Sobre el oscilador logarítmico como termostato

Marc Meléndez*†, William G. Hoover‡, Pep Español†

*mmelendez@fisfun.uned.es

†Departamento de Física Fundamental, UNED
c/ Senda del Rey, 9
28080 Madrid

‡Ruby Valley Research Institute
Highway Contract 60 Box 601
Ruby Valley 89833-9803 Nevada

Abstract: Campisi, Zhan, Talkner y Hänggi han propuesto recientemente el uso del oscilador logarítmico como termostato, tanto en simulaciones numéricas como en sistemas experimentales pequeños, tales como clusters de átomos [1]. Sin embargo, nuestro análisis revela que este método no puede utilizarse en la práctica como termostato debido a que las elongaciones máximas y los periodos entre dos estados de máxima elongación dependen exponencialmente de la energía del oscilador.

El oscilador logarítmico

Un oscilador logarítmico no es más que una masa puntual m en el seno de un potencial central logarítmico. En d dimensiones, el hamiltoniano es

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

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

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

(siendo $k_B T$ *precisamente* el valor introducido en el hamiltoniano).

Dado que la “temperatura” del oscilador es igual a T independientemente de su energía E, Campisi y sus colaboradores han propuesto utilizarlo como “termostato”, puesto que, haciendo que el oscilador interaccione de manera débil con un sistema de interés, se puede demostrar que la dinámica de éste muestrea los estados de la colectividad canónica [1].

El cálculo de la temperatura cinética media $\langle \boldsymbol{p}^2/2m \rangle_t$, aunque correcto, tiene aplicaciones prácticas muy limitadas debido a que el resultado $d k_B T/2$ se obtiene solamente en el límite cuando $t \to \infty$ [2]. Como el periodo de oscilación depende exponencialmente de la energía absorbida (*cf. infra*), la acción del termostato logarítmico es demasiado lenta para la mayoría de las aplicaciones.

Los inconvenientes del termostato logarítmico

Si dejamos de lado el problema de la singularidad en $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}$ (ver el apartado de simulaciones numéricas), un oscilador logarítmico unidimensional recorre un segmento limitado por las coordenadas $q_\pm = \pm b \exp\{\beta E\}$ con periodo

$$t_{orb.} = \sqrt{\frac{8\pi m}{k_B T}}\, b e^{\beta E}.$$

Para movimientos en más dimensiones, las trayectorias generalmente no son cerradas, pero se mantiene la dependencia *exponencial* entre los puntos de máxima elongación y la energía, $r_{máx.} \propto b \exp\{\beta E/d\}$. Análogamente, $t_\pm \propto b \exp\{\beta E/d\}$.

Dispositivos experimentales

El trabajo original de Nosé que dio lugar al conocido termostato de Nosé-Hoover incluía un grado de libertad ficticio en un potencial logarítmico, pero en [1] se sugiere un experimento en el que esta coordenada adicional es física: en un gas de N átomos neutros confinados en una caja donde se ha creado un potencial logarítmico, los átomos interaccionan débilmente con un ión (el oscilador logarítmico) que hace las veces de termostato. Evidentemente, no es posible reproducir experimentalmente la singularidad del potencial en el origen $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}$, así que supondremos que el campo experimental se aparta del teórico en un entorno muy pequeño (para $r < \sigma$, siendo σ el diámetro del ión).

Si se deseara enfriar el gas desde una temperatura de 3 K a 1 K, por ejemplo, el oscilador logarítmico tendría que absorber $\Delta E = 3 N k_B$ unidades de energía, lo cual conlleva un aumento del radio de máxima elongación $\Delta r_{máx.} = r_{máx.}(\exp\{N\} - 1)$. Si el valor inicial de $r_{máx.}$ fuera igual a $\sigma \sim 10^{-10}$ m, el proceso de enfriado exigiría una caja mayor que el diámetro de la tierra para unas pocas decenas de átomos de gas [2].

La ausencia de una singularidad en el experimento provoca desviaciones respecto de la colectividad canónica que se desea reproducir. Estas desviaciones se reducen al aumentar la energía E_{tot} del sistema (gas + oscilador). No obstante, se estima en [1] que una aproximación válida exige que $E_{tot} \propto 3 N k_B T/2$. Estos valores de la energía implican dispositivos experimentales mayores que el diámetro de la tierra a partir de sólo 26 átomos [3].

El tiempo libre medio estimado del oscilador en estos ejemplos,

$$\tau \sim \sqrt{\frac{m}{k_B T}\frac{L^2 \sigma}{4\pi N \sigma^2}} \sim 10^{19}\,\mathrm{s},$$

resulta ser mayor que la edad del universo [3].

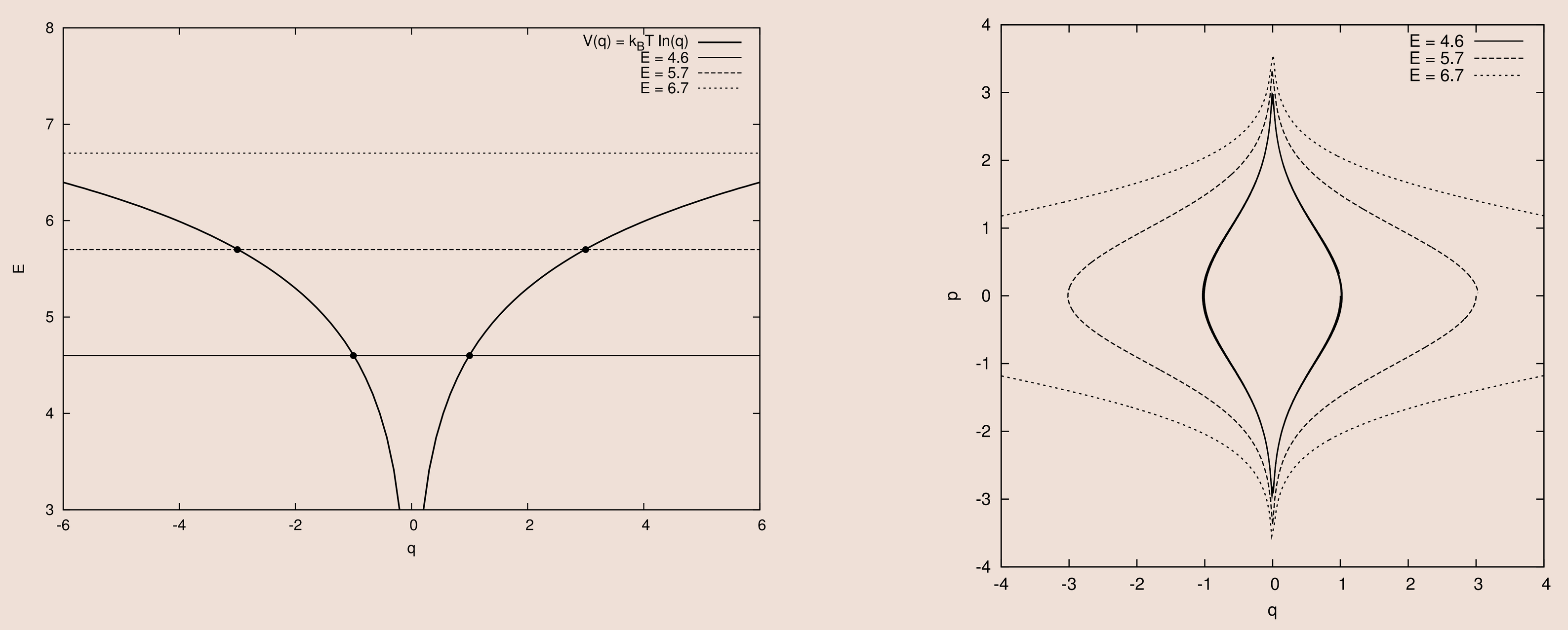

Figura: *Izquierda*: Potencial (*línea gruesa*) y elongaciones máximas (*puntos*) para diferentes valores de la energía E. *Derecha*: Las correspondientes trayectorias aproximadas de un oscilador logarítmico unidimensional en el espacio de fases ($k_B T = 1$, $b = 10^{-2}$).

Simulaciones numéricas

La singularidad del potencial logarítmico en $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}$ se puede evitar utilizando un potencial aproximado

$$\widetilde{H}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} d k_B T \ln\left(\frac{\|\boldsymbol{r}\|^2}{b^2} + 1\right).$$

$\widetilde{H}$ tiende al hamiltoniano original H cuando $b \to 0$. Ahora bien, si hay una cota L para elongación máxima del oscilador (si está, por ejemplo, contenido en una caja), entonces sólo puede intercambiar como máximo $k_B T \ln\left(L^2/b^2 + 1\right)$ unidades de energía con otro sistema. Dado que las fluctuaciones en la energía para sistemas descritos por la colectividad canónica es del orden de $\Delta E \sim 3 k_B T \sqrt{N}/2$, se debe escoger $b \sim L/\exp\left\{\sqrt{N}/2\right\}$. Para valores grandes de N, los fuertes gradientes localizados cerca del origen normalmente exigirán un algoritmo con pasos de integración extremadamente pequeños [2].

Campisi *et al.* sugirieron también que podría aplicarse el termostato logarítmico a sistemas fuera del equilibrio. Sin embargo, en simulaciones llevadas a cabo conectando los dos extremos de una cadena ϕ^4 a termostatos logarítmicos de temperaturas diferentes no se observó ninguna tendencia hacia el gradiente térmico lineal que teóricamente se debería obtener [3].

En cualquier caso, el inconveniente principal del termostato logarítmico consiste en que el tiempo de computación se vuelve prohibitivo en cuanto el número de partículas involucradas supera unas cuantas decenas [3].

Referencias

[1] M. Campisi, F. Zhan, P. Talkner, P. Hänggi: *Logarithmic Oscillators: Ideal Hamiltonian Thermostats*, Phys. Rev. Lett. **108**, 250601 (2012).

[2] M. Meléndez: *On the logarithmic oscillator as a thermostat*, arχiv:1205.3478 [cond-mat.stat-mech] (2012).

[3] M. Meléndez, Wm. G. Hoover, P. Español: *Comment on “Logarithmic Oscillators: Ideal Hamiltonian Thermostats”*, Phys. Rev. Lett., *pendiente*.