

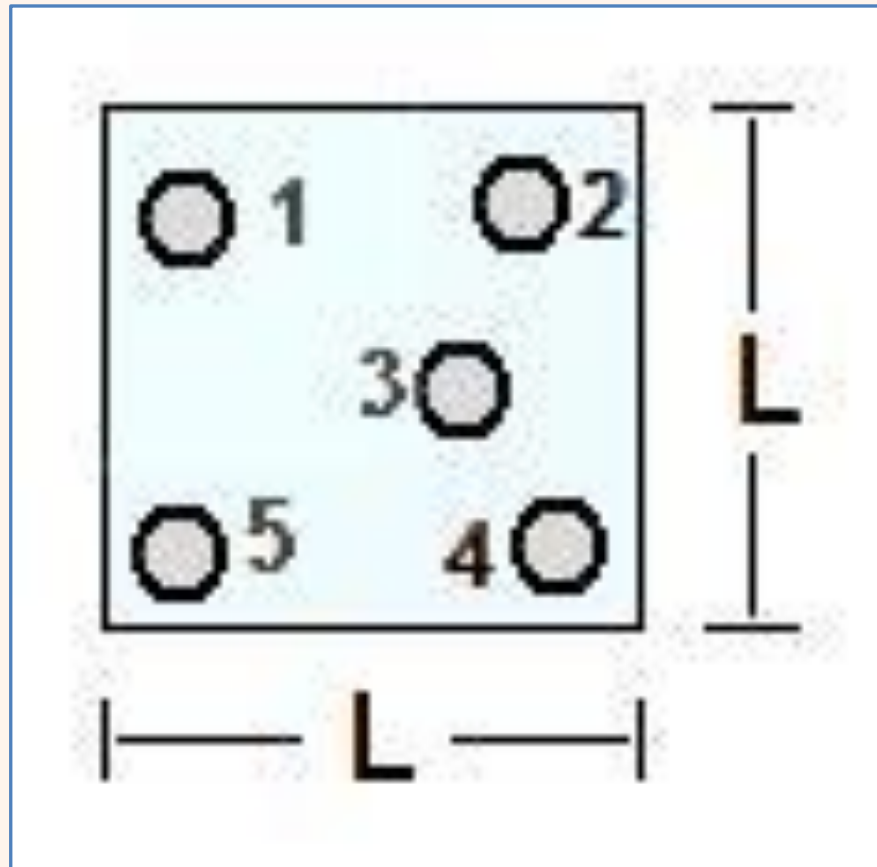
# Condición de imagen mínima para sistemas en bulto

