О конечной теплопроводности одномерной решетки ротаторов

© *А.В. Савин, О.В. Гендельман**

Государственный институт физико-технических проблем,
119034 Москва, Россия
E-mail: asavin@center.chph.ras.ru

* Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук,
117977 Москва, Россия
E-mail: ovgend@center.chph.ras.ru

*(Поступила в Редакцию 28 марта 2000 г.
В окончательной редакции 11 мая 2000 г.)*

Изучается процесс переноса тепла в одномерной решетке связанных ротаторов, в которой ориентационное взаимодействие соседних звеньев описывается периодическим потенциалом. На этом примере впервые показано существование одномерных решеток без потенциала подложки, обладающих конечной теплопроводностью в термодинамическом пределе. С ростом температуры данная система переходит из состояния с бесконечной в состояние с конечной теплопроводностью. Конечность теплопроводности обусловлена существованием в решетке локализованных стационарных возбуждений, препятствующих теплопереносу. Время жизни и концентрация этих возбуждений растет с ростом температуры, что приводит к монотонному уменьшению коэффициента теплопроводности.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 98-03-333-66а). Один из авторов (А.В. Савин) выражает благодарность фонду INTAS-96-158 за частичную поддержку данного исследования.

Теплопроводность одномерной решетки является классической проблемой, связанной с обоснованием макроскопического закона теплопроводности Фурье (пропорциональности теплового потока градиенту температуры) на микроскопическом уровне. Аномалии теплопроводности в нелинейных системах хорошо известны со времен знаменитой работы Ферми, Паста и Улама [1]. В интегрируемых системах (гармоническая решетка, цепочка Тоды) и в системах близких к ним температурный градиент не образуется и закон Фурье не выполняется (системы обладают бесконечной теплопроводностью). Неинтегрируемость системы является необходимым условием для конечности теплопроводности [2]. В ряде последних работ на примере цепи Ферми–Паста–Улама (ФПУ) [3–5] и двухатомной цепи Тоды [6] было показано, однако, что сама по себе неинтегрируемость не гарантирует выполнение закона Фурье. Неинтегрируемость данных систем приводит к образованию линейного температурного градиента, но величина теплового потока пропорциональна не $1/N$, а $1/N^\alpha$, где $0 < \alpha < 1$, а N — безразмерная длина цепи. Таким образом, данные системы тоже обладают бесконечной теплопроводностью в термодинамическом пределе $N \to \infty$. Аналитические оценки [5], сделанные в приближении малоамплитудных деформаций, показывают, что любая одномерная цепочка, имеющая акустическую фононную ветвь должна обладать бесконечной теплопроводностью.

С другой стороны, существует ряд специально построенных одномерных неинтегрируемых систем [7,8], обладающих конечной теплопроводностью. В работах [9,10] была показана также конечность теплопроводности для модели Френкеля–Конторовой, а в [11] — для цепи с другими ангармоническими потенциалами подложки. Здесь не только формируется линейный температурный градиент, но и величина теплового потока пропорциональна $1/N$. Существенной особенностью всех этих моделей является наличие внешнего потенциала, моделирующего взаимодействие цепи с подложкой. Эти системы не обладают трансляционной инвариантностью и в них не сохраняется полный импульс. В [6] сделано предположение, что наличие внешнего потенциала играет ключевую роль для конечности теплопроводности. Высказывается гипотеза о бесконечной теплопроводности всех изолированных одномерных решеток, где отсутствие внешних сил приводит к сохранению полного импульса системы.

Данная работа посвящена численному моделированию процесса переноса тепла в ранее не исследованной одномерной решетке с сохраняющимся импульсом (точнее говоря, моментом импульса) — цепочке одинаковых ротаторов с периодическим потенциалом взаимодействия ближайших соседей. В этой системе наблюдается переход от бесконечной к конечной теплопроводности с ростом температуры, что не противоречит основному результату работы [5], но опровергает сформулированную выше гипотезу. Показано, что такое поведение системы обусловлено возбуждением локализованных ротационных мод, концентрирующих тепловую энергию и являющихся эффективными рассеивателями фононов.

1. Модель

Примером одномерной решетки одинаковых ротаторов может служить линейная макромолекула, в которой кроме продольных деформаций возможны еще крутильные деформации (внутренние вращения вокруг жестких валентных связей). Здесь потенциал междоузельного взаимодействия оказывается периодической функцией (поворот одного звена на 360° переводит его в исходное состояние).

В качестве модели удобно рассмотреть цепь молекул, расположенных друг от друга на фиксированном расстоянии l. Предположим, что молекулы могут совершать только повороты вокруг оси цепи. Пусть переменная $\phi_n(t)$ задает поворот n-го мономера цепи в неподвижной системе координат. Тогда безразмерный гамильтониан системы будет иметь вид

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2}\dot{\phi}_n^2 + U(\phi_{n+1} - \phi_n) \right\}, \tag{1}$$

где точка обозначает дифференцирование по времени t, а потенциал междоузельного взаимодействия (потенциал вращения) $U(\phi)$ — неотрицательная периодическая функция с периодом 2π, удовлетворяющая условиям $U(0) = 0$, $U'(0) = 0$, $U''(0) = 1$.

Для определенности возьмем потенциал взаимодействия в простейшем виде

$$U(\phi) = 1 - \cos\phi. \tag{2}$$

2. Термализация цепи

При численном моделировании теплопроводности цепи обычно используется термостат Нозе–Хувера [3,4,6]. В работе [12] показано, что использование этого термостата не обеспечивает корректную термализацию цепи. Поэтому воспользуемся классическим термостатом Ланжевена.

