

Thermische und langreichweitige Effekte in nichtlinearer Gitterdynamik

mit Anwendungen in der Bio- und Nanophysik

Eine an der Universität Bayreuth zur Erlangung des Grades eines Doktors der
Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

verfasst von

Christian Brunhuber

geboren in Eschenbach i.d. Opf., Bayern

1. Gutachter: Prof. Dr. F.G. Mertens
2. Gutachter: Prof. Dr. W. Pesch

Tag der Einreichung: 07.12.2006
Tag des Kolloquiums: 01.02.2007

Abstract

Long-range and thermal effects in nonlinear lattice dynamics

with applications in bio and nano science

The scope of the thesis at hand is the role of long-range and thermal effects in nonlinear lattice dynamics and its applications in bio and nano science. The body of the thesis is divided into three parts, in which extensions of the famous Fermi-Pasta-Ulam-chain, the discrete nonlinear Schrödinger equation and a two-dimensional Fermi-Pasta-Ulam-array with graphite-like interaction potentials between the particles are considered.

In the first part, we extend prior studies on thermal diffusion of non-topological solitons to anharmonic Fermi-Pasta-Ulam-chains with additional long-range coupling. Two types of long-range interactions are considered: harmonic long-range interactions with Kac-Baker or power-law dependence of the coupling on the distance of the interacting particles. The observed superdiffusive behavior turns out to be the dominating mechanism for the soliton diffusion on chains with long-range interactions, whereas it is less decisive on chains with nearest neighbor interactions. Using a collective variable technique in the framework of a variational analysis for the continuum approximation of the chain, we derive a set of Langevin-equations for the collective variables soliton position and inverse soliton width. The simulations and the perturbative treatment of the Langevin-equations show, that for both types of long-range interactions, the solitons reach (on different time-scales) the same superdiffusive long-time limit of the position variance with a characteristic $t^{3/2}$ -dependence.

In the second part, the effect of Kac-Baker long-range interactions with and without nonlinear damping are considered in the discrete nonlinear Schrödinger equation. The combination of long-range forces and damping yields a periodic pattern of stationary breathers which evolves from an originally uniformly distributed background. The long-range interaction radius determines the periodicity which can be understood in the quasi-continuum approximation of the system. For the undamped system, the impact of the long-range interactions on the transition to a persistent-breather phase is investigated, which only depends on the energy and the norm of the DNLS. Using Monte-Carlo techniques, the localization strength can be monitored as a function of the long-range interaction radius and the system temperature, which is formally negative in the persistent-breather phase.

The third part is motivated by the applications of carbon nanotubes in novel micro devices. The carbon nanotubes are modeled by a Fermi-Pasta-Ulam-plane with periodic boundary conditions in the direction transverse to the tube axis. Along the tube axis, two heat baths are connected to the system. In the simulations, the heat flux and the thermal conductivity are obtained in dependence of the tube length and the mean temperature. The observed values of the thermal conductivity resemble prior results from experiments and molecular dynamic simulations. The thermal conductivity of a ten particle broad FPU-carbon-plane and a FPU-carbon-chain diverges for long enough systems with the same power of the system length, which depends on the temperature of the system.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Historisches	1
1.2	Überblick	5
1.2.1	Kapitel 2	5
1.2.2	Kapitel 3	6
1.2.3	Kapitel 4	7
2	Diffusion von Solitonen auf FPU-artigen Ketten mit langreichweitiger Kopplung	13
2.1	Motivation	13
2.2	Modell	15
2.2.1	Kac-Baker-Wechselwirkungen	17
2.2.2	Potenzartige Wechselwirkungen	17
2.3	Kontinuumsnäherung	18
2.3.1	Kac-Baker-Wechselwirkungen	18
2.3.2	Potenzartige Wechselwirkungen	19
2.4	Kollektive Variablen	23
2.4.1	Kac-Baker-Wechselwirkungen	24
2.4.2	Potenzartige Wechselwirkungen	25
2.5	Langevin-Systeme	27
2.5.1	Kac-Baker-Wechselwirkungen	28
2.5.2	Potenzartige Wechselwirkungen	29
2.5.3	Struktur der Langevin-Systeme	30
2.6	Stochastische Störungsrechnung	31
2.6.1	Kac-Baker-Wechselwirkungen	31
2.6.2	Potenzartige Wechselwirkungen	32
2.6.3	Diffusionsverhalten	33
2.7	Simulationen	34
2.7.1	Vorbemerkungen	34
2.7.2	Kac-Baker-Wechselwirkungen	36
2.7.3	Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen	39
2.7.4	Potenzartige Wechselwirkungen	40
2.7.5	Einfluss der Solitonenform	43
2.8	Zusammenfassung und Ausblick	47
2.9	Anmerkungen	48
2.9.1	Anomale Diffusion	48
2.9.2	Getriebene FPU-Systeme	49

3	Persistente Breather in langreichweitigen diskreten nichtlinearen Schrödinger-Modellen	55
3.1	Motivation	55
3.2	Modell	57
3.3	Gedämpftes System	58
3.3.1	Mikrokanonische Simulationen	59
3.3.2	Quasikontinuumsnäherung	62
3.3.3	Dimer	64
3.4	Thermalisierung	68
3.4.1	Simulation	69
3.4.2	Monte-Carlo-Simulationen	74
3.4.3	Lineare Stabilität	79
3.5	Zusammenfassung und Ausblick	83
4	Wärmeleitung von Kohlenstoff-Nanoröhrchen in Fermi-Pasta-Ulam Approximation	89
4.1	Motivation	89
4.2	Fourier-Gesetz	91
4.2.1	Anomale Diffusion	93
4.2.2	Lineare-Antwort-Theorie	94
4.3	Wärmeleitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen	97
4.4	Modell	104
4.4.1	FPU-Hamiltonfunktion	104
4.4.2	Wärmeleitfähigkeit	106
4.5	Simulationen	108
4.5.1	Nichtgleichgewichtssimulationen	108
4.5.2	Simulationsergebnisse: Anomale Wärmeleitung	112
4.5.3	Ballistische Wärmeleitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen	116
4.5.4	Temperaturabhängigkeit	119
4.5.5	Simulationsergebnisse: Temperaturabhängigkeit	122
4.6	Zusammenfassung und Ausblick	126
5	Schluss	133
A	Fluktuations-Dissipations-Theorem	135
B	Quasikontinuumsnäherung	137
C	Stochastische Störungsrechnung	139
D	Bestimmung des Startsolitons	141
E	Großkanonische Zustandssumme	143

Kapitel 1

Einleitung

In den letzten Jahrzehnten hat bei der Modellierung physikalischer Phänomene ein Paradigmenwechsel hin zu einer größeren Anerkennung komplexer Zusammenhänge zwischen Ursache und Wirkung stattgefunden. Dies kann vielleicht als der Wandel von einer reduktionistischen Sichtweise, die das Ganze als Summe seiner einzelnen Teile sieht, hin zu einer holistischen Anschauung beschrieben werden, bei der das Ganze mehr als die Summe seiner Einzelteile darstellt. Viele physikalische Modelle lassen sich nicht durch lineare Zusammenhänge und der daraus resultierenden großen Vereinfachung der Superposition beschreiben. Dieser Paradigmenwechsel hat zur Entwicklung der *Nichtlinearen Dynamik* als interdisziplinäres Feld beigetragen, die Forscher aus der Physik, Biologie, Chemie, Ökonomie, Medizin, Mathematik und Technik zusammenbringt.

Diese Arbeit behandelt nichtlineare Systeme und ihr Verhalten in der Gegenwart von thermischem Rauschen und langreichweitigen Wechselwirkungen. Nichtlinearität, Diskretheit, thermisches Rauschen und langreichweitige Wechselwirkungen sind überall in der Natur präsent und das Zusammenwirken dieser Phänomene ist der Schlüssel zum Verständnis vieler wichtiger Vorgänge in der Welt, die uns umgibt.

1.1 Historisches

In den letzten drei bis vier Dekaden lässt sich eine explosionsartige Steigerung der wissenschaftlichen Aktivität auf dem Gebiet der nichtlinearen Physik verzeichnen, die in [1] in die (sich gegenseitig überlappenden) Kategorien Chaostheorie, Reaktions-Diffusionssysteme und SolitONENTHEORIE eingeteilt wird. In den Jahren 1970-1990 stieg die jährliche Zahl wissenschaftlicher Artikel, die einen der Begriffe CHAOS, SOLITON oder REACTION-DIFFUSION im Titel oder Abstract verwenden, exponentiell an, gefolgt von einer langsamen Sättigung (ab etwa 1995) bei etwa 3000 Publikationen pro Jahr. Der Verlauf der Daten erinnert an eine Funktion, die Pierre Verhulst in der Mitte des neunzehnten Jahrhunderts zur Beschreibung des Wachstums von biologischen Populationen einführte [1]. Diese drei Begriffe können natürlich nur als eine mögliche Auswahl angesehen werden, denn andere wichtige Phänomene der nichtlinearen Physik wie die Strukturbildung und die Turbulenz befinden sich ebenfalls seit vielen Jahren im Fokus der Forschung.

Die hier vorliegende Arbeit gehört zur Kategorie der SolitONENTHEORIE. Die Geschichte der Solitonen in der nichtlinearen Physik beginnt im Jahre 1834 bei technischen Messungen zur Antriebsleistung von Lastbooten durch den schottischen Ingenieur John Scott Russell in einem Kanal nahe der Stadt Edinburgh. Beim plötzlichen Stoppen eines Bootes hatte sich vor dem Bug des Bootes eine beachtliche Wasserwelle gebildet, die begann, mit unveränderter Form und einer Geschwindigkeit von 8-9 Meilen pro Stunde den Kanal entlang zu laufen [2]. Diese Entdeckung veranlasste Russell zu weiteren Experimenten in Kanälen und Wassertanks. Dabei stellte er fest,

dass sich zwei dieser solitären Wellen ohne jegliche Wechselwirkung zu passieren scheinen. Im Jahre 1895 konnten Korteweg und de Vries mit ihrer Theorie zu Seichtwasserwellen Russells Beobachtung mathematisch erklären. Sie reduzierten das Problem auf eine nichtlineare partielle Differentialgleichung (PDE), der Korteweg-de Vries Gleichung (KdV). Diese besitzt formstabile (kohärente) Lösungen mit der Geschwindigkeit als Parameter und stellt eine mathematische Beschreibung des glatten wohldefinierten Wasserbergs aus Russells Beobachtung dar. Russells Arbeiten zu hydrodynamischen Solitonen gerieten aber wegen der damaligen ablehnenden Haltung seiner Zeitgenossen Airy und Stokes weitgehend in Vergessenheit. In den folgenden Jahrzehnten gab es viele weitere Entdeckungen in verschiedensten Systemen, bei denen nichtlineare Effekte den Schlüssel zu deren Verständnis darstellen. Die Messungen der Geschwindigkeit von Nervenpulsen (in Ischiasnerven von Fröschen) durch den Biologen Hermann Helmholtz im Jahre 1850, die zu einem überraschend kleinen Wert von etwa 27 m/s führten, waren der erste Hinweis auf die physikalisch-chemische Grundlage der Nervenleitung - autokatalytische chemische Reaktionen basierend auf den Gesetzen der nichtlinearen Diffusion. Im Jahre 1868 konnte durch Julius Bernstein erstmalig der Spannungsverlauf eines Nervenpuls aufgezeichnet werden. Bernstein war es auch, der 1902 die Hypothese aufstellte, dass ein Nachlassen des Oberflächenwiderstands des Nerven der grundlegende Mechanismus der Impulsübertragung ist. Zur etwa gleichen Zeit, 1906, demonstrierte Robert Luther, dass die Geschwindigkeit einer chemischen autokatalytischen Reaktionsfront durch das Produkt der ionischen Diffusionskonstante und der Reaktionszeit gegeben ist, was zu den beobachteten langsamen Geschwindigkeiten der Axonen führt (siehe [3]). Ein weiteres Beispiel sind die frühen Versuche von Gustav Mie im Jahre 1912, eine Theorie der Materie zu entwerfen, die im Wesentlichen aus einer nichtlinearen Erweiterung der Maxwellgleichungen bestand und in den 30er Jahren von Born und Infeld aufgegriffen wurde.

Zu dieser Zeit wurde auch das Konzept des Polarons vom sowjetischen Physiker Landau entwickelt und später, ebenfalls in der Sowjetunion, von Frenkel und Kontorova die Sine-Gordon-Gleichung (sG) zur Beschreibung von Versetzungen in Kristallen herangezogen. Ein anderes Gebiet, das zu den frühen Beispielen nichtlinearer Forschung zählt, ist die Molekülphysik. Während der 30er Jahre konnte Reinhard Mecke von IR-Absorptionsspektren kleiner Moleküle wie Benzol auf lokale Moden schließen, bei denen praktisch die gesamte Vibrationsenergie des Moleküls an einer C-H Bindung lokalisiert ist. Die Beiträge von Mecke gerieten in den Folgejahren in Vergessenheit, bis die Lokalisierung von Vibrationsenergie in Molekülen und molekularen Kristallen in den 70er Jahren wiederentdeckt wurde. Die Theorie dieser Selbstlokalisierung in molekularen Kristallen hängt eng mit Landaus Polaron zusammen und wurde in den späten 70er Jahren von Davydov auf den Transport von Vibrationsenergie in Proteinen angewandt.

Da es in dieser Arbeit vornehmlich um die Dynamik anharmonischer Ketten, ihre numerische Simulation und analytische Beschreibung gehen soll, ist besonders das berühmte rechnergestützte Experiment von Fermi, Pasta und Ulam (FPU-Experiment) von Bedeutung [4]. Das Experiment wurde 1954 in Los Alamos am MANIAC-Computer durchgeführt, der aus etwa 18 000 Vakuumröhren bestand. Dabei wurden die Bewegungsgleichungen einer Kette aus 64 Massen aufintegriert, die durch ein Federpotenzial mit kubischen und/oder quartischen Anharmonizitäten gekoppelt waren. Die Motivation für das numerische Experiment war das Studium des Thermalisierungsverhaltens der anharmonischen Kette als das einfachste Modell eines Festkörpers. Mit einer Anfangsbedingung, die die gesamte Energie in einer der 64 möglichen Moden des Systems konzentrierte, sollte im Zuge der Thermalisierung Äquipartition unter allen Moden auftreten. Das Ergebnis der Simulation zeigte jedoch, dass nach einer anfänglichen Interaktion mit einigen benachbarten Moden die Energie wieder fast vollständig in die anfangs angeregte Mode zurückkam (recurrence) [5, 6].

Dieses Rätsel blieb ungelöst, bis 1965 Norman Zabusky und Martin Kruskal die FPU-Kette im Kontinuumsgrenzfall durch eine KdV-Gleichung approximierten und feststellten, dass die

Anfangsbedingung des FPU-Experiments in ein Spektrum solitärer Wellen zerfallen muss, die nach einiger Zeit die Anfangsbedingung fast identisch wiederherstellen [7]. Bei ihren numerischen Untersuchungen stellten sie außerdem fest, wie lange vor ihnen John S. Russell, dass solitäre Wellen unverändert (bis auf eine räumliche Versetzung) aus Streuung untereinander hervorgehen und prägten den Ausdruck „Soliton“ für diese stabilen teilchenartigen Anregungen. Diese Eigenschaften der Soliton-Soliton-Streuung ist bei integrablen Systemen zu finden. Der Ausdruck „integrabel“ bezeichnet ein Hamiltonsches System, bei dem die Anzahl der Erhaltungsgrößen der Anzahl der Freiheitsgrade im System entspricht. Eine partielle Differentialgleichung entspricht einem unendlich-dimensionalen Hamiltonschen System und daher sind zur Integrabilität unendlich viele Erhaltungsgrößen nötig. Integrabilität ist aber eine nichtgenerische Eigenschaft und verschwindet mit fast allen denkbaren Störungen, die im System vorkommen können. Solitonen sind deshalb seltene mathematische Phänomene. Die gegenläufigen Effekte von Nichtlinearität und Dispersion (oder Diffraktion) führen aber sehr allgemein zur Existenz formstabiler Lösungen, oder solitärer Wellen, mit sehr ähnlichen Eigenschaften, die man oftmals in einer weniger strikten Sprechweise als „Solitonen“ bezeichnet.

Im Jahre 1967 konnte Gardner et al. [8] zeigen, dass sich die KdV-Gleichung durch eine Umformulierung in ein vollständig lösbares Streuproblem überführen lässt, wobei den Lösungen die Rolle eines zeitabhängigen Potenzials der Schrödingergleichung zukommt. Die Formulierung der inversen Streutheorie (IST) nach Lax wird heute benutzt, um exakte Lösungen einer großen Klasse nichtlinearer PDEs zu erhalten. Da mittlerweile viele integrable PDEs (und Gittergleichungen) gefunden wurden, werden die KdV-Gleichung, die nichtlineare Schrödingergleichung (NLS) und die Sine-Gordon-Gleichung (sG) als die klassischen integrablen Solitongleichungen bezeichnet [9–12]. Man klassifiziert Solitonen auch als „topologisch“ oder „nicht-topologisch“. Dabei bezeichnet man die Solitonen als topologisch, die ihre Stabilität einer nicht-trivialen Randbedingung oder Topologie verdanken, wohingegen die Stabilität nicht-topologischer Solitonen dynamisch ist und nicht mit den Randbedingungen zusammenhängt. Das Standardbeispiel für ein topologisches Soliton ist das stufenartige Sine-Gordon-Soliton, dessen Werte weit links bzw. rechts vom Solitonzentrum auf 0 bzw. 2π festgelegt sind. Die nicht-topologischen Solitonen unterteilen sich in Puls- und Envelope-Solitonen, wobei beide Spezies Lösungen des FPU-Systems sind [9, 11]. Für genügend kleine Geschwindigkeiten ergeben sich sehr breite und kleine niederenergetische Pulse bzw. Einhüllende. Beim Erreichen der Schallgeschwindigkeit verschwinden diese Anregungen, weil deren Energie und Amplitude gegen Null gehen.

Trotz ihrer langen Geschichte ist die eindimensionale FPU-Kette auch jetzt noch eines der meist untersuchtesten Modelle in der Nichtlinearen Physik. Gerade weil sie nicht integrabel ist, war sie immer wieder Gegenstand von Untersuchungen unterschiedlichster Phänomene. Besonders bemerkenswert ist, dass dieses „einfache“ System von eindimensional gekoppelten Massen immer noch oft als Paradebeispiel für aktuelle Forschungsinhalte dient, wie etwa der Existenz von diskreten Brethern (dB) [13, 14], der Supratransmission [15], der Wärmeleitung [16, 17], der Thermalisierung [18] und des chaotischen Verhaltens [19]. Die seit einigen Jahren intensiv untersuchte Wärmeleitung in FPU-Systemen trägt zur Klärung des immer noch nicht vollständig verstandenen Problems der Wärmeleitung in niedrigen Dimensionen bei und es können Anomalien der Wärmeleitfähigkeit studiert werden, die auch bei nanostrukturierter quasi-eindimensionaler Materie wie etwa den vor 15 Jahren entdeckten Kohlenstoff-Nanoröhrchen zu finden sind [20].

Die Theorie der solitären Wellen und Solitonen rückte nach der Lösung der Korteweg-de Vries Gleichung durch Zabusky und Kruskal und der nichtlinearen Schrödingergleichung durch Zakharov und Shabat [21] in den 70er Jahren in den Fokus vieler Wissenschaftler, die sich mit nichtlinearen Phänomenen befassten. Obwohl zu dieser Zeit durch die Arbeiten von Frenkel und Kontorova oder Toda bereits sehr interessante Gittergleichungen bekannt waren, wurde bei der Erklärung nichtlinearer Phänomene in diskreten Systemen vornehmlich mit Vereinfachungen wie

der Kontinuumsnäherung und den daraus resultierenden Solitonengleichungen gearbeitet [22–26]. Frenkel und Kontorova beschrieben die plastische Verformung von Kristallen im Jahre 1939 mit einer (nichtintegrablen) diskreten Version der integrablen Sine-Gordon-Gleichung und Toda gelang es 1967 erstmals eine vollständig integrable atomare Kette zu finden [9, 22]. Beigetragen hat zu dieser Situation sicherlich auch, dass das bei der diskreten und ebenfalls nichtintegrablen FPU-Kette entdeckte Wiederkehr-Phänomen (recurrence) von Zabusky und Kruskal erfolgreich durch die (integrablen) KdV-Gleichung beschrieben werden konnte, was als die Geburtsstunde der Solitentheorie gilt. Im übrigen standen die vielen anderen Beispiele von integrablen Gittern, die in den folgenden Jahren gefunden wurden, nicht im direkten Zusammenhang mit physikalischen Anwendungen. Das Paradebeispiel ist wohl das in den verschiedensten Disziplinen der Physik Anwendung findende nichtintegrablen Gitter der diskreten nichtlinearen Schrödingergleichung (DNLS), im Gegensatz zur integrablen Ablowitz-Ladik-Gleichung [9].

Ende der 80er Jahre setzte ein verstärktes Interesse an nichtintegrablen Gittergleichungen ein, weil man zur Erkenntnis gelangte, dass diese Gitter eine neue Klasse von Lösungen besitzen, für die die Diskretheit und Nichtlinearität des Gitters ausschlaggebend ist [13, 27, 28]. Diese diskreten Breather (oder intrinsisch lokalisierte Moden) sind allgemein gesprochen räumlich lokalisierte zeitperiodische stabile Anregungen in diskreten nichtlinearen (auch höherdimensionalen) Systemen. In der Festkörperphysik waren bereits früher Lokalisierungsmechanismen bekannt, die durch die extrinsische Unordnung im translationsinvarianten Kristallgitter verursacht wurden, wie die Phonon-Lokalisierung um Defekte oder die Anderson-Lokalisierung in ungeordneten Medien.

Der Grund für die Stabilität der diskreten Breather ist das Zusammenspiel von Nichtlinearität und Diskretheit. Die Bezeichnung „diskreter Breather“ stammt aus der rechnergestützten Untersuchung von zeitperiodischen lokalisierten Lösungen einiger PDEs (breather z.B. als Lösung der sG-Gleichung bekannt), die in den Simulationen zwangsläufig in diskretisierter Form vorlagen. Man kam hierbei zum Ergebnis, dass bei zunehmender Diskretisierung stabile Lösungen existieren können, die im Kontinuumsgrenzfall verloren gehen (z.B. im ϕ^4 -Modell). Die alternative Bezeichnung als intrinsisch lokalisierte Moden (intrinsic localized modes) stammt aus der Festkörperphysik, wo Teilchen und Quasiteilchen in diskreten Systemen durch eine intrinsische Nichtlinearität Lokalisierungstendenzen zeigen. Dieser Mechanismus entspricht dem des von Landau postulierten Polarons, bei dem die intrinsische Nichtlinearität durch die starke Kopplung eines Elektrons an die Gitterschwingungen entsteht. Diese Selbstlokalisierungs-Phänomene (self-trapping) können in analoger Weise auf Exzitonen in Molekülen angewendet werden und führen auf Gleichungen vom Typen der DNLS, was 1959 erstmals von Holstein gezeigt wurde [9, 24, 29].

Das derzeitige große Interesse und die rasant zunehmenden Publikationen in diesem Feld hängen vor allem damit zusammen, dass in den letzten Jahren diskrete Breather in einer Vielzahl von unterschiedlichen Systemen (kleine Moleküle, Ionenkristalle, magnetische Materialien, ringförmige Josephson-Leiter, Optische Wellenleiter, Bose-Einstein-Kondensate) experimentell nachgewiesen werden konnten. Zum anderen liegt das große Interesse vielleicht noch mehr darin begründet, dass man sie noch in einer Vielzahl anderer wichtiger Systeme (wie Biopolymeren und photonischen Kristallen) vermutet [30].

Ein letzter Punkt zur Geschichte solitärer Wellen soll wieder zu Russells hydrodynamischen Wellen zurückführen. Am 26. Dezember 2004 hat ein Seebeben vor der Küste Sumatras einen Tsunami ausgelöst, der beim Durchlaufen des Ozeans die Form einer NLS-artigen solitären Welle annahm. Dieser Tsunami transportierte große Energien ohne Dispersion über mehrere hundert Kilometer an die fernen Küsten Indiens, Sri Lankas und Thailands, und forderte dort viele tausend Menschenleben. Auf offener See sind die gewaltigen Wassermassen schwer zu erfassen. Doch wenn sie auf ein Kontinentalschelf treffen, wird der Tsunami langsamer, gewinnt an Höhe und spaltet sich in einige solitäre Wellen auf. Diese Tendenz für das Flachwasserverhalten lässt sich gut durch KdV-artige Gleichungen beschreiben [1, 31] und zeigt sich in kleinerem Maßstab auch bei

Experimenten in einfachen Wassertanks.

1.2 Überblick

Diese Arbeit behandelt den Einfluss langreichweitiger Wechselwirkungen in nichtlinearen Systemen bei endlichen Temperaturen. Insbesondere stehen die Wechselwirkungen zwischen langreichweitigen Kräften und thermischen Fluktuationen, sowie deren Einfluss auf die nichtlinearen Anregungen der Systeme im Mittelpunkt.

Dabei werden zu Beginn jedes Kapitels die folgenden Untersuchungen durch ihre Anwendungen in der aktuellen Forschung motiviert. Den zentralen Punkt nimmt dabei die Biophysik ein und im Speziellen die Modellierung molekularer Vorgänge durch vereinfachte nichtlineare Modelle. Nichtlineare Anregungen wurden wegen ihrer Robustheit gegen Störungen schon sehr früh zur Erklärung der Funktion von Biomolekülen herangezogen und vor allem auf die zwei Hauptklassen, Proteine und Nukleinsäuren, angewendet [24–26].

Kapitel 2 und 3 der vorliegenden Arbeit sind vor allem durch die Anwendung nichtlinearer Modelle auf die Proteindynamik motiviert. Bei den Proteinen gibt es verlässliche experimentelle Hinweise, dass temperaturabhängige strukturelle Änderungen die Funktion der Proteine beeinflussen (z.B. bei Hämoglobin [32]) und dass Proteine in der Lage sind, die durch die Hydrolyse von ATP gewonnene Energie zu speichern und zu transportieren. Der Transport und die Speicherung von biomechanischer Energie ist nötig für die wichtigen biologischen Funktionen der Proteine, wie etwa als molekulare Motoren bei der Muskelkontraktion [33].

Kapitel 2 und 3 dieser Arbeit handeln von Erweiterungen in Systemen, die in der Vergangenheit häufig auf die Proteindynamik angewendet wurden: Gittersolitonen in der α -Helix von Proteinen [34] und die für den Mechanismus des Energietransports und -speicherung in Proteinen diskutierten Davydov-Solitonen [9, 29].

In Kapitel 4 wird ein zweidimensionales nichtlineares Gittersystem in einer Nichtgleichgewichtssituation untersucht und auf eine aktuell in der Nanotechnologie diskutierte Frage, die anomale Wärmeleitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen (carbon nanotubes), angewendet.

1.2.1 Kapitel 2

Im zweiten Kapitel geht es um eine Modifikation der bekannten Fermi-Pasta-Ulam-Kette. Aufgrund ihrer Anwendbarkeit auf viele physikalische Problemstellungen und ihrer Rolle als vielleicht typischstes Beispiel eines Soliton-tragenden Systems, dient die FPU-Kette seit mehr als 50 Jahren als Ausgangsmodell für die weitergehende theoretische Modellierung echter Systeme. Eine sehr nahe liegende Erweiterung des FPU-Modells stellt die Berücksichtigung thermischen Rauschens dar, was sofort klar wird, wenn man sich an die ursprüngliche Verwendung des FPU-Modells zur Modellierung der Thermalisierung in Festkörpern [5] oder auch des Energietransfers in Biomolekülen [35, 36] erinnert.

Studien zum Verhalten der Pulssolitonen in FPU-Ketten haben gezeigt, dass die Solitonen sehr robust in Gegenwart thermischer Fluktuationen sind [37, 38]. Sie können sehr lange Strecken zurücklegen, bevor sie vom Rauschen und der Dämpfung, deren Energieströme sich im thermischen Gleichgewicht ausgleichen, zerstört werden. Den Haupteffekt der thermischen Fluktuationen stellt eine anomale Varianz der Solitonenposition dar. Dabei kann man beobachten, dass sich durch das direkte Wirken des thermischen Rauschens auf das Solitonenzentrum, wie bei der Diffusion eines Brownschen Teilchens, eine lineare Positionsvarianz $Var[X(t)] = \langle X^2(t) \rangle - \langle X(t) \rangle^2$ ($X(t)$ bezeichnet die Position des Solitons) ergibt, dass aber unter bestimmten Umständen höhere Potenzen im Zeitverhalten auftreten können (Superdiffusion). Es konnte gezeigt werden, dass dieser Effekt durch die Fluktuationen der Solitonenbreite oder der Solitonenform verursacht wird und über den für Solitonen typischen Zusammenhang zwischen deren Geschwindigkeit und Breite auf

die Positionsvarianz wirkt [39]. Besonders für hochenergetische schmale Solitonen sind die relativen Schwankungen der Solitonenform groß und das verrauschte Soliton zeigt starke superdiffusive Beiträge in seiner Ortsvarianz.

Die Solitonen sind nicht nur robust gegen thermische Fluktuationen, sondern auch gegen langreichweitige Wechselwirkungen in der FPU-Kette, was am Beispiel von harmonischen Wechselwirkungen mit abstandsabhängigen Kopplungskoeffizienten gezeigt wurde. Dabei wird hier besonders auf den Fall von exponentiell (Kac-Baker [40, 41]) oder potenzartig abfallenden Kopplungskoeffizienten eingegangen, da diese physikalisch relevante Situationen darstellen. Untersuchungen zu FPU-Ketten mit Kac-Baker langreichweitigen Wechselwirkungen zeigten, dass sich auch in diesen Systemen Solitonen finden lassen, die bei gleicher Geschwindigkeit breiter und hochenergetischer sind als die Solitonen der FPU-Kette [42]. Eine bemerkenswerte Eigenschaft dieser Solitonen ist die Existenz einer oberen kritischen Geschwindigkeit, bei der die pulsartigen Solitonen einen Kamm entwickeln, was man aus der Camassa-Holm-Gleichung kennt, die in der Hydrodynamik große Bedeutung hat. Bei näherer Betrachtungsweise stellt man fest, dass oberhalb eines verbotenen Geschwindigkeitsintervalls (oder einer Energielücke) schnellere diskretere Lösungen existieren, die durch eine Zwei-Komponenten-Lösung beschrieben werden können [43]. Bei ultra-langreichweitigen Wechselwirkungen kann sogar Bistabilität der beiden Lösungen beim gleichen Wert der Solitonen-geschwindigkeit vorliegen [43, 44]. Bei potenzartig abfallenden Wechselwirkungen ist es ratsam, sich (aus technischen Gründen) auf den Fall zu beschränken, bei dem die Kopplung mit der vierten Potenz des Abstands abfällt. Für diesen Fall ergeben sich Lorentz-förmige Solitonen, die für kleine Geschwindigkeiten durch die integrable Benjamin-Ono-Gleichung beschrieben werden können [45]. Durch Vergleich von analytischen Rechnungen und Simulationen wird das Zusammenwirken der langreichweitigen Kräfte mit den thermischen Fluktuationen beleuchtet. Es stellt sich insbesondere die Frage, inwiefern die von den langreichweitigen Wechselwirkungen bestimmte Solitonenform die anomale Diffusion der Gittersolitonen beeinflusst.

1.2.2 Kapitel 3

Das dritte Kapitel soll sich mit dem Einfluss langreichweitiger Wechselwirkungen auf diskrete persistente Breather in der diskreten nichtlinearen Schrödingergleichung (DNLS) beschäftigen. Wie bereits erwähnt, beschreibt dieses Modell die Selbst-Lokalisierung (self-trapping) in verschiedenen Systemen, wie optischen Wellenleitern, Bose-Einstein-Kondensaten in optischen Gittern, Polaronen im Festkörper oder Exzitonen in molekularen Systemen [46]. Das Modell, das hier verwendet werden soll, ist besonders durch die Problemstellung des Energietransports in molekularen Scheibe-Aggregaten motiviert. Dabei wird die diskrete nichtlineare Schrödingergleichung um einen Dämpfungsterm erweitert, der sich direkt aus den quantenmechanischen Davydov-Gleichungen ableiten lässt [47, 48]. Um prinzipiell den Einfluss langreichweitiger Wechselwirkungen zu studieren, wird (wie im Fall des FPU-Gitters) eine langreichweitige harmonische Kopplung angenommen, die exponentiell mit dem Abstand abklingt (Kac-Baker-Form). Mit dieser Form der Gleichung erhält man ein mit der diskreten self-trapping-Gleichung (DST) [49] verwandtes Modell, das ebenfalls eine Approximation des Davydov-Modells darstellt (ohne die Beschränkung auf Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen). Die DST stellt ein realistisches Modell zur Beschreibung von Energietransport in Proteinen dar, wobei man im Gegensatz zu der in Kapitel 2 betrachteten Möglichkeit von Gittersolitonen in der α -Helix, von einem Polaron-artigen Mechanismus für den Transport der CO-Schwingungsenergie ausgeht. Im Gegensatz zum Konzept des Gittersolitons in der α -Helix, für das es bisher nur Hinweise aus Computersimulationen gibt [34, 50, 51], konnte der Polaron-artige Zustand bereits in Experimenten nachgewiesen werden [52, 53].

Der Einfluss der langreichweitigen Wechselwirkungen wird im Fall der gedämpften DNLS sowie der ungedämpften DNLS untersucht. Dabei steht nicht die Dynamik eines einzelnen Breathers im Mittelpunkt (der schon an anderer Stelle untersucht wurde [54, 55]), sondern die Zeitentwicklung

des Systems und die Ausbildung von diskreten Brethern aus ausgedehnten Anfangszuständen. Im Fall der Dämpfung lässt sich durch Simulationen und Berechnungen (in der Quasikontinuumsnäherung [56]) ein relativ einfacher Zusammenhang zwischen der sich ausbildenden Brether-Landschaft und dem Wechselwirkungsradius finden. Im ungedämpften Fall legt die Vielzahl von Brether-Phonon-Wechselwirkungen eine statistische Betrachtungsweise des Systems nahe, bei dem man für hochenergetische Anfangsbedingungen (die im großkanonischen Ensemble der Situation negativer Temperaturen entspricht) eine entropisch begünstigte Ausbildung von persistenten Brethern beobachten kann. Es wird gezeigt, dass die langreichweitigen Wechselwirkungen zu interessanten Veränderungen in der Brether-Statistik und zu einer stärkeren Lokalisierung im System führen [57–60].

1.2.3 Kapitel 4

Die Wärmeleitung in FPU-Systemen stellt keine Gleichgewichtssituation dar, denn die Enden des FPU-Systems werden mit Wärmebädern unterschiedlicher Temperatur verbunden. Es stellte sich heraus, dass für diesen Nichtgleichgewichtszustand der FPU-Kette das Fouriersche Gesetz nicht gilt, da die Wärmeleitfähigkeit über ein Potenzgesetz mit der Systemlänge divergiert [17]. Es hat sich gezeigt, dass dieses Verhalten auf die Eindimensionalität der FPU-Kette und die spezielle Form des Wechselwirkungspotenzials zurückzuführen ist [61]. Gegenstand aktueller Forschung ist die Klärung der Frage, inwiefern die Wärmeleitfähigkeit eindimensionaler Systeme wie der FPU-Kette universell ist, wie von einer renormierungsgruppentheoretischen Rechnung vorhergesagt wird [62, 63], oder ob mehrere Universalitätsklassen existieren. Es ergeben sich beispielsweise aus aufwendigen Simulationen und analytischen Rechnungen (Modenkopplungstheorie) Hinweise, dass FPU-Ketten mit rein kubischer (α -FPU) oder rein quartischer (β -FPU) Anharmonizität auf unterschiedliche Potenzgesetze für die Abhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit von der Systemgröße führen [64]. In diesem Zusammenhang ist auch besonders interessant zu erwähnen, dass vor kurzem ein grundlegender Zusammenhang zwischen der Wärmeleitfähigkeit und der Superdiffusivität in verschiedenen Systemen gezeigt wurde [65]. Im Gegensatz zu oben sind aber nun vor allem die „Phononen“ der nichtlinearen Systeme die Energieträger des superdiffusiven Prozesses. Zweidimensionale FPU-Systeme waren bisher seltener Gegenstand solcher Untersuchungen [17, 66]. Es besteht in der aktuellen Literatur noch keine endgültige Übereinstimmung, ob die Divergenz der Wärmeleitung logarithmisch (was die Modenkopplungstheorie ergibt) oder ebenfalls potenzförmig ist, was neuere Simulationen ergaben. Neben der Klärung des Mechanismus der anomalen Wärmeleitung steht in dieser Arbeit die Frage im Mittelpunkt, ob solche Systeme in der Lage sind, reelle Materialien zu modellieren. In dieser Arbeit wird ein zweidimensionales FPU-Feld benutzt, um die thermische Leitfähigkeit von Kohlenstoff-Nanoröhrchen (carbon nanotubes) zu beschreiben, die in Molekulardynamik-Simulationen anomale Wärmeleitfähigkeiten gezeigt haben [67–69]. Der Einfluss der Dimensionalität des Systems oder der konkreten Form des FPU-Potenzials auf die thermische Leitfähigkeit sind wichtige Fragen, da die Kohlenstoff-Nanoröhrchen durch ihre besonderen elektronischen und thermischen Eigenschaften als vielversprechendes Material im Bereich der Nanoelektronik in neuen Prozessorgenerationen, im Bereich neuer Energiespeicher und neuartiger LEDs gelten.

