

Fermi-Pasta-Ulam β 格点链系统能量载流子研究*

袁宗强 褚敏 郑志刚†

(北京师范大学物理学系, 北京 - 香港 - 新加坡非线性与复杂性研究联合中心, 北京 100875)

(2012年12月3日收到; 2012年12月19日收到修改稿)

Fermi-Pasta-Ulam (FPU) β 格点链中能量运输的载流子是孤子还是声子一直存在较多的争议. 本文通过单脉冲方法, 明确了一个能量波包在该格点链系统中从声子波包转变成为孤子波包的条件, 即波包能量达到一定阈值. 基于纯四次势链的声子真空效应, 构造了由 FPU- β 链与纯四次势链构成的双段链系统. 通过对比研究双段链系统和单段 FPU- β 链中的热流, 发现低温下声子是 FPU- β 链中能量的主要载流子, 而随着温度的升高孤子逐步取代声子成为能量的主要载流子.

关键词: Fermi-Pasta-Ulam 格点链, 声子, 孤子, 热传导

PACS: 05.45.-a, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.62.080504

1 引言

自然界中的很多非平衡现象都与物质和能量的输运有关. 热输运是能量输运的一个重要方面. 对于热输运的研究, 可以追溯到傅里叶经验定律. 该经验定律微观机制的讨论一直以来都是非平衡统计力学中一个重要而具有挑战性的问题. 近些年来, 研究发现低维材料中存在反常热传导行为, 即热传导系数依赖于材料的尺寸^[1-3]. 这激发了对于满足傅里叶定律正常热传导微观机制问题的新一轮研究热潮^[4-13].

著名的 Fermi-Pasta-Ulam (FPU) 模型最初由 Fermi 等^[14] 引入, 用于研究非线性系统中的能量均分问题和遍历性假设. 后来 Lepri 等^[1] 将其用于研究低维热传导, 发现强非线性和混沌并不足以保证正常热传导行为, 能量载流子的阻尼效应很弱. 关于 FPU 格点链中能量的载流子是孤子还是声子的问题, 目前仍然存在着较多的争议^[15-20]. 这方面的讨论主要依据测量格点链上能量的传播速度, 然后将其测量值与载流子理论预测值相比较. 但是, 孤子理论和有效声子理论都能与测量值相符合而

无法区分^[17,19]. 近年来, Zhao^[18] 发展出一套通过平衡态途径研究能量输运性质的方案. Li 等^[20] 采用该新方案计算格点链上的能量传播速度, 通过对比发现有效声子理论与实际测量值的符合度比孤子理论更高. 据此, 他们认为 FPU 格点链中的能量载流子是长波声子, 而非孤子. 因此, 从一个新的视角考察这个问题会使我们的理解更加深入.

在数值模拟研究非线性格点链的热传导问题时, 通常将热浴耦合在格点链的两端粒子上. 热浴与格点链的相互作用是通过施加在端点粒子上的一系列随机力而实现的. 作为第一步, 研究一个单脉冲在格点链上的传播行为有助于从微观的角度去理解一些宏观的能量输运行为. 为此, 我们研究一个动量激发在 FPU- β 格点链上的传播行为. 动量激发能量较低时, 只能在 FPU- β 格点链上产生声子, 脉冲波包将由于色散而迅速坍缩. 而当动量激发能量足够高时, 能在链上形成波形稳定的孤子和随传播而坍缩的声子尾巴. 我们同时考察了简谐链和纯四次势格点链上动量激发的行为, 明确了 FPU- β 格点链由极低温时的简谐链极限到极高温时的纯四次链极限的转变.

由于不存在简谐项, 纯四次势格点链中 (声子

* 国家自然科学基金 (批准号: 11075016)、中央高校基本科研业务费 (批准号: 201001) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20100003110007) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zgzheng@bnu.edu.cn

真空效应) 不允许存在声子 [21-24]. 基于此, 我们构造了一个由 FPU- β 与纯四次势链构成的双段链系统. 通过对该系统与 FPU- β 单段链的对比研究, 得到如下结论: 低温下声子为 FPU- β 格点链中能量的主要载流子, 而随着系统温度的升高, 孤子逐步取代声子成为格点链中能量的主要载流子.

