

一维均匀 Morse 晶格体系的热流棘齿效应*

高秀云 郑志刚†

(北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2010年8月16日收到; 2010年9月3日收到修改稿)

本文系统研究了系统两端无平均温差时一维均匀 Morse 晶格中的热流棘齿效应. Morse 晶格的两端分别与两个热浴相接触, 其中一端热浴温度周期调制, 另一端热浴温度保持不变, 两端热浴温度长时平均相等. 数值结果表明, 当对一端热浴温度进行周期调制时, 系统中便会有稳定的定向热流产生. 通过改变调制频率和强度, 可以控制热流的大小及方向. 在合适的频率范围内, 可观察到一种非常有趣的现象——非定态负热导现象, 即系统中产生的定向热流逆着系统温度梯度方向由低温端流向高温端. 通过热波动力学分析(分析热流及温度分布的时空演化行为), 本文对此现象进行了说明. 还研究了 Morse 系统的特征参量对定向热流的影响, 这为设计材料优化棘齿热流提供了理论依据.

关键词: 热传导, 热流棘齿, 热导率, Morse 晶格

PACS: 44.10.+i, 05.70.Ln, 05.40.-a, 44.05.+e

1. 引言

热流的产生, 控制, 输运和利用在生产生活中有许许多多的应用. 长期以来, 人们对此方面进行大量探索, 取得了大量有意义的研究成果^[1-9]. 近些年, 随着声学^[10]的建立与发展, 人们对热传导方面的研究得到了长足的发展. 为了操纵控制声子输运(热流), 人们在理论上提出了各种各样的热模型, 比如热二极管^[11-15], 热晶体管^[16], 热逻辑门^[17], 热记忆器^[18]等等. 伴随理论研究, 实验工作同时取得了不断地进步. 碳管热整流器^[19,20]和碳管声子波导器^[21]已在实验室中得以实现. 在不久的将来, 像控制电流一样方便地控制热流必将得以实现.

最近, 有关热的单向输运方面的研究取得了突破性的进展. 受布朗马达^[22-27]研究思想的启发, 一些学者致力于在分子尺度内设计热泵, 使其可以逆着温度梯度方向将热流由低温输运到高温^[28-33]. 基于非线性晶格, 热流棘齿效应^[34-36]的提出及研究使热泵研究进一步深入并具实际设计意义. 文献^[34]研究了两段弱耦合的非对称 Frenkel-Kontorova (FK) 系统中存在的热流棘齿效应, 研究发现, 若系

统两端无静态温度偏置, 当一端热浴进行周期调制但长时平均保持系统两端无净温度偏流时, 系统中会有稳定的定向热流产生, 并且通过改变调制频率可改变热流大小及方向. 当系统两端存在静态温度梯度时, 这种热浴的周期调制就像热泵一样能逆着静态温度梯度方向将热流由低温端输运到高温端. 最近一个有趣的研究表明, 当两端热浴同时进行正弦混频反向调制时, 一维均匀 Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 系统和 Lennard-Jones (LJ) 系统中可以出现棘齿热流^[35]. 不同于文献^[34]采用的绝热近似, 这里的热流产生机制在于随时间混频调制温度场的动力学对称性破缺. 完全不同于上述两种方案, 文献^[36]研究了两端周期调制热浴温度保持每时每刻都严格相等时, 两段弱耦合的非对称 FK 结构中存在的定向热流. 结果显示: 在高频和低频区, 由于热浴调制过快或过慢, 系统两端均只能感受到相同的温度场, 导致系统中无热流产生. 在中频区, 非对称的两段 FK 结构会对热浴调制产生不同的响应, 最终导致系统中有非零的定向热流产生.

Morse 势是一种很重要的底势形式^[11,37-39]. 在某些物理体系中, 选择 Morse 势会更加真实. 比如 Morse 底势可用来用来表征流体和金属之间的相互

* 国家自然科学基金(批准号:11075016, 10875011), 国家重点基础研究发展计划(批准号:2007CB814805)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: zgzheng@bnu.edu.cn

作用,也可研究 DNA 链的动力学行为. 在本文我们可以看到,由于 Morse 晶格独特的材料性质,其中的棘齿热流与其他系统中的不尽相同,呈现出有趣的新现象,新特征. 比如,高频调制时, Morse 晶格中的二次流反转发生在两个固定调制频率取值下,与材料尺度无关. 不同于其他一维非线性晶格(如 FK, FPU)中的流反转机理,此系统中的流反转并非频率共振的结果,是 Morse 晶格特有的一种新现象. 在低频调制下,系统中出现了一种更为有趣的非定态负热导现象,即定向热流逆着系统温度梯度方向由低温端流向高温端. 本文旨在仔细探讨 Morse 晶格中棘齿热流的新现象,新特征. 并通过系统研究 Morse 系统的特征参量对定向热流的影响,以便为设计材料优化棘齿热流提供理论依据.

2. 模 型

考虑由 N 个质量为 m 的简谐链构成的一维均匀非线性 Morse 晶格,如图 1 所示. 其哈密顿量为

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{p_i^2}{2m} + U(q_i) \right\} + \sum_{i=0}^N V(q_{i+1}, q_i), \quad (1)$$

其中, q_i 和 p_i 分别为第 i 个粒子离开其平衡位置的位移和相应的动量.

$$V(q_{i+1}, q_i) = \frac{1}{2}k(q_{i+1} - q_i)^2 \quad (2)$$

是最近邻粒子间的相互作用势, k 为简谐耦合强度.

$$U(q_i) = D(e^{-\alpha q_i} - 1)^2 \quad (3)$$

是 Morse 底势, D 和 α 为底势的势场强度和非线性强度.

为了研究此系统的热传导行为,我们让 Morse 晶格的第一个和第 N 个粒子分别与温度为 T_L 和 T_R 的热浴相接触. 左右两端热浴温度分别为

$$\begin{aligned} T_L &= T_L(t) = T_0[1 + A \cdot \text{sgn}(\sin\omega t)], \\ T_R &= T_0. \end{aligned} \quad (4)$$

其中, T_0 为系统的平均环境参考温度, A 和 ω 分别为左端热浴周期调制的强度和频率.

