

一维原子链的热导模拟

蒋城欢, 刘红

(南京师范大学物理科学与技术学院 江苏 南京 210097)

[摘要] 提出新的碰撞模型, 通过模拟几种只含两种质量粒子的一维链的能量传递, 研究质量分布对热导的影响. 得出的 $T-N$ 图显示质量比在 1 到 3 之间时, 链上的温度分布存在部分梯度, 当质量比大于 3 时, 链上粒子的温度分布不存在梯度, 整体处于单一温度值 T 附近, 而且平均温度仅与链上粒子的质量分布有关.

[关键词] 一维链, 双原子链, Fibonacci 链, Period-doubling 链, Thue-Morse 链

[中图分类号] O551 [文献标识码] A [文章编号] 1001-4616(2006)03-0036-04

Simulation of Heat Conduction in One-dimensional Chains

Jiang Chenghuan, Liu Hong

(School of Physical Science and Technology, Nanjing Normal University, Nanjing 210097, China)

Abstract A new collision model was put forward, the influence of mass distribution on the heat conduction was studied through simulating the energy transportation in some one-dimensional chains which only have two different masses. The calculated $T-N$ profiles show that it has gradient characteristic in the temperature distribution when the mass ratio is between 1 and 3. However, for larger mass ratio, the gradient in several chains no longer exist, and the whole chain is near a stable average temperature. Moreover, it is found that the average temperature is only relative to mass distribution.

Key words one-dimensional chain, double-atom chain, Fibonacci chain, Period-doubling chain, Thue-Morse chain

0 引言

当材料的两端存在温度梯度, 则热量会从高温端传向低温端. 若材料是均匀的块体, 则从高温端到低温端温度是线性变化的, 即存在温度梯度. 但是对于低维系统往往出现与高维系统不同的性质. 近些年来, 由 Newton 动力学进行演化的低维系统的热导研究吸引了很多人的兴趣. 热导与系统的大小究竟有没有关系? 热导与决定它的微观动力学的联系又是什么? 为了研究低维系统的热传递, 人们提出了很多模型, 诸如谐振链模型、单原子 Toda 模型、F-K 模型^[1]、离散 ϕ^4 模型^[2]、Lorentz 模型^[3]、FPU 模型^[4,5]、双原子 Toda 模型^[6]等等, 发现采用的模型不同, 会得到不同的结论, 有的不存在温度梯度, 有的则存在温度梯度. 这些模型都是同一类原子在相互作用势下的模型. 由于气体中能量的传递是靠气体分子之间的完全弹性碰撞进行的, Dhar A^[7]曾通过气体分子弹性碰撞模拟不同质量的一维无序气体原子链的热导问题, 发现当两种原子的质量差别很小, 接近 1 时, 模拟结果显示存在一个非平庸的稳定态, 但是对于原子质量差别较大时, 以及准周期质量分布的一维原子链的热导问题研究结果很少.

本文提出气体分子弹性碰撞模型, 并考虑气体分子运动的热效应及热力学第二定律等因素, 结合统计平均的方法模拟单原子链、双原子链、准周期性的 Fibonacci 链、广义 Fibonacci 链、Period-doubling 链和 Thue-Morse 链及无序链的热导, 研究质量分布对热导的影响.

收稿日期: 2005-11-01.
基金项目: 江苏省教育厅自然科学基金资助项目(04KJB140065).
作者简介: 蒋城欢, 女, 1982—, 硕士研究生, 主要从事凝聚态物理的学习与研究. E-mail: jchenghuan249@163.com
通讯联系人: 刘红, 女, 1969—, 副教授, 主要从事凝聚态物理的教学与研究. E-mail: liuhong3@njnu.edu.cn

1 模型描述

我们从气体分子通过弹性碰撞传递能量得到启发,采用分子弹性碰撞模型来研究一维链中能量的传递情况,进而得到原子链上各点温度分布,即 $T-N$ 图。

首先,有一维的宽度均匀分布的 N 个格子,每个格子中有 1 个粒子,因此粒子也是均匀分布的,设第 i 个格子中粒子的质量为 m_i (质量单位 = k_B , k_B 为玻尔兹曼常数),并假设粒子间无其他相互作用,每个粒子的速度均取为其热平衡时的平均速度,速度的方向随机选取,若对第 i 个粒子产生的随机数 $\xi_i < \rho$,第 i 个粒子速度方向向左,若 $\xi_i > \rho$,则向右。

