

# 阻尼作用下一维体系热传导性质的研究<sup>\*</sup>

李新霞 唐 翌<sup>†</sup>

(湘潭大学现代物理研究所,湘潭 411105)

(2005 年 11 月 24 日收到,2006 年 7 月 18 日收到修改稿)

利用分子动力学方法,研究了阻尼对一维体系热传导性质的影响.研究表明,当体系的不可积性因阻尼的引入而被破坏时,在一维谐振子晶格体系中也能够形成线性的温度分布.弱阻尼对非可积体系的温度分布和热导率的影响是一种微扰,而对于可积体系是一种性态的改变.在强阻尼条件下,由于体系能量的过度耗散,体系中呈现出凹形的温度分布和收敛的热导率.

关键词:非线性动力学,一维体系,能量传输,阻尼

PACC:6670,6740K

## 1. 引言

从微观的、确定性的动力学方程出发来理解宏观的、不可逆的热力学现象是非平衡统计物理学中一项长期而又重要的任务<sup>[1]</sup>.20 世纪 80 年代以来,随着计算机技术的飞速发展,计算物理很快崛起成为物理学中一个非常重要的研究方向.现在,人们已经可以利用分子动力学方法研究由数以万计粒子组成的相互作用多粒子体系的动力学行为.利用平衡和非平衡分子动力学方法研究一维体系热传导性质一直以来是人们非常关注的一个研究课题.傅里叶热传导定律指出:体系中传导的热流量与温度梯度成正比,其比例系数称为热导率,它由材料本身的特性所决定.一维体系由于空间维度的限制常常表现出一些不同于三维体系中的奇异特征,近年来对一维体系中出现正常热传导行为所必需条件的探索,以及各种一维体系中的反常热传导行为是否满足一种普适性规律的研究吸引了人们极大的兴趣<sup>[1-7]</sup>.

在一维体系热传导的研究中,谐振子链作为一种最简单的并具有可积性的模型自然成为了人们最早研究的对象.事实上,对一维晶格体系中热传导最基本图像的了解也是通过对谐振子链的研究得到的.在这个体系中,晶格的振动可以分解成一系列独立的简正模式(normal mode)的叠加.由于

各简正模式之间缺乏相互作用,它们各自独立地、自由地传输能量,因此,该体系中不能形成温度梯度,体系中的热导率在热力学极限下趋向于无穷大,其具体的行为表现为  $\kappa \propto N^{[5]}$ .单原子 Toda 晶格链模型同样具有可积性,其中的热传导行为和谐振子链中的非常相似<sup>[6]</sup>.可以看出,可积性模型所对应的体系都是理想的热导体.进一步的研究指出,非可积性是体系中形成温度梯度的必要条件,但不是傅里叶热传导定律在一维体系中成立的充分条件<sup>[3]</sup>.文献 [8—10] 分别研究了 Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 链、双原子 Toda 晶格链、含有杂质和质量无序的 FPU- $\beta$  链等具有非可积性体系的热传导性质,研究发现,它们的热传导行为都不满足傅里叶热传导定律.在这些体系里,热导率  $\kappa$  随体系粒子数  $N$  的增大而增大,呈现出一种幂指数关系  $\kappa \propto N^\alpha (0 < \alpha \leq 1)$ ,这种行为现在被称为反常的热传导(anomalous heat conduction)现象.2002 年, Narayan 等<sup>[11]</sup>通过分析一维流体的热输运性质,从理论上证明了具有总动量守恒的一维体系中这种反常的热输运行为存在的合理性,并且得到了  $\kappa \propto N^{0.33}$  的标度关系.此外,对于一些含有格点势(on-site potential)的一维体系,例如,文献 [12—15] 中分别研究了 Ding-a-Ding 模型、Ding-Dong 模型、Frenkel-Kontoroval (FK) 模型、 $\phi^4$  链等的热传导性质,格点势破坏了体系的动量守恒,研究结果表明,当体系达到一定的大小后,这些体系的

