

Simulación del Motor Molecular Ratchet con Potencial Diente de Sierra

Mateo Maldonado

3 de diciembre de 2025

1. Introducción

El objetivo de este trabajo es estudiar la dinámica de una partícula en un motor molecular tipo *ratchet*, analizando su movimiento y la evolución de su energía. Se emplea un **potencial asimétrico de diente de sierra** y se integran las ecuaciones de movimiento utilizando el método de **Velocity Verlet** para garantizar estabilidad y precisión. Se incluye una fuerza externa periódica para inducir el movimiento de rectificación.

2. Potencial y Ecuaciones del Motor Molecular

2.1. Potencial Asimétrico de Diente de Sierra

Se utiliza un potencial periódico asimétrico (diente de sierra) definido por tramos, con un periodo L y una altura U_0 , caracterizado por la asimetría α :

$$U(x) = \begin{cases} U_0 \frac{x'}{\alpha L} & \text{si } 0 \leq x' < \alpha L \\ U_0 \left(1 - \frac{x' - \alpha L}{L - \alpha L}\right) & \text{si } \alpha L \leq x' < L \end{cases}$$

donde x' es la posición reducida al intervalo $[0, L)$, U_0 es la amplitud, L es el periodo y α es el factor de asimetría.

La fuerza asociada $F_{\text{pot}}(x) = -\frac{dU}{dx}$ es una función escalón (fuerza constante por tramos).

2.2. Ecuaciones de Movimiento con Driving

La partícula de masa m se mueve según la ecuación de Newton, incluyendo una fuerza externa periódica (*driving*) de amplitud A y frecuencia ω :

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_{\text{pot}}(x) + F_{\text{driving}}(t) \quad (1)$$

donde $F_{\text{driving}}(t) = A \sin(\omega t)$.

3. Método de Integración

Para simular el sistema, se utilizó el **método de Velocity Verlet**. Este esquema es una extensión de Verlet que permite calcular la velocidad en cada paso, garantizando una alta conservación de la energía y estabilidad numérica, crucial para los osciladores.

4. Resultados

4.1. Visualización del Potencial

La figura 1 muestra la forma asimétrica del potencial de diente de sierra y la ubicación de la partícula en un instante específico de la simulación.

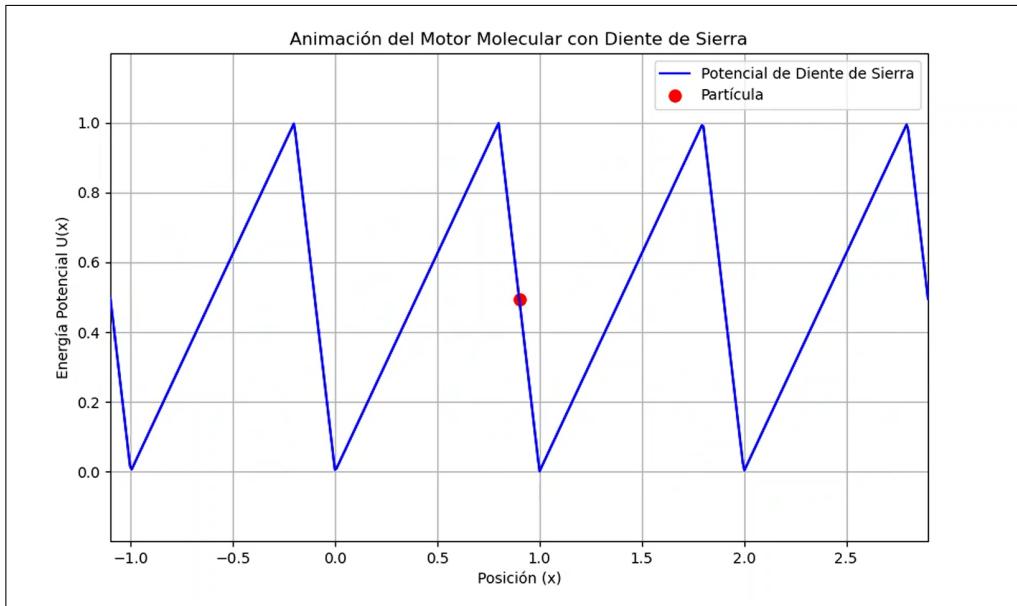


Figura 1: Forma del Potencial Asimétrico de Diente de Sierra y posición de la partícula en un instante.

4.2. Dinámica de la Partícula (Trayectoria y Velocidad) y Energía del sistema

La figura 4 agrupa la evolución temporal de la posición (x) y la velocidad (v) de la partícula. Se observa la rectificación del movimiento inducida por el potencial asimétrico y la fuerza externa.

4.2.1. Evolución de las Energías

La figura 5 muestra la evolución de la energía cinética K , potencial V y total $E = K + V$ de la partícula. El notorio aumento de la amplitud de la energía total indica que el sistema está siendo impulsado por la fuerza externa.

