

COMPARISON OF DIFFERENT THERMOSTATS IN THE HOLSTEIN MODEL

N. Fialko *, *M. Olshevets*, *V. D. Lakhno*

Institute of Mathematical Problems of Biology of RAS — the Branch of Keldysh
Institute of Applied Mathematics of RAS, Pushchino, Russia

When modeling charge dynamics in a chain of N sites at a temperature T , a Langevin thermostat and a Hamiltonian system, i.e., a chain heated to a given temperature before charge is injected, are compared. It is shown that the polaron disruption occurs in the same range of values of the thermal energy NT , however, T is not given by the initial data, but obtained after simulation from the average kinetic energy. For large T , the results averaged over a set of trajectories in a system with a Langevin thermostat and the results averaged over time for a Hamiltonian system are close, which does not contradict the ergodic hypothesis.

В задаче моделирования динамики заряда в цепочке из N сайтов при температуре T сравниваются термостат Ланжевена и гамильтонова система — цепочка, разогретая до внесения заряда до заданной температуры. Показано, что разрушение полярона происходит в одинаковой области значений тепловой энергии NT , однако T — не заданная начальными данными, а полученная после расчета из средней кинетической энергии. Для больших значений T результаты, усредненные по набору траекторий в системе с термостатом Ланжевена, и результаты, усредненные по времени для гамильтоновой системы, близки, что не противоречит гипотезе эргодичности.

PACS: 05.10.Gg

* E-mail: fialka@impb.ru