Dinámica de reacción controlada por difusión

Salman Habib[I], Katja Lindenberg[II], Grant Lythe[III] y Carmen Molina-París[IV].

[I]Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory, Nuevo México, EEUU.

[II]Department of Chemistry and Biochemistry 0340, University of California San Diego, EEUU.

[III]Department of Applied Mathematics, University of Leeds, U.K.

[IV]Mathematics Institute, The University of Warwick, U.K.

Estudiamos la dinámica de partículas que se difunden; dos partículas se aniquilan en cuanto se encuentran. Se producen sucesos de nucleación (creación de partículas) con una probabilidad uniforme en espacio y tiempo. Por lo tanto, se establece un balance entre nucleación y aniquilación que da lugar a un estado estadísticamente estacionario. Tratamos dos casos en una dimensión espacial : nucleación en pares y nucleación simple.

Un nuevo método de análisis nos permite realizar el calculo exacto de la densidad de partículas en el estado estadísticamente estacionario en función de tres parámetros: frecuencia de sucesos de nucleación Γ, separación de las dos partículas al crearse b (en caso de nucleación en pares), y el coeficiente de difusión de una partícula suelta D. Dicho método requiere la introducción de la siguente función:

$r(x,t) =$ probabilidad de que el número de partículas en un intervalo de longitud x sea par en el instante t.

Se puede demostrar[1] que $r(x,t)$ obedece una ecuación lineal y que la densidad de partículas viene dada por

$$\rho(t) = -\frac{\partial}{\partial x} r(x,t)\big|_{x=0^+}. \qquad (1)$$

En el caso de nucleación en pares, la frecuencia de sucesos de nucleación es proporcional al cuadrado de la densidad de partículas en el estado estacionario, siempre que la separación de pares en el instante de creación sea suficientamente pequeña. Concretamente, cuando el parámetro adimensional $\epsilon = b\,(2\Gamma/D)^{\frac{1}{3}}$ tiende a cero, la densidad de partículas en el estado estacionario es

$$\rho_0^{\mathrm{p}} \to \left(\frac{b\Gamma}{2D}\right)^{\frac{1}{2}}. \qquad (2)$$

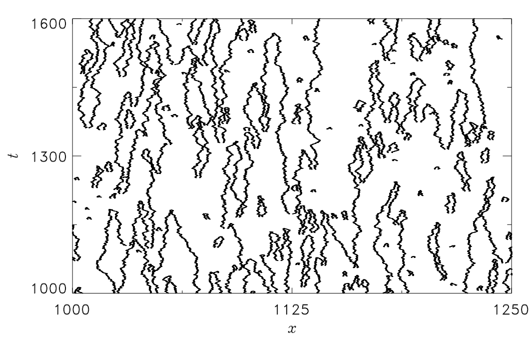

FIG. 1. Plano espacio-temporal que representa una pequeña parte de la evolución numérica. Nucleación en pares, con $\Gamma = 1.25\times10^{-3}$, $b = 2$ y $D = 0.1$.

En el caso de nucleación simple, hay solamente dos parámetros: la frecuencia de sucesos de nucleación Q y el coeficiente de difusión D. La densidad de partículas en el estado estacionario es[1,2]

$$\rho_0^{\mathrm{s}} = \frac{1}{2}\left(\frac{Q}{D}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{|\mathrm{Ai}'(0)|}{\mathrm{Ai}(0)} = \left(\frac{Q}{16D}\right)^{\frac{1}{3}} 0.9186\ldots, \qquad (3)$$

donde $\mathrm{Ai}(x)$ es la función de Airy. Así, la frecuencia de sucesos de nucleación es proporcional al cubo de la densidad de partículas en el estado estacionario.

Se puede también calcular la evolución temporal de la densidad para condiciones iniciales arbitrarias, mediante un desarrollo en auto-funciones de una ecuación de segunda orden[1]. Un ejemplo se encuentra en la Figura 2.

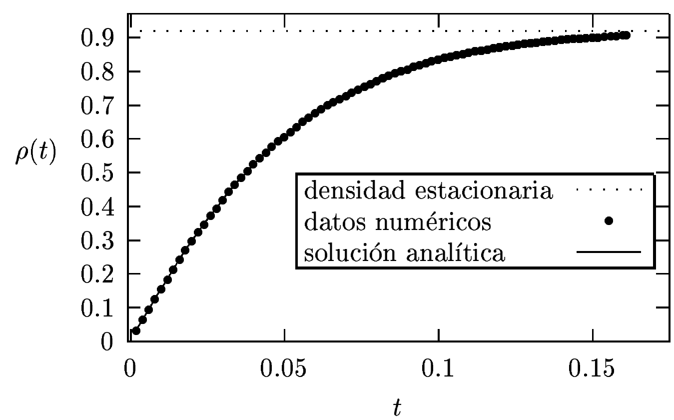

FIG. 2. Densidad como función del tiempo para condiciones iniciales en ausencia de partículas. Nucleación simple con $Q = 16$ y $D = 1$. La línea de puntos es la densidad de partículas en el estado estacionario, (3). Difícilmente se distingue la solución analítica de los datos numéricos.

[1] Salman Habib, Katja Lindenberg, Grant Lythe y Carmen Molina-París. *Diffusion-limited reacion in one dimension: paired and unpaired nucleation* J. Chem. Phys. **115** 73-89 (2001).

[2] T. Masser and D. ben-Avraham, *Method of intervals for the study of diffusion-limited annihilation, A + A → 0* Phys. Rev. E 63, 066108 (2001)