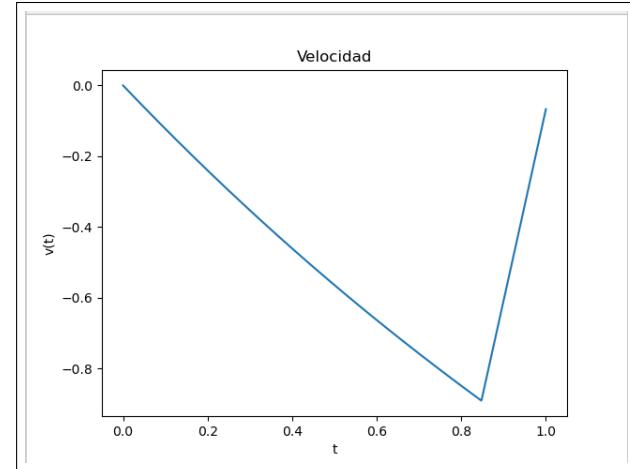
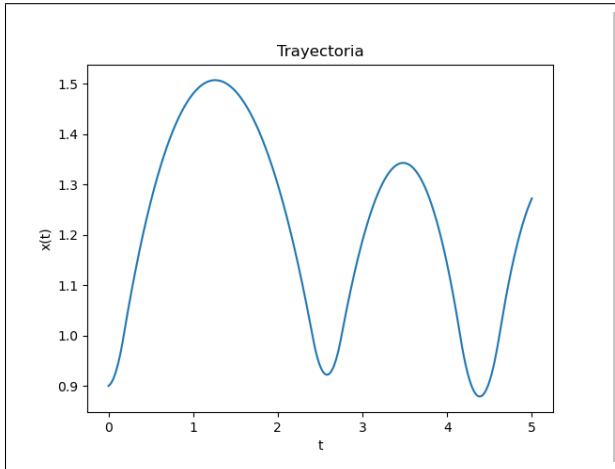


Figura 2: *

(a) Trayectoria ($x(t)$) de la partícula.

Figura 3: *

(b) Velocidad ($v(t)$) de la partícula.

Figura 4: Dinámica de la partícula: Posición y velocidad en función del tiempo.

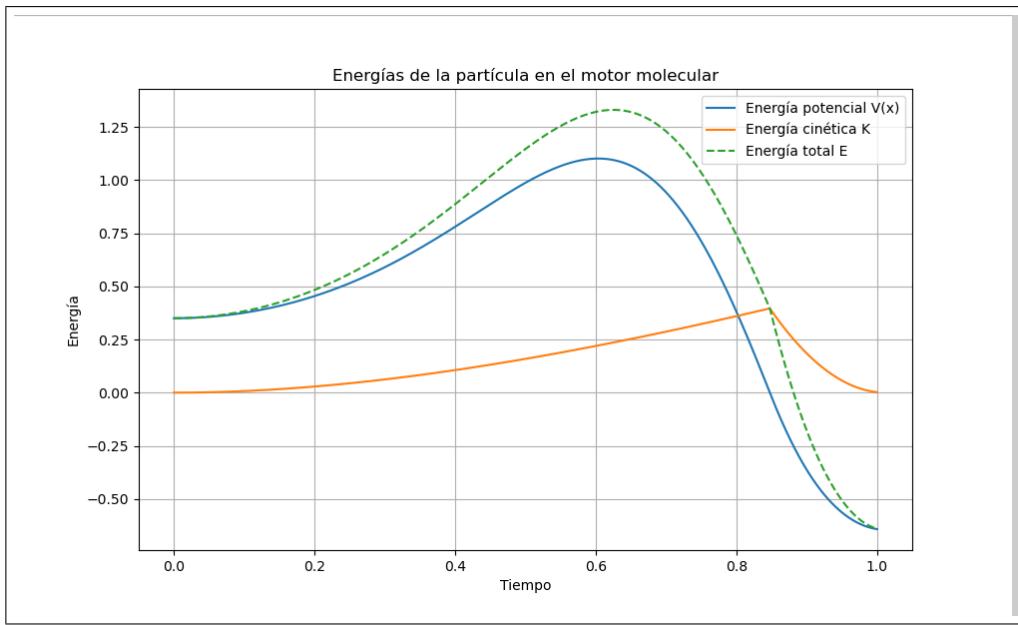


Figura 5: Energía cinética, potencial y total de la partícula en función del tiempo.

5. Conclusiones

Se logró simular la dinámica de una partícula en un motor molecular tipo ratchet utilizando un potencial de diente de sierra y una fuerza externa periódica. Las gráficas de dinámica (Posición y Velocidad) confirman el comportamiento de **rectificación del movimiento**, donde la asimetría del potencial transforma la oscilación simétrica del *driving* en un desplazamiento neto. El método de Velocity Verlet permitió una integración estable, mientras que la evolución de la energía total demuestra que la fuerza externa está transfiriendo trabajo al sistema, resultando en un movimiento direccional.