

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: 21 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.

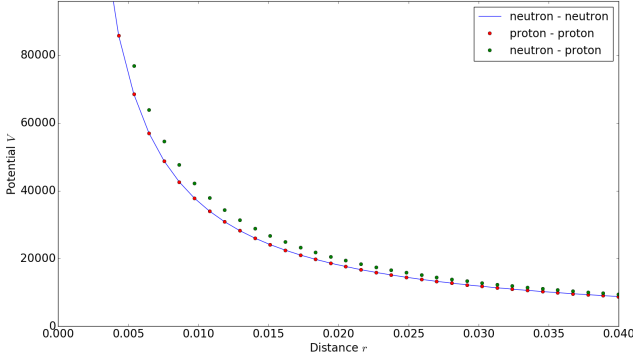


Figura 1: Potenciales discretizados. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

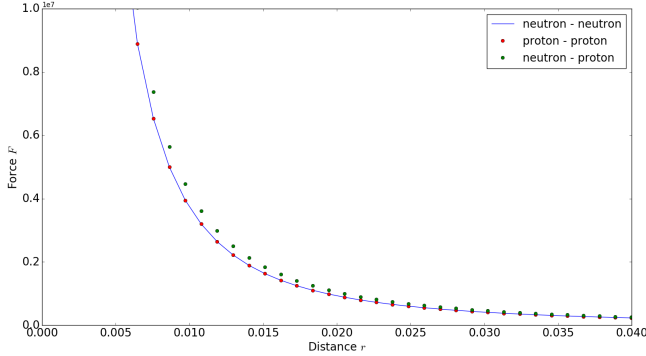


Figura 2: Fuerzas discretizadas. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

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.

IV. MEAN SQUARE DISPLACEMENT

En las figuras 3 y 4 vemos los desplazamientos cuadráticos medios para una simulación con protones y neutrones juntos.

* tavellafran@gmail.com

** lucaslongo52@gmail.com

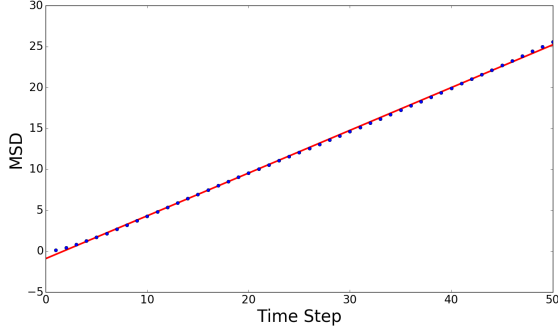


Figura 3: MSD de Neutrones para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periodicas de contorno en función del tiempo. El valor de D obtenido es de 0.087 ± 0.001 en unidades de lj.

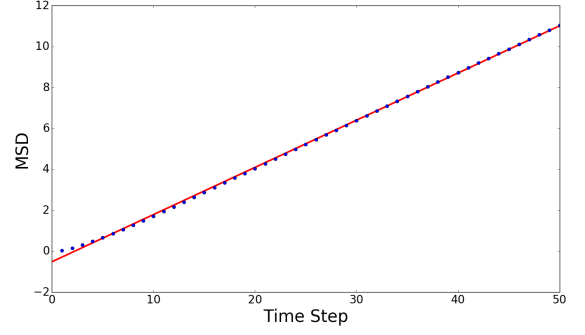


Figura 4: MSD de Protones para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periodicas de contorno en función del tiempo. El valor de D obtenido es de 0.038 ± 0.001 en unidades de lj.

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.

Unidades lj [2]

For style lj, all quantities are unitless. Without loss of generality, LAMMPS sets the fundamental quantities mass, sigma, epsilon, and the Boltzmann constant = 1. The masses, distances, energies you specify are multiples of these fundamental values. The formulas relating the reduced or unitless quantity (with an asterisk) to the same quantity with units is also given. Thus you can use the mass & sigma & epsilon values for a specific material and convert the results from a unitless LJ simulation into physical quantities.

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

[2] Sandia National Laboratories, <http://lammps.sandia.gov/doc/units.html>, Consultado 21/09/17