2 单脉冲在格点链上的传播行为

开放边界条件下, 包含 N 个粒子的 FPU- β 格点链的哈密顿量如下

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} V(q_{i+1}, q_i), \quad (1)$$

$$V(q_{i+1}, q_i) = \frac{k}{2} (q_{i+1} - q_i)^2 + \frac{\beta}{4} (q_{i+1} - q_i)^4, \quad (2)$$

其中 p_i 和 q_i 分别表示第 i 个粒子的动量和偏离平衡位置的位移, k 和 β 分别表示相互作用势能的二次项系数和四次项系数. $\beta = 0$ 时, 模型退化成可以解析求解的简谐链. 四次项势能的出现打破了简谐链的可积性, 产生出系统在相空间中丰富的规则和混沌运动. 在没有二次项势能, 即 $k = 0$ 时, 模型成为纯四次势链.

为了研究单脉冲在格点链上的传播行为, 在 $t = 0$ 时处于静息态的格点链上的最左端粒子上施加一动量激发, 并观察系统的演化行为. 该动量激发在格点链上产生一系列向前传播的能量波包. 由于非线性项的存在, FPU- β 格点链中既可以存在声子波包, 也可以存在孤子波包. 声子波包与孤子波包的本质区别在于, 前者会由于色散效应而导致波包坍塌, 而后者由于非线性效应与色散效应的平衡而形成稳定的波形. 固定 FPU- β 格点链的参数 $k = 1.0$ 和 $\beta = 1.0$, 探讨不同能量水平的动量激发在格点链上产生的波包的属性. 声子波包的峰值会随着波包向前传播而衰减, 孤子波包的峰值则随着波包的传播保持不变. 选取粒子数 $N = 1000$ 的格点链, 并在格点位置 $i_a = 50$ 和 $i_c = 950$ 处设置观察点, 当第 n 个能量波包经过两个观察点时其能量峰值 E_{pna} 和 E_{pnc} 将被记录下来用于考察波包的属性.

图 1(a) 展示了不同能量水平 E 的动量激发下, 前三个波包经过 FPU- β 格点链上两个观察点时能量峰值的变化情况. 可以看到, FPU- β 链上动量激

发的能量水平很低的时候, 所有波包在经过第二个观察点时的峰值相对于经过第一个观察点时的峰值都显著地减小, 说明激发出来的都是声子波包, 这些声子波包在传播过程中逐渐坍塌. 随着动量激发能量水平的提高, 各个波包的能量也相应增加. FPU- β 格点链上一个能量越大的波包, 其势能中非线性部分所占有的比重越大, 非线性效应越强.