若一维链的两端存在温度差,即第 1 个粒子和第 N 个粒子分别与高温热源 T_L 和低温热源 T_R 相接触 ($T_L > T_R$),两个端点的速度与温度之间满足如下的热力学关系:

$$v_1 = \sqrt{\frac{k_B T}{m_1}}, v_N = \sqrt{\frac{k_B T}{m_N}}.$$

除端点两个粒子外,当一维原子链处于热动平衡时,第 i 个粒子的速度与温度满足如下的热力学关系:

$$\frac{1}{2} m_i \langle v_i^2 \rangle = \frac{1}{2} kT,$$

其中 $\langle v_i^2 \rangle$ 为第 i 个粒子热平衡时的速度平方的统计平均。

假设一维原子链中热量是通过粒子间的完全弹性碰撞传递的,即考虑两个前后相邻的粒子,第 $i-1$ 个与第 i 个粒子,速度的方向由随机数 ξ_{i-1} 和 ξ_i 确定,采用如下的方法让粒子实现碰撞,令

$$\frac{m_i}{m_{i-1}} = \gamma,$$

碰撞前速度大小分别为 $v_{i-1,0}$ 和 $v_{i,0}$,则碰撞后速度大小 v_{i-1} 和 v_i 由以下 4 种情况分别进行计算:

(I) $\xi_{i-1} < \rho$, $\xi_i > \rho$,第 $i-1$ 个粒子向左,第 i 个粒子向右,两粒子不相碰,速度保持不变,

$$v_{i-1} = v_{i-1,0}, v_i = v_{i,0}.$$

(II) $\xi_{i-1} < \rho$, $\xi_i < \rho$,第 $i-1$ 个粒子向左,第 i 个粒子向左,

a. 若 $v_{i-1} > v_i$,两粒子不相碰,速度保持不变,

$$v_{i-1} = v_{i-1,0}, v_i = v_{i,0}.$$

b. 若 $v_{i-1} < v_i$,两粒子相碰,且是同方向追尾碰撞,

$$v_{i-1} = \frac{2\gamma v_{i,0} + (1-\gamma)v_{i-1,0}}{1+\gamma}, v_i = \frac{(\gamma-1)v_{i,0} + 2v_{i-1,0}}{1+\gamma}.$$

(III) $\xi_{i-1} > \rho$, $\xi_i > \rho$,第 $i-1$ 个粒子向右,第 i 个粒子向右,

a. 若 $v_{i-1} > v_i$,两粒子相碰,且是同方向追尾碰撞,

$$v_{i-1} = \frac{2\gamma v_{i,0} + (1-\gamma)v_{i-1,0}}{1+\gamma}, v_i = \frac{(\gamma-1)v_{i,0} + 2v_{i-1,0}}{1+\gamma}.$$

b. 若 $v_{i-1} < v_i$,两粒子不相碰,速度保持不变,

$$v_{i-1} = v_{i-1,0}, v_i = v_{i,0}.$$

(IV) $\xi_{i-1} > \rho$, $\xi_i < \rho$,第 $i-1$ 个粒子向右,第 i 个粒子向左,两粒子相碰,且是对碰,

$$v_{i-1} = \frac{-2\gamma v_{i,0} + (1-\gamma)v_{i-1,0}}{1+\gamma}, v_i = \frac{(1-\gamma)v_{i,0} + 2v_{i-1,0}}{1+\gamma}.$$

在碰撞过程中,粒子是从高温端向低温端的顺序进行碰撞的.每个粒子都要与左右两个粒子进行碰撞,碰撞的先后顺序由左右两个粒子的温度决定.每个粒子先与温度高的相邻粒子碰撞,碰撞后,不经过热平衡处理,即仍保持速度方向不变,继续与另一相邻粒子碰撞.考虑热力学第二定律,热量不能自动由低温传向高温,所以在模拟中我们加入碰撞限制条件,能量只能从高温粒子传向低温粒子,取消不符合此条件的碰撞。

2 模拟结果与讨论

粒子总数取为 $N = 200$, $T_L = 400$ K, $T_R = 300$ K, ρ 取为 0.5,即粒子向右运动和向左运动的概率相同。

万方数据

初始时,一维链未与热源接触,链上各原子温度为零,当接触热源后,经过足够多次的碰撞,即 450 万次碰撞,一维链处于热动平衡状态后,开始统计每个粒子速度平方的平均值,统计碰撞次数达到 50 万次,进而得出每个粒子的温度,画出温度-粒子数图像.用上述模型可以分别研究以下几种一维原子链:单原子链、双原子链、准周期性的 Fibonacci 链、广义 Fibonacci 链、Period-doubling 链和 Thue-Morse 链.