Рассмотрим конечную цепь из N звеньев с концами, погруженными в термостат Ланжевена, с температурой T_+ и T_-. Соответствующая система уравнений движения цепи имеет вид

$$\begin{aligned}
&\ddot{\phi}_n = F(\phi_{n+1} - \phi_n) - F(\phi_n - \phi_{n-1}) - \gamma\dot{\phi}_n + \xi_n,\\
&n = 1, \dots, N_0;\\
&\ddot{\phi}_n = F(\phi_{n+1} - \phi_n) - F(\phi_n - \phi_{n-1}),\\
&n = N_0 + 1, \dots, N - N_0;\\
&\ddot{\phi}_n = F(\phi_{n+1} - \phi_n) - F(\phi_n - \phi_{n-1}) - \gamma\dot{\phi}_n + \eta_n,\\
&n = N - N_0 + 1, \dots, N,
\end{aligned} \tag{3}$$

где $F(\phi)=dU(\phi)/d\phi$; N_0 — длина погруженных в термостат концевых участков цепи; γ — коэффициент релаксации, а ξ_n, η_n — моделирующий взаимодействие с термостатом белый гауссовский шум ($\langle\xi_n(t)\rangle=0$, $\langle\eta_k(t)\rangle=0$, $\langle\xi_n(t_1)\eta_n(t_2)\rangle = 0$, $\langle\xi_n(t_1)\xi_k(t_2)\rangle = 2\gamma T_+\delta_{nk}\delta(t_2 - t_1)$, $\langle\eta_n(t_1)\eta_k(t_2)\rangle = 2\gamma T_-\delta_{nk}\delta(t_2 - t_1)$).

Система уравнений движения (3) интегрировалась численно. После наступления теплового равновесия в цепи устанавливался температурный градиент

$$T_n = \langle\dot{\phi}_n^2(t)\rangle_t = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int_0^t \dot{\phi}_n^2(\tau)d\tau \tag{4}$$

и локальный тепловой поток

$$J_n = \langle j_n(t)\rangle_t = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t}\int_0^t j_n(\tau)d\tau, \tag{5}$$

где $j_n = -[F(\phi_{n+1} - \phi_n) + F(\phi_n - \phi_{n-1})]\dot{\phi}_n/2$. Использовались значения $\gamma = 0.1$, $N_0 = 50$, $N = 150$, 200, 300, 500, 700, 900, 1300, 1700, 2100, 2400 и начальные условия, соответствующие основному состоянию цепи $\{\phi_n = 0, \ \dot{\phi}_n = 0\}_{n=1}^N$. За время $t = 10^5$ решетка приходила в тепловое равновесие с термостатом. Средние значния (4), (5) находились из последующей динамики системы в течение времени $t = 10^6 - 10^7$.

Данный способ термализации цепи позволяет решить проблему граничных условий. Распределение в цепи теплового потока J_n и температурного профиля T_n показывает (рис. 1), что на внутреннем участке цепи $N_0 < n \leqslant N - N_0$ мы имеем свободный тепловой поток. Температурный градиент имеет линейную форму, а локальный тепловой поток не зависит от номера звена

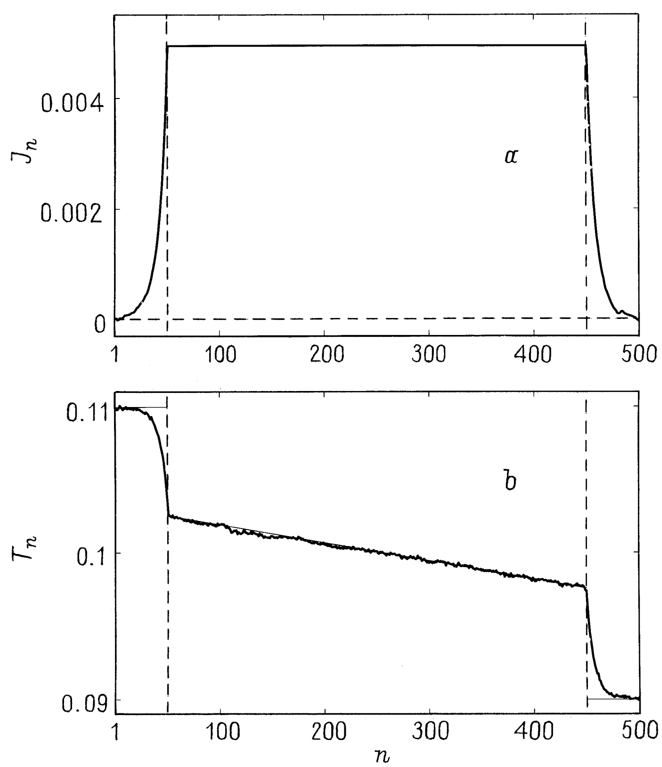

Рис. 1. Распределение локального теплового потока J_n (a) и локальной температуры T_n (b) в цепи с периодическим потенциалом взаимодействия ($N = 500$, $N_0 = 50$, $T_+ = 0.11$, $T_- = 0.09$, время усреднения $t = 5 \times 10^6$).

цепи: $J_n = J$. Это позволяет определить коэффициент теплопроводности, используя только внутренний участок цепи,

$$\kappa(N_1) = JN_1/(T_{N_0+1} - T_{N-N_0}), \tag{6}$$

где $N_1 = N - 2N_0$ — длина этого участка. Предельное значение

$$\kappa = \lim_{N_1\to\infty} \kappa(N_1) \tag{7}$$

будет соответствовать коэффициенту теплопроводности цепи при температуре $T = (T_+ + T_-)/2$.

Коэффициент теплопроводности можно также найти через формулу Грина–Кубо [13]

$$\kappa_c = \lim_{t\to\infty} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{NT^2} \int\limits_0^t c(\tau)d\tau, \tag{8}$$

где функция корреляции $c(t) = \langle J_s(\tau)J_s(\tau - t)\rangle_\tau$, а $J_s(t) = \sum_n j_n(t)$ — общий поток тепла в цепи.

Для нахождения функции корреляции $c(t)$ рассмотрим конечную циклическую цепь из $N = 4000$ звеньев, полностью погруженную в термостат Ланжевена. После наступления теплового равновесия цепи с термостатом рассматривалась уже динамика изолированной цепи. Для увеличения точности нахождения функции корреляции использовалось ее среднее значение по 500 различным реализациям начальной термализации цепи.

