

## РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ ВДОЛЬ ЦЕПОЧКИ ЧАСТИЦ СО ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ, ОПИСЫВАЕМЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ ЛЕННАРД-ДЖОНСА

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 and vibrational amplitudes of some particles are investigated.

**Введение.** Исследование поведения низкоразмерных структур привлекает внимание в связи с наличием и широким распространением их реальных прототипов и возможностью их более детального исследования по сравнению с трехмерными системами [1–3]. Исследование таких систем может дать важную информацию о микроскопических механизмах макроскопических тепловых процессов, протекающих в реальных телах [4].

Представляется важным исследовать поведение низкоразмерных систем в зависимости от характера межчастичных взаимодействий. Ранее было подробно исследовано поведение одномерной цепочки частиц, взаимодействующих между собой линейно [5,6] либо с учетом кубических нелинейностей [7]. Однако реальные межчастичные взаимодействия носят более сложный характер, и в случае неполярных частиц хорошим приближением является потенциал Леннард-Джонса. Ниже исследованы особенности поведения одномерной цепочки частиц, обусловленные этим типом взаимодействия.

**1. Уравнения движения.** Рассматривается система  $n+2$  частиц одинаковой массы  $m$ , энергия взаимодействия которых задана потенциалом Леннард-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;  $\varepsilon$  – глубина потенциальной ямы;  $\sigma$  – линейный параметр потенциала, равный расстоянию между частицами в положении равновесия (рис. 1). 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  $\sqrt{2}$  раз отличается от обычно используемого [8], что позволяет упростить запись уравнений движения.

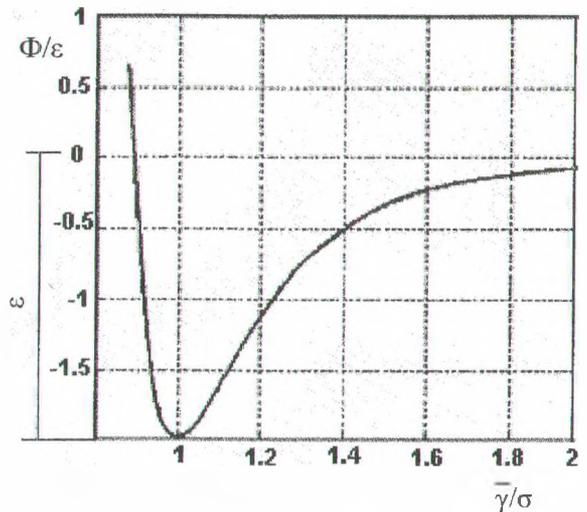


Рис. 1. Зависимость потенциальной энергии взаимодействия частиц от расстояния между ними в единицах  $\sigma$

Силу взаимодействия между телами определим как первую производную от потенциальной энергии по межчастичному расстоянию, взятую 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  $j$ -того 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  $\mu_1$  и  $\mu_n$ ), 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: первые десять и последние десять частиц системы подвержены действию упомянутых выше сил, зависящих от скоростей частиц. Сто частиц между ними представляют систему, поведение которой необходимо исследовать.

Полная система  $n=120$  дифференциальных уравнений движения имеет вид

$$m\ddot{x}_j = \mu_1 \dot{x}_j - \gamma_1 \dot{x}_j^3 + F(r_{j-1,j}) - F(r_{j,j+1}),$$

$$j = 1, \dots, 10,$$

$$m\ddot{x}_j = F(r_{j-1,j}) - F(r_{j,j+1}), \quad j = 11, \dots, 110,$$

$$m\ddot{x}_j = \mu_n \dot{x}_j - \gamma_n \dot{x}_j^3 + F(r_{j-1,j}) - F(r_{j,j+1}),$$

$$j = 111, \dots, 120.$$

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

$$\alpha_1 = \mu_1/\mu_n, \quad \alpha_3 = \sigma \mu_1 / \sqrt{\varepsilon m},$$