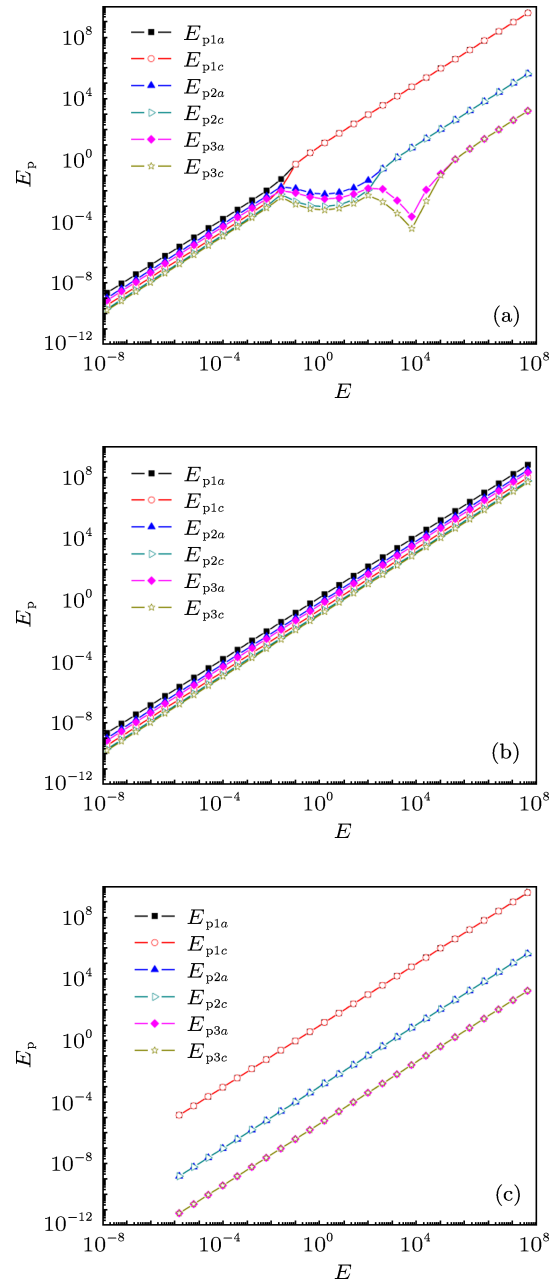


图 1 不同能量水平 E 的动量激发下第 n 个波包经过链上两个观察点 $i_a = 50$ 和 $i_c = 950$ 时的能量峰值 E_{pna} 和 E_{pnc} (a) FPU- β 格点链; (b) 简谐链; (c) 纯四次势链

因此, 当波包能量达到一定阈值后, 声子波包将演变成成为孤子波包. 从图 1(a) 中可以清晰地看到, 当动量激发的能量水平高到一定程度时, 第一个波包首先出现了经过两个观察点时能量峰值不衰减的情况, 声子波包演变成了孤子波包. 随着动量激发能量水平的进一步提高, 第二个和第三个声子波包也相继演变成了孤子波包. 可以推断, 动量激发能量水平的继续提高会使得更多的声子波包演变成成为孤子波包. 一个声子波包演变成成为一个孤子波包的条件是波包能量达到一定阈值, 而这个阈值的大小与格点链自身的属性相联系. 对于所选取的特征参数 $k = 1.0$ 和 $\beta = 1.0$ 的 FPU- β 格点链, 这个阈值在 1 的量级.

图 1(b) 和 (c) 给出了简谐链和纯四次势链上不同能量水平的动量激发下波包经过链上两个观察点时能量峰值的变化情况. 可以看出, 对于简谐链, 由于没有非线性项, 无论动量激发的能量水平多高, 只有声子波包存在. 对于纯四次势链, 由于不存在简谐项, 系统不允许声子波包的存在, 无论动量激发的能量水平多低, 只有孤子波包的存在. 对比图 1(a)—(c), 低能量水平的激发下 FPU- β 格点链趋向于简谐链, 而高能水平的激发下 FPU- β 格点链趋

向于纯四次势链.

3 FPU- β 格点链中的能量载流子

由于纯四次势链中不允许声子模式存在, 可以利用这个性质来构造图 2 中的两种格点链, 其中图 2(a) 为单段 FPU- β 链 (参数 $k = 1.0, \beta = 1.0$), 图 2(b) 为由 FPU- β 与纯四次势链构成的双段链系统 (左段参数 $k = 1.0, \beta = 1.0$, 右段参数 $k = 0, \beta = 1.0$). 本文将从宏观热流的角度对两种格点链加以对比分析, 并以此讨论 FPU- β 格点链中的能量载流子问题.

在数值模拟中, 采用固定边界 $q_0 = q_{N+1} = 0$, 两个温度为 $T_L = T_0(1 + \Delta)$ 和 $T_R = T_0(1 - \Delta)$ 的朗之万热浴分别与格点链两端的最左端 $i = 1$ 粒子和最右端 $i = N$ 的粒子耦合. 取粒子数 $N = 200$, 相对温差 $\Delta = 0.2$, 模拟足够长的时间以保证系统演化达到非平衡稳态. 测量不同基础温度 T_0 下通过双段链 (图 2(b)) 的热流 J_b 与单段 FPU- β 链 (图 2(a)) 的热流 J_a 的比值

$$R = J_b / J_a. \tag{3}$$

数值模拟测量结果如图 3 所示.