- (I) 双原子链的序列为 $ABABAB\dots$
- (II) Fibonacci 链的序列是由规则 $A\rightarrow AB, B\rightarrow A$ 从单个元素(如 A)产生的,这样产生的序列为: $ABAABABA\dots$
- (III) 第一类广义 Fibonacci 链的序列是由规则 $A\rightarrow A^m B, B\rightarrow A$ 从单个元素(如 A)产生的, $m=1$ 时就是 Fibonacci 序列. $m=2$ 的第一类广义 Fibonacci 序列为 $AABAABA\dots$
- (IV) Period-doubling 链的序列是由规则 $A\rightarrow AB, B\rightarrow AA$ 从单个元素(如 A)产生的,这样产生的序列为 $ABAAABAB\dots$
- (V) Thue-Morse 链的序列是由规则 $A\rightarrow AB, B\rightarrow BA$ 从单个元素(如 A)产生的,这样产生的序列为: $ABBABAAB\dots$

这里把 A 看作大质量粒子, B 看作小质量粒子,粒子按这些序列排列即形成质量分布不同的一维链.令小质量粒子质量为一个质量单位,大质量粒子与小质量粒子的质量比为 δ .

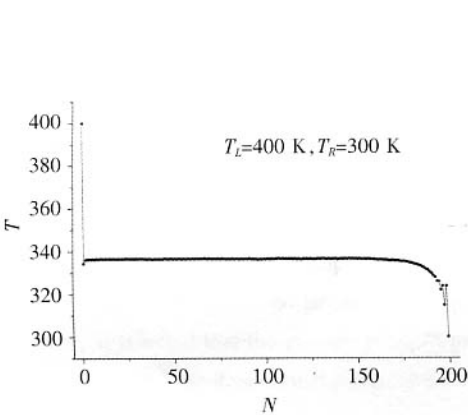


图 1 单原子链的 $T-N$ 图

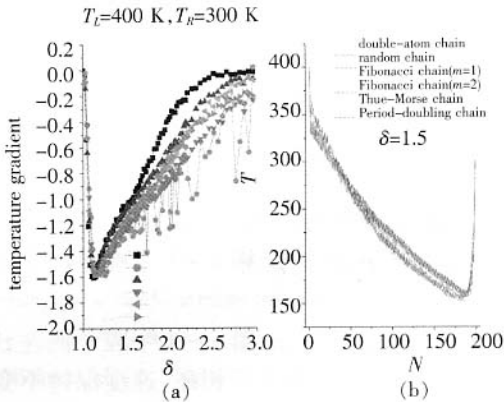


图 2 质量比较小时,几种原子链的温度梯度随质量比的变化及温度分布情况

对于一维单原子链,模拟结果显示于图 1.可看出,单原子链的温度分布无梯度变化,这一结果与谐振链模型和单原子 Toda 模型^[8]的结果相似,与 Dhar A 的结果也类似^[7].除端口几个原子外,整体处于单一温度值 T_C . T_C 与两端热源温度的关系通过数值拟合得到下述关系式:

$$T_C=0.365\,326T_L+0.634\,674T_R.$$

无论热源温度以及温度差值为多少,原子链的温度总遵循此关系.若在我们模拟碰撞的过程中,固定碰撞顺序,即粒子先与左端粒子碰撞,然后再与右端粒子碰撞,则模拟结果显示单原子链的温度分布呈梯度分布.这一结果说明,产生温度分布无梯度变化的原因,是由于两端热源同时向中间各低温粒子传递能量,可能导致粒子间对碰,反而导致粒子温度降低,最终导致温度不能按梯度分布.即这两种能量传递共同竞争导致温度分布不成梯度,中间各粒子的温度处于一个单一温度值.

从单原子链的结果看,新模型具有一定的合理性,在这基础上来讨论一下质量比不为 1 时的情况.对于一维的原子链,当质量比 δ 介于 1 到 3 之间时,双原子链、Fibonacci 链、第一类广义 Fibonacci 链($m=2$)、Period-doubling 链和 Thue-Morse 链上的温度分布是存在部分梯度的.图 2(a)显示了质量比 δ 值在 1 到 3 之间时,双原子链的温度梯度与质量比 δ 的关系,由图可知在 δ 为 1.1 左右时,温度梯度的绝对值最大,随着 δ 的增大,温度分布的斜率越来越小, δ 大约在 3 时,斜率接近于零,链上温度分布不再具有线性,除端口几个原子外,整体处于单一温度值 T 附近.图 2(b)显示了 $\delta=1.51$ 时,几种原子链上的温度分布情况.发现几种原子链在此时的温度分布情况基本相同.

图 3 给出了质量比 $\delta=7$ 时,双原子链、随机链、Fibonacci 链、第一类广义 Fibonacci 链($m=2$)、Period-doubling 链和 Thue-Morse 链的 $T-N$ 图,除随机链振荡较大外,温度分布都没有呈现梯度特征.除随机链外,其他链的温度分布都是整体处于某一温度值附近,此温度值对于不同的原子链是不同的.

