

Trabajo I: Función de distribución radial

Pablo Prieto Campaña.

30 de abril de 2025

1. Definición teórica:

La función de distribución radial es una función que aporta información sobre la densidad de un cierto sistema de partículas, para una distancia r dada. Es una medida de la probabilidad de encontrar a una partícula en una distancia $r+dr$ sobre un origen previamente establecido, en comparación con la probabilidad esperada para un sistema que no presenta ninguna correlación entre sus partículas y que por lo tanto está desorganizado. También es conocida como función de distribución de pares. Es una de las funciones más importantes del ámbito de la mecánica estadística y la física del estado sólido.

Se trata de una función muy importante, ya que nos puede aportar información sobre la estructura local de los sistemas, para definir patrones de estructura en los sólidos, para conocer si existe orden cristalino de larga distancia... Podemos encontrar que la función de distribución radial se anula siempre para $r=0$, y en algunos modelos como el gas de esferas duras, $g(r)=0$ para r más pequeños que el radio de las esferas (partículas del gas).

2. Descripción del sistema:

En este caso, se pretende evaluar la función de distribución radial para un sistema de partículas 2D sobre el que conocemos la posición de las partículas en distintos instantes. El sistema está formado por 484 partículas, confinadas en una caja de longitud 46.606726129198194 unidades. El diámetro de las partículas es de 1 unidad, y la fracción de empaquetamiento es de 0,7.

La función de distribución radial obtenida en este caso es:

3. Resultados observados:

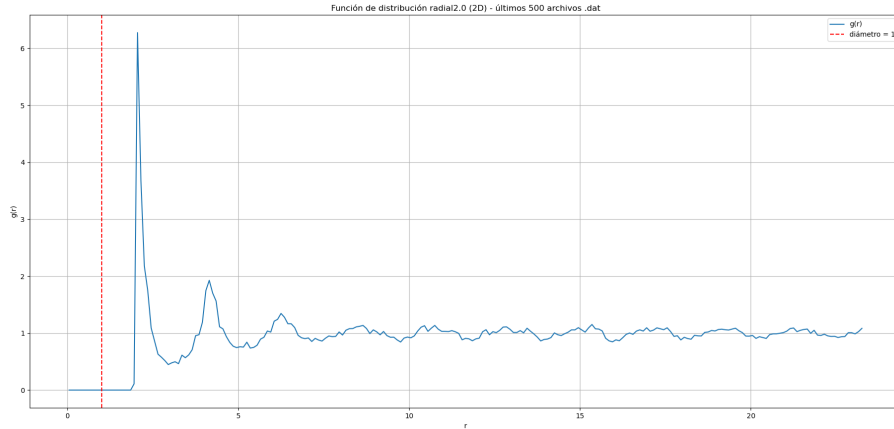


Figura 1: $G(r)$ para este sistema.

Algunas conclusiones que podemos obtener de esta función de distribución radial obtenida son:

- (i). Como podemos ver, para distancias menores a 1 unidad la $g(r)=0$, lo que quiere decir que en este caso estamos trabajando con sistemas de esferas duras. No hay partículas a distancias menores que el diámetro de las mismas.
- (ii). Existe un pico pronunciado para una distancia cercana a 1 unidad. Esto nos indica que hay una alta probabilidad de encontrar partículas a una distancia ligeramente mayor que la del diámetro de las partículas.
- (iii). Inmediatamente después de este pico pronunciado, la función tiende a estabilizarse y oscila sobre el valor $g(r)=1$. Esto nos indica que a una cierta distancia de la partícula de referencia, las partículas del sistema no siguen ningún orden determinado y se distribuyen de forma aleatoria.

Con todas estas conclusiones, podemos afirmar que esta función de distribución radial es la propia de un sistema en **fase líquida**, ya que hay un primer máximo pronunciado a distancias cercanas a 1 unidad, a largo alcance no hay un orden establecido y $g(r)$ tiende a 1 para distancias grandes.

4. Descripción del algoritmo:

Por último, se realizará una pequeña explicación del código utilizado para calcular $g(r)$.

1. Importamos todas las librerías necesarias.
2. Indicamos los parámetros del sistema que posteriormente necesitaremos para calcular $g(r)$.
3. Extraemos el archivo .tar en el que aparecen los datos del problema a una carpeta sobre la que posteriormente leeremos los datos.

4. Leemos los datos de la carpeta en la que los hemos almacenado.
5. Para que a la hora de calcular $g(r)$ no hay problemas, hay que tener en cuenta una serie de consideraciones.
 - (a). Definimos la distancia máxima como la mitad del tamaño de la caja, y definimos el incremento de distancias en intervalos de 0,1 unidades. Además, con el comando `hist = np.zeros(nbins)` iniciamos un array de ceros que se usará como un histograma para contar el número de pares de partículas que se encuentran dentro de cada bin de distancia.
 - (b). Como vamos a utilizar dos bucles anidados, utilizamos el comando `j = range(i + 1, N)` para asegurarnos de que cada par de partículas se cuente una sola vez.
 - (c). Aplicamos condiciones de borde periódicas, de tal forma que si la distancia entre dos partículas es mayor que la mitad del tamaño de la caja, se considera la distancia a través de la frontera opuesta de la caja. (Línea 53 del código).
 - (d). Ahora calculamos las distancias, y si obtenemos una distancia mayor que `rmax`, entonces desechamos ese dato.
 - (e). Asignamos cada valor de `r` en el histograma, calculamos el área de los anillos a la distancia `r`, que será el volumen del espacio muestreado a esa distancia y calculamos el factor de normalización, que es el número de partículas esperado si la distribución fuese aleatoria.
 - (f). Con todo ello, simplemente $g(r)$ se calcula como el cociente entre el número de pares encontrados en cada bin, y el número de pares esperados, dados por la distribución aleatoria.
6. Con todo esto, ahora solo queda acumular los valores de $g(r)$ que hemos obtenido en cada archivo, para hacer el promedio con todos los archivos y representar la gráfica.
7. Para graficar utilizamos la librería `matplotlib.pyplot`.