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

Система уравнений приобретает вид

$$\ddot{x}_j = \sigma \frac{\mu_1}{m} \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}} \dot{x}_j - \sigma \frac{\gamma_1}{m} \sqrt{\frac{\varepsilon}{m}} \dot{x}_j^3 +$$

$$+ \frac{\tau^2}{m\sigma} F(r_{j-1,j}) - \frac{\tau^2}{m\sigma} F(r_{j,j+1}),$$

$$j = 1, \dots, 10,$$

$$\ddot{x}_j = \frac{\tau^2}{m\sigma} F(r_{j-1,j}) - \frac{\tau^2}{m\sigma} F(r_{j,j+1}),$$

$$j = 11, \dots, 100,$$

$$\ddot{x}_j = \sigma \frac{\mu_n}{m} \sqrt{\frac{m}{\varepsilon}} \dot{x}_j - \sigma \frac{\gamma_n}{m} \sqrt{\frac{\varepsilon}{m}} \frac{\sigma^3}{\tau^3} \dot{x}_j^3 +$$

$$+ \frac{\tau^2}{m\sigma} F(r_{j-1,j}) - \frac{\tau^2}{m\sigma} F(r_{j,j+1}),$$

$$j = 111, \dots, 120.$$

Учитывая соотношения (2) и (4), получаем уравнения движения в безразмерной форме

$$\ddot{x}_j = \alpha_3 \dot{x}_j - \alpha_4 \dot{x}_j^3 + 12 \left( \bar{r}_{j,j-1}^{-13} - \bar{r}_{j,j-1}^{-7} \right) -$$

$$- 12 \left( \bar{r}_{j+1,j}^{-13} - \bar{r}_{j+1,j}^{-7} \right), \quad j = 1, \dots, 10,$$

$$\ddot{x}_j = 12 \left( \bar{r}_{j,j-1}^{-13} - \bar{r}_{j,j-1}^{-7} \right) -$$

$$- 12 \left( \bar{r}_{j+1,j}^{-13} - \bar{r}_{j+1,j}^{-7} \right), \quad j = 2, \dots, n-1,$$

$$\ddot{x}_j = \frac{\alpha_3}{\alpha_1} \dot{x}_j - \frac{\alpha_4}{\alpha_2} \dot{x}_j^3 + 12 \left( \bar{r}_{j,j-1}^{-13} - \bar{r}_{j,j-1}^{-7} \right) -$$

$$- 12 \left( \bar{r}_{j+1,j}^{-13} - \bar{r}_{j+1,j}^{-7} \right), \quad j = 111, \dots, 120,$$

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

Внутреннюю энергию системы определим как сумму ее кинетической и потенциальной энергий:

$$E = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} m \dot{x}_j^2 + \sum_{j=1}^{n+1} \varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{j,j-1}} \right)^{12} - \right.$$

$$\left. - 2 \left( \frac{\sigma}{r_{j,j-1}} \right)^6 \right],$$

которая в безразмерной форме  $\bar{E} = (\tau^2 / m\sigma^2) E$  приобретает вид

$$\bar{E} = \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} \dot{x}_j^2 + \sum_{j=1}^{n+1} \left[ (\bar{r}_{j,j-1})^{-12} - 2(\bar{r}_{j,j-1})^{-6} \right].$$

Запишем также выражения для мощностей диссипативных сил, действующих на первые и последние десять тел:

$$N_1 = (\mu_1 \dot{x}_j - \gamma_1 \dot{x}_j^3) \dot{x}_j, \quad j = 1, \dots, 10,$$

$$N_n = (\mu_n \dot{x}_j - \gamma_n \dot{x}_j^3) \dot{x}_j, \quad j = 111, \dots, 120,$$

или с учетом соотношений (4) между параметрами в безразмерной форме получим

$$\bar{N}_1 = \alpha_4 \dot{x}_1^2 - \alpha_3 \dot{x}_1^4;$$

$$\bar{N}_n = \frac{\alpha_4}{\alpha_1} \dot{x}_n^2 - \frac{\alpha_3}{\alpha_2} \dot{x}_n^4.$$

Интегрирование уравнений движения выполнено в среде MatLab [9] по многошаговому алгоритму Адамса – Башворта – Мултона переменного порядка.

**2. Результаты вычислений.** На рис. 2 представлено распределение температуры вдоль цепочки в безразмерных единицах  $\bar{T} = k_B T / \varepsilon$ . Безразмерная температура представляется через среднеквадратичную ско-

рость движения частиц  $k_B T = m \langle v^2 \rangle$   
 $\Rightarrow \bar{T} = \langle \bar{v}^2 \rangle$ , усреднение выполняется по  
 времени  $\langle \bar{v}^2 \rangle = \sum_{i=k_{\text{снб}}}^k \bar{v}_i^2 / (k - k_{\text{снб}} + 1)$ , где  $\bar{v}_i$

значение скорости на  $i$ -том шаге интегриро-  
 вания;  $k_{\text{уст}}$  определяет шаг, система может  
 рассматриваться как достигшая стационарного  
 состояния;  $k$  – конечный шаг интегрирования.