根据(1), (2)和(3)式,我们可写出系统的运动方程如下:

$$\begin{aligned} m\ddot{q}_i &= -V'(q_i - q_{i-1}) + V'(q_{i+1} - q_i) - U'(q_i), \\ (i &= 2, 3, \dots, N-1). \end{aligned} \quad (5)$$

对于两端粒子,考虑热浴对其影响,运动方程如下:

$$\begin{aligned} m\ddot{q}_1 &= -V'(q_1 - q_0) + V'(q_2 - q_1) \\ &\quad - U'(q_1) + F_{B1}, \end{aligned} \quad (6)$$

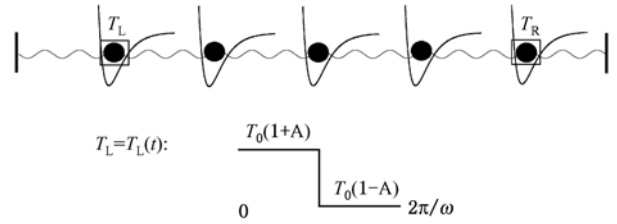


图 1 一维均匀 Morse 晶格示意图(其左右两端分别与周期调制热浴 $T_L = T_L(t)$ 和恒温热浴 T_R 相接触)

$$\begin{aligned} m\ddot{q}_N &= -V'(q_N - q_{N-1}) + V'(q_{N+1} - q_N) \\ &\quad - U'(q_N) + F_{BN}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 F_{B1} (F_{BN}) 是左(右)端热浴对左(右)端粒子的作用力.

第 i 格点处的平均(有效)局域温度和平均(有效)局域热流分别定义^[2]为

$$T_i = m\langle \dot{q}_i^2 \rangle, \quad (8)$$

$$J_j = k\langle \dot{q}_i(q_i - q_{i+1}) \rangle, \quad (9)$$

其中 $\langle \cdot \rangle$ 代表长时间平均.

当热浴温度场周期调制时,暂态过程后,第 i 格点处的瞬时局域温度和瞬时局域热流随时间发生周期性变化^[34],即

$$\begin{aligned} T_i(t) &= m\dot{q}_i^2(t) \\ &= T_i(t + 2\pi/\omega), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_i(t) &= k\dot{q}_i(t)(q_i(t) - q_{i+1}(t)) \\ &= J_i(t + 2\pi/\omega) \end{aligned}$$

因此,在一个周期 $t \in (0, 2\pi/\omega)$ 内,可定义第 i 格点处的周期局域温度和周期局域热流^[36]如下:

$$\bar{T}_i(t) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n T_i(t + 2j\pi/\omega), \quad (10)$$

$$\bar{J}_i(t) = \sum_{j=1}^n J_i(t + 2j\pi/\omega), \quad (11)$$

其中 n 为周期数.

所以,平均局域温度和平均局域热流又可表示为

$$T_i = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \bar{T}_i(t) dt, \quad (12)$$

$$J_i = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \bar{J}_i(t) dt, \quad (13)$$

由于系统的各态历经性,这样经两次平均后得到的热流值就等同于前述长时平均的热流值. 去暂态后,各个格点处的平均局域热流处处相等 $J_i = J_i'$, 所以系统的平均热流

$$J = \left(\sum_{i=1}^N J_i \right) / N = J_i. \quad (14)$$

我们在研究过程中一般关注的即为此热流.

为数值计算的方便,对参数进行无量纲化:位移由晶格常数 $[a]$ 无量纲化,动量由 $[a(mk)^{1/2}]$ 无量纲化,频率由 $[(k/m)^{1/2}]$ 无量纲化,温度由 $[ka^2/k_B]$ 无量纲化,能量由 $[ka^2]$ 无量纲化.

实际模拟中,我们选择 Langevin 热浴. 采用的高斯白噪声满足涨落耗散关系,即

$$\langle \xi_{L/N}(t) \rangle = 0, \\ \langle \xi_{L/N}(t) \xi_{L/N}(t') \rangle = 2k_B \eta T_{L/R} \delta(t - t'),$$

其中 k_B 是 Boltzmann 常数, η 是系统与热浴之间的耦合强度. 因此, (6) 和 (7) 式中 F_{B1} 和 F_{BN} 具体形式如下:

$$F_{B1} = \xi_1(t) - \eta \dot{q}_1, \\ F_{BN} = \xi_N(t) - \eta \dot{q}_N.$$

采用固定边界条件 $q_0 = q_{N+1} = 0$, 并使用辛速度 Verlet 算法^[40] 求解粒子的运动方程. 其中选取系统与热浴之间的最佳耦合强度 $\eta = 0.5$, 积分步长为 $h = 0.005$, 并且模拟足够长的时间以保证系统演化达到非平衡稳态.

为简单起见,在本文中取 $m = a = k_B = \alpha = 1, A = 0.5$, 无量纲化的温度 $T_0 = 0.09$. 则研究过程中,可调参量减少到四个:热浴调制参数 ω , 反映材料特性参量 k, D 和粒子数 N .

3. 调控参数对定向热流的影响

首先,我们研究热浴调制频率 ω 对系统平均热流的影响. 在(2)式所示的随时间周期变化的非平

衡温度场驱动下,系统中有非零的平均净热流 J 产生(如图2(a)所示),并通过调整热浴调制频率 ω 可改变热流大小及方向. 高频极限 $\omega \rightarrow \infty$ 时,热浴被驱动变化太快,以至于左端粒子来不及随之响应,它只能感受到平均环境参考温度 T_0 . 这种情形相当于系统处于热平衡态,所以 $\omega \rightarrow \infty$ 时, $J \rightarrow 0$.

绝热极限 $\omega \rightarrow 0$ 时,由于热浴变化足够慢,绝热极限下棘齿热流的产生可以很好地解释. 调制温度 $T_L(t)$ 在其变化的前后半周期内均有足够的时间使体系内建立起稳定的温度分布. 所以,在前后半周期内, $T_L(t)$ 可分别近似表示为静态温度偏流 $T_0(1+A)$ 和 $T_0(1-A)$, 相应地,分别导致系统中产生正负向热流 J_+ 和 J_- . 由此, $T_L(t)$ 温度场驱动产生的热流 J 约为 J_+ 和 J_- 的平均值(如图2(a)中的水平箭头所示). 经数值研究表明,在本文所研究的温度范围(无量纲化温度 $T_0 = 0.09$ 附近)内, Morse 晶格体系的热传导率随着温度的升高而减小(如图2(b)所示). 正负向热流 J_+ 和 J_- 对应的系统平均温度分别为

$$T_+ = \frac{T_0(1+A) + T_0}{2}, T_- = \frac{T_0(1-A) + T_0}{2}.$$

显然 $T_+ > T_-$, 则 $J_+ < J_-$, 所以 $\omega \rightarrow 0$ 时,系统中有负向的棘齿热流产生.

非绝热条件下,随着 ω 增大,热流 J 逐渐减小,但它并不会单调减小为零. 由图可见,在某些中间频率值处,热流 J 会两次跨过零而反转其方向. 很显然,在一段很窄的频率窗口内,我们可观察到两个明显的正负热流峰值.

