

## ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТЕРМОСТАТОВ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ ВДОЛЬ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ ЧАСТИЦ

Вихренко В.С., Дубинин С.В.

*The chain of particles with interactions described by the Lennard-Jones potential is considered. The interaction of the system with the environment is modeled by self-sustained oscillation systems located at the ends of the system. The temperature distribution along the chain, the energy flow are investigated.*

**Введение.** Одномерные системы привлекают исследователей своей относительной простотой при решении фундаментальных вопросов теплопроводности, а также наличием и широким распространением их прототипов среди реальных физических объектов (биологические и органические молекулы, анизотропные кристаллы, наноразмерные трубки и т. д.) [1-3]. Исследование таких систем может дать важную информацию о микроскопических механизмах макроскопических тепловых процессов [4].

Ранее было подробно исследовано поведение одномерной цепочки частиц, взаимодействующих между собой линейно [5,6], либо с учетом кубических нелинейностей [7]. Однако хорошим приближением реальных межчастичных взаимодействий является потенциал Леннарда-Джонса. Многие процессы, в особенности электронные, происходящие в наноразмерных системах, требуют квантово-механического описания. Вместе с тем хорошо известно, что классическая механика адекватно отражает поведение ансамблей частиц на атомарном уровне [8,9], если характеристические частоты процессов не слишком высоки (ограничиваются величинами порядка десяти ТГц).

При исследовании теплопроводности компьютерным моделированием часто рассматривают стационарное состояние системы, поддерживаемое с помощью термостатов, расположенных на границах системы. В настоящей работе в качестве источника и потребителя энергии рассматриваются автоколебательные подсистемы, способные обеспечить сколь угодно большие потоки энергии, но характеризующиеся малым числом степеней свободы. С целью увеличения уровня стохастичности применяются цепочки из таких подсистем, влияние параметров которых на поведение системы и является объектом исследований.

**Уравнения движения.** Рассматривается система  $n$  частиц одинаковой массы  $m$ , энергия взаимодействия которых задана потенциалом Леннарда-Джонса:

$$\Phi(r) = \varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где  $r$  – расстояние между частицами;  $\sigma$  – линейный параметр потенциала, равный расстоянию между частицами в положении равновесия;  $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы. Потенциальная энергия имеет минимум в точке, где сила взаимодействия между частицами обращается в нуль и осуществляется переход от отталкивания на малых расстояниях к менее интенсивному притяжению на больших расстояниях. Принятый здесь параметр  $\sigma$  в  $\sqrt[6]{2}$  раз отличается от обычно используемого, что позволяет упростить запись уравнений движения.

Сила взаимодействия между телами определяется как первая производная от потенциальной энергии по межчастичному расстоянию, взятая с противоположным знаком:

$$F(r) = -\Phi'(r) = 12 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^7 \right]. \quad (2)$$

Расстояние между частицами можно представить в виде  $r_{j,j+1} = \sigma + \Delta x_{j,j+1}$ , где  $\Delta x_{j,j+1} = x_{j+1} - x_j$  – взаимное смещение соседних тел;  $x_j$  – смещение  $j$ -го тела от его положения равновесия в системе. Тогда

$$F(r) = 12(\varepsilon / \sigma) \left( (1 + \Delta\bar{x})^{-13} - (1 + \Delta\bar{x})^{-7} \right), \quad (3)$$

где  $\Delta\bar{x} = \Delta x / \sigma$  – смещение тел в безразмерных единицах, т.е. в единицах  $\sigma$ .

Учет взаимодействия системы с окружающей средой достигается введением в уравнения движения двух дополнительных членов, один из которых имитирует отрицательную вязкость (коэффициенты пропорциональности  $\mu_1$  и  $\mu_n$ , соответственно), а второй – силы сопротивления, кубические по скоростям (коэффициенты  $\gamma_1$  и  $\gamma_n$ ). В качестве обобщенных координат принимаются смещения тел от их положений равновесия. В рассматриваемой системе частиц выделены две подсистемы, которые участвуют в обмене энергией между системой и средой и являются своеобразными термостатами:  $n_1$  первых и  $n_2$  последних частиц подвержены действию упомянутых выше сил, зависящих от скоростей частиц. Представляет интерес исследование поведения системы в зависимости от параметров термостатов.

