

TRANSFERENCIA DE CALOR RESONANTE EN UNA CADENA UNIDIMENSIONAL CON ACOPLAMIENTO VARIABLE

RESONANCE OF HEAT TRANSFER IN ONE DIMENSIONAL CHAINS WITH TUNEABLE COUPLING

M.F. Carusela^{1,2}, N. Beraha¹, R. Barreto¹, A. Soba^{2,3}

1 Instituto de Ciencias- Universidad Nacional de General Sarmiento J.M.Gutierrez 1150 - Los Polvorines - Buenos Aires - Argentina

2 Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas - Argentina (CONICET)

3 Comisión Nacional de Energía Atómica - Buenos Aires - Argentina (CNEA)

e-mail: flor@ungs.edu.ar

Recibido: 12/12/12 – Aprobado: 07/08/13

Pese a que el problema del transporte de calor tiene cientos de años de antigüedad desde que Fourier dio a conocer su tan famosa ley de conducción, aún se desconocen las condiciones necesarias para que ésta se cumpla en sistemas de baja dimensión. Es por ello, además de por su interés práctico en el desarrollo tecnológico, que el control del transporte de energía en sistemas nanométricos de baja dimensión es un área de estudio que ha cobrado un gran interés en los últimos años. En este trabajo estudiamos la posibilidad de controlar el transporte de energía a lo largo de una cadena no-lineal unidimensional que consiste en dos segmentos con diferentes estructuras conectados mediante un acoplamiento modulado temporalmente. Los extremos de cada conductor están acoplados a reservorios térmicos también modulados en el tiempo. Analizamos la existencia de rectificación térmica y de comportamientos resonantes de la corriente de energía, como función de las frecuencias características del sistema. Discutimos el mecanismo físico subyacente.

Palabras Claves: conducción térmica, fenómenos alejados del equilibrio.

Since Fourier unveiled its so famous law of heat conduction, the problem of heat transport is still open specially due to its application and conditions that it must fulfill for low dimensional systems. That is why and for its practical interest in technological development, the control of energy transport in low-dimensional nanoscale systems is an area of reasearch that has gained considerable interest in recent years. In particular we study the possibility of controlling the transmission of energy along a one-dimensional non-linear chain consisting of two conductors with different structures connected by a coupling temporally modulated. The ends of each conductor are coupled to thermal reservoirs also temporally modulated. We analyze the existence of thermal rectification and resonant behavior of the energy flow as a function of the characteristic frequencies of the system. We discuss the underlying physical mechanism.

Key Word: thermal conduction, phenomena far from equilibrium.

I. INTRODUCCIÓN

En la última década se ha prestado una gran atención a la conducción de calor en escalas nanométricas, con el desarrollo de la fonónica, en donde se propone que los fonones son los protagonistas en los procesos de transporte. Este tema reviste suma relevancia tecnológica por estar involucrado en la generación y transporte de calor/energía en diversos dispositivos y se relaciona con consecuencias no deseadas como la posibilidad de daños estructurales de los mismos. Se ha demostrado experimentalmente, por ejemplo, que la corriente eléctrica en juntas moleculares genera suficiente calor como para afectar la integridad del dispositivo¹. Situaciones como ésta demuestran que es esencial estudiar mecanismos para, según sea el caso, poder disipar o direccionar calor eficientemente^{2,3}, además de determinar bajo qué

condiciones de operación, un dado dispositivo puede ser un buen conductor o aislante térmico. Entre todos los posibles mecanismos analizados recientemente se ha mostrado que una forma de inducir una bomba fonónica es modular temporalmente el acoplamiento entre distintas partes del sistema^{4,5}. Experimentalmente esto puede hacerse por ejemplo en juntas moleculares o sistemas de moléculas, variando la distancia entre ellas. Sin embargo, el transporte de fonones en sistemas moleculares dependientes del tiempo, es un tópico que aún no se comprende completamente desde un punto de vista teórico. En este trabajo proponemos un modelo para estudiar el transporte de calor/energía en un sistema unidimensional, analizando los posibles regímenes cuando se contemplan modulaciones temporales de los acoplamientos y temperaturas.