<sup>\*</sup> 湖南省杰出青年科学基金(批准号 03JJY1001)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: tangyi@xtu.edu.cn

热导率  $\kappa$  收敛, 因此在有限体系范围内, 它们的热传导行为服从傅里叶热传导定律. 这些结果说明动量不守恒是傅里叶热传导定律在一维体系中成立的一个重要条件. 然而人们在研究中又发现了一个特例, Rotator 模型中体系的总动量是守恒的, 它的热传导行为却服从傅里叶热传导定律<sup>[6]</sup>. 所以, 人们至今对一维体系中的热传导规律很难给出一个普适性的结论.

在实际的热传导过程中, 体系能量的耗散总是不可避免. 通常, 体系向周围环境的热辐射或热扩散、与基底之间的摩擦等都是导致能量耗散的一些原因. 从微观动力学的角度看, 耗散的引入改变了体系的哈密顿函数和动力学方程, 这无疑会对体系的宏观统计性质产生影响. Samiento 等<sup>[17]</sup>在研究能量脉冲在一维线性、非线性体系中的传输行为时发现, 耗散改变了能量脉冲在体系中传播的速度, 并且破坏了它传播的完整性. 2004 年, 祝恒江等<sup>[18]</sup>研究了体系中的热辐射和热扩散对 FPU- $\beta$  链和  $\phi^4$  链的热传导性质的影响. 他们的研究指出, 当耗散系数很小 ( $\gamma \approx 10^{-5}$ ) 时, 体系的局域热流沿着温度降低的方向减少, 但体系的温度分布和热导率与无耗散 ( $\gamma = 0$ ) 的情况相比没有显著的改变. 很显然, 对于全面掌握耗散体系中热传导的性质, 考虑各种不同的能量耗散机制是一项很有意义的工作. 本文中, 我们研究了阻尼对体系热传导性质的影响, 对无阻尼、弱阻尼和强阻尼三种情况下一维谐振子体系、FPU- $\beta$  链和  $\phi^4$  链中的热传导行为分别进行了研究.

## 2. 模型和动力学方程

考虑一个由  $N$  个质量为  $m$  的原子组成的一维周期性晶格体系. 在平衡时相邻原子间的距离为  $a$ . 原子的运动限制在沿  $x$  轴的方向, 用  $x_i$  表示第  $i$  个原子偏离其平衡位置的位移,  $p_i$  表示其相应的动量, 则体系的哈密顿函数为

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + V(x_{i-1}, x_i) + U(x_i), \quad (1)$$

式中  $V(x_{i-1}, x_i)$  和  $U(x_i)$  分别表示最近邻原子间的相互作用势和格点势. 谐振子链和 FPU- $\beta$  链的哈密顿函数中不包含格点势,  $V(x_{i-1}, x_i)$  分别为

$$V(x_{i-1}, x_i) = \frac{1}{2}(x_{i-1} - x_i)^2, \quad (2a)$$

$$V(x_{i-1}, x_i) = \frac{1}{2}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{\beta}{4}(x_{i-1} - x_i)^4. \quad (2b)$$

对于  $\phi^4$  链, 通常选取

$$\begin{aligned} V(x_{i-1}, x_i) &= \frac{1}{2}(x_{i-1} - x_i)^2, \\ U(x_i) &= \frac{1}{4}x_i^4. \end{aligned} \quad (3)$$

