

Dinámica molecular en un cristal binario

Luis Pizarro Pablo Bellino

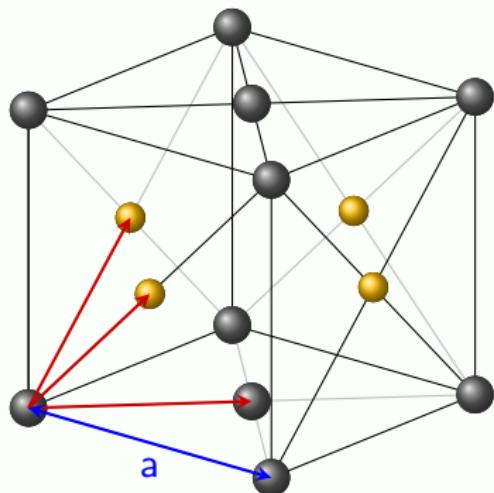
{lpizarro,pbellino}@cnea.gov.ar

Introducción a la Simulación Computacional
Universidad Nacional de San Martín - Centro Atómico
Constituyentes
Diciembre de 2015

Objetivos

- Presentación de los resultados obtenidos durante la puesta en marcha de la CNA U-II (a potencia cero)

Descripción del problema



- Átomo 1
- Átomo 2

- Interacciones de a pares a través de un potencial de Lenard-Jones

Reglas de combinación

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (\text{Berthelot})$$

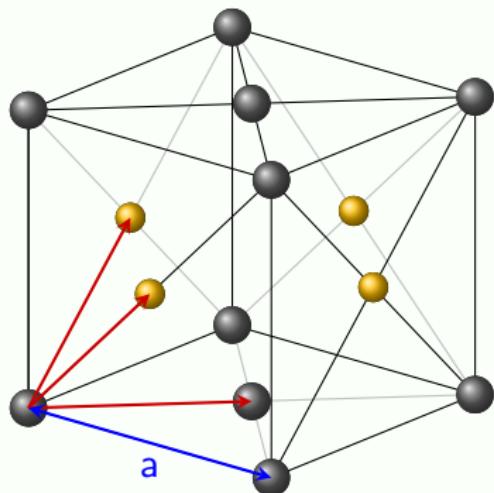
$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (\text{Lorentz})$$

- Radio de corte:

$$r_{ij}^c = 2.5\sigma_{ij}$$

- Ensamble (N, V, T)
- Se calcula el parámetro de red a adecuado

Descripción del problema



- Átomo 1
- Átomo 2

- Interacciones de a pares a través de un potencial de Lenard-Jones

Reglas de combinación

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (\text{Berthelot})$$

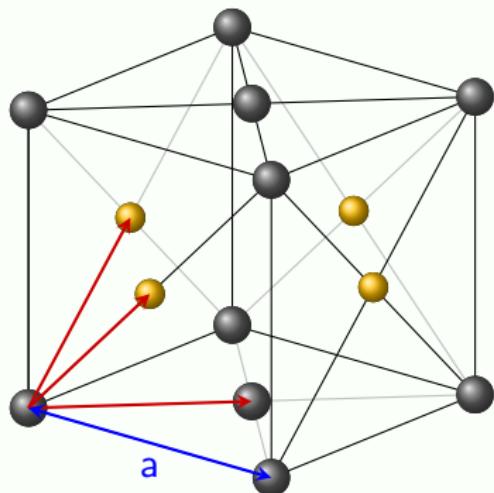
$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (\text{Lorentz})$$

- Radio de corte:

$$r_{ij}^c = 2.5\sigma_{ij}$$

- Ensamble (N, V, T)
- Se calcula el parámetro de red a adecuado

Descripción del problema



- Átomo 1
- Átomo 2

- Interacciones de a pares a través de un potencial de Lenard-Jones

Reglas de combinación

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (\text{Berthelot})$$

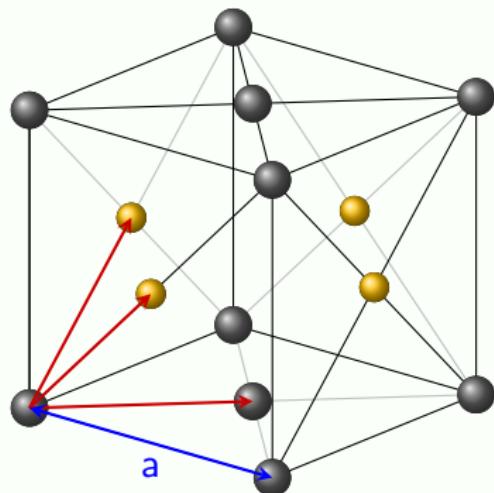
$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (\text{Lorentz})$$