Literaturverzeichnis: Einleitung

- [1] A.C. Scott, The development of nonlinear science, *Rivista del Nuovo Cimento* **27**, 1-115 (2004)
- [2] J Scott Russell, Report on Waves. 14th meeting of the British Association for the Advancement of Science (BAAS) (1844)
- [3] A.C. Scott, *Rev. Mod. Phys.* **11**, 487-553 (1975)
- [4] G.P. Berman and F.M. Izrailev, *Chaos* **15**, 015104 (2005)
- [5] E. Fermi, J.R. Pasta, and S.M. Ulam: Studies of nonlinear problems, Los Alamos Sci. Lab. Rep., LA-1940 (1955)
- [6] J. Ford, *Physics Reports (Review Section of Physics Letters)* **213**, 271-310 (1992)
- [7] N.J. Zabusky and M.D. Kruskal, *Phys. Rev. Lett.* **15**, 240 (1965)
- [8] C.S. Gardner, J.M. Greene, M.D. Kruskal, and R.M. Miura, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1095 (1967)
- [9] A.C. Scott, *Nonlinear Science*, University Press Oxford (1999)
- [10] P.G. Drazin and R.S. Johnson, *Solitons: an introduction*, Cambridge University Press (1989)
- [11] M. Remoissenet, *Waves Called Solitons*, Springer-Verlag (1996)
- [12] R.K. Dodd, J.C. Eilbeck, J.D. Gibon, and H.C. Morris, *Solitons and Nonlinear Wave Equations*, Academic Press Inc., London (1982)
- [13] S.Flach and C.R. Willis, *Phys. Rep.* **295**, 181 (1998)
- [14] S. Flach and A. Gorbach, *Chaos* **15**, 015112 (2005)
- [15] R. Khomeriki, S. Lepri, and S. Ruffo, *Phys.Rev. E* **70**, 066626 (2004)
- [16] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, *Phys. Rev. E* **68**, 067102 (2003)
- [17] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, *Phys. Rep.* **377**, 1
- [18] A. Carati, L. Galgani, and A. Giorgilli, *Chaos* **15**, 015105 (2005)
- [19] M. Pettini, L. Casetti, M. Cerruti-Sola, R. Franzosi, and E.G.D. Cohen, *Chaos* **15**, 015106 (2005)
- [20] R. Livi and S. Lepri, *Nature* **421**, 327 (2003)

-
- [21] V.E. Zakharov and A.B. Shabat, Sov. Phys. JETP **34**, 62 (1972)
- [22] M. Toda, *Theory of Nonlinear Lattices*, Springer-Verlag (1981)
- [23] V. Muto, P.S. Lomdahl, and P.L. Christiansen, Phys. Rev. A **42**, 7452 (1990)
- [24] A.S. Davydov, *Solitons in Molecular Systems*, Reidel (1985)
- [25] S.W. Englander, N.R. Kallenbach, A.J. Seeger, J.A. Krumhansl, und S. Litwin, Nature of the open state in long polynucleotide double helices: Possibility of soliton excitations, Proceedings of the National Academy of Sciences USA, **77**: 7222-7227 (1980)
- [26] P.S. Lomdahl, S.P. Layne, and I.J. Bigio, Los Alamos Science, Spring 1984, pp. 4-21
- [27] S. Takeno, Phys. Rev. Lett. **61**, 970 (1988)
- [28] R.S. MacKay and S. Aubry, Nonlinearity **7**, 1623 (1994)
- [29] A.C. Scott, Physics Reports **217** 1-67 (1992)
- [30] D.K. Campbell, S. Flach, and Y.S. Kivshar, Phys. Today **57**, 43 (2004)
- [31] W. Craig, Surface water waves and tsunamis, <http://www.math.mcmaster.ca/craig/>
- [32] F.G. Parak, Rep. Prog. Phys. **66**, 103 (2003)
- [33] K. Kitamura, M. Tokunaga, A.H. Iwane, and T. Yanagida, Nature **397**, 129 (1999)
- [34] P.L. Christiansen, A.V. Zolotaryuk, and A.V. Savin, Phys. Rev. E **56**, 877 (1997)
- [35] S. Yomosa, Phys. Rev. A **32**, 1752 (1985)
- [36] D. Hochstrasser, F.G. Mertens, and H. Büttner, Phys. Rev. A **40**, 2602 (1989)
- [37] P. Perez and N. Theodorakopoulos, Phys. Lett. A **117**, 405 (1986)
- [38] P. Perez and N. Theodorakopoulos, Phys. Lett. A **124**, 267 (1987)
- [39] E. Arévalo, F.G. Mertens, Y. Gaididei, and A.R. Bishop, Phys. Rev. E **67**, 016610 (2003)
- [40] G.A. Baker Jr, Phys. Rev. **122**, 1477 (1961)
- [41] A.M. Kac and B.C. Helfand, J. Math. Phys. **4**, 1078 (1972)
- [42] Y.B. Gaididei, N. Flytzanis, A. Neuper, and F.G. Mertens, Physica D **107**, 83
- [43] S.F. Mingaleev, Y.B. Gaididei, and F.G. Mertens, Phys. Rev. E **58**, 3833 (1998)
- [44] P.L. Christiansen, Y.B. Gaididei, F.G. Mertens, and S.F. Mingaleev, Eur. Phys. J. B **19**, 545
- [45] S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, Yu.B. Gaididei, M. Johansson, and K.Ö. Rasmussen, J. Biol. Phys. **25**, 41 (1999)
- [46] J.C. Eilbeck and M. Johansson, Proceedings of the Third Conference „Localization and Energy Transfer in Nonlinear Systems“, June 17-21, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, eds L. Vázquez, R. S. MacKay, M. P. Zorzano, World Scientific, Singapore, 44-67 (2003)
- [47] P.L. Christiansen, Yu.B. Gaididei, M. Johansson, K.Ø. Rasmussen, and I.I. Yakimenko, Phys. Rev. E **54**, 924 (1996)
-

-
- [48] O. Bang, P.L. Christiansen, F. If, K.Ø. Rasmussen, and Y.B. Gaididei, Phys. Rev. E **49**, 4627 (1994)
- [49] J.C. Eilbeck, P.S. Lomdahl, and A.C. Scott, Physica D **16** 318 (1985)
- [50] F. d'Ovidio, H.G. Bohr, and P. Lindgård, J. Phys.: Condens. Matter **15**, s1699 (2003)
- [51] F. d'Ovidio, H.G. Bohr, and P. Lindgård, Phys. Rev. E **71**, 026606 (2005)
- [52] J. Edler, P. Hamm, and A.C. Scott, Phys. Rev. Lett. **88**, 067403 (2002)
- [53] J. Edler, R. Pfister, V. Pouthier, C. Falvo, and P. Hamm, Phys. Lett. **93**, 106405 (2004)
- [54] M. Johansson and S. Aubry, Phys. Rev. E **61**, 5864 (2000)
- [55] P.L. Christiansen, Yu. B. Gaididei, M. Johansson, and K.Ø. Rasmussen, Phys. Rev. B **55**, 5759 (1997)
- [56] Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, and K.Ø. Rasmussen, Phys. Lett. A **222**, 152 (1996)
- [57] K.Ø. Rasmussen, T. Cretegnny, P.G. Kevrekidis, and N. Grønbech-Jensen, Phys. Rev. Lett. **84**, 3740 (2000)
- [58] M. Johansson and K.Ø. Rasmussen, Phys. Rev. E **70**, 066610 (2004)
- [59] B. Rumpf, Phys. Rev. E **69**, 016618 (2004)
- [60] B. Rumpf, Phys. Rev. E **70**, 016609 (2004)
- [61] T. Prozen and D.K. Campbell, Chaos **15**, 015117 (2005)
- [62] O. Narayan and S. Ramaswamy, Phys. Rev. Lett. **89**, 200601 (2002)
- [63] T. Mai and O. Narayan, Phys. Rev. E **73**, 061202 (2006)
- [64] L. Delfini, S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. E **73**, 060201(R) (2006)
- [65] B. Li, J. Wang, L. Wang, and G. Zhang, Chaos **15**, 015121 (2005)
- [66] P. Grassberger and L. Yang, arXiv:cond-mat/0204247 (2002)
- [67] S. Maruyama, Microscale Thermophys. Eng. **7**, 41 (2003)
- [68] Z. Yao, J.S. Wang, B. Li, and G.R. Liu, Phys. Rev. E **71**, 085417 (2005)
- [69] G. Zhang and B. Li, Chem. Phys. **123**, 114714 (2005)
-

Kapitel 2

Diffusion von Solitonen auf FPU-artigen Ketten mit langreichweitiger Kopplung

2.1 Motivation

Das vor mehr als 50 Jahren von Fermi, Pasta und Ulam durchgeführte numerische Experiment zum Studium der Thermalisierung einer eindimensionalen anharmonischen Kette als einfachstes Modell eines Festkörpers war sicherlich eines der Schlüsselmomente in der nichtlinearen Physik und gleichzeitig ein Meilenstein in der Geschichte der rechnergestützten Physik [1]. Seit dieser Zeit dient das FPU-Modell trotz seiner Einfachheit bis heute in vielen Gebieten der Physik als oft verwendetes Modell und zeigt immer wieder neue aufregende Phänomene. Die langsame Relaxation ins Gleichgewicht, die Wärmeleitung und die solitären Anregungen der FPU-Kette sind immer noch Gegenstand aktueller Forschung. Aber auch für relativ neue Gebiete wie diskrete Breather, die zum Beispiel in der Biophysik diskutiert werden, oder die Modellierung von Bose-Einstein-Kondensaten stellt das FPU-System eine gute Grundlage dar (siehe CHAOS **15**: focus issue: THE FERMI-PASTA-ULAM PROBLEM - THE FIRST 50 YEARS) [2].

Dieses Kapitel ist insbesondere durch die Anwendungen FPU-artiger Systeme in der Biophysik motiviert. Dabei versuchen Physiker die grundlegende Funktionsweise von sehr komplizierten Prozessen in lebenden Zellen, wie zum Beispiel die Transkription der DNA, die Funktionsweise von Proteinen als molekulare Motoren und das Speichern und den Transport der aus der Hydrolyse von ATP gewonnenen biomechanischen Energie durch physikalische Modelle zu beschreiben [3–8]. In der Vergangenheit entstanden aber oft allzusehr vereinfachte Modelle, die frei propagierende Solitonen in DNA-Strängen oder in der α -Helix von Proteinen vorhersagten. Solche Modelle sind nach heutigem Stand zu ungenau, um die Funktionsweise von Biomolekülen erklären zu können. Beachtet man bei der Modellbildung den diskreten Aufbau der dreidimensionalen molekularen Struktur, deren thermische Fluktuationen und realistische Wechselwirkungen, sollte es möglich sein, qualitative Übereinstimmung mit den Experimenten zu erzielen. Das bekannteste Modell zur Beschreibung des Energietransports in Proteinen wurde von Davydov vor mehr als 30 Jahren vorgeschlagen und beschreibt die Selbst-Lokalisierung der Schwingungsenergie der C=O-Bindung der Peptidgruppe durch eine aus der Festkörperphysik bekannte Polaron-artige Dynamik, bei dem die Schwingungsquanten mit den Gitterschwingungen koppeln, was zu einer intrinsischen Nichtlinearität im System führt [6, 9, 10]. Durch spektroskopische Experimente am kristallinen Modellprotein ACN konnte dieser Mechanismus direkt nachgewiesen werden (für die N-H Schwingung). Davydov-Solitonen könnten daher eine wichtige Rolle in der Funktionsweise von Biomolekülen spielen, selbst wenn die beobachtete Lebensdauer der Anregung in isolierten Molekülen kleiner ist als ursprünglich von

Davydov angenommen [11, 12]. In einem anderen Zugang zu dem Problem beschreibt Yomosa [13] die Wasserstoff-Bindungen, die die Sekundärstruktur der Proteine stabilisieren, als eine FPU-artige Kette, wobei die Massen, an die sie koppeln, die relativ starren Peptidgruppen darstellen. In der Kontinuumsnäherung führt dieses Modell auf KdV- oder Toda-Solitonen, durch die der Energietransfer entlang der Helix beschrieben wird. Verbesserte Modelle konnten aber schon relativ bald aufzeigen, dass sich bei Erweiterungen wie der Berücksichtigung transversaler Bewegungen der Peptidgruppen qualitative Unterschiede zu der eindimensionalen Kette ergaben [14].

Aufgrund dieser starken Vereinfachungen wurde die Idee der Gittersolitonen in Proteinhelices weiter verfeinert. Unter Berücksichtigung der dreidimensionalen Struktur der Helix konnte in [15] numerisch gezeigt werden, dass das System nicht-topologische Soliton-Lösungen besitzt. Dieses Konzept wurde vor kurzem herangezogen, um Ergebnisse von Pump-Probe-Messungen von Bacteriorhodopsin-Proteinmolekülen zu erklären, bei denen sehr langlebige Schwingungsmoden (*ca.* 500 ps) beobachtet wurden [16, 17]. In [17] wurde vermutet, dass es sich dabei um kollektive Bewegungen (Biege-, Deformations- und Torsionsschwingungen) des Moleküls handelt, die das Protein eventuell in verschiedene räumliche Strukturen überführen können. Die Langlebigkeit wurde durch die schwache Wechselwirkung mit dem Lösungsmittel begründet, wozu es aber in der Literatur gegensätzliche Auffassungen gibt.

In einem theoretischen Ansatz wird vorgeschlagen, dass die Langlebigkeit der beobachteten Schwingungen von dem langsamen Zerfall eines Gittersolitons der Helix in die vielen möglichen Schwingungsmoden (Bereich $\sim 100 \text{ cm}^{-1}$) herrührt [18, 19]. Bei der Modellierung der dreidimensionalen Helix wurden drei molekulare Ketten mit Wasserstoffbrückenbindungen (Sekundärstruktur) benutzt, die durch Peptidbindungen (Primärstruktur), beide beschrieben durch Lennard-Jones- oder Toda-Potenziale, miteinander verbunden sind. Es wurde gezeigt, dass sich bei einer Störung in einer dieser Ketten ein Tripel-Soliton (in den drei Ketten) ausbildet, das sich, stabilisiert durch die Peptidbindungen, entlang der Helix bewegen kann und eine langlebige Energiequelle für die beobachteten Schwingungsenergien von etwa 118 cm^{-1} darstellen würde [20]. In einer anderen Studie wird davon ausgegangen, dass die α -Helices in diesem Protein zu kurz sind, als dass Solitonen darin existieren könnten [21] und es wird stattdessen ein diskreter Breather in der Peptidkette vorgeschlagen, dessen Schwingungsfrequenz im beobachteten Bereich liegt.

Da sehr realistische Modelle oder ab-initio Studien von biologischen Modellen meist nur mit zeitaufwendigen Computersimulationen bewerkstelligt werden können, ist es besonders wichtig, einfachere Modelle zu untersuchen, an denen sich qualitativ richtige Aussagen über die komplexe Dynamik ableiten lassen. Diese sind in Computersimulationen und analytischen Rechnungen einfacher handhabbar. Im Zuge der realitätsnahen Beschreibung von Biomolekülen ist es insbesondere nötig, thermische Fluktuationen und Dämpfungseffekte zu berücksichtigen. Wichtig können aber auch langreichweitige Wechselwirkungen sein, wenn beispielsweise geladene Molekülgruppen oder Gruppen mit Dipolmomenten vorhanden sind. Der Einfluss thermischer Fluktuationen auf die solitären Anregungen von FPU-Ketten (mit kubischer und quartischer Anharmonizität) wurde kürzlich untersucht [22–24]. Es wurde gezeigt, dass beide Arten nicht-topologischer solitärer Anregungen der FPU-Kette, Envelope- und Pulssolitonen, eine stärker als lineare Ortsvarianz als Funktion der Zeit zeigen (Superdiffusion), wenn auch aus unterschiedlichen Gründen [23]. Bei Envelope-Solitonen verursacht die zeitlich durch die Dämpfung exponentiell wachsende Solitonenbreite eine Ortsvarianz, die mit der Zeit kubisch und höher ansteigt. Pulssolitonen sind viel stabiler in Gegenwart von Dissipation. Hier führen vor allem die Fluktuationen der Solitonenbreite neben der linearen Zeitabhängigkeit der Ortsvarianz zu quadratischen und kubischen Korrekturtermen, besonders im Fall schmaler schneller Gittersolitonen. Insgesamt weisen Studien verschiedener Systeme darauf hin, dass Superdiffusivität typisch für nicht-topologische Solitonen sein dürfte. Sie wurde beispielsweise auch für Pulssolitonen in klassischen Heisenbergketten beobachtet [25], wohingegen gezeigt werden konnte, dass sie bei topologischen Solitonen wie etwa des Sine-Gordon-Systems nicht auftritt [26].

2.2 Modell

Das Modell ist eine eindimensionale Kette mit N Massen m ($m = 1$) und dem interatomaren Abstand a ($a = 1$). Die Auslenkung der n -ten Masse aus der Ruhelage soll als u_n bezeichnet werden. Das Wechselwirkungspotenzial besteht aus einem Nächste-Nachbar-Anteil, ähnlich dem von Fermi, Pasta und Ulam gewählten Potenzial, und einem langreichweitigen Anteil, wobei J_{nm} die harmonische Kopplungsstärke zwischen Partikel n und m darstellt. Die Lagrangefunktion des Systems ergibt sich daher zu:

$$L = T_{kin} - U_{NN} - U_{LR} \quad (2.1)$$

mit

$$T_{kin} = \frac{1}{2} \sum_n \left(\frac{du_n}{dt} \right)^2, \quad U_{NN} = \sum_n V(u_{n+1} - u_n)$$

$$U_{LR} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} J_{n,m} (u_n - u_m)^2. \quad (2.2)$$

Das Potenzial $V(r)$ zwischen nächsten Nachbarn stellt eine Entwicklung des Toda-Potenzials bis einschließlich dritter Ordnung dar, das auch in [18] verwendet wurde:

$$V(r) = \frac{1}{2} r^2 - \frac{1}{3} r^3. \quad (2.3)$$

Zur Modellierung der Umgebung werden die Rausch- und Dämpfungsterme ($\mathcal{F}_n^N(t)$ und $\mathcal{F}_n^D(t)$) benutzt, die auf die einzelnen Partikel wirken und global das Fluktuations-Dissipations-Theorem erfüllen (siehe Anhang A). Damit ist gewährleistet, dass das System nach einiger Zeit (die typischerweise mit dem Inversen des Dämpfungskoeffizienten skaliert) ins thermische Gleichgewicht übergeht, was man beispielsweise durch die Berechnung des Mittelwertes der Äquipartitionsenergie \mathcal{H}_{eq} nachprüfen kann

$$\langle \mathcal{H}_{eq}(t) \rangle = \left\langle \sum_n \frac{\partial H(t)}{\partial u_n(t)} u_n(t) \right\rangle \quad (2.4)$$

($H = 2T_{kin} - L$), die (von unten) gegen $Nk_B T$ geht [22]. Als Dämpfung soll die hydrodynamische Dämpfung $\mathcal{F}_n^D(t) = \mathcal{F}_n^{hy}(t)$ gewählt werden, da diese die langwelligen Komponenten des Fourierpektrums nicht beeinflusst, wohingegen am Rand der ersten Brillouin-Zone eine imaginäre Dispersionsrelation $\omega(k)$ den kurzwelligen Teil des Spektrums dämpft. Für Stokes-Dämpfung werden die langwelligen Komponenten des Spektrums gedämpft, was zu Verformungen des Solitons führt [27]. Mit hydrodynamischer Dämpfung, die von der zeitlichen Änderung der Relativkoordinaten $w_n(t) = u_{n+1}(t) - u_n(t)$ abhängt, und dem Rauschen lassen sich die Euler-Lagrange-Gleichungen mit der Dissipationsfunktion der hydrodynamische Dämpfung

$$\Psi_{hy} = \frac{1}{2} \nu_{hy} \sum_n \dot{w}_n^2, \quad (2.5)$$

durch Ausführen von

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_n} - \frac{\partial L}{\partial u_n} + \frac{\partial \Psi^{hy}}{\partial \dot{u}_n} = \mathcal{F}_n^N(t) \quad (2.6)$$

gewinnen. Benutzt man das berechnete Ergebnis (Anhang A) für den Rauschterm $\mathcal{F}_n^N(t)$, der mit der hydrodynamischen Dämpfung das Fluktuations-Dissipations-Theorem erfüllt, so lauten die

Bewegungsgleichungen in Relativkoordinaten ($D^{hy} = 2\nu_{hy}T$ mit der Festlegung $k_B = 1$):

$$\begin{aligned}\ddot{w}_n &= V'(w_{n+1}) - 2V'(w_n) + V'(w_{n-1}) - \sum_m J_m(w_n - w_{n+m}) \\ &+ \nu_{hy}(\dot{w}_{n+1} - 2\dot{w}_n + \dot{w}_{n-1}) \\ &+ \sqrt{D^{hy}}(\xi_{n+1}(t) - \xi_n(t)) .\end{aligned}\tag{2.7}$$

Die langreichweitige Wechselwirkung wurde als harmonische Kopplung der einzelnen Partikel eingeführt. Über die Federstärke J_m , die die Stärke der harmonischen Kopplung in Abhängigkeit vom Abstand der Teilchen n und $n + m$ reguliert, wurde noch keine Annahme gemacht. Im folgenden werden für die konkrete Form der langreichweitigen Kopplung J_m zwei Fälle unterschieden: Mit dem Abstand m exponentiell oder potenzartig abklingende Kopplungsstärken. Im Fall der exponentiellen Kopplung bezeichnet α^{-1} den Wechselwirkungsradius, nach dem die Kopplung auf den Wert J_0/e abgefallen ist. Im Fall der potenzartig abnehmenden Kopplung soll s die Potenz bezeichnen, mit der die Kopplung zwischen den Teilchen auf der Kette abnimmt:

$$\text{exponentiell: } J_m \sim e^{-\alpha m} , \text{ potenzartig: } J_m \sim |m|^{-s} .\tag{2.8}$$

Die Statistische Mechanik von Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen nimmt in der physikalischen Grundlagenforschung noch immer einen großen Raum ein. Es treten hierbei oftmals konkurrierende theoretische Konzepte, wie etwa die Einführung einer nicht-extensiven Entropie, auf [28]. Bei nichtlinearen Systemen führt die Einführung langreichweitiger Wechselwirkungen oft zu neuartigen Phänomenen [29]. Langreichweitige Wechselwirkungen stellen eine natürliche Erweiterung dar, um realistischere Modelle zu erhalten. In Bezug auf die vorher erwähnten Biomoleküle wirken vor allem geladene Atomgruppen oder Dipolmomente (z.B. das Dipolmoment des DNA-Basis-Paars) über große Entfernungen. Es ist zu erwarten, dass diese Wechselwirkungen Auswirkungen auf solitonische und diskrete Anregungen in der Kette haben. Es wurde gezeigt, dass nichtlineare Anregungen in Fermi-Pasta-Ulam-Ketten neue Eigenschaften zeigen, wenn die Wechselwirkung einen kritischen Wert übersteigt [30, 31]. In FPU- und nichtlinearen Schrödinger-Systemen zeigen sich neue Solitonentypen, die beim gleichen Wert des spektralen Parameters (Geschwindigkeit bzw. Norm) existieren können [32]. Das kontrollierte Hin- und Herschalten zwischen verschiedenen Solitonenzuständen wurde als möglicher Mechanismus für Speicherung und Transport von Vibrationsenergie in Biomolekülen vorgeschlagen [7]. In der Vergangenheit wurden auch nichtlineare Klein-Gordon-Systeme mit langreichweitigen Wechselwirkungen studiert und auf zahlreiche physikalische Phänomene wie die Dislokationen in Festkörpern [33, 34], die Beschreibung adsorbierter Atome an Oberflächen oder Domänenwände in Ferromagneten oder Ferroelektrika angewendet (siehe Referenzen in [35]). Das bekannte Peyrard-Bishop-Dauxois-Modell für DNA stellt formal auch ein Klein-Gordon-Gitter dar und in einigen Studien ergeben sich durch die Einführung langreichweitiger Dipolwechselwirkungen interessante Effekte bezüglich der nichtlinearen Anregungen und den Auswirkungen von Krümmungen der Kette [36].

Interessanterweise ergibt sich im Fall ultra-langreichweitiger Wechselwirkungen in FPU- und NLS-Systemen die Multistabilität verschiedener Solitonentypen [32], nämlich zwischen relativ breiten Solitonen und den wesentlich energiereicheren diskreteren Anregungen. Im Fall der Kac-Baker-Wechselwirkungen in anharmonischen Ketten bedeutet Multistabilität, dass die beiden Solitonentypen (und ein instabiles Soliton mit mittlerer Energie) mit verschiedenen Energien bei dem gleichen Wert des spektralen Parameters Geschwindigkeit v existieren können. Bei NLS-Systemen bedeutet Multistabilität dagegen, dass es (mobile) breite und (immobile) diskrete Anregungen mit verschiedenen Werten der Norm bei der gleichen nichtlinearen Frequenz geben kann.

Bei der vorliegenden Arbeit liegt das Hauptaugenmerk bei der Untersuchung des gestörten FPU-Systems vor allem auf den kontinuumsartigen Anregungen, da sich die diskreteren Hochgeschwindigkeitssolitonen als sehr anfällig für Dämpfung gezeigt haben. Aufgrund der schnellen Auslenkungen

der Koordinate $w_n(t)$ bei dieser Spezies transformieren sie sich relativ rasch zu niederenergetischen Solitonen.

2.2.1 Kac-Baker-Wechselwirkungen

Diese Art der Wechselwirkungen wurde in der Vergangenheit häufig benutzt, um die Einflüsse langreichweitiger Wechselwirkungen auf Phasenübergänge in Ising-Systemen oder in van-der-Waals Gasen zu studieren [37, 38]. Die Kopplung soll durch eine zusätzliche multiplikative Konstante erweitert werden, die sicherstellt, dass das Integral über die Kopplungskoeffizienten eine Konstante ergibt, die in Zukunft als Systemkonstante betrachtet wird. Der Einfluss größerer Wechselwirkungsradien geht daher mit abnehmenden effektiven Kopplungsstärken einher:

$$J_{n-m} = \frac{1}{2}J(e^\alpha - 1)e^{-\alpha|n-m|}, \quad \sum_{m=1}^{\infty} J_m = J. \quad (2.9)$$

In der Kontinuumsnäherung ergibt sich für dieses Modell eine nicht-lokale Boussinesq-Gleichung, die im Vergleich zur FPU-Kette neuartige solitäre Anregungen unterstützt.

2.2.2 Potenzartige Wechselwirkungen

Viele Naturkräfte zeigen ein potenzförmiges Abklingen mit dem Abstand, über den sie wirken. Beispiele sind die Gravitation, zweidimensionale oder geophysikalische Fluidodynamik, spezielle Modelle aus der Plasmaphysik, Spinmodelle oder andere „toy models“ [29].

Im Modell 2.7 wird eine Kopplung der Art

$$J_m = \frac{J}{|m|^s}, \quad \sum_{m=1}^{\infty} J_m = \zeta(s) \quad (2.10)$$

angenommen, wobei $\zeta(s)$ die Zetafunktion ist. Im folgenden wird sich auf den Fall $s = 4$ ($\zeta(4) \approx 1.08232$) beschränkt, um eine analytisch lösbare Gleichung in der Kontinuumsnäherung (im nächsten Abschnitt) der anharmonischen Kette zu erhalten. Für $s = 4$ ergibt sich ebenfalls eine Boussinesq-artige Gleichung mit einer Hilbert-Transformierten, wie diese von der integrierbaren Benjamin-Ono-Gleichung bekannt ist, die Lorentz-förmige Soliton-Lösungen liefert.

2.3 Kontinuumsnäherung

Für langreichweitige Wechselwirkungen stellt die Kontinuumsnäherung ein passendes Instrument dar. Das Solitonenprofil wird bei relativ geringen Werten der Kopplung J wesentlich breiter und kontinuierlicher als im Fall der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung.

Die ersten Versuche, die Effekte langreichweitiger Wechselwirkungen auf Solitonen in anharmonischen Ketten zu untersuchen, gehen auf Ishimori [39] zurück. Er zeigte, dass eine anharmonische Kette mit einem $(2n, n)$ -Lennard-Jones Wechselwirkungspotenzial im Fall $n = 2$ durch eine Benjamin-Ono-Gleichung und für $n \geq 4$ durch eine Boussinesq-Gleichung beschrieben werden kann. Remoissenet und Flytzanis studierten die Renormalisierung von Solitonenparametern durch langreichweitige Wechselwirkungen und die Stabilität langwelliger ebener Wellen [40]. Tchawona et al. studierten insbesondere den Einfluss von langreichweitigen Wechselwirkungen auf Solitonen in diatomaren anharmonischen Ketten, wobei sie Kink- und Envelope-Soliton-Lösungen fanden [41].

2.3.1 Kac-Baker-Wechselwirkungen

Um die Gleichung (2.7) für die Kac-Baker-Wechselwirkungen in eine partielle Differentialgleichung zu überführen, wird im folgenden die Quasikontinuumsnäherung in Referenz [30] benutzt. Man erhält eine Boussinesq-artige Gleichung (siehe Anhang B)

$$\partial_t^2 w = (c^2 - 1) \frac{\kappa^2 \partial_x^2}{\kappa^2 - \partial_x^2} w + \partial_x^2 (w - w^2) + \lambda \partial_x^2 \partial_t^2 w + \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t w + \sqrt{D^{hy}} \partial_x^2 \xi(x, t) \quad (2.11)$$

$$\lambda = \frac{1}{12}, \quad \kappa = 2 \sinh\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (2.12)$$

$$c = \left[1 + \frac{1}{2} J \frac{e^{-\alpha} + 1}{(e^{-\alpha} - 1)^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.13)$$

mit zusätzlichen Dämpfungs-, Rausch- und langreichweitigen Termen. Die Schallgeschwindigkeit c der Kette ergibt sich aus der Berechnung der Dispersionsrelation der linearisierten Kette unter Verwendung ebener Wellen. Der Pseudo-Differentialoperator, in den der Wechselwirkungsradius α^{-1} eingeht, ist über folgenden Integraloperator definiert:

$$(\alpha^2 - \partial_x^2)^{-1} f(x) = \frac{1}{2\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-\alpha|x-x'|} f(x') \quad (2.14)$$

In [30, 42] wurde die Gleichung (2.11) im Fall der ungestörten Kette ($\nu_{hy} = 0$, $D^{hy} = 0$) implizit gelöst. Eine Lösung des Problems, das die Soliton-Lösung auf eine numerische Integration zurückführt, erscheint technisch einfacher und ist im Anhang D skizziert. Es wurde gezeigt, dass die Kette Soliton-Lösungen im Geschwindigkeitsintervall $c < v < v_c$ hervorbringt, wobei $v_c \simeq \sqrt{(4c^2 - 1)}/3$ die kritische Geschwindigkeit darstellt, bei der sich kammtragende Soliton-Lösungen (Peakonen) ergeben, die aus der Theorie seichter Wasserwellen [43] als Lösungen der integrierbaren Camassa-Holm-Gleichung [44] bekannt sind. Eine Stabilitätsanalyse zeigt, dass die Solitonen instabil werden, bevor sie Peakon-Gestalt annehmen. In einer anderen Arbeit [45] wird gezeigt, dass sich in anharmonischen Gittern mit passenden langreichweitigen Potenzialen von vornherein (diskrete) Peakon-Lösungen ergeben. Es wird hier nicht versucht Gleichung (2.11) zu lösen, sondern die Tatsache verwendet, dass die Lösung für Geschwindigkeiten, die nicht zu nahe bei v_c liegen, gut durch eine pulsartige Kurve approximiert werden kann. Wie man der Abbildung 2.1 (a) entnehmen kann, führt ein wachsender Wechselwirkungsradius α^{-1} zu massiveren und breiteren Lösungen, selbst wenn J relativ klein ist. Für $\alpha = 0.5$ und $J = 0.1$ ist das Soliton mit der

normierten Geschwindigkeit $c_o = v/c = 1.01$ wesentlich breiter als die Lösung mit der gleichen Geschwindigkeit auf der Kette ohne langreichweitige Wechselwirkungen ($J \rightarrow 0$). Für die Werte $J = 0.1$ und $\alpha = 0.3$ ergibt sich eine kritische Geschwindigkeit von $v_c \approx 1.09c$. Für diesen Fall sind in Abbildung 2.1 (b) Solitonen mit wachsender normierter Geschwindigkeit c_o dargestellt. Für Geschwindigkeiten kleiner als $v \approx 1.07c$ ergeben sich pulsförmige Solitonen, die gut durch einen *sech*-Puls beschrieben werden können, welcher sich auch für die Soliton-Lösungen der Boussinesq-Gleichung (ohne langreichweitige Wechselwirkungen) ergibt.

Der Fall der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung ist für die Kac-Baker-Form durch den Grenzfall $J \rightarrow 0$ ($\alpha \neq 0$) gegeben. In diesem Limes verschwindet der Term $(c^2 - 1) \rightarrow 0$ und man erhält eine verbesserte Boussinesq-Gleichung (improved Boussinesq equation, IBq) mit $c = 1$ [22]. Der Grenzfall $\alpha \rightarrow \infty$ führt zu einer IBq mit einer zusätzlichen Nächste-Nachbar-Kopplung von $J/2$ und einer Schallgeschwindigkeit $c = \sqrt{1 + J/2}$.

2.3.2 Potenzartige Wechselwirkungen

Wenn man für die Gleichung (2.7) mit dem J_m aus (2.10) zur Kontinuumsnäherung übergeht, wobei man die diskrete Ortsvariable n durch das kontinuierliche x und Funktionen am Ort $x + m$ durch deren Taylor-Reihe um x ersetzt

$$w_n(t) \rightarrow w(x, t), \quad \xi_n(t) \rightarrow \xi(x, t), \quad f(x + m, t) \rightarrow e^{m\partial_x} f(x, t), \quad (2.15)$$

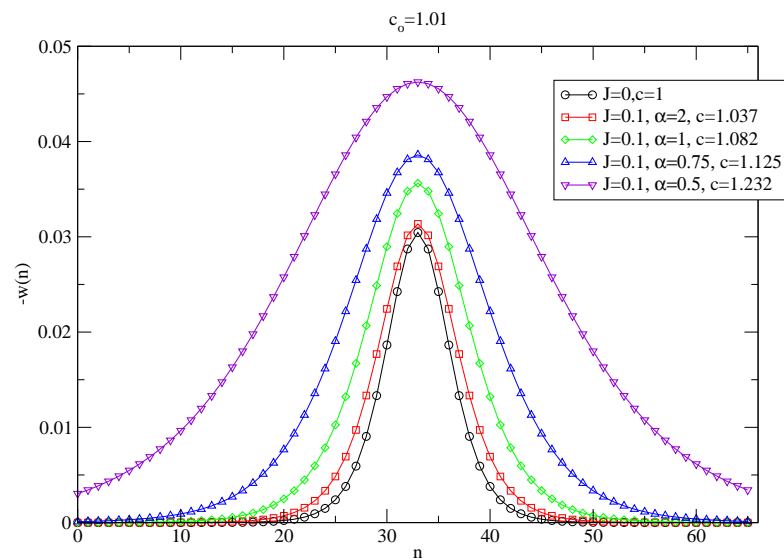
dann ergibt sich die partielle Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \partial_t^2 w(x, t) &= 2(\cosh(\partial_x) - 1)V'(w(x, t)) \\ &- 2J \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1 - \cosh(m\partial_x)}{m^s} w(x, t) + \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t w(x, t) \\ &+ \sqrt{D^{hy}} \partial_x^2 \xi(x, t). \end{aligned} \quad (2.16)$$

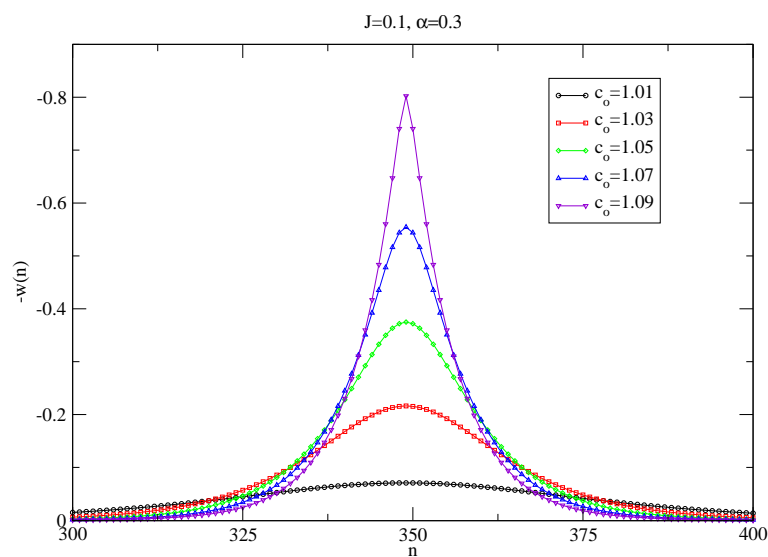
Das weitere Vorgehen hängt vom Wert s ab. In [46] wird gezeigt, dass sich im Fall $s > 5$ in der Kontinuumsnäherung eine Boussinesq-artige Gleichung, ähnlich zum Fall der Kette mit ausschließlich Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen ergibt. Für $3 < s \leq 5$ bilden sich am Soliton algebraische anstelle exponentieller Schwänze aus und für $s \leq 3.5$ entsteht eine Energielücke zwischen dem Solitonenspektrum und dem Spektrum der ebenen Wellen. Im Fall $s = 4$ ergibt sich die Hilbert-Boussinesq-Gleichung, die auf die integrable Benjamin-Ono-Form zurückgeführt werden kann, welche bekanntermaßen Lorentz-förmige Soliton-Lösungen (im folgenden auch algebraische Solitonen genannt) ergibt. Da die Soliton-Lösungen für $s > 5$ durch eine Boussinesq-Gleichung beschrieben werden können, sind keine größeren Unterschiede zu der in [22] durchgeführten Analyse für die Solitonen ohne langreichweitige Wechselwirkungen zu erwarten. Um den Effekt der algebraischen Solitonenschwänze auf der verdrahteten Kette zu untersuchen, wird im folgenden stets der Wert $s = 4$ benutzt, der als exemplarisch für den Wertebereich $3 < s \leq 5$ angenommen wird. Außerdem entstehen in der folgenden Kollektivvariablen-Theorie relativ komplizierte stochastische Ausdrücke. Es ist daher ratsam, zuerst den technisch weniger aufwendigen Fall $s = 4$ zu betrachten. Die gestörte Hilbert-Boussinesq-Gleichung ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \partial_t^2 w - c^2 \partial_x^2 w - \lambda \partial_x^4 w - \frac{J\pi}{6} \mathcal{H}(\partial_x^3 w) + 2\partial_x^2 w^2 &= \\ &= \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t w + \sqrt{D^{hy}} \partial_x^2 \xi(x, t) \end{aligned} \quad (2.17)$$

mit $c^2 = (1 + J\pi^2/6)$ und $\lambda = (1/12 - J/24)$, wobei die Differentialoperatoren für den Nächste-Nachbar-Teil und den langreichweitigen Teil $Q(s, \partial_x) = 2 \sum_m (1 - \cosh(m\partial_x))/m^s$ in (2.16) folgen-



(a)



(b)

Abbildung 2.1: a: Soliton-Lösungen für Gleichung (2.11) mit der gleichen normierten Geschwindigkeit $c_o = v/c = 1.01$ für eine Kette mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen ($J = 0$) und einer Kette mit relativ schwacher langreichweitiger Kopplung $J = 0.1$ für verschiedene Werte des Wechselwirkungsradius α^{-1} .

b: Soliton-Lösungen für verschiedene Werte für c_o für $J = 0.1$ und $\alpha = 0.3$. Für $c_o = v_c/c = 1.092$ nimmt das Soliton Peakon-Gestalt an.