阻尼的大小一般正比于原子振动的速度. 利用哈密顿正则方程, 经过无量纲化以后, 原子的运动方程写为

$$x_i'' = f_{i+1} - f_i - \gamma x_i'. \quad (4)$$

这里, 上标符号“'”表示变量对时间求导,  $f_i = -\partial V(x_i, x_{i-1})/\partial x_i$  为相邻粒子作用于第  $i$  个粒子上的力. 方程 (4) 中的最后一项是阻尼项, 阻尼的强弱通过无量纲参数  $\gamma$  来刻画. 我们研究了三种不同的情况, 分别是无阻尼 ( $\gamma = 0$ )、弱阻尼 ( $0 < \gamma \leq 10^{-5}$ ) 和强阻尼 ( $\gamma \geq 10^{-3}$ ). 一般情况下, 体系的第一个原子和最后一个原子首先分别置于两个 Nosé-Hoover 热浴<sup>[19]</sup>中, 热浴的温度分别用  $T_1$  和  $T_2$  表示. 热浴中的两个原子满足的运动方程为

$$\begin{aligned} x_1'' &= -\zeta_+ x_1' + f_1 - f_2, \\ x_N'' &= -\zeta_- x_N' + f_N - f_{N+1}, \\ \zeta_+ &= \frac{x_1'^2}{T_1} - 1, \\ \zeta_- &= \frac{x_N'^2}{T_2} - 1, \end{aligned} \quad (5)$$

式中  $\zeta_{\pm}$  是 Nosé-Hoover 热浴乘子. 计算中, 我们采用了固定边界条件, 即  $x_0 = x_{N+1} = 0$ .

局域温度和局域热流是刻画体系热传输行为的两个重要物理量. 当体系趋近非平衡平衡态 (热力学稳恒态) 时, 这两个量的大小在涨落允许的范围内都不随时间改变. 利用方程 (4) 和 (5), 我们可以计算体系的热传输过程和性质. 数值积分采用四阶 Runge-Kutta 方法, 所有变量都被定义为双精度型的, 初始条件选择为体系的基态. 此后, 体系中所有原子在任意时刻  $t$  所处的动力学状态都可以计算出来. 达到稳恒态后, 体系的系综平均可以近似地用它的时间平均来代替<sup>[11]</sup>. 因此, 利用定义

$$t_i = x_i'^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{t} \right) \int_0^t x_i'^2(\tau) d\tau, \quad (6a)$$

$$J_i = j_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{t} \right) \int_0^t j_i(\tau) d\tau, \quad (6b)$$

可以得到体系中的局域温度  $t_i$  和局域热流量  $J_i$ . 阻尼的引入通常对体系的哈密顿函数和动力学性态都会产生影响. 在热传导的研究中, 哈密顿函数的这种改变显然不会改变对局域温度的计算, 但是对局域

热流  $j_i$  的计算会产生影响. 在考虑阻尼很小 ( $\gamma \ll 1$ ) 的情况下, 对 (6b) 式中  $j_i$  的计算近似地采用无阻尼体系中相应的形式是合理的<sup>[18]</sup>, 所以

$$j_i = x'_i \frac{\partial K(x_{i+1}, x_i)}{\partial x_{i+1}}. \quad (7)$$

在热浴的作用下, 体系从基态逐渐变化到热力学稳恒态需要经过足够长的时间. 我们的研究表明, 经过  $\tau \approx 1 \times 10^7$  个积分步后, 体系已经处于一种非常好的稳恒态. 此后, 我们记录下了体系的许多状态来建立系综. 在计算中, 数值积分一直持续到  $\tau \approx 5 \times 10^7$  个积分步, 因此, 我们选取的系综介于  $1 \times 10^7 - 5 \times 10^7$  积分步之间.

