

# Difusión en materia nuclear - Nuclear matter diffusion

Franco Tavella\* and Lucas Longo\*\*

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires,  
Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428 Buenos Aires, Argentina.*

(Dated: 20 de septiembre de 2017)

ABSTRACT

## I. INTRODUCCIÓN

Potenciales y fuerzas discretizadas que se usan en la simulación, figuras 1 y 2. Podemos observar comportamientos repulsivos para todos los casos.

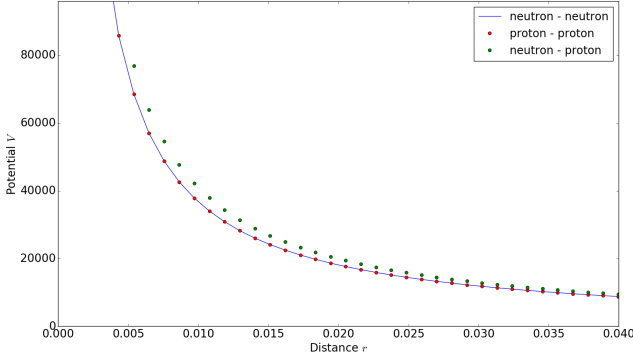


Figura 1: Potenciales discretizados. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

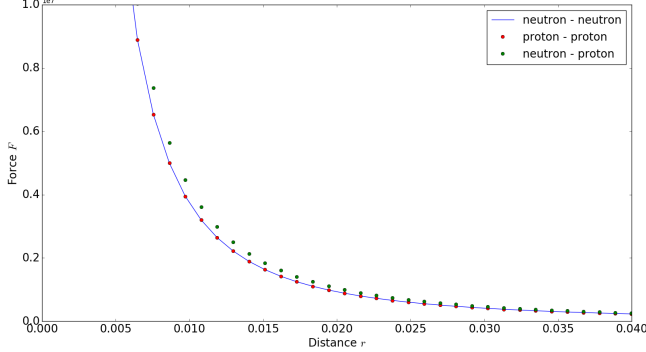


Figura 2: Fuerzas discretizadas. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

## II. DIFUSIÓN

La ecuación de difusión describe el comportamiento colectivo de partículas microscópicas que resulta de su movimiento aleatorio. Se puede arribar a ella a partir

de la ecuación de continuidad junto con la primer ley fenomenológica de Fick.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (1)$$

$$\vec{j} = -D(\phi, r) \nabla \phi(r, t) \quad (2)$$

en donde  $\phi(r, t)$  es la densidad de la sustancia que difunde y  $D(\phi, r)$  el coeficiente de difusión colectivo. Para un caso isótropo y homogéneo pensamos a  $D(\phi, r) = D$  como una constante y obtenemos una ecuación análoga a la del calor

$$\frac{\partial \phi(r, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \phi(r, t) \quad (3)$$

## III. DISCRETIZACIÓN

Para la obtención del coeficiente de difusión  $D$  debemos resolver la ecuación 3. Para ello debemos medir de las simulaciones la cantidad  $\phi(r, t)$ . Realizaremos una discretización espacial y otra temporal. Utilizaremos los subíndices  $i, j$  y  $k$  para indicar las subceldas espaciales correspondientes a las direcciones  $x, y$  y  $z$  respectivamente. El grillado será isótropo y homogéneo. Temporalmente utilizaremos el subíndice  $n$ . Entonces tendremos las siguientes cantidades si dividimos cada dirección en  $m$  espacios y la caja de simulación posee longitud  $L$

$$\phi(r_{i,j,k}, t_n) = \frac{m^3}{L^3} N_{i,j,k} \quad (4)$$

en donde  $r_{i,j,k}$  representa la posición de la celda i-j-k-ésima y  $N_{i,j,k}$  el número de partículas en ésta.

\* tavellafran@gmail.com

\*\* lucaslongo52@gmail.com

#### IV. MEAN SQUARE DISPLACEMENT

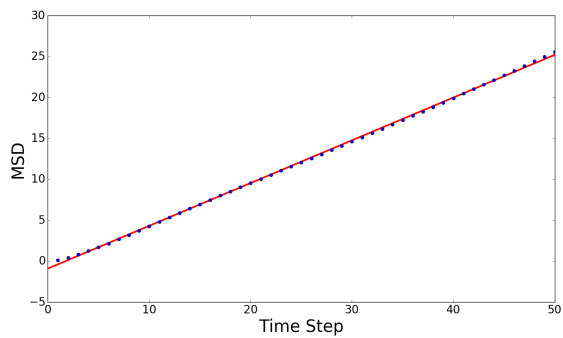


Figura 3: MSD para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periódicas de contorno en función del tiempo. El valor de  $D$  obtenido es de  $0.087 \pm 0.001$  en unidades de  $lj$ .

#### V. DETALLES TÉCNICOS

Las posiciones de las partículas son obtenidas a través del comando `dump` en LAMMPS. En la documentación[1] sobre este comando se hace una aclaración sobre las condiciones periódicas de contorno

*Because periodic boundary conditions are enforced only on timesteps when neighbor lists are rebuilt, the coordinates of an atom written to a dump file may be slightly outside the simulation box. Re-neighbor timesteps will not typically coincide with the timesteps dump snapshots are written. See the `dump_modify pbc` command if you wish to force coordinates to be strictly inside the simulation box.*

---

[1] Sandia National Laboratories, <http://lammps.sandia.gov/doc/dump.html>, Consultado 02/09/17