

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: 27 de septiembre de 2017)

ABSTRACT

I. INTRODUCCIÓN

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

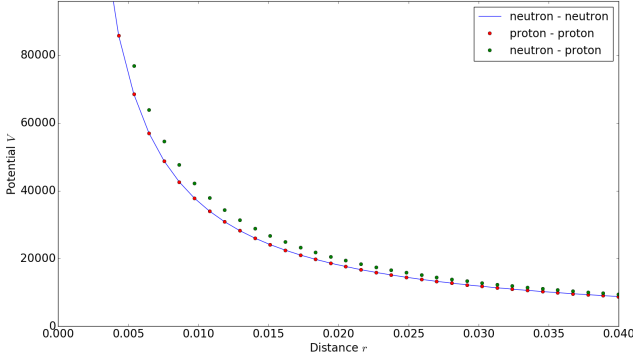


Figura 1: Potenciales discretizados. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

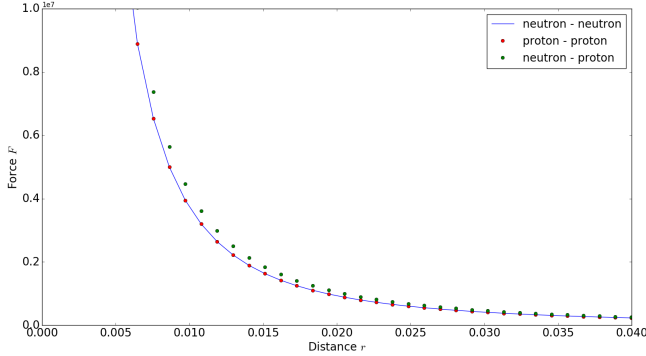


Figura 2: Fuerzas discretizadas. Tenemos dos tipos, uno para partículas iguales y otro para partículas diferentes.

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 ?. 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 ?? y ?? vemos los desplazamientos cuadráticos medios para una simulación con protones y neutrones juntos.

* tavellafran@gmail.com

** lucaslongo52@gmail.com

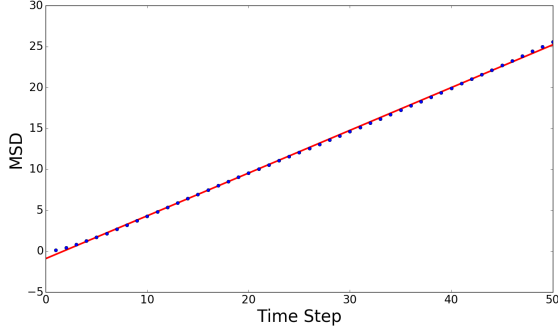


Figura 3: MSD de Neutrones para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periodicas de contorno en función del tiempo. El valor de D obtenido es de 0.087 ± 0.001 en unidades de lj.

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 :

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

En las ecuaciones ?? y ?? 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 ?? muestra que D es proporcional a la pendiente del desplazamiento cuadrático medio a tiempos largos. La forma ?? se prefiere a la forma ?? 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 Δt , 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 $\vec{r}_i(t_j)$
 - 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:

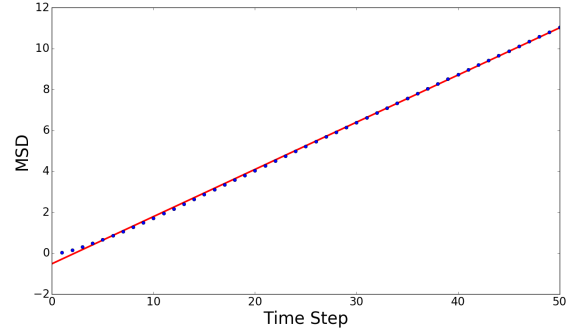


Figura 4: MSD de Protones para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periodicas de contorno en función del tiempo. El valor de D obtenido es de 0.038 ± 0.001 en unidades de lj.