3. Теплопроводность цепи с периодическим потенциалом междоузельного взаимодействия

Численное моделирование динамики цепи показано существование критического значения температуры $0.2 < T_0 < 0.3$. При $T < T_0$ цепь обладает бесконечной теплопроводностью, а при $T > T_0$ — конечной. Зависимость κ от N_1 при температуре $T = 0.2$ и 0.3 дана на рис. 2. Как видно из рисунка, при $T = 0.2$ с ростом длины цепи N_1 теплопроводность κ увеличивается как степень $N_1^{0.26}$. Таким образом, предел (7) равен бесконечности. При $T = 0.3$ с ростом N_1 теплопроводность $\kappa(N_1)$ стремится к конечному значению $\kappa = 31.8$, т.е. при этом значении температуры цепь обладает конечной теплопроводностью. Зависимость $\kappa(N_1)$ при температуре $T = 1$ приведена в таблице.

Зависимость коэффициента теплопроводности κ от длины внутреннего участка цепи N_1 и значение теплопроводности κ_c, полученное при помощи формулы Грина–Кубо, при температуре $T = (T_+ + T_-)/2$

T_+	T_-	$\kappa(50)$	$\kappa(100)$	$\kappa(200)$	$\kappa(400)$	$\kappa(600)$	$\kappa(800)$	κ_c
0.33	0.27	21.14	23.67	25.96	29.04	29.59	29.54	28.47
1.1	0.9	0.506	0.574	0.634	0.572	0.613	0.612	0.55

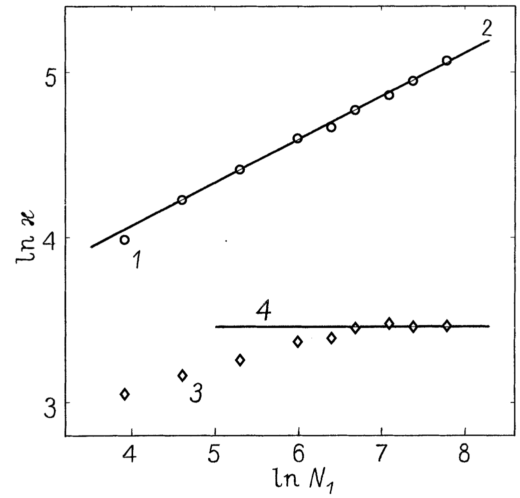

Рис. 2. Зависимость натурального логарифма коэффициента теплопроводности κ от натурального логарифма длины внутреннего участка цепи N_1. Маркеры *1* дают полученные численно значения при температуре $T = 0.2$ ($T_+ = 0.21$, $T_- = 0.19$). Аппроксимирующая эту зависимость прямая *2* имеет наклон $\delta = 0.26$. Маркеры *3* дают значения при $T = 0.3$ ($T_+ = 0.33$, $T_- = 0.27$). Аппроксимирующая эту зависимость прямая *4* имеет нулевой наклон ($\kappa = 31.8$).

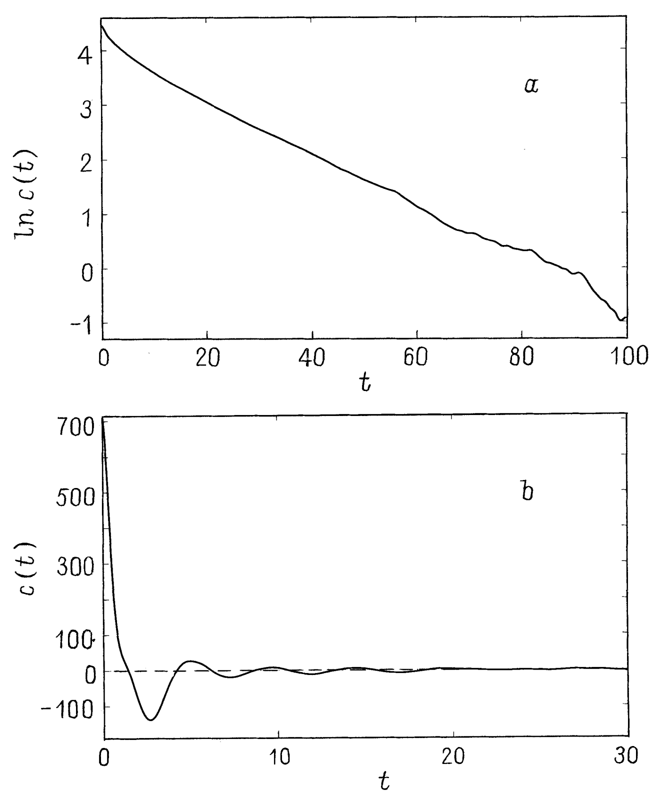

Рис. 3. Экспоненциальное убывание функции корреляции $c(t)$ при температуре $T < 2$ (*a*) (температура $T = 0.5$, теплопроводность $\kappa_c = 5.044$) и осцилляции функции при $T > 2$ (*b*) (температура $T = 2.5$, теплопроводность $\kappa_c = 0.014$).

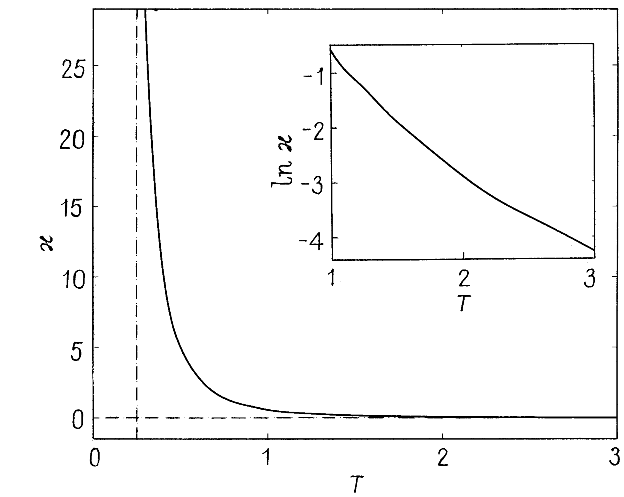

Рис. 4. Зависимость коэффициента теплопроводности κ от температуры цепи T.