Полная система  $n$  дифференциальных уравнений движения имеет вид

$$\begin{aligned} m\ddot{x}_j &= \mu_1 \dot{x}_j - \gamma_1 \dot{x}_j^3 + F(r_{j-1,j}) - F(r_{j,j+1}), & j &= 1, \dots, n_1, \\ m\ddot{x}_j &= F(r_{j-1,j}) - F(r_{j,j+1}), & j &= n_1 + 1, \dots, n - n_2, \\ m\ddot{x}_j &= \mu_n \dot{x}_j - \gamma_n \dot{x}_j^3 + F(r_{j-1,j}) - F(r_{j,j+1}), & j &= n - n_2 + 1, \dots, n, \end{aligned}$$

Для перехода к безразмерному виду введем  $\tau = \sigma\sqrt{m/\varepsilon}$  как единицу времени и безразмерные параметры

$$\alpha_1 = \mu_1 / \mu_n, \quad \alpha_3 = \sigma\mu_1 / \sqrt{\varepsilon m}, \quad \alpha_2 = \gamma_1 / \gamma_n, \quad \alpha_4 = \gamma_1 \sqrt{\varepsilon} \sigma / m^{3/2}. \quad (4)$$

С учетом соотношений (2) и (4) уравнения движения приведем к безразмерной форме (безразмерные величины обозначаются чертой над символом):

$$\begin{aligned} \ddot{\bar{x}}_j &= \alpha_3 \dot{\bar{x}}_j - \alpha_4 \dot{\bar{x}}_j^3 + 12(\bar{r}_{j,j-1}^{-13} - \bar{r}_{j,j-1}^{-7}) - 12(\bar{r}_{j+1,j}^{-13} - \bar{r}_{j+1,j}^{-7}), & j &= 1, \dots, n_1, \\ \ddot{\bar{x}}_j &= 12(\bar{r}_{j,j-1}^{-13} - \bar{r}_{j,j-1}^{-7}) - 12(\bar{r}_{j+1,j}^{-13} - \bar{r}_{j+1,j}^{-7}), & j &= n_1 + 1, \dots, n - n_2, \\ \ddot{\bar{x}}_j &= \frac{\alpha_3}{\alpha_1} \dot{\bar{x}}_j - \frac{\alpha_4}{\alpha_2} \dot{\bar{x}}_j^3 + 12(\bar{r}_{j,j-1}^{-13} - \bar{r}_{j,j-1}^{-7}) - 12(\bar{r}_{j+1,j}^{-13} - \bar{r}_{j+1,j}^{-7}), & j &= n - n_2 + 1, \dots, n, \end{aligned}$$

где  $\bar{r}_{j,j+1}$  – безразмерное расстояние между  $j$ -й и  $(j+1)$ -й частицами.

**Результаты вычислений.** На рис. 1 представлено распределение температуры вдоль цепочки из ста двадцати тел в безразмерных единицах  $\bar{T} = k_B T / \varepsilon$ . Безразмерная температура представляется через среднеквадратичную скорость движения частиц  $k_B T = m \langle v^2 \rangle \Rightarrow \bar{T} = \langle \bar{v}^2 \rangle$ , усреднение выполняется по времени  $\langle \bar{v}^2 \rangle = \sum_{i=k_{\text{on0}}}^k \bar{v}_i^2 / (k - k_{\text{on0}} + 1)$ , где  $\bar{v}_i$  – значение скорости на  $i$ -м шаге интегрирования;  $k_{\text{on0}}$  определяет шаг, когда система может рассматриваться как достигшая стационарного состояния;  $k$  – конечный шаг интегрирования. Параметры термостатов выбраны так, что левый конец цепочки более нагрет.

В случае (а) пять первых и пять последних тел системы являют собою автоколебательные подсистемы. Хотя данное распределение характеризуется наличием периодических вариаций среднеквадратичных скоростей, можно наблюдать градиент температуры, если ввести усреднение по нескольким соседним частицам. На рисунке четко выражены граничные эффекты, представляющие собой резкие колебания температуры вблизи границ цепочки. Естественно, что поведение первых и последних пяти тел существенно отличается от поведения остальных тел. Однако поведение примерно еще десяти тел с обоих концов отражает

наличие граничных эффектов. Отметим, что распределение температуры на левом конце, через который энергия поступает в систему, существенно глаже, чем на правом конце.