II. MODELO Y RESULTADOS

Consideramos un modelo que consiste en dos segmentos de cadenas tipo Frenkel-Kontorova (FK), acopladas armónicamente con una constante de acoplamiento k_{int} modulada temporalmente en forma periódica como se muestra en la Figura 1. El Hamiltoniano puede ser escrito como:

$$H = H_L + H_{int} + H_R \quad (1)$$

donde $H_{L,R}$ corresponden a los segmentos izquierda (L), derecha (R) respectivamente, mientras que H_{int} da cuenta de la interacción entre ambos

$$H_{L,R} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} K_{L,R} (x_{i+1} - x_i)^2 - \frac{V_0}{4\pi^2} \cos(2\pi x_i) \quad (2)$$

$$H_{int} = \frac{1}{2} K_{int}(t) (x_{int+1} - x_{int})^2$$

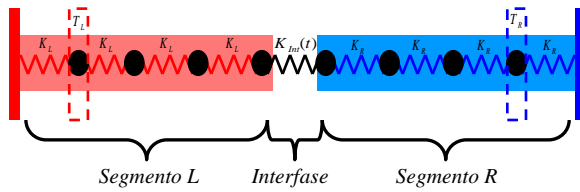


Figura 1. Esquema de dos cadenas unidimensionales acopladas por medio de una interacción modulada en el tiempo y en sus extremos acoplada a dos baños térmicos Langevin.

m_i es la masa del átomo i th, $x_i = q_i - ia$ denota el desplazamiento de su posición de equilibrio ia siendo a la periodicidad de la red (correspondiendo a un estado conmensurado del sistema⁶) y p_i corresponde al momento. $K_{L,R}$ son las constantes elásticas y V_0 es la amplitud del potencial de sitio. Los extremos de cada segmento están en contacto con dos baños térmicos los cuales son simulados a partir de reservorios tipo Langevin con media nula y varianza $\langle \xi_{1,N}(t), \xi_{1,N}(t') \rangle = 2\gamma k_B T_{L,R} \delta(t-t')$, donde γ es la intensidad del acoplamiento sistema-baño.

El sistema es llevado fuera del equilibrio mediante dos mecanismos:

- la modulación periódica simultánea de la temperatura de ambos baños $T_{L,R}(t) = T_{0,i} (1 + \Delta \text{sgn}(\sin(\omega_{temp} t)))$ $i = L, R$ donde $T_{0,i}$ es la temperatura de referencia de cada reservorio.
- la modulación del acoplamiento entre ambos segmentos $k_{int}(t) = k_o (1 + \sin(\omega_k t))$.

Las frecuencias se eligen de forma tal que $p \omega_{temp} = q \omega_k$ con $p, q \in \mathbb{N}$. La corriente de calor local dependiente del tiempo se calcula como:

$$J_i(t) = k_i \dot{x}_i(t) [x_i(t) - x_{i-1}(t)] \quad (3)$$

Entonces, podemos definir la corriente media \bar{J}_i promediando sobre un conjunto de períodos luego de un transitorio como:

$$\bar{J}_i(t) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n J_i(t + 2k\pi / \omega_{min}) \quad (4)$$

Donde n es el número de períodos, y $\omega_{min} = \min(\omega_{temp}, \omega_k)$. La corriente de calor neta en cada segmento es entonces:

$$J_{L,R} = \frac{\omega_{min}}{2\pi} \int_0^{\omega_{min}/2\pi} \bar{J}_i(t) dt \quad (5)$$

Para las simulaciones numéricas se utilizan parámetros adimensionales: constantes k_i en unidades de k_R , momentos en unidades de $[a(m k_R)^{1/2}]$, frecuencias en unidades de $[(k_R/m)^{1/2}]$ y temperaturas en $[a^2 k_R / k_B]$. Se aplican condiciones de contorno fijas. La integración se realiza con un algoritmo Runge-Kutta de 4th-orden asegurándonos que el sistema alcanza un estado estacionario ($J_{L,R}$ es independiente del sitio en cada segmento).

A partir de la ecuación de continuidad, la corriente de energía que fluye hacia y desde una partícula deben cancelarse cuando el sistema alcanza el estado estacionario, para que no se produzca una variación temporal de la densidad local de energía. Por lo tanto, se debe verificar que $\dot{W} + \dot{Q}_L = -\dot{Q}_R = J_R$, donde $-\dot{Q}_L$ es la tasa de calor absorbido por el reservorio L (definimos positivo de $L \rightarrow R$), \dot{Q}_R es la tasa de liberación de calor hacia el reservorio R y \dot{W} es la tasa a la cual se hace trabajo en el contacto.