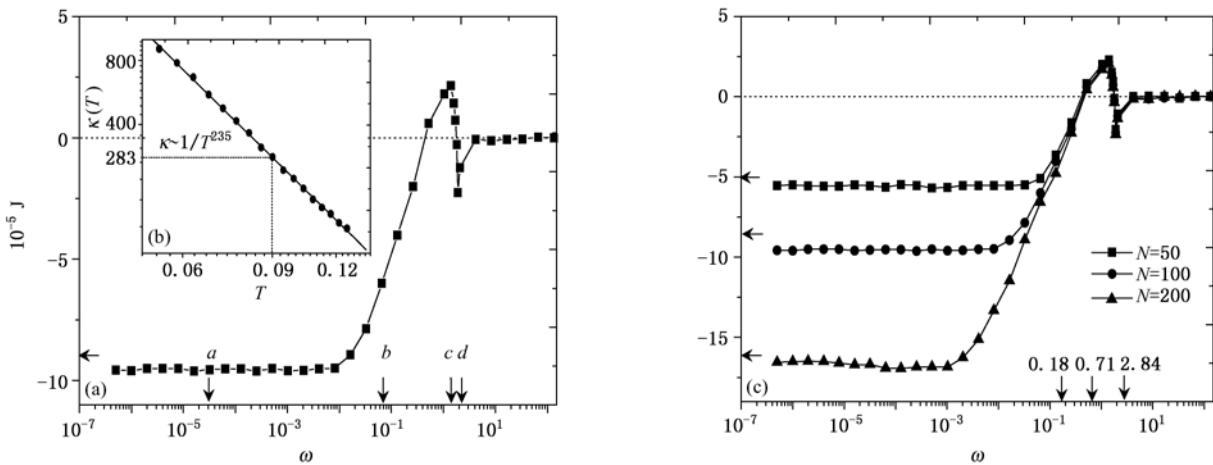


图2 (a) 系统平均热流 J 随热浴调制频率 ω 变化的曲线,其中 $D = 0.5, k = 0.6, N = 100$; (b) 无量纲化环境参考温度 $T_0 = 0.09$ 附近, Morse 晶格的热传导率 κ 对系统平均温度的依赖曲线,其中 $D = 0.5, k = 0.6, N = 100$; (c) 系统粒子数 N 取不同值的情况下,系统平均热流 J 随热浴调制频率 ω 变化的曲线,其中 $D = 0.5, k = 0.6$

流反转是一种很有趣的现象,在一端周期调制的弱耦合非对称 FK 系统^[34]和两端混频反向正弦调制的 FPU 系统^[35]中都曾观察到此种现象. 研究发现这两种体系中出现的流反转现象均与系统的热响应时间相关,是系统特征频率与热浴调制频率之间的共振效应. 此处, Morse 体系中出现的二次流反转现象虽然和文献[35]中出现的流反转现象非常相似,但它并非频率共振的结果. 下面作简单分析.

非调制 Morse 系统的热传导遵守傅里叶定律^[11], 所以其温度变化满足扩散方程

$$\partial T(x,t)/\partial t = (\kappa/c)\partial^2 T(x,t)/\partial x^2,$$

其中 κ 和 c 分别为系统的热导率和比热容. 此方程的解为高斯波包:

$$T(x,t) = 1/2 \sqrt{\pi\kappa t/c} \exp(-x^2 c/4\kappa t),$$

因此,系统的热响应时间可估计为能量在系统中的

扩散时间,即 $\tau \propto cN^2/4\kappa$. 所以系统的特征频率可估算为 $\omega_c \approx 2\pi/\tau = 8\pi\kappa/cN^2$. 对于经典的输运过程,简谐晶格系统的比热容为 $c = k_B$. 当 Morse 底势强度很弱时,可将 Morse 晶格近似看作是简谐链,估算比热 $c \approx k_B$. 在本文中取 $k_B = 1$, 所以可估算 $c \approx 1$. 由图 2(b)可见,系统平均环境参考温度 $T_0 = T = 0.09$ 时, Morse 晶格 ($D = 0.5, k = 0.6$) 的热导率为 283. 由此可估算出不同尺度的 Morse 晶格的特征频率如下: $N = 50$ 时, $\omega_c \approx 2.84$, $N = 100$ 时, $\omega_c \approx 0.71$, $N = 200$ 时, $\omega_c \approx 0.18$. 如图 2(c)所示,指向 x 轴的竖直箭头标注的就是这些估算频率值. 由图显而易见,对于不同的 N ,流反转发上在相同的频率值而非发生在 ω_c 处,即随着 N 增大,正负热流峰值并不发生红移. 所以可判定此处流反转非频率共振效应,而是 Morse 晶格特有的现象.

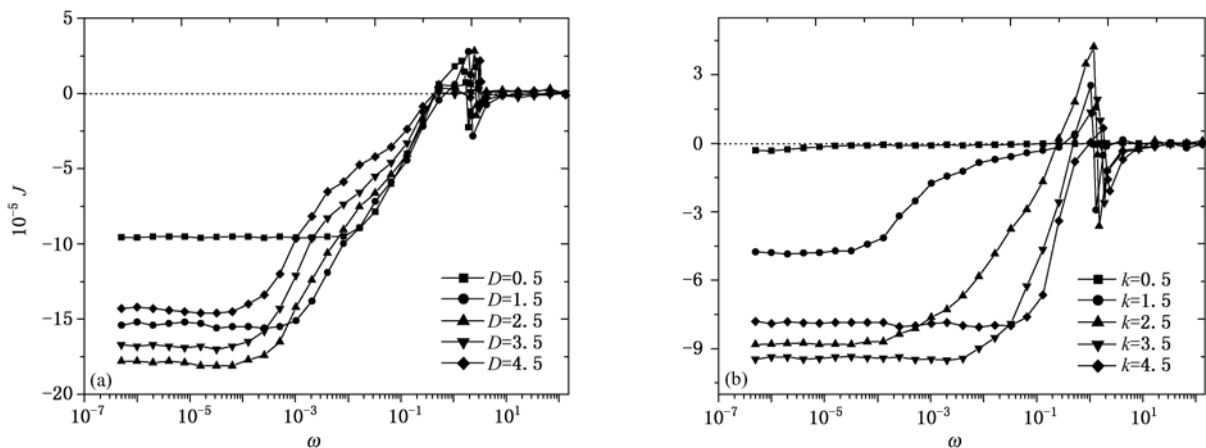


图3 (a) Morse 底势强度 D 取不同值的情况下,系统平均热流 J 随热浴调制频率 ω 变化的曲线,其中 $k=0.6, N=100$; (b) 粒子间简谐耦合强度 k 取不同值的情况下,系统平均热流 J 随热浴调制频率 ω 变化的曲线,其中 $D=0.5, N=100$