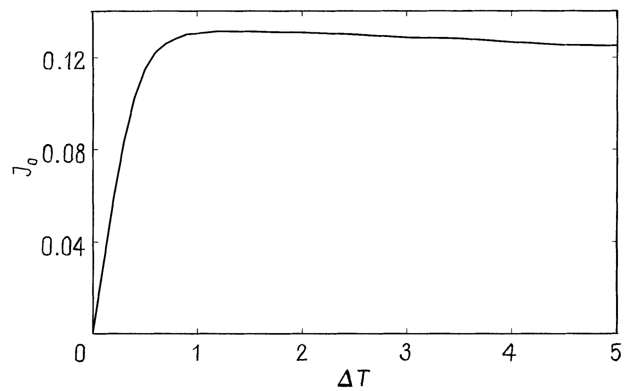

Рис. 5. Зависимость теплового потока J_o от разности температур ΔT ($N = 300$, $N_0 = 50$, $T_+ = \Delta T$, $T_- = 0$).

Изучение поведения функции корреляции $c(t)$ при $t \to \infty$ подтвердило утверждение о конечности теплопроводности цепи. При температуре $T > T_0$ функция корреляции стремится к нулю с экспоненциальной скоростью, откуда следует сходимость интеграла в формуле (8) и, следовательно, конечность значения κ_c. Характер убывания функции корреляции с ростом времени хорошо виден на рис. 3. При $T_0 < T < 2$ функция монотонно стремиться к нулю (рис. 3, a). При $T > 2$ (рис. 3, b) $c(t)$ ведет себя как осциллирующая убывающая функция (осцилляции способствуют более быстрой сходимости интеграла в формуле (8)). Таблица показывает, что использованные два способа определения коэффициента теплопроводности дают очень близкие значения.

Рассмотрим зависимость коэффициента теплопроводности κ от температуры цепи T. Вычисление теплопроводности по формуле Грина–Кубо (8) показало, что κ монотонно уменьшается с увеличением температуры. Вид зависимости приведен на рис. 4. При $T \to T_0$ теплопроводность стремится к бесконечности, а при $T \to \infty$ — экспоненциально убывает.

4. Зависимость теплового потока от градиента температуры

Рассмотрим теперь зависимость величины теплового потока J от разности температур ΔT. Для этого возьмем конечную цепь из $N = 300$ звеньев с нулевой температурой на правом конце ($T_- = 0$). Тогда разность температур составляет $\Delta T = T_+$. Величину теплового потока здесь можно определить как работу силы трения на правом конце цепи

$$J_0 = \gamma \sum_{n=N-N_1+1}^{N} T_n. \tag{9}$$

Численное интегрирование системы уравнений движения (3) показывает, что это значение совпадает с величиной локального теплового потока во внутреннем участке цепи: $J_n = J_o$, $n = N_1 + 1, \dots, N - N_1$. Это совпадение подтверждает корректность определения локального теплового потока (5).

Зависимость теплового потока J_0 от разности температур ΔT представлена на рис. 5. Как видно из данных рисунка, величина теплового потока монотонно растет с увеличением температуры. При температуре $T = T_r = 1.3$ величина потока достигает максимального значения (происходит насыщение). Дальнейшее увеличение температуры приводит к постепенному уменьшению потока. Такое необычное поведение системы связано со специфическими свойствами фононов и с наличием в цепи при больших значениях температуры локализованных вращательных мод, препятствующих движению фононов. Рассматрим детально свойства этих возбуждений.

5. Периодические волны постоянного профиля

Изучим дисперсионный закон нелинейных периодических волн
$$\phi_n(t) = \phi(n - st) \equiv \phi(z), \tag{10}$$
где z — волновая переменная ($z = n - st$), а $\phi(z)$ — периодическая функция с периодом L $\big(\phi(z+L) \equiv \phi(z)\big)$. В малоамплитудном приближении ($|\phi(z)| \ll \pi$) дисперсионное уравнение имеет вид

$$\omega^2(q) = 2(1 - \cos q), \tag{11}$$

где волновое число $q = 2\pi/L$, длина волны $L \geqslant 2$. Фазовая скорость волны $s = \omega(q)/q$ (скорость малоамплитудных длинноволновых фононов $s_0 = \lim\limits_{q\to 0} \omega(q)/q = 1$). Нелинейность потенциала междоузельного взаимодействия приводит к тому, что скорость (частота) периодической волны (10) зависит не только от длины L, но и от ее амплитуды A.

Для нахождения формы и скорости волны воспользуемся псевдоспектральным методом [14]. Численный анализ показал, что для каждой длины волны $L \geqslant 2$

существует максимальное значение амплитуды $A(L)$. Амплитуда периодической волны не может превышать его $(A \leqslant A(L))$, а амплитуда относительных поворотов молекул цепи $A_\varphi = \max|\phi(z+1) - \phi(z)|$ не превышает своего естественного максимального значения, равного π. Периодические волны обладают свойством энергетического насыщения. Существует максимальное значение энергии $E(L)$, соответствующее температуре $T(L) \simeq 1.8$.

Проведенное исследование периодических волн позволяет заключить, что в цепи связанных ротаторов существует критическое значение температуры $T_0 \approx 1.8$, выше которой не возможно термализовать колебательные моды цепи. При $T = T_0$ происходит насыщение колебательных мод, они становятся неустойчивыми и начинают сбрасывать лишнюю энергию. При дальнейшем росте температуры общая энергия колебательных мод цепи не возрастает. Нелинейность колебательных мод обусловлена отрицательным ангармонизмом потенциала междоузельного взаимодействия и поэтому приводит к монотонному росту их теплоемкости с ростом температуры.