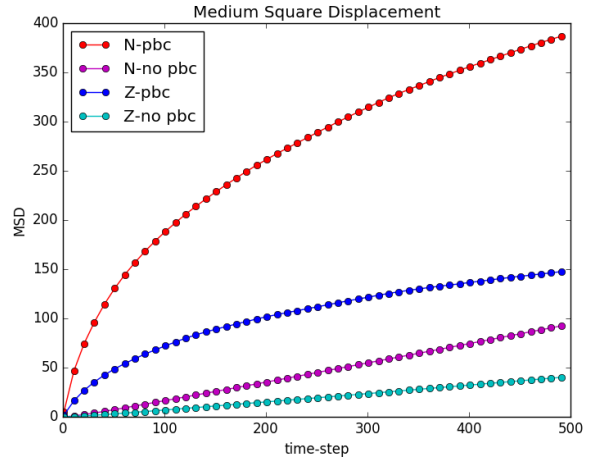


Figura 5: MSD para una simulación con posiciones corregidas para eliminar las condiciones periodicas de contorno en función del tiempo. timestep 0.1 dump 10 run 10000 temp 4.0

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

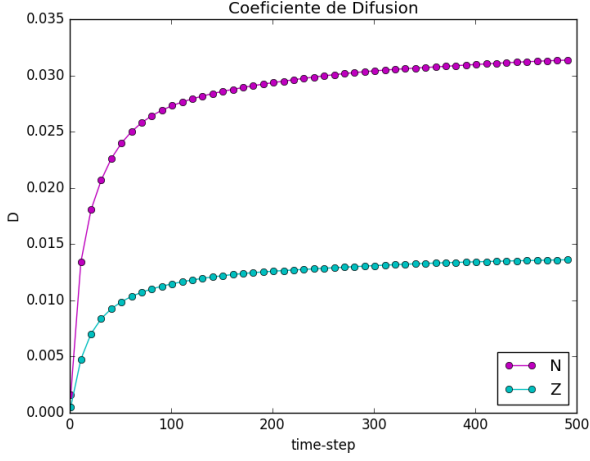


Figura 6: Coeficiente de Difusion D para protones(Z) y neutrones (N)

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 función 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 $MSD(t)$:

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

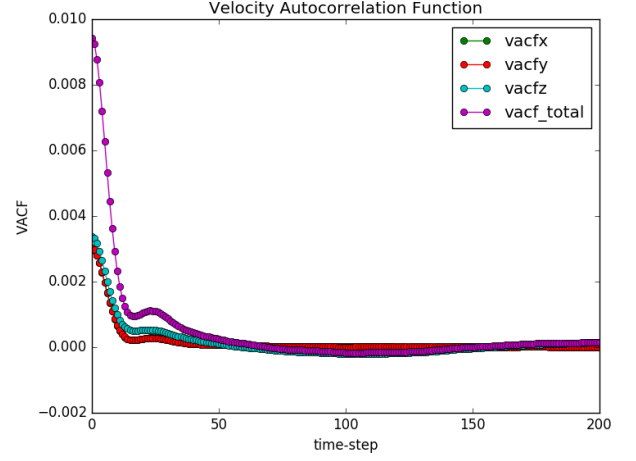


Figura 7: Función de autocorrelación de velocidades para neutrones. timestep 0.1 dump 10 run 10000 temp 4.0

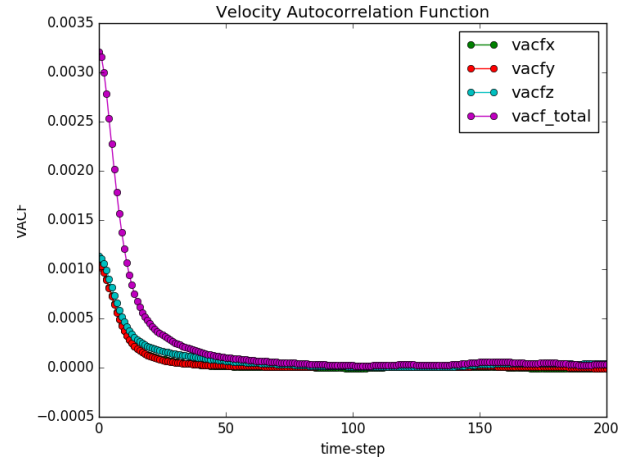


Figura 8: Función de autocorrelación de velocidades para protones. timestep 0.1 dump 10 run 10000 temp 4.0

Integración de la función VACF mediante la regla de Simpson.

Numero de puntos: 401

Numero de áreas de Simpson: 200

Integral de VACF protones=0.0435208564516

Integral de VACF neutrones=0.0982231090351

VI. DETALLES TÉCNICOS

Las posiciones de las partículas son obtenidas a través del comando *dump* en LAMMPS. En la documentación[?] 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 [?]]

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