*(Introducción, DEXII)*

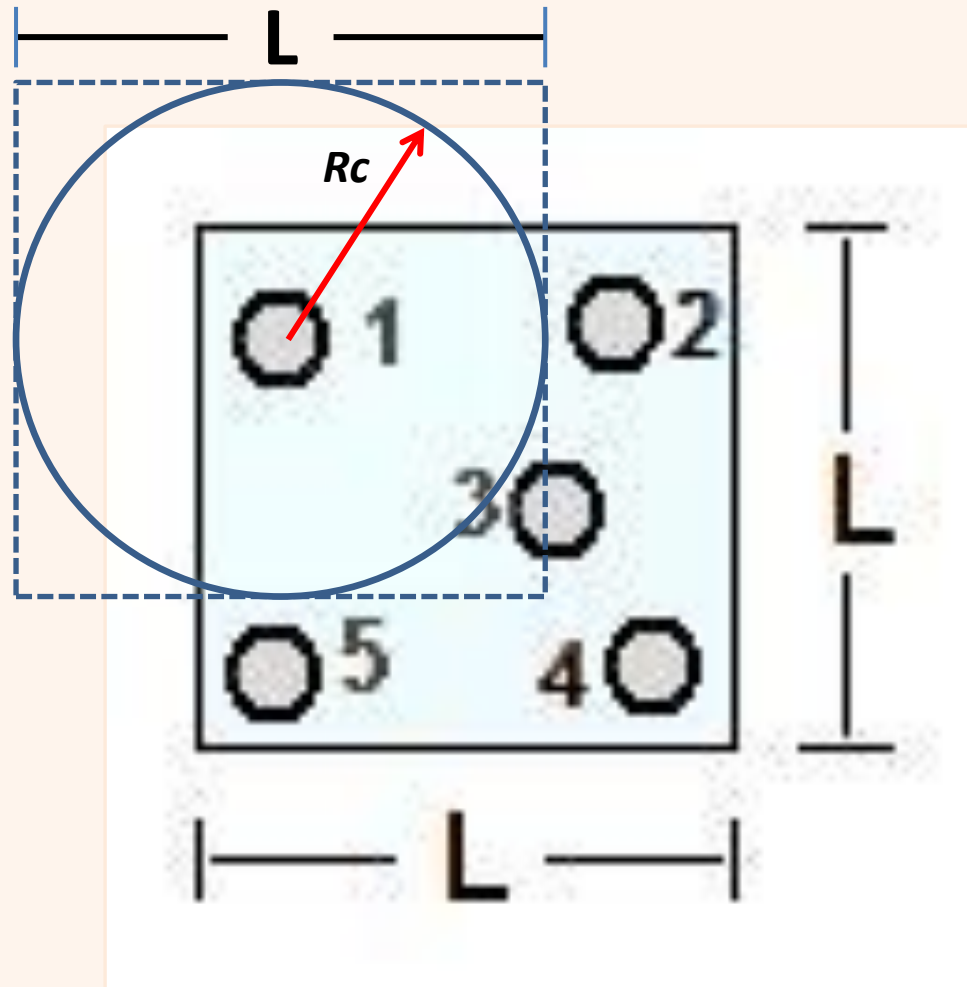
2017-1

L. Yeomans

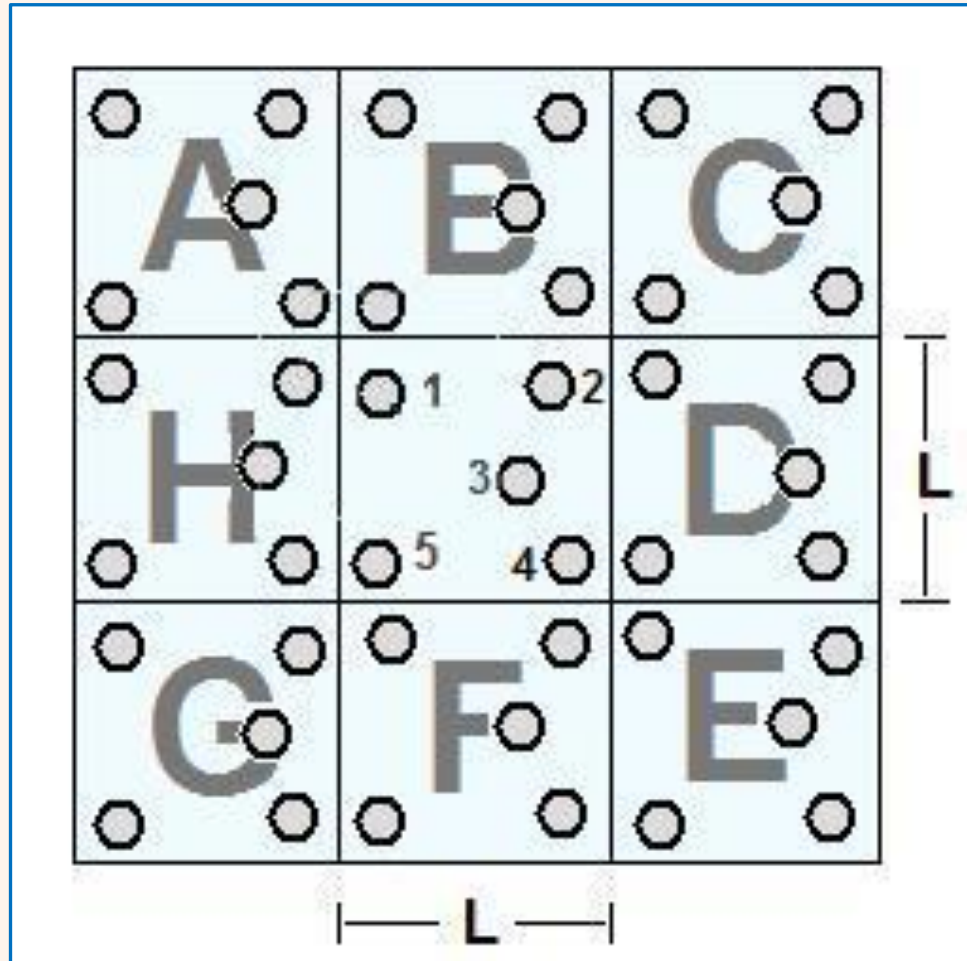
## Celda Principal (5 partículas)



