Sobre el oscilador logarítmico como termostato

Marc Meléndez Schofield*
Dpto. Física Fundamental UNED. Senda del Rey, 9, 28040 Madrid

Campisi, Zhan, Talkner y Hänggi han propuesto el uso del oscilador logarítmico como termostato, tanto en simulaciones numéricas como en sistemas experimentales pequeños, tales como clusters de átomos[1]. Un oscilador logarítmico no es más que una masa puntual m en el seno de un potencial central logarítmico. El hamiltoniano del sistema es

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + k_B T \ln\left(\frac{\|q\|}{b}\right)$$

donde $k_B T$ y b son parámetros arbitrarios del sistema. El factor que multiplica al logaritmo se escribe como $k_B T$ debido a que el promedio temporal de la energía cinética resulta ser para este sistema

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_t = \frac{1}{2} k_B T,$$

(siendo $k_B T$ *precisamente* el valor introducido en el hamiltoniano). Esto significa que la "temperatura" del oscilador es igual a T independientemente de su energía E. Basándose en esta propiedad, Campisi y sus colaboradores han demostrado que, si el oscilador interacciona de manera débil con un sistema de interés, entonces acaba induciendo en éste una dinámica que muestrea los estados de la colectividad canónica. Este "termostato" presenta, por tanto, dos características muy atractivas: primero, tiene una dinámica hamiltoniana determinista[2] relativamente sencilla, y, segundo, se pueden diseñar en principio experimentos en los que una partícula física se comporta de forma parecida a un baño térmico[1].

En las simulaciones numéricas, se puede evitar la singularidad en el potencial aproximando el hamiltoniano expuesto más arriba mediante

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k_B T \ln\left(\frac{\|q\|^2 + b^2}{b^2}\right),$$

que da lugar a trayectorias en el espacio de fases como las que se muestran en la figura.

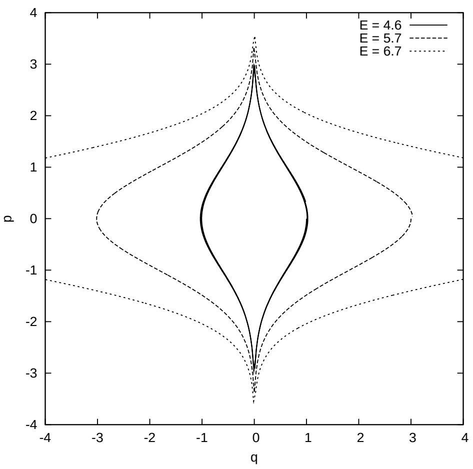

FIG. 1. Trayectorias aproximadas del oscilador logarítmico en el espacio de fases para diferentes valores de la energía E ($k_B T = 1$ y $b = 10^{-2}$).

Sin embargo, nuestro análisis revela que el oscilador logarítmico no puede utilizarse en la práctica como termostato debido a que las elongaciones máximas $q_{max.}$ y los periodos entre dos estados de máxima elongación Δt dependen exponencialmente de la energía E del oscilador.

$$q_{max.} \propto b e^{\beta E},$$

$$\Delta t \propto b e^{\beta E},$$

donde $\beta = (k_B T)^{-1}$. Por lo tanto, cuando el oscilador absorbe energía del sistema que se desea simular, se aleja progresivamente de él y realiza revoluciones cada vez más lentas, lo cual provoca una convergencia extremadamente lenta a la temperatura de equilibrio deseada.

---

* mmelendez@fisfun.uned.es

[1] M. Campisi, F. Zhan, P. Talkner and P. Hänggi, *Logarithmic oscillators: Ideal Hamiltonian Thermostats*, arχiv 1203.5968v3 (2012) [cond-mat.stat-mech].

[2] M. Campisi, F. Zhan, P. Talkner and P. Hänggi, *Reply to Hoover [arXiv: 1204.0312v2]*, arχiv 1204-4412v1 (2012) [cond-mat.stat-mech].