当 D 逐渐增大时, Morse 体系的非线性效应越来越显著,此时系统的比热不再是常数,它不仅是系统平均温度的函数,而且与底势强度 D 密切相关. 同时,底势强度 D 对体系的热导率有非常大的影响. 另外,粒子间的耦合强度 k 对体系热导率同样有很大的影响. 对于 Morse 体系热传导特性的讨论是个复杂的过程,我们将另文作详细系统的讨论. 但由以上简单分析可推测:底势强度 D 及耦合强度 k 对 Morse 体系的流反转频率,绝热(非绝热)热流大小及绝热热流所对应的频率宽度必将产生较大的影响. 图 3(a)和(b)分别给出了 D, k 取不同值的情况下,系统平均热流 J 随热浴调制频率 ω

变化的曲线. 由图可见, D, k 大小对系统热流 J 有明显的影晌.

4. 材料特性对定向热流的影响

为了进一步了解底势强度 D 和耦合强度 k 对系统平均热流 J 的影响,我们给出不同参数取值下 $J-D$ 和 $J-k$ 关系曲线. 如图 4(a)所示为粒子间简谐耦合强度 k 取不同值时,绝热热流 J ($\omega = 3.2 \times 10^{-5}$) 随 Morse 底势强度 D 变化的曲线. 从图中可看出: J 随 D 变化复杂: 首先,当 D 从零开始增大时,负向热流 J 从零急速增大到第一个极值.

紧接着, J 随 D 增大而减小达到第二个极值. 此后, 随 D 增大, J 再次迅速增大并达到其最大值. 最后, J 随 D 增大逐渐减小并逐渐趋于零. 粒子间耦合逐渐增强 (k 由小变大) 时, 两个热流极值逐渐减小直到强耦合时完全消失, 并且它们所对应的 D 依次增大. 随着 k 增大, 热流最大值所对应

的 D 同样逐渐增大, 但是热流最大值随 k 非单调变化, 在某一最优的耦合强度, 一维 Morse 晶格系统的系统绝热热流必将取得最大值. 定向热流与底势和耦合强度的这种依赖关系非常有趣, 因为在棘齿定向输运研究中我们也发现类似的依赖关系^[41,42].

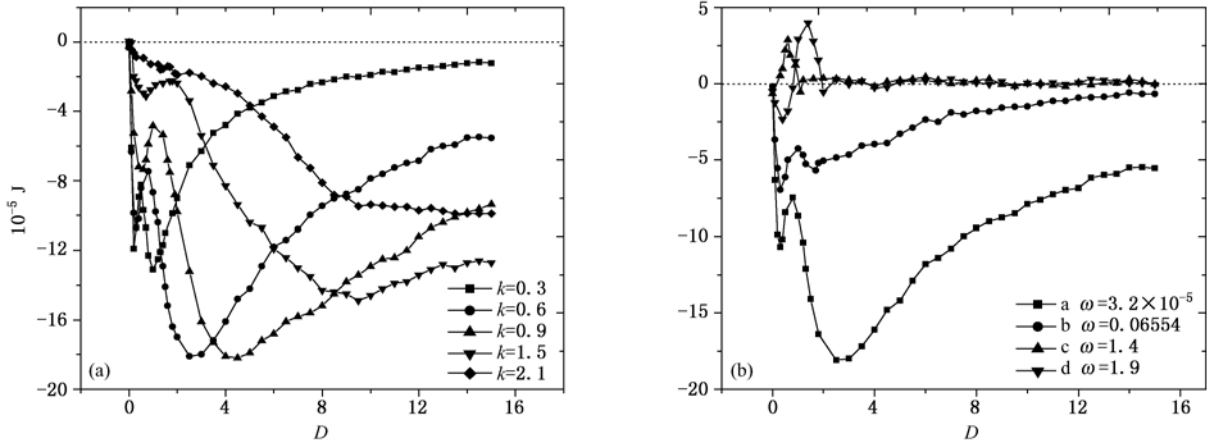


图4 (a) 粒子间简谐耦合强度 k 取不同值的情况下, 系统平均热流 J 随 Morse 底势强度 D 变化的曲线, 其中 $\omega = 3.2 \times 10^{-5}$, $N = 100$; (b) 热浴调制频率 ω 取不同值 (如图2(a) a, b, c, d 所示) 的情况下, 系统平均热流 J 随 Morse 底势强度 D 变化的曲线, 其中 $k = 0.6$, $N = 100$

如图4(b)所示为从图2(a)中选取的四个典型调制频率 ($a: \omega = 3.2 \times 10^{-5}$, $b: \omega = 0.06554$, $c: \omega = 1.4$, $d: \omega = 1.9$) 取值下, 系统平均热流 J 随 Morse 底势强度 D 变化的曲线. 由图可见, 高频调制的 J - D 曲线和低频调制的 J - D 曲线存在明显的差别. 低频调制时, D 在很大的取值范围内均可保证系统中有稳定的平均热流存在并保持其方向不变. 然而, 当高频调制时, 只有当 D 取值较小, 即 Morse 底势强度较弱时, 系统中才会有净热流出现, 并且随着 D 的改变, 高频调制热流会在参数空间内反转其方向. 因此, 当底势强度很大时, 系统的定向热流在高频调制情况下会受到抑制.

上述结果表明, 不同耦合强度下, 绝热热流随 D 变化曲线关系复杂, 内容丰富. 事实上, 这种有趣的 J - D 依赖关系是线性势能 k 与非线性势能 D 之间的竞争效应与 Morse 体系的热导率对温度的敏感依赖性双重作用的结果. 下面以图4(a)中 $k = 0.6$ 的曲线为例详细讨论.

低频驱动下的绝热热流 J 可近似为两个非调制静态热流 J_+ 和 J_- 的平均值,

$$J = \frac{J_+ + J_-}{2}.$$

所以我们可通过探究 J_+ - D, J_- - D 关系以洞悉 J - D

关系. 在图5(a)中, 我们同时给出了 J_+ 和 J_- 分别对应的系统平均温度 T_+ 和 T_- 下, Morse 晶格的热导率随 D 变化的曲线. 很显然, 对于小 D , 温度对体系热导率的影响非常显著, 低温 T_- 对应的热导率远远大于高温 T_+ 对应的热导率. 而对于大 D , 温度对体系热导率的影响微乎其微, 两条曲线基本重合. 但是, 比较两条曲线可看出, T_+ 和 T_- 对应的 κ - D 曲线有相似的变化趋势: 随 D 增大, 在小 D 时发生明显振荡, 在大 D 时 κ 迅速减小, 几乎接近为零.