- Radio de corte:

$$r_{ij}^c = 2.5\sigma_{ij}$$

- Ensamble (N, V, T)
- Se calcula el parámetro de red a adecuado

Descripción del problema



- Átomo 1
- Átomo 2

- Interacciones de a pares a través de un potencial de Lenard-Jones

Reglas de combinación

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (\text{Berthelot})$$

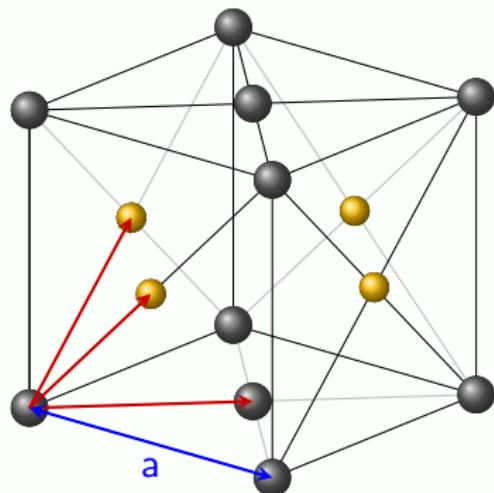
$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (\text{Lorentz})$$

- Radio de corte:

$$r_{ij}^c = 2.5\sigma_{ij}$$

- Ensamble (N, V, T)
- Se calcula el parámetro de red a adecuado

Descripción del problema



- Átomo 1
- Átomo 2

- Interacciones de a pares a través de un potencial de Lenard-Jones

Reglas de combinación

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (\text{Berthelot})$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (\text{Lorentz})$$

- Radio de corte:

$$r_{ij}^c = 2.5\sigma_{ij}$$

- Ensamble (N, V, T)
- Se calcula el parámetro de red a adecuado

Parámetros utilizados

- La configuración inicial siempre fue un cristal FCC
- Se buscó que el cristal mantuviera la estructura

Parámetros de las partículas

Partícula	ϵ^*	σ^*	m^*
1	1.0	1.0	1.0
2	0.8	0.9	0.6

- Las magnitudes reducidas están normalizadas con los parámetros de L-J de la partícula 1
- Estructura cristalina muy dependiente de los valores de σ

Parámetros utilizados

- La configuración inicial siempre fue un cristal FCC
- Se buscó que el cristal mantuviera la estructura

Parámetros de las partículas

Partícula	ϵ^*	σ^*	m^*
1	1.0	1.0	1.0
2	0.8	0.9	0.6

- Las magnitudes reducidas están normalizadas con los parámetros de L-J de la partícula 1
- Estructura cristalina muy dependiente de los valores de σ

Parámetros utilizados

- La configuración inicial siempre fue un cristal FCC
- Se buscó que el cristal mantuviera la estructura

Parámetros de las partículas

Partícula	ϵ^*	σ^*	m^*
1	1.0	1.0	1.0
2	0.8	0.9	0.6

- Las magnitudes reducidas están normalizadas con los parámetros de L-J de la partícula 1
- Estructura cristalina muy dependiente de los valores de σ

Parámetros utilizados

- La configuración inicial siempre fue un cristal FCC
- Se buscó que el cristal mantuviera la estructura

Parámetros de las partículas

Partícula	ϵ^*	σ^*	m^*
1	1.0	1.0	1.0
2	0.8	0.9	0.6

- Las magnitudes reducidas están normalizadas con los parámetros de L-J de la partícula 1
- Estructura cristalina muy dependiente de los valores de σ

Parámetros utilizados

- La configuración inicial siempre fue un cristal FCC
- Se buscó que el cristal mantuviera la estructura

Parámetros de las partículas

Partícula	ϵ^*	σ^*	m^*
1	1.0	1.0	1.0
2	0.8	0.9	0.6

- Las magnitudes reducidas están normalizadas con los parámetros de L-J de la partícula 1
- Estructura cristalina muy dependiente de los valores de σ

Determinación del parámetro de red

- Se busca encontrar el valor de a que minimice la energía libre de Helmholtz

$$F = U - TS$$

- Se simula a $T = 0$ variando el parámetro de red hasta encontrar un mínimo en U
- Se asume que el valor encontrado será válido para $T \neq 0$.