La rectificación térmica en este sistema se puede ajustar modificando varios parámetros fundamentales del problema como las frecuencias, temperatura y tamaño. En este caso nos enfocaremos en mostrar el rol que juegan las frecuencias relevantes del sistema. En primer lugar, mostramos en la Figura 2 la corriente en cada segmento como función de ω_k para un valor de ω_{temp} correspondiente al límite adiabático ($\omega_{temp} \rightarrow 0$), con el objeto de enfocarnos solo en la respuesta del sistema frente a la modulación en el contacto. Podemos observar la existencia de dos regímenes claramente diferenciados. Uno que corresponde a valores de ω_k que van desde el límite $\omega_k \rightarrow 0$ hasta A y a partir de B, intervalos que corresponden a un régimen de transporte de calor propiamente dicho. A muy altas frecuencias el sistema no puede responder adecuadamente al estímulo y por lo tanto la respuesta es similar al caso sin modulación. Por otro lado, en el límite de muy baja frecuencia, el sistema se reduce al caso cuasi-estático. En ambos casos la corriente es la misma en cada segmento ($J_R - J_L \approx 0$ siendo la corriente positiva y donde el calor fluye de mayor a menor temperatura) y la tasa de trabajo entregado al sistema es pequeña aunque no nula. Sin embargo, para frecuencias en el intervalo [A,B], se produce una respuesta resonante en la conducción de energía en el sistema, incluso produciéndose una

inversión de la corriente en el segmento L (punto C). Esto marca un umbral de un régimen que podemos denominar de ‘transporte de energía’, donde la potencia entregada $J_R + |J_L|$ que es siempre positiva, alcanza en este régimen un valor máximo según es esperable en condición resonante. Más aún, es interesante observar la existencia de una frecuencia para la cual la corriente (en valor absoluto) es la misma en ambos segmentos en este régimen (punto D). A partir de allí, y para frecuencias mayores, $J_R - |J_L|$ es negativa, es decir se comienza a producir una mayor corriente de energía hacia el reservorio de mayor temperatura. Este comportamiento es robusto, siendo encontrado para distintas direcciones del gradiente de temperatura y frecuencias de modulación de los baños. Incluso se observa en el caso en que las temperaturas de los baños son iguales, indicando que es un régimen puramente de transporte de energía en condición resonante. Sin embargo, los valores máximos de J_L y J_R sí dependerán del bias medio de temperatura.

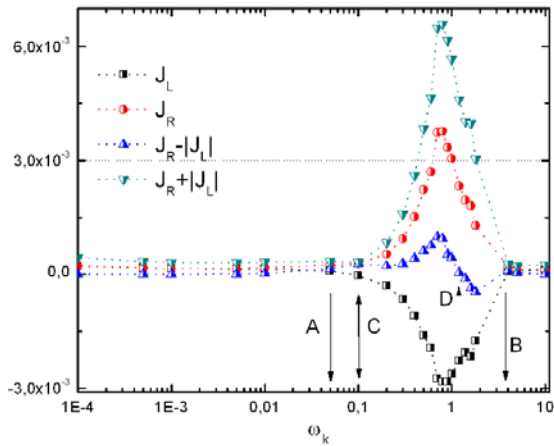


Figura 2. Corriente versus ω_k en los segmentos L (negro), R (rojo), $J_R - |J_L|$ en el contacto (azul) y potencia entregada (verde). El significado de A, B y C se discute en el texto. Parámetros: $V_0=5$, $\omega_{temp}=0.00001$, $\gamma=0.5$, $\Delta=0.5$, $k_R=0.5$, $k_L=1$, $k_{int}=0.05$. $T_{0,L}=0.15$, $T_{0,R}=0.05$, $N=30$.

Para comprender el mecanismo subyacente en este fenómeno de rectificación e inversión, calculamos los espectros de energía de las partículas correspondientes a la izquierda (L) y derecha (R) de la interfase. A modo de ejemplo, presentamos en la Figura 3 el espectro fonónico de dichas partículas cuando $T_L > T_R$. Se observa que los espectros de las partículas a izquierda (L) y derecha (R) de la interfase son diferentes. Esto es debido por un lado a que las estructuras son diferentes, y por otro a que las bandas fonónicas dependen de la temperatura debido a la no linealidad del potencial.

Cuando la temperatura es baja el potencial de sitio juega un rol fundamental confinando las partículas.