对于 Morse 晶格的热导率与底势强度之间的关系 (如图5(a)所示), 我们可以这样来理解: 当粒子间弱耦合 ($k = 0.6$) 时, 对于小 D , 线性势能 k 与非线性势能 D 相当, 其间的复杂竞争导致复杂的 κ - D 结构. 当 D 增大, 即 Morse 底势的非线性增强时, 非线性势能逐渐占优势, 声子与声子之间的相互作用增强, 导致声子局域化增强, 由此会阻碍热的传导, 所以热导率很小, 几乎接近为零.

由于 T_+ 和 T_- 对应 κ - D 曲线的相似性和差别性, 导致 $|J_+|$ - D 曲线和 $|J_-|$ - D 曲线既非常相似又有细微的差别, 如图5(b)所示. 虽不明显, 但经仔细观察可发现: 虽然两条曲线的变化趋势非常相

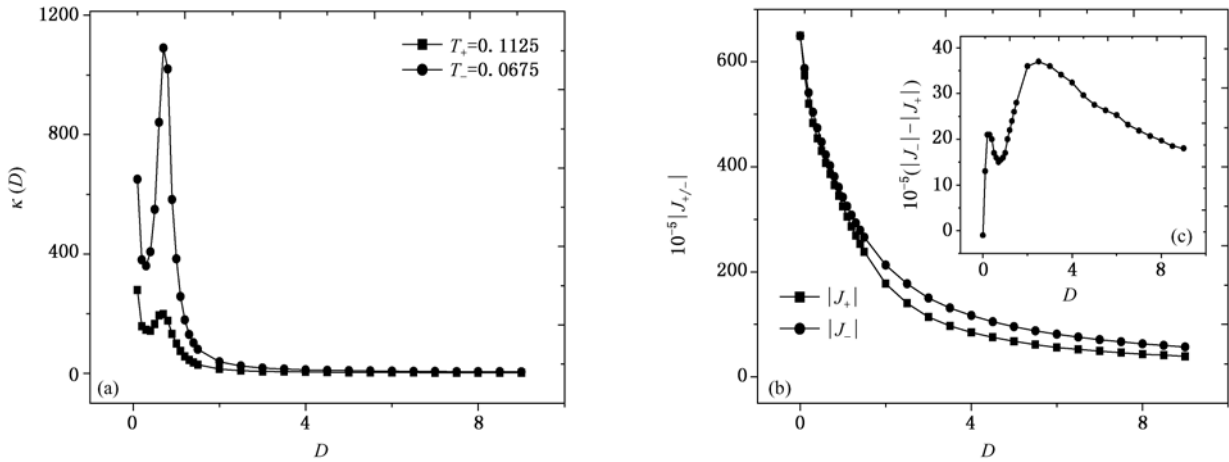


图5 (a) 非调制静态热流 J_+ 和 J_- 分别对应系统平均温度 T_+ 和 T_- 下, Morse 晶格的热导率随 D 变化的曲线; (b) 非调制静态热流 J_+ 和 J_- 的绝对值随 D 变化的曲线; (c) 非调制静态热流 J_+ 和 J_- 的绝对值差值 $|J_-| - |J_+|$ 随 D 变化的曲线. 其中 $k=0.6, N=100$

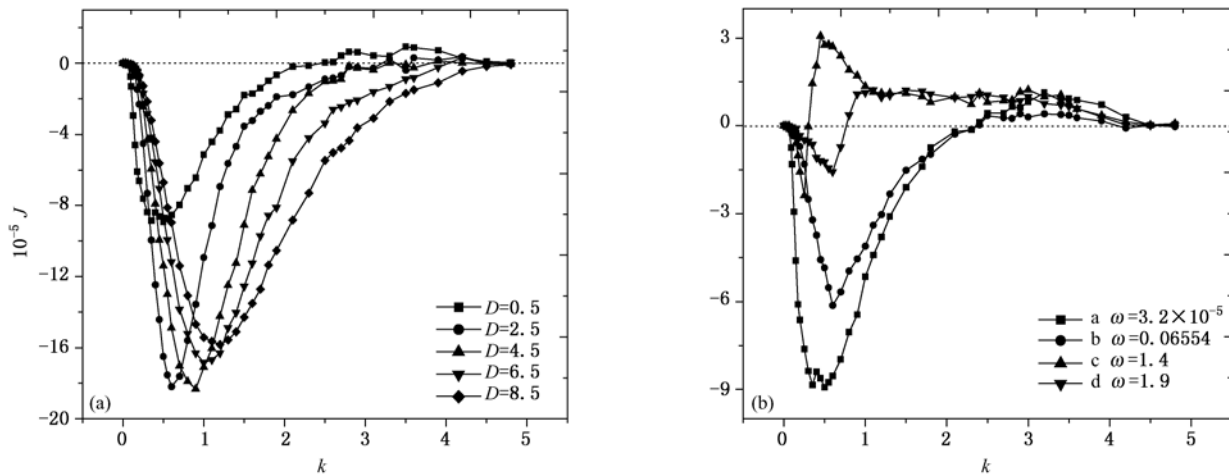


图6 (a) Morse 底势强度 D 取不同值的情况下, 系统平均热流 J 随粒子间简谐耦合强度 k 变化的曲线, 其中 $\omega = 3.2 \times 10^{-5}, N=100$; (b) 热浴调制频率 ω 取不同值(如图 2(a) a, b, c, d 所示)的情况下, 系统平均热流 J 随粒子间简谐耦合强度 k 变化的曲线, 其中 $D=0.5, N=100$

似, 但变化速率却不同. 当 D 从零开始逐渐增大时, J_+-D 和 $J--D$ 曲线经过了先分离后靠近, 再远离再靠近的变化过程, 如图 5(c) 所示. 由此导致 J_+ 和 J_- 的平均值随 D 变化复杂, 即出现了有趣的 $J-D$ 曲线.

