

文章编号: 1673-0062(2009)04-0053-03

## 一维派尔斯晶格体系中反常热导的研究

李新霞

(南华大学核科学技术学院, 湖南 衡阳 421001)

**摘要:** 考虑到许多真实材料的派尔斯不稳定性, 提出了 1 维二聚化晶格模型. 通过改变体系长短键键能的差异, 得到了在  $\alpha$  之间连续变化的指数值  $\alpha$ . 对于真实体系如聚乙炔链, 计算结果与 Mode-coupling theory 理论的预测值吻合较好, 表明同质的 (homogenous) 链是最好的热导体.

**关键词:** 派尔斯晶格; 热传导; 能量输运

**中图分类号:** O482.2      **文献标识码:** A

## Special Heat Conduction in One-dimensional Peierls Systems

LI Xin-xia

(School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China)

**Abstract** We put forward a dimerized lattice model with the consideration of the Peierls instability that occurs in many realistic materials and investigate its behaviors of heat conduction. A continuous variation of the divergent exponent of  $\kappa$  in the interval of (0.7~0.4) is shown by taking into account the difference between the long bond and the short one in the systems. For typical parameters related to real physical systems such as the polyethylene chain, the result is in good agreement with that predicted by the mode-coupling theory. Moreover, the homogenous chain is shown to be the best thermal conductor.

**Key words** Peierls lattice; heat conduction; energy transport

### 0 引言

傅立叶热传导定律指出, 体系中传导的热流量与温度梯度成正比, 其比例系数称为热导率, 由材料本身的特性所决定. 一维体系由于空间维度的限制常常表现出一些不同于三维体系中的奇异特征. 对许多一维体系模型的研究结果表明, 这些

体系的热传导并不遵守傅立叶热传导定律, 其热导率  $\kappa$  随体系粒子数  $N$  的增加而增加, 呈现出一种幂指数关系  $\kappa \propto N^\alpha$  ( $0 < \alpha \leq 1$ ), 这种行为现在称为反常的热传导现象<sup>[1-3]</sup>. 2002 年, M. Terraneo<sup>[4]</sup> 等人在著名的 Phys Rev Lett 物理刊物上指出: 可以通过调整体系格点势的强弱来控制体系热流量的大小, 进而研制出热整流器 (thermal

收稿日期: 2009-05-05

基金项目: 湖南省教育厅科研基金资助项目 (08C763)

作者简介: 李新霞 (1973-), 男, 湖南湘潭人, 南华大学核科学技术学院讲师, 硕士. 主要研究方向: 非线性物理.

rectifier). 2004年, Li Baowen 等人提出了制备一维(准一维)热二极管的方案<sup>[2]</sup>, 最近, 他们又讨论了研制热阻和热晶体管(thermal transistor)的可能性<sup>[5]</sup>. 面对一维体系热传导研究中呈现出的诱人的应用前景, 构建和研究包含有更多的实际体系因素的模型就显得非常重要了, 这种对更接近于真实体系特征的研究结论不仅为检验已有的关于热传导研究结论的正确性提供了有力的工具, 而且还将对热传导理论研究的进一步发展起到巨大的推动作用. 本文针对自然界中广泛存在的一类重要的材料——派尔斯晶格, 通过构造一维二聚化晶格体系模型, 利用分子动力学方法的研究了该材料的热传导性质.

## 1 模型和动力学方程

对于电子半满能带的原子等距离分布的链, 存在派尔斯不稳定性<sup>[6]</sup>. 原子发生位移后, 体系最终形成了一种长短键依次排列的(二聚化)原子链构型, 如典型的聚乙炔准一维材料、一维自旋体系(如  $GdCuO_3$ )等. 很明显, 二聚化后原来的简单晶格变成了复式晶格, 体系中的动力学性态发生了显著的变化, 晶格的振动不仅有声学模还有光学模. 考虑由  $N$  个质量为  $m$  的原子组成的派尔斯晶格体系, 第一个原子 ( $i=1$ ) 和最后一个原子 ( $i=N$ ) 分别放置在两个 Nosé-Hoover 热浴中, 热浴的温度用  $T_1$  和  $T_2$  表示. 两个成键的原子通过短键连接在一起, 原子对之间彼此通过长键连接起来. 通常来说, 短键是强键而长键是弱键. 为了便于和已有的研究进行比较, 最近邻原子间采用  $FPU-\beta$  模型中的相互作用势.

$$V = V(x_{i-1}, x_i) = \frac{1}{2}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{\beta}{4}(x_{i-1} - x_i)^4 \quad (1)$$

考虑到长短键键能的差异, 引入

$$V_{WB} = \gamma V_{SB} \quad (0 < \gamma \leq 1) \quad (2)$$

其中,  $\gamma$  是无量纲的系数, 它刻画体系长短键键能的差异, 下标 WB 和 SB 是短键和长键的缩写. 如果  $\gamma=1$  该模型简化为  $FPU-\beta$  体系.