Linealizando las ecuaciones de movimiento se obtiene que las frecuencias corresponden a la banda $\sqrt{V_0} < \omega < \sqrt{V_0 + 4k_i}$ (Figura 3-a). A medida que la temperatura en la interfase aumenta (debido a la potencia entregada) el potencial de sitio puede despreciarse y el potencial entre partículas tiende a ser armónico. En este punto comienzan a aparecer frecuencias bajas, y esto ocurre para temperaturas en la interfase mayores a la crítica $T_{cr} \approx \frac{V_0}{4\pi^2}$ (Figura 3-b). Para temperaturas mayores el sistema se asemeja a dos cadenas armónicas acopladas con frecuencias en la banda $0 < \omega < 2\sqrt{k_i}$ (Figura 3-c)

Por lo tanto para alcanzar y optimizar la rectificación en ambos segmentos se debe lograr una superposición de las bandas en el régimen de alta temperatura. Esta superposición se produce para frecuencias bajas que son las que corresponden a modos no localizados, responsables del transporte. Fuera de la resonancia la superposición se observa en intervalos de mayor frecuencia, correspondientes a modos localizados. En este caso el sistema funciona prácticamente como un aislante.

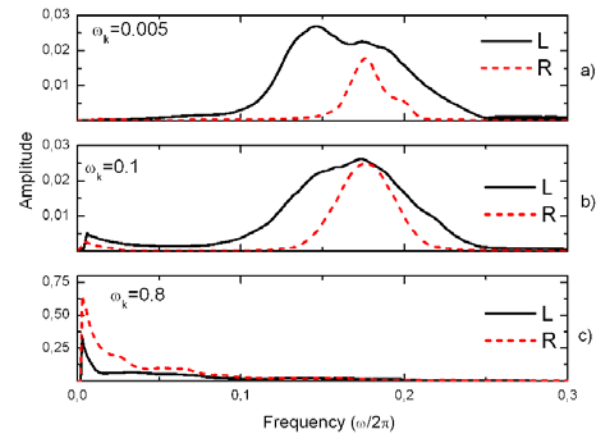


Figura 3. Espectros de las dos partículas acopladas a la izquierda (L) y derecha (R) de la interfase para $\omega_k=0.005$, 0.1 , 0.8 (de arriba hacia abajo). Los parámetros son los mismos de la Figura 2.

Para analizar la respuesta del sistema en función de ω_{temp} , graficamos la corriente en uno de los dos segmentos de la cadena (la elección es arbitraria). En la Figura 4 se muestra la corriente en el segmento R en función de la frecuencia de modulación de los baños para diferentes valores de ω_k . Cuando ω_k es pequeño (por lo tanto $k_{int} \approx cte$), la corriente es la misma en cada segmento ($J_L = J_R$). En el caso de $\omega_{temp} \rightarrow 0$ la corriente media es debida a dos baños térmicos cuyas temperaturas se pueden expresar como dos bias térmicos estáticos. Por otro lado, si $\omega_{temp} \rightarrow \infty$, las partículas de los extremos experimentan una temperatura promedio

constante, correspondiendo a un equilibrio térmico si $\omega_k \rightarrow 0$. Este es un régimen de transporte de calor propiamente dicho estando determinado principalmente por la temperatura.

A medida que aumenta el valor de ω_k (por ejemplo $\omega_k=0.1$ en la Figura 4) comienza a ser dominante el régimen de transporte de energía debido a la potencia entregada por la modulación del contacto entre segmentos. Las corrientes en cada segmento son diferentes ($\text{sgn}(J_L) \neq \text{sgn}(J_R)$ y $|J_L| \neq |J_R|$) y a partir de un cierto valor crítico de ω_{temp} (aprox. 0.05 en la Fig. 4) la corriente se hace independiente de dicha frecuencia.

Sin embargo en el régimen resonante, entorno de $\omega_k \approx 0.8$ (ver Figura 2), la corriente presenta un comportamiento marcadamente diferente. Se observa que la misma se hace máxima para un valor intermedio de ω_{temp} . Sin embargo, se encuentra un fenómeno de multiresonancia en el transporte de energía con la presencia de múltiples picos resonantes. Estos están relacionados, aunque no necesariamente son coincidentes, con las autofrecuencias del sistema armónico correspondiente, estando determinadas principalmente por el tamaño del mismo. Es importante notar que este fenómeno requiere una sinergia entre ambas fuentes de no equilibrio.