6. Локализованные ротационные моды

Ограниченность энергии междоузельного взаимодействия приводит к возможности существования в цепи локализованных ротационных мод, детально изученных для более общей системы в работе [15]. Ротационная мода соответствует вращению одной молекулы при почти неподвижных соседях. Динамика моды в первом приближении аппроксимируется вращением одной молекулы при неподвижных соседях. В этом приближении движение молекулы будет описываться уравнением маятника. При энергии $E \geqslant \max U(\phi) = 2$ движение молекулы будет соответствовать равномерному вращению. С ростом энергии E частота вращения ω будет монотонно увеличиваться от 0 до $+\infty$. Движение соседних молекул оказывает влияние на вращение. Численное моделирование вращения показало, что такое локализованное возбуждение будет устойчиво только при частоте $\omega \geqslant \omega_0 = 2.173$. Зависимость энергии ротационной моды от частоты хорошо аппроксимируется параболой $\omega^2/2$, соответствующей энергии свободного вращения одной молекулы цепи. С ростом энергии теплоемкость моды монотонно уменьшается и при $E \to \infty$ стремится к 1/2 (к теплоемкости изолированного ротатора).

Таким образом, в рассматриваемой системе, кроме фононов (нелинейных колебательных мод), имеющих частотный спектр $0 \leqslant \omega \leqslant 2$, имеются локализованные ротационные моды с частотным спектром $\omega \geqslant \omega_0 > 2$. Появление в цепи ротационных мод должно приводить к уменьшению теплоемкости системы.

7. Распеределение энергии тепловых колебаний по нелинейным модам

Рассмотрим распределение энергии тепловых колебаний цепи по частотам. Для этого численно найдем плотность распределения частотного спектра функции $\dot{\phi}_n(t)\exp[i\phi_n(t)]$.

В цепи с гармоническим потенциалом взаимодействия $U(\phi) = \phi^2/2$ плотность распределения энергии

$$E(\omega) = 2T/\pi\sqrt{\omega_a^2 - \omega^2}, \quad 0 \leqslant \omega \leqslant \omega_n, \qquad (12)$$

где максимальная частота фононов $\omega_a = 2$.

При низкой температуре $T = 0.1$ распределение энергии практически совпадает с распределением (12). Здесь вся энергия приходится на колебательные моды с частотой $\omega < \omega_0$. Увеличение температуры приводит к смещению спектра в область частот локализованных вращений $\omega > \omega_0$ (рис. 6). Определим энергию терма-

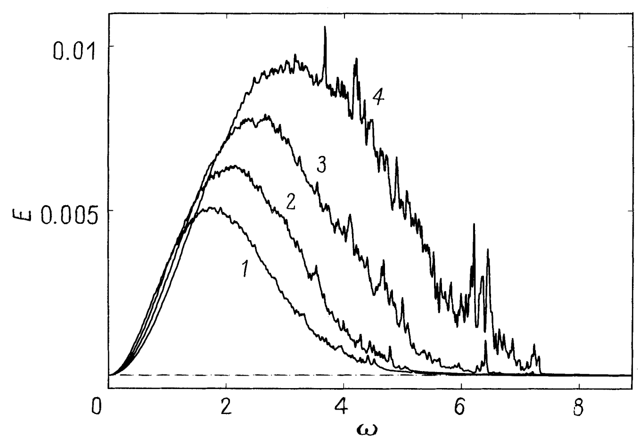

Рис. 6. Распределение энергии E тепловых колебаний частицы цепи по частотам ω при температуре $T = 1.4, 2, 3, 5$ (кривые *1, 2, 3, 4* соответственно).

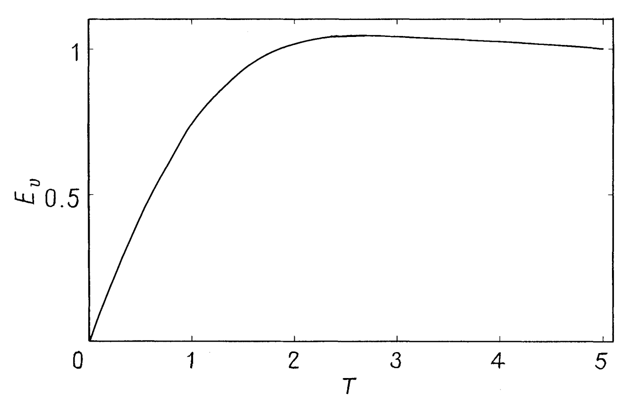

Рис. 7. Зависимость энергии термализации фононов E_v от температуры цепи T. Дана энергия, приходящаяся на одно звено цепи.

лизации колебательных мод как

$$E_v = \int_0^{\omega_0} E(\omega)d\omega.$$

Зависимость E_v от температуры T представлена на рис. 7. При $T \ll 2$ энергия E_v растет пропорционально температуре. Рост энергии заметно уменьшается при $T \approx 1$. При $T = 2.5$ энергия достигает своего максимального значения. Дальнейшее увеличение температуры приводит только к ее незначительному уменьшению. Как мы и предсказывали выше, происходит насыщение энергией низкочастотных колебательных мод. Дальше повышение температуры приводит только к росту энергии стационарных локализованных ротационных мод.

Поскольку перенос энергии в цепи могут осуществлять только фононы (колебательные моды), то их энергетическое насыщение объясняет необычную зависимость величины теплового потока J_o от градиента температуры ΔT (рис. 5). Однако сам эффект насыщения не может быть причиной конечной теплопроводности цепи. Для ее объяснения необходимо рассмотреть взаимодействия фононов с локализованными ротационными модами.