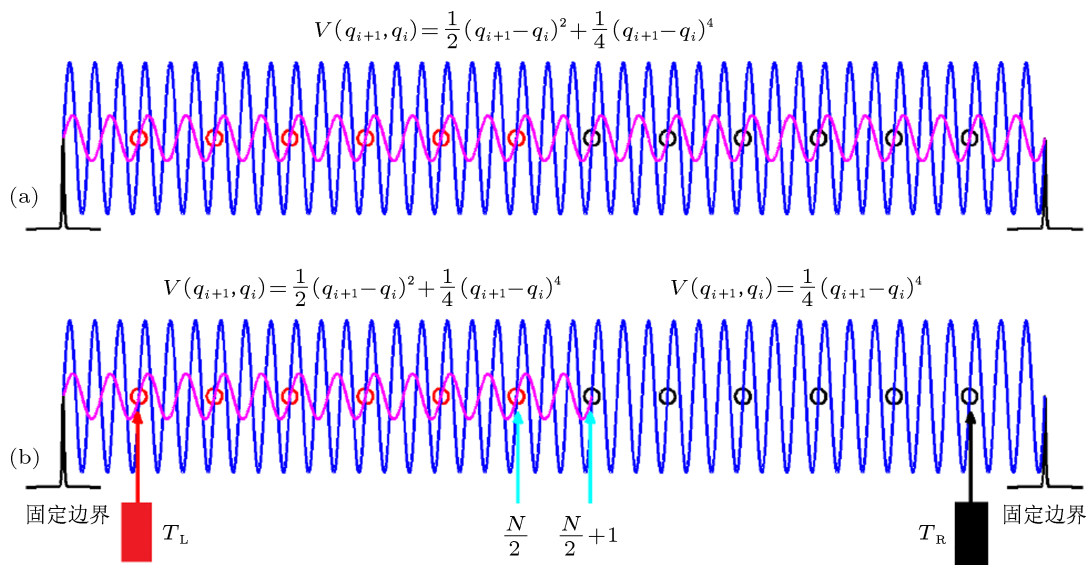


图 2 格点链系统 (a) 单段 FPU- β 链; (b) 由 FPU- β 与纯四次势链构成的双段链

从图 3 我们可以得到一些有价值的信息. 先看低温情形. 低温对应于低能量水平激发, FPU- β 格点链中此时的激发模式以声子波包为主, 因此低温下单段 FPU- β 链 (图 2(a)) 中声子为主要能量载流

子. 对于由 FPU- β 链与纯四次势链构成的双段链系统 (图 2(b)), 不允许声子波包存在于右边纯四次势链中, 因此左边 FPU- β 链中声子波包的传播将在界面处被阻断, 不能起到载流子的作用. 这导致

图 2(b) 链的载流能力相对于 (a) 链急剧下降, 因此 R 值在低温下很小. 随着系统基础温度 T_0 的提高, 能量的非线性激发水平提高, FPU- β 格点链中激发模式中孤子波包的比重提高. 孤子波包既可以在右边纯四次势链中传播, 也可以在左边的 FPU- β 链中传播, 因此孤子波包逐渐取代声子波包成为主要能量载流子, 故而 R 值随着基础温度的提高逐渐变大. 高温极限下 R 值趋近于 1, 对应着高温极限下 FPU- β 格点链中声子波包的比重趋于 0, 其载流能力与孤子波包的载流能力相比可以忽略. 因此, FPU- β 格点链中声子波包和孤子波包都能起到载流子的作用. 低温情况下, 声子载流起主导作用; 高温情况下, 孤子载流起主导作用.

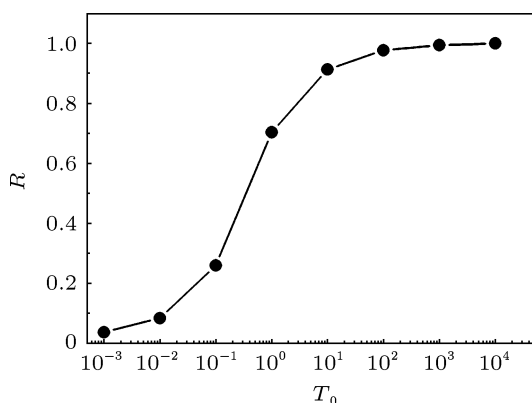


图 3 双段链系统中热流与单段 FPU- β 链中热流的比值随基础温度 T_0 的变化

4 FPU- β 与纯四次势双段链系统中的界面效应

再次回到微观角度, 研究一个单脉冲在两种格点链上的传播行为, 用以进一步支持前面得出的结论. 采取开放边界条件, 对 $t = 0$ 时处于静息态的格点链上的最左端 $i = 1$ 粒子施加一 momentum 激发, 并观察系统的时间演化行为.