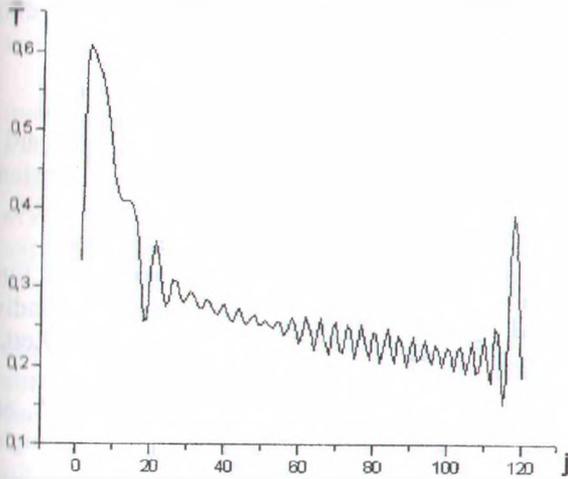


Рис. 2. Зависимость среднеквадратичной скорости движения от номера тела в системе при  $\alpha_1 = 1; \alpha_2 = 0.25; \alpha_3 = 1.05; \alpha_4 = 0.95$

Данное распределение характеризуется наличием температурного градиента. На рисунке четко выражены граничные эффекты, представляющие собой резкие колебания температуры вблизи границ цепочки. Вполне естественно, что поведение первых и последних десяти тел, подверженных действию неконсервативных сил, зависящих от скоростей тел, существенно отличается от поведения остальных тел. Однако поведение примерно еще десяти тел с обоих концов цепочки отражает наличие граничных эффектов.

Крайние тела, располагаясь друг от друга на значительном расстоянии (118 тел), все же проявляют высокую степень синхронизации, двигаясь почти в противофазе (рис. 3).

Оценка коэффициента теплопроводности при усреднении температуры на границах системы по десяти крайним телам из ста, не подвергающихся действию диссипативных сил, дает значение  $k \approx 11.6$  Вт/(м·К), которое значительно меньше, чем в линейной цепочке [7]. При расчете принимались параметры системы ( $m = 6.7 \cdot 10^{-25}$  кг,  $\sigma = 4.04 \cdot 10^{-10}$  м,  $\epsilon = 1.66 \cdot 10^{-25}$  Дж), характерные для атомов аргона. Температура на левом конце при этом равна 486,4 К, на правом – 367,5 К.

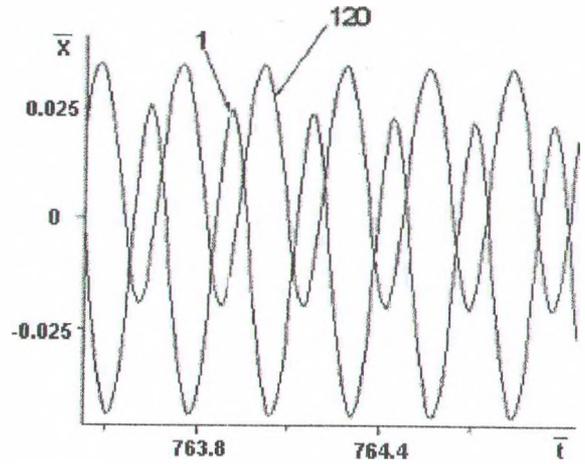


Рис. 3. Зависимость координаты от времени для первого, и последнего тел в единицах  $\sigma$  при  $\alpha_1 = 1; \alpha_2 = 0.25; \alpha_3 = 1.05; \alpha_4 = 0.95$

При низких значениях температуры системы наблюдается еще более значительная синхронизация крайних тел. Каждое из них поочередно находится в состоянии лишь незначительных колебаний относительно медленно смещающегося положения, и по достижению последним некоторого значения происходит резкий переход к колебательному движению со значительно большей амплитудой (рис. 4). Распределение температуры в этом случае имеет вид параболы с максимумом, приходящимся на тела, расположенные по центру системы (рис. 5).

Изменение температуры при переходе от тела к телу происходит плавно, за исключением тел, расположенных вблизи границ, на которые оказывают определяющее воздействие диссипативные силы.