8. Влияние локализованных возбуждений на транспорт энергии

Ротационные моды (локализованные вращения) являются стационарными возбуждениями цепи, они не могут участвовать в переносе тепловой энергии и должны приводить к уменьшению теплопроводности цепи. Изучим их взаимодействие с тепловыми фононами. Для этого рассмотрим цепочку из $N = 300$ молекул с температурой на левом конце $T_+ = 0.02 > 0$, а на правом — с $T_- = 0$. Возьмем в начальный момент времени цепочку в основном состоянии $\phi_n \equiv 0, \dot{\phi}_n \equiv 0$ и поместим в центре цепи на узле $n = N/2$ ротационную моду, имеющую энергию $E = 16$. Рассмотрим теплоперенос в цепи. На рис. 8 показаны: зависимость распределения энергии в цепи E_n (a) и зависимость энергии моды (локализованного вращения) E от времени t (b). Как видно из рисунка, локализованная мода в центре цепи препятствует прохождению всех тепловых фононов. В результате происходит термализация только левой половины цепи — правая половина остается нетермализованной (рис. 8, a). Давление фононов на локализованную моду в центре цепи приводит к ее постепенному разрушению. Энергия моды монотонно уменьшается (рис. 8, b). В момент времени $t = 28\,000$ локализованное возбуждение разрушается и в цепи возникает тепловой поток. Проведенное моделирование позволяет сделать вывод о препятствии локализованных возбуждений теплопереносу в цепи и о конечности времени их жизни в термализованной цепи.

Для изучения влияния локализованных мод на перенос энергии рассмотрим релаксацию тепловой энергии цепи. Для этого возьмем конечную цепь из $N = 300$ звеньев. Погрузим ее в термостат Ланжевена и удалим его после термализации цепи. Введем на концах цепи трение, обеспечивающее поглощение энергии (для этого достаточно в системе уравнений движения (3) положить $T_+ = T_- = 0$). Численное моделирование динамики показало наличие в цепи локализованных ротационных мод. При температуре $T = 1$ они обладают небольшим времени жизни. В результате взаимодействия с фононами они бысто разрушаются, не препятствуя откачке энергии из цепи (рис. 9, a). При температуре $T = 2$ локализованные вращения обладают большим временем жизни и уже существенно влияют на механизм откачки энергии. Откачка происходит только после разрушения концевых локализованных мод. В результате этого процесса в цепи остается только одно локализованное состояние (рис. 9, b). Особенно хорошо скачкообразность откачки энергии заметна при температуре $T = 3$ (рис. 9, c).

Таким образом, теплоперенос в цепи можно качественно описать как последовательность случайных локальных перебросов энергии, происходящих при каждом разрушении стационарной локализованной моды. С увеличением температуры энергия этих мод растет, увеличивается их время жизни и, следовательно, продолжительность интервалов между случайными перебросами энергии. Этот механизм вместе в эффектом насыщения фононов объясняет уменьшение потока энергии J_o с ростом температуры при $T > T_o$ (рис. 5).

9. Цепь с гиперболическим потенциалом междоузельного взаимодействия

Полученные результаты, по-видимому, должны быть справедливы для цепи с любым периодическим потенциалом междоузельного взаимодействия. Конечность теплопроводности связана с наличием в цепи стационарных узколокализованных ротационных мод, существование которых обусловлено только ограниченностью потенциала взаимодействия. Рассмотрим для сравнения цепь с неограниченным гиперболическим потенциалом взаимодействия

$$U(\phi) = \sqrt{1 + \phi^2} - 1. \tag{13}$$

Потенциал (13), так же как и периодический потенциал (2), имеет отрицательный квартетный ангармонизм, но является уже неограниченной функцией. При $\phi \to \pm\infty$ потенциал растет как линейная функция $\pm\phi - 1$.

Численное моделирование показало, что цепь с потенциалом (13) имеет бесконечную теплопроводность для всего исследованного диапазона значений температуры. Коэффициент теплопроводности цепи κ с увеличением длины внутреннего участка цепи N_1 растет как N_1^δ, где показатель $\delta < 1$. Например, при температуре $T = 2$ показатель степенного роста $\delta = 0.29$. Функция корреляции $c(t)$ при всех значениях температуры стремится к

