FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN PARA LA N-ÉSIMA PARTÍCULA MÁS PRÓXIMA EN UNA COLECCIÓN AL AZAR

Por

Cacier Z. Hadad & Franklin Ferraro G. [1]

Resumen

Hadad, C.Z., & F. Ferraro-G.: Función de distribución para la n-ésima partícula más próxima en una colección al azar. Rev. Acad. Colomb. Cienc. **32**(122): 61-66, 2008. ISSN 0370-3908.

Para hallar expresiones o encontrar valores numéricos para algunas propiedades físicas y fisicoquímicas en sistemas en que las partículas se distribuyen totalmente al azar (o que pueden considerarse, con buen grado de aproximación, como si lo estuvieran) en algunas ocasiones es necesario disponer de las funciones de distribución de las n-ésimas partículas más próximas a alguna partícula genérica. Sin embargo, a nuestro conocimiento, no existe una fórmula generatriz que permita obtenerlas y sólo se dispone de expresiones particulares para las 4 primeras funciones, dos de las cuales se encuentran reportadas con errores. En este trabajo se deduce tal fórmula generatriz, se indica la manera de usarla, y, a modo de ejemplo, se listan y grafican las funciones particulares hasta el quinto orden.

Palabras clave: función de distribución radial, fórmula "generatriz", n-ésima partícula más cercana, distribución al azar.

Abstract

In order to find expressions or to find numerical values for some physical or physicochemical properties in systems in which particles are distributed totally at random (or that can be considered, in good approximation, as if they were) sometimes it is necessary to have distribution functions for the nth-nearest-neighbour particle around some generic one. To our knowledge, a general formula does not exist which allows obtain them. There are specific expressions reported for only the four first functions, a couple of which with some mistakes. In this paper such a general formula is derived, it is indicated how to use it, and the particular first five functions are listed, including their plots.

Key words: radial distribution function, "generatrix" formula, nth-nearest-neighbour particle, random distribution.

1 Grupo de Química-Física Teórica, Instituto de Química, Universidad de Antioquia. Calle 67 N° 53-108, bloque 2 oficina 337 - Apartado Aéreo 1226, Medellín, Colombia. E-mail: czhadad@matematicas.udea.edu.co

Introducción

Conocer la función de distribución espacial de partículas de algún sistema es fundamental para la resolución de algunos problemas físicos y fisicoquímicos en diferentes áreas del conocimiento (**S. Chandrasekhar,** 1943; **Hadad *et al.*,** 2003; **Inokuti *et al*,** 1965; **Tewari *et al.*** 2006; **Tonooka *et al.*,** 1997). Particularmente, existen varios sistemas en que las partículas se distribuyen totalmente al azar o pueden considerarse con buen grado de aproximación, como si lo estuvieran. (**Tonooka *et al.*,** 1997; **A. Tewari & A. M. Gokhale,** 2006; **M. Inokuti & F. Hirayama,** 1965; **C. Z. Hadad,** 2007) Consecuentemente, es muy importante disponer de alguna fórmula generatriz para obtener las funciones de distribución de las n-ésimas partículas más próximas a alguna partícula en una colección al azar. Sin embargo, a nuestro conocimiento no existe tal fórmula general y sólo se dispone de expresiones particulares para las 4 primeras funciones (**S. Chandrasekhar,** 1943; **K. Tonooka *et al.*,** 1997).

Fue Chandrasekhar quién primero mostró en 1943 (**S. Chandrasekhar,** 1943) para un problema de astrofísica, que la función de distribución radial para el primer vecino más cercano en una colección de partículas ubicadas al azar es:

$$F_1(r) = 4\pi c r^2 \exp\left(-4\pi c r^3/3\right) \quad (1),$$

en donde c es la densidad de partículas.

Por otro lado, Tonooka *et al*, (**Tonooka *et al.*,** 1997) trabajando en un modelo estadístico para la luminiscencia en sólidos amorfos, en que los centros ópticos pueden considerarse como distribuidos de manera aleatoria, dedujo las funciones de distribución para los 2^{os}, 3^{os}, 4^{os} vecinos más próximos. Sin embargo, aunque las gráficas de las funciones mostradas por el autor parecen ser correctas, las expresiones matemáticas reportadas contienen errores en las 3^{as} y 4^{as} funciones.

En este trabajo se deduce una fórmula de recurrencia para encontrar la función de distribución de la n-ésima partícula más próxima a alguna partícula en una colección al azar, en términos de la función inmediatamente anterior. Además se indica la manera de usarla, y, a modo de ejemplo, se obtienen las funciones, $F_n(r)$, para n = 2, 3, 4 y 5, corrigiendo con ello $F_3(r)$ y $F_4(r)$ listadas por Tonooka *et al* (**Tonooka *et al.*,** 1997).