如图 6(a) 所示为 Morse 底势强度 D 取不同值时, 绝热热流 J ($\omega = 3.2 \times 10^{-5}$) 随粒子间简谐耦合强度 k 变化的曲线. 如图 6(b) 所示为从图 2(a) 中选取的四个典型调制频率(a: $\omega = 3.2 \times 10^{-5}$, b: $\omega = 0.06554$, c: $\omega = 1.4$, d: $\omega = 1.9$) 取值下, 系统平均热流 J 随粒子间简谐耦合强度 k 变化的曲线. 由图可见, 与 $J-D$ 曲线相似, $J-k$ 曲线同样具有复杂的结构, 蕴含丰富的内容. 我们同样可用上述分析

绝热近似热流的方法对这些曲线进行分析, 这里不再赘述.

5. 热波动力学

为了进一步认识系统中热流的产生及反转, 我们给出图 2(a) 中以 a, b, c, d 标记的四个最具代表性热浴调制频率值下, Morse 链中的平均局域温度 T_i 分布, 如图 7 所示. 由图可明显地观察到: 与无静态温度偏置, 无热浴调制的情形相对比, 由于左端热浴 $T_L(t)$ 的周期调制, 体系中出现了清晰的温度分布位形, 并且不同的热流形式对应不同的温度分布位形. 然而, 我们并不能从温度分布图确定热流的方向. 更为有趣的是: 负向绝热热流(a: $\omega =$

3.2×10^{-5}) 逆着温度梯度方向由低温端流向高温端, 我们称这种有趣的现象为非定态负热导现象. 实际上, 热流在系统内的传播需要一定的弛豫时间, 热浴温度调制使得热流和温度分布不处在定态, 因此只讨论长时间平均的局域温度不足以说明问题, 我们应仔细分析热流和温度分布的非定态行为-热波动力学分析.

图 8 和图 9 分别给出的是图 2(a) 中标注的 a, b, c, d 四个调制频率值下, 在热浴调制一个周期内, 不同时刻点的周期局域温度 $\bar{T}_i(t)$ 分布图和周期局域热流平均值 $J(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{J}_i(t)$ 随时间变化图. 从图 8(a) 可看出: 当调制频率 ($\omega = 3.2 \times 10^{-5}$) 很小时, 由于热浴变化最够慢, 在其变化一个周期内的不同时刻点, 系统内均可建立起良好的温度梯度. 并且在 $T_L(t)$ 变化的前后半周期内, 经极短的弛豫时间, 系统内温度分布便均可快速达到不随时间改变的稳定的分布状态(图 8 中 $t=0.500T$ 和 $t=1.000T$ 线所示). 相应地, 在热浴变化前后半周期的绝大多数时间内, 系统的正负热流都处于不随时

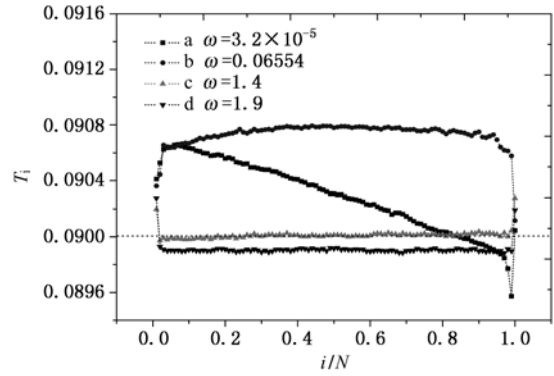


图 7 热浴调制频率 ω 取不同值(如图 2(a) a, b, c, d 所示)的情况下, 各个格点处的平均局域温度 T_i 分布, 其中 $D=0.5, k=0.6, N=100$

间变化的稳定值, 如图 9(a) 所示. 所以低频驱动的绝热热流可近似为两个非调制静态热流 J_+ 和 J_- 的平均值, 而 J_+ 和 J_- 对应平均局域温度 $T_+(i)$ 和 $T_-(i)$ 的平均值恰好约为绝热近似热流所对应平均局域温度分布(图 7 中 $\omega = 3.2 \times 10^{-5}$ 线所示). 由此导致了有趣的非定态负热导现象的产生.

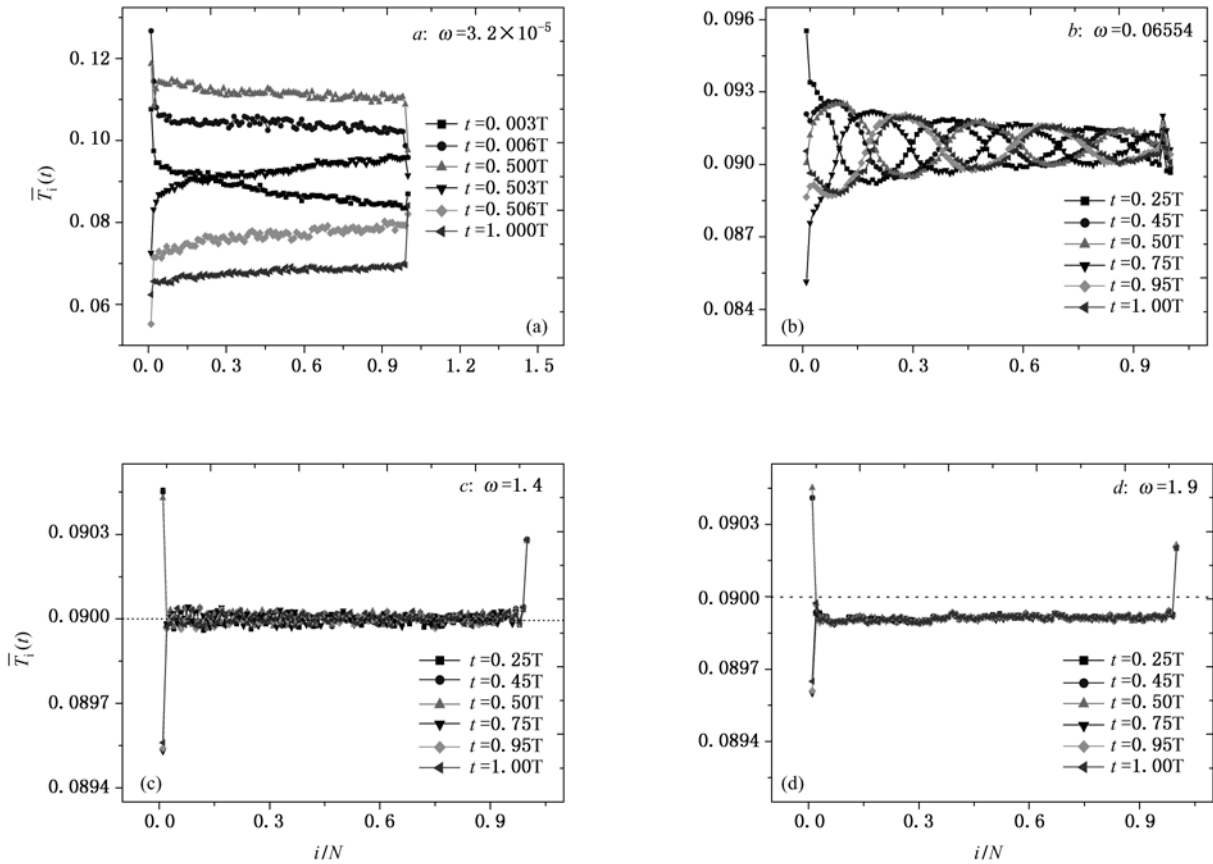


图 8 热浴调制频率 ω 取不同值(如图 2(a) a, b, c, d 所示)的情况下, 热浴调制一个周期内不同时刻点的周期局域温度 $\bar{T}_i(t)$ 分布图, 其中 $D=0.5, k=0.6, N=100, T=2\pi/\omega$ 为热浴调制周期