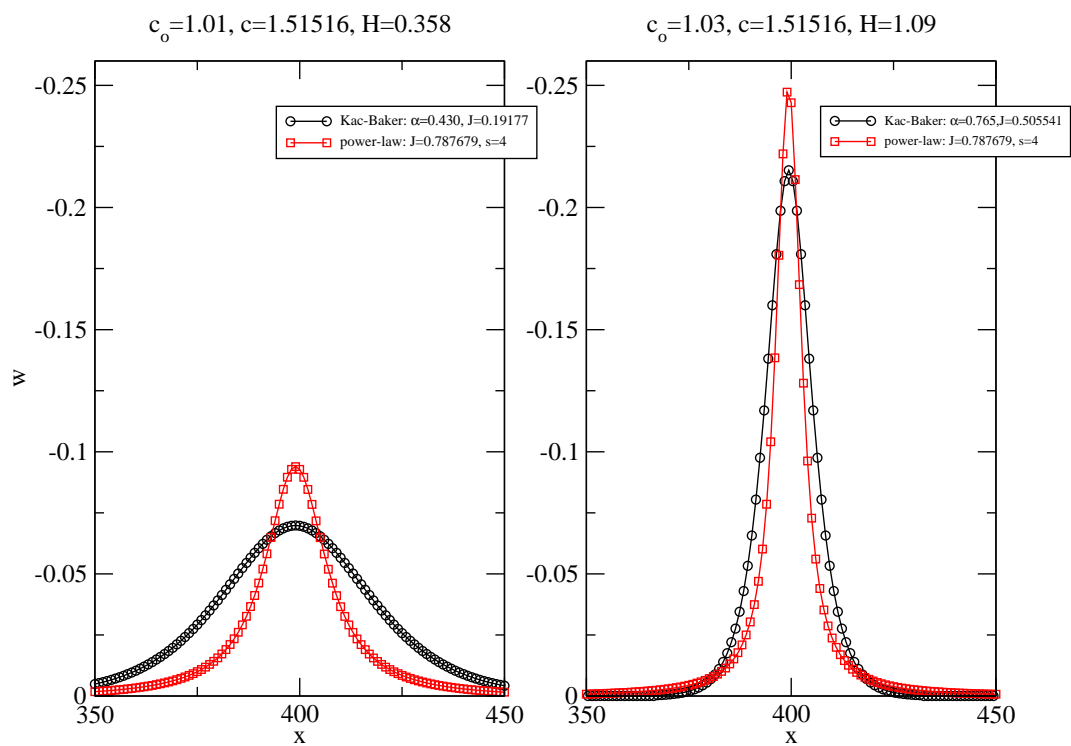


Abbildung 2.2: Soliton-Lösungen für algebraische ($s = 4$) und Kac-Baker-Wechselwirkungen. Die zwei Solitonen im linken und rechten Feld haben jeweils die gleiche (normierte) Geschwindigkeit c_0 und Energie H .

dermaßen entwickelt wurden:

$$2(\cosh(\partial_x) - 1) = 2\left(\frac{\partial_x^2}{2!} + \frac{\partial_x^4}{4!} + \dots\right) \quad (2.18)$$

$$Q(4, \partial_x) = -\frac{\pi^2}{6}\partial_x^2 - \frac{\pi}{6}\mathcal{H}(\partial_x^3) + \frac{1}{24}\partial_x^4. \quad (2.19)$$

$\mathcal{H}(f(x)) = 1/\pi P \int_{-\infty}^{\infty} f(y)/(y-x)dy$ bezeichnet die Hilbert-Transformation und P den Cauchyschen Hauptwert des Integrals. Die Quasikontinuumsnäherung ist für die potenzartigen Wechselwirkungen nicht so einfach durchzuführen wie bei der Kac-Baker-Form, da der exakte Ausdruck für $Q(s, \partial_x)$ auf Polylogarithmusfunktionen führt, die in der Quasikontinuumsnäherung sehr komplizierte komplexwertige Ausdrücke zur Folge haben.

Die Gleichung (2.17) besitzt für $\nu_{hy} = 0$ und $D^{hy} = 0$ Lorentz-förmige Soliton-Lösungen [7], die im nächsten Abschnitt noch genauer untersucht werden. Die deutlichen Unterschiede für die Solitonschwänze im Fall der exponentiellen und potenzartigen langreichweitigen Wechselwirkungen kann man sich am einfachsten durch direkten Vergleich der Form der Solitonen in den verschiedenen Systemen klarmachen. In Abbildung 2.2 werden Soliton-Lösungen der anharmonischen Kette mit potenzartigen und exponentiellen langreichweitigen Wechselwirkungen verglichen, die die gleiche Geschwindigkeit c_o und die gleiche Energie H haben. Die exponentiellen Solitonen wurden dabei durch systematisches Abgleichen der beiden Werte J und α auf die Geschwindigkeit und Energie der algebraischen Solitonen ermittelt.

2.4 Kollektive Variablen

Die Solitonendynamik eignet sich besonders gut für die Anwendung der Theorie kollektiver Variablen. Dabei nimmt man an, dass ein System mit vielen Freiheitsgraden durch wenige effektive Freiheitsgrade, den kollektiven Koordinaten oder kollektiven Variablen $X_i(t)$, festgelegt ist [47]. Im Fall der Solitonen nimmt man dabei an, dass das Soliton durch eine feste Formfunktion (generalized traveling wave ansatz) approximiert werden kann und dass Änderungen nur auf die zeitabhängigen kollektiven Variablen wie die Solitonenposition, -breite oder -amplitude wirken. Diese Technik hat sich in der Vergangenheit besonders bei der Beschreibung solitärer Anregungen großer Beliebtheit erfreut und fand Anwendungen in verschiedensten Systemen der nichtlinearen Optik, auf magnetische Systeme, auf Solitonenrutschen oder anharmonische Gitter [48–50].

Um die Dynamik des Solitons im Rahmen der Kollektivvariablen-Näherung zu studieren, bieten sich mehrere Ansätze an. In der Vergangenheit hat sich beispielsweise die Projektionsmethode [48] bewährt, die in Untersuchungen der thermischen Diffusion von FPU-Solitonen angewendet wurde [22]. Eine weitere Möglichkeit stellen Variationsverfahren dar, die auf die Methode von Whitham [43] zurückgehen. Hier wird die Lagrangedichte \mathcal{L} der PDEs räumlich integriert und aus der resultierenden Lagrangefunktion die Euler-Lagrange-Gleichungen der kollektiven Variablen $X_i(t)$ berechnet. Da die hier untersuchten Gleichungen Boussinesq-artig sind, bietet sich eine Variationsmethode an, da durch die hohen Zeit- bzw. Ortsableitungen in diesen PDEs die Projektionsmethode mit zu großem Rechenaufwand verbunden ist.

Um die PDEs (2.11) und (2.17) aus der Lagrangedichte \mathcal{L} ableiten zu können, muss das absolute Auslenkungsfeld $u(x, t)$ ($w(x, t) = \partial_x u(x, t)$) verwendet werden [51]:

$$-\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} + \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_t} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_x} - \frac{\partial^2}{\partial x \partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{xt}} + \dots = \Phi. \quad (2.20)$$

Der Reibungsterm $\Phi = \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t u(x, t)$ kann nicht aus der Lagrangedichte abgeleitet werden. Nach dem generalisierten Hamiltonschen Prinzip für nichtlineare dissipative Wellen von Ostrovsky et al. [52], das eine Erweiterung der Whitham-Methode auf dissipative Medien darstellt, kann der Effekt der Dämpfung auf die kollektiven Variablen durch die folgenden Bewegungsgleichungen berücksichtigt werden:

$$\frac{\delta \langle \mathcal{L} \rangle}{\delta X_i} = \frac{\partial \langle \mathcal{L} \rangle}{\partial X_i} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \langle \mathcal{L} \rangle}{\partial \dot{X}_i} = - \left\langle \Phi u_i \right\rangle, \quad (2.21)$$

wobei die Klammern eine räumliche Integration über x bezeichnen und u_i die Ableitung des Ansatzes nach der kollektiven Variable X_i darstellt.

Kollektivvariablen-Ansätze sind natürlich nicht auf Soliton-Soliton-Wechselwirkungen oder strahlende Solitonen anwendbar. Eine vollständigere Diskussion der störungstheoretischen Behandlungen von Solitongleichungen findet sich etwa in [53]. Dissipative nichtlineare Wellendynamik ist vor allem auf dem Gebiet der granularen Materie [54] oder der Hydrodynamik [55] aktueller Forschungsgegenstand.

Im folgenden werden die Soliton-Lösungen in der gestörten Boussinesq-Gleichung mit passenden Kollektivvariablen-Ansätzen beschrieben, wobei die inverse Breite und die Position des Solitons als zeitabhängig angenommen werden, jedoch nicht die Amplitude $2A_o$ der Stufenfunktion in absoluten Koordinaten $u(x, t)$ ($2A_o = \int_{-\infty}^{+\infty} w(x, t) dx$, Kinkamplitude). Diese ist eine Erhaltungsgröße der Boussinesq- und der Korteweg-de Vries-Gleichung, selbst wenn man hydrodynamische Dämpfung annimmt, wie in [22] gezeigt wurde. Für eine grundlegende mathematische Theorie der Boussinesq-Gleichung mit viskoser Dämpfung sei auf [56] und die darin angegebenen Referenzen verwiesen.

Grundsätzlich stellt die Annahme einer konstanten Kinkamplitude für das Soliton eine Näherung dar, da durch die Dämpfung Verunreinigungen am Solitonenrumpf auftreten (siehe auch [22, 54, 55]) und dadurch die Kinkamplitude des Solitons abnimmt. Das Soliton wandelt sich in der Gegenwart

der Dämpfung in langsamere Solitonen mit kleinerer Kinkamplitude um. Die Differenz wird von der Strahlung aufgenommen. Für die Solitonen mit kleinen Geschwindigkeiten ist dieser Effekt eher klein, aber für Hochgeschwindigkeitssolitonen wird dieser Mechanismus der ausschlaggebende. Grundsätzlich führt aber der Rauschterm und die Präsenz der langreichweitigen Wechselwirkungen dazu, dass die Abweichungen von der idealen Solitonenform am Rumpf in guter Näherung vernachlässigt werden können.

2.4.1 Kac-Baker-Wechselwirkungen

Zur Untersuchung von Gittersolitonen mit exponentiellen langreichweitigen Wechselwirkungen bietet sich als Ansatz ein *sech*-Puls an. In den Abbildungen 2.1 war zu sehen, dass in relativen Koordinaten bei stärkeren langreichweitigen Wechselwirkungen das Soliton bei kleinen Geschwindigkeiten unter Beibehaltung seiner *sech*-Form breiter wird. Bei höheren Geschwindigkeiten nahe v_c bildet sich im Solitonenzentrum ein Kamm aus und das entstehende Peakon zeigt im ganzen Bereich einen exponentiellen Verlauf.

In absoluten Auslenkungskoordinaten $u(x, t)$ ergibt sich eine Stufenfunktion mit der Amplitude

$$2A_o = \int_{-\infty}^{\infty} w(x, t) dx , \quad (2.22)$$

die - wie für die Boussinesq-Gleichung - eine Erhaltungsgröße des Systems ohne Rauschen darstellt. Der Kollektivvariablen-Ansatz

$$u(x, t) = A_o \tanh(\gamma(t)(x - X(t))) \quad (2.23)$$

$$w(x, t) = \partial_x u(x, t) = A_o \gamma(t) \operatorname{sech}^2(\gamma(t)(x - X(t))) , \quad (2.24)$$

mit den kollektiven Variablen $\gamma(t)$ (inverse Breite), $X(t)$ (Position) und $2A_o$ (Kinkamplitude) hat auch schon für die ungestörte Kette im gesamten Geschwindigkeitsbereich qualitativ gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen erzielt [57]. Im Grenzfall der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung ($J \rightarrow 0$) ergibt die Variation nach den kollektiven Variablen für das ungestörte System die exakte Soliton-Lösung für das Boussinesq-Soliton

$$\gamma = \sqrt{3} \frac{\sqrt{v^2 - 1}}{v} , \quad A_o = \frac{\sqrt{3}}{2} \sqrt{v^2 - 1} v , \quad X(t) = vt + X_o . \quad (2.25)$$

Im Fall des gestörten Systems lässt sich zeigen, dass die Lagrangedichte, die durch Anwendung der Vorschrift (2.20) auf die nicht-lokale Boussinesq-Gleichung in absoluten Auslenkungskoordinaten

$$\begin{aligned} \partial_t^2 u &- \lambda \partial_x^2 \partial_t^2 u - (c^2 - 1) \frac{\kappa^2 \partial_x^2}{\kappa^2 - \partial_x^2} u - \partial_x^2 u + 2(\partial_x u)(\partial_x^2 u) \\ &- \sqrt{D^{hy}} \partial_x \xi(x, t) = \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t u \end{aligned} \quad (2.26)$$

führt, durch die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{u_t^2}{2} - \frac{u_x^2}{2} + \frac{u_x^3}{3} + \frac{\lambda}{2} u_{xt}^2 + \sqrt{D^{hy}} u_x \xi(x, t) \\ &+ \frac{(c^2 - 1)\kappa}{4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\kappa|x-s|} u(x, t) \partial_s^2 u(s, t) ds \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\Phi = \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t u \quad (2.28)$$

gegeben ist. Im Gegensatz zum Rauschterm und den aus der Boussinesq-Gleichung bekannten Termen ist die Ableitung des langreichweitigen Terms in \mathcal{L} nicht auf den ersten Blick ersichtlich.

Hier wurde ausgenutzt, dass sich der Term $\sim \partial_x^2/(\kappa^2 - \partial_x^2)u(x, t)$ in (2.26) durch die Variation eines Terms

$$\mathcal{L} \sim \frac{1}{2}u(x, t)\frac{\partial_x^2}{\kappa^2 - \partial_x^2}u(x, t) = \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{\infty}u(x, t)\left(\frac{\partial_x}{\kappa}\right)^{2i+2}u(x, t) \quad (2.29)$$

in der Lagrangedichte ergibt, dessen Integraloperator (zu sehen in 2.27) sich durch die Identität (2.14) ergibt. Nach einer Integration $\langle \cdot \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdot dx$ ergibt sich die Lagrangefunktion $L = \langle \mathcal{L} \rangle$, die sich aus der ungestörten Lagrangefunktion des Systems L^o und dem Rauschanteil L^N zusammensetzt

$$\begin{aligned} L &= \langle \mathcal{L} \rangle = L^o + L^N \\ L^o &= \frac{(-6 + \pi^2)A_o^2\dot{\gamma}^2}{18\gamma^3} + \frac{2}{3}A_o^2\gamma(\dot{X}^2 - 1) - \frac{16}{45}A_o^3\gamma^2 + \frac{2\pi^2}{45}\lambda\frac{A_o^2\dot{\gamma}^2}{\gamma} + \\ &+ \frac{8}{15}\lambda A_o^2\gamma^3\dot{X}^2 - \frac{(c^2 - 1)}{4}\kappa A_o^2\gamma^2\mathcal{I}(\kappa, \gamma) \\ L^N &= A_o\sqrt{D^{hy}}\gamma \int_{-\infty}^{\infty} sech^2[\gamma(x - X)]\xi(x, t)dx \end{aligned} \quad (2.30)$$

mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{x}d\tilde{s}sech^2[\tilde{s}]\tanh[\tilde{s}]\tanh[\tilde{x}] = \frac{\gamma^2}{2}\mathcal{I}(\kappa, \gamma) \quad (2.31)$$

und

$$\mathcal{I}(\kappa, \gamma) = \frac{2\kappa^2}{\gamma^4}\Psi'\left(\frac{\kappa}{2\gamma}\right) - \frac{4}{\gamma^2} - \frac{4\kappa}{\gamma^3} \quad (2.32)$$

Die Identität (2.31) kann durch partielle Integration des entsprechenden Ausdrucks \mathcal{I} (mit $\alpha = \kappa$) in [57] gezeigt werden, der für das ungestörte System nach Einführung der mitbewegten Koordinate $z = x - vt$ (und zweimaliger Integration) berechnet wurde.

2.4.2 Potenzartige Wechselwirkungen

Im Fall der Hilbert-Boussinesq-Gleichung ergeben sich für Geschwindigkeiten $c_o = v/c \leq 1.03$ (bei $s = 4$, $J = 0.7877$ und damit $c = 1.51516$) Solitonen, die gut durch Lorentz-förmige Lösungen approximiert werden können. Für größere Geschwindigkeiten werden die Lösungen sehr diskret im Solitonzentrum und die Hilbert-Boussinesq-Gleichung (als Resultat der Kontinuumsnäherung) beschreibt die Lösung nur noch unzureichend. Der Grenzfall $J \rightarrow 0$ führt auf die Boussinesq-Gleichung mit *sech*-förmigen Solitonen.

Die Lagrangedichte der Hilbert-Boussinesq-Gleichung kann nur für das absolute Auslenkungsfeld $u(x, t)$ angegeben werden. Es lässt sich zeigen, dass die Variation (2.20) der Lagrangedichte

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{u_t}{2} - \frac{c^2 u_x^2}{2} + \frac{u_x^3}{J\pi} + \frac{J\pi}{6}u_{xx}\mathcal{H}(u_x) + \lambda\frac{u_{xx}^2}{2} \\ &- \sqrt{D^{hy}}u_x\xi(x, t) \end{aligned} \quad (2.33)$$

auf die Hilbert-Boussinesq-Gleichung

$$\begin{aligned} \partial_t^2 u - c^2 \partial_x^2 u - \lambda \partial_x^4 u - \frac{J\pi}{6}\mathcal{H}(\partial_x^3 u) + 2\partial_x u \partial_{xx} u &= \\ = \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t u + \sqrt{D^{hy}} \partial_x \xi(x, t) \end{aligned} \quad (2.34)$$

führt. Der Ansatz für das Lorentz-förmige Soliton lautet

$$\begin{aligned} u(x, t) &= -A_o \arctan[\sigma(t)(x - X(t))] \\ w(x, t) &= -\frac{A_o \sigma(t)}{1 + \sigma(t)^2(x - X(t))^2} \end{aligned} \quad (2.35)$$

mit den kollektiven Variablen $\sigma(t)$ (inverse Breite), $X(t)$ (Position) und $2A_o$ (Kink-Amplitude). Man kann sich davon überzeugen, dass die Variation der Lagrangefunktion

$$\begin{aligned} L &= \langle \mathcal{L} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \mathcal{L} = \\ &= \frac{A_o^2 \pi}{4} \left(\frac{\dot{\sigma}^2}{\sigma^3} + \sigma \dot{X}^2 \right) - \frac{c^2 A_o^2 \pi \sigma}{4} - \frac{\pi}{8} A_o^3 \sigma^2 + \frac{A_o^2 J \Pi^2 \sigma^2}{48} \\ &+ \frac{A_o^2 \pi \gamma \sigma^3}{8} + \sqrt{D^{hy}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{A_o \sigma}{1 + \sigma^2(x - X(t))^2} \xi(x, t) \end{aligned} \quad (2.36)$$

nach den kollektiven Variablen $\sigma(t)$, $X(t)$ und A_o im ungestörten Fall ($\nu_{hy} = \sqrt{D^{hy}} = 0$) die korrekten Werte liefert (vergleiche mit [46] für $\lambda = 0$)

$$A_o = \frac{J\pi}{3} + 4\lambda\sigma_o, \quad \sigma_o = \frac{6}{\pi J}(v^2 - c^2), \quad X(t) = vt + X_o, \quad (2.37)$$

wenn man als Lösung einen kohärenten Puls mit konstanter Geschwindigkeit annimmt ($\dot{\sigma} = \dot{A}_o = 0$, $\dot{X} = v$).

2.5 Langevin-Systeme

Aus der Kollektivvariablen-Technik lassen sich durch Anwendung von (2.21) auf die im vorigen Abschnitt berechneten Lagrange-Funktionen zwei gekoppelte stochastische Integro-Differentialgleichungen gewinnen, die die zeitliche Entwicklung der inversen Breite (allgemein als $X_1(t)$ bezeichnet) und der Position (allgemein als $X_2(t)$ bezeichnet) beschreiben. Nach der Vernachlässigung kleiner Terme kann man diese Systeme in der Form

$$\frac{dX_i}{dt} = A_i(\vec{X}) + \int_{-\infty}^{+\infty} dx B_{ij}(\vec{X}, x) \xi(x, t) \quad (2.38)$$

schreiben. Der Rauschterm ξ entspricht dem Rauschterm in den Boussinesq-artigen Gleichungen (2.11 und 2.17). Diese Form ist sehr ungünstig für weitergehende numerische und eventuelle analytische Untersuchungen der Dynamik der kollektiven Variablen. Deswegen ist das Ziel dieses Abschnitts, für die kollektiven Variablen ein Langevin-System (mit unabhängigen Rauschtermen ξ^j)

$$\frac{dX_i}{dt} = a_i(\vec{X}) + b_{ij}(\vec{X}) \xi^j(t) \quad , \quad \langle \xi^i(t) \xi^j(s) \rangle = \delta(t-s) \delta_{ij} \quad (2.39)$$

abzuleiten, das statistisch gleichwertig zum System (2.38) ist. Diese Forderung ist erfüllt, wenn man sicherstellen kann, dass beide stochastischen Gleichungen die gleiche Fokker-Planck-Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\vec{X}, t)$ erfüllen. Die Vorschrift zur Berechnung der Fokker-Planck-Gleichung für das stochastische Integro-Differentialsystem (2.38) lautet in Stratonovich-Interpretation [58]

$$\partial_t \rho = - \sum_i \partial_{X_i} (\rho A_i) + \frac{1}{2} \sum_{ijklm} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \partial_{X_i} (B_{ij} \partial_{X_m} [\rho B_{mk}]) \quad . \quad (2.40)$$

Es ergibt sich nach einiger Rechnung ein Ausdruck der Form

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= f^o(\vec{X}) \rho + f^{X_1}(\vec{X}) \partial_{X_1} \rho + f^{X_2}(\vec{X}) \partial_{X_2} \rho + f^{X_1 X_2}(\vec{X}) \partial_{X_1 X_2} \rho \\ &+ f^{X_1^2}(\vec{X}) \partial_{X_1}^2 \rho + f^{X_2^2}(\vec{X}) \partial_{X_2}^2 \rho \quad . \end{aligned} \quad (2.41)$$

Die Fokker-Planck-Gleichung für das Langevin-System (2.39) muss nun derart bestimmt werden, dass es auf die gleichen Funktionen f führt. Dieses System ist exakt lösbar, da man mit sechs Gleichungen sechs unbekannte Funktionen (zwei a_i , vier b_{ij}) zu bestimmen hat. Die Vorschrift zur Berechnung der Fokker-Planck-Gleichung (in Stratonovich-Interpretation [59]) aus den noch unbekanntem Diffusions- und Drifttermen $b_{ij}(\vec{X})$ und $a_i(\vec{X})$ lautet

$$\partial_t \rho = - \sum_i \partial_{X_i} (\rho a_i) + \frac{1}{2} \sum_{ijk} \partial_{X_i} (b_{ij} \partial_{X_k} [\rho b_{kj}]) \quad . \quad (2.42)$$

Da bei der Ableitung der Fokker-Planck-Gleichung (2.40) in beiden Fällen (Kac-Baker oder potenzartige Wechselwirkungen) der Mischterm $f^{X_1 X_2} = 0$ verschwindet, liegt es nahe, auch in der Langevin-Gleichung verschwindende Mischterme anzusetzen ($b_{12} = b_{21} = 0$).

In den folgenden Abschnitten wird im Fall der Kac-Baker und der potenzartigen Wechselwirkungen das stochastische Integro-Differentialsystem berechnet und das jeweils statistisch äquivalente Langevin-System bestimmt. Dabei werden in beiden Fällen kleine Terme in den Gleichungen (2.40), wie beispielsweise Terme proportional zu \ddot{X} , vernachlässigt. Diese Näherung hat hier andere Gründe als etwa bei Ratschen-Systemen, bei denen diese Näherung zutrifft, wenn man eine überdämpfte Dynamik annimmt. Im folgenden wird klar, dass die Solitondynamik von der Zeitskala $t_r \sim X_1^2 \nu_{hy} t$ abhängt. Für die betrachteten Solitonen erscheint daher die Zeitableitung einer Größe in der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon^4)$, denn sie besitzen typischerweise inverse Breiten $X_1 \sim \epsilon$ und es werden moderate Dämpfungskoeffizienten von $\nu_{hy} \sim \epsilon^2$ angenommen.

2.5.1 Kac-Baker-Wechselwirkungen

Die Euler-Lagrange-Gleichungen (2.21) für die Lagrangefunktion (2.30) ergeben ($\theta = \kappa/2\gamma$, $\bar{x} = x - X(t)$)

$$\frac{4}{3}\dot{\gamma}\dot{X} - \frac{2\sqrt{D^{hy}}\gamma^2}{A_o} \int_{-\infty}^{\infty} \text{sech}^2[\gamma\bar{x}]\tanh[\gamma\bar{x}]\xi(\bar{x}, t)d\bar{x} = -\frac{16}{15}\nu_{hy}\gamma^3\dot{X} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} -2(\dot{X}^2 - 1) + \frac{16}{9}A_o\gamma - 4(c^2 - 1)\left[\theta + \theta^2 + \theta^4\Psi''(\theta)\right] - \frac{2\sqrt{D^{hy}}}{A_o} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x}\text{sech}^2[\gamma\bar{x}]\xi(x, t) \\ + \frac{2\sqrt{D^{hy}}\gamma}{A_o} \int_{-\infty}^{\infty} d\bar{x}\text{sech}^2[\gamma\bar{x}]\tanh[\gamma\bar{x}]\bar{x}\xi(\bar{x}, t) = 0, \end{aligned} \quad (2.44)$$

wobei die erste Gleichung aus der Variation nach $X(t)$ und die zweite Gleichung aus der Variation nach $\gamma(t)$ und nach der zeitunabhängigen Kinkamplitude A_o (nach Subtraktion) folgt. Bei diesen Gleichungen wurden bereits kleine Beiträge $\sim \dot{\gamma}^2$, $\sim \ddot{X}$ und $\sim \ddot{\gamma}$ vernachlässigt, um analytisch besser handhabbare Gleichungen zu gewinnen. Eine ungefähre Vorstellung vom Beitrag dieser Terme kann durch das Auswerten der Simulationen gewonnen werden. Eine Klassifikation nach einem kleinen Parameter $\gamma(t=0) = \gamma_o \sim \epsilon$ macht klar, dass diese Terme nur unbedeutend zur Dynamik beitragen. Zu diesem Ergebnis kommt man auch, wenn man die Gleichungen (2.43,2.44) ohne Rauschterme numerisch löst (z.B. in MATHEMATICA) und mit dem Ergebnis vergleicht, das sich bei Berücksichtigung der kleinen Terme ergibt. Es ergeben sich praktisch die gleichen numerischen Werte.

Um eine Gleichung erster Ordnung in $X(t)$ zu erhalten, muss (2.44) zu

$$\begin{aligned} \dot{X}^2 = v_d^2 \left(1 + \frac{1}{v_d^2} \left(-\frac{2\sqrt{D^{hy}}}{A_o} \int_{-\infty}^{\infty} dx \text{sech}^2[\gamma\bar{x}]\xi(x, t) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2\sqrt{D^{hy}}\gamma}{A_o} \int_{-\infty}^{\infty} dx \text{sech}^2[\gamma\bar{x}]\tanh[\gamma\bar{x}]\bar{x}\xi(x, t) \right) \right) \end{aligned} \quad (2.45)$$

umgeschrieben werden, wobei der Ausdruck v_d der Geschwindigkeit des gedämpften Solitons entspricht (für $D^{hy} = 0$)

$$v_d^2 = 1 + \frac{8}{9}A_o\gamma(t) - 2(c^2 - 1)\left[\theta + \theta^2 + \theta^4\Psi''(\theta)\right]. \quad (2.46)$$

Wenn nun \dot{X} in (2.43) und v_d in (2.45) durch die Startgeschwindigkeit des Solitons v ($c < v < v_c \approx 1.09c$) ersetzt wird, zieht man die Wurzel von (2.45) (was zum gewünschten Term \dot{X} auf der linken Seite führt) und entwickelt den Ausdruck auf der rechten Seite bis zur ersten Ordnung nach dem kleinen Parameter $\sqrt{D^{hy}}$. Das Mitnehmen des exakten Ausdrucks für v_d würde zu sehr komplizierten Koeffizienten B_{ij} führen. Als Ergebnis erhält man ein gekoppeltes stochastisches Integro-Differentialsystem erster Ordnung in den kollektiven Variablen $\gamma(t)$ und $X(t)$:

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma} \\ \dot{X} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \xi \end{pmatrix}, \quad (2.47)$$

mit

$$A_1 = -0.8\nu_{hy}\gamma^3, \quad A_2 = v_d \quad (2.48)$$

$$B_{11} = \frac{3}{2} \frac{\sqrt{D^{hy}}\gamma^2}{A_o v} \operatorname{sech}^2[\gamma\bar{x}] \tanh[\gamma\bar{x}] \quad (2.49)$$

$$B_{21} = -\frac{\sqrt{D^{hy}}}{2A_o v} \operatorname{sech}^2[\gamma\bar{x}] \quad (2.50)$$

$$B_{22} = \frac{\sqrt{D^{hy}}\gamma}{2A_o v} \operatorname{sech}^2[\gamma\bar{x}] \tanh[\gamma\bar{x}] \bar{x} . \quad (2.51)$$

Mit der im vorigen Abschnitt beschriebenen Prozedur lässt sich zeigen, dass das Langevin-System mit unabhängigen weißen Rauschtermen ξ^j ($j = 1, 2$) auf die gleiche Fokker-Planck-Gleichung (2.41) führt:

$$\begin{pmatrix} \dot{\gamma} \\ \dot{X} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & 0 \\ 0 & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

mit

$$\begin{aligned} a_1 &= A_1 + \frac{1}{4} \frac{D^{hy}}{A_o^2 v^2} \gamma^2, \quad a_2 = v_d \\ b_{11} &= \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{\sqrt{D^{hy}}}{A_o v} \gamma^{\frac{3}{2}} \\ b_{22} &= \sqrt{\left(\frac{1}{6} + \frac{\pi^2}{180}\right)} \frac{\sqrt{D^{hy}}}{A_o v \gamma^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

2.5.2 Potenzartige Wechselwirkungen

Für die Lagrangefunktion des Gittersolitons für potenzartige langreichweitige Wechselwirkungen (2.36) ergeben sich nach Anwendung von (2.21) die folgenden Gleichungen für die kollektiven Variablen $\sigma(t)$ und $X(t)$

$$\dot{\sigma}\dot{X} = \frac{4\sqrt{D^{hy}}\sigma^3}{A_o\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\bar{x}\xi(x,t)}{(1+\sigma^2\bar{x}^2)^2} - \frac{\nu_{hy}}{2} \dot{X}\sigma^3 \quad (2.54)$$

$$(\dot{X}^2 - c^2) = \frac{A_o\sigma}{2} + \frac{\lambda\sigma^2}{2} - \frac{8\sqrt{D^{hy}}\sigma^2}{\pi A_o} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\bar{x}^2\xi(x,t)}{(1+\sigma^2\bar{x}^2)^2} \quad (2.55)$$

mit

$$A_o = \frac{J\pi}{3} + 4\lambda\sigma_0, \quad \bar{x} = x - X(t), \quad (2.56)$$

wobei sich (2.54) durch Variation nach $X(t)$ und (2.55) durch Variation nach $\sigma(t)$ und A_o ergibt. Wie bei den exponentiellen Wechselwirkungen wurden hier aus den gleichen Gründen die kleinen Terme $\sim \dot{\sigma}^2$, $\sim \ddot{X}$ und $\ddot{\sigma}$ vernachlässigt. Die Stimmigkeit dieser Näherung kann man wieder explizit durch Vergleich der numerischen Lösung der Gleichungen (2.54,2.55) für $D^{hy} = 0$ mit dem entsprechenden System unter Beibehaltung der vernachlässigten Terme nachprüfen. Um eine Gleichung erster Ordnung in \dot{X} zu erhalten, kann man wie vorher für den Kac-Baker-Fall die Geschwindigkeit des gedämpften Solitons einführen

$$v_d = \sqrt{c^2 + \frac{A_o}{2}\sigma(t) + \frac{\lambda}{2}\sigma(t)^2}, \quad (2.57)$$

die Wurzel von Gleichung (2.55) ziehen und den Ausdruck auf der rechten Seite bis zur ersten Ordnung in $\sqrt{D^{hy}}$ entwickeln, wobei der Ausdruck für v_d im stochastischen Teil von (2.55) durch die Startgeschwindigkeit des Solitons approximiert wird ($c < v < 1.03c$). Ohne diese Approximation würden die stochastischen Gleichungen und die folgende Ableitung der Fokker-Planck-Gleichung wesentlich umfangreicher, da die Diffusionskoeffizienten B_{ij} in diesem Fall viel komplizierter von den kollektiven Variablen abhängen würden. Das stochastische Integro-Differentialsystem lautet somit

$$\begin{pmatrix} \dot{\sigma} \\ \dot{X} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} + \int_{-\infty}^{\infty} dx \begin{pmatrix} B_{11} & 0 \\ 0 & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \xi \end{pmatrix}, \quad (2.58)$$

mit

$$A_1 = -\frac{\nu_{hy}}{2}\sigma^3, \quad A_2 = v_d \quad (2.59)$$

$$B_{11} = \frac{4\sqrt{D^{hy}}\sigma^3}{\pi A_0 v} \frac{(x - X(t))}{(1 + \sigma^2(x - X(t))^2)^2} \quad (2.60)$$

$$B_{22} = -\frac{4\sqrt{D^{hy}}\sigma^2}{\pi A_0 v} \frac{(x - X(t))^2}{(1 + \sigma^2(x - X(t))^2)^2}. \quad (2.61)$$

Das statistisch äquivalente Langevin-System ergibt sich durch Ausführen der vorher beschriebenen Vorgehensweise zu

$$\begin{pmatrix} \dot{\sigma} \\ \dot{X} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{11} & 0 \\ 0 & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^1 \\ \xi^2 \end{pmatrix} \quad (2.62)$$

mit

$$a_1 = -\frac{\nu_{hy}\sigma^3}{2} - \frac{D^{hy}\sigma^2}{4A_0^2\pi v^2}, \quad a_2 = v_d$$

$$b_{11} = \frac{\sqrt{D^{hy}}\sigma^{\frac{3}{2}}}{A_0\sqrt{\pi}v}, \quad b_{22} = \frac{\sqrt{D^{hy}}}{\sqrt{\sigma}A_0\sqrt{\pi}v}. \quad (2.63)$$

2.5.3 Struktur der Langevin-Systeme

An dieser Stelle macht es Sinn, die gewonnenen Langevin-Gleichungen für exponentiell und potenzartig abfallende langreichweitige Wechselwirkungen miteinander und mit früheren Ergebnissen auf der FPU-Kette ohne langreichweitige Wechselwirkungen [22] zu vergleichen. Die beiden Langevin-Systeme (2.52) und (2.62) hängen in nahezu identischer Weise von den kollektiven Variablen inverse Breite und Position und den Parametern wie der Kinkamplitude, der Startgeschwindigkeit, der Dämpfung und der Temperatur ab. Besonders das Verhalten der Solitonenbreite in Gegenwart der Dämpfung $\dot{X}_1 \sim \nu_{hy}X_1^3$ ist in beiden Fällen identisch. Dieses Verhalten scheint sehr typisch für nichtlineare Anregungen zu sein, denn es zeigt sich ebenfalls für die niederenergetischen Gittersolitonen der α - und β -FPU-Kette und bei diskreten Brethern im Phononenbad [60]. Die langreichweitigen Wechselwirkungen scheinen dieses Verhalten wohl nicht prinzipiell zu verändern, obwohl die Dynamik für $X_1(t)$ (bei Solitonen mit gleichem c_o) auch vom numerischen Faktor in dieser Relation und vor allem vom Startwert der inversen Breite abhängt, der sehr stark von den langreichweitigen Wechselwirkungen beeinflusst wird (siehe Abbildung 2.1).

Dagegen scheint die deterministische Solitonengeschwindigkeit v_d und ihre Abhängigkeit von der inversen Breite stark von der konkreten Form der langreichweitigen Wechselwirkungen abzuhängen. Im Fall der exponentiellen Wechselwirkungen ergibt sich ein wesentlich komplizierterer Ausdruck für v_d als für die potenzartig-abfallenden Wechselwirkungen.

2.6 Stochastische Störungsrechnung

Eine Störungsrechnung für kleines Rauschen wurde bereits in [22] auf die stochastischen Kollektivvariablen-Gleichungen erfolgreich angewendet, um einen analytischen Ausdruck für die Positionsvarianz des Solitons abzuleiten. Für langreichweitige Wechselwirkungen wird diese Vorgehensweise von der Tatsache gestützt, dass hier energetisch massivere Anregungen erscheinen, die stabiler gegen Störungen sind als Solitonen in der FPU-Kette mit ausschließlich Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen. Die prinzipielle Vorgehensweise der Störungsrechnung findet sich in [61] und besteht aus einer Entwicklung des Systems nach dem kleinen Temperaturparameter $\sqrt{D^{hy}}$.

