

Cálculo de la Función de Distribución Radial para un sistema de baja densidad

J. Miguel Polo Barahona
Universidad de Extremadura

11 de abril de 2025

1. Introducción

En física de la materia condensada, la caracterización estructural de sistemas compuestos por muchas partículas es fundamental para comprender sus propiedades colectivas. Una herramienta clave en este análisis es la *función de distribución radial* $g(r)$, que proporciona información sobre el número promedio de partículas que se encuentran a una distancia $(r, r + dr)$ de cada partícula.

Este trabajo se enfoca en el cálculo de $g(r)$ para un sistema bidimensional de discos rígidos, con un factor de empaquetamiento bajo ($\nu = 0,2$). Para ello, se ha utilizado un conjunto de datos que representan las configuraciones espaciales de 484 partículas tras alcanzar el equilibrio, a partir de los cuales se calcula y promedia la función $g(r)$.

El análisis de esta función permite distinguir entre diferentes tipos de orden estructural, como el presente en líquidos, sólidos y gases.

2. Marco teórico

La función de distribución radial $g(r)$ es un caso particular de la función de correlación de pares, correspondiente a un sistema homogéneo e isótropo.

En este contexto, $g(r)$ se expresa como:

$$g(r) = \frac{V}{N^2} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(r - r_{ij}) \right\rangle,$$

donde N es el número de partículas del sistema, V su volumen (o área en dos dimensiones) y r_{ij} es la distancia entre las partículas i y j .

En la práctica, el cálculo de $g(r)$ se lleva a cabo dividiendo el rango radial en intervalos de ancho Δr , contando el número de pares de partículas que se encuentran dentro de cada anillo concéntrico, y normalizando por el área del anillo, la densidad promedio y el número de partículas. En dos dimensiones, $g(r)$ se expresa como sigue:

$$g(r) = \frac{A}{N^2} \cdot \frac{h_n}{2\pi r \Delta r},$$

donde A es el área del sistema y h_n el número de pares a una distancia entre r y $r + \Delta r$.

Para sistemas en dos dimensiones con condiciones de contorno periódicas, se emplea el algoritmo del *mínimo de imagen*, que garantiza que las distancias entre partículas se calculen considerando la repetición infinita del sistema. Dado un sistema cuadrado de lado L , la distancia mínima entre dos partículas se calcula como:

$$\begin{aligned} \Delta x &= x_i - x_j - L \cdot \text{round} \left(\frac{x_i - x_j}{L} \right), \\ \Delta y &= y_i - y_j - L \cdot \text{round} \left(\frac{y_i - y_j}{L} \right), \\ r_{ij} &= \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}. \end{aligned}$$

El cálculo numérico de $g(r)$ se lleva a cabo mediante el conteo de pares de partículas que se encuentran a una distancia dentro de anillos concéntricos de ancho Δr , centrados en cada partícula. Para cada intervalo radial, se contabiliza el número de pares h_n cuya separación r_{ij} pertenece a dicho intervalo.

El procedimiento se repite para cada archivo que contiene configuraciones del sistema, y la función $g(r)$ resultante se promedia dividiendo por el número total de archivos analizados.

3. Resultados

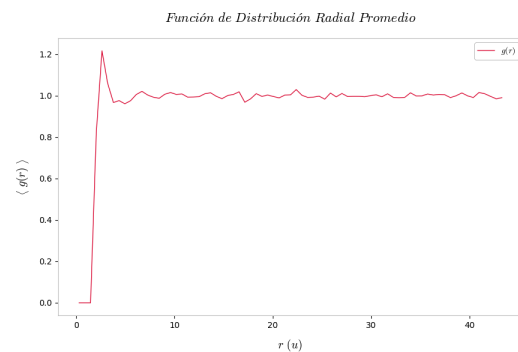


Figura 1: Función de distribución radial promedio.

Para el cálculo de $g(r)$, se dividió el espacio radial hasta r_{\max} en 75 intervalos de ancho Δr . Esta elección no es arbitraria, sino que proporciona una buena resolución,

permitiendo identificar las características estructurales del sistema sin introducir demasiado ruido.

4. Conclusiones

La función de distribución radial obtenida, mostrada en la figura 1, presenta un comportamiento característico de un sistema en fase líquida. Se observa un primer pico pronunciado en torno a $r \approx 3R$, lo que refleja la existencia de una estructura de corto alcance, propia de sistemas en fase líquida con baja densidad. A distancias mayores, la función se estabiliza tendiendo hacia la unidad, $g(r) \rightarrow 1$, en concordancia con la ausencia de orden de largo alcance en sistemas homogéneos y desordenados.