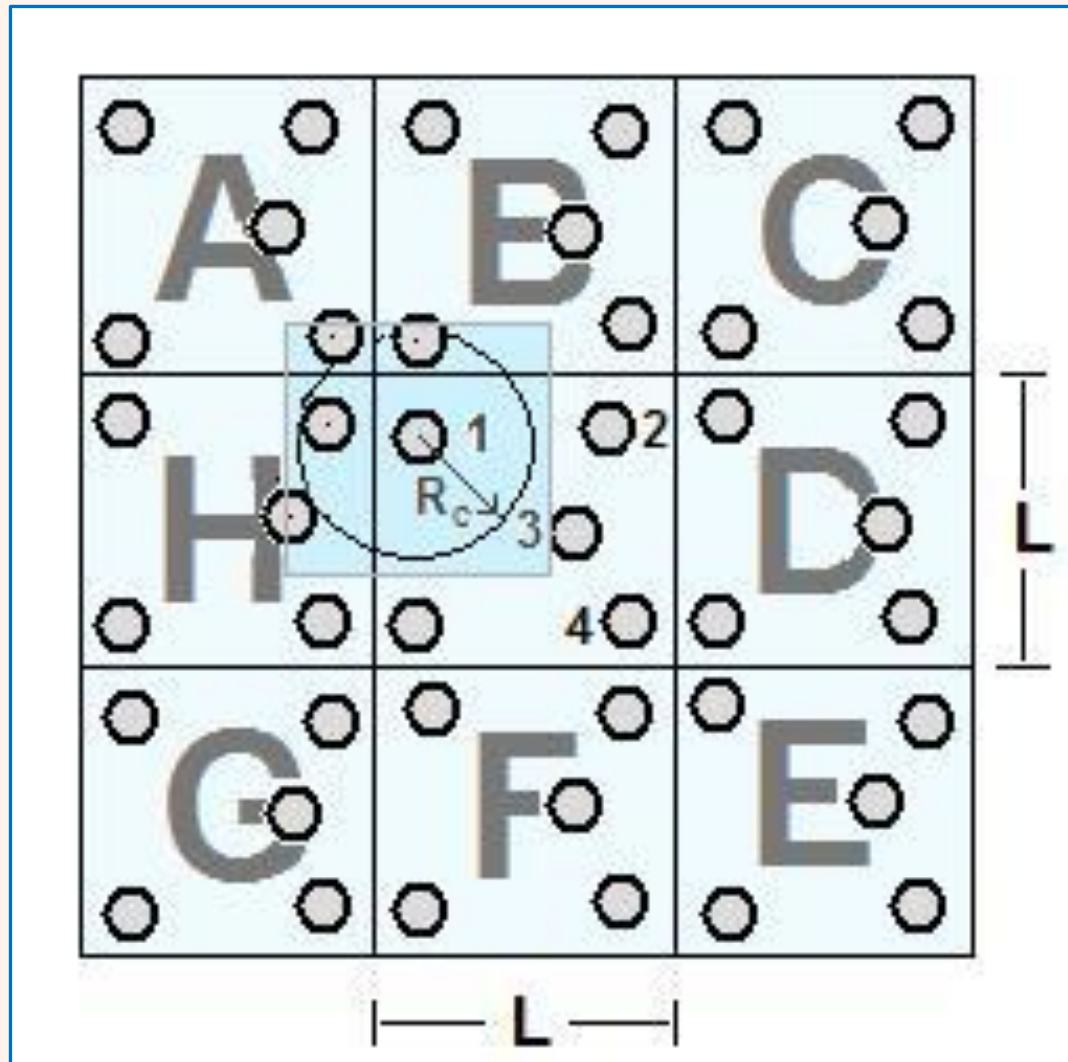
# Radio de corte para cálculo de interacciones (ejemplo, sobre partícula 1)