低能量水平的动量激发在两种格点链中的典型传播行为如图 4 所示. 可以清楚地看到, 在单段 FPU- β 链 (图 4(a)) 中, 单脉冲激发产生的声子波包在格点链上自由传播, 可以起到载流子的作用. 而对于由 FPU- β 链与纯四次势链构成的双段链 (图 4(b)), 单脉冲激发产生的声子波包在格点链的界面处被反弹, 不能起到载流子的作用. 当然, 声子波包对格点链界面的冲击会造成界面的扰动, 界面扰动会在右边纯四次势链中激发孤子波包而具有载流

效果, 这与前面看到的低温下双段链 (图 2(b)) 中热流与单段 FPU- β 链 (图 2(a)) 中热流的比值 R 虽然很小但却不完全为 0 相一致.

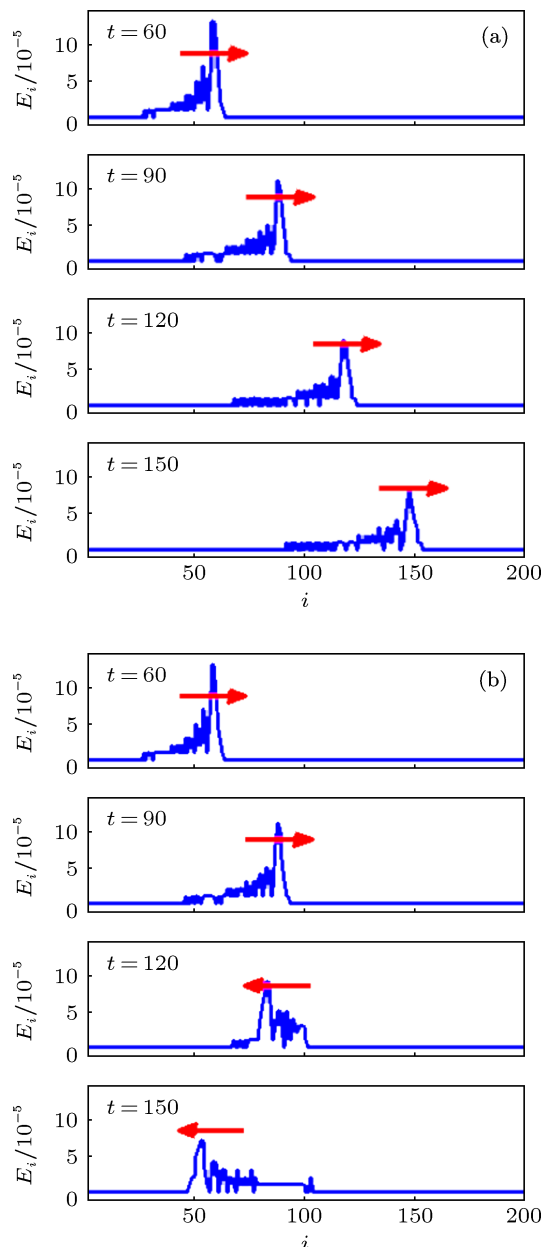


图 4 能量水平 $E = 0.001$ 的动量激发在两种格点链上的传播行为 (a) FPU- β 链; (b) 双段链

在高能量水平的动量激发下, FPU- β 格点链中产生孤子波包和追随其后的声子尾巴, 两者在两种格点链中的典型传播行为如图 5 所示. 单段 FPU- β 链 (图 5(a)) 中, 单脉冲激发产生的孤子波包和声子尾巴均在链上自由传播, 均可以起到载流子的作用. 对于我们构造的双段链 (图 5(b)), 单脉冲激发产生的孤子波包能顺利通过界面, 起到载流子的作用; 而

