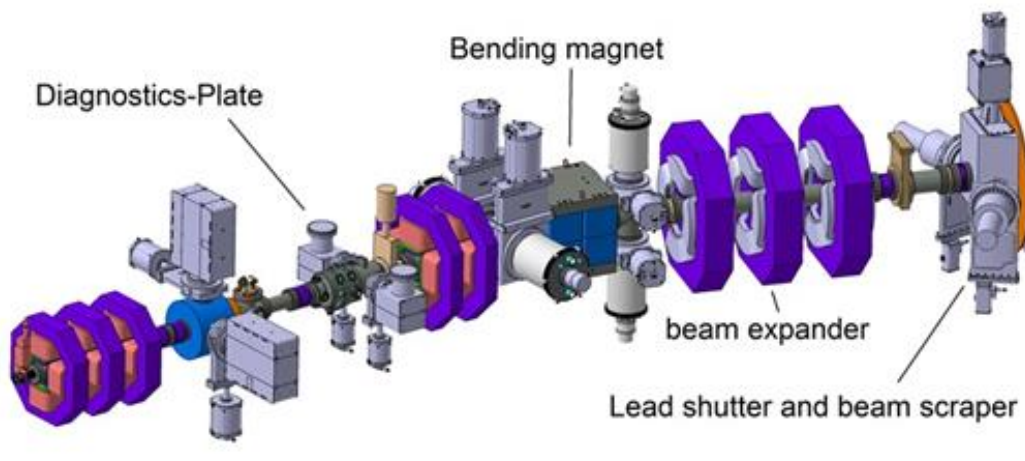
Dplate es la primera sección de la HEBT. Consiste en un tubo rectilíneo en el que hay varias cavidades cuyo propósito es la caracterización y control del haz. En la primera cavidad hay dos bombas iónicas, DIP01 y DIP02, y en la última cavidad del Dplate hay otras dos, DIP03 y DIP04. EL requisito de nivel de presión a la entrada del SRF LINAC son valores por debajo de $5 \cdot 10^{-8}$ mbar (Arranz & Brañas, 2012) para prevenir la contaminación del crio-módulo. Está separado del SRF y de los siguientes subsectores de HEBT mediante válvulas de puerta.

Figura 23. Modelo 3D del interior de DPLATE



HEBT continúa con dos subsectores más, ambos separados también por una válvula de puerta. En el primer subsector hay montadas dos bombas criogénicas, HCP01 y HCP04, y en el segundo otras dos, HCP02 y HCP03. Estas bombas criogénicas tienen una alta capacidad de bombeo ya que están preparadas para evacuar la intensa carga de gas proveniente del *Beam Dump*, que es aproximadamente $1.5 \cdot 10^{-2} \text{ mbar} \cdot \text{l} \cdot \text{s}^{-1}$ (Arranz & Brañas, 2012), para comparar la carga de gas de un acero inoxidable tras el tratamiento térmico en toda el área de HEBT es $2.7 \cdot 10^{-6} \text{ mbar} \cdot \text{l} \cdot \text{s}^{-1}$. Por lo tanto, la presión total de esta sección está dominada por esta carga de gas. Sin embargo, en el estudio de la presión parcial de aire, la carga de gas del *Beam Dump* no es visible, ya que está compuesta de Deuterio. Así que simplemente se observarán presiones muy bajas a lo largo de esta sección.

Figura 24. Modelo 3D de referencia de HEBT. (IFMIF Webpage, s.f.)



El HEBT no tiene juntas de Viton instaladas en la cavidad de vacío, por lo tanto, no se observarán fenómenos de permeación tan fuertes como en las secciones anteriores. Un posible estudio que se puede hacer en la presión parcial del aire con la simulación que se ha producido en este trabajo sería la respuesta de los valores de presión a posibles fugas en estas secciones, para asegurar el requisito de baja presión en el SRF de manera adecuada.

El *Beam dump* es donde finaliza el acelerador de partículas. Su cavidad interna consiste en un cono de cobre que va gradualmente cambiando su sección.