Im Anhang C wird mit dieser Methode die vom Rauschen verursachte räumliche Versetzung des Solitons $X_2^{(1)}(t)$ (in erster Ordnung in $\sqrt{D^{hy}}$) aus den Langevin-Systemen für exponentielle und potenzartige Wechselwirkungen berechnet. Die Komplexität des Resultats

$$Var[X_2^{(1)}(t)] = \lim_{s \rightarrow t} \langle X_2^{(1)}(t) X_2^{(1)}(s) \rangle \quad (2.64)$$

hängt sehr davon ab, auf welche Weise der Driftkoeffizient $a_2(X_1(t)) = v_d(X_1(t))$ von der inversen Breite $X_1(t)$ abhängt. Im Fall der Kac-Baker-Wechselwirkungen kann der komplexe Ausdruck für v_d für Solitonen mit deutlich kleineren Geschwindigkeiten als v_c auf eine lineare und quadratische Abhängigkeit von der inversen Breite zurückgeführt werden. Im Fall der potenzartig abfallenden Wechselwirkungen hängt v_d ebenfalls linear und quadratisch von der inversen Breite ab, wobei der lineare Beitrag aber deutlich dominiert.

Die folgenden Näherungen für die Geschwindigkeiten v_d für beide Solitentypen sind jeweils gut für niederenergetische Solitonen. Es gibt im Wesentlichen zwei Gründe, warum diese Näherungen keine echten Einschränkungen darstellen. Zum einen bricht bei hochenergetischen Solitonen die Approximation durch den gewählten Kollektivvariablen-Ansatz zusammen und zum anderen liefert die stochastische Störungsrechnung für schmale und schnelle Hochenergiesolitonen keine guten Resultate mehr, da die relativen Formschwankungen ($\delta X_1/X_1$) groß werden und eine Beschränkung auf das Resultat in erster Ordnung nicht mehr ausreicht. Im Fall der Kac-Baker-Wechselwirkung würde das Mitnehmen des Ausdrucks mit der Trigamma-Funktion in (2.46) außerdem auf höchst komplizierte Ausdrücke führen.

In den folgenden beiden Abschnitten werden die Ergebnisse der Störungsrechnung für die beiden Typen langreichweitiger Wechselwirkungen angegeben. Es wird dabei vor allem auf die gewählten Approximationen für den Ausdruck v_d eingegangen und auf das Resultat für die Positionsvarianz $Var[X(t)]$ im Limes großer Zeiten $t_r \gg 1$.

2.6.1 Kac-Baker-Wechselwirkungen

Der wichtigste Schritt bei der Störungstheorie im Fall der Kac-Baker-Wechselwirkungen ist eine gute Näherung des relativ komplizierten Ausdrucks v_d (2.46) zu finden, um analytisch auswertbare Formeln zu erhalten. Eine Expansion der Trigamma-Funktion für große $\theta = \kappa/2\gamma$ [62]

$$\Psi''(\theta) \approx -\frac{1}{\theta^2} - \frac{1}{\theta^3} - \frac{1}{2\theta^4} + \frac{1}{6\theta^6} \quad (2.65)$$

ist relativ gut für die Werte $\theta(t=0) \in [1.5, 3]$, die man für Solitonen auf der FPU-Kette mit langreichweitigen Wechselwirkungen ($\alpha \approx 0.3$, $J \approx 0.1$) erhält. Auf größeren Zeitskalen $t_r > 1$ (die für die Diffusion des Solitons ausschlaggebend sind) ergeben sich wegen der Verbreiterung der Solitonen in Gegenwart der Dämpfung aber zwangsläufig ausreichend große Werte für θ . Im Rahmen dieser Näherung lässt sich zeigen, dass die deterministische Solitongeschwindigkeit linear

und quadratisch von γ abhängt:

$$\begin{aligned}
v_d &= \sqrt{1 + \frac{8}{9}A_o\gamma(t) - 2(c^2 - 1) \left[\theta + \theta^2 + \theta^4 \Psi''(\theta) \right]} \\
&\approx \sqrt{1 + \frac{8}{9}A_o\gamma(t) - 2(c^2 - 1) \left[-\frac{1}{2} + \frac{1}{6\theta^2} \right]} \\
&\approx c \sqrt{1 + \frac{8}{9} \frac{A_o}{c^2} \gamma(t) - \frac{4}{3} \frac{(c^2 - 1)}{c^2 \kappa^2} \gamma^2} \\
&\approx c + \frac{4}{9} \frac{A_o}{c} \gamma(t) - \left(\frac{8}{81} \frac{A_o^2}{c^3} + \frac{2}{3} \frac{(c^2 - 1)}{c \kappa^2} \right) \gamma(t)^2 .
\end{aligned} \tag{2.66}$$

Mit diesem Ausdruck ergeben sich die im Anhang C nachzulesenden stochastischen Gleichungen für die Korrektur des Solitonenortes in erster Ordnung, mit der für genügend kleine Temperaturen die Positionsvarianz $Var[X_2^{(1)}(t)] \approx Var[X(t)]$ beschrieben werden kann. Bei der Berechnung von

$$Var[X_2^{(1)}(t)] = \lim_{s \rightarrow t} \langle X_2^{(1)}(t) X_2^{(1)}(s) \rangle \tag{2.67}$$

ergibt sich ein sehr länglicher Ausdruck, der von Parametern wie D^{hy} , ν_{hy} , A_o und verschiedenen Potenzen von t_r abhängt. Nach dem Umschreiben der Formel lässt sich der Term bestimmen, der für große t_r den Ausdruck dominiert:

$$Var[X(t)]_{inf} = \frac{1}{64} \frac{D^{hy}}{c^2 \nu_{hy}^2 \nu_{hy}^{1.5}} t^{3/2} . \tag{2.68}$$

Nach der Berechnung des entsprechenden Ausdrucks für potenzartige Wechselwirkungen im folgenden Unterabschnitt werden die beiden Resultate verglichen und die qualitativen Unterschiede herausgestellt.

2.6.2 Potenzartige Wechselwirkungen

Für die potenzartig abfallenden harmonischen Wechselwirkungen ergibt sich ein weitaus weniger komplexer Ausdruck für die deterministische Solitonengeschwindigkeit v_d als für den Kac-Baker-Fall. Dieser Ausdruck kann wegen der Kleinheit des Parameters $\lambda = 1/12 - J/24 < A_o$ weiter vereinfacht werden:

$$\begin{aligned}
v_d &= \sqrt{c^2 + \frac{A_o}{2}\sigma(t) + \frac{\lambda}{2}\sigma^2(t)} \approx c \sqrt{1 + \frac{A_o}{2c^2}\sigma(t)} \\
&\approx c + \frac{A_o}{4c} \sigma(t) .
\end{aligned} \tag{2.69}$$

Mit der im Anhang C beschriebenen Vorgehensweise erhält man nach einiger Rechnung (in erster Ordnung in $\sqrt{D^{hy}}$) ein relativ längliches Resultat für die Positionsvarianz des Solitons, das lediglich von der reduzierten Zeit $t_r = \nu_{hy} \sigma_o^2 t$ abhängt:

$$\begin{aligned}
Var[X(t)] &= D^{hy} \left(\frac{A_o^2 [-16(-1 + \sqrt{\eta}) + (\eta - 1)(18 - 10\sqrt{\eta} + (\eta - 1)(\eta + 2))]}{60 A_o^2 c^2 \nu_{hy}^3 \pi \sigma_o^3 \nu^2 \eta^{\frac{3}{2}}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{2c^2 \nu_{hy}^2 \eta (-1 + \sqrt{\eta} - (\eta - 1)(\eta + 1))}{3 A_o^2 c^2 \nu_{hy}^3 \pi \sigma_o^3 \nu^2 \eta^{\frac{3}{2}}} \right)
\end{aligned} \tag{2.70}$$

mit

$$\eta = 1 + t_r = 1 + \sigma_o^2 \nu_{hy} t . \tag{2.71}$$

Um leichter handhabbarere Ausdrücke und eine Vorstellung von der Zeitabhängigkeit der Positionsvarianz zu gewinnen, werden aus dem Resultat die dominierenden Beiträge für große ($t_r \gg 1$) und kleine ($t_r \ll 1$) Zeiten berechnet. Technisch gesehen entwickelt man die Ausdrücke, in denen η auftaucht, für kleine t_r für kleine Zeiten (oder kleine $1/t_r$ für große Zeiten) und übernimmt nur den führenden Term. Das Ergebnis für kleine Zeiten lautet

$$Var[X(t)]_0 = \frac{4}{3} \frac{D^{hy}}{A_o^2 \pi \sigma_o^2 v^2} t. \quad (2.72)$$

Das im Grenzfall großer Zeiten gültige Resultat

$$Var[X(t)]_{inf} = \frac{D^{hy}}{60 c^2 \nu_{hy}^{1.5} \pi v^2} t^{3/2} \quad (2.73)$$

ist das ausschlaggebende für das Diffusionsverhalten des Solitons.

Der Übergang zwischen den beiden Grenzwerten erfolgt in typischen Zeiten von einigen wenigen $1/(\nu_{hy} \sigma_o^2)$ und zeigt einen stärkeren zeitlichen Anstieg als $\sim t^{3/2}$.

2.6.3 Diffusionsverhalten

Die Ergebnisse der stochastischen Störungsrechnung für Solitonen auf FPU-Ketten mit den beiden betrachteten Typen von langreichweitigen Wechselwirkungen zeigen für große Zeiten das gleiche Diffusionsverhalten $Var[X] \sim t^{3/2}$. Dieses Ergebnis gilt auch für Solitonen auf der FPU-Kette [22], da die Kette im Fall des Kac-Baker-Potenzials im Grenzfall $J \rightarrow 0$ einer FPU-Kette mit kubischer Anharmonizität entspricht. Da die Lebensdauer der niederenergetischen Solitonen in [22] wesentlich kürzer ist als für gleich schnelle Solitonen in Ketten mit zusätzlichen langreichweitigen Wechselwirkungen, wurden in den Simulationen in Übereinstimmung mit den analytischen Resultaten vor allem quadratische Abweichungen vom linearen (normalen) Zeitverhalten beobachtet. Diese Ergebnisse fügen sich gut mit den neuen Resultaten zusammen, denn die Solitonen der FPU-Kette erreichen nicht den Zeitbereich mit der typischen $t^{3/2}$ -Abhängigkeit. Da in [22] langsame Solitonen mit $c_o < 1.01$ mit relativ großer Breite untersucht wurden, konnten die Solitonen nur bis zu Zeiten $t_r \sim 1$ nachgewiesen werden. Im Fall der langreichweitigen Wechselwirkungen sollte es grundsätzlich leichter sein, Zeiten $t_r \gg 1$ zu erreichen, da die Solitonen durch die langreichweitigen Wechselwirkungen mehr Energie haben als ihre Gegenstücke auf den Ketten mit Nächste-Nachbar-Potenzialen. Außerdem haben die langreichweitigen Potenziale den Effekt, Solitonen mit höheren Geschwindigkeiten $c_o \approx 1.07$ zu stabilisieren, die durch ihre relativ geringe Breite sehr bald (gemessen in t) in den Bereich $t_r \gg 1$ vorstoßen.

2.7 Simulationen

In diesem Kapitel geht es darum, die in Simulationen der verrauschten langreichweitigen FPU-Kette (2.7) gemessenen Positionsvarianzen von Solitonen mit verschiedenen Geschwindigkeiten c_o mit den analytischen Ergebnissen des letzten Abschnitts zu vergleichen.

Im Fall der exponentiellen Wechselwirkungen werden die Simulationsergebnisse mit der numerischen Lösung des Langevin-Systems (2.52) verglichen, um eventuelle Einflüsse der Vereinfachungen bei der stochastischen Störungsrechnung ausschließen zu können. Vergleiche mit dem Ergebnis der Störungsrechnungen zeigen kleine, aber merkliche Abweichungen. Im Fall der Lorentz-förmigen Solitonen zeigt das analytische Ergebnis (2.70) aus der Störungsrechnung einen Verlauf, der nahezu identisch zur numerischen Lösung des Langevin-Systems (2.62) ist. Deshalb wird in diesem Fall die in den Simulationen gemessene Positionsvarianz direkt mit den Ergebnissen (2.73) und (2.70) verglichen.

In dem darauf folgenden Abschnitt wird die Positionsvarianz von einem Lorentz-förmigen („algebraischen“) und einem *sech*-förmigen („exponentiellen“) Soliton gegenübergestellt, wobei durch die Wahl der Parameter J und α sichergestellt wird, dass die beiden Solitonen die gleiche Geschwindigkeit $v = 1.03 c$ und die gleiche Energie $H = 1.09$ zu Beginn der Simulation besitzen; sie sind in Abbildung 2.2 dargestellt. Eine Analyse der Resultate (2.68) und (2.73) für sehr lange Zeiten erklärt die in der Simulation festgestellten Unterschiede bezüglich der asymptotischen $t^{3/2}$ -Abhängigkeit der Positionsvarianz und den Einfluss der Solitonenform auf dieses universelle Verhalten.

Aber vorher soll mit einigen Bemerkungen zur Implementierung des Codes und der Erzeugung der Soliton-Lösungen als Anfangsbedingungen auf die prinzipielle Vorgehensweise bei der Numerik eingegangen werden.

2.7.1 Vorbemerkungen

Die Zeitintegration der Bewegungsgleichungen (2.7) wurde mit Hilfe des Heun-Algorithmus durchgeführt, der in der Vergangenheit bereits vielfach auf partielle Differentialgleichungen und Gittergleichungen in der Präsenz von additivem oder multiplikativem Rauschen angewendet wurde. Periodische Randbedingungen wurden benutzt, um lange Simulationszeiten von Systemen mit typischerweise $N = 3000$ Partikeln zu ermöglichen. Die Systeme waren dabei stets größer als der in den Simulationen verwendete Abschneidewert (cut-off value), bis zu dem die langreichweitigen Wechselwirkungen berücksichtigt wurden. Für exponentielle Wechselwirkungen lag der Wert beispielsweise bei $\text{INT}(50/\alpha)$. Da bei langreichweitigen Wechselwirkungen die benötigte CPU-Zeit zum Lösen des Systems quadratisch mit der Systemgröße N skaliert, ist der numerische Aufwand sehr viel größer als bei der FPU-Kette mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkung. Die Rechenzeit (bei einem Zeitschritt von $h = 0.01$) für einen Simulationslauf bis $t = 10000$ und einem $\alpha \approx 0.3$ beträgt auf einem 3 GHz Xeon-CPU etwa 24 Stunden. Um die Varianz des Solitonenortes zu messen, wurde die selbe Simulation 100 mal mit verschiedenen Zufallszahlen wiederholt. Die zu bewältigende Rechenzeit für die im folgenden dargestellten Simulationsläufe beträgt also mehrere 100 Tage, weshalb für diese Arbeit die Benutzung eines CPU-Clusters oder einer anderen parallelen Rechnerarchitektur unabdingbar war.

Für die Messung des Solitonenortes wurde eine Methode gewählt, die der Bestimmung des Schwerpunktes einer eindimensionalen Massenverteilung entspricht, wobei das Quadrat $w_i(t)^2$ der relativen Auslenkungsordinate am Ort i die Rolle einer Masse spielt:

$$X(t) = \frac{\sum_{i \in \mathcal{F}} i w_i(t)^2}{\sum_{i \in \mathcal{F}} w_i(t)^2} . \quad (2.74)$$

Durch die relativ massiven Soliton-Lösungen in der Präsenz langreichweitiger Wechselwirkungen ist das Solitonprofil trotz des verwendeten Rauschens stets klar erkennbar. Diese Methode der Ortsbestimmung ist einer Fit-Methode überlegen. Das trotz des Rauschens relativ glatte Stufenprofil

des Solitons in absoluten Auslenkungskoordinaten $u_n(t)$ wurde verwendet, um den Messbereich \mathcal{F} festzulegen. Eine Summierung über das ganze System würde für große N stets den Wert $N/2$ liefern. Die Breite des Solitons kann dagegen nur durch Anpassen der Datenpunkte an eine gewählte Formfunktion bestimmt werden.

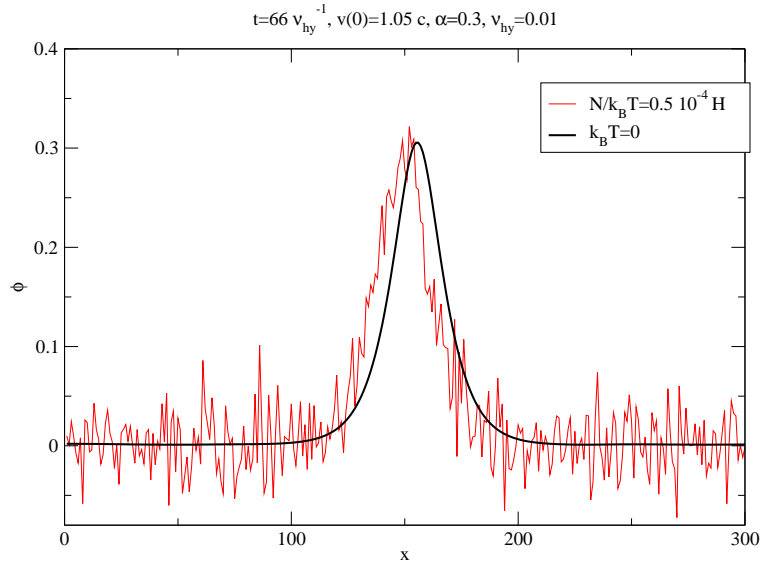


Abbildung 2.3: Simulationsergebnisse für die Positionsvarianz von Solitonen mit $c_o = 1.05$ auf einer anharmonischen Kette mit $J = 0.1$, $\alpha = 0.3$, $c = 1.51516$, $\nu_{hy} = 0.01$ mit $T = 0$ (schwarze Linie) und $T = 5 \cdot 10^{-5} H$ (rote Linie), wobei H die Energie der ungestörten Solitonen darstellt. Die beiden Solitonen zeigen nach einer Zeit von $66 \nu_{hy}^{-1}$ unterschiedliche Positionen.

In Abbildung 2.3 sind zwei Solitonen mit Startgeschwindigkeit $c_o = 1.05!c$ auf einer anharmonischen Kette mit Kac-Baker-Wechselwirkungen ($\alpha = 0.3$, $J = 0.1$) nach einer Zeit von $66 \nu_{hy}^{-1}$ zu sehen. Für ein Soliton (rote Linie) wurde neben der Dämpfung $\nu_{hy} = 0.01$ ein Rauschterm mit der Stärke $T = 5 \cdot 10^{-5} H$ angenommen, wobei H die Energie der ungestörten Solitonen entspricht. Im Vergleich mit dem Soliton auf der gedämpften Kette (schwarze Linie) ist neben der Fluktuationen in der Solitonenform deutlich eine räumliche Versetzung zwischen den beiden Solitonen zu erkennen. Zu Beginn der Simulation wird die Kette mit der Soliton-Lösung initialisiert, die sich aus der ungestörten Boussinesq-artigen Gleichung ergibt, die den Kontinuumslimites des behandelten Systems beschreibt. Regionen auf der Kette weit weg vom Soliton werden mit $w_i(0) = 0$ und $\dot{w}_i(0) = 0$ initialisiert. Da die Kette (ohne Soliton) in typischen Zeiten $\sim 1/\nu_{hy}$ thermalisiert, sollten Einschalteneffekte für die gewählten Simulationszeiten $t \approx 100/\nu_{hy}$ keine Rolle spielen.

Die Soliton-Lösungen für die exponentiellen langreichweitigen Wechselwirkungen sind in impliziter Form in [30] angegeben. Bei den hier gezeigten Simulationen wurden die Lösungen aber durch eine numerische Integration (siehe Anhang D) bestimmt, was einfacher zu implementieren ist. Im Anhang D wird gezeigt, dass die in [30] abgeleitete Solitonengleichung für die Anregungen mit $v \leq v_c$ auf eine Bernoullische Differentialgleichung zurückgeführt werden kann.

Für die algebraischen Solitonen werden die vorher erwähnten Lösungen der ungestörten Boussinesq-Hilbert-Gleichung (2.37) verwendet. Da diese ein Ergebnis der Kontinuumsnäherung darstellen, erhält man keine guten Resultate für relativ diskrete Solitonen mit $c_o \geq 1.03$. Deshalb sind in solchen Fällen relativ lange Simulationsläufe nötig, bis sich durch Abstrahlung von kleinamplitudigen

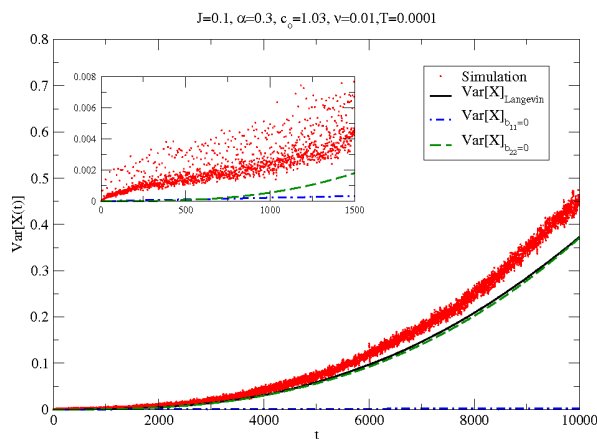
Störungen am Solitonenrumpf eine ungestörte Lösung des Systems (mit kleinerer Geschwindigkeit als $v(t=0)$) ergibt.

2.7.2 Kac-Baker-Wechselwirkungen

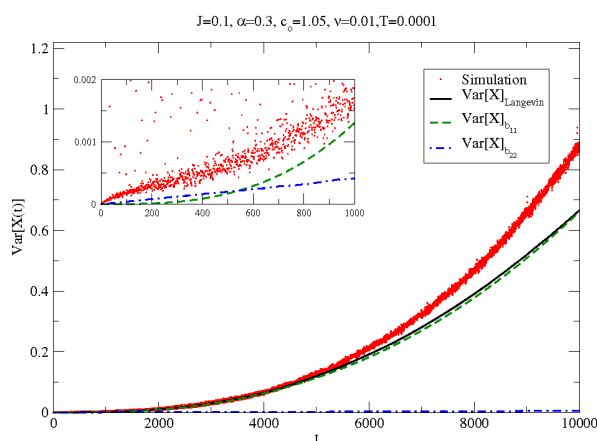
Da das Ergebnis der stochastischen Störungsrechnung erst durch die Näherung der deterministischen Solitonengeschwindigkeit (2.66) zu Stande gekommen ist, werden die Simulationsergebnisse mit der numerischen Lösung des Langevin-Systems (2.52) verglichen. Um die Rolle der Rauschterme ξ^1 und ξ^2 in (2.52), die die stochastischen Einflüsse auf die Solitonenform und Solitonenposition darstellen, besser unterscheiden zu können, werden zusätzlich die Varianzen $Var[X]_{b_{11}=0}$ und $Var[X]_{b_{22}=0}$ berechnet. Sie bezeichnen das Ergebnis aus der numerischen Lösung des Langevin-Systems, wenn der im Index erscheinende Diffusionskoeffizient per Hand zu Null gesetzt wird und die berechnete Positionsvarianz nur vom belassenen Prozess stammt. Obwohl die Positionsvarianz nicht in die Anteile $Var[X]_{b_{11}=0}$ und $Var[X]_{b_{22}=0}$ zerlegt werden kann, $Var[X]_{Langevin} \neq Var[X]_{b_{11}=0} + Var[X]_{b_{22}=0}$, zeigt ein Vergleich der beiden Terme deutlich, dass die Diffusion $Var[X]_{Langevin}$ der Gittersolitonen sehr stark vom Rauschen der Solitonenform dominiert wird ($Var[X]_{Langevin} \approx Var[X]_{b_{22}=0}$). Die Werte für α und J sind im folgenden immer so gewählt, dass sich eine konstante Schallgeschwindigkeit $c = 1.51516$ ergibt, was zur Folge hat, dass sich für größere Wechselwirkungsradien α^{-1} kleinere Werte für die Kopplung ergeben.

In Abbildung 2.4 ist die in den Simulationen gemessene Positionsvarianz und die Ergebnisse der numerischen Lösung des Langevin-Systems (2.52), $Var[X]_{Langevin}$, $Var[X]_{b_{11}=0}$ und $Var[X]_{b_{22}=0}$ für $\alpha = 0.3$ und $J = 0.1$ für drei verschiedene Solitonengeschwindigkeiten $c_o = \{1.03, 1.05, 1.07\}$ dargestellt. In Abbildung 2.5 sind die gleichen Ergebnisse für Solitonen auf einer Kette mit $\alpha = 0.2$ und $J = 0.046819$ gezeigt. Zum einen ist festzustellen, dass sich eine qualitativ sehr gute Übereinstimmung zwischen den Simulationsergebnissen und den Resultaten für $Var[X]_{Langevin}$ ergibt. Die Tatsache, dass die Übereinstimmung für den kleineren Wert $\alpha = 0.2$ besser ist als für den Wert $\alpha = 0.3$ spricht dafür, dass die betriebenen analytischen Rechnungen den Effekt der langreichweitigen Wechselwirkungen in der richtigen Weise widerspiegeln. Besonders der Einfluss der Formfluktuationen auf die Positionsvarianz, der zum Ergebnis $Var[X]_{b_{22}=0}$ führte, gibt die Simulationsergebnisse im Fall $\alpha = 0.2$ nahezu exakt wieder. Neben der guten Übereinstimmung für genügend große Zeiten fällt noch auf, dass der durch die Formschwankungen des Solitons verursachte superdiffusive Beitrag von $Var[X]_{b_{22}=0}$ praktisch identisch mit der Lösung $Var[X]_{Langevin}$ ist, was besonders im Fall der hochenergetischen Solitonen mit großem $c_o \geq 1.05$ zutrifft. Hier tritt die gute Übereinstimmung auch früher ein, was zu erwarten ist, da bei großen Werten γ_o (kleinen Breiten) die Zeitskala t_r schneller mit t anwächst.

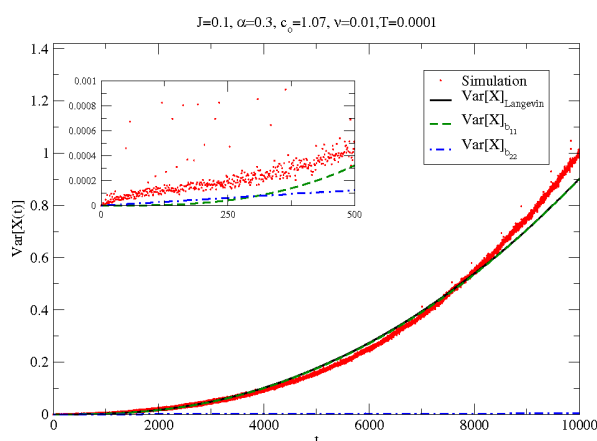
Die Tatsache, dass die theoretischen Werte tendenziell kleiner sind als die der Simulation, kann mit dem Argument begründet werden, dass in der Theorie keine Soliton-Phonon-Wechselwirkungen angenommen wurden. Diese führen aber in der Simulation zu größeren Positionsvarianzen, weil es dadurch zu zusätzlichen Ortsversetzungen des Solitons kommt. Diese Schlussfolgerung wurde auch schon in [22] gezogen und analytisch an Toda-Systemen nachgewiesen [24]. Insbesondere die Diskrepanzen zwischen den Simulationswerten und den Lösungen $Var[X]_{b_{11}=0}$ und $Var[X]_{b_{22}=0}$ für kleine Zeiten (siehe Insets von Abbildung 2.4 und 2.5) lassen auf Soliton-Phonon-Streuereignisse schließen. Die Werte von $Var[X]_{b_{22}=0}$ sind bei diesen Zeiten zu klein und ihr Verlauf zeigt eine andere Zeitabhängigkeit. Die Werte $Var[X]_{b_{11}=0}$, die vom Rauschterm ξ^2 verursacht werden, der direkt auf die Position wirkt, zeigen auch eine lineare Zeitabhängigkeit (wie die Werte der Simulationen für genügend kleine Zeiten), sind jedoch meist um einen Faktor zwei kleiner. Ähnliche Verläufe haben sich bei der Diffusion niederenergetischer Solitonen der FPU-Kette mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen für die gesamte Simulationszeit gezeigt. Mit Simulationen und durch Vergleich mit der Toda-Kette [22, 24] wurde gezeigt, dass der nichtdissipative Anteil der beobachteten Solitondiffusion auf Phononeneinflüsse zurückgeht.



(a)

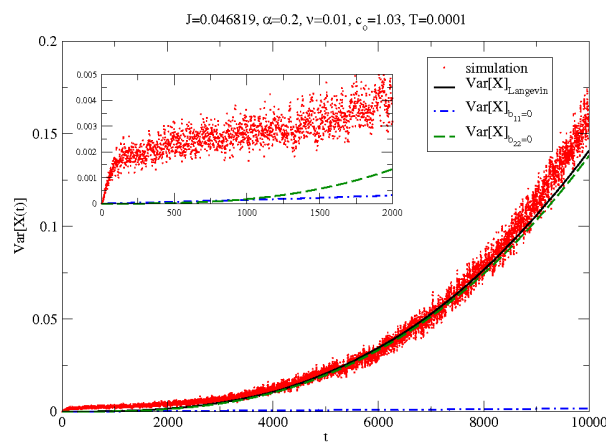


(b)

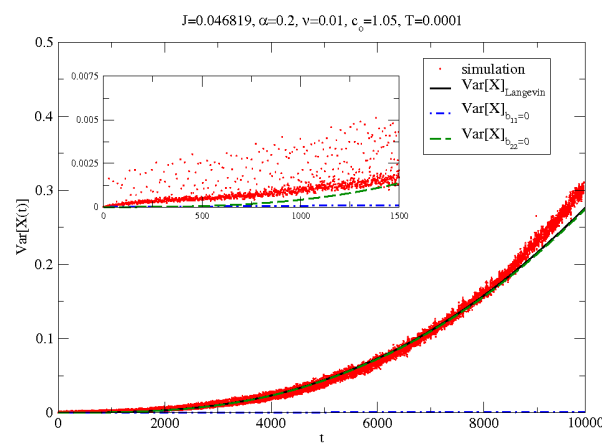


(c)

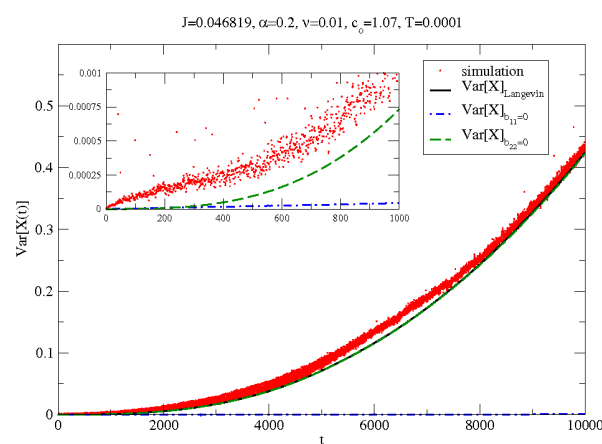
Abbildung 2.4: Simulationsergebnisse für die Positionsvarianz unterschiedlicher Solitonen ($c_o = 1.03$ in (a), $c_o = 1.05$ in (b) und $c_o = 1.07$ in (c)) auf einer Kette mit $J = 0.1$, $\alpha = 0.3$, $\nu_{hy} = 0.01$ und $T = 0.0001$. Die Ergebnisse $Var[X]_{b_{11}=0}$ und $Var[X]_{b_{22}=0}$ wurden durch (numerisches) Lösen des Systems (2.52) für $b_{11} = 0$ und $b_{22} = 0$ erhalten. Das Ergebnis für $Var[X]_{b_{22}=0}$ illustriert die Dominanz des superdiffusiven Mechanismus.



(a)



(b)



(c)

Abbildung 2.5: Simulationsergebnisse für die Positionsvarianz unterschiedlicher Solitonen ($c_o = 1.03$ in (a), $c_o = 1.05$ in (b) und $c_o = 1.07$ in (c)) auf einer anharmonischen Kette mit $J = 0.046819$, $\alpha = 0.2$, $\nu_{hy} = 0.01$ und $T = 0.0001$. Die Ergebnisse $Var[X]_{b_{11}=0}$ und $Var[X]_{b_{22}=0}$ wurden durch (numerisches) Lösen des Systems (2.52) für $b_{11} = 0$ und $b_{22} = 0$ erhalten. Das Ergebnis für $Var[X]_{b_{22}=0}$ illustriert die Dominanz des superdiffusiven Mechanismus. Das schnelle Anwachsen der Simulationsergebnisse in der Nähe von $t = 0$ in (a) stammt von Ungenauigkeiten bei der Positionsbestimmung (2.74) und ist typisch für relativ breite Solitonen.

Der superdiffusive Teil der Simulationsergebnisse kann stets sehr gut an quadratische und kubische Terme angepasst werden. Auf diese Beobachtung wird im nächsten Abschnitt weiter eingegangen. Sie ist konsistent mit den Beobachtungen in [22], wo als Korrektur zur normalen Solitonendiffusion ein quadratischer Beitrag erscheint, was besonders gut für schnellere KdV-artige Solitonen ($c_o \geq 1.007$) zu sehen ist. Dieser Geschwindigkeitsbereich entspricht im Fall der nicht-lokalen Boussinesq-Gleichung dem Bereich kleiner Geschwindigkeiten mit sehr breiten Soliton-Lösungen, die eher kollektive Anregungen des Systems darstellen (z.B. Abbildung 2.1 für $c_o = 1.01$). In diesem Bereich sind die superdiffusiven Beiträge sehr klein und es zeigt sich vorwiegend eine lineare Zeitabhängigkeit. Die Ergebnisse ähneln denen für die Solitonen in Abbildung 2.4 und 2.5 für kleine Zeiten, was dadurch erklärt werden kann, dass im Fall breiter Solitonen der Bereich kleiner Zeiten $t_r < 1$ (in dem die normale Diffusion vorherrscht) im ganzen Zeitbereich der Simulationen $t \leq 10000$ zutrifft.

Neben der numerischen Lösung des Langevin-Systems sei noch angemerkt, dass das Resultat der stochastischen Störungsrechnung $Var[X]_{small\ noise\ expansion}$ ebenfalls gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen und mit $Var[X]_{Langevin}$ erzielt. Anstatt mehrere Vergleiche mit den oben gezeigten Simulationswerten für $\alpha = 0.3$ und $\alpha = 0.2$ anzugeben, soll die Qualität der Übereinstimmung an einem typischen Beispiel demonstriert werden. In Abbildung 2.6 sind die Simulationsergebnisse für $\alpha = 0.2$ und $c_o = 1.03$ mit den Werten $Var[X]_{Langevin}$ und dem Ergebnis der Störungsrechnung abgebildet. Die Übereinstimmung ist für höhere Solitonengeschwindigkeiten c_o weniger gut, da die Werte $Var[X]_{small\ noise\ expansion}$ tendenziell zu groß sind. Die gleiche Tendenz findet sich später bei schnellen diskreten algebraischen Solitonen wieder. Für schmalere Solitonen scheint die Störungsrechnung in erster Ordnung nicht auszureichen, da die relativen Formschwankungen für schmalere Solitonen stärker sind.

Ein Vergleich mit dem Langzeitlimit $Var[X]_{inf}$ ist im Fall der hier gezeigten Solitonen wenig sinnvoll, da der Bereich $t_r \gg 1$ durch die großen Werte der Solitonenbreite γ_o^{-1} bei sehr viel größeren Zeiten $t \gg 10000$ liegt.

2.7.3 Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen

Die Theorie für die exponentiellen Kac-Baker-Wechselwirkungen gilt ebenfalls im Grenzfall der FPU-Kette mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen ($J = 0$), da in beiden Fällen der Kollektivvariablen-Ansatz eine gute Approximation der Solitonengestalt darstellt. Die Ergebnisse in diesem Fall stimmen gut mit den früheren Untersuchungen [22, 24, 27] überein. Der superdiffusive Mechanismus ist prinzipiell der gleiche. Doch da die Solitonen der FPU-Kette wesentlich schmaler sind (siehe Abbildung 2.1), verhindern Diskretheitseffekte vergleichbar hohe Solitonengeschwindigkeiten wie im Fall langreichweitiger Wechselwirkungen. Bei den KdV-artigen Solitonen in [22] ist die normale Diffusion dominierend für kleine Solitonengeschwindigkeiten von etwa $c_o = 1.005$, da die superdiffusiven Effekte erst bei Zeiten auftreten, bei denen niederenergetische Solitonen bereits vom Rauschen und der Dämpfung zerstört wurden. Für größere Geschwindigkeiten wie $c_o = 1.01$ oder $c_o = 1.02$ dominieren bereits superdiffusive Effekte (siehe Abbildung 2.7).

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Solitonen auf Ketten mit langreichweitigen Wechselwirkungen stärker von superdiffusiven Effekten kontrolliert werden, da für sie höhere Geschwindigkeiten und längere Lebensdauern möglich sind.

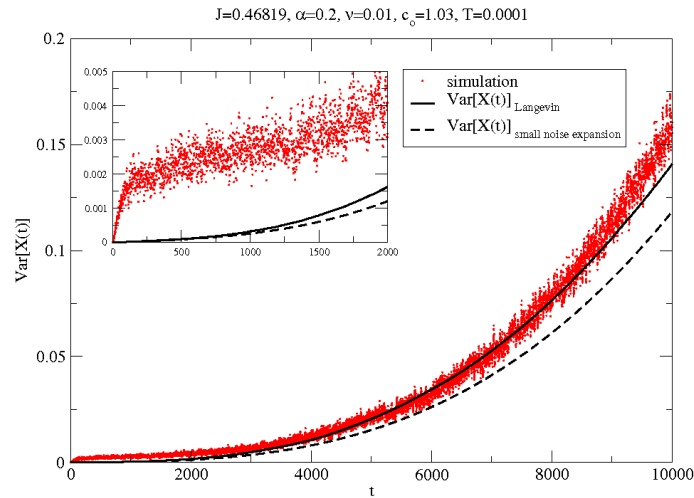


Abbildung 2.6: Simulationsergebnisse für die Positionsvarianz eines Solitons mit $c_o = 1.03$ auf einer anharmonischen Kette mit $J = 0.046819$, $\alpha = 0.2$, $c = 1.51516$, $\nu_{hy} = 0.01$ und $T = 0.0001$. Die Ergebnisse stimmen gut mit der numerischen Lösung des Langevin-Systems (2.52) überein. Das Ergebnis der stochastischen Störungsrechnung reproduziert die Werte der numerischen Lösung des Langevin-Systems qualitativ gut.