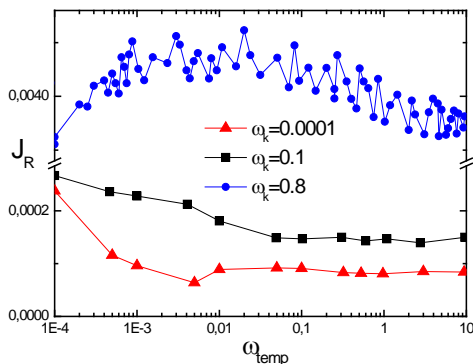


Figura 4. J_R versus ω_{temp} , para $\omega_k=10^{-4}$ (rojo), $\omega_k=10^{-1}$ (negro), y $\omega_k=8 \cdot 10^{-1}$ (azul). Los parámetros son los mismos de la Figura 2.

III. CONCLUSIONES

En síntesis, hemos analizado el transporte de calor en dos segmentos con distintas estructuras y acoplados débilmente, habiéndose incorporado al sistema dos fuentes de no equilibrio: la modulación temporal de las temperaturas y del acoplamiento. Hemos encontrado la existencia de dos regímenes bien diferenciados: de transporte de calor y de transporte de energía. El primero está determinado principalmente por la temperatura de los baños, en el límite de muy baja frecuencia para la modulación del acoplamiento. En cambio el segundo es fuertemente dependiente de ambas

frecuencias involucradas. Para comprender el mecanismo subyacente, hemos analizado el comportamiento de los espectros de las partículas en la interfase en el límite $\omega_{temp} \rightarrow 0$, encontrando que en el régimen resonante la superposición de los mismos se da en la región de bajas frecuencias, es decir correspondiente a modos no localizados responsables del transporte. En este caso las corrientes en cada segmento son máximas (en valor absoluto), produciéndose transporte de energía hacia ambos reservorios. Aunque este dispositivo no actúa como bomba de calor permitiendo transportar energía contra el gradiente térmico, sin embargo ajustando las frecuencias ω_k y ω_{temp} adecuadamente, la diferencia entre las corrientes hacia el segmento L y R puede tomar valores positivos o negativos. Esto permitiría ajustar la energía direccionada a cada segmento, incluso logrando un transporte térmico multiresonante. Cuando se realiza el funcionamiento de un nano dispositivo o sistema, poder ajustar las frecuencias de trabajo adecuadamente permitiría, aún en condiciones de óptimo transporte, controlar la energía o calor que se direcciona hacia distintas partes del mismo. Esto se torna relevante desde el punto de vista tecnológico al momento de evitar daños estructurales.

Referencias

- 1 – Z. Huang, B. Xu, Y. Chen, M. Di Ventra, and N. Tao, Nano Lett. 6, 1240 (2006); M. Tsutsui, M. Taniguchi, and T. Kawai, *ibid.* 8, 3293 (2008); Z. Huang, F. Chen, R. D'Agosta, P. A. Bennett, M. Di Ventra, and N. Tao, Nat. Nanotechnol. 2, 698 (2007).
- 2 – C. Van den Broeck and R. Kawai, Phys. Rev. Lett. 96, 210601 (2006); M. van den Broek and C. Van den Broeck, *ibid.* 100, 130601 (2008); J. Ren and B. Li, Phys. Rev. E 81, 021111 (2010); F. Zhan, N. Li, S. Kohler, and P. Hänggi, Phys. Rev. E 80, 061115 (2009); B.-Q. Ai, D. He, and B. Hu, Phys. Rev. E 81, 031124 (2010).
- 3 – D. Segal, Phys. Rev. Lett. 101, 260601 (2008); D. Segal, J. Chem. Phys. 130, 134510 (2009); N. Nakagawa and T. S. Komatsu, EPL 75, 22 (2006); N. Li, F. Zhan, P. Hänggi, and B. Li, *ibid.* 80, 011125 (2009); M. Rey, M. Strass, S. Kohler, P. Hänggi, and F. Sols, Phys. Rev. B 76, 085337 (2007); L. Arrachea, M. Moskalets, and L. Martin-Moreno, *ibid.* 75, 245420 (2007); M. Moskalets and M. Büttiker, *ibid.* 70, 245305 (2004); Y. Wei, L. Wan, B. Wang, and J. Wang, *ibid.* 70, 045418 (2004); B. Wang and J. Wang, *ibid.* 66, 125310 (2002); M. Moskalets and M. Büttiker, *ibid.* 66, 205320 (2002).
- 4 – Ai B.-Q, He D., Hu B., Phys. Rev. E, 81, 031124(2010)
- 5 – Cuansing E., Wang J.S, Phys. Rev. B 81, 052302 (2010); Cuansing E., Wang J.S, Phys. Rev. E 82, 021116 (2010)
- 6 – S. Aubry, P.Y. Le Daeron, Vol 8, Issue 3 (1983)