Figura 25. Modelo 3D del interior de HEBT

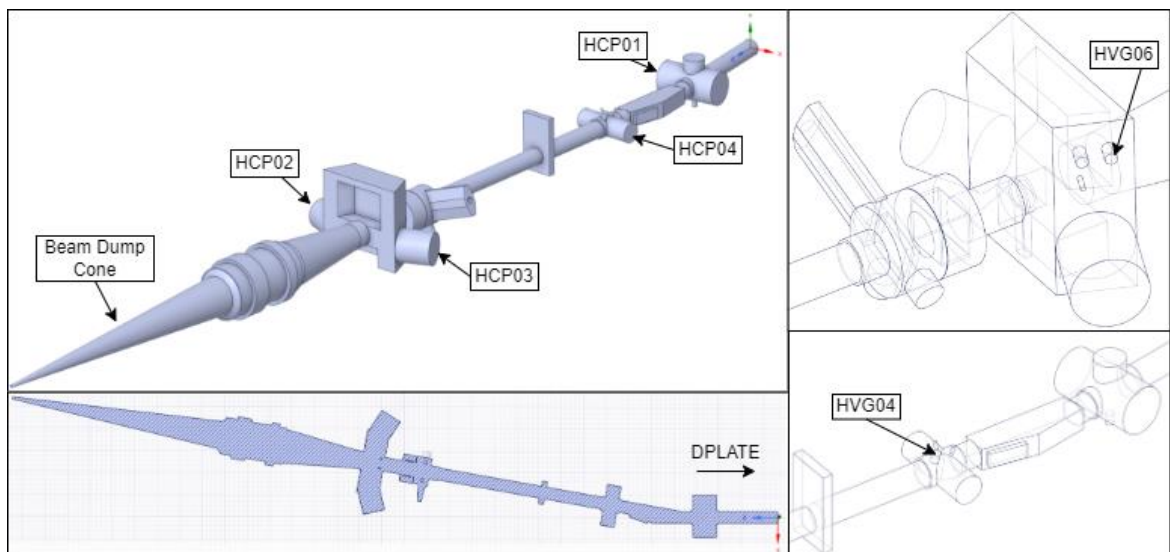


Figura 26. Modelo 3D de referencia del Beam Dump. (Kondo, 2019)

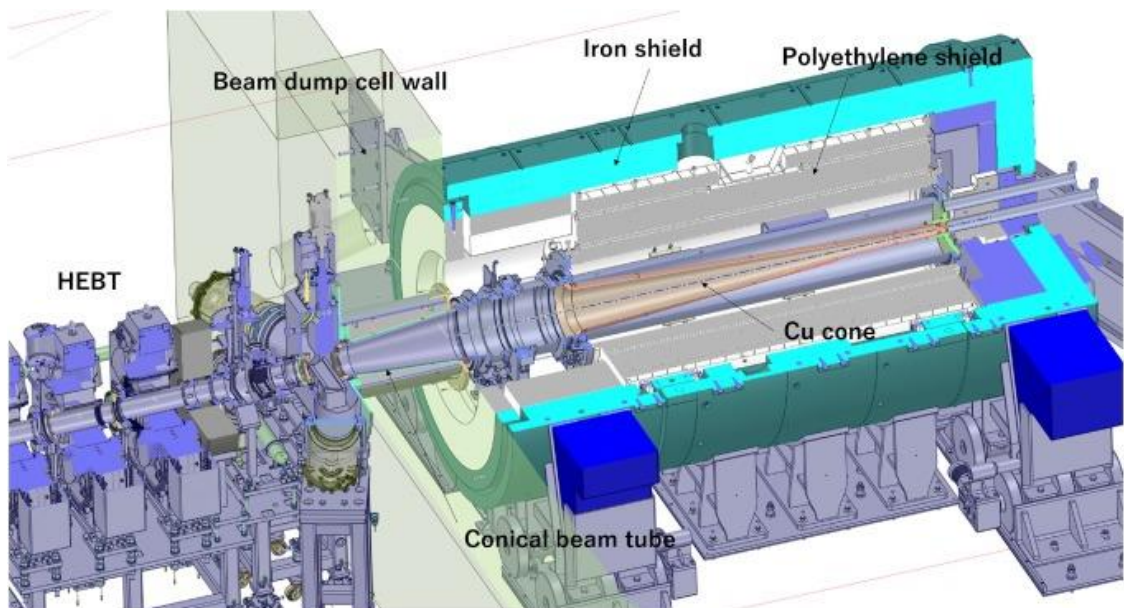


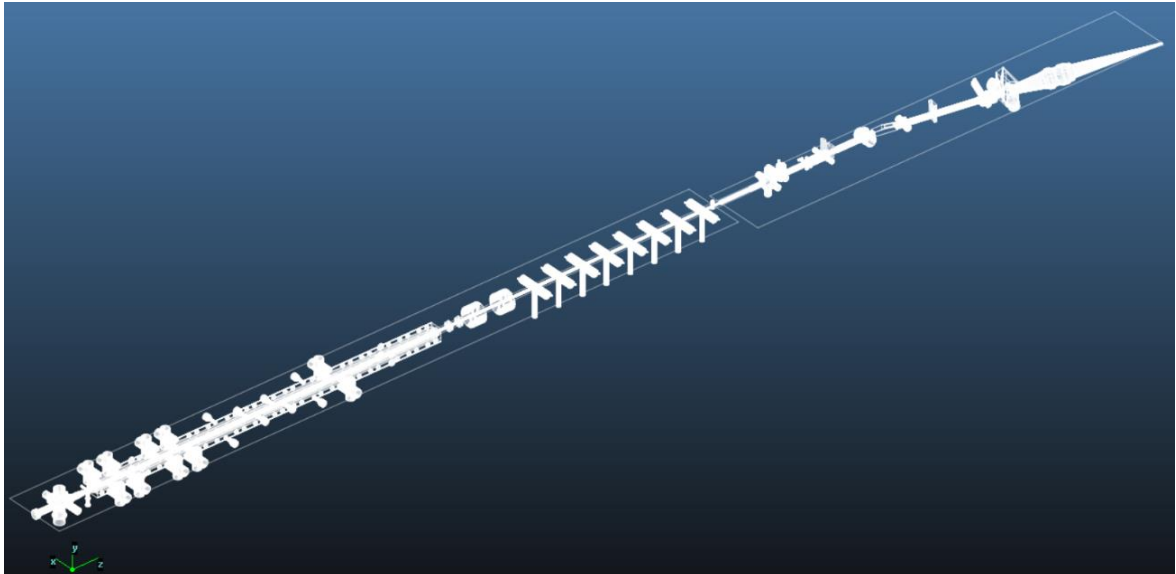
Figura 27. Imagen de la instalación del Beam Dump en Rokkasho. (IFMIF Webpage, s.f.)