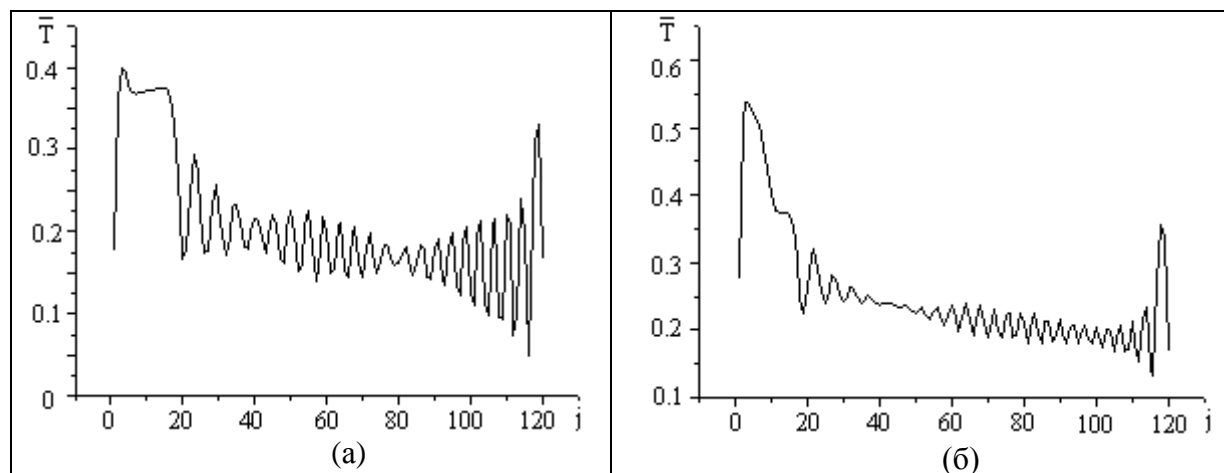


Рис 1. Зависимость среднеквадратичной скорости движения от номера тела в системе, состоящей из 120 тел. Термостаты содержат по 5 (а) или 10 (б) тел.

С увеличением числа тел в системе, подвергнутых действию неконсервативных сил, постепенно исчезают резкие колебания температуры внутри цепочки. На рис. 1 (б) представлено распределение температуры вдоль цепочки, содержащей по десять тел в каждом термостате. При определенном соотношении между числом этих тел и размером консервативной цепочки, наблюдается линейное распределение температуры вдоль системы (рис. 2 (а) – на двадцать тел с обоих концов действуют диссипативные силы).

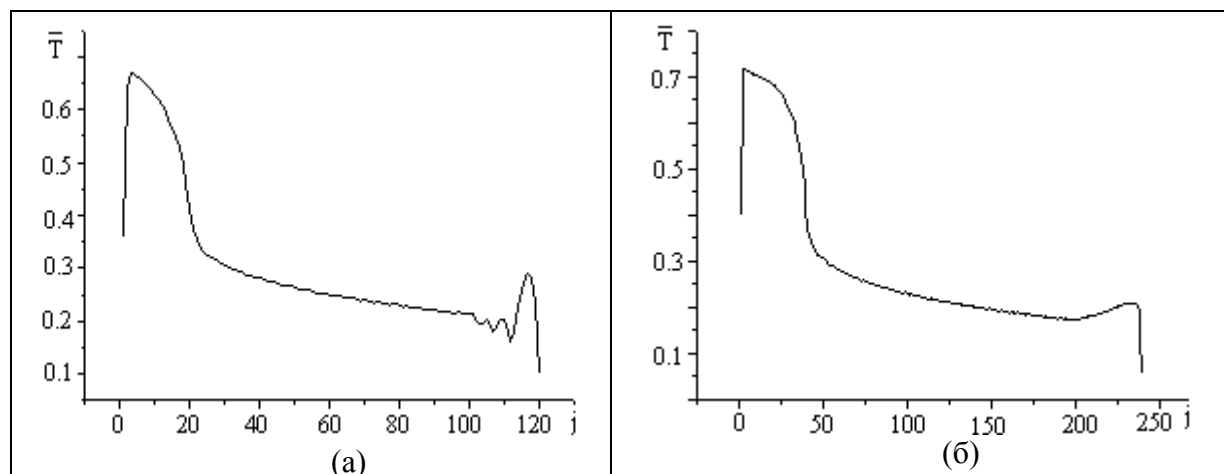


Рис 2. Зависимость среднеквадратичной скорости движения от номера тела в системе, состоящей из 120 (а) или 240 (б) тел. Термостаты содержат по 20 (а) или 40 (б) тел.

В этом случае граничные эффекты отражаются только на крайних телах, взаимодействующих с внешней средой. Оценка коэффициента теплопроводности при усреднении температуры на границах системы по пяти крайним телам из ста, не подвергающихся действию диссипативных сил, дает значение  $k \approx 54.4$  Вт/(м·К), которое значительно меньше, чем в линейной цепочке [5]. При расчете принимались параметры системы ( $m = 6.7 \cdot 10^{-25}$  кг,  $\sigma = 4.04 \cdot 10^{-10}$  м,  $\varepsilon = 1.66 \cdot 10^{-25}$  Дж), характерные для атомов аргона. Температура на левом конце при этом равна 350 К, на правом – 200 К.

При увеличении системы до двухсот сорока тел, из которых по сорок тел с обоих концов образуют термостаты, распределение среднеквадратичных скоростей в целом сохраняет свою форму (рис. 2 (б)), и лишь изменяется масштаб в горизонтальном направлении. Но коэффициент теплопроводности существенно увеличился и принял значение  $k \approx 127$  Вт/(м·К).

