

# 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: 23 de septiembre de 2017)

ABSTRACT

## I. INTRODUCCIÓN

Potenciales y fuerzas discretizadas que se usan en la simulación, figuras 1 y 3. Podemos observar comportamientos repulsivos para todos los casos.

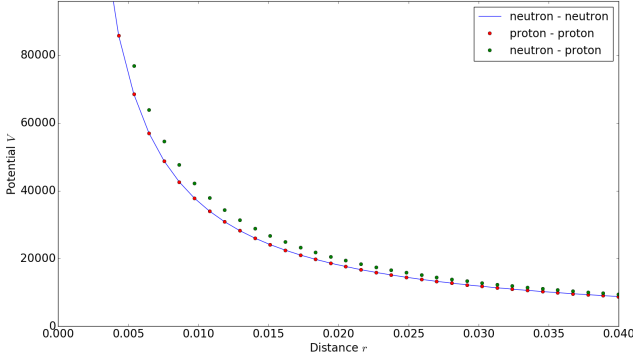


Figura 1: Potenciales discretizados. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

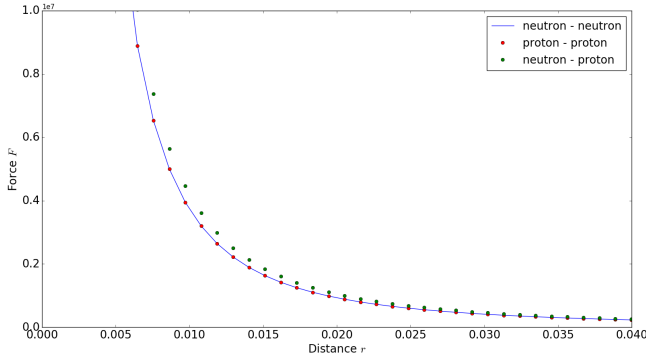


Figura 2: Fuerzas discretizadas. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

## 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.

## IV. MEAN SQUARE DISPLACEMENT

La relación de Einstein para difusión establece una relación entre las posiciones de las moléculas y el coeficiente de difusión  $D$ .

$$2tD = \frac{1}{3} \langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(t_0)]^2 \rangle \quad (5)$$

Este resultado es aplicable cuando el tiempo  $t$  es largo en comparación al tiempo promedio entre colisiones. Es posible entonces obtener un valor para  $D$ :

\* tavellafran@gmail.com

\*\* lucaslongo52@gmail.com

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(t_0)]^2 \rangle}{6t} \quad (6)$$

En las ecuaciones 5 y 6 el valor  $\langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(t_0)]^2 \rangle$  es el desplazamiento cuadrático medio  $MSD(t)$  del sistema a tiempo  $t$ . El símbolo  $\langle \rangle$  debe entenderse como un promedio sobre el número de partículas y sobre orígenes de tiempo  $t_0$ .

EL coeficiente de difusión  $D$  puede también ser evaluado de otras maneras. La relación de Einstein puede reescribirse como: (Ver Haile pág 302)

$$D = \frac{1}{6} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \langle [\vec{r}(t) - \vec{r}(t_0)]^2 \rangle \quad (7)$$

La ecuación 7 muestra que  $D$  es proporcional a la pendiente del desplazamiento cuadrático medio a tiempos largos. La forma 7 se prefiere a la forma 6 en particular para bajas densidades.

El desplazamiento cuadrático medio del sistema de  $N$  partículas puede aproximarse como:

$$MSD(t) = \frac{1}{M \cdot N} \sum_{t_0}^M \sum_i^N [\vec{r}_i(t_0 + t) - \vec{r}_i(t_0)]^2 \quad (8)$$

Donde  $N$  es el número de partículas y  $M$  es el número de orígenes de tiempo disponibles. Para un total de  $L$  pasos temporales separados por  $\Delta t$ ,  $M$  depende del tiempo  $t$  de la medición mediante:  $M = L - \frac{t}{\Delta t}$ .