5. CONDICIONES DE CONTORNO

En esta sección se presentan las distintas condiciones de contorno que se han tenido en cuenta en la simulación de flujo molecular. Estas condiciones son directamente aplicadas en el modelo 3D importado en Molflow+.

Figura 28. Modelo 3D importado en Molflow+



5.1. BOMBAS DE VACÍO

En la tabla a continuación se pueden observar las diversas bombas de vacío y sus velocidades de bombeo asignadas. Para este estudio se ha utilizado la velocidad de bombeo equivalente de Nitrógeno.

Tabla 3. Condiciones de contorno de velocidades de bombeo. Valor entre paréntesis indica velocidad de bombeo de las bombas iónicas con la sublimación de titanio activada.

Inyector	Bomba de Vacío	H2 (l/s)	N2 (l/s)	Interfaz	Tecnología
ITP01	TURBOVAC MAG W 2800	2100	2400	250CF	Turbo-molecular
ITP02	TurboVac 151	115	145	100CF	Turbo-molecular
RFQ	Bomba de Vacío	H2 (l/s)	N2 (l/s)	Interfaz	Tecnología
RCP11	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP12	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP21	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP22	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP31	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP32	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP41	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP42	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP51	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RCP52	COOLVAC 1500	2200	1600	200CF	Criogénica
RIP41	VACION PLUS 300	525	300	160CF	Iónica
RIP42	VACION PLUS 300	525	300	160CF	Iónica
RIP51	VACION PLUS 300	525	300	160CF	Iónica
RIP52	VACION PLUS 300	525	300	160CF	Iónica
MEBT	Bomba de Vacío	H2 (l/s)	N2 (l/s)	Interfaz	Tecnología
MTP01	TV 551	510	550	160CF	Turbo-molecular
MTP02	TV 551	510	550	160CF	Turbo-molecular
MTP03	TV 551	510	550	160CF	Turbo-molecular
MIP01	500T TiSP	875(1800)	500	160CF	Iónica
DPLATE	Bomba de Vacío	H2 (l/s)	N2 (l/s)	Interfaz	Tecnología
DIP01	500T TiSP	875(1800)	500	160CF	Iónica
DIP02	500T TiSP	875(1800)	500	160CF	Iónica
DIP03	150TV TiSP	260(1250)	150	100CF	Iónica
DIP04	150TV TiSP	260(1250)	150	100CF	Iónica
HEBT	Bomba de Vacío	H2 (l/s)	N2 (l/s)	Interfaz	Tecnología
HCP01	Marathon Cp12	5000	3500	250CF	Criogénica
HCP02	Marathon Cp12	5000	3500	250CF	Criogénica
HCP03	Marathon Cp12	5000	3500	250CF	Criogénica
HCP04	Marathon Cp8LP	1500	1200	160CF	Criogénica

5.2.CARGA DE GAS

Las distintas cargas de gas en este estudio son provenientes de dos fuentes. La primera es la propia desgasificación de los metales de las cavidades internas del acelerador y la segunda es la permeación de las juntas de Viton que han sido instaladas en la línea del acelerador.

5.2.1. Desgasificación de los materiales

En la tabla a continuación se presentan los distintos materiales de las secciones del acelerador y su tasa de desgasificación asignada.

Tabla 4. Condiciones de contorno de tasa de desgasificación.

Inyector	Material	Tasa de desgasificación (mbar·l·s ⁻¹)
Cono	Cobre OFE	$1.2 \cdot 10^{-12}$
Resto de la cavidad	Acero Inox 316L	$2 \cdot 10^{-12}$
RFQ	Material	Tasa de desgasificación (mbar·l·s⁻¹)
Cuerpo	Cobre OFE	$1.2 \cdot 10^{-12}$
Estaciones de bombeo	Acero Inox 316L	$2 \cdot 10^{-12}$
Acopladores	Acero con cobre electrodepositado	$4.8 \cdot 10^{-12}$
MEBT	Material	Tasa de desgasificación (mbar·l·s⁻¹)
Bunchers	Acero con cobre electrodepositado	$4.8 \cdot 10^{-12}$
Resto de la cavidad	Acero Inox 316L	$2 \cdot 10^{-12}$
SRF	Material	Tasa de desgasificación (mbar·l·s⁻¹)
Extremo inferior Acopladores	-	$2 \cdot 10^{-12}$
Cavidades Superconductoras	Niobio	0
DPLATE	Material	Tasa de desgasificación (mbar·l·s⁻¹)
Cavidad	Acero Inox 316L	$2 \cdot 10^{-12}$
HEBT	Material	Tasa de desgasificación (mbar·l·s⁻¹)
Cono BD	Cobre OFE	$1.2 \cdot 10^{-12}$
Cavidad	Acero Inox 316L	$2 \cdot 10^{-12}$

5.2.2. Permeación en juntas de Viton

Tanto en el RFQ como el inyector poseen juntas toroidales de Viton en sus cámaras de vacío. El inyector en ambas cavidades posee una junta de tamaño estándar KF16 y KF40. El RFQ posee tres juntas de distintos tamaños en cada uno de sus ocho acopladores. La tasa de flujo de gas asociada a estas juntas va a representar las mayores subidas de presión en las cámaras de vacío. A continuación, se muestra el cálculo de la tasa de flujo de las juntas usadas.