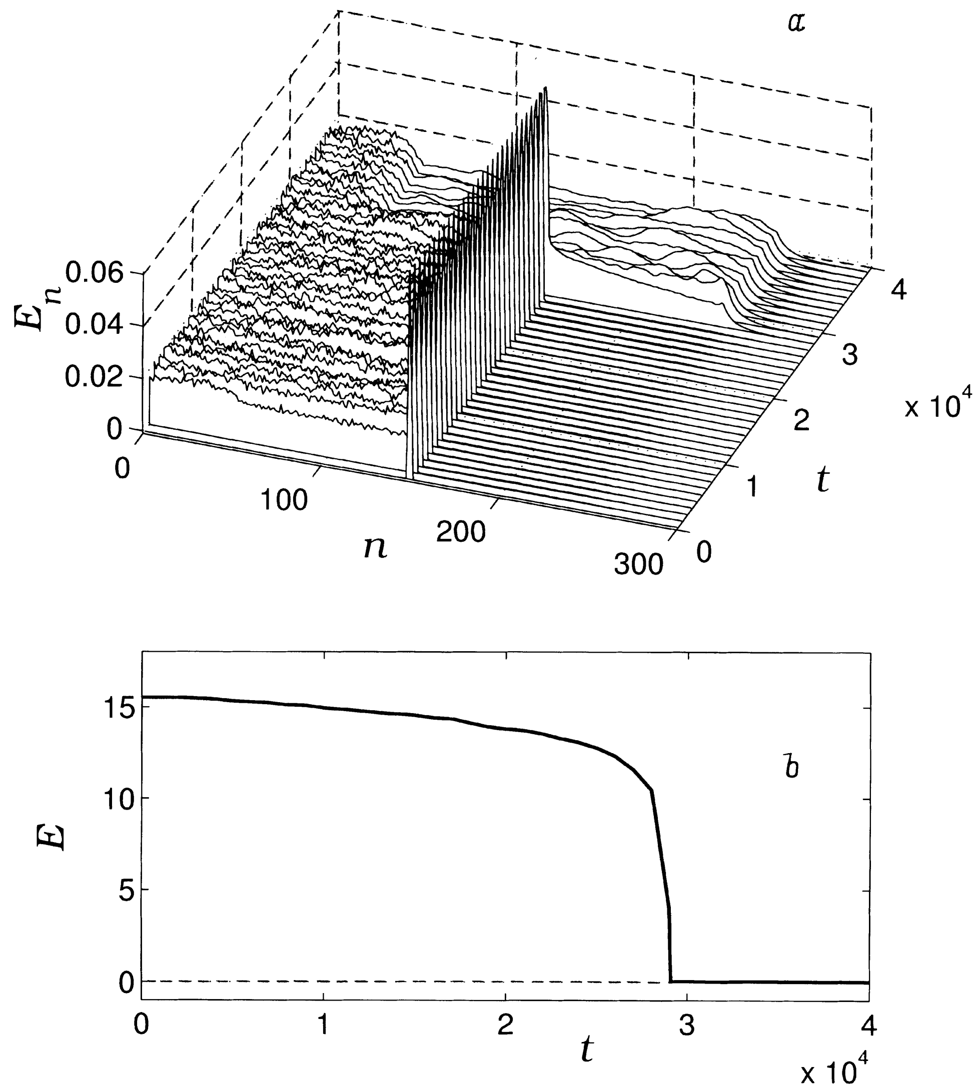

Рис. 8. Взаимодействие ротационной моды с тепловыми фононами. Показаны зависимость распределения энергии E_n в цепи (a) и зависимость энергии E моды от времени t (b).

нулю со степенной скоростью t^α, $-1 < \alpha < 0$. Так, при $T = 2$ показатель степени $\alpha = -0.82$. Отсюда следует, что интеграл в формуле Грина–Кубо (8) расходится, а теплопроводность $\kappa_c = \infty$. Таким образом, одна отрицательность квартетного ангармонизма (в полном соответствии с выводами работ [3–6]) не обеспечивает конечности теплопроводности. Это позволяет сделать вывод о ключевой роли ограниченности потенциала взаимодействия для конечности теплопроводности изолированной цепи.

10. Зависимость теплоемкости цепи от температуры

В системе с неограниченным потенциалом взаимодействия (13) теплоемкость цепи $C = d\langle E\rangle/dT$ монотонно возрастает при росте температуры T (рис. 10). Теплоемкость, связанная с возбуждением периодических волн в цепи с периодическим потенциалом взаимодействия (2), тоже монотонно растет, но теплоемкость, связанная с ротационными модами, уменьшается с ростом температуры. Поэтому, как показано на рис. 10, при $T \leqslant 0.4$ теплоемкость растет, а при $T \geqslant 0.4$ — монотонно уменьшается. Отсюда можно сделать вывод, что в первом интервале температур основной вклад в теплоемкость системы вносят колебательные моды, а во втотом — ротационные моды. Таким образом, при $T \leqslant 0.4$ главный вклад в нелинейную динамику вносит отрицательная ангармоничность, а при $T > 0.4$ — ограниченность потенциала взаимодействия. Температура, соответствующая максимуму теплоемкости, близка к температуре перехода от бесконечной к конечной теплопроводности.

В цепи с ограниченным потенциалом взаимодействия теплоемкость $C \to 1/2$ при $T \to \infty$. Значение теплоемкости $C = 1/2$ соответствует системе несвя-