把两个 Nosé-Hoover 热浴连在链的两端, 热浴里的原子与它们的最近邻原子总是通过长键(WB 键)连接, 这两个原子的动力学方程满足

$$\begin{aligned} x_1'' &= -\zeta_+ x_1' + f_1 - f_2 \\ x_N'' &= -\zeta_- x_N' + f_N - f_{N+1} \\ \zeta_+' &= x_1'^2/T_1 - 1; \zeta_-' = x_N'^2/T_2 - 1 \end{aligned} \quad (3)$$

其中, 符号“ $'$ ”表示对时间的求导,  $\zeta_{\pm}$  是

Nosé-Hoover 热浴乘子. 体系中其它部分粒子的动力学方程为

$$x_i'' = f_i - f_{i+1} \quad (i=2, \dots, N-1) \quad (4)$$

其中  $f_i$  是作用在第  $i$  个粒子上的力, 引入长短键键能的差异后

$$f_i = -\partial V_{WB}(x_{i-1}, x_i) / \partial x_i \quad (i \in \text{even})$$

$$f_i = -\partial V_{SB}(x_{i-1}, x_i) / \partial x_i \quad (i \in \text{odd}) \quad (5)$$

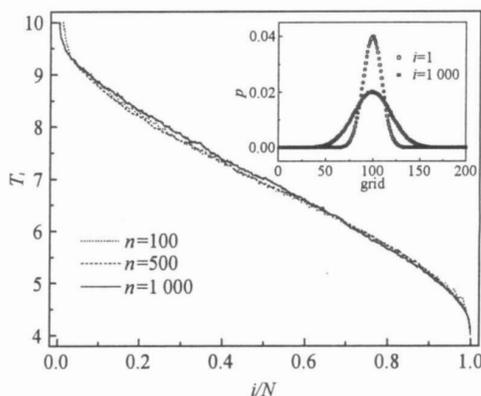
用四阶 Runge-Kutta 方法对体系的动力学方程式(3)和式(4)数值积分, 所有变量都被定义为双精度型的, 初始条件选择为体系的基态, 边界条件满足  $x_0 = x_{N+1} = 0$  达到稳恒态后, 体系的系综平均近似的用时间平均来代替<sup>[1]</sup>, 即

$$t_i = \langle x_i'^2 \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{t} \int_0^t x_i'^2(\tau) d\tau \right) \quad (6)$$

$$J_i = \langle j_i \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{t} \int_0^t j_i(\tau) d\tau \right) \quad (7)$$

## 2 结果与讨论

首先研究一维二聚化晶格中的温度分布情况. 图 1 给出了  $N=100, 500, 1000$  的三种情况, 从图中看出, 除了链的两端靠近热浴的地方粒子温度出现了较大的跳跃外, 体系中形成了较好的线性温度分布, 局域温度满足  $T_i \propto i/N$  的标度关系. 改变体系的粒子数  $N$ 、热浴的温度  $T_1, 2, \gamma$  的值等, 体系中温度的这种标度性质都不变. 选择参数  $\gamma=0.75$  这个值对应于聚乙炔链在基态时长短键键能的差异. 插图给出了热浴中粒子运动速度的概率分布, 很明显, 这是一种高斯型的分布.



$$T_1 = 10.0, T_2 = 4.0, \beta = 0.50, \gamma = 0.75$$

图 1 一维派尔斯晶格中的温度分布

Fig 1 Temperature profile of the Percival lattice

当体系中建立起线性的温度分布后, 根据傅立叶热传导定律  $j = -\kappa \cdot \nabla T$ , 体系的热传导率可以表示为  $\kappa \propto 1/N$  的形式. 一维二聚化体系总热流量

$JN$  与体系粒子数  $N$  的双对数关系如图 2 所示,  $\gamma = 1.0$  对应于  $FPU-\beta$  模型 ( $\gamma = 1.0$ ). 从图 2 可以看出:

1) 体系的总热流量  $JN$  随粒子数  $N$  的增大而增大, 两者之间服从幂指数关系  $JN \propto N^\alpha$ .

2) 与  $FPU-\beta$  模型中的总热流量  $JN$  相比较, 二聚化体系中的总热流量  $JN$  减少, 这种减少的趋势随  $\gamma$  值的变小更加明显.

3) 当参数  $\gamma$  在较宽的范围内变化时, 体系的总热流量  $JN$  随粒子数  $N$  的变化趋势与  $FPU-\beta$  模型对应的情况基本一致. 对于实际的体系, 如聚乙炔链 ( $\gamma = 0.75$ ),  $\alpha = 0.43 \pm 0.01$ , 这个结果与 MCT 理论的预测值仍然较好的吻合.

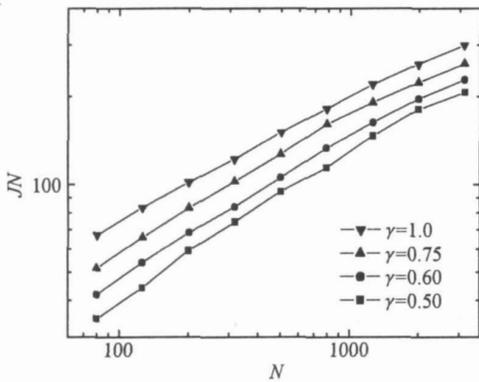


图 2 总热流量  $JN$  与体系粒子数  $N$  的对数关系  
Fig 2 Log-Log plots of  $JN$  and  $N$  for the systems

此外, 晶格二聚化导致了体系中总热流量的减少. 值得一提的是, 在质量无序的  $FPU-\beta$  链中也发现同样的现象. 图 2 中给出了体系中总热流量  $JN$  与  $\gamma$  的关系, 从图中可以看出, 体系的热流量在  $\gamma = 1.0$  时最大; 在  $\gamma \rightarrow 0$  时最少. 这表明同质的链是最好的热导体. 另外, 在研究中发现, 当  $\gamma \rightarrow 0$  时, 体系已经不能形成温度.

图 3 中给出了一维二聚化晶格和双原子  $FPU-\beta$  链中的指数值  $\alpha$  与参数  $\gamma$  的关系. 对于后者,  $\gamma = m_1/m_2$

从图 3 看出, 指数  $\alpha$  的值随  $\gamma$  的增大而减少. 当  $\gamma = 1.0$  时,  $\alpha$  最小, 且  $\alpha \approx 0.42$  此时对应于  $FPU-\beta$  模型. 对于真实的体系, 如聚乙炔链 ( $\gamma = 0.75$ ,  $\alpha = 0.43 \pm 0.01$ ), 指数  $\alpha$  的值与 MCT 理论的预测值较好的一致. 另外, 对于较大范围内的  $\gamma$  值, 如  $\gamma \in (0.6 \sim 1.0)$ , 指数  $\alpha$  的值与  $FPU-\beta$  模型的结果也非常的接近.

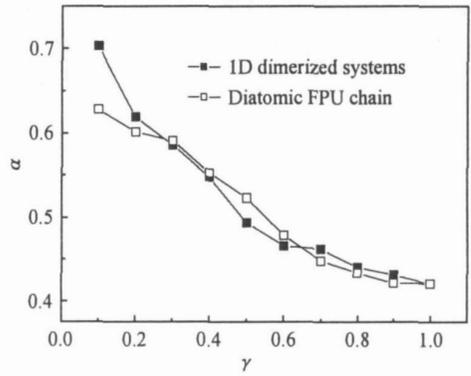


图 3 一维派尔斯晶格和双原子  $FPU-\beta$  链中的指数值  $\alpha$  与系数  $\gamma$  的关系

Fig 3 Dependence of  $\alpha$  and  $\gamma$  in the pericals lattice and the  $FPU-\beta$  diatomic lattice

### 3 结论

基于某些真实一维体系的派尔斯不稳定性, 本文构造了一维晶格二聚化模型, 研究结果表明该体系的热传导是反常的. 通过改变体系中长短键键能的比值  $\gamma (0 < \gamma \leq 1)$ , 对应的指数值  $\alpha$  在  $(0.7 \sim 0.4)$  之间连续的变化. 对于某些真实体系, 如聚乙炔链 ( $\gamma = 0.75$ ), 数值模拟得到的  $\alpha$  值与 MCT 理论的预测值较好的一致. 在双原子  $FPU-\beta$  链中, 通过改变原子的质量比, 数值上也得到相类似的结果. 此外, 同质的链 ( $\gamma = 1.0$ ) 被证明是最好的热导体.

### 参考文献:

- [1] Lepri S, Livi R, Politi A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices [J]. Physics Reports 2003, 377(1): 1- 80
- [2] Hu B, Li B, Zhao H. Heat conduction in one-dimensional chains [J]. Physics Review. E, 1998, 57(3): 2992- 2996
- [3] 李新霞, 唐 翌. 阻尼作用下一维体系热传导性能的研究 [J]. 物理学报, 2006, 56(12): 6556- 6561.
- [4] Teraneo M, Peyrard M, Casati G. Controlling the energy flow in nonlinear lattices: a model for a thermal rectifier [J]. Physics Review. Lett 2002, 88(7): 94302 - 94305
- [5] Baowen L, Lei W, Giulio C. Negative differential thermal resistance and thermal transistor [J]. Appl Phys Lett 2006, 88(5): 143501- 143054
- [6] Peierls R E. Quantum theory of solid [M]. London Oxford University Press 1995