

УДК 536.24.01

**ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭНЕРГИИ
ВДОЛЬ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ**

В.С. Вихренко, С.В. Дубинин

Белорусский государственный технологический университет
vvikhre@bstu.unibel.by

В настоящее время распространение энергии вдоль одномерных структур широко исследуется как в связи с вопросами обоснования закона теплопроводности Фурье [1], так и ввиду необходимости понимания процессов передачи энергии в реальных квазиодномерных системах (биологических и органических молекулах, анизотропных кристаллах, наноразмерных трубках и т.д.) [2,3]. При этом основное внимание уделяется именно процессу распространения энергии вдоль одномерной системы. Вместе с тем эффекты, возникающие на ее границах в местах контактирования системы с термостатами, изучены недостаточно. Настоящее сообщение посвящено исследованию этих эффектов.

Рассматривается система n частиц массы m , линейно взаимодействующих между собой и с подложной. Взаимодействие с термостатами моделируется введением в уравнения движения первой и n -й частиц двух дополнительных членов, один из которых имитирует отрицательную вязкость, а второй – силы сопротивления, кубические по скоростям. Таким образом, частицы на границах, рассматриваемые изолированно, являются собой автоколебательные системы, которые могут потреблять или отдавать энергию в окружающую среду. Такие термостаты близки к термостату Нозера-Хувера. Интегрирование уравнений движения при $n = 100$ выполнено в среде Matlab.

Как следует из результатов интегрирования уравнений движения, взаимодействие частиц на границе с остальными частицами существенно влияет на установившиеся значения амплитуд колебаний. Начиная интегрирование уравнений движения из состояния, когда возбуждена лишь первая частица, найдено, что существует переходный период продолжительностью порядка времени прохождения упругой волны вдоль цепочки, прежде чем устанавливается стационарный поток энергии вдоль цепочки. Исследовано распределение температуры вдоль цепочки, и в частности ее эволюция вблизи граничных частиц.

Л и т е р а т у р а

1. Lepri S., Livi R., Politi R. // Phys. Reps. 2003. Vol. 377. P. 1.
2. Smentara F., Lasjaunas J.C., Maynard R. // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 77. P. 5397.
3. Schwarzer D., Hanisdi C., Kutne P., Troe J. // J. Phys. Chem. 2002. Vol. A106. P. 8019.