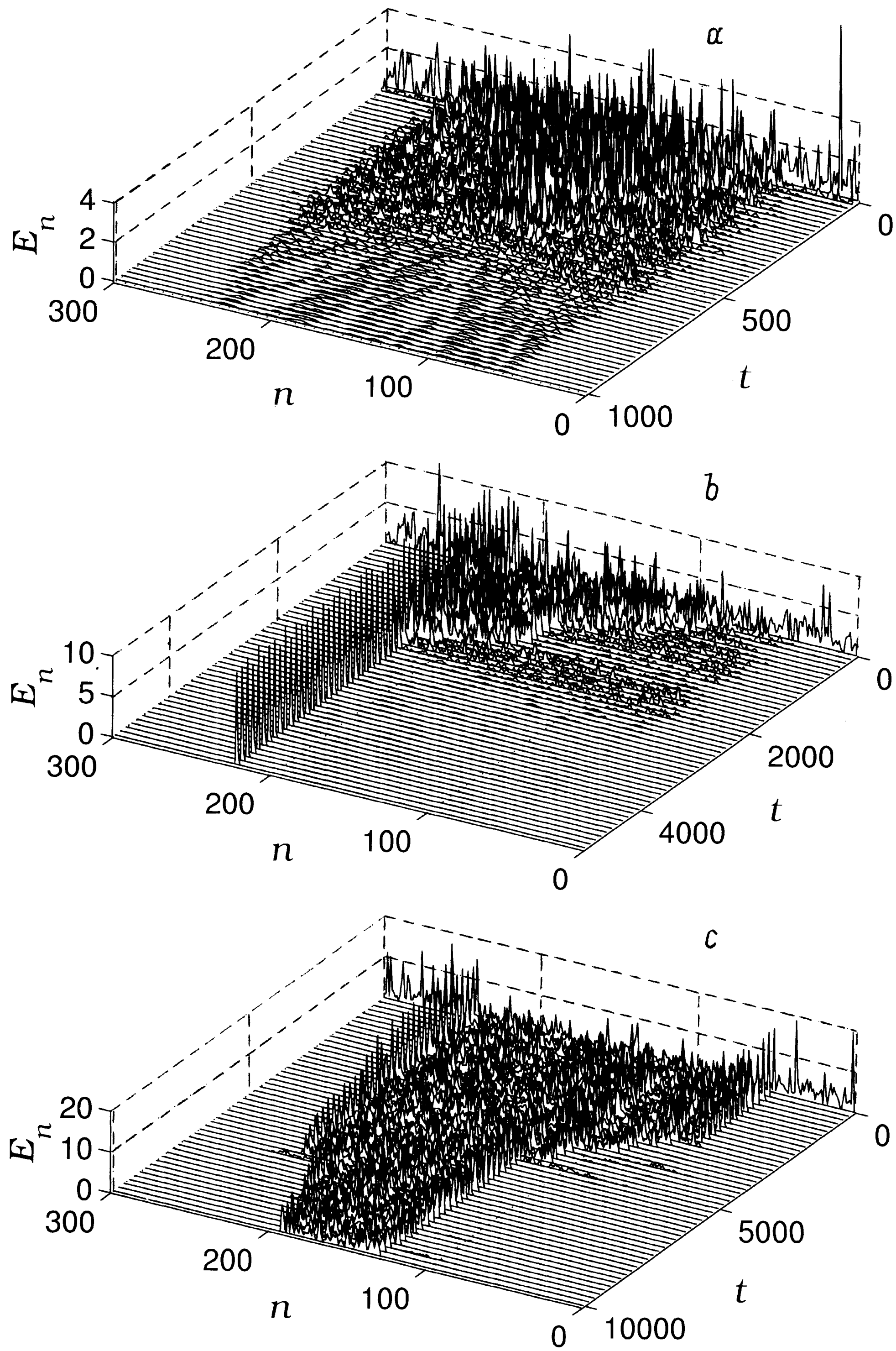

Рис. 9. Релаксации энергии термализованной цепи при температуре $T = 1$ (a), 2 (b) и 3 (c). Дана зависимость локальной энергии E от номера звена цепи n и времени t. В начальный момент времени система имеет температуру T, далее рассматривается динамика цепи с поглощающими концами ($N = 300$, $N_0 = 50$, $T_+ = T_- = 0$).

занных частиц. На качественном уровне можно сказать, что с ростом температуры происходит фазовый переход системы связанных частиц в систему свободных частиц.

Таким образом, проведенное исследование показало, что в цепи одинаковых ротаторов с периодическим потенциалом взаимодействия ближайших соседей наблюдается переход от бесконечной к конечной теплопроводности с ростом температуры. Это не противоречит основному результату работы [5], в которой показано, что любая изолированная одномерная цепочка должна

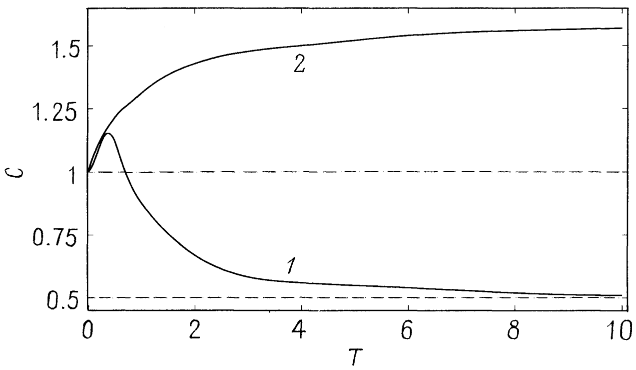

Рис. 10. Зависимость теплоемкости C от температуры T для цепи с периодическим (кривая *1*) и гиперболическим (кривая *2*) потенциалами взаимодействия.

обладать бесконечной теплопроводностью, связанной с отсутствием рассеяния длинноволновых фононов. Аргументация этой работы справедлива только для малоамплитудных деформаций, т. е. для низких температур.

С ростом температуры в рассматриваемой цепи образуются локализованные ротационные возбуждения, препятствующие свободному движению фононов. Заметим, что в цепи ФПУ [3–5] тоже существуют локализованные возбуждения — дискретные бризеры. Принципиальным отличием является то, что они не препятствуют движению длинноволновых фононов. Они могут только отфильтровывать фононы с определенной длиной волны [16], а ротационные возбуждения препятствуют движению всех фононов независимо от длины их волны и частоты.

Фононы в рассматриваемой цепи обладают конечной энергоемкостью. С ростом температуры их энергия растет, пока не достигнет максимального значения. Дальнейшее увеличение температуры не приводит уже к росту энергии. Периодические волны становятся неустойчивыми, вся их лишняя энергия при распаде идет на образование препятствующих теплопереносу стационарных ротационных возбуждений. Сам механизм теплопереноса в этом случае можно описать как последовательность случайных локальных перебросов энергии, происходящих при каждом разрушении стационарного возбуждения. Этот механизм объясняет уменьшение теплопроводности цепи при увеличении температуры. Действительно, ведь с ростом температуры растет энергия только локализованных возбуждений. Увеличивается их время жизни и, следовательно, уменьшается частота локальных перебросов энергии. Теплоемкость цепи монотонно уменьшается с ростом температуры и стремится к значению 1/2, соответствующему теплоемкости системы несвязанных частиц. В пределе высоких температур рассматриваемая система превращается в цепь несвязанных ротаторов с нулевой теплопроводностью.

Список литературы

[1] E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam. Los Alamos Rpt *LA–1940* (1955).
[2] О.В. Гендельман, Л.И. Маневич. ЖЭТФ **102**, 511 (1992).
[3] S. Lepri, L. Roberto, A. Politi. Phys. Rev. Lett. **78**, 1896 (1997).
[4] S. Lepri, R. Livi, A. Politi. Physica **D119**, 140 (1998).
[5] S. Lepri, R. Livi, A. Politi. Evrophys. Lett. **43**, 271 (1998).
[6] T. Hatano. Phys. Rev. **E59**, R1 (1999).
[7] G. Casati, J. Ford, F. Vivaldi, V.M. Visscher. Phys. Rev. Lett. **52**, 1861 (1984).
[8] T. Prosen, M. Robnik. J. Phys. **A25**, 3449 (1992).
[9] M.J. Gillan, R.W. Holloway. J. Phys. **C18**, 5705 (1985).
[10] B. Hu, B. Li, H. Zhao. Phys. Rev. **E57**, 2992 (1998).
[11] G.P. Tsironis, A.R. Bishop, A.V. Savin, A.V. Zolotaryuk. Phys. Rev. **E60**, 6610 (1999).
[12] A. Fillipov, B. Hu, B. Li, A. Zeltser. J. Phys. **A31**, 7719 (1998).
[13] R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume. Statistical Physics II. Springer Ser. Solid State Sci. **31** (1991).
[14] J.C. Eilbeck, R. Flesch. Phys. Lett. **A194**, 200 (1990).
[15] S. Takeno, M. Peyrard. Physica **D92**, 140 (1996).
[16] S. Flach, C.H. Willis. Physics Reports **295**, 181 (1998).