当热浴调制频率($\omega = 0.06554$)增大时,在其变化一个周期内不足以使体系内建立起良好的温度梯度,但是温度分布随时间变化有规律地进行波动,如图 8(b)所示. 相应的热流变化如图 9(b)所示,由图可见,在热浴变化一个周期的大部分时间内,系统中产生负向热流. 所以最终系统中产生负的定向净热流.

当热浴调制继续加快时,负向热流会跨过零反转方向变为正向热流. 正向热流最大值(对应调制频率为 $\omega = 1.4$)处的周期局域温度 $\bar{T}_i(t)$ 分布如图 8(c)所示. 显然,由于热浴变化过快,除端点粒子能随之变化外,链中其余粒子都无法完全随之响应,随时间变化它们的温度均只能在平均环境参考温度 $T_0 = 0.09$ 附近毫无规律地振荡. 此种情形下,

在热浴变化一周期的每一时刻系统中均产生正向净热流(如图 9(c))所示,致使系统中最终产生正的定向热流.

当热浴调制再次加快时,正向热流会急速减小再次跨过零而再次变为负向. 负向热流最大值(对应调制频率为 $\omega = 1.9$)处的周期局域温度 $\bar{T}_i(t)$ 分布如图 8(d)所示. 显而易见,除端点粒子外,链中其余粒子完全不能响应变化极快的热浴,它们的温度分布不随时间改变,稳定地分布在平均环境参考温度 $T_0 = 0.09$ 以下. 此种情形下,在热浴变化一周期的每一时刻系统中均产生负向净热流(如图 9(d))所示,因此系统中最终产生负的定向热流. 当热浴调制频率加快到链中所有粒子都不能随之响应时,系统中便不再有热流产生.

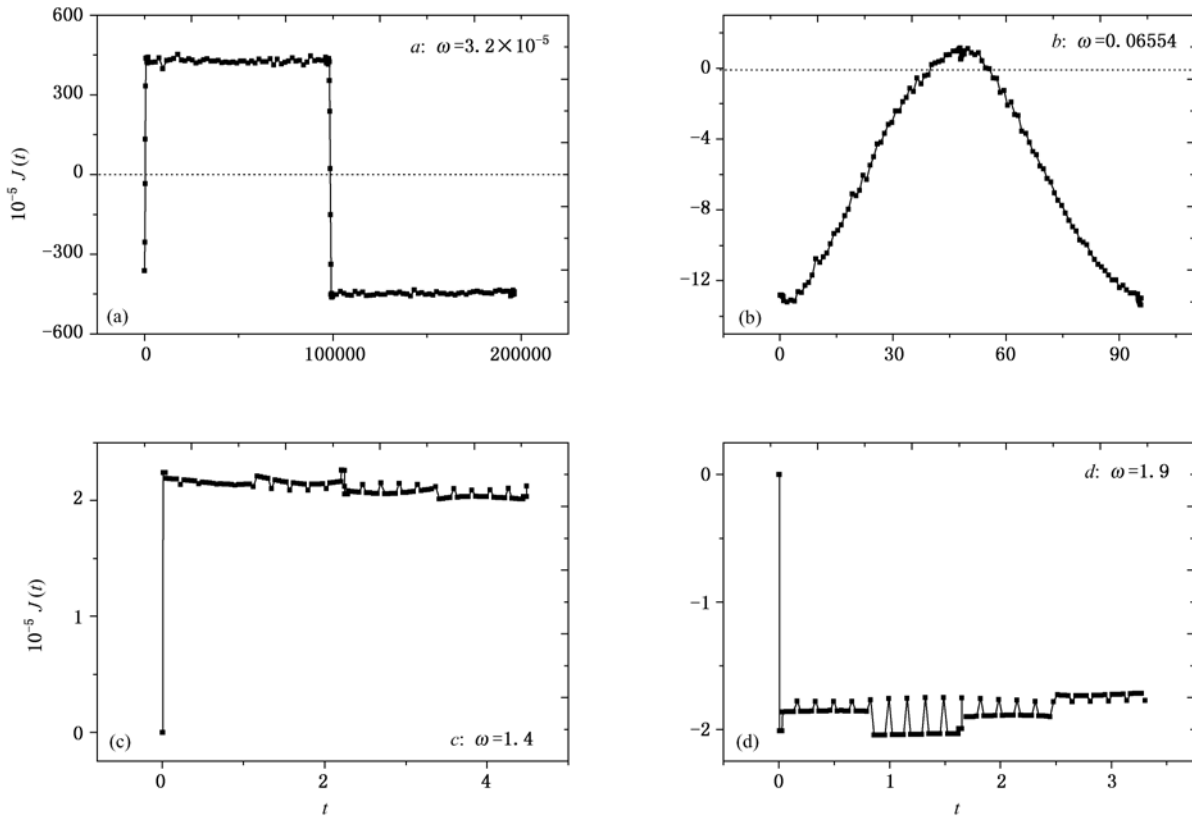


图 9 热浴调制频率 ω 取不同值(如图 2(a) a, b, c, d 所示)的情况下,在热浴调制一个周期内,各个格点处的周期局域热流平均值 $J(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{J}_i(t)$ 随时间变化图,其中 $D=0.5, k=0.6, N=100$

6. 结 论

根据著名的热力学第二定律:热量只能自发地由高温物体流向低温物体或由物体的高温部分流向低温部分. 所以要想产生并控制热流必须要先产

生并控制温度梯度. 然而,在小尺度甚至在纳米尺度内产生并控制温度梯度是非常困难的. 自然便提出问题:当系统两端无温差时,如何使其中产生热流并控制它? 本文正是针对这一问题. 经上述仔细研究表明:当周期调制一端热浴驱使系统离开热平衡态时, Morse 晶格中便会有稳定的定向热流产生,