### 3. 结果和讨论

我们首先研究了阻尼对体系温度分布的影响. 从图 1(a) 中我们可以清楚地看到, 当  $\gamma = 0$  时, 谐振子体系中除去两端靠近热浴的粒子, 体系中其他部分粒子的温度都相同, 说明在可积体系中不能形成温度梯度. 计入阻尼后可积性被破坏, 在小阻尼情况下, 数值模拟的结果表明原来的可积体系中形成了很好线性的温度分布. 在图 1(a) 中我们给出了不同的阻尼系数下, 由 500 个原子组成的一维谐振子晶格体系中的温度分布情况. 当  $10^{-4} < \gamma < 10^{-3}$  时, 一维谐振子晶格体系中的温度分布展现出很好的线性关系. 这一结果与非可积性是一维体系形成温度梯度的必要条件的结论相一致. 如果继续增大  $\gamma$  的值, 也就是在强阻尼条件下 ( $\gamma \geq 1 \times 10^{-3}$ ), 体系最终形成了凹形的温度分布. 此时, 体系中部分粒子的温度低于低温热浴的温度值, 有的甚至趋向于零. 在图 1(b) 和 (c) 中, 对非可积体系 FPU- $\beta$  链和  $\phi^4$  链的计算显示, 在弱阻尼条件下 ( $0 < \gamma \leq 10^{-5}$ ), 体系的温度分布仍然能较好地满足线性关系. 这种现象与祝恒江等<sup>[18]</sup>研究能量耗散对体系温度分布的影响的结论相类似. 同样, 随着阻尼系数  $\gamma$  的增大, 体系最终也会形成与可积体系相同的凹形的温度分布. 对一维体系温度分布的研究结果说明: 弱阻尼对非可积体系的宏观热力学性质的影响是一种微扰, 而对于可积体系则是一种性态的改变. 类似于热阻, 阻尼直接导致了能量的衰减, 因此在原来的可积体系中也能够形成温度梯度. 另外需要指出的是, 图 1 中体系两端靠近热浴的原子温度都出现了较大跳跃, 这种现象一方面是由于 Nosé-Hoover 热浴中的原子在相