2.7.4 Potenzartige Wechselwirkungen

Für die Simulationen der anharmonischen Kette mit potenzartig abfallenden langreichweitigen Wechselwirkungen wurden die Parameter $J = 0.7877$, $T = 0.0001$ und $\nu_{hy} = 0.01$ gewählt, damit die Schallgeschwindigkeit $c = 1.51516$ und die Dämpfungs- und Rauschstärke die gleiche ist wie im Fall der Kac-Baker-Wechselwirkungen. Da wegen der Festlegung auf $s = 4$ kein langreichweitiger Parameter (wie α) zur Variation des Wechselwirkungsradius zur Verfügung steht, ist als einziger Parameter die Solitonengeschwindigkeit frei wählbar. Wie bereits in Abbildung 2.2 zu sehen ist, führen die Kac-Baker-Wechselwirkungen zu tendenziell breiteren Solitonen. Für $c_o = 1.01$ ergibt sich eine deutlich schmalere und höhere Soliton-Lösung als für ein energetisch äquivalentes exponentielles Soliton.

Bei den Lorentz-förmigen Solitonen erhält man für $c_o = 1.03$ ($\sigma_o \approx 0.3$) bereits eine relativ diskrete Anregung. Es gelang in den Simulationen nicht, Solitonen mit höheren Geschwindigkeiten zu generieren, aber für diese Anregungen wäre eine Kontinuumsbeschreibung sowieso stark fehlerbehaftet. In der Abbildung 2.8 werden die Ergebnisse aus den Simulationen für $c_o = 1.01$ und $c_o = 1.03$ mit dem Resultat der Störungsrechnung (2.70) verglichen. In beiden Fällen ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den Simulationsergebnissen und $Var[X]_{small\ noise\ expansion}$. Wie bereits im Fall der Kac-Baker-Wechselwirkungen erwähnt, erwartet man aus den Langevin-Systemen für die Positionsvarianz kleinere Werte als die in den Simulationen gemessenen, weil in der Theorie keine Soliton-Phonon-Wechselwirkungen berücksichtigt sind. Die in den Simulationsergebnissen bei kleinen Zeiten vorkommenden Diskrepanzen mit dem analytischen Resultat (z.B. für $c_o = 1.01$) kommen wohl durch diesen Effekt zustande. Dafür spricht, dass man dieses Problem gleichermaßen für exponentielle Solitonen feststellt [22, 24]. Die im Fall von $c_o = 1.03$ beobachteten, tendenziell zu großen Werte für $Var[X]_{small\ noise\ expansion}$ lassen sich durch die diskrete Struktur dieses Solitons

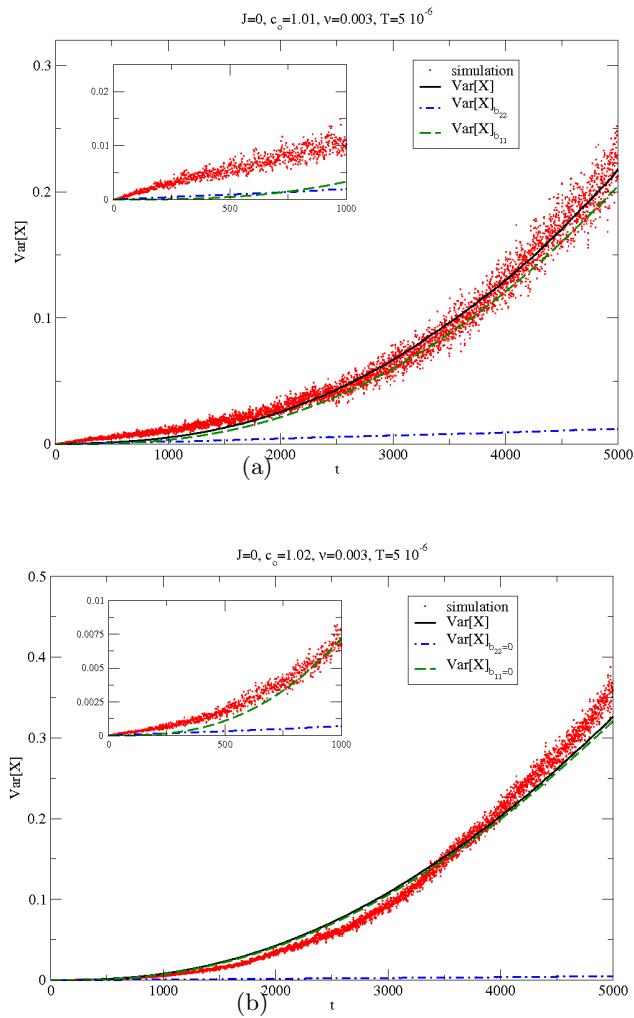


Abbildung 2.7: Positionsvarianz für unterschiedliche Solitonengeschwindigkeiten ($c_o = 1.01$ in (a) und $c_o = 1.02$ in (b)) auf einer Kette mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen ($J = 0, c = 1$) und $\nu_{hy} = 0.003$ und $T = 5 \cdot 10^{-6}$.

begründen. Dieses Verhalten wurde ebenfalls bei relativ diskreten Solitonen auf Ketten mit Kac-Baker-Wechselwirkungen beobachtet und ist typisch für stark fluktuierenden Solitonen wegen der Beschränkung auf die Korrekturen in erster Ordnung in der stochastischen Störungsrechnung. Die

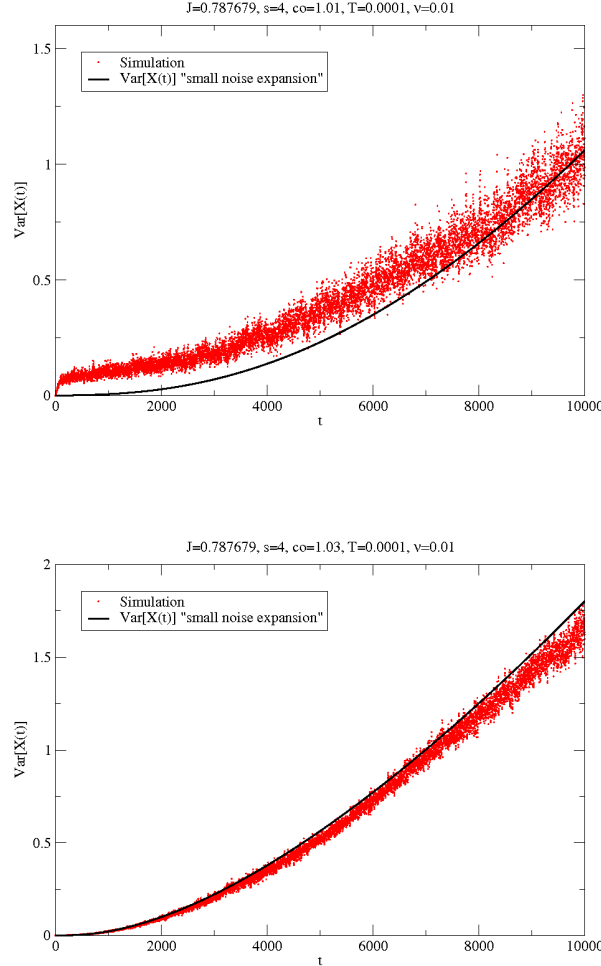


Abbildung 2.8: Positionsvarianz für ein Soliton mit $c_o = 1.01$ und $c_o = 1.03$ auf der anharmonischen Kette mit potenzartig abfallenden langreichweitigen Wechselwirkungen ($J = 0.7877$, $s = 4$). Es wird das Resultat der Störungsrechnung (2.70) mit den Simulationsergebnissen verglichen.

Tatsache, dass das Soliton sein Langzeitverhalten erst für große Zeiten $t_r \gg 1$ erreicht, hat bei den exponentiellen Solitonen einen direkten Nachweis der $t^{3/2}$ -Charakteristik in den Simulationen verhindert. Im Fall der schmalen algebraischen Solitonen besteht die Möglichkeit, diese Vorhersage der Theorie innerhalb der bisher verwendeten Simulationszeiten $t = 10000$ zu testen. Da für das Soliton mit $c_o = 1.03$ ($\sigma_o \approx 0.3$) $t_r = 1$ für $t \approx 1111$ gilt, ist zwar für $t \leq 10000$ noch keine sehr gute Übereinstimmung mit $\text{Var}[X]_{inf}$ (2.73) zu erwarten. Man kann aber in Abbildung 2.9 deutlich sehen, dass sich die Simulationsergebnisse (von unten) an das Resultat des Langzeitlimes $\text{Var}[X]_{inf}$ annähern.

Bei dieser Gelegenheit sei angemerkt, dass der Ausdruck $\text{Var}[X]_h$

$$\text{Var}[X(t)]_h \approx \frac{D}{60c^2v_{hy}^2\pi\sigma_o^3v^2} \frac{t_r^3}{t_r^{1.5} + 1.5\sqrt{t_r}}, \quad (2.75)$$

auf den man im Zuge der Ableitung des Ergebnisses $Var[X]_{inf}$ stößt, eine im ganzen Zeitbereich $t \leq 10000$ ausgezeichnete Approximation der Simulationsergebnisse darstellt. Im Fall der exponentiellen Solitonen findet man eine ähnlich gute Übereinstimmung durch die Anpassung eines kubischen Polynoms an die Simulationsergebnisse.

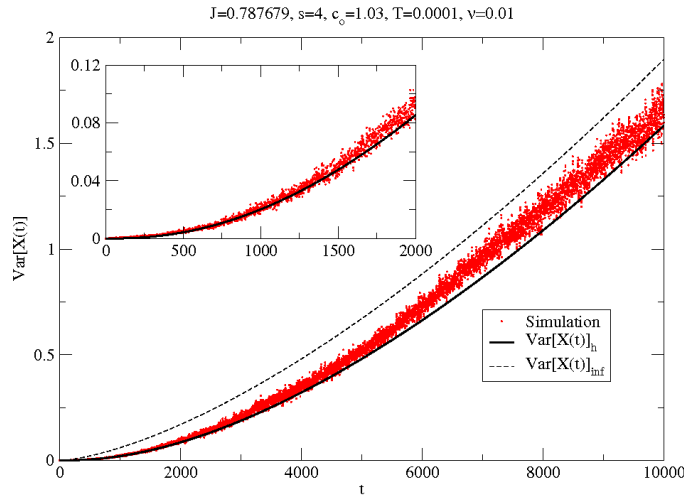


Abbildung 2.9: Die Positionsvarianz für ein Hochgeschwindigkeitssoliton ($c_o = 1.03$) auf der anharmonischen Kette mit potenzartig abfallenden langreichweitigen Wechselwirkungen ($J = 0.7877$, $s = 4$). Es sind die Simulationsergebnisse und die zwei verschiedenen Langzeitnäherungen für (2.70) $Var[X(t)]_{inf}$ (2.73) und $Var[X(t)]_h$ (2.75) dargestellt. Für Zeiten $t \approx 10000$ ($t_r \approx 9$) ist das Langzeitverhalten noch nicht erreicht, aber die Simulationsergebnisse nähern sich dem Resultat $Var[X(t)]_{inf}$ deutlich an, wohingegen $Var[X(t)]_h$ im ganzen Zeitbereich eine ausgezeichnete Approximation darstellt.

2.7.5 Einfluss der Solitonenform

Solitonen auf Ketten mit langreichweitigen Wechselwirkungen sind energiereicher als die Solitonen der FPU-Kette und zeichnen sich sogar in der Gegenwart von thermischen Fluktuationen und Dämpfung durch eine lange Lebensdauer aus. Die breiten Solitonen mit niedrigen Geschwindigkeiten werden kaum von der Dämpfung beeinflusst, da die Partikel im Solitonenprofil nur geringe relative Geschwindigkeiten $\dot{w}_i(t)$ haben.

Die wichtigste Reaktion auf das thermische Rauschen stellt die Superdiffusion der Solitonen dar, die durch Fluktuationen der inversen Solitonenbreite über den Driftkoeffizienten v_d auf die Solitonenposition wirkt. Da die Superdiffusion (die sehr gut von den Langevin-Systemen beschrieben wird) nach diesen Überlegungen stark von der Solitongeschwindigkeit v_d abhängt, liegt es nahe zu vermuten, dass sie primär von der Solitonenform kontrolliert wird. Diese Vermutung wurde in den Simulationen bestätigt. Im Fall der exponentiellen Solitonen lassen sich die Simulationsergebnisse sehr gut an ein kubisches Polynom anpassen, wohingegen der Verlauf der Positionsvarianz der algebraischen Solitonen sehr gut durch $Var[X]_h$ (2.75) wiedergegeben wird (Abbildung 2.10). Dabei ist zu beachten, dass es sich in der Abbildung 2.10 um Verläufe der Positionsvarianzen energetisch äquivalenter Solitonen mit $c_o = 1.03$ unter gleich starker Störung handelt. Die Positionsvarianz des algebraischen Solitons folgt nach einiger Zeit dem $t^{3/2}$ -Verlauf, wohingegen beim exponentiellen

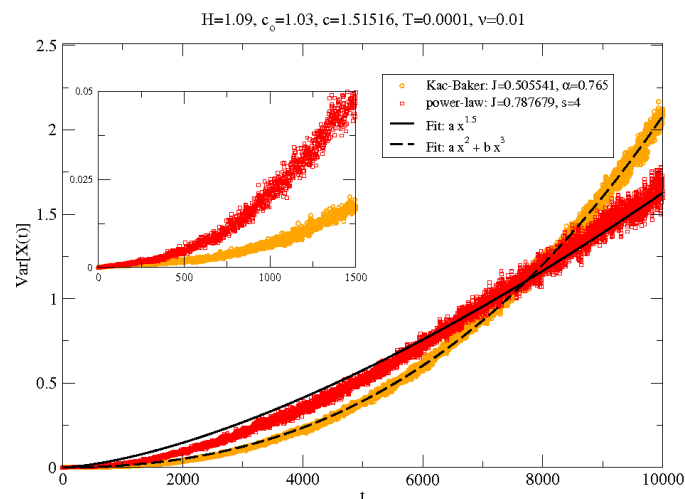


Abbildung 2.10: Simulationsergebnisse für die Positionsvarianz von zwei Solitonen, wobei das eine eine Lösung für die anharmonische Kette mit potenzartigen langreichweitigen Wechselwirkungen ($J = 0.7877$, $s = 4$) und das andere eine Lösung für die anharmonische Kette mit Kac-Baker-Wechselwirkungen darstellt. In beiden Fällen wurde die Temperatur und die Dämpfung auf $T = 0.0001$ und $\nu_{hy} = 0.01$ festgelegt. Der Wechselwirkungsradius $\alpha^{-1} = 0.765^{-1}$ und die Koppelstärke $J = 0.505541$ wurde so gewählt, dass die Geschwindigkeit $c_o = 1.03$ und die Energie $H = 1.09$ des exponentiellen Solitons denen des Lorentz-förmigen Solitons entsprechen. Um die unterschiedliche Zeitabhängigkeit der Positionsvarianz der beiden Solitonen zu unterstreichen, wurden die Werte $Var[X(t)]$ an Kurven mit unterschiedlicher Zeitabhängigkeit angepasst. Man kann deutlich sehen, dass die Ergebnisse für das Lorentz-förmige Soliton (für große Zeiten) auf eine $t^{3/2}$ -Abhängigkeit hinweisen, während die Positionsvarianz des exponentiellen Solitons sehr gut durch quadratische und kubische Terme dargestellt werden kann.

Soliton ein stärkerer Anstieg vorherrscht, der ab $t > 8000$ zu größeren Werten der Positionsvarianz führt. Für beide Solitonen sollte sich laut dem Resultat der Störungsrechnung $Var[X]_{inf}$ für genügend lange Zeiten (wenn $t_r \gg 1$ gilt) eine $t^{3/2}$ -Abhängigkeit ergeben. Da das exponentielle Soliton deutlich breiter ist als das algebraische ($\gamma_o = 0.132 < \sigma_o = 0.297$), ist es nicht überraschend, dass der Grenzfall $t_r \gg 1$ erst nach wesentlich längeren Zeiten t eintritt.

Das unterschiedliche Verhalten der beiden Solitonen spiegelt sich auch in ihrer Geschwindigkeit wieder. Trotz des gleichen Startwerts und des identischen thermischen und dissipativen Umfelds zeigt die in der Simulation gemessene mittlere Geschwindigkeit der Solitonen sehr unterschiedliche Verläufe (Abbildung 2.11). Der Grund dafür ist die stärkere Abhängigkeit der Geschwindigkeit v_d vom Quadrat der inversen Solitonenbreite im Kac-Baker-Fall und der unterschiedlichen Solitonenbreiten γ_o bzw. σ_o bei $t = 0$. Es sind in Abbildung 2.11 zusätzlich die analytischen Ergebnisse für v_d in nullter Ordnung $v_d(\gamma^{(0)}(t))$ bzw. $v_d(\sigma^{(0)}(t))$ eingezeichnet, die die Geschwindigkeit der gedämpften Solitonen beschreiben. In einzelnen Realisierungen können sich die Werte von $\gamma(t)$ bzw. $\sigma(t)$ und somit die Werte für \dot{X} sehr stark von den Ergebnissen in nullter Ordnung unterscheiden. Durch die Mittelung zeigt sich aber, dass sich für $\langle \dot{X} \rangle$ ein ähnlicher Verlauf wie der von $v_d(\gamma^{(0)}(t))$ bzw. $v_d(\sigma^{(0)}(t))$ ergibt. Die Form der Solitonen und die dadurch festgelegte Solitonengeschwindigkeit kann als der entscheidende Grund für die beobachteten unterschiedlichen zeitlichen Verläufe von $Var[X]$ und $\langle \dot{X} \rangle$ ausgemacht werden.

Um das Diffusionsverhalten der exponentiellen Solitonen für große Zeiten zu untersuchen, wird im folgenden das Resultat der stochastischen Störungsrechnung verwendet, da Simulationen für den Zeitbereich $t > 10^4$ zu zeitaufwendig sind. Werden die Ergebnisse $Var[X]_{small\ noise\ expansion}$ und $Var[X]_{inf}$ der beiden Solitonen für lange Zeiten auf einer doppelt-logarithmischen Skala abgebildet (Abbildung 2.12), fällt sofort auf, dass die exponentiellen Solitonen erst wesentlich später den Bereich mit der typischen $t^{3/2}$ -Abhängigkeit der Positionsvarianz erreichen. Die exponentiellen Solitonen erreichen im Langzeitlimit höhere Positionsvarianzen, weil die Diffusionskonstante in (2.68) um etwa einen Faktor π größer ist als für algebraische Solitonen (2.73).

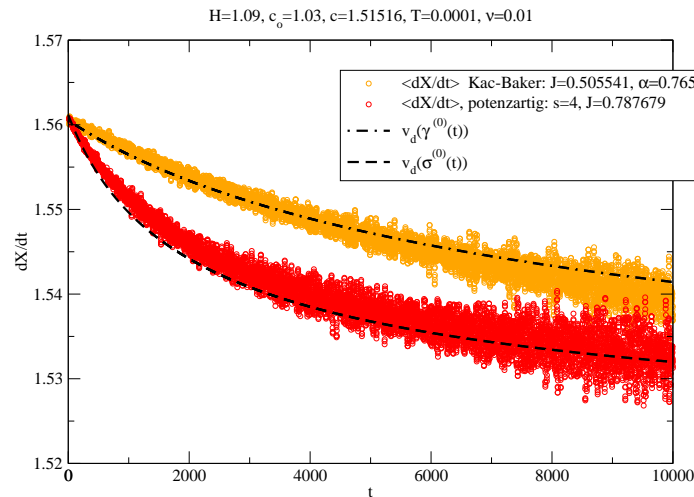


Abbildung 2.11: Simulationsergebnisse für die mittlere Solitonengeschwindigkeit $\langle \dot{X} \rangle$ im Fall einer gestörten Kette mit $T = 0.0001$ für energetisch gleichwertige algebraische oder exponentielle Solitonen mit $c_o = 1.03$. Die Resultate in nullter Ordnung (ohne Rauschen) der Störungsrechnung für die Solitonengeschwindigkeit $v_d(\sigma^{(0)}(t))$ und $v_d(\gamma^{(0)}(t))$ stimmen gut mit den Simulationsergebnissen überein und demonstrieren die Unterschiede zwischen den beiden Solitonentypen hinsichtlich des Einflusses der Solitonenformen auf ihre Geschwindigkeiten.

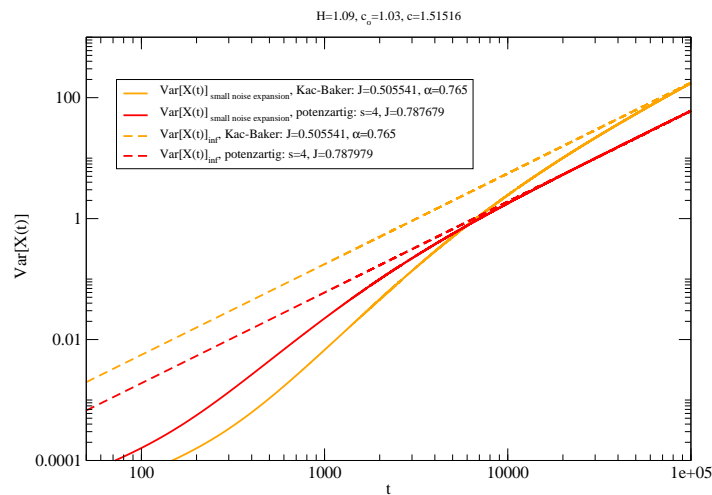


Abbildung 2.12: $Var[X(t)]$ und $Var[X(t)]_{inf}$ aus der stochastischen Störungsrechnung für die beiden Solitonen aus der Abbildung 2.10. Algebraische Solitonen erreichen das Langzeitverhalten $Var[X(t)]_{inf}$ wesentlich schneller als exponentielle Solitonen mit der gleichen Energie ($H = 1.09$) und Geschwindigkeit ($c_o = 1.03$). Das Ergebnis $Var[X(t)]_{inf}$ zeigt für beide Solitonentypen die gleiche Zeitabhängigkeit, aber die Diffusionskonstante für Lorentz-förmige Solitonen ist ungefähr um einen Faktor π kleiner.

2.8 Zusammenfassung und Ausblick

Die Simulationen und die in der Kontinuumsnäherung gemachten analytischen Berechnungen weisen darauf hin, dass die Diffusion der Solitonen und die von der Dämpfung verursachte Restrukturierung der Solitonenform von der Zeitskala t_r abhängen, die proportional zum Dämpfungskoeffizienten und zur dritten Potenz der inversen Solitonenbreite ist. Die Dynamik von sehr breiten Solitonen ist daher träger als die der schmalen Hochgeschwindigkeitssolitonen. Anschaulich wird dieser Zusammenhang sofort klar, denn bei einem ausgedehnten Solitonenprofil haben benachbarte Teilchen sehr kleine relative Geschwindigkeiten und werden deshalb nur sehr schwach von der Dämpfung beeinflusst. Der Einfluss des Rauschens ist ebenfalls für schmalere Solitonen stärker. Der Diffusionsterm b_{11} in den Langevin-Systemen wächst mit großen Werten der inversen Breite. In den Simulationen ist auch deutlich zu erkennen, dass bei schmalen Solitonen das Solitonenprofil stärker fluktuiert als bei breiteren Anregungen. Da die Fluktuationen der Solitonenform bei den relativ massiven Solitonen in der Gegenwart langreichweitiger Wechselwirkungen (und die dadurch fluktuierende Solitonengeschwindigkeit v_d) den deutlich dominierenden Beitrag zur gesamten Positionsvarianz liefern, sollte die Form der Solitonen und der daraus resultierende Ausdruck für v_d die Solitonendiffusion maßgeblich bestimmen. Es zeigt sich in den Simulationen und in den analytischen Ergebnissen, dass für kleine Zeiten $t_r \sim 1$ deutliche Unterschiede im Zeitverhalten der betrachteten Lorentz-förmigen und *sech*-förmigen Solitonen zu sehen sind. Im Langzeitlimit tendieren aber beide Solitonentypen in ihrer Positionsvarianz zur einer $t^{3/2}$ -Abhängigkeit, wobei sich die *sech*-förmigen Solitonen durch eine um π höhere Diffusionskonstante von den Lorentz-förmigen Solitonen unterscheiden. Diese Asymptotik wird aber bei den *sech*-förmigen Solitonen erst nach wesentlich längeren Zeiten erreicht, was sich wiederum anhand der für die Solitonendynamik maßgeblichen Zeitskala t_r verstehen lässt.

Abgesehen von den Details der Solitonendiffusion ist an dieser Untersuchung besonders bemerkenswert, dass langreichweitige Wechselwirkungen die Solitonen energetisch stabilisieren und ihnen sehr viel längere Lebensdauern verleihen als ihren Verwandten in den FPU-Ketten. Selbst für sehr kleine Kopplungskonstanten J erhält man diese robusten Energiepulse, die vielversprechende Kandidaten für den Energietransport in Biomolekülen sein könnten. Bei der Klärung dieser Frage könnten die gefundenen analytischen Resultate hilfreich sein, obwohl die anharmonische Kette eine starke Vereinfachung echter Moleküle darstellt. Realistischere Modelle für Biomoleküle, bei denen z.B. die Geometrie der Molekülketten berücksichtigt wird [36], sind nur noch numerisch handhabbar.

Vom theoretischen Standpunkt wären sicherlich weitere Untersuchungen an anderen Systemen oder mit anderen Anregungen, wie etwa den diskreten Brethern, interessant, um zu testen, ob sich auch dort die charakteristische Zeitabhängigkeit von $Var[X] \sim t^{3/2}$ findet. Simulationsergebnisse in FPU-Ketten weisen interessanterweise auf das gleiche Zeitverhalten für die Ortsvarianz von hochamplitudigen diskreten Breather-Lösungen hin [63]. Diese Abhängigkeit scheint sehr fundamental zu sein, weil sie für verschiedene Kraftkonstanten und Temperaturen der FPU-Kette beobachtet wurde. Im Gegensatz zu der Rechnung hier wird in dieser Arbeit aber auf die Streuprozesse mit niederamplitudigen Brethern/Phononen als Hauptgrund für das superdiffusive Verhalten verwiesen [63].

2.9 Anmerkungen

In der Physik ist es wichtig, die bei einer Arbeit benutzten Konzepte und die gefundenen Effekte im größeren Zusammenhang zu sehen, wodurch sich evtl. neue Aspekte ergeben. Mit den modernen technischen Möglichkeiten bei Austausch oder Archivierung der zahlreichen Ergebnisse in der Grundlagenforschung kommt der Literaturrecherche ein großer Stellenwert zu, besonders im Hinblick auf die seit mehreren Jahrzehnten weltweit wachsenden Anzahl von Universitäten und Forschungszentren. In den Naturwissenschaften gibt es viele bekannte Beispiele, wie etwa die Formulierung des Periodensystems der Elemente, die belegen, dass oftmals mehrere Wissenschaftler gleichzeitig am gleichen Problem arbeiten, ohne voneinander zu wissen. Deshalb soll zum Abschluss des Kapitels noch kurz auf die bestehende Literatur zu zentralen Begriffen wie der anomalen Diffusion und der Störung von FPU-Systemen eingegangen werden.

2.9.1 Anomale Diffusion

Was man unter dem Begriff Diffusion normalerweise versteht, geht auf eine der vier im Jahre 1905 veröffentlichten Arbeiten von Albert Einstein zurück. Die Veröffentlichung, die den Titel „Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen“ trägt, erklärt die Entdeckung von der Zitterbewegung kleiner Partikel in Wasser durch den Schotten Robert Brown im Jahre 1827, und begründet auf diese Weise die probabilistische Formulierung der Statistischen Mechanik (siehe Referenzen in [64]). Diese Veröffentlichung leitet eine Beziehung zwischen der Diffusionskonstante der Teilchen und der Viskosität der Flüssigkeit ab, was später in den 50er Jahren zum berühmten Fluktuations-Dissipations-Theorem verallgemeinert wurde. Das entscheidende Ergebnis zum Diffusionsverhalten der Partikel ist, dass die mittlere quadratische Abweichung (und die Varianz) der Partikel linear in der Zeit anwächst. Seit dieser Zeit haben sich in Mathematik und Physik viele neue wichtige Konzepte entwickelt, wie etwa die Fluktuationstheoreme der Nichtgleichgewichtsthermodynamik, Quanten-Brownsche-Bewegung, die Dynamik nicht-markovscher Prozesse, die Stochastische Resonanz, Brownsche Motoren oder Erweiterungen wie die fraktale Brownsche Bewegung und generalisierte Langevin- und Fokker-Planck-Gleichungen. Das Erscheinen von anomaler Diffusion, also eine vom linearen Zeitverhalten abweichende Positionsvarianz, hängt insbesondere mit den letztgenannten Punkten zusammen; ein aktueller Artikel der diese Ergebnisse zusammenfasst ist [65]. Seit den ersten Beobachtungen von anomaler Diffusion in turbulenten Strömungen und amorphen Halbleitern ist die Anzahl der Systeme mit anomalen Diffusionseigenschaften mittlerweile so groß, dass die normale Diffusion eigentlich als die Ausnahme von der Regel betrachtet werden müsste. Viele natürliche Prozesse zeichnen sich etwa durch eine divergierende charakteristische Wartezeit (bei endlicher mittlerer quadratischer Schrittweite) aus, was an einer nichtintegrierbaren Form der Wartezeit-Wahrscheinlichkeitsverteilung liegt und zu fraktalen Diffusionsgleichungen und Subdiffusion führt. Die bekanntesten Beispiele sind Ladungsträgertransport in amorphen Halbleitern oder die Dynamik von Polymeren, Gläsern und Biomolekülen. Bei endlicher charakteristischer Wartezeit, aber divergierender mittlerer quadratischer Schrittweite ergeben sich die sogenannten Lévy-Flüge (Lévy-flights) mit ihrem typisch superdiffusiven Zeitverhalten. Solches Verhalten ist aus der turbulenten Richardson-Diffusion, der Einzelmolekülspektroskopie, bakterieller Bewegungen oder aus sozio-physikalischen Fragestellungen wie der Ausbreitung von Epidemien durch den globalen Flugverkehr [66] bekannt.

Um in diesem Zusammenhang wieder auf die vorher erwähnten Proteine zurückzukommen, sei angemerkt, dass anomales Diffusionsverhalten einer der Eckpfeiler der Funktionsweise von Proteinen ist. Mössbauerspektroskopie an der Hämo-Gruppe von Proteinen wie Myoglobin, einem Verwandten des Hämoglobins, zeigt deutlich, dass Proteindynamik bei physiologischen Temperaturen sehr von räumlicher Diffusion der einzelnen Molekülgruppen abhängt. Durch diese öffnen

sich auf kurzen Zeitskalen Reaktionspfade für O_2 -Moleküle, die an das Eisen der Häm-Gruppe anbinden. Man sieht in den Experimenten deutlich, dass nichtlineare Effekte bei physiologischen Temperaturen eine Rolle spielen [67]. Die theoretische Modellierung arbeitet häufig mit generalisierten Langevin-Gleichungen [68]. In einer anderen Arbeit, bei der es um Elektronenaustausch zwischen Molekülgruppen eines Proteins geht, ist die Theorie mit generalisierten Langevin-Gleichungen in der Lage, qualitativ gute Übereinstimmungen mit experimentellen Befunden der Einzelmolekülspektroskopie zu erzielen [69].

2.9.2 Getriebene FPU-Systeme

Der hier betrachtete thermische Rauschterm wurde durch die möglichen Funktionen von Solitonen in Biomolekülen motiviert. Es soll erwähnt werden, dass eine andere große Klasse von Störtermen, nämlich zeitlich periodische Störungen der anharmonischen Ketten auch zu sehr interessanten Effekten führen können, die ebenfalls durch biologische Fragestellungen motiviert sind. In den letzten Jahren wurden z.B. viele Untersuchungen (bevorzugt in Klein-Gordon-Systemen) zum sogenannten Ratschen-Effekt (ratchet effect) gemacht, bei dem die von Teilchen in asymmetrischen periodischen Potenzialen bekannte gerichtete Bewegung unter Einfluss solcher Kräfte auf solitäre Anregungen übertragen wurde [70]. Dabei geht es besonders um die Modellierung von molekularen Motoren [71]. Aber auch bei diskreten nichtlinearen Schrödingersystemen wurde dieser Effekt theoretisch nachgewiesen [72] und könnte für experimentell beobachtbare diskrete Hohlraumsolitonen (cavity solitons) wichtig sein, die zum Beispiel in Halbleiter-Aushöhlungen oder optisch nichtlinearen Medien vorkommen. An der FPU-Kette sind ebenfalls viele Untersuchungen mit Antriebstermen unternommen worden. Generell lässt sich sagen, dass die Existenz von FPU-Solitonen in Anwesenheit solcher Störungen sehr eingeschränkt ist [73], wohingegen sich diskrete Breather als stabiler erwiesen haben [74]. Anharmonische FPU-artige Gitter mit realistischen langreichweitigen Wechselwirkungspotenzialen beschreiben die Erzeugung von diskreten Breather-Moden, wie z.B. durch gepulsten Laserbeschuss des Ferroelektrikums $LiNbO_3$ geschehen [34]. Ein weiterer interessanter Effekt in getriebenen nichtlinearen Systemen ist die Supratransmission, bei der ab einer bestimmten Antriebsamplitude diskrete Solitonen an den getriebenen Rändern der FPU-Kette [75] oder des DNLS-Systems [76] erzeugt werden und ballistisch durch das System propagieren. Eine ähnliche Entdeckung in Bezug auf die anfangs vorgestellte Proteindynamik wurde in [77] diskutiert, wo aufgrund der Asymmetrie der Helices von Proteinen ein Ratschen-Effekt vorhergesagt wurde.