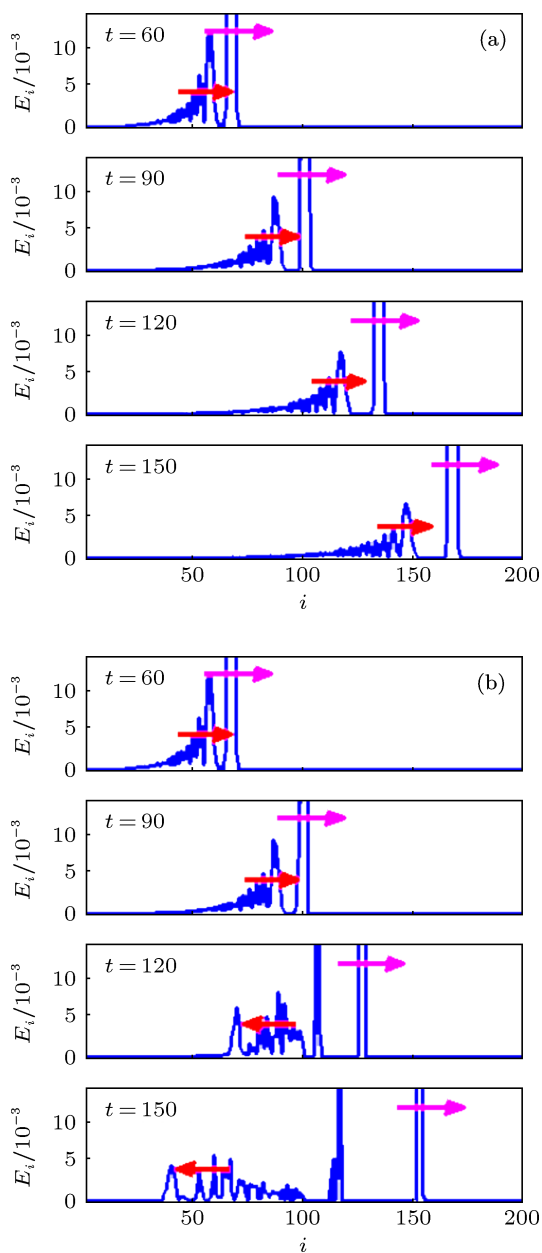


图5 能量水平 $E = 1.0$ 的动量激发在两种格点链上的传播行为, 由于孤子能量远远高于声子尾巴的能量, 为了清楚地看到声子尾巴的行为, 此处能量轴只给出 $(0, 0.015)$ 部分 (a) 单段 FPU- β 链; (b) 双段链

声子尾巴则在格点链的界面处被反弹, 不能起到载流子的作用. 当然, 波包对界面的冲击仍然会造成界面的扰动, 从而在右边纯四次势链中激发出新的低能量水平的孤子波包.

因此, 通过研究单脉冲在格点链上的传播行为可以清楚地看到: 双段链模型 (b) 中右边纯四次势链确实不允许声子波包的传播, 声子波包在界面处发生反弹, 而孤子波包则能顺利的通过界面. 这样, 就从微观角度支持了前面对宏观上热流比值 R 随基础温度 T_0 的依赖关系的分析过程, 从而支持了我们对 FPU- β 格点链中能量载流子的看法.

5 结论

近些年来, 由于反常热传导的发现和纳米技术的飞速发展, 低维材料的热传导问题引起了人们的广泛兴趣. 大量的数值计算结果丰富了对热传导微观机制的认识, 同时在一些基本问题上也产生了一些争议, 其中就包括 FPU- β 格点链中能量载流子是孤子还是声子的问题. 我们设计了由 FPU- β 与纯四次势链构成的双段链系统, 通过对比单段 FPU- β 链和双段链的热流, 发现 FPU- β 格点链中的能量载流子在低温下以声子为主, 而在高温下以孤子为主.

以往的研究主要通过测量格点链上能量的传播速度来讨论载流子问题, 而能量传播速度的测量本身并不是很精确. 从宏观热流的角度分析该问题是希望对这个问题获得更加清晰的认识. 本文从微观角度研究了单脉冲在双段链系统上的传播行为, 声子波包在界面处反生反弹, 支持了我们的结论. 但是也要看到, 声子波包并不是完全反弹, 而是会有少部分能量通过界面透射过去. 对于不同能量水平的声子波包, 通过界面透射的能量比例还有所不同. 这些问题将是今后进一步研究的对象.