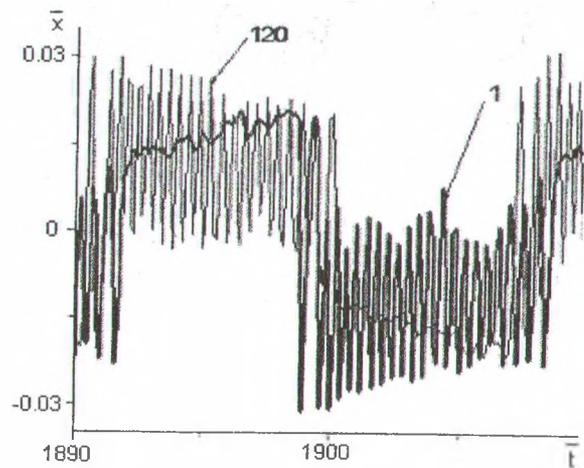


Рис. 4. Зависимость координаты от времени для первого и последнего тел в единицах  $\sigma$  при  $\alpha_1 = 1; \alpha_2 = 0.25; \alpha_3 = 0.1; \alpha_4 = 10$

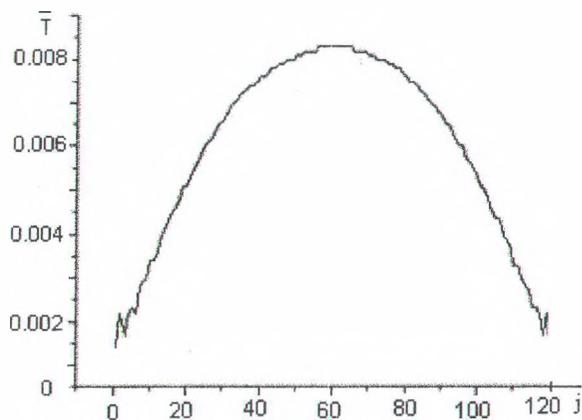


Рис. 5. Зависимость среднеквадратичной скорости движения тела от номера в системе при  $\alpha_1 = 1$ ;  $\alpha_2 = 0.25$ ;  $\alpha_3 = 0.1$ ;  $\alpha_4 = 10$

Анализ движения тел, расположенных на концах цепочки, показывает, что при увеличении температуры крайние тела колеблются относительно положений, смещенных в сторону увеличения эффективной длины цепочки (рис. 6). Наблюдаемый эффект соответствует явлению теплового расширения в макроскопических телах и теоретически объясняется асимметрией потенциала межчастичного взаимодействия (рис. 1).

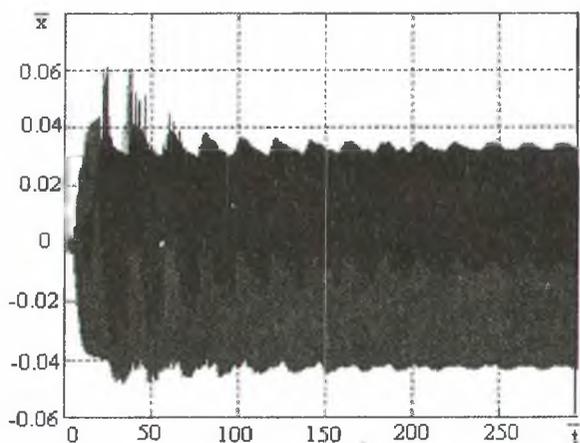


Рис. 6. Зависимость координаты от времени для первого (серый) и последнего (черный) тел в единицах  $\sigma$  при  $\alpha_1 = 4$ ;  $\alpha_2 = 0.25$ ;  $\alpha_3 = 1$ ;  $\alpha_4 = 1$

В начальный момент возбуждалась лишь первая частица (левый конец цепочки), а остальные находились в покое. На начальном этапе в поведении системы четко прослеживаются два периода, в течение которых возмущение достигает правого конца, а затем отраженная волна возвращается к левому концу. Прохождение волны по системе прослеживается и в дальнейшем, но возмущения в движении последнего тела постепенно затухают, и выход на стационарный режим требует до десяти указанных периодов.

### 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. Reps.* – 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. Физ.-мат. науки и информ.* – 2004. – Вып. XII. – 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. Наркевич И.И., Волмянский Э.И., Лобко С.И. *Физика для ВУЗов. Механика. Молекулярная физика.* – Мн.: Выш. шк., 1992.
9. Дьяконов В.П. *MatLab: Учебный курс.* – СПб.: ПИТЕР, 2001.