El algoritmo que hemos utilizado para obtener  $MSD(t)$  es el siguiente (ver Haile pág 284):

- 1) Elegir un valor para el tiempo  $t$
  - 2) Loop sobre orígenes de tiempos  $t_j$ ,  $\{j = 1, \dots, M(t)\}$
  - 3) Para cada origen de tiempo  $t_o$ , loop sobre  $i$ ,  $\{i = 1, \dots, N\}$  las  $N$  partículas, para leer  $\vec{r}_i(t_j + t)$  y  $\vec{r}_i(t)$
  - 4) Acumular  $[\vec{r}_i(t_j + t) - \vec{r}_i(t_j)]^2$
  - 5) Volver al paso (1) hasta barrer todos los  $t$
- nos permite hallar el coeficiente de difusión dado que:

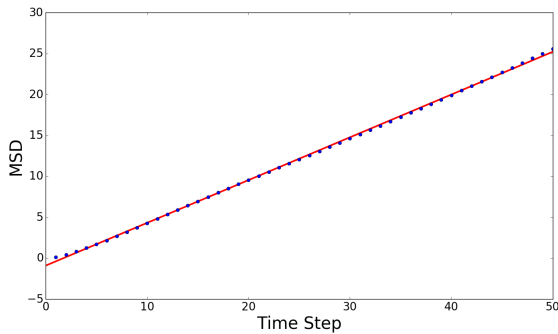


Figura 3: MSD para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periodicas de contorno en función del tiempo. El valor de  $D$  obtenido es de  $0.087 \pm 0.001$  en unidades de  $lj$ .

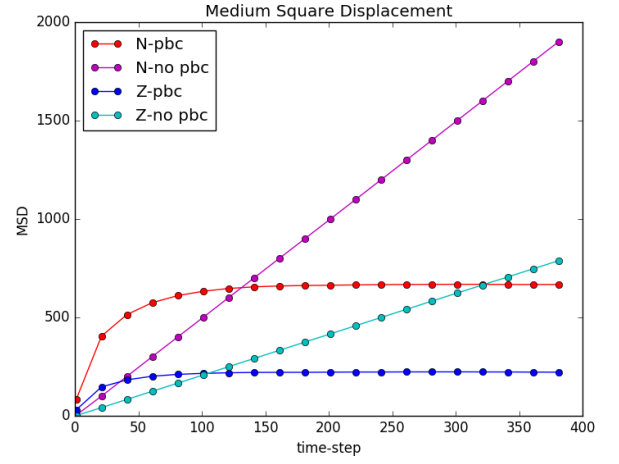


Figura 4: MSD para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periodicas de contorno en función del tiempo. timestep 0.5 dump 50 run 40000 temp 4.0

A partir de la ecuación 6 se calculo  $D$  para cada tiempo  $t$ .

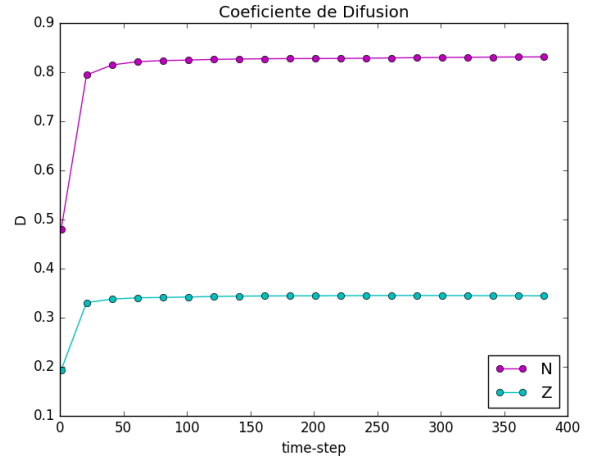


Figura 5: Coeficiente de Difusion  $D$  para protones( $Z$ ) y neutrones ( $N$ )

## V. VELOCITY AUTOCORRELATION FUNCTION

Las relación de Green-Kubo permite relacionar el desplazamiento cuadrático medio de una cantidad dinámica  $A$  con la integral de una funcion de autocorrelación:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle [A(t) - A(t_0)]^2 \rangle}{2t} = \int_0^\infty d\tau \langle \dot{A}(\tau) \dot{A}(\tau_0) \rangle \quad (9)$$

En particular para el coeficiente de difusión, la relación de Green-Kubo es:

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty dt \langle \vec{v}(t) \vec{v}(t_0) \rangle \quad (10)$$

Aquí  $\langle \vec{v}(t) \vec{v}(t_0) \rangle$  es la función de autocorrelación de velocidades  $VACF(t)$ . Nuevamente el símbolo  $\langle \rangle$  indica un promedio sobre el número de partículas y sobre orígenes de tiempos  $t_0$ .