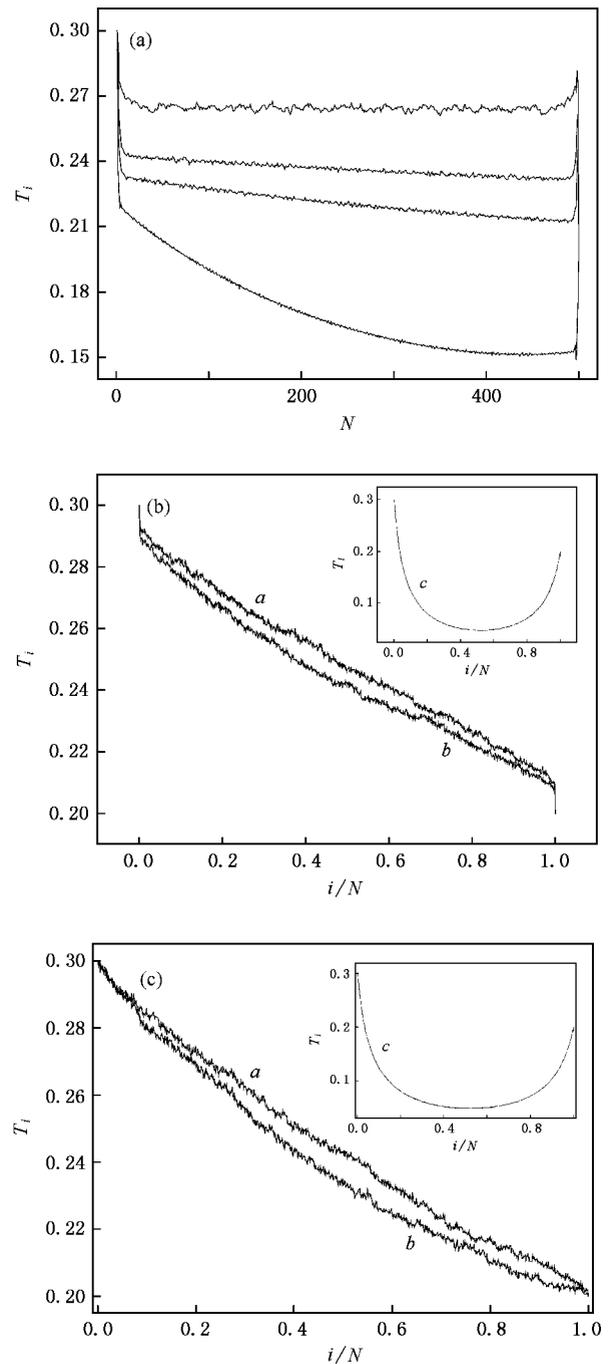


图 1 不同的阻尼系数下一维晶格体系中的温度分布 (a) 一维谐振子晶格体系, 曲线从上到下依次表示  $\gamma = 0, 1 \times 10^{-4}, 1.5 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-3}$  四种情况 (b) FPU- $\beta$  链 (c)  $\phi^4$  链. 曲线 a、曲线 b 和内插图中的曲线 c 分别对应  $\gamma = 0, 1 \times 10^{-5}$  和  $1 \times 10^{-3}$  的三种情况.  $N = 500, T_1 = 0.3, T_2 = 0.2$

空间运动轨道的分布不均匀<sup>[20]</sup>; 另一方面是因为热浴与原子链的连接处实际上构成了两种不同性质材料的界面, 热阻导致界面两边的温度产生了这种跳跃.

在理想一维晶格体系热传导的研究中,局域热流的大小处处相等是判断体系处于稳恒态的一个重要标志.计及体系能量的耗散后,非可积体系中的局域热流沿着链的方向单调地递减<sup>[18]</sup>.考虑阻尼后,我们在可积体系和非可积体系的研究中都得到了类似的结论.图 2 中给出了一维谐振子晶格体系中的局域热流  $J_i$  与粒子位置  $i$  的关系.当  $\gamma = 0$  时,忽略涨落的影响,局域热流可以认为是恒量.当  $\gamma > 0$  时,局域热流在靠近高温热浴的一端明显地大于无阻尼体系中所对应的量,而在相反的一端却明显地变小了.这种变化的趋势随阻尼系数的增大变得更加显著.有趣的是,在靠近低温热浴的一端,局域热流甚至可以变为负值.

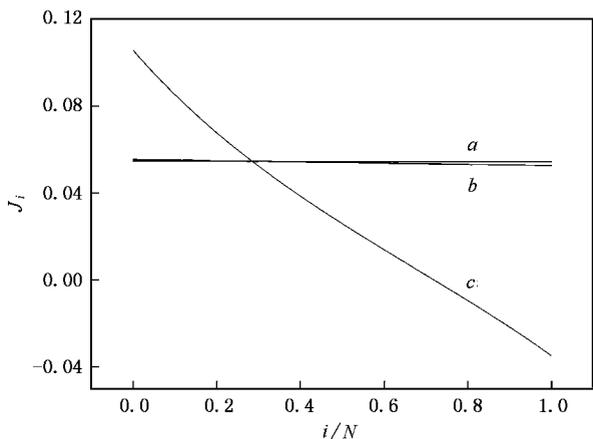


图 2 阻尼作用下一维谐振子晶格体系中的局域热流与原子位置的关系.曲线 a、曲线 b 和曲线 c 分别表示无阻尼、弱阻尼和强阻尼三种情况.  $N = 1000$

当线性的温度分布在体系中建立起来后,根据傅里叶热传导定律

$$j = -\kappa \nabla T,$$

体系的热导率可以表示为

$$\kappa = \frac{JN}{T_1 - T_2}$$

的形式.因此,当体系两端热浴的温度固定后,人们往往借助于分析体系的总热流量随粒子数的变化关系来判断体系的热传导是否遵守傅里叶定律:如果体系的总热流量随粒子数的增加而收敛,则体系的热传导是正常的(遵守傅里叶定律);否则,称为反常的热传导现象.然而,计入阻尼后,从图 2 中我们已经看到体系中的局域热流  $J_i$  变成了与位置相关的函数,因此,对体系中热导率的计算可以采用下列公式<sup>[18]</sup>:

$$\kappa = \frac{1}{T_1 - T_2} \int_0^N \mathcal{J}(x) dx. \quad (8)$$

显然,当  $\gamma = 0$  时,

$$JN = \int_0^N \mathcal{J}(x) dx.$$

图 3 为不同的阻尼系数下一维晶格体系的热导率  $\kappa$  与粒子数  $N$  的关系.在弱阻尼( $\gamma \leq 1 \times 10^{-5}$ )条件下,体系中的热导率  $\kappa$  随粒子数的变化关系与无阻尼体系中对的情况非常接近.随着  $\gamma$  值的增大,两者的差别逐渐显示出来.当阻尼足够大时,一维体系中的热导率  $\kappa$  都呈现收敛的趋势.对于一维谐振子晶格体系和 FPU- $\beta$  链,体系原来发散的热导率变得收敛了,这种变化实际上体现了体系热传导性质一种本质的转变.对于  $\phi^4$  链,体系的热导率在有限的体系尺度内收敛,然后又出现了下降的趋势.这种现象的出现源于体系中负的局域热流的形成.在强阻尼条件下,靠近低温热浴一端的热流方向与靠近高温热浴一端的热流方向相反,因此体系的热导率

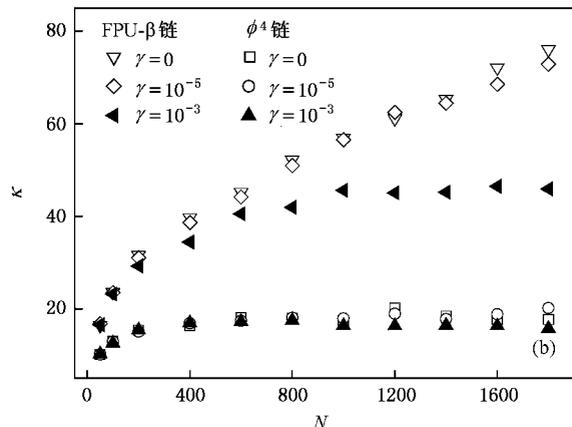
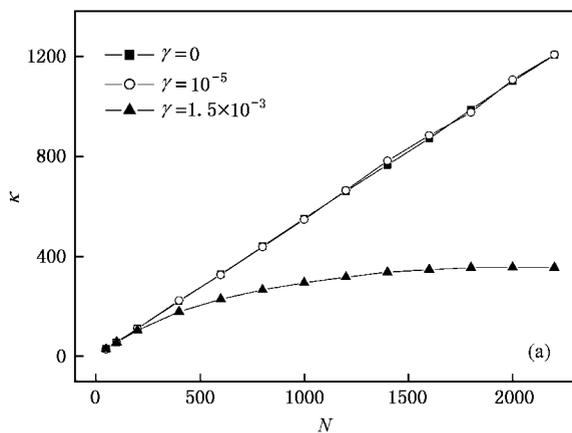


图 3 不同的阻尼系数下体系中的热导率随体系原子数的变化关系 (a)谐振子链 (b)FPU- $\beta$  链和  $\phi^4$  链

$\kappa$  反而减少. 引入阻尼后, 虽然一维晶格体系中出现热导率  $\kappa$  收敛的现象, 但是这种收敛与无阻尼体系中出现的正常热传导行为有着本质的区别. 凹形的温度分布和单调递减的局域热流的形成展现了一维体系热传导行为一些新的特征. 这种对更加接近于真实物理体系中能量传输过程的研究结论, 对人们更加全面理解一维真实物理体系中能量传输的行为无疑具有重要的意义.