## Celda Principal y Celdas Imagen (A-H)



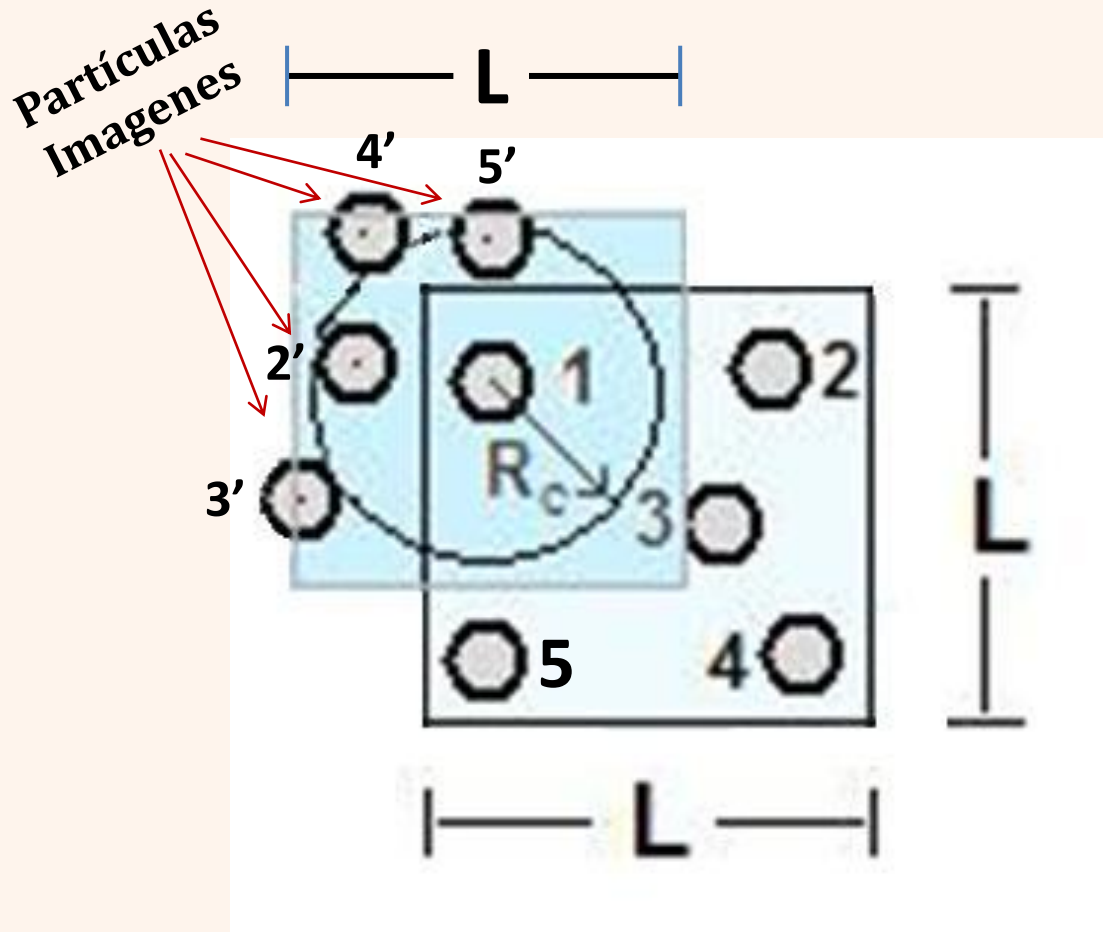
# Radio de corte para cálculo de interacciones incluimos celdas imágenes (ilustrado en la partícula 1)



# Zoom: Radio de corte para cálculo de interacciones

## Condición de Imagen Mínima

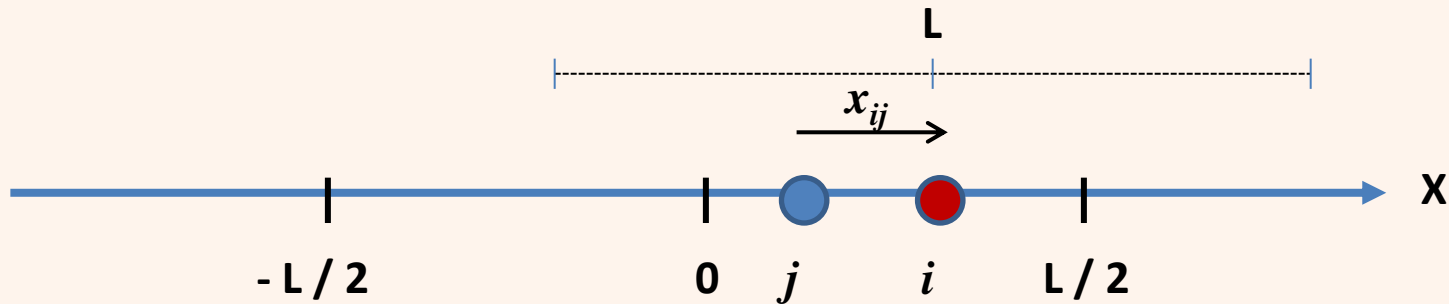
(ilustrado en la partícula 1)



# Ilustración: Condición de imagen mínima en una dimensión (sobre la *i-esima* partícula)

$$x'_{ij} = x_{ij} - L \cdot \left\{ \frac{x_{ij}}{L} \right\}^* \quad \text{tal que} \quad x_{ij} \equiv x_i - x_j$$