Literaturverzeichnis: Kapitel 2

- [1] E. Fermi, J.R. Pasta, and S.M. Ulam, Studies of nonlinear problems, Los Alamos Sci. Lab. Rep., LA-1940 (1955)
- [2] D.K. Campbell, P. Rosenau, and G.M. Zaslavsky, *Chaos* **15**, 015101 (2005)
- [3] M. Peyrard, *Nonlinearity* **17**, R1 (2004)
- [4] L. V. Yakushevich, *J. Biosci.* **26**, 305 (2001)
- [5] T. Dauxois and M. Peyrard, *Physics of Solitons*, Cambridge University Press (2005)
- [6] A.C. Scott, *Physics Reports* **217**, 1-67 (1992)
- [7] S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, Yu.B. Gaididei, M. Johansson and K.Ø. Rasmussen, *J. of Biological Physics* **25**, 41 (1999)
- [8] C.H. Choi, G. Kalosakas, K.Ø. Rasmussen, M. Hiromura, A. R. Bishop, and A. Usheva, *Nucleic Acids Res.* **32**, 1584
- [9] A.S. Davydov, *Solitons in Molecular Systems*, Reidel (1985)
- [10] P.S. Lomdahl, S.P. Layne, and I.J. Bigio, Los Alamos Science, Spring 1984, pp. 4-21
- [11] J. Edler, P. Hamm, and A.C. Scott, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067403 (2002)
- [12] J. Edler, R. Pfister, V. Pouthier, C. Falvo, and P. Hamm, *Phys. Lett.* **93**, 106405 (2004)
- [13] S. Yomosa, *Phys. Rev. A* **32**, 1752 (1985)
- [14] P.S. Lomdahl, O.H. Olsen, and M.R. Samuelsen, *Phys. Lett. A* **152**, 343 (1991)
- [15] P.L. Christiansen, A.V. Zolotaryuk, and A.V. Savin, *Phys. Rev. E* **56**, 877 (1997)
- [16] A. Xie, L. van der Meer, W. Hoff, and R.H. Austin, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5435 (2000)
- [17] A. Xie, A.F.G. van der Meer, and R.H. Austin, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 018102-1 (2002)
- [18] F. d'Ovidio, H.G. Bohr, and P. Lindgård, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, s1699 (2003)
- [19] F. d'Ovidio, H.G. Bohr, and P. Lindgård, *Phys. Rev. E* **71**, 026606 (2005)
- [20] S.H. Lee and S. Krimm, *Biopolymers* **46**, 283 (1998)
- [21] A.E. Sitnitsky: arxiv:cond-mat/0306135

-
- [22] E. Arévalo, F.G. Mertens, Y. Gaididei, and A.R. Bishop, *Phys. Rev. E* **67**, 016610 (2003)
- [23] C. Brunhuber, F.G. Mertens, and Y. Gaididei, *Eur. Phys. J. B* **42**, 103 (2004)
- [24] F.G. Mertens, E. Arévalo, and A.R. Bishop, *Phys. Rev. E* **72**, 036617 (2005)
- [25] M. Meister, F.G. Mertens, Y. Gaididei, and A.R. Bishop, *Eur. Phys. J. B* **20**, 405 (2001)
- [26] N. Quintero, A. Sánchez, and F.G. Mertens, *Eur. Phys. J. B* **16**, 361 (2000)
- [27] E. Arévalo, Yu. Gaididei, and F.G. Mertens, *Eur. Phys. J. B.* **27**, 63 (2002)
- [28] M. Gell-Mann and C. Tsallis (Eds.), *Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications*, Oxford University Press, New York (2004)
- [29] T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, and M. Wilkens (Eds.), *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, Lecture Notes in Physics **602**, Springer (2002)
- [30] Y.B. Gaididei, N. Flytzanis, A. Neuper, and F.G. Mertens, *Physica D* **107**, 83
- [31] S. Flach and C.R. Willis, *Phys. Rep.* **295**, 181 (1998)
- [32] P.L. Christiansen, Y.B. Gaididei, F.G. Mertens, and S.F. Mingaleev, *Eur. Phys. J. B* **19**, 545 (2001)
- [33] D. Bonart, *Phys. Lett. A* **231**, 201-207 (1997)
- [34] T. Rössler and J.B. Page, *Phys. Rev. E* **62**, 11460 (2000)
- [35] O.M. Braun and Yu.S. Kivshar, *Physics Reports* **306**, 1-108 (1998)
- [36] P.V. Larsen, P.L. Christiansen, O. Bang, J.F.R. Archilla, and Y.B. Gaididei, *Phys. Rev. E* **70**, 036609 (2004)
- [37] G.A. Baker Jr, *Phys. Rev.* **122**, 1477 (1961)
- [38] A.M. Kac and B.C. Helfand, *J. Math. Phys.* **4**, 1078 (1972)
- [39] Y. Ishimori, *Prog. Theor. Phys.* **68**, 402 (1982)
- [40] M. Remoissenet and N. Flytzanis, *J. Phys. C* **18**, 1573 (1985)
- [41] C. Tchawona, T.C. Kofane, and A.S. Bokosah, *J. Phys. A*, **26**, 6477 (1993)
- [42] S.F. Mingaleev, Y.B. Gaididei, and F.G. Mertens, *Phys. Rev. E* **61**, R1044 (2000)
- [43] G.B. Whitham, *Linear and Nonlinear Waves*, Wiley (1974)
- [44] R. Camassa and D.D. Holm, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1661 (1993)
- [45] A. Comech, J. Cuevas, and P.G. Kevrekidis, *Physica D* **207**, 137 (2005)
- [46] S.F. Mingaleev, Y.B. Gaididei, and F.G. Mertens, *Phys. Rev. E* **58**, 3833 (1998)
- [47] A. Sánchez and A.R. Bishop, *SIAM Review* **40**, 579-615 (1998)
- [48] F.G. Mertens, H.J. Schnitzer, and A.R. Bishop, *Phys. Rev. B* **56**, 2510 (1997)
- [49] C. Schuster, M. Meister, and F.G. Mertens, *Europ. Phys. J. B* **42**, 381 (2004)
-

-
- [50] L. Morales-Molina, N.R. Quintero, F.G. Mertens, and A. Sánchez. Phys. Rev. Lett. **91**, 234102 (2003)
- [51] A. Jeffrey and T. Kawahara, *Asymptotic Methods in Nonlinear Wave Theory*, Pitman Advanced Publishing Program, Boston (1982)
- [52] L.A. Ostrovsky and E.N. Pelinovsky, Sov. Phys. Dokl. **15**, 1097 (1971)
- [53] A.C. Scott, *Nonlinear Science*, University Press Oxford (1999)
- [54] E.B. Herbold and V.F. Nesterenko, arxiv/cond-mat:0607212
- [55] R.H.J. Grimshaw, L.A. Ostrovsky, and D.E. Pelinovsky, CHAOS **15**, 037101 (2005)
- [56] V.V. Varlamov, Internat. J. Math. & Math. Sci. **22**, 131 (1999)
- [57] A. Neuper, Y.B. Gaididei, N. Flytzanis, and F.G. Mertens, Phys. Lett. A **190**, 165 (1994)
- [58] V.V. Konotop and L. Vázquez, *Nonlinear random waves*, World Scientific, Singapore (1994)
- [59] J. Honerkamp, *Stochastische Dynamische Systeme*, VHC Verlagsgesellschaft (1990)
- [60] M. Johansson and S. Aubry, Phys. Rev. E **61**, 5864 (2000)
- [61] C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Springer Verlag (1983)
- [62] M. Abramowitz and I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables*, Dover Publications Inc., New York, Ninth Printing November (1970)
- [63] R. Reigada, A. Sarmiento, and K. Lindenberg, Phys. Rev. E **64**, 066608 (2001)
- [64] P. Hänggi and F. Marchesoni, CHAOS **15**, 026101 (2005)
- [65] R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep. **339**, 1 (2000)
- [66] D. Brockmann, L. Hufnagel, and T. Geisel, Nature **439**, 462 (2005)
- [67] F.G. Parak, Rep. Prog. Phys. **66**, 103 (2003)
- [68] R. Zwanzig, *Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Oxford University Press, New York, 2001
- [69] S.C. Kou and X. Sunney Xie, Phys. Rev. Lett. **93**, 180603 (2004)
- [70] M. Salerno and N.R. Quintero, Phys. Rev. E **65**, 025602
- [71] P. Hänggi, F. Marchesoni, and F. Nori, Ann. Phys. **14**, 51 (2005)
- [72] A.V. Gorbach, S. Denisov, and S. Flach, Optics Letters, **31**, 1702 (2006)
- [73] K. Ø. Rasmussen, B. Malomed, A.R. Bishop, and N. Grønbech-Jensen, Phys. Rev. E **58**, 6695 (1998)
- [74] R. Khomeriki, S. Lepri, and S. Ruffo, Phys. Rev. E **64**, 056606 (2001)
- [75] R. Khomeriki, S. Lepri, and S. Ruffo, Phys. Rev. E **70**, 066626 (2004)
- [76] R. Khomeriki, Phys. Rev. Lett. **92**, 063905 (2004)
- [77] A.V. Zolotaryuk, P.L. Christiansen, B. Nordén, and A.V. Savin, Condensed Matter Physics **2** 293 (1999)
-

Kapitel 3

Persistente Breather in langreichweitigen diskreten nichtlinearen Schrödinger-Modellen

3.1 Motivation

In den vergangenen Jahren wurden die von der Theorie vorhergesagten diskreten Breather (oder intrinsisch lokalisierte Moden) in vielen unterschiedlichen Systemen wie in Ionenkristallen, Antiferromagneten, Josephson-Kontakten und optischen Wellenleitern experimentell bestätigt [1]. Besonders die diskrete nichtlineare Schrödingergleichung (DNLS) zeichnet sich auf vielen Gebieten als äußerst erfolgreiches Modell aus. Dazu zählt die Beschreibung diskreter Solitonen in der Optik, Anregungen in Bose-Einstein-Kondensaten und die Beschreibung von Schwingungsmoden in kleinen Molekülen wie Benzol [2, 3]. Die Anwendung der DNLS in der Biophysik geht auf die Idee von Davydov zurück, den Transport und die Speicherung von biomechanischer Energie durch einen Polaron-artigen Mechanismus zu beschreiben [4, 5]. Zu Beginn der 70er Jahre gelangte man zur Ansicht, dass die Speicherung der aus Hydrolyse von ATP gewonnenen Energie nötig ist, um die beobachtete Effizienz des Energietransports in biologischen System zu erklären [6]. Die 1973 von David Green organisierte Konferenz „crisis in bioenergetics“ diskutierte verschiedene Ansätze wie etwa die damals vorherrschende Vorstellung einer Speicherung von molekularer Energie mittels elektrostatischer Felder von durch Membranen getrennten Ladungen innerhalb der Zelle. Arbeiten von McClare über resonanten Energietransport und -speicherung in Biomolekülen dürften Davydov maßgeblich zu seinen Arbeiten motiviert haben, bei denen er den Polaron-artigen Energietransfer unter gewissen Näherungen durch Solitonen der NLS beschrieb [7].

Ursprünglich geht das Konzept des Polarons auf eine kurze Note Landaus [8] aus dem Jahre 1933 zurück und beschreibt die Bewegung eines Elektrons im Kristallgitter eines Festkörpers und die damit zusammenhängenden Gitterverformungen - ähnlich einer Murmel, die sich durch einen Teller Spaghetti arbeitet. Der Hamilton-Operator, den Davydov zur Beschreibung des Energie- und später auch Ladungstransports vorschlug, ist im Wesentlichen der gleiche, den Holstein 1959 bei der Beschreibung von Polaronen in molekularen Kristallen verwendete. Im Davydov-Modell kommt es durch die Wechselwirkung der C=O-Schwingung (Amid-I Schwingung) mit (optischen) Phononen (in den Wasserstoffbrückenbindungen, die die α -Helix stabilisieren) zu einer Verstimmung der Oszillationsfrequenz und somit zu einer Selbst-Lokalisierung (self-trapping) des Exzitons, weil die Dispersion der Vibrationsenergie zu benachbarten C=O-Gruppen blockiert ist.

Der erste experimentelle Hinweis auf Selbst-Lokalisierung in Proteinen wurde im Kristall von Acetanilid (ACN) gefunden, das Ketten aus Wasserstoffbrückenbindungen ähnlich wie in natürlichen Proteinen enthält (siehe [4]). Eine zu den freien delokalisierten Exzitonen der Amid-I-Schwingung

um 15 cm^{-1} rotverschobene Absorptionslinie im Spektrum des Modellproteins wurde nach Ausschluss anderer denkbarer Ursachen den selbst-lokalisierten Exzitonen zugeschrieben. Eine quantenmechanische Störungsrechnung von Scott et al. (in der die Exziton-Kopplung als Störung des mit einem Bloch-Ansatz beschriebenen entkoppelten Systems behandelt wird) war in der Lage, die Temperaturabhängigkeit und die Oberton-Frequenzen der neuen Bande zu erklären [4]. Die seither teilweise kontroverse Diskussion bezüglich der Lebensdauer solcher selbst-lokalisierten Anregungen in gelösten Proteinen bei physiologischen Temperaturen konnte durch den Einsatz moderner Femto-Lasertechnologie beendet werden [9–11]. In Myoglobin wurde eine Lebenszeit von 15 ps für Amid-I-Schwingungen gefunden [9]. Bei der Pump-Spektroskopie mit intensiven IR-Pulsen im Femtosekundenbereich konnten selbst-lokalisierte Amid-I und N-H-Schwingungen beobachtet werden, wobei sich für die N-H-Schwingung eine Lebensdauer von 20 ps im ACN-Kristall und 1 ps für isoliertes ACN bei Raumtemperatur ergab [11–13]. Die experimentellen Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Bande weisen aber darauf hin, dass die Selbst-Lokalisierung bei relativ niedrigen Temperaturen dominiert, wohingegen bei physiologischen Temperaturen dynamische und statische Unordnung im Molekül zu Energie-Lokalisierung führt (Anderson-Lokalisierung). Dieses Ergebnis steht in Übereinstimmung mit Computersimulationen von Cruzeiro-Hansson und Takeno [14]. Diese letzten Erfolge der Davydov-Theorie lassen Fragen laut werden, ob dynamische nichtlineare Anregungen eventuell auch zum wichtigen Prozess der Proteinfaltung beitragen [15, 16], was in der Vergangenheit vor allem als komplexes statistisches Problem verstanden wurde.

In diesem Abschnitt soll es vor allem um den Einfluss langreichweitiger Wechselwirkungen in der DNLS gehen. Dies geschieht durch die Einführung von Kac-Baker-Wechselwirkungen, die durch die Wahl des Wechselwirkungsradius α^{-1} zwischen den Grenzfällen der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung und der homogenen Kopplung aller Oszillatoren vermitteln können.

Eine realistische Modellierung sollte langreichweitige Wechselwirkungen in Betracht ziehen, wie sie etwa im Fall der Dipol-Dipol-Wechselwirkungen in Biomolekülen durch die C=O-Gruppen in Proteinen oder die Basenpaare der DNA zustande kommen.

Anregungen in solchen langreichweitigen DNLS-Systemen wurden bereits als mögliche Kandidaten für das kontrollierte Hin- und Herschalten zwischen Energietransport und -speicherung [17] oder als Auslöser von strukturellen Änderungen in Biomolekülen in Betracht gezogen [18, 19].

Die Rolle der langreichweitigen Dipol-Dipol-Wechselwirkungen auf den Lokalisierungsmechanismus in einem Protein wurde auch schon in Computersimulationen beobachtet. In einer aktuellen Studie [20] wurden mit einer atomistischen Simulation eines Proteins mit Hilfe des AMBER-Molekulardynamik-Codes [21] die Dipol-Dipol-Wechselwirkungen in Proteinen direkt aus den dreidimensionalen Positionen der Atome der Carbonyl-Gruppe bestimmt. Es zeigte sich, dass am stärksten (in der Primärstruktur) benachbarte C=O Gruppen miteinander wechselwirken, gefolgt von benachbarten Gruppen entlang der Achse des Proteins in Richtung der Wasserstoffbrückenbindungen. Diese Studie vernachlässigt den besprochenen Selbst-Lokalisierungs-Mechanismus, da die Wirkung der Amid-I Schwingungen auf die Proteinstruktur nicht berücksichtigt wurde. Die beobachtete Lokalisierung stammt von der Unordnung in der Dipol-Wechselwirkungsmatrix.

Abgesehen von der Anwendbarkeit auf Biopolymere wurde Energie-Lokalisierung auch in anderen Systemen anhand DNLS-artiger Gleichungen vorhergesagt und experimentell nachgewiesen. Neben dem frühen Beispiel des Acetanilid wurde Lokalisierung von Vibrationsenergie in Raman-Spektren des linearen Ladungstransfers in *PtCl*, bei zeitaufgelösten Pump-Probe-Experimenten dünner organischer Schichten und π -konjugierter Polymere (wie Acetylen) entdeckt (siehe [22]). Eine interessante theoretische Arbeit, bei der ebenfalls langreichweitige Kac-Baker-Wechselwirkungen für die DNLS angenommen wurden um den Ladungstransfer in DNA-artigen Substanzen zu beschreiben ist [23].

3.2 Modell

Das Modell ist eine DNLS-Gleichung mit langreichweitigen harmonischen Wechselwirkungen, wobei J_{n-m} die Kopplung zwischen den Oszillatoren n und m und $\gamma d/dt |\phi_n|^2$ einen nichtlinearen Dämpfungsterm darstellt

$$2i\omega_o \dot{\phi}_n - \sum_m J_{n-m}(\phi_n - \phi_m) + 3B |\phi_n|^2 \phi_n - \gamma \phi_n (|\phi_n|^2)_t = 0 . \quad (3.1)$$

Die Plancksche Wirkungskonstante \hbar (aus der quantenmechanischen Formulierung nach Davydov) steckt bei dieser quasiklassischen Gleichung in der normierten Zeit t , die Dipol-Dipol-Wechselwirkungsmomente sind im Parameter J_{n-m} verborgen und die Kopplung zwischen dem Exziton und den (optischen) Phononen führt auf die Nichtlinearität $3B$ (siehe z.B. [4], [24]).

Diese Gleichung hat eine Erhaltungsgröße \mathcal{N} , die Norm

$$\mathcal{N} = \sum_n |\phi_n(t)|^2 . \quad (3.2)$$

Die Energie

$$H = \sum_{n=1} -\frac{3}{4} \frac{B}{\omega_o} |\phi_n|^4 + \frac{1}{2} \sum_{m=1} \frac{J_m}{\omega_o} |\phi_n - \phi_{m+n}|^2 \quad (3.3)$$

ist nur im Fall $\gamma = 0$ erhalten. Diese Gleichung kann aus dem diskreten Klein-Gordon-Modell (KG)

$$H_{KG} = \sum_n \frac{\dot{u}_n^2}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} J_{n-m} (u_n - u_m)^2 + \sum_n \frac{\omega_o^2}{2} u_n^2 - \sum_n \frac{B}{4} u_n^4 \quad (3.4)$$

durch Betrachtung der Modulationen der harmonischen Schwingung (rotating wave approximation) $\phi_n(t)$ mit dem Ansatz $u_n(t) = \phi_n(t) \exp(-i\omega_o t) + c.c.$ abgeleitet werden [25]. Für die langreichweitige Wechselwirkung wird die Kac-Baker-Form für die Kopplung angenommen

$$J_m = J(\alpha, N) e^{-\alpha|m|} = J \frac{(e^\alpha - 1)}{(1 - e^{-\alpha N})} e^{-\alpha|m|} \quad (3.5)$$

$$\sum_m^N J_m = J , \quad (3.6)$$

die zwischen den Grenzfällen der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung ($\alpha \rightarrow \infty$) und der Situation der gleichmäßigen Kopplung aller Oszillatoren der Kette ($\alpha \rightarrow 0$) vermittelt. Die Generalisierung der DNLS für beliebige Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zwischen den einzelnen Oszillatoren ist als diskrete Self-Trapping-Gleichung (DST) bekannt [3]. Die Einführung des nichtlinearen Dämpfungsterms $\gamma \phi_n d/dt |\phi_n|^2$ in (3.1) ermöglicht einen Dämpfungsmechanismus, der die Norm oder auch Anregungszahl (number of quanta) genannt, zeitlich konstant lässt. Diese Dämpfung erscheint, wenn die Davydov-Gleichungen für Exzitonen im Phononenbad mit Dämpfungs- und Rauschtermen auf eine DST-artige Gleichung für die quantenmechanische Wellenfunktion des Exzitons reduziert werden [26, 27]. Diese Form der Dämpfung ist interessanterweise sehr ähnlich zu dem aus der nichtlinearen Optik bekannten Dämpfungsterm, der die Intensitätsverluste des NLS-Solitons aufgrund von Raman-Streuung beschreibt. Lösungen dieser Gleichung wurden innerhalb der Quasikontinuumsnäherung des ungedämpften Systems gefunden. Es wurde unter anderem gezeigt, dass sich für bestimmte Anfangsbedingungen ähnlich zur zweidimensionalen NLS ein Kollaps der Wellenfunktion ergibt. Eigenschaften der diskreten Breather-Lösungen und ihre Dynamik in

der Gegenwart von Rauschen und Dämpfung sind in [28] zu finden. Die Breather-Dynamik im Fall eines zweidimensionalen DNLS-Systems wurde in [29] behandelt.

Bevor Simulationsergebnisse diskutiert werden, soll betont werden, dass die spezielle Form der Kopplung für alle Werte α^{-1} und für alle Systemgrößen N die Bedingung (3.6) erfüllt. Das führt zu relativ kleinen Kopplungskonstanten für große Wechselwirkungsradien und legt bei den in den Simulationen beobachteten Effekten die Schlussfolgerung nahe, eine Konsequenz der neuen Längenskala α^{-1} des Systems zu sein.

3.3 Gedämpftes System

In diesem Kapitel sollen die Einflüsse langreichweitiger Wechselwirkungen in der gedämpften DNLS (3.1) betrachtet werden. Dieses Modell wurde vor allem zur Erklärung des Energietransfers in Scheibe-Aggregaten verwendet [24, 30]. Scheibe-Aggregate sind geordnete molekulare Systeme, die eine Unterklasse der Langmuir-Blodgett-Filme darstellen. Sie wurden in den 1930er Jahren entdeckt und sind kompakte Aggregate aus Farbstoffmolekülen, bestehend aus Chromophoren und Fettsäuren. In den 1970er Jahren wurde von Kuhn und Möbius [31] entdeckt, dass in diesen molekularen Systemen Energietransfer über große Entfernungen von etwa 100 nm von Donor- zu Akzeptor-Farbstoffmolekülen stattfindet, der bei geringem Akzeptor-Donor-Verhältnis und (etwas überraschend) für steigende Temperaturen im Intervall $[20K, 320K]$ besonders effektiv ist. Die Zerfallszeit in Nanosekunden aufgrund Energieabstrahlung wurde zu $\tau_{rad} = (T/3000) K$ geschätzt [32]. Durch die beobachteten maximalen Ausbeuten von über 50 Prozent wurden sie für zukünftige Anwendungen in Bereichen der Photographie und der Photodetektion vorgeschlagen [33]. Außerdem wurden große Anstrengungen unternommen, den Mechanismus des Energietransfers zu begreifen, da man sich dadurch ein besseres Verständnis der Photonenabsorption in lebenden Zellen versprach. Dieses Problem ist aber noch weitgehend ungelöst, da es verschiedene konkurrierende theoretische Konzepte gibt, deren Anwendbarkeit auf die experimentelle Situation noch diskutiert wird. Quantenmechanische Modelle gehen beispielsweise von harmonischen Wechselwirkungen zwischen schwingenden Molekülgruppen nächster Nachbarn aus und erzielen bei der Vorhersage gute Ergebnisse, wenn die Wechselwirkungen mit dem Phononenbad klein sind [34, 35]. Bei nichtlinearen Modellen wird der Energietransfer durch Davydov-Solitonen modelliert, was später auf (diskrete) DNLS-Systeme erweitert wurde [27]. Diese Idee geht auf Huth zurück [30], setzt aber eine starke Kopplung zwischen den Exzitonen und den Phononen voraus.

Die gedämpfte DNLS wurde vor kurzem zur Erklärung von schnellem katalytischem Elektronentransfer bei niedrigen Temperaturen als Erweiterung der Marcus-Theorie verwendet [36]. Dabei taucht die DNLS als resultierende Gleichung bei einer quantenmechanischen Behandlung eines schwach mit einem nicht-adiabatischen Phononenbad wechselwirkenden Elektrons im Tight-Binding-Modell auf. Die Dämpfung ist nötig, um die Transfer-Reaktionsenergie zu verbrauchen und die Irreversibilität des Elektronenübergangs herbeizuführen. Die experimentell beobachteten photosynthetischen Reaktionen von primitiven Bakterien [37] zeigen Eigenschaften, die qualitativ gut von diesem Ansatz vorhergesagt werden. Der nichtlineare Dämpfungsterm in der DNLS entsteht allgemein unter gewissen Näherungen (erstmalig in [27]) aus einer Erweiterung des Davydov-Modells, bei dem ein Stokes-artiger Dämpfungsterm zur Phonon-Dynamik hinzugefügt wurde. Diese Art der Dämpfung sollte in vielen Systemen relevant sein, da man allgemein auf sie stößt, wenn man thermisches Rauschen und Dämpfung für das Phononenbad annimmt, wie zum Beispiel auch beim „kinetischen Ansatz“ zur Protein-Faltung [38].

3.3.1 Mikrokanonische Simulationen

Das System wird zu Beginn mit einer gleichmäßig verteilten Norm $\mathcal{N} = Na$ plus einer kleinen Störung initialisiert. Dabei wird entweder der Fall betrachtet, dass ϕ_n nur für einen Partikel n_1 vom Einheitswert \sqrt{a} abweicht oder dass alle Partikel eine kleine zufällige Störung erleiden:

$$\text{Anfangsbedingung I: } \phi_{n \neq n_1}(0) = \sqrt{a}, \phi_{n_1} = (1 + \epsilon)\sqrt{a} \quad (3.7)$$

$$\text{Anfangsbedingung II: } \phi_n = \sqrt{a} + \epsilon \text{ rand}() \quad (3.8)$$

In den Simulationen wird stets $\omega_o^2 = A = 1$ benutzt. Für die Dämpfung wird (recht willkürlich) $\gamma = 1$ angenommen. Kleinere Werte für γ scheinen nur den Übergang zu einem stationären Profil der Normverteilung zu verlängern. In Abbildung 3.1 sind deutlich einige interessante Konsequenzen der langreichweitigen Wechselwirkungen zu erkennen. Die Längenskala des nach einigen hundert Zeiteinheiten entstehenden Breather-Musters wächst mit dem Wechselwirkungsradius α^{-1} . Die diskreten Breather haben eine deutlich größere Norm und die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Breather-Musters ist größer für kleinere Werte von α . Der Effekt der Dämpfung wird klar, wenn man dieses Ergebnis mit Simulationen des ungedämpften Systems (z.B. in [39]) vergleicht, wo die diskreten Breather eine starke Tendenz haben, durch gegenseitige Kollisionen einen entropisch günstigen Zustand von persistenten großamplitudigen Breathern herbeizuführen.

Die Anfangsbedingung II führt zu sehr ähnlichen Mustern $|\phi_n(t)|^2$ bezüglich der Anzahl und Größe der persistenten Breather.

Ein sehr bemerkenswerter Sachverhalt ist der Mechanismus der Breather-Entstehung, der in Abbildung 3.1 nicht gut zu sehen ist. Obwohl der Zeitraum (etwa 350 Zeiteinheiten in Abbildung 3.1) nicht von α abhängt, spiegelt die Formation der Breather für kleine Werte von α mehr und mehr einen Quasikollaps-Prozess wieder, bei dem sich die Energie und Norm eines Breathers plötzlich in seinem Zentrum sammelt. Diese Beobachtung wurde in diesem System (aber ohne Dämpfung) in der Quasikontinuumsnäherung für bestimmte Anfangsbedingungen bereits gemacht [40]. Wählt man größere Werte für J , erhöht man die Kopplung zwischen den Oszillatoren und der oben beschriebene Lokalisierungseffekt wird sogar noch drastischer. Im Fall von $\alpha = 0.2$ und $J = 1 = 10B$ ist man bereits in einer Situation, in der sich die gesamte Norm des Systems auf ein oder zwei „hot spots“ vereinigt (Abbildung 3.2 a). Diese Situation soll im folgenden benutzt werden, um einen näheren Blick auf den Quasikollaps im System zu werfen. In Abbildung 3.2 (b) sieht man, dass bei kleinen Zeiten sehr breite Anregungen im System entstehen. Im Laufe des Kollaps sammelt sich praktisch die ganze Norm in den Zentren der beiden Anregungen und das System nimmt einen stationären Endzustand mit zwei großamplitudigen „hot spots“ an.

Dieser Kollaps kann verhindert werden, wenn man die im System verfügbare Norm vermindert. Ein System mit den gleichen Anfangsbedingungen, aber einer Teilchenzahl von $N = 500$ anstatt $N = 512$, läuft in einen Endzustand, bei dem die beiden Anregungen nicht kollabieren. Vor dem Kollaps entstehen langwellige kontinuumsartige Norm-Modulationen des Systems, eine Situation von der man annehmen kann, dass die Quasikontinuumsnäherung anwendbar ist [40].

Das System in Abbildung 3.1 erscheint nach etwa 5000 Zeitschritten relativ stationär. Doch es gibt zwischen den immobilen Breathern weiterhin kleine bewegliche Anregungen oder kleinere Breather. Für lange Zeiten wird das Muster immer klarer und die größeren Breather wachsen auf Kosten der kleineren. Manchmal wachsen Breather auch und schrumpfen erst nach relativ langen Zeiten, wenn alle kleineren Anregungen verschwunden sind. Um anhand der Simulationen eine Abhängigkeit zwischen dem Wechselwirkungsradius α^{-1} und dem mittleren Breather-Abstand l ablesen zu können, müssen daher die Simulationen relativ lange Zeiten laufen (einige 10^5 Zeiteinheiten). Das Resultat ist in Abbildung 3.3 für ein System mit $N = 1024$, $\gamma = 1$, $B = 0.1$ und $J = 0.1$ oder $J = 0.05$ dargestellt. Der mittlere Abstand der stationären Breather wächst linear mit dem Wechselwirkungsradius α^{-1} und der Kopplungskonstante J . Dieses Resultat stützt die intuitive Vorstellung, dass

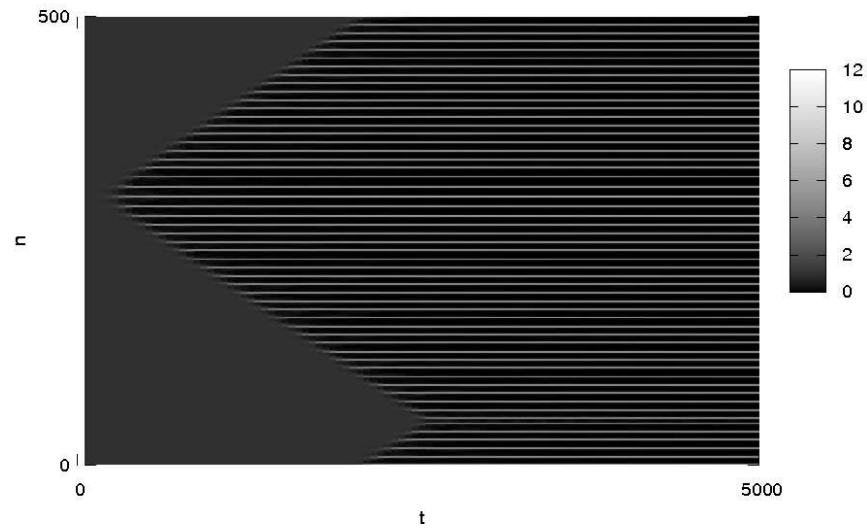
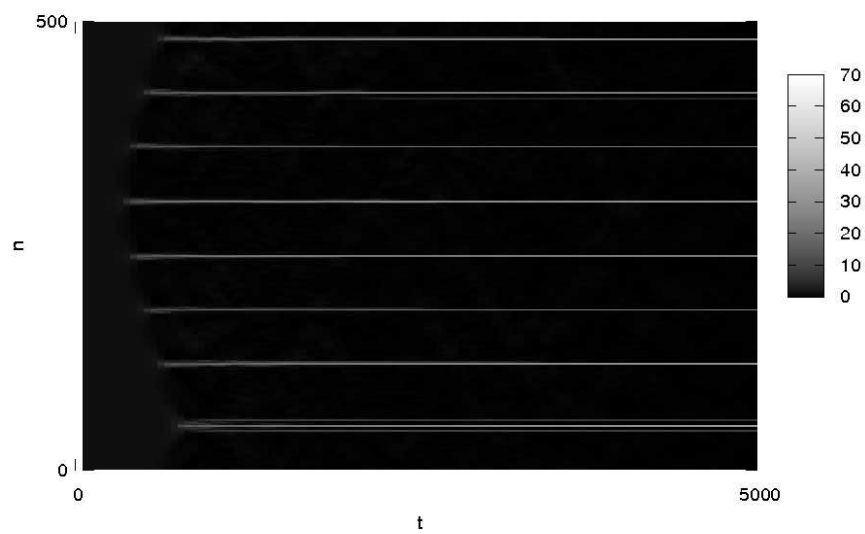
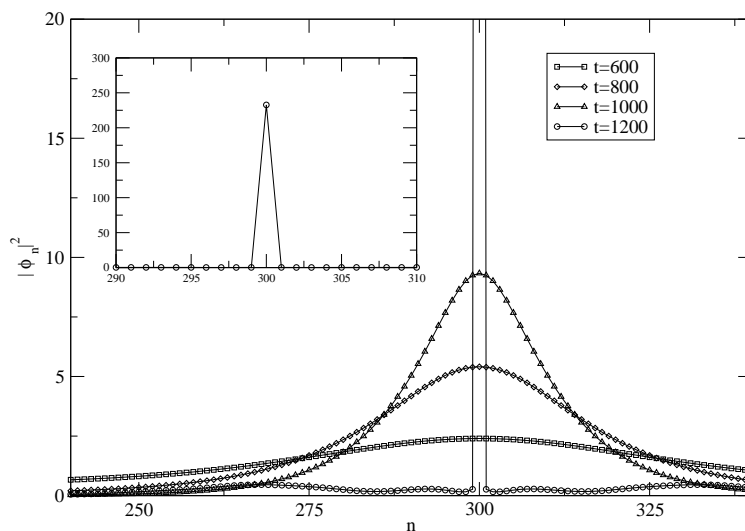
(a) $\alpha = 2$ (b) $\alpha = 0.2$

Abbildung 3.1: Es ist anhand der Größe $|\phi_n(t)|^2$ die Entstehung und Zeitentwicklung eines Breather-Musters in der DNLS mit $B = 0.1$, $J = 0.1$, $\gamma = 1$ und $\alpha = 2$ (a) bzw. $\alpha = 0.2$ (b) für die Anfangsbedingung I dargestellt. Das Muster gibt die Norm $|\phi_n(t)|^2$ auf einer Schwarz-Weiß-Skala in Einheiten von $a = 0.16$ von jedem Oszillator n bis zur Zeit $t = 5000$ wieder.



(a) $\alpha = 0.2$



(b) Breather bei $n = 300$

Abbildung 3.2: Es ist anhand der Größe $|\phi_n(t)|^2$ die Entstehung und Zeitentwicklung eines Breather-Musters in der DNLS mit $B = 0.1$, $J = 1$, $\gamma = 1$ und $\alpha = 0.2$ (a) für die Anfangsbedingung I dargestellt. Anfänglich bilden sich sehr breite Anregungen im System, die sich im Laufe der Zeit um $n = 300$ und $n = 20$ konzentrieren und schließlich in einen Zustand kollabieren, bei dem praktisch die ganze Norm an zwei Oszillatoren konzentriert sind, von denen einer in (b) für verschiedene Zeiten dargestellt ist.

die Norm in auf der Kette hintereinander liegenden Bereichen, deren Größe mit α^{-1} anwächst, auf jeweils einen „hot spot“ zusammenkommt. Für kleine α ergeben sich Abweichungen vom linearen Verlauf, was daran liegt, dass in den Simulationen die Systemgröße immer bei $N = 1024$ belassen wurde, was für kleine α zu weniger Brethern im System führt und deshalb zu einer weniger guten Statistik. In den Simulationen sind größere Systemlängen sehr zeitaufwendig, da für langreichweitige Wechselwirkungen die Simulationszeiten quadratisch mit N anwachsen.

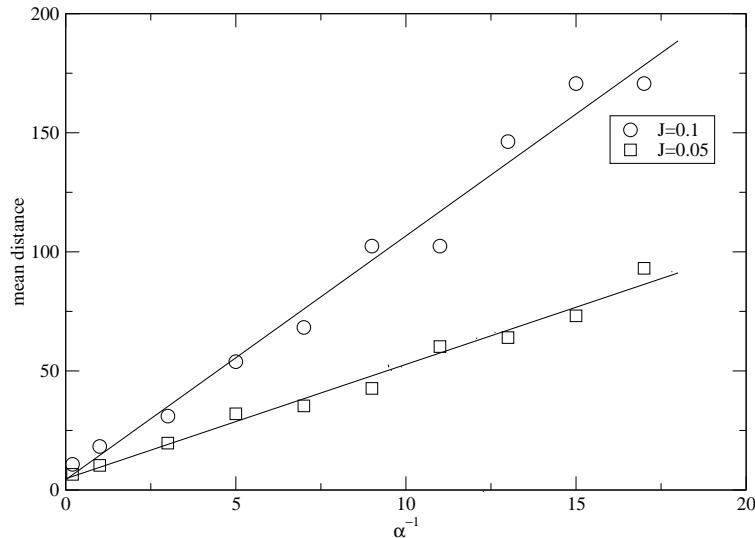


Abbildung 3.3: Mittlerer Breather-Abstand im stationären Zustand des Systems ($N = 1024$, $\gamma = 1$, $B = 0.1$ und $J = 0.1$ bzw. $J = 0.05$) für verschiedene Werte von α . Der mittlere Breather-Abstand wächst linear mit α^{-1} und die Steigung der Geraden wächst mit dem Wert der Kopplung J . Die Geraden stellen einen Datenfit der Simulationsergebnisse mit den Steigungen 4.803 ± 0.225 für $J = 0.05$ und 10.233 ± 0.516 für $J = 0.1$ dar. Für $\alpha^{-1} = 17$ beträgt die Zeit, bis zu der simuliert werden muss, damit alle kleinen Anregungen verschwinden, typischerweise einige 10^5 Zeiteinheiten.

In der folgenden Quasikontinuumsnäherung soll analytisch ein Verständnis für die lineare Abhängigkeit der mittleren Breather-Abstände von J und α^{-1} entwickelt werden.

3.3.2 Quasikontinuumsnäherung

Die volle Dynamik des Systems (3.1) ist relativ kompliziert, da Diskretheit, langreichweitige Effekte und Dämpfung wichtig sind. Die verwandte DNLS-Gleichung ohne Dämpfung und eine quantisierte Version der DNLS wird in [6] ausführlich behandelt. Dabei geht es um die Beschreibung von lokalen Schwingungsmoden in kleinen Molekülen und es wird untersucht, unter welchen Umständen es zu chaotischen Trajektorien im Phasenraum kommt.

Abgesehen von der komplizierten Dynamik der DNLS (3.1) liegt in diesem Abschnitt das Hauptaugenmerk auf der Erklärung der in den Simulationen beobachteten Abhängigkeit des mittleren Breather-Abstands l (im stationären Endzustand des Systems) vom Wechselwirkungsradius α^{-1} und der Kopplung J . Es bietet sich an, eines der Ergebnisse in [40] für die Quasikontinuumsnäherung des Systems zu betrachten, die besagt, dass zwei Lösungen der langreichweitigen DNLS für verschiedene Werte α über eine einfache Skalierungsrelation zusammenhängen. Der Quasikollaps selbst

kann natürlich nicht im Rahmen einer Kontinuumsnäherung verstanden werden. Doch für die Berechnung von l ist es ausreichend, die sich in den breiten pulsformigen Anregungen des Systems anhäufende Norm zu kennen. Diese Norm konzentriert sich auf die durch Quasikollaps entstehenden diskreten Breather und liefert somit unter der Annahme, dass es eine Zahl Z identischer diskreter Breather im System gibt, auf die die gesamte Norm $\mathcal{N} = Na$ des Systems aufgeteilt ist, sofort die beobachteten Abhängigkeiten. Die Annahme, dass es sich um identische Breather-Lösungen handelt, wird von den Simulationen gestützt, obwohl die Dynamik in einem relativ klaren Breather-Feld sehr langsam ist. Die Rolle der Dämpfung ist im Wesentlichen die (schnelle) Ausbildung eines stationären Profils zu ermöglichen. Durch die Form der nichtlinearen Dämpfung werden Fluktuationen der lokalen Norm $|\phi_n(t)|^2$ weggedämpft und es kommt zur Ausbildung stationärer Profile. In den Simulationen ist deutlich zu erkennen, dass der stationäre Zustand dann eintritt, wenn die Gesamtenergie des Systems sich nach einem langsamen Abfall auf einen konstanten Wert zubewegt. Für kleinere Dämpfungskoeffizienten γ dauert dieser Übergang länger, führt aber qualitativ zu den gleichen Ergebnissen.