Determinación del parámetro de red

- Se busca encontrar el valor de a que minimice la energía libre de Helmholtz

$$F = U - TS$$

- Se simula a $T = 0$ variando el parámetro de red hasta encontrar un mínimo en U
- Se asume que el valor encontrado será válido para $T \neq 0$.

Determinación del parámetro de red

- Se busca encontrar el valor de a que minimice la energía libre de Helmholtz

$$F = U - TS$$

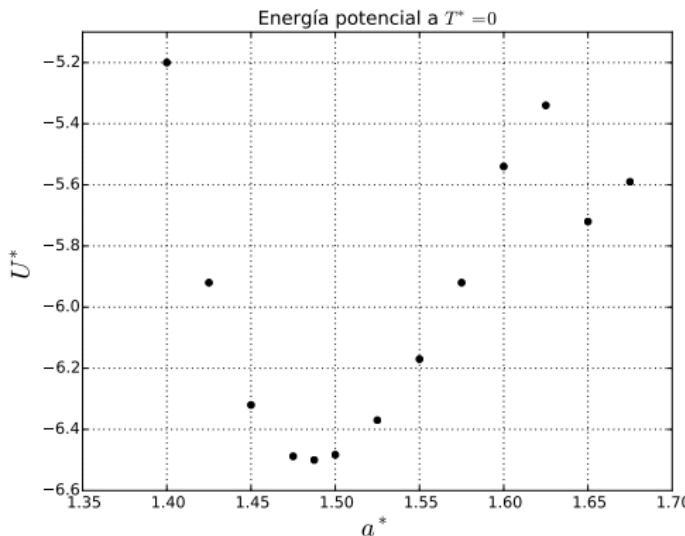
- Se simula a $T = 0$ variando el parámetro de red hasta encontrar un mínimo en U
- Se asume que el valor encontrado será válido para $T \neq 0$.

Determinación del parámetro de red

- Se busca encontrar el valor de a que minimice la energía libre de Helmholtz

$$F = U - TS$$

- Se simula a $T = 0$ variando el parámetro de red hasta encontrar un mínimo en U
- Se asume que el valor encontrado será válido para $T \neq 0$.

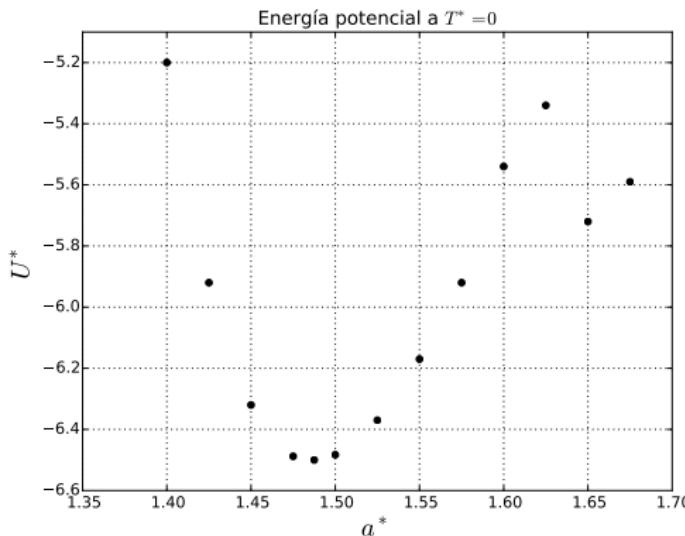


Determinación del parámetro de red

- Se busca encontrar el valor de a que minimice la energía libre de Helmholtz

$$F = U - TS$$

- Se simula a $T = 0$ variando el parámetro de red hasta encontrar un mínimo en U
- Se asume que el valor encontrado será válido para $T \neq 0$.