并且通过改变调制频率的大小便可控制定向热流的大小及方向. 此外, 文章还仔细探究了 Morse 晶格独特的材料特性对系统定向热流大小及方向的影响. 对于低频调制产生的绝热近似热流, Morse 底势强度(D)和粒子间耦合强度(k)的强弱只影响其大小不影响其方向. 由此, 在最优的 D, k 选择下, 必能使 Morse 晶格中的定向绝热热流达到可观的最大值. 对于高频调制产生的反转热流, 改变 D, k 大小不仅能改变系统净热流的大小, 还能使其在参数空间内反转方向. 所以可通过选择合适的 D, k 来选择系统净热流方向并控制其大小. 另外, 在研究过程中我们还发现了 Morse 晶格所特有的一些新现象. 与其他一维非线性晶格(如 FK, FPU)中的流反转机理不同, Morse 晶格中的流反转并非频率共振

的结果. 在特定的 D, k 取值下, 反转发生在两个固定调制频率取值下, 与材料尺度无关, 是 Morse 晶格特有的现象. 在低频调制下, 我们可观察到一种更为独特的现象——系统中产生的定向热流逆着系统温度梯度方向由低温端流向高温端(非定态负热导现象).

较之其他一维非线性晶格, Morse 晶格中的棘齿热流出现了新现象, 新特征, 蕴含更为丰富的内容. 一维 Morse 模型被用来研究 DNA 链的动力学行为. 本文的研究结果表明: 相比于传统的固体材料, 低维软物质材料会在热传导特性方面表现出与众不同的行为, 而到目前为止还缺乏非常系统深入的研究, 利用这一类体系来设计热流控制的小装置值得进一步探讨.

- [1] Lepri S, Livi R, Politi A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1896
- [2] Hu B, Li B, Zhao H 1998 *Phys. Rev. E* **57** 2992
- [3] Prosen T, Campbell D K 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2857
- [4] Dhar A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 3554
- [5] Garrido P L, Hurtado P I, Nadrowski B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5486
- [6] Grassberger P, Nadler W, Yang L 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 180601
- [7] Li B, Wang L, Hu B 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 223901
- [8] Lepri S, Livi R, Politi A 2003 *Phys. Rep.* **377** 1
- [9] Li B, Wang J 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 044301
- [10] Wang L, Li B 2008 *Phys. World* **21** 27
- [11] Terraneo M, Peyrard M, Casati G 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 094302
- [12] Li B, Wang L, Casati G 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 184301
- [13] Hu B, Yang L, Zhang Y 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 124302
- [14] Wang J, Zheng Z G 2010 *Phys. Rev. E* **81** 011114
- [15] Wang J, Zheng Z G 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 476 (in Chinese)
[王 军, 郑志刚 2010 物理学报 **59** 476]
- [16] Li B, Wang L, Casati G 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 143501
- [17] Wang L, Li B 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 177208
- [18] Wang L, Li B 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 267203
- [19] Chang C W, Okawa D, Garcia H, Majumdar A, Zettl A 2006 *Science* **314** 1121
- [20] Kobayashi W, Teraoka Y, Terasaki I 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 171905
- [21] Chang C W, Okawa D, Garcia H, Majumdar A, Zettl A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 045901
- [22] Reimann P, Bartussek R, Häussler, Hänggi P 1996 *Phys. Lett. A* **215** 26
- [23] Astumian R D Hnggi P 2002 *Phys. Today* **55** (11) 33
- [24] Reimann P, Hnggi P 2002 *Appl. Phys. A* **75** 169
- [25] Reimann P 2002 *Phys. Rep.* **57** 361
- [26] Hänggi P, Marchesoni F, Nori F 2005 *Ann. Phys. (Leipzig)* **14** 51
- [27] Hänggi P, Marchesoni F 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 387
- [28] Segal D, Nitzan A, Hänggi P 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 030103 (6804)
- [29] Van den Broeck C, Kawai R 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 210601
- [30] Segal D, Nitzan A 2006 *Phys. Rev. E* **73** 026109
- [31] Marathe R, Jayannavar A M and Dhar A 2007 *Phys. Rev. E* **75** 030103 (R)
- [32] Van den Broeck M, Van den Broeck C 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 130601
- [33] Segal D 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 260601
- [34] Li N, Hänggi P, Li B 2008 *Europhys. Lett.* **84** 40009
- [35] Li N, Zhan F, Hänggi P, Li B 2009 *Phys. Rev. E* **6** 011125
- [36] Ren J, Li B 2010 *Phys. Rev. E* **81** 021111
- [37] Larsen P V, Christiansen P L, Bang O, Archilla J F R, Gaididei Yu B 2004 *Phys. Rev. E* **69** 026603
- [38] Kalosakas G, Ngai K L, Flach S 2005 *Phys. Rev. E* **71** 061901
- [39] Lü B B, Deng Y P, Tian Q 2010 *Chin. Phys. B* **19** 026302
- [40] Haile J M 1992 *Molecular dynamics simulation: elementary methods* John Wiley and Sons, Inc. New York, NY, USA
- [41] Zheng Z G Hu G, Hu B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 2273
- [42] Zheng Z G Cross M C, Hu G 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 154102

Ratcheting thermal conduction in one-dimensional homogeneous Morse lattice systems^{*}

Gao Xiu-Yun Zheng Zhi-Gang[†]

(Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

(Received 16 August 2010; revised manuscript received 3 September 2010)

Abstract

The ratchet effect in heat conductions of one-dimensional Morse lattices is studied when the system is located between two averagely isothermal reservoirs, of which one keeps the temperature constant and the other is periodically modulated in temperature, and their temperatures averaged over a long time are equal to each other. Unidirectional heat current can be observed when one of the heat baths is periodically modulated in temperature. The efficiency and the direction of heat conduction can be rectified and controlled by adjusting the frequency and the amplitude of the modulation. An interesting non-stationary negative thermal conductivity, i. e. , a reversed heat flow against the temperature gradient, is found in an appropriate region of frequency of the modulation. A heat wave scheme in revealing the spatiotemporal behavior of the heat conduction is proposed to study the this phenomenon. The influence of the parameters of the Morse lattice on the directional heat current is investigated, and so this provides theoretical support for practical applications.

Keywords: heat conduction, thermal ratchet, heat conductivity, Morse lattices

PACS: 44.10.+i, 05.70.Ln, 05.40.-a, 44.05.+e

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11075016, 10875011) and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2007CB814805).

[†] Corresponding author. E-mail: zgzhen@bnu.edu.cn