Para calcular  $VACF(t)$  hemos utilizado nuevamente el algoritmo ya usado para el  $MSD(t)$ :

$$VACF(t) = \frac{1}{M.N} \sum_{t_0}^M \sum_i^N \vec{v}_i(t_0) \cdot \vec{v}_i(t_0 + t) \quad (11)$$

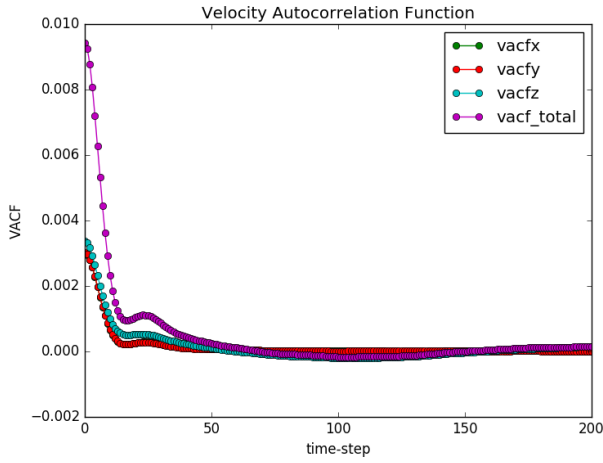


Figura 6: Función de autocorrelación de velocidades para neutrones. timestep 0.02 dump 50 run 20000 temp 4.0

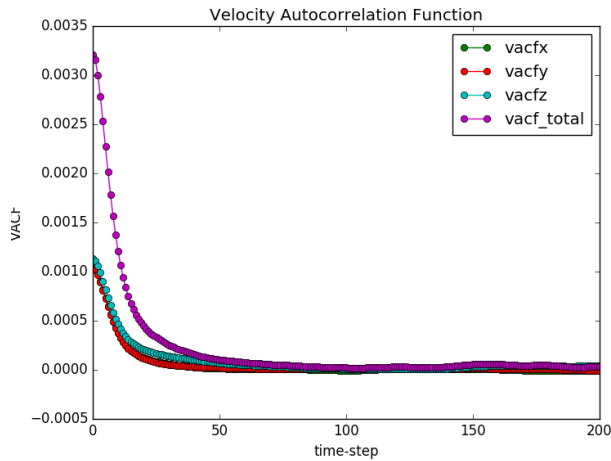


Figura 7: Función de autocorrelación de velocidades para protones. timestep 0.02 dump 50 run 20000 temp 4.0

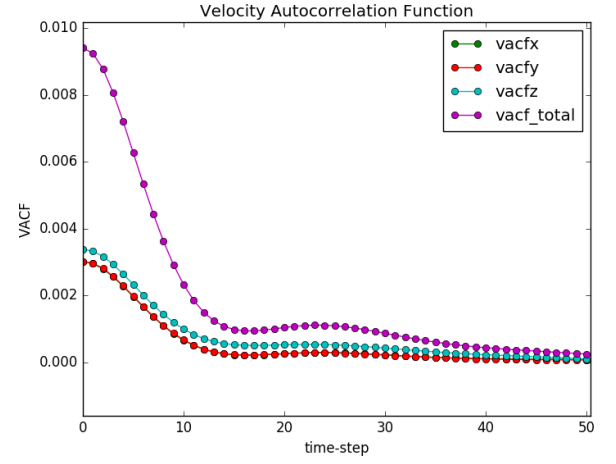


Figura 8: Función de autocorrelación de velocidades para neutrones. (Zoom)

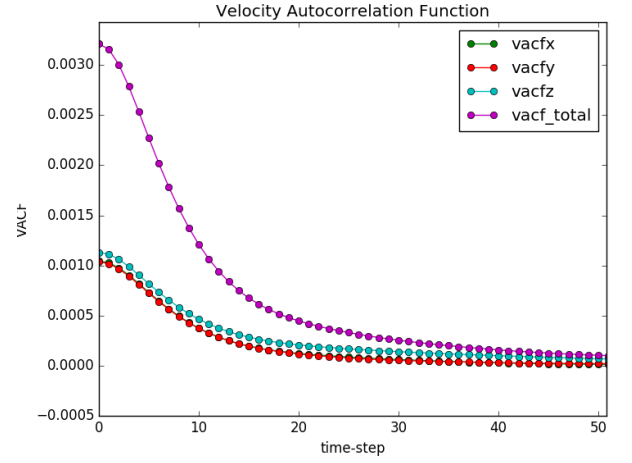


Figura 9: Función de autocorrelación de velocidades para protones. (Zoom)

## VI. 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://lammmps.sandia.gov/doc/dump.html>, Consultado 02/09/17