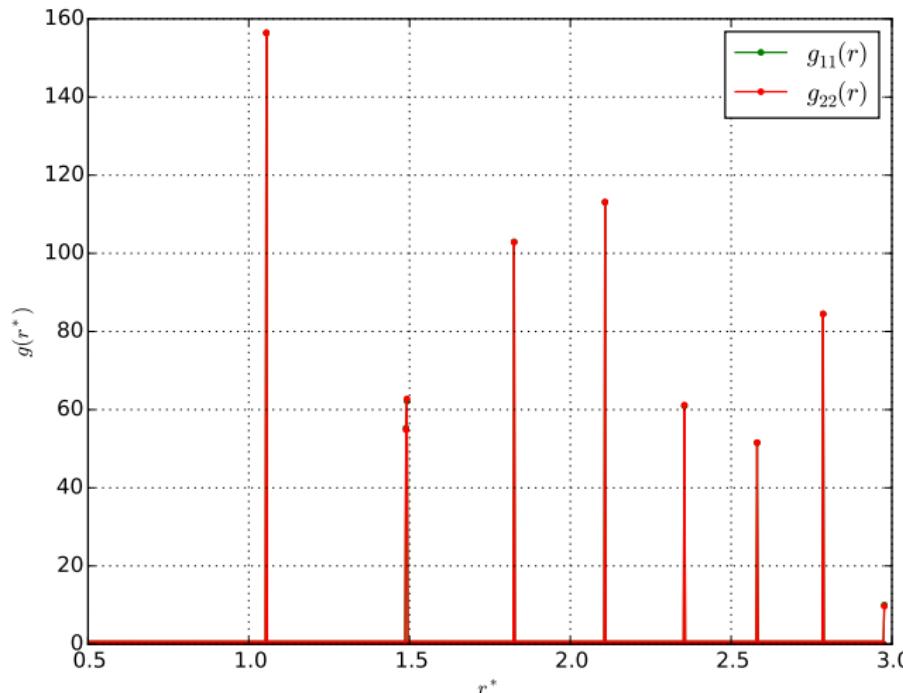


Parámetro de red

$$a^* = 1.49$$

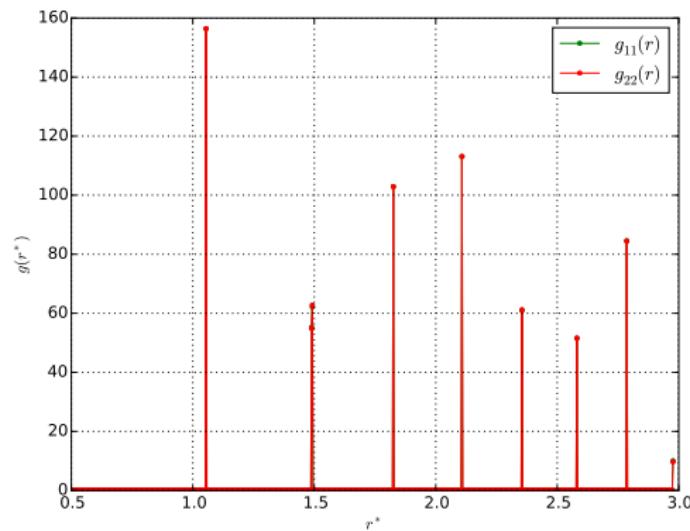
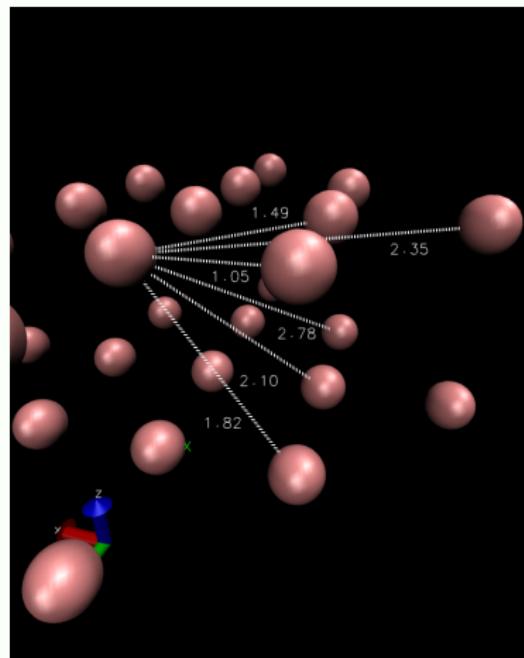
Cristal amorfo