Tabla 5. Cálculo de la tasa de fuga relacionada con la permeación.

	KF40	KF16	015	0163	Coax 6 1/8 inch
Diámetro junta (mm)	42	18	15.78	154.69	165.11
Diámetro sección (mm)	5	5	1.78	2.62	7
Junta comprimida 80% (mm)	4	4	1.424	2.096	5.6
Perímetro (m)	0.1319469	0.0565487	0.0495743	0.485973	0.5187084
Área Permeada (m ²)	0.0005278	0.0002262	7.059E-05	0.0010186	0.0029048
Diferencia de Presión (bar)	1.01325	1.01325	1.01325	1.01325	1.01325
q_{perm} (25C) (mbar·l·s ⁻¹ ·mm·m ⁻² ·bar ⁻¹)	6.00E-03	6.00E-03	6.00E-03	6.00E-03	6.00E-03
Tasa de flujo(mbar·l·s ⁻¹)	6.42E-07	2.75E-07	2.41E-07	2.36E-06	2.52E-06

Al ser una analogía Óhmica podemos sumar en serie y en paralelo dichas conductancias de permeación para representar la totalidad de la tasa de flujo de gas en cada sección del acelerador.

Tabla 6. Condiciones de contorno de permeación.

	Inyector		RFQ		
	Cámara 1	Cámara 2	Acoplador 1	Acoplador 2	Acoplador 3
Juntas	3xKF40+4xKF16	2xKF40+KF16	2 x 015	2 x 0163	Coax
Configuración	Paralelo	Paralelo	Serie	Serie	Única
Tasa de flujo(mbar·l·s ⁻¹)	3.03E-06	1.56E-06	1.21E-07	1.18E-06	2.52E-06

Estos cálculos han sido contrastados por estudios recientes en la materia (Sefa & Setina, 2017), en los que se obtienen los mismos resultados de manera experimental. Posteriormente, estas tasas de flujo han sido añadidas en sus respectivas secciones del acelerador en Molflow+.

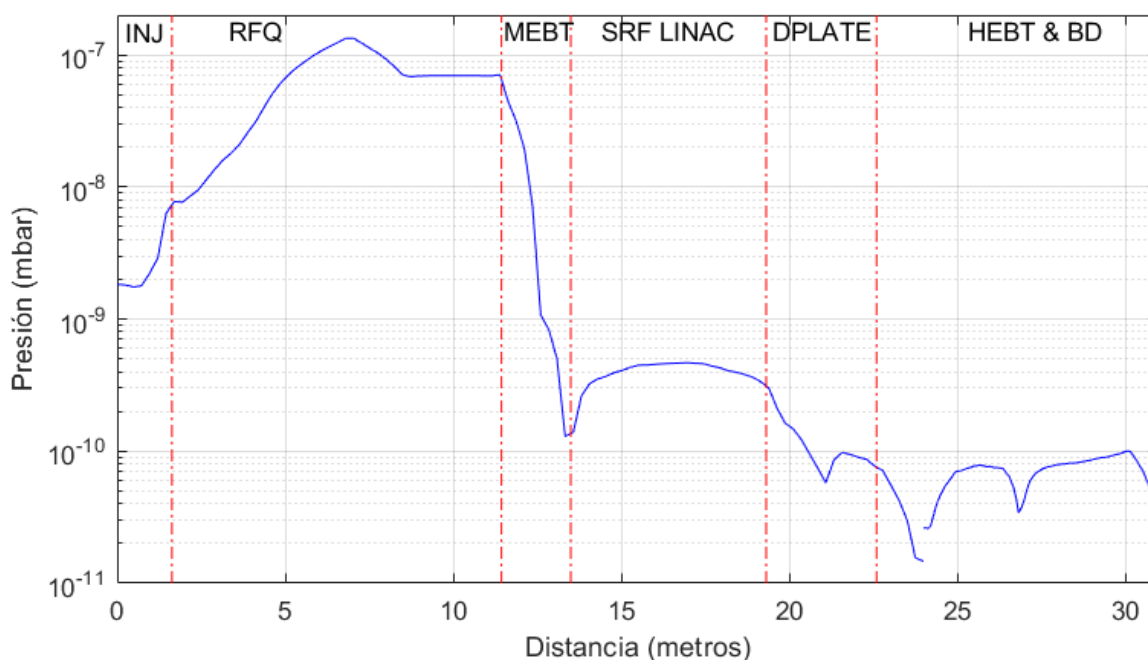
5.3.TEMPERATURA

La temperatura se ha considerado para este estudio debido a la presencia del crió-módulo. Todas las temperaturas del modelo son 293 Kelvin con excepción de las cavidades del SRF LINAC, en la que la temperatura se ha establecido como 4.45 K. En los acopladores del SRF LINAC se ha considerado el gradiente de temperaturas entre los extremos inferiores y superiores.