Fórmula generatriz

En una distribución aleatoria de partículas en el espacio, la probabilidad de que la n-ésima partícula más próxima a una partícula esté ubicada entre r y $r+dr$, $F_n(r)dr$, es igual a la probabilidad de que no se encuentre entre 0 y r, $1-\int_0^r F_n(r_n)dr_n$, multiplicada por la probabilidad de encontrar cualquier partícula en la capa esférica entre r y $r+dr$, $F(r)dr$, y, además, en los casos $n \geq 2$, multiplicada por las probabilidades de encontrar a los $(n-1)$, $(n-2)$,...,1 -ésimas partículas más cercanas entre 0 y r, $\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}$, $\int_0^r F_{n-2}(r_{n-2})dr_{n-2}$, ..., $\int_0^r F_1(r_1)dr_1$, respectivamente. De esto se sigue que:

$$F_n(r) = \left(1-\int_0^r F_n(r_n)dr_n\right)\left(\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\right) \cdots \left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r), \quad (2)$$

En donde, de acuerdo a Chandrasekhar (**S. Chandrasekhar,** 1943):

$$F(r) = 4\pi c r^2, \quad (3)$$

Con c, concentración de partículas, como en (1).

De la expresión (2) se deduce:

$$-d\ln\left(1-\int_0^r F_n(r_n)dr_n\right) = \left(\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\right)\cdots \left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r)dr$$

Integrando esta última expresión entre 0 y r y aplicando la exponencial, se llega a:

$$1-\int_0^r F_n(r_n)dr_n = \exp\left[-\int_0^r\left(\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\right)\cdots\left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r)dr\right]$$

Introduciendo este resultado en (2) tenemos:

$$F_n(r) = \exp\left[-\int_0^r\left(\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\right)\cdots\left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r)dr\right]$$
$$\times\left(\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\right)\cdots\left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r), \qquad (4)$$

Desde la forma (2) aplicada a $F_{n-1}(r)$, se deduce para $\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}$:

$$\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1} = \frac{\left(\int_0^r F_{n-2}(r_{n-2})dr_{n-2}\right)\cdots\left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r) - F_{n-1}(r_{n-1})}{\left(\int_0^r F_{n-2}(r_{n-2})dr_{n-2}\right)\cdots\left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r)}$$

Reemplazando esta última expresión en el exponente de (4) y reordenando, $F_n(r)$, queda:

$$F_n(r) = \int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\exp\left[\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\right]$$
$$\times\left\{\exp\left[-\int_0^r\left(\int_0^r F_{n-2}(r_{n-2})dr_{n-2}\right)\cdots\left(\int_0^r F_1(r_1)dr_1\right)F(r)dr\right]\right.$$
$$\left.\times\left(\int_0^r F_{n-2}(r_{n-2})dr_{n-2}\cdots\int_0^r F_1(r_1)dr_1 F(r)\right)\right\}$$

De acuerdo a (4), la parte encerrada entre llaves en esta última expresión corresponde a $F_{n-1}(r)$, por lo tanto, la fórmula de recurrencia buscada es:

$$F_n(r) = F_{n-1}(r)\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\exp\left(\int_0^r F_{n-1}(r_{n-1})dr_{n-1}\right),\ n \geq 2, \qquad (5)$$

Nótese que para $n = 1$, la fórmula generatriz se alcanza tempranamente desde (4):

$$F_1(r) = F(r)\exp\left(-\int_0^r F(r)dr\right), \qquad (6)$$

Modo de aplicación

A modo de ejemplo, calculemos $F_n(r)$ para $n = 2, 3, 4$ y 5. La fórmula de recurrencia (5) debe emplearse en conjunto con la definición de $F_n(r)$ (ecuación 2), pero aplicada a $F_{n-1}(r)$. Así, en el cálculo de $F_2(r)$ debemos obtener previamente $\int_0^r F_1(r_1)dr_1$, utilizando la ecuación (2) para F_1:

$$\int_0^r F_{1^\circ}(r_1)dr_1 = \left(1 - \frac{F_{1^\circ}(r)}{F(r)}\right) = \frac{F(r) - F_{1^\circ}(r)}{F(r)} = 1 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right), \qquad (7),$$

en donde se ha empleado (1) y (3). Introduciendo este resultado y la expresión (1) en la ecuación (5) para $n = 2$, obtenemos:

$$F_2(r) = 4\pi cr^2 \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\left[1 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right]\exp\left[1 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right], \qquad (8).$$

Por medio de este camino es posible deducir fácilmente las restantes funciones. Las fórmulas extendidas para las siguientes tres son las siguientes:

