

Teorema de equipartición generalizado: versión tensorial

Gonzalo Gutiérrez*, Sergio Davis,

Grupo de NanoMateriales, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Casilla 653, Santiago, Chile.

El teorema de equipartición de energía, así como el teorema del virial, es una relación muy útil en mecánica estadística para estimar los valores medios de magnitudes físicas. Por ejemplo, en simulación computacional a nivel atómico, éste permite asignar temperatura un sistema (o a parte de él) en términos de la energía cinética de sus elementos constituyentes (átomos o moléculas). De aquí surgen varias preguntas fundamentales, tales como ¿es siempre posible hacer esta asignación? ¿depende del número de átomos? ¿depende del tipo de interacción? ¿cuántas muestras se requieren para obtener una buena estimación?, entre otras. En esta comunicación presentamos una generalización tensorial del teorema de equipartición de energía basado en resultado previo[1], que nos permite escribir el inverso de la temperatura, $\beta = 1/k_B T$, como un promedio sobre ensemble:

$$\beta = \frac{\langle \partial_\ell T^{ijk\dots} \rangle}{\langle T^{ijk\dots} \partial_\ell H \rangle}, \quad (1)$$

donde $T^{ijk\dots}$ es un campo tensorial arbitra-

rio y H es el hamiltoniano del sistema. Considerando la parte simétrica o antisimétrica del tensor $\partial_\ell T^{ijk\dots}$ (con respecto a los índices ℓ, i), se deducen dos ecuaciones independientes. A partir de ellas se pueden construir diferentes familias de estimadores de β , según sea la elección del campo tensorial $T^{ijk\dots}$. Esto otorga una gran libertad para obtener estimadores de la temperatura, pues el campo tensorial se puede construir a partir de las variables dinámicas del problema (por ejemplo p y q), pudiendo ser de cualquier rango. De esta manera, la ecuación (1) es una generalización del resultado tensorial obtenido antes[2].

Agradecimientos: GG agradece apoyo parcial de Fondecyt 1120603. SD agradece apoyo de Fondecyt 1140514.

Referencias

- [1] S. Davis and G. Gutiérrez, Physical Review E **86**, 051136 (2012).
- [2] E. N. Parker, Physical Review **96**, 1686 (1954).

*Email: gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl