

Inhomogeneidad anómala en sistemas con condiciones de contorno periódicas

J. A. White, F. L. Román*, A. González y S. Velasco

Departamento de Física Aplicada, Universidad de Salamanca, 37008 Salamanca

La colectividad de la Mecánica Estadística correspondiente a las simulaciones mediante dinámica molecular de sistemas en equilibrio es diferente de la microcanónica ó *EVN*, donde E , V y N son, respectivamente, la energía, el volumen y el número de partículas del sistema. Históricamente las simulaciones de dinámica molecular han sido asociadas a la colectividad *EVNM*, donde \mathbf{M} es el momento lineal total del sistema que permanece constante. Recientemente,^{1,2} se ha puesto de manifiesto la existencia de otra magnitud física conservada \mathbf{G} , relacionada con el centro de masa del sistema. En particular, la consideración de condiciones de contorno periódicas en las simulaciones de dinámica molecular inducen la localización del centro de masas del sistema en una red discreta. El paso de dicha red está relacionado con la razón entre las masas de las partículas que componen el sistema. Esta localización del centro de masa introduce una correlación entre las posiciones de las partículas y modifica la densidad del sistema de manera que deja de ser uniforme. De esta manera un sistema que a priori podría ser considerado como homogéneo presenta, sorprendentemente, una inhomogeneidad provocada por las condiciones de contorno periódicas.

En este trabajo estudiaremos los perfiles de densidad de sistemas de discos duros conteniendo pocas partículas en la colectividad de dinámica molecular *EVNMG*. En la figura 1 se presentan los perfiles de densidad de un sistema de discos duros de la misma masa conteniendo 2 (a), 3 (b) y 4 (c) discos. En todos los casos la energía del sistema fue $E = 1$, su momento lineal total $\mathbf{M} = \mathbf{0}$ y el tamaño del sistema fue $L^2 = 3 \times 3 \sigma^2$ donde σ es el diámetro de los discos. Los perfiles de densidad muestran que, en efecto, dichos sistemas presentan una gran inhomogeneidad que se atenúa a medida que crece el número de partículas³.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio de Educación y Ciencia de España a través de los proyectos FIS2005-05081 FEDER y FIS2006-03764 FEDER.

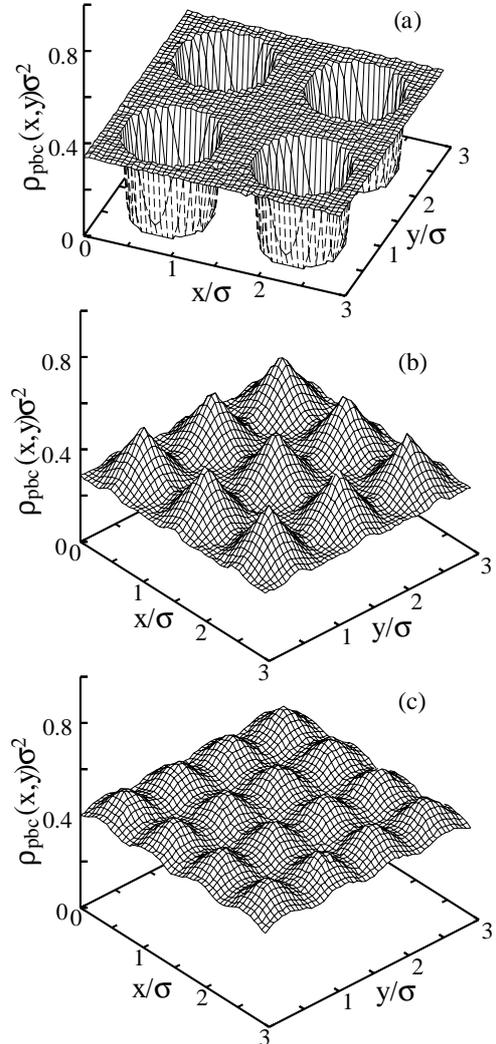


Figura 1. Densidad de un sistema de discos duros con condiciones de contorno periódicas. El número de partículas del sistema fue a) $N = 2$, b) $N = 3$ y c) $N = 4$.

* romanh@usal.es

¹ J. R. Ray y H. Zang, Phys. Rev. E **59**, 4781 (1999).

² W. W. Wood, J. J. Erpenbeck, G. A. Barker Jr. y J. D. Johnson, Phys. Rev. E **63**, 011106 (2000).

³ J. A. White, F. L. Román, A. González y S. Velasco, *enviado*