## 4. 结 论

本文系统地研究了考虑阻尼后一维晶格体系中能量的传输行为, 研究结果展现了体系中一些新的

特征. 当体系可积性因阻尼的引入而被破坏时, 在典型的可积体系(如一维谐振子晶格中), 也能够形成线性的温度分布. 这是一个很重要的结果, 它直观地体现了体系从可积向非可积转变后, 动力学性质的一种性态上的改变; 同时也为非可积性是体系中形成温度梯度的必要条件这一论点提供了新的佐证. 弱阻尼对非可积体系中的温度分布和热导率的影响是一种微扰. 在强阻尼条件下, 由于体系能量的过度耗散, 体系中呈现出凹形的温度分布. 本文中与阻尼密切相关的一维晶格体系中热传导性质的这些研究结果, 不仅有助于人们更全面和深入理解一维真实物理体系中能量传输的行为, 而且对于将来设计和制备微观热器件也具有应用的价值.

- 
- [ 1 ] Lepri S, Livi R, Politi A 2003 *Phys. Rep.* **377** 1  
 [ 2 ] Hu B, Li B, Zhao H 1998 *Phys. Rev. E* **57** 2992  
 [ 3 ] Hu B, Li B, Zhao H 2000 *Phys. Rev. E* **61** 3828  
 [ 4 ] Tomaž P, David K C 2005 *Chaos* **15** 015117  
 [ 5 ] Rieder Z, Lebowitz J, Lieb E 1967 *J. Math. Phys.* **8** 1073  
 [ 6 ] Toda M 1979 *Phys. Scr.* **20** 424  
 [ 7 ] Yang Y R, Yan X H, Cao J X *et al* 2004 *Chin. Phys.* **13** 2109  
 [ 8 ] Lepri S, Livi R, Politi A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1896  
 [ 9 ] Hatano T 1999 *Phys. Rev. Lett.* **59** R1  
 [ 10 ] Li B, Zhao H, Hu B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 63  
 [ 11 ] Narayan O, Ramaswamy S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 200601  
 [ 12 ] Gasati G, Ford J, Vivaldi F *et al* 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 1861  
 [ 13 ] Prosen T, Robnik M 1992 *J. Phys. A* **25** 3449  
 [ 14 ] Hu B, Lei Y 2005 *Chaos* **15** 015119  
 [ 15 ] Savin A V, Gendelman O V 2003 *Phys. Rev. E* **67** 041205  
 [ 16 ] Giardinà G, Livi R, Politi A *et al* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2144  
 [ 17 ] Sarmiento A, Reigade R, Romero A H *et al* 1999 *Phys. Rev. E* **60** 5317  
 [ 18 ] Zhu H J, Zhang Y, Zhao H 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 2219  
 [ 19 ] Nosé S J 1984 *Chem. Phys.* **81** 511  
 Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695  
 [ 20 ] Phillipov A, Hu B, Zeltser A 1998 *J. Phys. A* **31** 7719

# Heat conduction in one-dimensional systems with damping<sup>\*</sup>

Li Xin-Xia Tang Yi<sup>†</sup>

( *Institute of Modern Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China* )

( Received 24 November 2005 ; revised manuscript received 18 July 2006 )

## Abstract

By making use of the method of molecular dynamics, we study the behaviors of heat conduction in one-dimensional systems under the influence of damping. The results show that when the integrability of the systems is destroyed by the damping, linear temperature profiles appear even in the harmonic lattices. Weak damping acts as a sort of perturbation in nonintegrable systems and does not substantially change their temperature profiles and the thermal conductivity, while it causes essential change in integrable systems. However, in the case of strong damping, because of the excessive dissipation of energy, temperature profiles in a sunken shape and the convergent thermal conductivity appear.

**Keywords** : nonlinear dynamics, one-dimensional systems, energy transport, damping

**PACC** : 6670, 6740K

---

<sup>\*</sup> Project supported by the Outstanding Young Researchers Foundation of Hunan Province, China ( Grant No. 03JJY1001 ).

<sup>†</sup> E-mail : tangyi@xtu.edu.cn