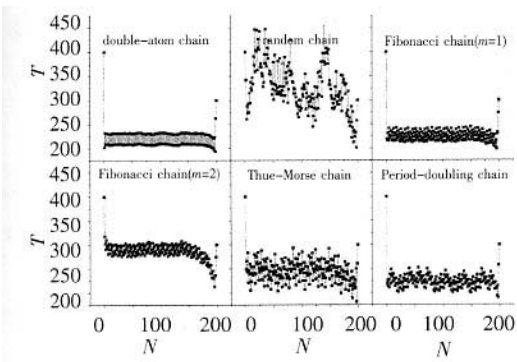


图 3 质量比 $\delta=7$ 时各种链的 $T-N$ 图

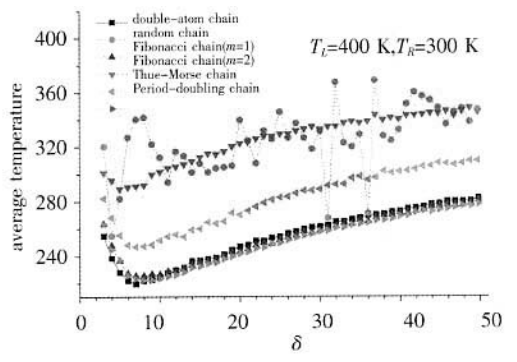


图 4 几种一维链温度分布的平均值随质量比 δ 的变化

根据图 2 的结果,当 $\delta > 3$ 时,链的温度分布不再呈现梯度特征.图 4 显示的是双原子链、随机链、Fibonacci 链、第一类广义 Fibonacci 链($m = 2$),Period-doubling 链和 Thue-Morse 链的平均温度与 δ 值的关系.当 δ 大约为 7 时,这几种链的平均温度达到最低值,随着 δ 的增大,链的平均温度又继续增加.由图 4 可以看出,除随机链平均温度振荡较大外,平均温度随 δ 的变化趋势基本分为三种:双原子链、Fibonacci 链、Period-doubling 链的平均温度随 δ 的增加逐渐趋近一个较低的值 280 K,随机链和 Fibonacci 链($m = 2$)处于较高的平均温度值 350 K, Thue-Morse 链则处于高温热源和低温热源之间为 310 K.另外这几种链的曲线之间的差别与不同质量粒子所占的比率无关,主要是由链上粒子质量分布不同造成的,这从图 4 上可以推断出,因为双原子链、随机链、Thue-Morse 链的大质量粒子所占比例都是 50%,但是却趋于不同的温度.

3 总结

本文提出一种碰撞模型,模拟了单原子链的能量传递,还模拟了几种只含两种质量粒子的一维链,包括双原子链、Fibonacci 链、Period-doubling 链、Thue-Morse 链等的能量传递,得出质量分布不同的一维链的 $T-N$ 图像.当一维链达到平衡后,质量比在 1 到 3 之间时,链上的温度分布存在部分梯度,当质量比大于 3,链上粒子的温度分布不存在梯度,整体处于单一温度值 T 附近.不同原子链的平均温度不同,几种原子链基本都是在 $\delta = 7$ 左右时,链的平均温度达到最低值,另外发现平均温度仅与链上粒子的质量分布有关,而与大质量和小质量粒子在链上所占的比率无关.

[参考文献]

[1] Hu Bambi , Li Baowen , Zhao Hong. Heat conduction in one - dimensional chains[J]. Phys Rev E , 1998 , 57(3) : 2992 - 2995.

[2] Chen Ding , Aubry S , Tsironis G P. Breather mbility in discrete Φ^4 nonlinear lattices[J]. Phys Rev Lett , 1996 , 77(23) : 4776 - 4779.

[3] Alonso D , Artuso R , Casati G , et al. Heat conductivity and dynamical instability[J]. Phys Rev Lett , 1999 , 82(9) : 1859 - 1862.

[4] Stefano Lepri , Roberto Livi , Antonio Politi. Heat conduction in chains of nonlinear oscillators[J]. Phys Rev Lett , 1997 , 78(10) : 1896 - 1899.

[5] Giardiná C , Livi R , Politi A , et al. Finite thermal conductivity in 1D lattices[J]. Phys Rev Lett , 2000 , 84(10) : 2144 - 2147.

[6] Takahiro Hatano. Heat conduction in the diatomic Toda lattice revisited[J]. Phys Rev E , 1999 , 59(1) : R1 - R4.

[7] Abhishek Dhar. Heat conduction in a one-dimensional gas of elastically colliding particles of unequal masses[J]. Phys Rev Lett , 2001 , 86(16) : 3554 - 3557.

[8] Gendelman O V , Savin A V. Normal heat conductivity of the one-dimensional lattice with periodic potential of nearest-neighbor interaction[J]. Phys Rev Lett , 2000 , 84(11) : 2381 - 2384.

[责任编辑 : 丁蓉]