

## Se anunciaron los ganadores de la convocatoria abierta del OIEA sobre materiales para la tecnología de fusión



En octubre de 2018, un equipo formado por cuatro científicos del Instituto Max Planck de Física del Plasma y del Centro Max Planck de Computación y Datos en Garching (Alemania) fue elegido ganador de la convocatoria abierta del OIEA sobre visualización, análisis y simulación de materiales con que construir reactores de fusión.

La fusión nuclear —la reacción nuclear que alimenta al Sol— podría, con el tiempo, proporcionar una cantidad ilimitada de energía limpia y asequible sin emisiones de carbono utilizando isótopos del hidrógeno obtenidos a partir de agua y litio. No obstante, aprovechar la energía de fusión de una forma que sea comercialmente viable entraña importantes desafíos tecnológicos, como proteger las paredes y otros componentes de la vasija del reactor frente a temperaturas extremadamente elevadas y las partículas de alta energía.

En total, 14 equipos de investigadores de 10 países presentaron análisis innovadores de simulaciones del daño a las paredes del reactor, que puede ser ocasionado por los neutrones de alta energía emitidos por una reacción termonuclear. Los criterios para evaluar las simulaciones fueron el beneficio científico, la novedad del propio algoritmo o de su uso en la ciencia de los materiales y la utilidad de la visualización y su repercusión prevista.

“Algunos de los trabajos presentados eran ciertamente extraordinarios; fue casi como organizar un torneo de fútbol local y que al final se presentara una selección ganadora de la Copa del Mundo”, explica

Sergei Dudarev, Director del Programa de Materiales de la Autoridad de Energía Atómica del Reino Unido y uno de los artífices del concurso.

Los miembros del equipo ganador —Udo von Toussaint, Javier Domínguez, Markus Rampp y Michele Compostella— aplicaron por primera vez una técnica que ya existe en el aprendizaje automático y la ciencia de los datos con la finalidad de identificar y clasificar las estructuras de defectos en los cristales dañados de la simulación.

“Esta solución abre las puertas a una forma nueva y productiva de categorizar automáticamente las estructuras de defectos y, por consiguiente, deducir, de forma cuantitativa, los factores y diferencias comunes entre los materiales”, explica Arjan Koning, Jefe de la Sección de Datos Nucleares del OIEA. “En el contexto del estudio de materiales para la cámara de vacío de un reactor de fusión como el ITER, proporciona una forma efectiva de medir, clasificar y visualizar el daño que los neutrones de alta energía emitidos por un reactor de fusión ocasionan a un material determinado. La búsqueda de un material apropiado con el que construir la primera pared de la vasija del reactor es un paso crucial para establecer una central de fusión viable”.

El enfoque presenta varias ventajas respecto a los métodos actuales, entre las que cabe destacar las siguientes:

- permite identificar y clasificar automáticamente tipos de defectos nuevos o imprevistos;

- se basa en una combinación de algoritmos claros y potentes que proceden de la ciencia de datos;
- puede distinguir entre los defectos verdaderos y las pequeñas distorsiones temporales causadas por el movimiento térmico de los átomos, y
- es lo suficientemente rápido para ser aplicado durante la evolución del daño simulado que sufre el cristal a lo largo del tiempo a fin de entender mejor cómo se forman, se combinan y, en algunos casos, llegan a desaparecer los defectos a medida que los átomos recuperan sus posiciones iniciales en la red cristalina.

Hasta ahora, la identificación y la clasificación de los defectos eran tareas que exigían una gran cantidad de trabajo y de tiempo y, por tanto, solían realizarse únicamente al final de las simulaciones moleculares. Este nuevo algoritmo puede aplicarse durante la simulación del defecto del cristal en cada etapa, lo que puede arrojar luz sobre cuándo se producen y desaparecen determinados tipos de defectos. Esto da mucha más información sobre el sistema, apenas accesible hasta ahora, y permite distinguir entre los tipos de defecto que probablemente permanecerán durante largo tiempo y los que no.

“Esperamos que nuestro enfoque acelere considerablemente el análisis de las simulaciones de dinámica molecular”, declara el Sr. von Toussaint. “La potencia informática está aumentando y las capacidades manuales son limitadas. Toda tarea que se pueda asignar a una computadora en lugar de a una persona acelera el desarrollo científico”.

Según explicó el Sr. von Toussaint, los ganadores pondrán su programa a disposición de cualquier parte interesada de forma gratuita y en código abierto. Otras instituciones y expertos —principalmente, científicos de materiales— podrían utilizarlo para analizar los resultados de sus simulaciones, en particular las relacionadas con el daño por radiación en sólidos.