6. RESULTADOS

En esta sección se exponen los resultados de la simulación de flujo molecular del acelerador de partículas. Se ha usado la versión de Molflow+ 2.8.4. Los resultados han sido obtenidos tras 17 horas de simulación, con una cantidad de impactos de $9.6 \cdot 10^9$ y de partículas generadas por desorción de $5.81 \cdot 10^6$. Los resultados han sido exportados de Molflow+ y post procesados en Matlab para su correcta presentación. A continuación, se puede observar el perfil de presiones a lo largo del acelerador de partículas. Las líneas verticales representan las interfaces entre las distintas secciones.

Figura 29. Perfil de presiones simulado en el acelerador de partículas. Las líneas rojas verticales representan un cambio de sección del acelerador.



Las imágenes a continuación representan el mapa de presiones del plano medio del acelerador de partículas. Pueden verse con mayor resolución en el Anexo 1. En la primera imagen se puede observar el plano medio que va desde el inicio del acelerador de partículas hasta el final del SRF LINAC, mientras que en la segunda imagen se observa el HEBT y el *Beam Dump*.

Figura 30. Campo de presiones simulado en el acelerador de partículas desde el inyector hasta el final de SRF LINAC.

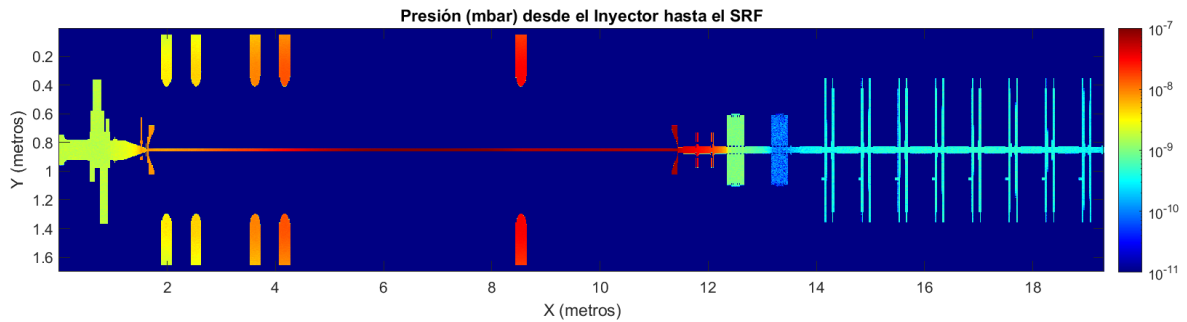
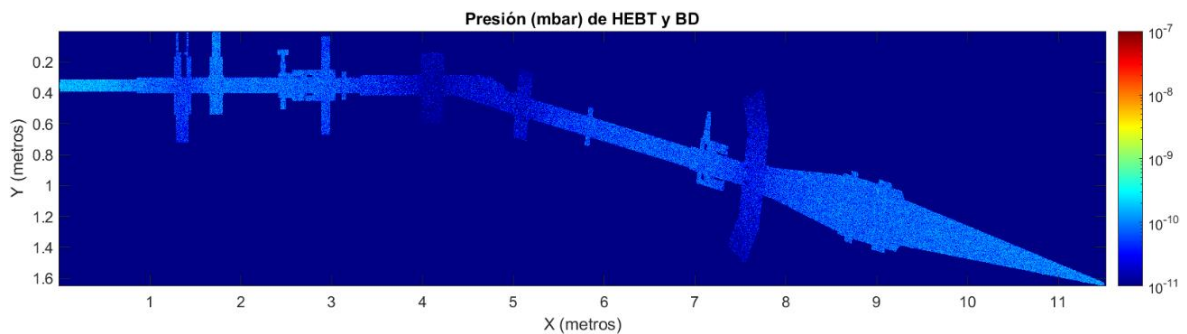
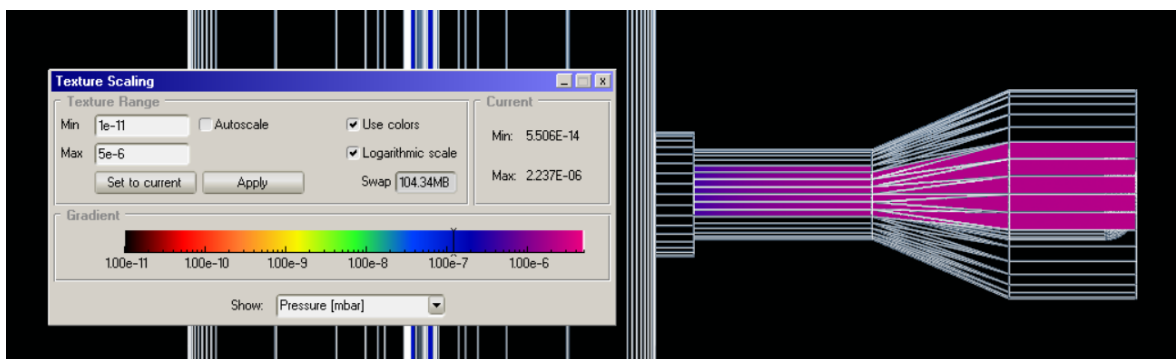


Figura 31. Campo de presiones simulado en el acelerador de partículas de HEBT y BD.



En la imagen a continuación se puede observar el valor de la presión en el interior de los acopladores, que al no estar situados en el plano medio del acelerador no se pueden apreciar en las imágenes anteriores.

Figura 32. Campo de presiones simulado en uno de los acopladores de RFQ.



7. CONCLUSIÓN

En este estudio se ha analizado el perfil de presión parcial equivalente a Nitrógeno del acelerador de partículas LIPAc, situado en Rokkasho, bajo el marco de trabajo del proyecto IFMIF/EVEDA, encargado de la validación de la ingeniería para tener una fuente de neutrones con la que simular la radiación del interior de un reactor nuclear de fusión. En este trabajo se ha analizado el contexto de la tecnología de vacío y sus métodos de cálculo. Se han presentado las distintas secciones del acelerador y los modelos generados de sus cavidades internas. Se han obtenido resultados mediante el uso del software de código abierto desarrollado por CERN que emplea una técnica de cálculo de Monte Carlo de partícula test (TPMC). Y, por último, se han analizado y discutido los resultados.

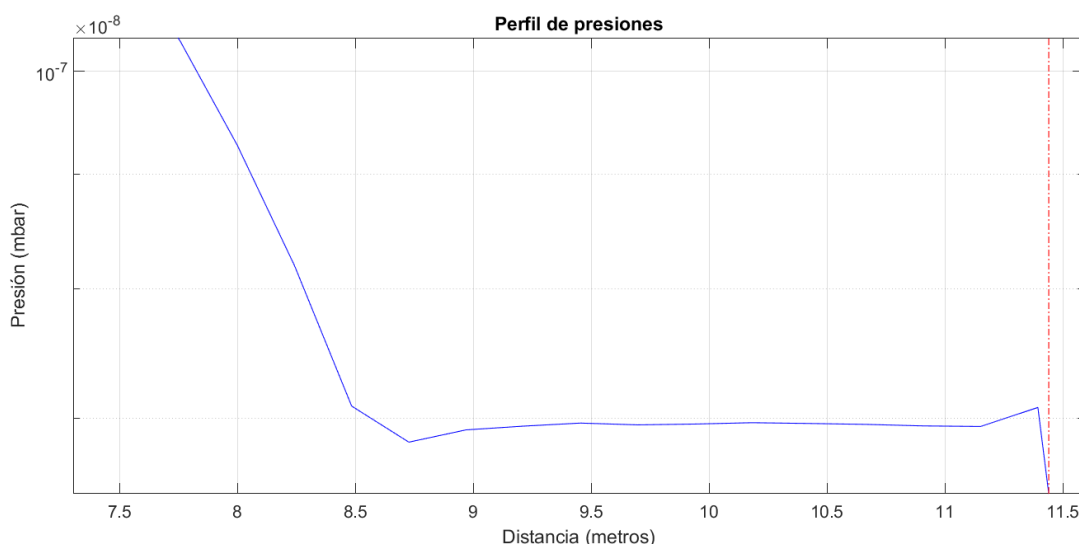
En lo concerniente a los resultados, en el perfil de presiones se pueden observar las diferentes contribuciones a los valores de presión parcial equivalente de Nitrógeno de todas las secciones del acelerador, mientras que, en los mapas de colores podemos observar el mismo valor de presiones, pero de manera más visual e intuitiva.

La primera sección es el inyector, en la que se puede ver como la alta capacidad de bombeo y la baja conductancia con el RFQ juegan un papel importante en el valor de presión de esta sección. A pesar de tener una carga de gas debido a la permeación y de que la siguiente sección es el RFQ, donde la carga de gas debido a la permeación del aire es alta, el valor de presión se ha mantenido en unos niveles relativamente bajos, superando sin dificultad el requisito del nivel de presión de 10^{-6} mbar. Se puede concluir que el efecto de la permeación en el inyector, aunque influye negativamente empeorando la calidad del vacío, no supone un riesgo para el no cumplimiento del requisito de vacío. No obstante, la presión dominante en esta sección es debido a la carga de gas de Deuterio, así que sería interesante para futuros trabajos rehacer esta simulación para la presión parcial equivalente de Hidrógeno y sumar los resultados para obtener una estimación de la presión total.

La siguiente sección es el RFQ donde podemos observar el máximo global en el perfil de presiones. Esto es debido a la intensa carga de gas debido a la permeación del aire a través de las juntas de Viton. Se puede observar como la presión en la zona inicial del RFQ se mantiene en valores más bajos debido a la presencia de la mayoría de las bombas criogénicas, después asciende hasta el máximo en la zona de los acopladores donde supera los 10^{-7} mbar. Sin

embargo, el perfil de presiones representa el eje central del acelerador. En la Figura 32, podemos observar el valor de la presión en uno de los ocho acopladores, que está fuera del plano medio del acelerador y es el lugar donde están situada la carga de gas debido a la permeación. Aquí podemos observar valores de presión mayores a 10^{-6} mbar. Hay que recordar que el requisito de trabajo del RFQ es tener valores de presión menores de $5 \cdot 10^{-7}$ mbar. Por lo tanto, podemos concluir que el efecto de la permeación afecta gravemente en la calidad del vacío del RFQ y en futuras campañas de funcionamiento del acelerador o futuros diseños, el uso de las juntas elastómeras de Viton debería de ser evitado en el interior de los acopladores. Adicionalmente, este valor de presiones en el interior del acoplador no es visible por los sensores de vacío, que están situados en las estaciones de bombeo, donde la presión es uno o dos órdenes de magnitud mayor. Después del máximo la presión vuelve a descender hasta llegar a un mínimo, donde está situada la última estación de bombeo del RFQ, tras ella el perfil de presiones es aparentemente lineal. Sin embargo, se han estudiado los resultados analíticos de una cámara de vacío con bombas periódicamente instaladas, cuyo resultado consta de perfiles de presión únicamente parabólicos. Podemos observar este perfil parabólico tras ampliar la imagen en esta sección en la imagen a continuación.