Um die Norm der stationären Breather abschätzen zu können, wird die Quasikontinuumsnäherung auf das System angewendet ($n \rightarrow x$, $\phi_n(t) \rightarrow \phi(x, t)$), wodurch sich aus dem System (3.1) mit der Skalierung $\phi \rightarrow \sqrt{2/3B} \phi$, $J \rightarrow J/2$ und unter Vernachlässigung der nichtlinearen Dämpfung eine nicht-lokale nichtlineare Schrödingergleichung (NLS) ergibt

$$i\partial_t \phi + \frac{2J(\alpha, N)}{\alpha} \frac{\partial_x^2}{\alpha^2 - \partial_x^2} \phi + |\phi|^2 \phi = 0. \quad (3.9)$$

Eine Skalierung der Zeit- und der Ortskoordinate sowie des Feldes ϕ ($z = \alpha x$, $\tau = 2J(\alpha, N)/\alpha t$, $\psi = \sqrt{\alpha/2J} \phi$) führt zur Gleichung

$$i\partial_\tau \psi + \frac{\partial_z^2}{1 - \partial_z^2} \psi + |\psi|^2 \psi = 0, \quad (3.10)$$

die von Gaididei et al. [40] unter Verwendung des Ansatzes

$$\psi = \frac{b}{\sqrt{b^2 - 1}} F(z, b) e^{i\lambda^2 \tau} \quad (3.11)$$

gelöst wurde, wobei λ den spektralen Parameter und $b = \lambda^{-1} \sqrt{\lambda^2 + 1}$ die Breite des Solitons darstellen. $F(z, b)$ konnte nur für $b \geq 3$ in impliziter Form angegeben werden, doch die Norm der Lösung ergab sich zu

$$\mathcal{N}_\phi = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(x, t)|^2 dx = \frac{2}{3B} \frac{J(\alpha, N)}{\alpha^2} \mathcal{N}_\psi \quad (3.12)$$

$$\mathcal{N}_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(z, \tau)|^2 dz = \frac{1}{b^2 - 1} \left[3b + \frac{b^2 - 9}{8} \ln \left(\frac{b^2 + 4b + 3}{b^2 - 4b + 3} \right) \right]. \quad (3.13)$$

Nimmt man an, dass sich die gesamte Norm \mathcal{N} des Systems auf Z identische Lösungen (gleiches b , gleiches \mathcal{N}_ψ) aufteilt

$$\mathcal{N} = Z \mathcal{N}_\phi = Z \frac{2}{3B} \frac{J(\alpha, N)}{\alpha^2} \mathcal{N}_\psi, \quad (3.14)$$

kann der mittlere Breather-Abstand l (für kleine Werte α) sofort durch Teilen der Systemlänge $L = N$ durch die Breather-Anzahl Z abgeschätzt werden

$$l = \frac{N}{Z} = \underbrace{\mathcal{N}_\psi \frac{2}{3a(1 - e^{-\alpha N})}}_{\text{const. für } N \gg \alpha^{-1}} J \frac{e^\alpha - 1}{B\alpha^2} \sim \frac{J}{B} \alpha^{-1}, \quad (3.15)$$

woraus sich die beobachteten Proportionalitäten ergeben.

Mit dieser Vorgehensweise kann auch die im vorigen Kapitel erwähnte Abhängigkeit des Quasikollaps-Prozess von der Norm des Systems erklärt werden. Mit dem Ergebnis für die kritische Norm \mathcal{N}_ψ^c des NLS Solitons aus [40] ($\mathcal{N}_\psi^c \simeq 1.128$) kann mit Hilfe von (3.14) auf die kritische Norm \mathcal{N}_ϕ^c der DNLS geschlossen werden. Das bedeutet, für die Parameterwerte des Systems aus Abbildung 3.2 ergibt sich für $Z = 2$ Anregungen die Kollaps-Bedingung $\mathcal{N} \geq 2\mathcal{N}_\phi^c = 83.25$. Der Kollaps ergibt sich im System bereits bei einer Norm von $\mathcal{N} = Na = 512 \cdot 0.16 = 81.92$, jedoch nicht bei einem kleineren System mit $\mathcal{N} = Na = 500 \cdot 0.16 = 80$. Es lässt sich also festhalten, dass die Quasikontinuumsnäherung in der Lage ist, das System qualitativ richtig zu beschreiben. Zusammenfassend kann man den Effekt der langreichweitigen Wechselwirkung in der gedämpften DNLS als die Tendenz zur Ausbildung (weniger) sehr massiver immobiler diskreter Breather beschreiben. Selbst bei relativ schwacher Kopplung J ergibt sich diese Tendenz, wenn nur ausreichend große Wechselwirkungsradien α^{-1} vorliegen.

3.3.3 Dimer

Im Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ erhält man eine gleichmäßige Kopplung zwischen allen Oszillatoren der Kette

$$J_m = J \frac{(e^\alpha - 1)}{(1 - e^{-\alpha N})} e^{-\alpha m} \stackrel{\alpha \rightarrow 0}{\approx} \frac{J}{N}. \quad (3.16)$$

Dieser Grenzfall soll im folgenden benutzt werden, um die Tendenz zur Akkumulierung der Norm auf einzelne „hot spots“ im System zu verstehen. In [27] wurde der stationäre Zustand bei der gedämpften und verdrahteten DNLS im Grenzfall des Dimers mit $N = 2$ Oszillatoren exakt gelöst. In [41] wurde gezeigt, dass die DST mit 2 Freiheitsgraden auf die Bewegungsgleichung eines anharmonischen Oszillators in einem ϕ^4 -Potential reduziert werden kann. Die Hamiltonfunktion in diesem Grenzfall ergibt sich (ohne Dämpfung und unter Vernachlässigung eines konstanten Terms) zu

$$H^D = -\frac{1}{4} \frac{J}{N} \sum_{n,m \neq n}^N (\phi_m \tilde{\phi}_n + \phi_n \tilde{\phi}_m) - \frac{3B}{4} \sum_n^N |\phi_n|^4. \quad (3.17)$$

Die korrespondierende Bewegungsgleichung mit dem Dämpfungsterm aus (3.1) lautet

$$2i\dot{\phi}_n + \frac{J}{N} \sum_{m \neq n}^N \phi_m + 3B |\phi_n|^2 \phi_n - \gamma (|\phi_n|^2)_t \phi_n = 0. \quad (3.18)$$

Da die Amplitude des Oszillators am Punkt n_1 nur (infinitesimal) vom Einheitswert $\phi_{n \neq n_1} = \sqrt{a}$ abweicht, kann das System aus N Teilchen als Dimer-Gleichung geschrieben werden, wobei ϕ_o den Oszillator bei n_1 beschreibt und ϕ_1 alle anderen Oszillatoren. Nach der Transformation $\phi_o := \phi_{n_1} = \sqrt{N-1} \bar{\phi}_o$, $\phi_1 := \phi_{n \neq n_1} = \bar{\phi}_1$, ergeben sich die Dimer-Gleichungen zu

$$i\dot{\bar{\phi}}_o = -\bar{J}\bar{\phi}_1 - \bar{V}_o \bar{\phi}_o \bar{\rho} + |\bar{\phi}_o|^2 \quad (3.19)$$

$$i\dot{\bar{\phi}}_1 = -\bar{J}\bar{\phi}_o - E_1 \bar{\phi}_1 - \bar{V}_1 \bar{\phi}_1 \bar{\rho} + |\bar{\phi}_1|^2 \quad (3.20)$$

mit

$$\begin{aligned} \bar{J} &= \frac{J\sqrt{N-1}}{2N}, \quad \bar{V}_o = \frac{3}{2}B(N-1) \\ \bar{\rho} &= \left(1 - \frac{\gamma}{3B} \frac{d}{dt}\right), \quad E_1 = \frac{J(N-2)}{2N}, \quad \bar{V}_1 = \frac{3}{2}B. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Führt man die neuen Variablen Θ und Ψ bzw. $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$ nach der Vorschrift

$$\bar{\phi}_o^* \bar{\phi}_1 + \bar{\phi}_o \bar{\phi}_1^* = \sin \Theta \cos \Psi = x(t) \quad (3.22)$$

$$-i(\bar{\phi}_o^* \bar{\phi}_1 - \bar{\phi}_o \bar{\phi}_1^*) = \sin \Theta \sin \Psi = y(t) \quad (3.23)$$

$$|\bar{\phi}_o|^2 - |\bar{\phi}_1|^2 = \cos \Theta = z(t) \quad (3.24)$$

$$\bar{\mathcal{N}} = |\bar{\phi}_o|^2 + |\bar{\phi}_1|^2 = \frac{\mathcal{N}}{N-1} \quad (3.25)$$

ein, erhält man die Dimer-Gleichungen:

$$\dot{\Psi} = \frac{2\bar{J}z \cos \Psi}{\sqrt{\bar{\mathcal{N}} - z^2}} - \frac{\bar{V}_o - \bar{V}_1}{2} \bar{\mathcal{N}} - \frac{\bar{V}_o + \bar{V}_1}{2} \bar{\rho} z \quad (3.26)$$

$$\dot{z} = -2\bar{J}\sqrt{\bar{\mathcal{N}} - z^2} \sin \Psi . \quad (3.27)$$

Dieses System ist lösbar für $\gamma = 0$ und führt zu kleinamplitudigen Schwingungen von $z(t)$ um seinen Startwert. Bei einem nicht-verschwindenden Wert für γ kann man das System numerisch lösen und es lässt sich ein effektiver Norm-Transfer auf den Oszillator ϕ_o beobachten, da $z(t)$ von seinem Startwert $z(0) \approx -\bar{\mathcal{N}}$ auf den Maximalwert $z(\infty) = \bar{\mathcal{N}}$ anwächst (ähnlich dem Modell für Elektronentransfer in [36]). Dieses Ergebnis und die Beobachtungen in den Simulationen legen somit die Interpretation nahe, dass die sich für kleine Zeiten im System ausbildenden Anhäufungen der lokalen Norm (mit einer Ausdehnung, die mit dem Wechselwirkungsradius α^{-1} anwächst) qualitativ als eine Sequenz von Dimer-Regionen aufgefasst werden können. In diesen Regionen, deren Größe von α und J kontrolliert wird, tritt aufgrund des Dämpfungsmechanismus eine sehr effektive Lokalisierung der darin befindlichen lokalen Norm ein.

Eine vielleicht anschaulichere Behandlung des Normtransfers im Dimer-Modell wurde bei Untersuchungen über die Peierls-Nabarro-Barriere der diskreten Breather in [42] angewendet. Diese Formulierung soll hier übernommen und mit den Ergebnissen der Simulationen für den Dimer-Fall $\alpha \rightarrow 0$ verglichen werden. Dabei setzt man die speziellen Anfangsbedingungen

$$\phi_o = \phi_{n=n_1} \quad (3.28)$$

$$\phi_1 = \phi_{n \neq n_1} \quad (3.29)$$

in die Hamiltonfunktion (3.17) ein und erhält

$$H = \frac{-2J(N-1)}{4N} (\phi_1 \tilde{\phi}_o + \phi_o \tilde{\phi}_1) - \frac{-J(N-1)(N-2)}{4N} (\phi_1 \tilde{\phi}_o + \phi_o \tilde{\phi}_1) - \frac{3B}{4} (|\phi_o|^4 + (N-1) |\phi_1|^4) . \quad (3.30)$$

Mit dem Übergangsparameter $\nu(t)$, der den Normfluss vom Anfangszustand $\nu = 0$ mit ($|\phi_o|^2 = |\phi_1|^2 = a$) bis zum Endzustand $\nu = 1$ mit ($|\phi_o|^2 = \mathcal{N}$, $|\phi_1|^2 = 0$) regelt und der Phase $\theta(t)$ zwischen den beiden Wellenfunktionen lässt sich das Problem folgendermaßen schreiben:

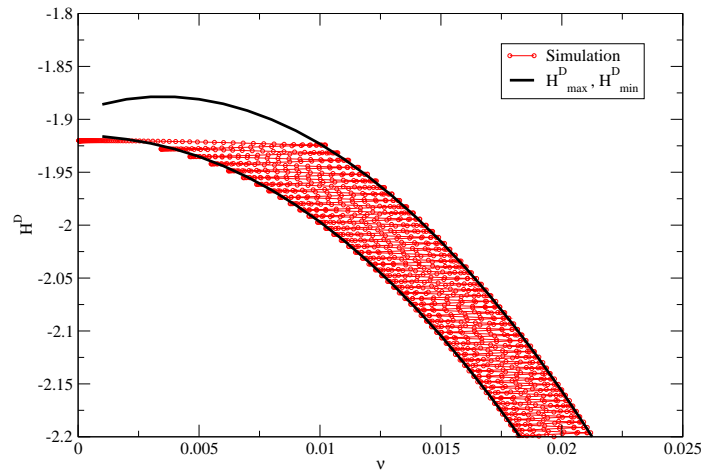
$$\phi_1(\nu) = \sqrt{a\sqrt{1-\nu}} e^{i\psi} e^{i\theta} \quad (3.31)$$

$$\phi_o(\nu) = \sqrt{a\sqrt{1+(N-1)\nu}} e^{i\psi} \quad (3.32)$$

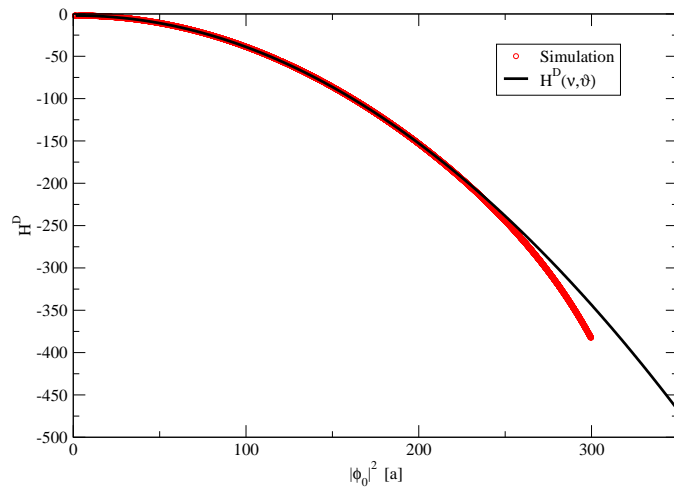
$$H^D = \frac{-J(N-1)}{N} a\sqrt{1-\nu}\sqrt{1+(N-1)\nu} \cos \theta - \frac{-2J(N-1)(N-2)}{4N} a(1-\nu) + \frac{3B}{4} a^2 N (1+(N-1)\nu^2) . \quad (3.33)$$

In Abbildung 3.4 sind die Simulationsergebnisse für ein DNLS-System mit $B = 0.2$, $J = 0.1$ und $N = 500$ für $\alpha = 0$ mit dem minimalen theoretischen Wert $H_{min}^D(\nu) = H^D(\nu, \theta = 0)$ und dem maximalen theoretischen Wert $H_{max}^D(\nu) = H^D(\nu, \theta = \pi)$ für verschiedene Werte von $\nu \in [0, 1]$

aufgetragen. Man kann gut erkennen, dass die in der Simulation gemessenen Energien des Dimers zeitlich abnehmen, wobei der aktuelle Wert der Energie schnell zwischen H_{max}^D und H_{min}^D schwankt (Abbildung 3.4 a). Diese Ergebnisse lassen sich auch in Abhängigkeit der Norm $|\phi_o|^2$ auftragen. Für große Zeiten, wenn schon etwa die Hälfte ($|\phi_o|^2 \approx 250 a$) der gesamten Norm $\mathcal{N} = 500 a$ am Oszillator ϕ_o vorliegt, gibt es Abweichungen vom theoretischen Verlauf (siehe Abbildung 3.4 b). Das liegt an der Tatsache, dass für die in diesem Fall sehr schnelle Dynamik von $\phi_o(t)$ sehr kleine Zeitschritte in den Simulationen erforderlich werden.



(a)



(b)

Abbildung 3.4: a: Energie eines DNLS-Dimers ($\alpha \rightarrow 0$) mit $B = 0.2$, $J = 0.1$ und $N = 500 a$ in der Simulation verglichen mit der theoretisch maximalen und minimalen Energie, H_{max}^D und H_{min}^D , für kleine Werte des Übergangsparmeters ν . Die Anfangsbedingung für den Oszillator $n_1 = 300$ unterscheidet sich bei $t = 0$ infinitesimal vom Wert $\phi_{n \neq n_1} = \sqrt{a}$ ($a = 0.16$). Ohne die Dynamik für die Phase $\theta(t)$ für den Ansatz (3.33) exakt zu kennen, kann der Verlauf der Dimer-Energie H^D in Abhängigkeit vom Übergangsparmeter ν gut vorhergesagt werden. Es sind lediglich die Ergebnisse für relativ kleine Werte ν gezeigt, damit das Hin- und Herpendeln der Systemenergie zwischen den Werten H_{max}^D und H_{min}^D deutlich wird.

b: Für größere Werte von $\nu \approx 0.5$ und damit großen Werten $|\phi_o|^2 \approx 250 a$ weichen die Simulationsergebnisse vom theoretischen Verlauf $H^D \approx H_{max}^D \approx H_{min}^D$ ab, weil der Zeitschritt der numerischen Integration nicht mehr ausreicht, um die schnelle Dynamik $\phi_o(t)$ zu beschreiben, was außerdem mit einer schnellen Änderung der Erhaltungsgröße \mathcal{N} einhergeht.

3.4 Thermalisierung

Obwohl die Existenz diskreter Breather theoretisch in vielen Systemen bewiesen wurde, gibt es kontroverse Diskussionen bezüglich ihrer Relevanz im Fall endlicher Temperaturen. Nur bei großen Lebensdauern der Anregungen in Gegenwart thermischer Fluktuationen kann man davon ausgehen, dass sie zu Transporteigenschaften in Kristallen oder Biomolekülen beitragen. Deshalb ist besonders interessant zu klären, unter welchen Bedingungen persistente Breather im System entstehen. Wegen der neueren Anwendungen der DNLS bei optischen Wellenleitern und bei der Beschreibung von Bose-Einstein-Kondensaten sind besonders bei DNLS-Gleichungen, insbesondere der DNLS mit kubischer Nichtlinearität, viele Fortschritte erzielt worden [39, 43]. Es wäre erstrebenswert, diese Ergebnisse auf erweiterte DNLS-Modelle und andere nichtlineare Gitter, für die die DNLS unter gewissen Bedingungen eine Näherung darstellt, zu übertragen [44]. Bei der DNLS stehen besonders Erweiterungen auf die physikalisch relevanteren Situationen zwei- und dreidimensionaler Systeme im Vordergrund, weswegen oftmals eindimensionale DNLS-Gleichungen mit allgemeinerer Nichtlinearität ($|\phi_n|^{2\sigma} \phi$, $\sigma \neq 1$) untersucht werden, die ähnliche Eigenschaften zeigen wie die DNLS in zwei und drei Dimensionen. Beispielsweise ergibt sich bei $\sigma > 1$ wie in zwei- und dreidimensionalen Systemen eine Energielücke für die Anregung von diskreten Breathern. Die Bedingung für das Vorhandensein einer Energielücke im Anregungsspektrum entspricht der aus dem Vakhitov-Kolokolov-Kriterium abgeleiteten Bedingung für den Kollaps der NLS-Grundzustandslösung: $\sigma D > 2$. Die Tight-Binding DNLS-Approximation von Bose-Einstein-Kondensaten motiviert dagegen die Situation $\sigma < 1$ [45].

Verwandte Gittermodelle, wie das Peyrard-Bishop-Dauxois-Modell [46], werden zur Beschreibung der DNA benutzt, da durch sie die experimentell beobachtete diskrete Dynamik der Basenpaare bei wichtigen Prozessen (z.B. lokales Öffnen, Transkription) gut beschrieben wird [47]. Da die DNLS ein System mit zwei Erhaltungsgrößen ist (Energie und Norm), zeigen sich andere Eigenschaften als etwa in Klein-Gordon- oder Fermi-Pasta-Ulam-Systemen [48]. Dies ist auch der Grund, weshalb die Energielokalisierung in der DNLS gut durch eine großkanonische statistische Beschreibung vorhergesagt werden kann [39, 43, 44]. Dabei lässt sich allgemein beantworten, welche Anfangsbedingungen im System (Energie und Norm) zu persistenter Energielokalisierung führen. Frühere Ergebnisse zur linearen Instabilität ebener und stehender Wellen in der DNLS [2] oder einer spontanen Breather-Bildung aus einem anfangs von thermischen Fluktuationen beherrschten Untergrund wurden vor einiger Zeit als erster Schritt zu Energielokalisierung in nichtlinearen Systemen betrachtet [49]. Oftmals wurde lineare Instabilität in einem System automatisch mit der Fähigkeit zur Ausbildung persistenter Breather gleichgesetzt. In der statistischen Beschreibung lässt sich anhand der Werte für die Energie und Norm des Systems vorhersagen, ob normales (Gibbsches) Thermalisierungsverhalten im System oder persistente Energielokalisierung eintritt, was in [43] als ein Phasenübergang zu einem überhitzten Zustand des Systems mit formal negativen Temperaturen beschrieben wurde. Die Bedingung für den Phasenübergang, eine benötigte mittlere Energiedichte (für eine bestimmte mittlere Norm) im System, entspricht dabei für den Fall $\sigma = 1$ genau der Bedingung für die lineare Instabilität einer stehenden Welle [44]. In [39] wurde analytisch gezeigt, dass die Bildung persistenter Breather aus einer Minimierung der Entropie des gesamten Systems folgt.

In diesem Kapitel soll es um die Einflüsse langreichweitiger Wechselwirkungen auf die statistische Mechanik des DNLS-Systems gehen. Dabei wird wie im vorigen Abschnitt von harmonischen exponentiell abklingenden Wechselwirkungen vom Kac-Baker-Typ ausgegangen. Im Grenzwert $\alpha \rightarrow \infty$ ergeben sich die Ergebnisse für die in [39, 43, 44] betrachteten DNLS. Es soll dabei nicht in erster Linie um die Eigenschaften einzelner diskreter Breather und deren Wechselwirkung untereinander bzw. mit Phononen gehen, sondern um die Norm-Lokalisierung η und die mittlere Besetzungswahrscheinlichkeit $p_n = \langle |\phi_n|^2 / \mathcal{N} \rangle$ für das DNLS-System als Funktion des Wechselwirkungsradius α^{-1} .

Ein Maß für Energielokalisierung, definiert als $\sum_n |\phi_n|^4 / \sum_n |\phi|^2$, wurde bereits in [50] für die

DST-Gleichung benutzt, um die Energieverteilung der C=O-Schwingungen beim Protein Adenylat Kinase (bestehend aus $f = 194$ Aminosäuren) zu bestimmen, wobei die $f(f - 1) = 18721$ Nichtdiagonalelemente zufällig festgelegt wurden. Das Ergebnis der Untersuchung war, dass es in der DST bei relevanten Werten der Nichtlinearität zu einer Energielokalisierung vom Anderson-Typ kommt. Aktuelle experimentelle und theoretische Ergebnisse bezüglich der Temperaturabhängigkeit der Energielokalisierung in Proteinen bei physiologischen Temperaturen deuten (wie bereits vorher erwähnt) ebenfalls auf die Dominanz der Anderson-Lokalisierung durch dynamische und statische Unordnung über den Davydovschen Selbst-Lokalisierungs-Mechanismus hin.

Durch Hinzunahme langreichweitiger Wechselwirkungen wird sich zeigen, dass die lineare Instabilität einer ebenen Welle (als Anfangsbedingung) keine hinreichende Bedingung für die Ausbildung persistenter Breather darstellt, sondern dass die statistische Betrachtungsweise notwendig ist, um die persistente Breather-Phase zu beschreiben.

Die statistische Beschreibung für Energielokalisierung in der DNLS wurde vor kurzem auf die DNLS-Näherung eines KG-FPU-Systems (mit anharmonischen Oszillator- und Wechselwirkungspotenzialen) angewendet [51]. Dabei wurde festgestellt, dass die Phasenkurve im Konfigurationsraum stark vom Verhältnis der Anharmonizitäten des Oszillatorpotenzials und des Wechselwirkungspotenzials abhängt und dass die Bedingung für lineare Instabilität nicht zur Vorhersage persistenter Energielokalisierung ausreicht. Für starke Wechselwirkungspotenziale ergibt sich ein Szenario ähnlich der Thermalisierung eines FPU-Systems, bei dem sich nach langen Zeiten nur noch eine mobile großamplitudige Anregung im System befindet, die durch Kollisionen mit den Phononen eine Zufallsbewegung zeigt (daher ihre Bezeichnung als chaotische Breather) [52], was zu der in [53] beobachteten Positionsvarianz $\sim t^{3/2}$ führt. Im Gegensatz zu KG- und DNLS-Systemen, wo immobile diskrete Breather nach einiger Zeit nicht mehr mit ihrer Umgebung wechselwirken, wurden in ein- und zweidimensionalen FPU-Systemen die Zerstörung des chaotischen Breathers durch Wechselwirkungen mit langwelligen Phononen beobachtet [52, 54].

3.4.1 Simulation

Die Ausbildung von persistenten Brethern in der DNLS basiert auf inelastischen Kollisionen der Breather untereinander und mit Phononen. Es wurde gezeigt, dass die einfachste Breather-Lösung der DNLS mit einer Spitze (single-peaked breather) Lyapunov-stabil ist, das heißt, dass sie stabil ist gegen Norm-erhaltende Störungen, was ebenfalls an der Normerhaltung in der DNLS liegt und nicht auf andere Hamiltonsche Gitter zutrifft [2, 55]. Eine dynamische Beschreibung der Breather-Breather- und Breather-Phonon-Wechselwirkungen (die nicht in Rahmen von Stabilitätsanalysen möglich ist) ist mitunter sehr komplex. Die Breather-Breather-Wechselwirkungen zeigen die Tendenz, dass größere Breather auf Kosten der kleineren wachsen, was auch bei anderen Gittern beobachtet wurde [56, 57]. Breather können von einem Phonon (unter Aussendung eines Phonons mit doppelter Frequenz) Energie aufnehmen. Zu Breather-Zerfall kommt es dagegen nur bei Multi-Phonon-Streuprozessen [58, 59]. Ab einer genügend großen Amplitude scheinen die diskreten Breather sich nicht mehr wesentlich zu verändern (in führender Ordnung einer Störungsrechnung), wobei nicht klar ist, ob dies den Endzustand des Systems darstellt oder ob es zu einem Breather-Zerfall für lange Zeiten kommen kann (wie bei FPU-Systemen beobachtet [60]). Bei Untersuchungen der DNLS mit nichtlinearer Dämpfung und weißem Rauschen (einer Idealisierung des farbigen Rauschens in [27]) sind sehr langlebige großamplitudige Breather gefunden worden mit einer in der Zeit linearen Zerfallsrate, die proportional zur Rauschstärke im System ist.

Ein qualitatives Verständnis dafür, welche (räumlich ausgedehnten) Anfangsbedingungen zur Ausbildung von persistenten Brethern führen, erfordert eine statistische Beschreibung. Die Resultate in [39, 43, 44] können vereinfacht folgendermaßen zusammengefasst werden:

Das Formieren persistenter Breather ist grundsätzlich der Versuch eines überhitzten Systems (mikrokanonisch $T < 0$), sich selbst durch das Kreieren einiger „hot spots“ aus lokalisierter Energie

zu kühlen. Im mikrokanonischen Ensemble (\mathcal{N} , H konstant) lässt sich zeigen, dass dieser Prozess entropisch getrieben ist, wobei das System bei $\beta = 0$ (β ist die inverse Temperatur) einen Zustand maximaler Entropie einnimmt und weitere Energie an die „hot spots“ abgibt, um den für das restliche System der kleinamplitudigen Fluktuationen günstigen Zustand mit $\beta = 0$ aufrechtzuerhalten. Die maximale Energie des Systems entspricht einem einzelnen Breather mit Norm \mathcal{N} . Verwendet man die Energie als einen durch die Anfangsbedingungen veränderbaren Parameter, so nimmt die Anzahl von Mikrozuständen im System (für feste Norm) für wachsende Energie in der persistenten Breather-Phase ab, was gemäß der Definition der Temperatur $1/T = (\partial S/\partial E)_{\mathcal{N}}$ der Situation negativer Temperaturen entspricht.

Die Energiezunahme führt zu einer wachsenden Lokalisierung der Norm, die in den folgenden Simulationen anhand der Größe

$$\eta = N \frac{\sum_i^N |\phi_i|^4}{(\sum_i^N |\phi_i|^2)^2} \quad (3.34)$$

veranschaulicht wird. Die Norm-Lokalisierung kann Werte im Bereich $[1, N]$ annehmen, was bei $\eta = 1$ der Situation einer gleichmäßig verteilten Norm und bei $\eta = N$ der Situation einer kompletten Lokalisierung an einem Oszillator entspricht. Diese Größe gibt keine Informationen über die Art der räumlichen Verteilung, sondern nur über den Grad der Lokalisierung. In der folgenden Abbildung 3.5 sollen mit der Zeitentwicklung der lokalen Normverteilung $p_n = |\phi_n|^2 / \mathcal{N}$ (in Einheiten von $a = \mathcal{N}/N$) die qualitativen Unterschiede bei der Thermalisierung eines Systems (mit Anfangsbedingung II) für die verschiedenen Wechselwirkungsparameter $\alpha = 5$ und $\alpha = 0.2$ dargestellt werden. Die Einbeziehung langreichweitiger Wechselwirkung (bei $\alpha = 0.2$) führt zu deutlichen Unterschieden zum Fall $\alpha = 5$, der praktisch der Situation einer DNLS mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen entspricht. Dabei ist immer zu beachten, dass größere Werte α^{-1} zu kleineren Kopplungskonstanten führen. Der lange Zeitraum der Breather-Breather-Kollisionen für $\alpha = 5$ (Abb. 3.5 a) ist für kleinere Werte von α ersetzt durch einen schnelleren Prozess, bei dem großamplitudige Breather ihrer Umgebung (definiert durch α^{-1}) Energie entziehen. Manchmal befindet sich eine kleinere Anregung in der Nähe einer größeren und wird von dieser ohne Positionsänderung absorbiert (Abb. 3.5 b). Insgesamt ergibt sich durch den langreichweitigen Transfer eine marmorierte Struktur im Gegensatz zu den kollidierenden Trajektorien bei Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen. Abgesehen von der schnelleren Lokalisierung ergeben sich auch größere Werte für η für lange Zeiten. Ein anderer Unterschied besteht beim Quasikollaps-Prozess zu Beginn der Simulation (wenn nach etwa 350 Zeiteinheiten die diskreten Breather in der Abbildung 3.5 erscheinen), der für $\alpha = 0.2$ wesentlich stärker zu sein scheint.

Nach diesen augenscheinlichen Unterschieden soll nun die Statistik der DNLS und deren Abhängigkeit von α untersucht werden. In [43] wurde die Wahrscheinlichkeit $p_n(A_n)$ eines Oszillators, eine gewisse Norm $A_n = |\phi_n|^2$ ($\phi_n(t) = \sqrt{A_n(t)} e^{i\theta_n(t)}$) zu haben, mit der Transfer-Integral-Methode numerisch bestimmt (unter der Annahme eines unendlich ausgedehnten Systems). Es wurde gezeigt, dass sich im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ ein linearer Zusammenhang zwischen $\text{Log}[p(A_n)]$ und A_n ergibt ($\text{Log}[p(A_n)] \sim -\Gamma A_n$) mit $\Gamma = \beta\mu$, wobei μ das chemische Potenzial bezeichnet, das im Grenzfall großer Temperaturen gegen große Werte geht, so dass Γ endlich bleibt. Das chemische Potenzial μ folgt aus der Interpretation der Norm \mathcal{N} als Teilchenzahl im System. Dieses Resultat konnte durch analytische Rechnung bestätigt werden, da die großkanonische Zustandssumme im Grenzfall $\beta \rightarrow 0$ relativ einfach berechnet werden kann. In Anhang E wird gezeigt, dass sich selbst im Fall langreichweitiger Wechselwirkungen das gleiche Ergebnis ergibt. Im Fall positiver oder negativer Temperaturen ergibt sich für die Kurve $\text{Log}[p(A_n)]$ eine negative oder positive Krümmung. Dieses Verhalten konnte auch durch Simulationen der DNLS mit allgemeinerer Nichtlinearität nachgewiesen werden, bei denen die Werte A_n über lange Zeiten gemittelt wurden [44]. Für kleine Fluktuationen (kleine Werte A_n) ergibt sich im Bereich negativer Temperaturen in den in [43, 44] betrachteten Fällen stets eine lineare Abhängigkeit $\text{Log}[p(A_n)] \sim -A_n$ und die Krümmung setzt

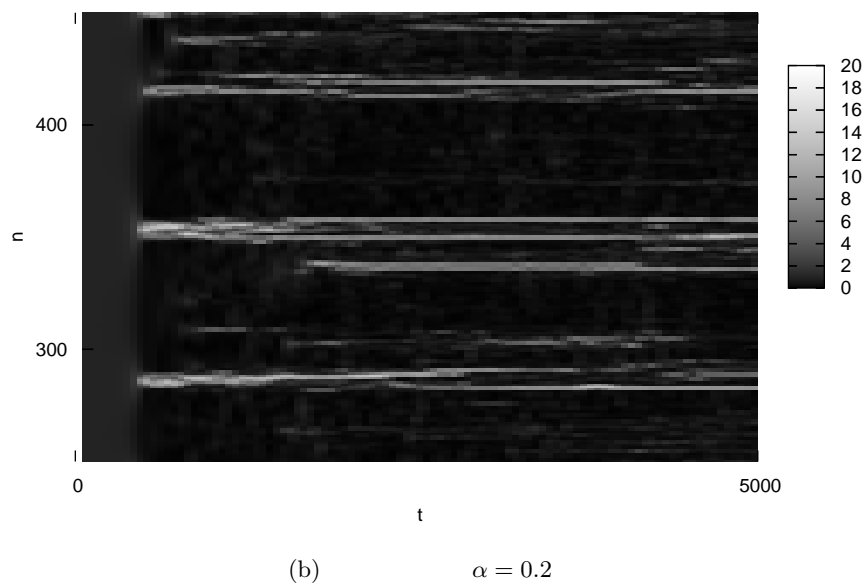
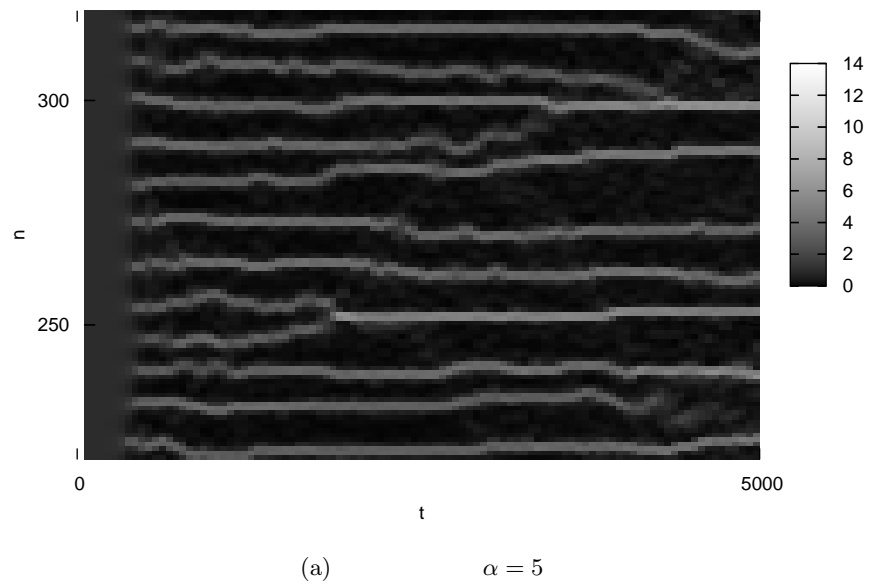


Abbildung 3.5: Zeitentwicklung von $|\phi_n|^2$ der DNLS mit ($B = 0.1$, $J = 0.1$) ohne Dämpfung ($\gamma = 0$) mit $\alpha = 5$ (a) und $\alpha = 0.2$ (b) mit der Anfangsbedingung II und $a = 0.16$. Für den kleineren Wert $\alpha = 0.2$ ergeben sich keine Breather-Kollisionen, sondern langreichweitiger Transfer von Energie und Norm, was zu einer marmorierten Struktur der Norm-Verteilung führt.

erst bei größeren Werten für A_n ein. Dieses Ergebnis rechtfertigt den Ansatz von Rumpf [39], den Wertebereich der Amplituden in zwei Teile aufzuspalten: Den der kleinamplitudigen Fluktuationen mit einer statistischen Verteilung, die dem Wert $\beta = 0$ entspricht, und den Teil der persistenten Breather bei größeren A_n , was die für negative Temperaturen typische positive Krümmung von $\text{Log}[p(A_n)]$ hervorruft.

Im folgenden soll die Wahrscheinlichkeit $p(A)$, im System die lokale Norm $A = A_n$ bei einem Oszillator n zu finden, für das System (3.1) bei den verschiedenen Werten $\alpha = 5$, $\alpha = 0.2$ und $\alpha = 0.04$ gemessen werden, um den Einfluss der langreichweitigen Wechselwirkungen im thermalisierten System herauszustellen. Dabei wurden nach einer ausreichend langen Wartezeit bei mehr als 1000 verschiedenen Zeiten in einem System mit 4096 Oszillatoren die Werte A_n gemessen, aufgezeichnet und aus den mehr als $4 \cdot 10^6$ Datenpunkten die Wahrscheinlichkeit $p(A)$ berechnet. In Abbildung 3.6 sind die Verläufe dargestellt, die sich ergeben, wenn das System (nach einigen 10^5 Zeitschritten) das thermische Gleichgewicht erreicht hat, was durch konstante Mittelwerte von $p(A)$ und η angezeigt wird. Es ergeben sich durch die Einführung langreichweitiger Wechselwirkungen einige wichtige Unterschiede im Gleichgewichtszustand. Der Bereich bei kleinen Werten A , bei dem $\text{Log}[p(A)]$ linear in A ist, ist für kleinere α auf deutlich kleinere Werte A reduziert und ändert seinen Verlauf. Im weiteren ist festzustellen, dass das Minimum für mittlere Werte A für kleinere Werte α verschwindet und durch einen nahezu horizontalen Verlauf in diesem Bereich ersetzt wird. Die Ergebnisse zeigen also deutlich, dass die Aufteilung des Phasenraums in den Bereich kleinamplitudiger Fluktuationen (bei $\beta = 0$) und großamplitudiger Breather für langreichweitige Potenziale nicht mehr gegeben ist. Insgesamt scheint eine Umverteilung der Norm vom Gebiet kleiner Werte auf mittlere und große Werte für A stattzufinden. Es ist für beliebige Anfangsbedingungen problematisch, die Effekte der langreichweitigen Wechselwirkungen auf die Thermalisierung, wie in Abbildung 3.5 gemacht, nur durch Ändern des Wechselwirkungsradius α^{-1} zu untersuchen, da die Energie des Systems von α abhängt. Da aber die Anfangsbedingungen I und II ($|\phi_n| = \sqrt{A_n} e^{i\theta_n} = \sqrt{a}$) dem System die α -unabhängige maximal mögliche Energie (bei gleichmäßig verteilter Norm) zuführen, besitzt das System aus Abbildung 3.6 für alle drei Werte von α die gleiche Energie.

