

Temperatura en sistemas finitos

Cesar Jara^{1*}, Felipe González¹, Sergio Davis¹, Gonzalo Gutiérrez¹

¹ Grupo de NanoMateriales, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Casilla 653, Santiago, Chile.

Usualmente, el cálculo de la temperatura en simulaciones computacionales hace uso del teorema de equipartición para definirla en cada instante:

$$K(t) = \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2(t) = \frac{3}{2} N k_B T.$$

Asumiendo la hipótesis ergódica, se espera que el promedio temporal $\langle K \rangle$ converja a la temperatura del sistema en equilibrio. Sin embargo, en sistemas finitos y sistemas fuera del equilibrio la temperatura no está bien definida ya que el teorema de equipartición no es necesariamente válido. Recientes trabajos han mostrado que la temperatura puede ser evaluada de otras formas, en particular, usando sólo las coordenadas de posiciones (configuracionales) en lugar de las coordenadas de velocidad a partir de relaciones que involucran derivadas espaciales del hamiltoniano del sistema. Existe una familia de estimadores configuracionales de la temperatura obtenidos del teorema CVT [1]:

$$\langle \nabla \cdot \vec{v} \rangle = \beta \langle \vec{v} \cdot \nabla \mathcal{H} \rangle,$$

donde \vec{v} es un campo vectorial cualquiera y $\beta = 1/(k_b T)$.

En este trabajo se ha estudiado el comportamiento de distintos estimadores de la

temperatura y sus fluctuaciones mediante simulaciones de dinámica molecular clásica [2] de Ar, modelando la interacción interatómica con un potencial de Lennard-Jones:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

donde r denota la separación entre dos átomos, mientras que σ y ϵ son los parámetros de distancia y energía correspondientes al argón [3], respectivamente. Se ha encontrado que para tiempos de simulación suficientemente largos, los distintos estimadores de temperatura convergen al mismo valor, mientras que las fluctuaciones no son las mismas para cada estimador.

Gonzalo Gutiérrez agradece a Proyecto Fondecyt 1120603.

Referencias

- [1] S. Davis and G. Gutiérrez, Physical Review E, **86**, 051136 (2012).
- [2] S. Davis, C. Loyola, F. González y J. Peralta, Computer Physics Communications, **181**, 21262139 (2010).
- [3] C.Kittel, Introduction to Solid State Physics, 53 (University of California, Berkeley, 2005)

*Email: cesar.jara.uchile@gmail.com