

ESTUDOS EXATOS DA CONDUÇÃO TÉRMICA NA CADEIA HARMÔNICA UNIDIMENSIONAL

Aluno: Diogo Gaia da Silva

Orientador: Welles Antonio Martinez Morgado

Introdução

O problema da condução térmica baseada em dinâmicas microscópicas, apesar de toda uma extensa literatura sobre o tema, ainda é um problema sob debate [1]. A Lei empírica de Fourier, que determina que o fluxo local de calor J é igual em módulo ao produto do coeficiente de condutividade térmica λ pelo gradiente de temperatura. Este coeficiente é uma propriedade intensiva dos materiais e independe das dimensões físicas dos mesmos, mas podendo depender da temperatura e pressão. A conservação microscópica da energia implica uma equação de continuidade entre o fluxo de calor J e variações da densidade de energia térmica proporcionais à variações da temperatura, $d\rho = c dT$. Assim temos $\partial\rho/\partial t = -\text{div } J$ e portanto a temperatura, e por conseguinte a energia térmica, obedece uma equação de difusão: $\partial T/\partial t = D \nabla^2 T$, onde $D = \lambda/c$. Assim, qualquer modelo que pretenda representar um sistema que obedeça a lei de Fourier deve ser capaz de espalhar os fluxos microscópicos de calor de modo eficiente. Em outras palavras, a energia térmica deve se espalhar de modo difusivo (e irreversível) ao longo do sistema representado pelo modelo. Isto leva às propriedades usuais da condutividade térmica de materiais tais como o fluxo total de calor ao longo do eixo principal de um cilindro submetido a um gradiente externo de temperatura (não importando a secção reta do mesmo). Podemos verificar que o fluxo total de calor será inversamente proporcional ao comprimento desse cilindro, quando λ não depende das dimensões do material. Um gradiente uniforme de temperatura se estabelece então ao longo deste cilindro. Isto é essencial para caracterizar o material como obedecendo à Lei de Fourier.

Uma idéia inicial, aparentemente boa, é utilizar um sistema de cadeia unidimensional de massas acopladas a osciladores harmônicos, ou seja, modelos do tipo massa-mola com energia potencial quadrática. Para efetuar a condução de calor ao longo do sistema, uma extremidade é acoplada a um termostato de temperatura T_1 , enquanto que a outra se encontra acoplada a um outro termostato à temperatura $T_2 > T_1$. Este acoplamento consiste em geral de termos de força de Langevin [2] agindo em cada partícula das extremidades, e termos dissipativos correspondentes, de acordo com o teorema de Mori [3]. Contudo, um grande inconveniente deste modelo é que a energia é nele transportada a maneira de uma onda, ou seja, de forma balística e não difusiva. Uma consequência imediata é que o fluxo total de calor depende da diferença $T_2 - T_1$, mas não exatamente do inverso do comprimento total do sistema L [4]. Em outras palavras, λ depende de L e este modelo não obedece à Lei de Fourier.

Objetivos

Nosso principal objetivo científico de médio prazo para o presente projeto é utilizar métodos derivados das técnicas exatas de [5-7] para o estudo da Lei de Fourier em cadeias lineares harmônicas e não-harmônicas. Pretendemos estender a aplicação dos cálculos exatos das referências [5-7] para a condutância térmica para cadeias harmônicas lineares (de comprimento arbitrário L) de partículas Brownianas. Nosso objetivo é, através deste trabalho, estudar um sistema condutivo de maneira analítica, e tentar a partir destes modelos lineares desenvolver métodos úteis para o estudo do caso de potenciais não lineares (uma esperança de aplicação futura do método).

Metodologia

Resolveremos um conjunto linear de molas harmônicas acopladas a N massas (de mesmo valor) igualmente espaçadas ao longo de uma cadeia unidimensional. De modo a implementar um fluxo de energia de não equilíbrio, efetuamos primeiramente o acoplamento das partículas das extremidades ($n=1$ e $n=N$) a banhos térmicos de temperaturas distintas T_1 e $T_2 < T_1$ via termos de força de Langevin. A abordagem deste projeto consistirá de duas frentes de trabalho, uma numérica e outra analítica.

Na abordagem numérica o aluno irá produzir códigos de simulação, do tipo Dinâmica Molecular [8], em linguagem C para reproduzir o comportamento do sistema ao longo do tempo. Os métodos, tais como o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, que serão utilizados nesta fase do projeto são bastante padronizados. A precisão dos resultados obtidos por meio de simulações deste tipo é bastante razoável e as habilidades a serem adquiridas pelo aluno podem ser empregadas em muitas outras situações.

Nossa abordagem analítica envolve a solução direta do problema de Langevin por integração no tempo e a obtenção do comportamento estacionário do sistema via médias temporais das variáveis dinâmicas. Apesar de razoavelmente complexo do ponto de vista matemático, os principais resultados podem ser obtidos de maneira bastante prática através do uso de programas como Maple, ou similares. A forma das equações nos leva a utilizar cálculo de resíduos e transformadas de Laplace.

Conclusões

Um procedimento original utilizado recentemente nos permite obter funções resposta termodinâmicas (condutância térmica) de modo exato para sistemas pequenos. Nosso objetivo é estender esses resultados para a cadeia linear harmônica (curto e médio prazo) como uma passagem intermediária para a eventual solução de um problema não-linear de condução de energia (longo prazo).

Referências

1. F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and J. Lukkarinen, *J. Stat. Phys.* 116, 783 (2004).
2. N. C. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1992.
3. R. Zwanzig, in: W.E. Broton (Ed.), *Lectures in Theoretical Physics*, Boulder, vol. 3, Interscience, New York, 1961; H. Mori, *Phys. Rev.* v. 112 p. 1892, 1958.
4. Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb, *J. Math. Phys.* 8, 1073, 1967; M. Rich and W. M. Visscher, *Phys. Rev. B* 11, 2164, 1975; M. Bolsterli, M. Rich, and W. M. Visscher, *Phys. Rev. A* 1, 1086, 1970.
5. SOARES-PINTO, Diogo Oliveira e MORGADO, Welles Antônio Martinez, Brownian dynamics, time-averaging and colored noise. *Physica A*, v.365, p. 289, 2006
6. SOARES-PINTO, Diogo Oliveira e MORGADO, Welles Antônio Martinez, Exact time-average distribution for a stationary non-Markovian massive Brownian particle coupled to two heat baths. *Physical Review E*, v.365, p. 289, 2008.
7. MORGADO, Welles Antônio Martinez e SOARES-PINTO, Diogo Oliveira, Exact time-averaged thermal conductance for small systems: Comparison between direct calculation and Green-Kubo formalism. *Physical Review E*, v.365, p. 289, 2009.
8. R. Balescu, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, Wiley, New York, 1975.