Figura 33. Ampliación del perfil de presiones simulado en el final de la sección del RFQ.



En la MEBT se puede observar una alta caída de presión debido a la baja conductancia con su sección anterior, el RFQ; la alta capacidad de bombeo de la sección y la presencia del SRF LINAC, que actúa como una bomba criogénica. Gracias a estas características las altas presiones que se han creado en el RFQ debido a los efectos de permeación no son transmitidos

al SRF LINAC, lo cual es muy importante para evitar la contaminación de las cavidades superconductoras. Podemos observar que el perfil de presiones está compuesto de dos perfiles parabólicos, estando situadas las bombas turbo-moleculares en los puntos en los que cambia el perfil. El requisito de trabajo de tener valores menores que $5 \cdot 10^{-7}$ mbar a la entrada del SRF LINAC es cumplido en esta sección.

En el SRF LINAC podemos observar un perfil parabólico que va desde la entrada a la salida de esta sección. Esto es debido a que hay un mínimo valor de desgasificación proveniente del extremo inferior de los acopladores al no estar en temperaturas criogénicas. Los valores de presión se han mantenido en unos valores lo suficientemente bajos para el correcto funcionamiento de la sección.

En el HEBT podemos observar unos valores de presión considerablemente bajos. Esto es debido a la alta capacidad de bombeo que posee esta sección para evacuar de manera efectiva la carga de gas proveniente del *Beam Dump*. Este estudio es de la presión parcial equivalente al Nitrógeno, por lo tanto, las pérdidas del haz o la carga de gas del *Beam Dump* no son visibles al ser de Deuterio. Este modelo será usado en futuros trabajos para analizar esta presión parcial y tener una visión general del perfil de presiones total del acelerador. Esta sección comienza con la DPlate, en la que podemos observar un primer valor mínimo dónde están situadas las bombas iónicas. Tras la DPlate se alcanza el valor mínimo global del perfil de presiones, en la cavidad donde están instaladas las dos primeras bombas criogénicas. En esta sección podemos observar que hay una pequeña discontinuidad en la gráfica, esto es debido a que justo después de esta cavidad el eje central del acelerador cambia su dirección en 20° y la pieza que forma la transición tras el giro no ha sido incluida en el perfil de presiones. Prosiguiendo podemos observar el siguiente mínimo en la presión donde están situadas las últimas bombas criogénicas. Y, por último, podemos observar un descenso de la presión conforme la sección transversal del cono del *Beam Dump* va disminuyendo.

Como conclusión general del estudio de la presión parcial equivalente de Nitrógeno en el acelerador de partículas, cabe destacar la importancia de la permeación de las juntas elastómeras de Viton y cómo afectan en la calidad del vacío. En una cavidad de vacío en la que se requiere un alto vacío, su uso debería evitarse generalmente. También juega un papel importante las bajas conductancias que hay entre las secciones del acelerador, haciendo que

subidas locales de presión, como en este caso en el RFQ, no se transmitan con efectos de gravedad a las demás secciones.

7.1.FUTURO TRABAJO

Para trabajos futuros se podrá utilizar el modelo para analizar la presión parcial equivalente de Hidrógeno, en la que se deberá incluir las pérdidas del haz a lo largo del acelerador y las cargas de gas provenientes del inyector y del *Beam Dump*. Con este segundo estudio, se podrá hallar el perfil de presiones total a lo largo del acelerador de partículas. Otras posibilidades es el análisis de posibles fugas en las distintas secciones del acelerador y como afectan al perfil de presiones a lo largo de la línea de vacío.

Otro trabajo futuro será la verificación del modelo usado en las simulaciones con datos experimentales. Se podrá hacer cuando se tenga el cálculo de la presión total al añadir la presión parcial de Hidrógeno. Otra opción de verificación conllevaría el uso de un analizador de gases residuales y fugas controladas de gas Nitrógeno en distintas secciones del acelerador.

Adicionalmente, los modelos generados servirán para el proyecto que va a continuación, IFMIF DONES en Granada. Consistirá en el mismo tipo de acelerador de partículas, pero con cuatro crio-módulos en serie y un objetivo, que es una cascada de Litio líquido, cuyo propósito es la producción de la radiación similar al interior de un reactor nuclear de fusión.