“El OIEA planea aprovechar el éxito de este concurso para desarrollar una

aplicación de computación distribuida que puedan descargar voluntarios para llevar a cabo simulaciones del daño causado en los materiales destinados a actividades relacionadas con la fusión”,

informa el Sr. Koning. Este proyecto podría aumentar considerablemente la velocidad a la que se pueden examinar los nuevos materiales candidatos para un reactor de fusión y mejorará aún más la

comprensión que tienen los científicos del comportamiento de estos materiales en esas condiciones extremas.

— *Christian Hill y Aleksandra Peeva*

## El curso de aprendizaje electrónico del OIEA sobre activación neutrónica ayuda a científicos de 40 países



Tanto si se trata de resolver crímenes históricos como de determinar la causa de la desaparición de una playa en Jamaica o la calidad del aire en tu gimnasio, la activación neutrónica es un método consolidado para averiguar la composición y el origen de los materiales que, gracias a una herramienta de aprendizaje electrónico desarrollada por el OIEA, investigadores de 40 países pueden ahora aplicar.

La activación neutrónica es un tipo común de análisis que se realiza en cerca de la mitad de los 238 reactores de investigación en funcionamiento en todo el mundo, así como en algunas fuentes de neutrones basadas en aceleradores. La técnica, de gran sensibilidad, puede revelar la concentración atómica de un átomo en concreto entre un millón, sin alterar ni destruir el material. Esta precisión ofrece ventajas respecto a otros métodos analíticos y resulta especialmente útil para realizar análisis volumétricos y estudiar materiales únicos que deben preservarse.

La técnica consiste en irradiar átomos estables con neutrones y, posteriormente, medir el decaimiento, o la radiación, de los elementos de la muestra. Los científicos emplean esta técnica para determinar la firma química de plásticos, metales, vidrio, tierra y partículas de aire, entre otros.

“Hoy los principales campos de aplicación de este método son las ciencias ambientales, la arqueología,

el patrimonio cultural e incluso la criminalística”, explica Nuno Pessoa Barradas, Especialista en Reactores de Investigación del OIEA. “Sin embargo, los investigadores en estos campos no tienen necesariamente formación en física nuclear, por lo que tal vez no sepan sacar el máximo provecho a la técnica”.

### Crear conocimientos

A fin de subsanar esa falta de conocimientos y atender a la demanda creciente, el OIEA, a través del proyecto de cooperación técnica titulado “Creación de redes para programas de enseñanza, capacitación y divulgación en la esfera nuclear sobre ciencia y tecnología nucleares”, diseñó un curso de aprendizaje electrónico sobre análisis por activación neutrónica. El instrumento, que se puso en marcha a finales de 2017, responde a las necesidades tanto de principiantes como de profesionales especializados con un nivel avanzado.

En octubre de 2018, el curso de capacitación en línea logró un hito: en menos de un año se habían inscrito participantes de 40 de los 52 países con reactores de investigación en funcionamiento. Varios institutos usan este instrumento para formar a su personal y al alumnado, incluido a nivel universitario.

“Tenemos frecuentes cambios en la plantilla y la capacitación de los nuevos trabajadores requiere bastante

tiempo, especialmente en un campo tan especializado”, explica Katalin Gméling, del Centro de Investigaciones Energéticas de Hungría. “El material de aprendizaje electrónico ofrece un gran conjunto de información para formar a trabajadores recién llegados y actualizar los conocimientos del personal superior”.

La activación neutrónica, descubierta en 1935 por el químico de origen húngaro George de Hevesy y la física germanodanesa Hilde Levi, resultó ser en un principio un instrumento útil para medir la masa de las tierras raras.

En las últimas décadas, se han encontrado otros usos para este método, como proporcionar pruebas adicionales para resolver crímenes históricos. En 2013 se aplicó la activación neutrónica a un pelo de bigote para refutar la teoría según la cual el noble danés Tycho Brahe había muerto envenenado con mercurio. Sus valiosas notas fueron heredadas por su ayudante —y principal sospechoso—, el matemático y astrónomo Johannes Kepler, que enunció las leyes del movimiento planetario.

Más recientemente, después de que de la playa de Coral Springs, en Jamaica, se robara una cantidad de arena que podría llenar 500 camiones, las autoridades locales se unieron al Centro Internacional de Ciencias Ambientales y Nucleares para aplicar la activación neutrónica a fin de comprobar el origen de la arena de las playas en las que se sospechaba había acabado la arena sustraída, consiguiendo así pruebas adicionales para el caso.

Hoy la activación neutrónica también se usa en el estudio y el análisis de la calidad del aire en espacios cerrados (por ejemplo, en escuelas y centros deportivos) para ayudar a determinar la cantidad y el origen de los contaminantes presentes en el aire.

En septiembre de 2018, el instrumento de aprendizaje electrónico sobre análisis por activación neutrónica fue sometido a