**Caso I**



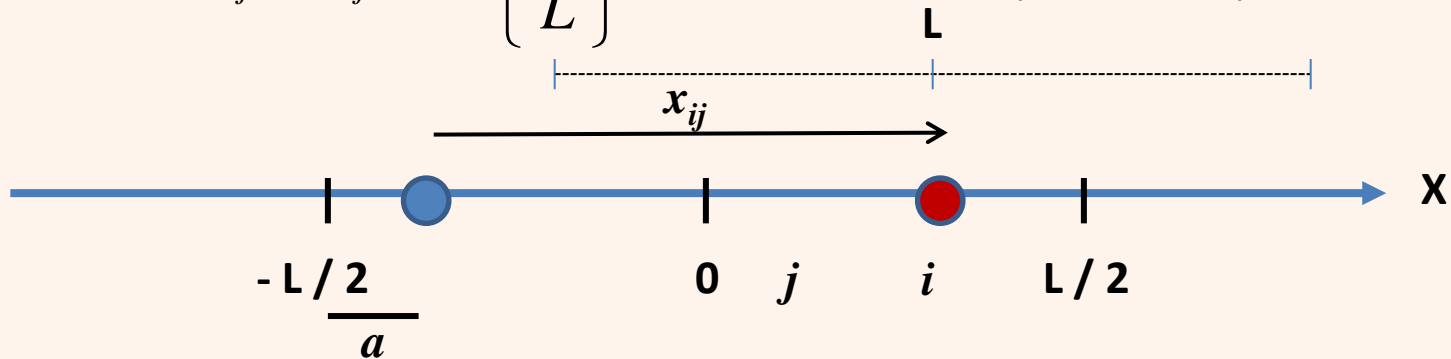
$$0 < x_{ij} < \frac{L}{2} \quad \Rightarrow \quad 0 < \frac{x_{ij}}{L} < \frac{1}{2} \quad \Rightarrow \quad \left\{ \frac{x_{ij}}{L} \right\}^* = 0$$

$$\therefore x'_{ij} = x_{ij}$$

La *j*-ésima partícula queda en el mismo lugar

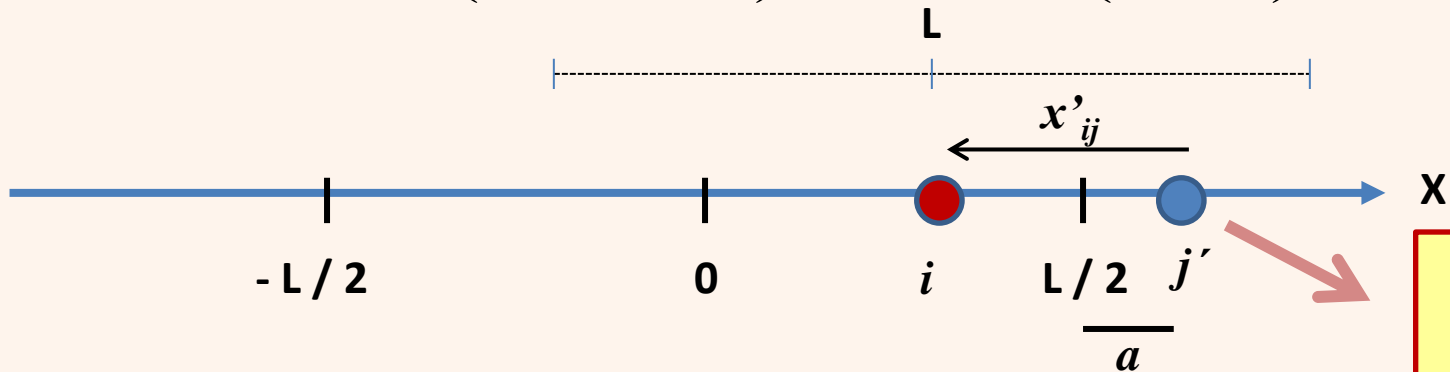
## Caso II

$$x'_{ij} = x_{ij} - L \cdot \left\{ \frac{x_{ij}}{L} \right\}^* \quad \text{tal que} \quad x_{ij} \equiv x_i - x_j$$



$$x_j = -\frac{L}{2} + a \Rightarrow x_{ij} = x_i - \left( -\frac{L}{2} + a \right) > \frac{L}{2} \Rightarrow \frac{x_{ij}}{L} > \frac{1}{2} \Rightarrow \left\{ \frac{x_{ij}}{L} \right\}^* = 1$$

$$\therefore x'_{ij} = x_{ij} - L = \left( x_i + \frac{L}{2} - a \right) - L = x_i - \left( \frac{L}{2} + a \right) = x_i - x'_j$$



*imagen de la  
j-ésima  
partícula*