[1] Lepri S, Livi R, Politi A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1896
 [2] Chang C W, Okawa D, Garcia A, Majumdar A, Zettl A 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 075903
 [3] Nika D L, Ghosh S, Pokailov E P, Balandin A A 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 203103
 [4] Casati G, Ford J, Vivaldi F, Visscher W M 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 1861
 [5] Prosen T, Robnick M 1992 *J. Phys. A* **25** 3449
 [6] Hu B, Li B, Zhao H 1998 *Phys. Rev. E* **57** 2992
 [7] Li B, Zhao H, Hu B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 63
 [8] Dhar A, Lebowitz J L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 134301
 [9] Saito K, Dhar A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 040601
 [10] Wang L, He D, Hu B 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 160601
 [11] Lepri S, Livi R, Politi A 2003 *Phys. Rep.* **377** 1
 [12] Dhar A 2008 *Adv. Phys.* **57** 457
 [13] Li N, Ren J, Wang L, Zhang G, Hänggi P, Li B 2012 *Rev. Mod. Phys.*

84 1045

- [14] Fermi E, Pasta J, Ulam S 1955 *Los Alamos Document No. LA-1940*
[15] Zhang F, Isbister D J, Evans D J 2000 *Phys. Rev. E* **61** 3541
[16] Zhang F, Isbister D J, Evans D J 2001 *Phys. Rev. E* **64** 021102
[17] Aoki K, Kusnezov D 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 4029
[18] Zhao H 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 140602
[19] Li N, Tong P, Li B 2006 *Europhys. Lett.* **75** 49
[20] Li N, Li B, Flach S 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 054102
[21] Mahan G D 2006 *Phys. Rev. B* **74** 094304
[22] Neogi S, Mahan G D 2008 *Phys. Rev. B* **78** 064306
[23] Sen S, Mohan T R K 2009 *Phys. Rev. E* **79** 036603
[24] Ávalos E, Sun D, Doney R L, Sen S 2011 *Phys. Rev. E* **84** 046610

Energy carriers investigation in the Fermi-Pasta-Ulam β lattice*

Yuan Zong-Qiang Chu Min Zheng Zhi-Gang[†]

(Beijing-Hong Kong-Singapore Joint Center for Nonlinear and Complex Studies, Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China)

(Received 3 December 2012; revised manuscript received 19 December 2012)

Abstract

Recently, heat conduction in low-dimensional materials has attracted much attention. The energy carriers responsible for the heat conduction in the Fermi-Pasta-Ulam (FPU) β lattice is still in debate. To the best of our knowledge, the sound velocity of energy transfer has been measured to examine the properties of the energy carriers, by using both nonequilibrium and equilibrium approaches. Nevertheless, the uncertainty of the computational data is too large to distinguish between the two predictions based on soliton theory and effective-phonon theory. In this paper, the spatiotemporal propagation of a momentum excitation traveling along the FPU- β lattice is investigated. The harmonic and anharmonic couplings induce the dispersion and localization of a energy packet on the lattice, respectively. The bifurcation of a solitary wave takes place as the energy of the packet exceeds a threshold. Based on the “acoustic vacuum” phenomenon in the pure quartic lattice, a two-segment lattice composed of the FPU- β chain and the pure quartic chain is constructed. The heat flux in the two-segment lattice is studied to compare with that in the FPU- β lattice. The ratio of the heat flux of the two-segment lattice to the FPU- β lattice increases monotonically as temperature rises. We conclude that phonons are the majority energy carriers in the low temperature regime, while solitons become dominant carriers as the temperature increases. The spatiotemporal propagation of a momentum excitation traveling along the two-segment lattice is also investigated. Phonon packets excited in the FPU- β part are reflected at the interface while solitary waves can pass through the interface. This supports microscopically our conclusion on the energy carriers in the FPU- β lattice.

Keywords: Fermi-Pasta-Ulam lattice, phonon, soliton, heat conduction

PACS: 05.45.-a, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.62.080504

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11075016), the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. 201001), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 20100003110007).

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