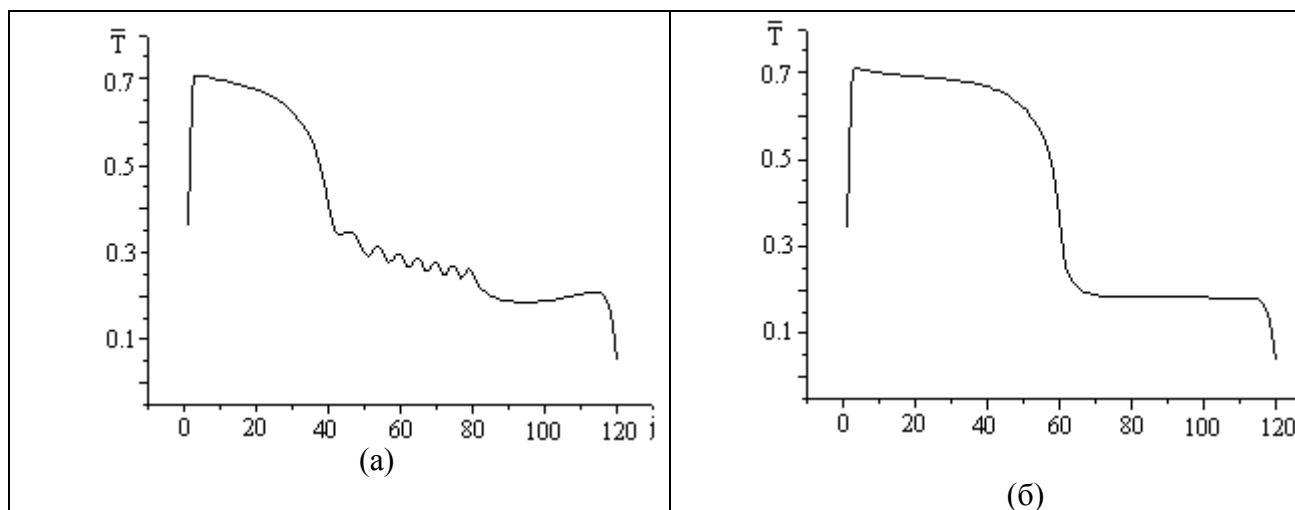


Рис 3. Зависимость среднеквадратичной скорости движения от номера тела в системе, состоящей из 120 тел. Термостаты содержат по 40 (а) или 60 (б) тел.

Таким образом, при увеличении доли термостатов распределение температуры вдоль системы становится более гладким. Численные эксперименты показывают, что при дальнейшем увеличении относительных размеров термостатов распределение температуры приобретает ступенчатый вид (рис. 3 (а)). В цепочке, полностью состоящей из тел, обменивающихся энергией с окружающей средой, распределение температуры представлено на рис. 3 (б).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Smontara F., Lasjaunas J. C., and Maynard R. Phonon Poiseuille flow in quasi-one-dimensional single crystals // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77. – P. 5397–5400.
2. Kim P., Shi L., Majumdar A., and McEuen P. L. Thermal transport measurements of individual multiwalled nanotubes // *Phys. Rev. Lett.* – 2001. – Vol. 87. Art, no. 215502.
3. Schwarzer D., Hanisch C., Kutne P., and Troe J. Vibrational energy transfer in highly excited bridged azulene-aryl compounds: Direct observation of energy flow through aliphatic chains and into the solvent // *J. Phys. Chem. B.* – 2002. – Vol. 106. – P. 8019–8028.
4. Lepri S., Livi R., and Politi R. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices // *Phys. Repts.* – 2003. – Vol. 377. – P. 1–80.
5. Вихренко В.С., Дубинин С.В. Стационарные состояния одномерной цепочки частиц при переносе энергии // *Труды БГТУ. Сер. VI.* – 2004. – Вып. XII, Физ.-мат. науки и информ. – С. 27 – 31.
6. Вихренко В.С., Дубинин С.В. // *Автоматический контроль и автоматизация производственных процессов / Материалы конференции.* – Мн.: БГТУ, 2003. – С. 363.
7. Вихренко В.С., Дубинин С.В. // *Инж.-физ. журнал.* – 2005. – Т. 78, № 1. – С. 94 – 100.
8. Heidelberg C., Vikhrenko V. S., Schwarzer D., and Schroeder J. Molecular Dynamics Simulation of Vibrational Energy Relaxation of Highly Excited Molecules in Fluids. II. Nonequilibrium Simulation of Azulene in CO<sub>2</sub> and Xe//*J. Chem. Phys.* 1999. Vol. 110. Pp. 5286 – 5299.
9. Kajimoto O. Solvation in supercritical fluids: Its affects on energy transfer and chemical reactions// *Chem. Rev.* 1999. Vol. 99. Pp. 355 – 390.