$$\begin{aligned} F_3(r) = 4\pi cr^2 &\left\{1 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right\}\left\{1 - \exp\left[1 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right]\right\} \\ &\times \exp\left[2 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right) - \exp\left(1 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right)\right], \quad (9), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} F_4(r) = 4\pi cr^2 &\left\{1 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right\}\left\{1 - \exp\left[1 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right]\right\} \\ &\times \left\{1 - \exp\left[2 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right) - \exp\left(1 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right)\right]\right\} \\ &\times \exp\left[3 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right) - \exp\left(1 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right)\right] \\ &\times \exp\left[-\exp\left(2 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right.\right. \\ &\left.\left. - \exp\left(1 - 4\pi cr^3/3 - \exp\left(-4\pi cr^3/3\right)\right)\right)\right], \quad (10), \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
F_5(r) = 4\pi c r^2 &\{1 - \exp[-4\pi c r^3/3]\}\{1 - \exp[1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3)]\} \\
&\times \{1 - \exp[2 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3) - \exp(1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3))]\} \\
&\times \{1 - \exp[3 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3) - \exp(1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3))]\} \\
&\times \exp\Big[-\exp\big(2 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3) \\
&\qquad - \exp\big(1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3)\big)\big)\Big] \\
&\times \exp[4 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3) - \exp(1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3))] \\
&\times \exp\left[-\exp\left(2 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3) - \exp\left(1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3)\right)\right)\right] \\
&\times \exp\left[-\exp\left(3 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3) - \exp\left(1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3)\right)\right)\right] \\
&\times \exp\Big[-\exp\Big(-\exp\big(2 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3) \\
&\qquad - \exp\big(1 - 4\pi c r^3/3 - \exp(-4\pi c r^3/3)\big)\big)\Big)\Big], \qquad (11).
\end{aligned}
$$

En la figura 1 se muestran las gráficas de estas funciones. Las expresiones (9) y (10) corrigen las fórmulas reportadas en el apéndice A del artículo de Tonooka *et al* (**Tonooka *et al.*** 1997).

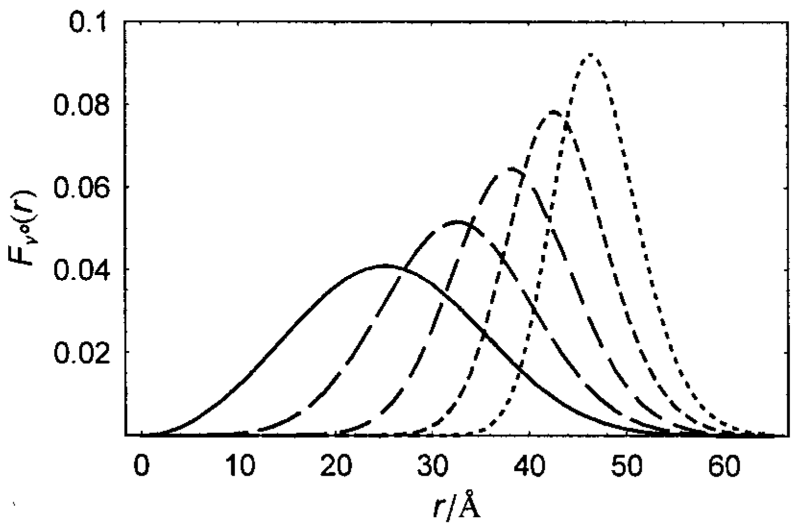

Figura 1. Diagrama para las primeras 5 funciones de distribución, con $c = 10^{-5}$ *partículas/Å*^{3} en las expresiones (1), (8)-(11). La curva sólida es para $F_1(r)$, mientras que las curvas de segmentos corresponden a las restantes funciones, en dónde se disminuye el grosor del segmento a medida que se avanza en la secuencia $\nu = 2,3,4,5$ de $F_\nu(r)$.

Conclusiones

Este trabajo demostró que es factible disponer de una fórmula generatriz de recurrencia para obtener las funciones de distribución de las n-ésimas partículas más próximas a alguna partícula genérica y que dicha fórmula es fácil de utilizar. Además, una mirada de las funciones (8)-(11) permite ver que su extensión y grado de complejidad aumenta con el orden de la función, lo cual indica que es conveniente disponer de la fórmula generatriz nombrada. Por otro lado, la explicitación de la tercera y cuarta función permite demostrar, al compararla con las expresiones listadas por Tonooka *et al* (**Tonooka *et al.*,** 1997), que efectivamente estas últimas contienen errores en algunos de sus términos.

Agradecimientos

Agradecemos a la Universidad de Antioquia, Colombia. CZH agradece a CONICYT y a FONDECYT de Chile.

Referencias

1 **Chandrasekhar, S.** 1943. Stochastic problems in physics and astronomy. Rev. Mod. Phys. **15:** 86-87.

2 **Tonooka, K. Yamada, K., Kato, Y., Hayakawa, T. & Kamata, N.** 1997. Theory of donor fluorescence governed by discrete energy transfers between rare-earth ions in glasses J. Opt. Soc. Am. B. **14,** 713-721.

3 **Tewari, A. & Gokhale, A. M.** 2006. Nearest-neighbor distributions in thin films, sheets, and plates. Acta Mater. 54: 1957-1963.

4 **Inokuti M. & Hirayama, F**. 1965. Influence of energy transfer by the exchange mechanism on donor luminescence. J. Chem. Phys. **43:** 1978-1989.

5 **Hadad, C. Z. & Vásquez, S. O.** 2003. Statistical approach to the transient up-converted population in monodoped amorphous solids. Chem. Phys. **5:** 3027-3033.

Recibido: noviembre 3 de 2006

Aceptado para su publicación: marzo 7 de 2008