Correlación entre pares con $T^* = 0$

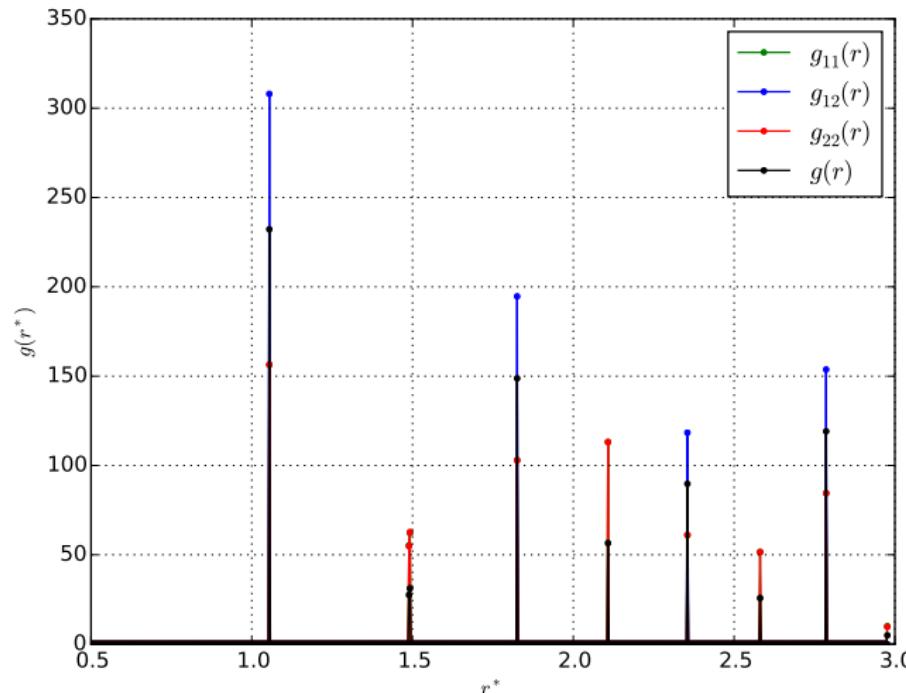


Correlación entre pares con $T^* = 0$

Distancias medidas sólo entre las partículas 1



Correlación entre pares con $T^* = 0$



Correlación entre pares con $T^* \neq 0$

Trayectorias del cristal FCC a $T^* = 0.2$

Ubicación de los detectores neutrónicos

- Dos detectores de los canales de arranque de la central (BF_3)
- Una cámara de ionización (de tres) especialmente instrumentada para estos ensayos

Calibración del Banco B y del boro

Señales de los detectores

Reactividad estimada (relativa al
valor total del paso)

Insercción del Banco B

Reactividad de la porción introducida del Banco B ($\Delta\$$)

- Se tiene en cuenta el efecto el tiempo de inserción del Banco B mientras se produce el filtrado del moderador
- Se extrapola linealmente a la evolución de la reactividad
- Se calcula el coeficiente de reactividad del Banco B:

$$\Gamma_s(s) = \frac{\Delta\$}{\Delta s}$$

Reactividad de barras individuales (caliente)

Experiencias de caída de barras individuales

Las reactividades $\Delta\$$ para cada detector se expresan de forma relativa al promedio $\langle \Delta\$ \rangle$ entre los tres detectores.

Conclusiones

- **Mediciones y determinaciones independientes de parámetros físicos durante la puesta en marcha de la CNA U-II**
- Implementación del Multi Reactímetro Digital con tres detectores de forma simultánea (cámara de ionización y canales de arranque) para la estimación de reactividad en los distintos ensayos

Conclusiones

- Mediciones y determinaciones independientes de parámetros físicos durante la puesta en marcha de la CNA U-II
- Implementación del Multi Reactímetro Digital con tres detectores de forma simultánea (cámara de ionización y canales de arranque) para la estimación de reactividad en los distintos ensayos

Muchas gracias.