Referencias bibliográficas

- Ady, M. (2016). *MONTE CARLO SIMULATIONS OF ULTRA HIGH VACUUM AND SYNCHROTRON RADIATION FOR PARTICLE ACCELERATORS*. Thesis. ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE.
- Ady, M., & Kersevan, R. (2014). *MolFlow+ user guide*. CERN.
- Al-Dmour, E. (2017). Fundamentals of Vacuum Physics and Technology . *Proceedings of the 2017 CERN–Accelerator–School course on Vacuum for Particle Accelerators, Glumslöv, (Sweden)*.
- Arranz, F., & Brañas, B. (2012). *LIPAc HEBT Line and Beam Dump Engineering Design Report*.
- Chiggiato, P. (2017). Materials and properties IV Outgassing. *CERN Accelerator School on Vacuum for Particle Accelerators*.
- Ciemat, CEA Saclay. (2013). *Engineering Design Report of the IFMIF-EVEDA SRF LINAC (Internal Document)*.
- Ciemat, LIPAc EU-HT. (2014). *Engineering Design Report of the LIPAc Medium Energy Beam Transport Line (Internal Document)*.
- Clausing, P. (1932). *Ann. Phys.*, 961.
- Comunian, E. F. (2014). The RFQ for IFMIF-EVEDA project: status and high-power tests. *Congresso Nazionale SIF*. Pisa.
- Davis, D. (1960). *J. Appl. Phys*, 31, 1169.
- Day, C. (2007). *Basics and applications of cryopumps*. CERN.
- Dobrozemsky, R., & Moraw, G. (1973). Comparison Of Outgassing Rates From Stainless Steel, Aluminum, And Copper After Bakeout Under High Vacuum And Atmospheric Pressure. *Int. Conf. on Surface Phenomena*. Madrid.
- Elsley, R. (1975). Outgassing of vacuum materials-II. *Vacuum*, 25(8), Pages 347-361.
- Fusion FOr Energy. (s.f.). *Key components of the Prototype Accelerator installed*. Obtenido de <https://fusionforenergy.europa.eu/news/key-components-of-the-prototype-accelerator-installed/>
- Garton, D. (2011). *Vacuum Technology and Vacuum Design Handbook for Accelerator Technicians*.
- Gaudet, H. C. (1981). Outgassing rate of the Copper-plated beam tube for ISABELLE. *IEEE Trans. Nucl. Sci*, 28(3), p. 3295-3297.
- Gobin, R. (2010). *Injector Design Report (Internal document)*. CEA Saclay.
- IFMIF Webpage*. (s.f.). Obtenido de <https://www.ifmif.org/slider2/>
- INFN (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare). (2011). *Engineering Design Report of the Radio Frequency Quadrupole (RFQ) prototype (Internal Document)*.
- Jitschin, W. (2016). Gas Laws and Kinetic Theory of gases. En K. Jousten, *Handbook of Vacuum Technology* (pág. 29). Weinheim: WILEY-VCH.
- Jousten, K. (2016). Materials. En K. Jousten, *Handbook of Vacuum Technology* (pág. 764). Weinheim: Wiley-VCH.

- Kersevan, R. (2007). Analytical and numerical tools for vacuum systems. *CERN Accelerator School*. Platja d'Aro.
- Kondo, K. (2019). Radiation shielding requirements for the full power operation of the linear IFMIF prototype accelerator (LIPAc) at Rokkasho,. *Fusion Engineering and Design*, 146 A, 293-298.
- Leybold Webpage*. (s.f.). Obtenido de <https://www.leybold.com/es-es/knowledge/vacuum-fundamentals/fundamental-physics-of-vacuum/how-to-calculate-vacuum-conductance>
- Li, Y. (1999). Calculation of pressure profiles in the CESR hardbend and IR regions. *Proc. Int. Workshop on Performance and Improvement of e-e+ Collider Particle Factories*. Tsukuba.
- Nuvolone, R. (1977). Technology of low-pressure systems—establishment of optimum conditions to obtain low degassing rates on 316 L stainless steel by heat treatments. *Journal of Vacuum Science and Technology* (14), 1210–1212.
- O'Hanlon, J. F. (2003). *A User's Guide to Vacuum Technology*. John Wiley & Sons.
- Orsini, F., & Bazin, N. (2013). PROGRESS ON THE SRF LINAC DEVELOPMENTS FOR THE IFMIF- LIPAC PROJECT. *International Particle Accelerator Conference*. Shanghai.
- Pfeifferr Vacuum*. (s.f.). Obtenido de <https://www.pfeiffer-vacuum.com/en/know-how/introduction-to-vacuum-technology/fundamentals/types-of-flow/>
- Ratnakala, K. C. (s.f.). Outgassing rate measurement of copper plated stainless steel. *Journal of Physics: Conference Series*, 114(1).
- Riihimaki, A. (2019). *Master Thesis - Outgassing Studies of Some Particle Accelerators*.
- Sefa, M., & Setina, J. (2017). Comparison of permeation of atmospheric gases through Viton O-ring gaskets for different initial conditions. *Journal of Vacuum Science & Technology*, 35(4).
- Sgobba, S. (2006). Materials for high vacuum technology: an overview. *CERN Accelerator school*. Platja d'Aro.
- Sonderegger, K. (2006). *CERN Accelerator School*. Obtenido de <https://cas.web.cern.ch/sites/default/files/lectures/platjadaro-2006/sonderegger.pdf>
- Sullivan, M. K. (1993). *A Method for Calculating Pressure Profiles in Vacuum Pipes*.
- Vandoni, G. (2012). *Cern Indico - The basis of Vacuum*. Obtenido de <https://indico.cern.ch/event/264020/attachments/467855/648232/CERN-Basic-Vacuum-2012-lecture.pdf>

Anexo A. Resultados Simulación