Man kann analog zu [44] vorgehen, um für eine gleichmäßig verteilte feste Norm $\mathcal{N} = Na$ im System die maximale Energie $-H^u$ (für $\phi_n(0) = \sqrt{a}$), die minimale Energie $-H^s$ (für $\phi_n(0) = \sqrt{a} e^{i\pi n}$) und die Energie $-H_{\beta=0+}$ beim Phasenübergang zu bestimmen (siehe Anhang E). Die Größe $-H^u$ bezeichnet die maximale Energie des Systems, die durch Veränderung der Phasen θ_n erreicht werden kann. Der eigentliche obere Grenzwert der Energie $-H$ ist natürlich durch einen einzelnen Breather mit der Norm \mathcal{N} gegeben. Doch dieser Zustand ist durch die Abkopplung der Breather-Dynamik von der Umgebung für große Breather auf natürlichem Wege nicht erreichbar [58].

Die Minuszeichen bei den Energien (3.35-3.38) erscheinen, damit die folgenden Grafiken einfacher mit denen in [43, 44] verglichen werden können, wo die Energie (3.3) mit einem anderen Vorzeichen definiert wurde. Für die mittlere Energiedichte $-h = -H/N$ und die mittlere Norm $a = \mathcal{N}/N$ lässt sich dann ein dem in [43] entsprechendes Phasendiagramm zeichnen, wobei gilt

$$-h_{\beta=0+} = -\frac{H_{\beta=0+}}{N} = -Ja + \frac{3}{2}Ba^2 \quad (3.35)$$

$$-h^s(\alpha \rightarrow \infty) = -\frac{H^s(\alpha \rightarrow \infty)}{N} = -2Ja + \frac{3}{4}Ba^2 \quad (3.36)$$

$$-h^s(\alpha \rightarrow 0) = -\frac{H^s(\alpha \rightarrow 0)}{N} = -Ja + \frac{3}{4}Ba^2 \quad (3.37)$$

$$-h^u = -\frac{H^u}{N} = \frac{3}{4}Ba^2 \quad (3.38)$$

Nur die untere Grenze $-H^s$ von $-H$ (3.3) hängt von α ab. In die obere Grenze $-H^u$ und in die Phasenübergangsenergie $-H_{\beta=0+}$ geht der Wechselwirkungsanteil der Hamiltonfunktion (3.3) nicht ein. Im Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ verschwindet der Bereich der Gibbschen Thermalisierung für kleine Werte a

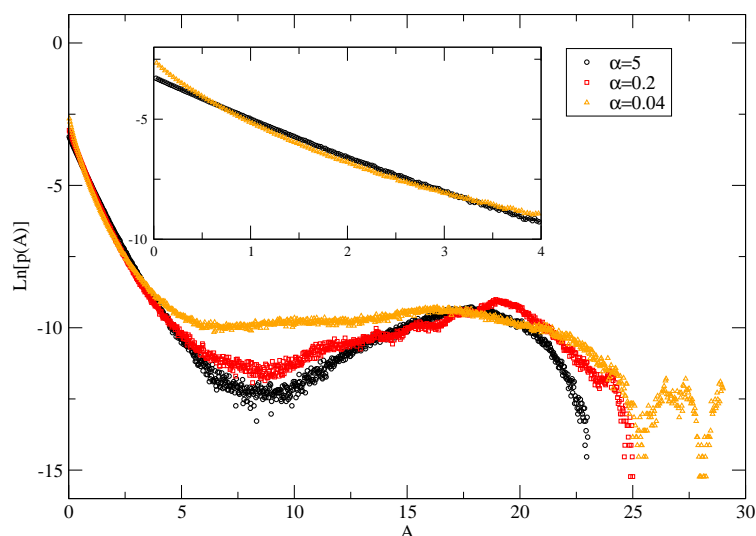


Abbildung 3.6: Zeitgemittelte und normalisierte Verteilung $p(A_n)$ für die DNLS mit Anfangsbedingung II mit $a = 0.16$. Die Daten wurden durch Mittelung über 1000 Zeitpunkte in einem System mit $N = 4096$ Gitterpunkten ($\sim 4 \times 10^6$ Datenpunkte) in einer Zeit von $\sim 10^5$ Zeitschritten gewonnen, nachdem die Lokalisierung η einen zeitlich konstanten Mittelwert erreicht hatte. Die Simulation wurde jeweils mit den Werten $\alpha = 5$ (schwarze Kreise), $\alpha = 0.2$ (rote Quadrate) und $\alpha = 0.04$ (orange Dreiecke) durchgeführt. Der Wechselwirkungsradius α^{-1} hat starken Einfluss auf den Verlauf von $p(A)$, obwohl die Kopplung $J(\alpha, N)$ für große Wechselwirkungsradien sehr klein wird.

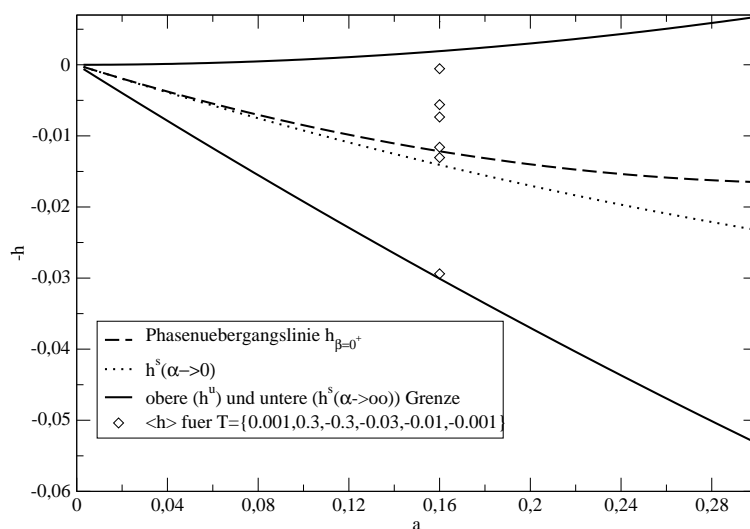


Abbildung 3.7: Die Abbildung gibt die Abhängigkeit der Energiedichten $-h = -H/N$ (3.35-3.38) von a wieder. Die Datenpunkte stellen die mittleren Energiedichten $\langle h \rangle$ bei den Temperaturen aus der Abbildung 3.11 für die DNLS (3.1) mit $B = J = 0.1$ und $\gamma = 0$ dar.

und man befindet sich für alle möglichen Energien $-h$ in der Phase persistenter Energielokalisierung. Um zu untersuchen, ob die bisher nur für $H = H^u$ (Abbildung 3.6) beobachtete Tendenz einer mit α^{-1} anwachsenden Lokalisierung im ganzen Energiespektrum vorliegt, muss ein Weg gefunden werden, systematisch Anfangsbedingungen des DNLS-Systems mit fester Norm und Energie für verschiedene Werte α zu generieren. Diese Anfangsbedingungen werden für das System 3.1 (für ein bestimmtes α) ausgehend von Anfangsbedingung II nur durch zufällige Veränderungen der Phasen θ_n erzeugt, was die Energie des Systems ändert, aber die Norm \mathcal{N} unverändert lässt. In der folgenden Simulation wird sich auf den Fall $B = J = 0.1$, $a = 0.16$ und $N = 512$ beschränkt, was zu den Energien (siehe Anhang E)

$$\begin{aligned} -H_{\beta=0^+} &= -6.23, & -H^s(\alpha \rightarrow \infty) &= -15.40 \\ -H^s(\alpha \rightarrow 0) &= -7.21, & -H^u &= 0.98 \end{aligned} \quad (3.39)$$

führt. Diese Werte korrespondieren zu den Energiedichten in der Abbildung 3.7 für den Wert $a = 0.16$. In der Abbildung 3.8 sind die Ergebnisse für den Mittelwert der Lokalisierung η für die Werte $\alpha = 5$ und $\alpha = 0.2$ für verschiedene Energien dargestellt. Man kann erkennen, dass die obere und untere Grenze der möglichen Systemenergien für $\alpha = 5$ und $\alpha = 0.2$ bereits sehr gut mit den Werten (3.39) für $\alpha \rightarrow \infty$ und $\alpha \rightarrow 0$ übereinstimmen. Die Mittelwerte von η bei der Phasenübergangsenergie stimmen für die beiden gewählten Werte α überein, was zu erwarten ist, da für $\beta = 0^+$ die großkanonische Zustandssumme (und somit die statistischen Mittelwerte im System) nicht mehr von der konkreten Form des harmonischen Wechselwirkungspotenzials abhängen.

3.4.2 Monte-Carlo-Simulationen

Die im letzten Abschnitt dargestellten Ergebnisse in Abbildung 3.8 zeigen, dass die Einführung eines größeren Wechselwirkungsradius α^{-1} zu einer merklichen Zunahme der Norm-Lokalisierung bei konstanter Norm \mathcal{N} und Energie $-H$ führt. Um die Thermodynamik des DNLS-Systems weiter zu studieren, sollen die bisherigen Studien (am mikrokanonischen Ensemble) durch die experimentell relevantere Fragestellung nach der Temperaturabhängigkeit der Lokalisierung ergänzt werden (kanonisches Ensemble). Deshalb wurde eine zweite Serie von Messungen der Lokalisierungsstärke η für vorgegebene Temperaturen T unternommen, wobei die Anfangsbedingungen des Systems durch Hybrid-Monte-Carlo-Simulationen generiert wurden. Dabei wurden die Phasen θ_n des Systems auf zufällige Weise manipuliert (was zur einer Änderung ΔH der Systemenergie führt) und eine neue Konfiguration mit der Wahrscheinlichkeit $\exp(-\beta\Delta H)$ akzeptiert. Wenn die Änderungsrate (mit der neue Konfigurationen akzeptiert werden) zu klein wird, wird das System durch mikrokanonische Simulationen aufgefrischt. Die Monte-Carlo-Methode wurde auf positive und negative Temperaturen angewendet. Nach vielen Monte-Carlo-Schritten erreicht das System den Zustand mit einem konstanten Mittelwert der Energie $-H$, der von der gewählten Temperatur T und dem Wechselwirkungsradius α^{-1} abhängt (siehe Abbildung 3.9). In Abbildung 3.9 sind die Mittelwerte (mit Fehlerbalken) der Systemenergien für $\alpha = 5$ und $\alpha = 0.2$ gegen den Betrag der Temperatur aufgetragen. Dabei befinden sich die Werte für positive (negative) Temperaturen unterhalb (oberhalb) der gestrichelten Linie. Es ist deutlich zu sehen, dass die Monte-Carlo-Simulationen die Vorhersagen für die Energie des Phasenübergangs $-H_{\beta=0^+}$ bestätigen. Für betragsmäßig große positive oder negative Werte für T ($\beta \rightarrow 0$) nimmt das System den berechneten Wert $-H_{\beta=0^+} = -6.23$ (gestrichelte Linie) an. Bei ungleichmäßiger Verteilung der Norm sind für das System größere Energien als $-H^u$ möglich. Die Ergebnisse des hier betrachteten Monte-Carlo-Verfahrens stimmen im Bereich $\beta \approx 0^+$ sehr gut mit den Vorhersagen der Theorie überein. Im Grenzfall $T \rightarrow 0^-$ ergibt sich aber in den Simulationen eine sehr langsame Konvergenz, was eventuell am Algorithmus liegt (critical slow down) oder/und an der erwähnten Trägheit großamplitudiger diskreter Breather, über eine gewisse Größe hinaus weiter zu wachsen. Dieses Problem und die Auswirkungen auf die Monte-Carlo-Technik erfordern weitere Untersuchungen. In der bestehenden Literatur zur DNLS

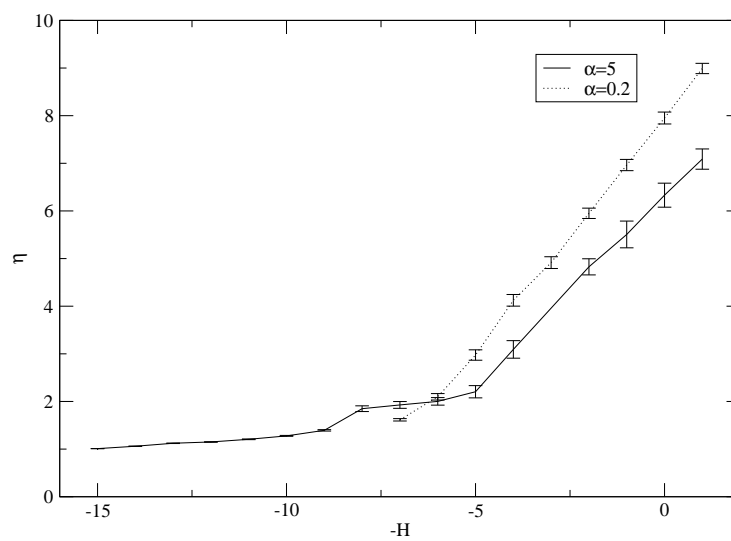


Abbildung 3.8: Der zeitliche Mittelwert der Norm-Lokalisierung η (gemittelt über 1000 Messpunkte) als Funktion der Energie. Die Resultate (3.39) für $\alpha \rightarrow 0$ und ∞ stimmen sehr gut mit dem in der Grafik sichtbaren Wertebereich von H für $\alpha = 5$ und 0.2 überein. Bei der Energie $H_{\beta=0^+} = -6.23$ ist der Wert von η gleich für die beiden Werte von α , was zu erwarten ist, da für $\beta = 0^+$ die großkanonische Zustandssumme (und somit die statistischen Mittelwerte im System) nicht mehr von der konkreten Form des harmonischen Wechselwirkungspotenzials abhängen. ($B = J = 0.1$, $a = 0.16$, $N = 512$)

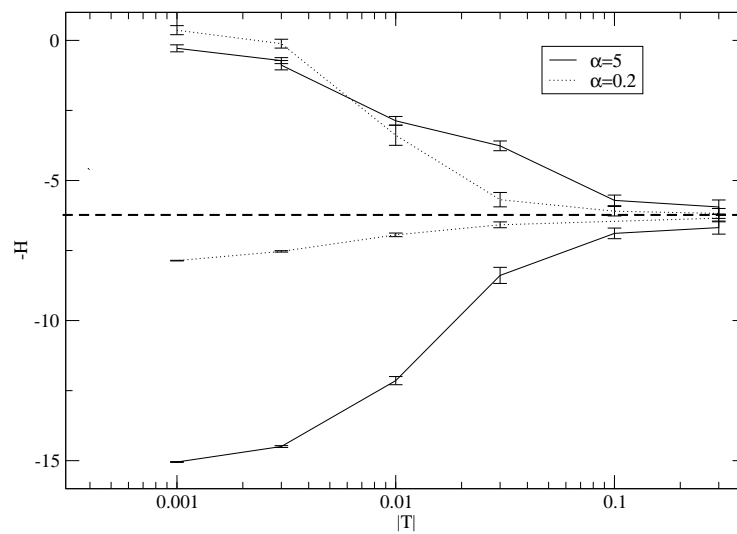


Abbildung 3.9: Es sind die Mittelwerte (mit Fehlerbalken) der Systemenergien für $\alpha = 5$ und $\alpha = 0.2$ gegen den Betrag der Temperatur aufgetragen. Dabei befinden sich die Werte für positive (negative) Temperaturen unterhalb (oberhalb) der gestrichelten Linie. Für betragsmäßig große positive und negative Temperaturen T führt die Vorgehensweise unabhängig vom Wert α auf eine Systemenergie von $-H = -H_{\beta=0^+} = -6.23$ (gestrichelte Linie). ($B = J = 0.1$, $a=0.16$, $N = 512$)

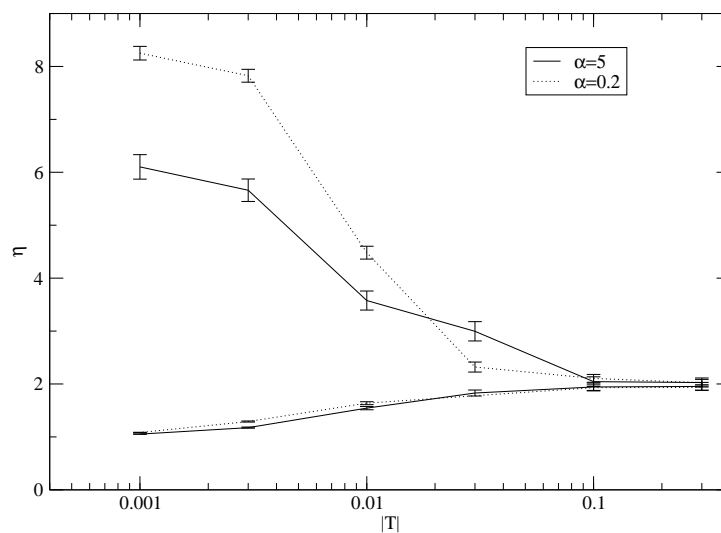


Abbildung 3.10: Der Mittelwert der Norm-Lokalisierung η als Funktion der Systemtemperatur für $\alpha = 5$ und $\alpha = 0.2$. Die Anfangsbedingungen wurden mit Monte-Carlo-Simulationen der DNLS gewonnen. Die Werte oberhalb des Wertes $\eta \approx 2$ im Hochtemperaturlimes gehören zu negativen Temperaturen und die Werte unterhalb zu positiven Temperaturen. ($B = J = 0.1$, $a=0.16$, $N = 512$)

gibt es meines Wissens bisher keine ähnlichen Studien, die die DNLS-Dynamik mit der Monte-Carlo-Methode kombinieren.

Die erhaltenen Systemkonfigurationen wurden als Anfangsbedingung weiterer mikrokanonischer Simulationen benutzt, um die Lokalisierung $\eta(T)$ in Abhängigkeit von der Temperatur zu bestimmen. Es ist zu sehen, dass der Verlauf von $\eta(T)$ im Bereich negativer Temperaturen stark von α abhängt. Für stark überhitzte Systeme $T \rightarrow 0^-$ zeigen sich für größere Wechselwirkungsradien (und somit kleiner Kopplung $J(\alpha, N)$) deutlich größere Werte für η . In den Arbeiten [43, 44] wird das Phänomen als Phasenübergang bezeichnet, wohingegen in [39] nicht von einem Phasenübergang gesprochen wird. Die Bezeichnung als Phasenübergang suggeriert die Vorstellung einer bei der kritischen Temperatur plötzlich einsetzenden Veränderung des Ordnungsparameters des Systems (in unserem Fall η), aber der Verlauf von η bei $|\beta| \rightarrow 0$ erscheint in den Simulationen sehr glatt. Der Zusammenhang des Übergangs zur persistenten Breather-Phase mit dem Konzept des Phasenübergangs stammt aus der Überlegung [43, 44], dass anstelle der Norm \mathcal{N} als effektive Teilchenzahl in der großkanonischen Zustandssumme \mathcal{Z} (die für $\beta < 0$ divergiert) der Ausdruck \mathcal{N}^2 stehen sollte. Im Bereich $T \rightarrow 0^-$ wird die Energie hauptsächlich auf persistente großamplitudige Anregungen verteilt, für die $H \sim \mathcal{N}^2$ gilt. Für genügend kleine Werte des neuen (zu \mathcal{N}^2 korrespondierenden chemischen Potentials) erreicht man einen konvergierenden Ausdruck für \mathcal{Z} . Diese Vorgehensweise und die Anwendung der Transfer-Integral-Methode liefert in [43] gute Übereinstimmung mit den Simulationen. Die bei $\beta = 0$ erscheinende Diskontinuität der großkanonischen Zustandssumme bei $\beta = 0$ sollte dann nach den Regeln der Statistischen Mechanik als Phasenübergang beobachtbar sein.

In den Simulationen kann man bei verschiedenen Temperaturen die Ausbildung der persistenten Breather direkt verfolgen. Bei der Bildung persistenter Breather sollte festzustellen sein, dass die Anregungswahrscheinlichkeit $p_n = |\phi_n|^2 / \mathcal{N}$ bei bestimmten Oszillatoren n im Zeitmittel größer ist als bei anderen Oszillatoren. An Orten, bei denen sich persistente Breather ausbilden, sollte sich der beobachtete Wert p_n deutlich von seinem Mittelwert $1/N$ unterscheiden. Wie man in Abbildung 3.11 (für $\alpha = 5$) sehen kann, verhält sich p_n im Limes $T \rightarrow \infty$ (bei dem theoretisch der Phasenübergang eintreten muss) sehr homogen (Temperatur $T = 0.3$, $T = -0.3$). Erst bei betragsmäßig kleineren negativen Temperaturen wie $T = -0.001$ sind deutliche Spitzen in der Anregungswahrscheinlichkeit p_n zu erkennen. Da die $\beta = 0^+$ -Linie im Phasenraum die Stellen markiert, bei denen die Ausbildung großamplitudiger persistenter Anregungen anläuft, sind dort anschaulich auch keine drastischen Änderungen zu erwarten. Da keine quantitativen Informationen über die Analytizität der großkanonischen Zustandssumme \mathcal{Z} an diesem Punkt bekannt sind, ist die Bezeichnung des Vorgangs als Phasenübergang vielleicht etwas irreführend.

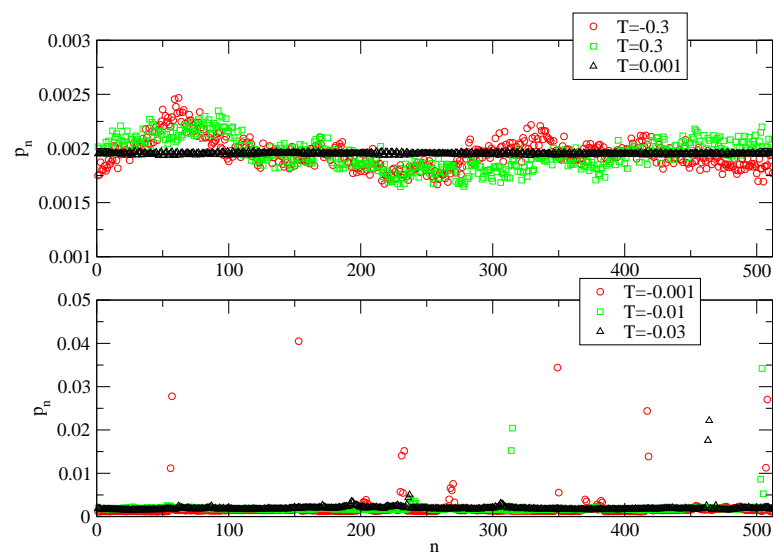


Abbildung 3.11: Die Mittelwerte der Besetzungswahrscheinlichkeit p_n für sechs unterschiedliche Temperaturen (oben: $T = -0.3$ (Kreise), $T = 0.3$ (Quadrate), $T = 0.001$ (Dreiecke); unten: $T = -0.001$ (Kreise), $T = -0.01$ (Quadrate), $T = -0.03$ (Dreiecke)) zeigen erst bei betragsmäßig relativ kleinen negativen Temperaturen wie $T = -0.001$ eine signifikante Ausbildung von persistenten Anregungen. ($B = J = 0.1$, $a=0.16$, $N = 512$, $\alpha = 5$)

3.4.3 Lineare Stabilität

Die lineare Instabilität von ebenen Wellenlösungen wurde in der Vergangenheit als erster Schritt zur Energielokalisierung in nichtlinearen Gittern bezeichnet [49]. Aber wie schon in [51] für die FPU-KG-DNLS-Gleichung geschehen, soll hier für die DNLS mit langreichweitigen Wechselwirkungen (3.1) demonstriert werden, dass die lineare Instabilität keine hinreichende Bedingung für die Ausbildung persistenter Anregungen darstellt. Für die DNLS ergibt sich die lineare Instabilität stehender Wellen $\phi_n = \sqrt{a} \cos(qn + \beta)$ für den gleichen Zusammenhang $h(a)$, der auch für $h_{\beta=0+}$ gilt [44]. Für allgemeine Nichtlinearitäten $\sigma \neq 1$ in der DNLS verschwindet diese Übereinstimmung und es kommt zu Bereichen, in denen linear instabile Anfangsbedingungen auf Gibbsche Thermalisierung führen, aber keine persistenten Breather entstehen.

Um diesen Sachverhalt und die guten Vorhersagen der statistischen Beschreibung der DNLS zu demonstrieren, wird im folgenden die Bedingung für die lineare Stabilität ebener Wellen berechnet und die Resultate mit einigen Simulationen verglichen.

Wenn man eine ebene Welle $\phi_n = \phi_o e^{i(qn - \omega t)}$ in

$$i\dot{\phi}_n - \sum_{m \in \mathbb{Z}} \frac{J_m}{2} (\phi_n - \phi_m) + \frac{3B}{2} |\phi_n|^2 \phi_n = 0 \quad (3.40)$$

einsetzt, erhält man exakte Lösungen mit

$$\omega = \sum_{m \in \mathbb{N}} J_m (1 - \cos(mq)) - \frac{3B}{2} \phi_o^2. \quad (3.41)$$

Eine lineare Stabilitätsanalyse beginnt mit der Einführung einer Modulation der ebenen Welle mit der kleinen Amplitude $b_n \ll \phi_o$ und der kleinen Störphase $\Psi_n \ll \theta_n = qn - \omega t$:

$$\phi_n = (\phi_o + b_n) e^{i(\theta_n + \Psi_n)}. \quad (3.42)$$

In einer linearen Stabilitätsanalyse werden die linearisierten Gleichungen für b_n und Ψ_n betrachtet. Dieses Gleichungssystem liefert mit den Lösungsansätzen ($b_n = b e^{i(Qn - \Omega t)}$, $\Psi_n = \Psi e^{i(Qn - \Omega t)}$) für Ω eine Bedingung der Form

$$\left(\Omega + \sum_{m \in \mathbb{N}} J_m \sin(mq) \sin(mQ) \right)^2 = 2 \sum_{m \in \mathbb{N}} J_m \cos(mq) \sin(0.5mQ)^2 \left(2 \sum_{m \in \mathbb{N}} J_m \cos(mq) \sin(0.5mQ)^2 - 6B\phi_o^2 \right). \quad (3.43)$$

Zu imaginären Werten von Ω (und dadurch zu exponentiellem Anwachsen der kleinen Störung) kommt es, wenn der rechte Teil der Gleichung negativ wird. Dies ist für jeden Wert Q der Fall, wenn die Bedingung

$$\phi_o^2 > \frac{1}{3B} \left| \sum_{m \in \mathbb{N}} J_m \cos(mq) \right| \quad (3.44)$$

erfüllt ist, was beispielsweise für $q = 0$ (Anfangsbedingung I und II) bedeutet, dass alle Modulationen Q für $\phi_o^2 > J/3B$ zu linearer Instabilität führen. In den Simulationen wurden kleinere Werte von ϕ_o benutzt, weswegen sich auch linear stabile Modulationen ergeben.

In Abbildung 3.12 sind für die Werte $J = B = 0.1$ und $\phi_o = \sqrt{a} = 0.4$ die Bereiche linearer Instabilität (schwarz) in der (Q, q) -Ebene für die Werte $\alpha = \{0.2, 5\}$ eingezeichnet. In [61] wurde die lineare Instabilität für die DNLS mit Nächste- und Übernächste-Nachbar-Wechselwirkungen behandelt. Im Falle der Kac-Baker-Wechselwirkungen kann man für die gewählten Parameter

sehen, dass für alle α -Werte im Bereich $q \leq \pi/2$ instabile Modulationen existieren.

In Abbildung 3.13 ist die Zeitentwicklung von $|\phi_n(t)|^2$ für die DNLS (3.1) mit $\gamma = 0$, $N = 512$, $B = J = 0.1$ für die zwei Werte $\alpha = 5$ (Abbildung 3.13 a) und $\alpha = 0.2$ (Abbildung 3.13 b) dargestellt, die zur Zeit $t = 0$ mit einer ebenen Welle mit $q = 100\pi/N = 0.195\pi < \pi/2$ und $\phi_o = 0.4$ initialisiert worden ist. Die lineare Stabilitätsanalyse liefert für diese Parameter für alle Werte α im Bereich $q < \pi/2$ instabile Modulationen. Man kann deutlich erkennen, dass es in beiden Fällen zur Instabilität der für kleine Zeiten vorliegenden wellenförmigen Norm-Verteilung der Anfangsbedingung kommt, aber dass nur im Fall $\alpha = 5$ persistente Breather mit großen Amplituden $A_n > 6$ auftreten. Für $\alpha = 0.2$ sind nur für relativ kurze Zeiten Lokalisierungen in der Norm-Verteilung von maximal $A_n \approx 3$ zu beobachten. Dieses Ergebnis lässt sich mit Hilfe der statistischen Beschreibung erklären. Beide Systeme wurden anfangs mit dem gleichen Wert \mathcal{N} initialisiert, was zur Energie $-H_{\beta=0+} = N(Ja + 3/2 Ba^2) = -6.23$ führt. Da die Energie der Anfangsbedingung von α abhängt, ergibt sich für $\alpha = 0.2$ ein Wert $-H = -6.72$, der im Bereich der normalen Thermalisierung liegt, während man sich für $\alpha = 5$ mit $-H = 0.05$ bereits deutlich in der Phase persistenter Breather befindet. Persistente Energielokalisierung und die damit für echte Systeme wie Festkörper, Magnete oder Biomoleküle verbundenen Konsequenzen können demnach nicht durch lineare Stabilitätsanalysen vorhergesagt werden.

Durch die Statistische Physik der DNLS lassen sich auch qualitativ die Einflüsse von J und B auf die Norm-Lokalisierung für bestimmte Anfangsbedingungen verstehen. Im Fall der eingangs gewählten Anfangsbedingungen I oder II wird das System mit $B = 0.1$ bei gleichmäßig verteilter Norm $\mathcal{N} = Na$ unabhängig vom Wechselwirkungsterm und somit unabhängig von den Werten für J und α mit der Energie $-H = 0.983$ initialisiert. Da die Kurve $h_{\beta=0+}$ maßgeblich vom Wert J abhängt, ist klar, dass für große Kopplungen J ($J \gg Ba$) eine sehr starke und für kleine Kopplungen J ($J \sim Ba$) keine persistente Lokalisierung eintritt. Für große J wird die Phasenübergangsenergie $-H_{\beta=0+}$ zu sehr kleinen Werten verschoben. Das System mit Anfangsbedingung I befindet sich somit in einem Bereich im Phasenraum $-h(a)$, der formal zu negativen Temperaturen korrespondiert. Dynamisch kann man diesen Vorgang als Verbesserung der von J abhängigen Energietransfereigenschaften deuten. In [42] wird für die DNLS gezeigt, dass die Mobilität und die Fähigkeit zur Akkumulation von Norm hauptsächlich vom Wechselwirkungskoeffizienten abhängt, da bei Positionswechsel großamplitudiger Anregungen viel Energie im Wechselwirkungsterm gespeichert werden muss. In Abbildung 3.14 ist zu sehen, dass ein System mit $B = 0.1$ bei schwacher Kopplung $J = 0.01$ (Abbildung 3.14 a, b) und starker Kopplung $J = 1$ (Abbildung 3.14 c, d) völlig unterschiedliche Zustände einnimmt. Die Ursache ist, dass für $J = 1$ die Phasenübergangsenergie den Wert $-H_{\beta=0+} = -79.95$ und für $J = 0.01$ den Wert $-H_{\beta=0+} = 1.15$ annimmt. Deshalb ergibt sich in Abbildung 3.14 (a) und (b) keine Energielokalisierung, sondern lediglich eine fluktuierende Norm-Verteilung. Für $J \gg B$ in 3.14 (c),(d) kommt es zu persistenten Anregungen, wobei der Endzustand für große α durch Breather-Wechselwirkungen und für kleine α über langreichweitigen Energietransfer erreicht wird.

Man kann anhand der Ergebnisse für $h^s(\alpha)$ und $h_{\beta=0+}$ vermuten, dass für große J der Einfluss langreichweitiger Effekte am deutlichsten zu Tage tritt. Immerhin unterscheiden sich die Verläufe der Grundzustandsenergien der DNLS $h^s(\alpha)$ für große J sehr für verschiedene Werte α . Für kleine Werte J ($J \ll Ba$) verlaufen die Kurven $h^s(\alpha \rightarrow 0) = -Ja + 3/4Ba^2$ und $h^s(\alpha \rightarrow \infty) = -2Ja + 3/4Ba^2$ im Phasenraum sehr ähnlich, weil die Nichtlinearität im Vordergrund steht und nicht die dispersiven Terme. Das ist gut zu sehen in den Abbildungen 3.14 (a) und (b), wo sich für $J = 0.01$ für $\alpha = 5$ und $\alpha = 0.2$ sehr ähnliche Lokalisierungsstärken ergeben (obwohl die Strukturen Unterschiede aufweisen). Wenn aber die dispersiven Terme bei großen J oder kleinen a für das System wichtig werden ($J \gg Ba$), ergeben sich sehr große Unterschiede zwischen den Systemen mit oder ohne langreichweitigen Wechselwirkungen (siehe Abbildung 3.7 für kleine a). In der Abbildung 3.14 (c) und (d) ist zu sehen, dass für $J = 1$ im Fall $\alpha = 0.2$

sehr hohe Breather-Amplituden möglich sind und sich im Wesentlichen nur zwei diskrete Breather im System die vorhandene Norm teilen (der zweite bei $n \approx 300$ scheint erst nach Aufnahme von Strahlung bei $t \approx 3800$ immobil zu werden). Für $\alpha = 5$ ist der Mechanismus der Breather-Bildung (inelastische Breather-Breather-Kollisionen) komplett unterschiedlich. Aufgrund der einsetzenden Trägheit der Breather für größere Amplituden ist für $\alpha = 5$ keine vergleichbar starke Lokalisierung möglich.

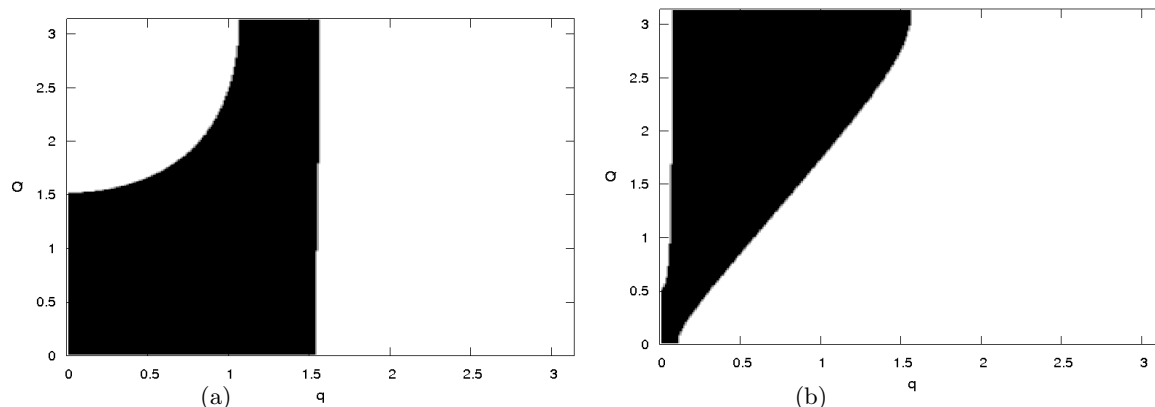


Abbildung 3.12: Die Auswertung der Bedingung (3.43) ergibt für die Parameter $J = B = 0.1$ und $a = 0.16$ und $\alpha = 5$ (a) bzw. $\alpha = 0.2$ (b) die schwarz dargestellten Bereiche linearer Instabilität in der (q, Q) -Ebene.

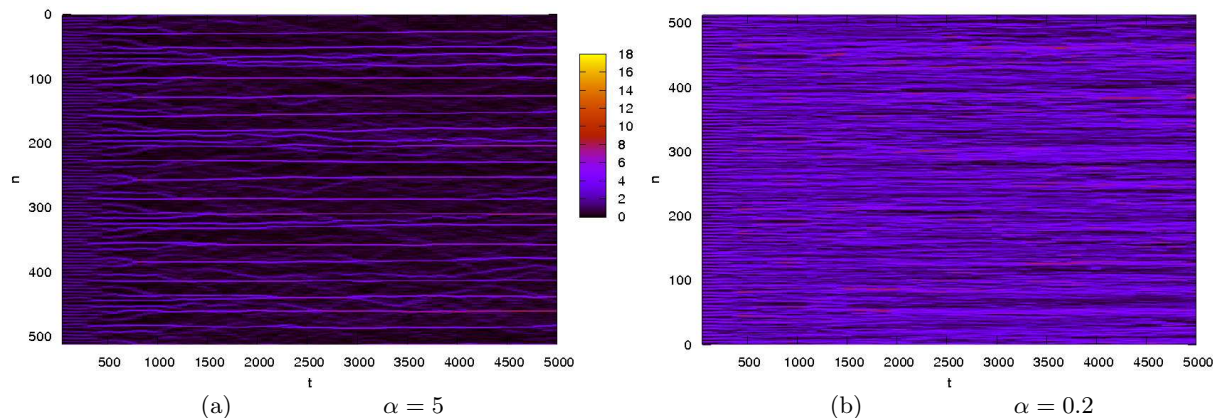


Abbildung 3.13: Norm-Profil der DNLS mit $J = B = 0.1$, $a = 0.16$ für $\alpha = 5$ (a) und $\alpha = 0.2$ (b) für die Anfangsbedingung einer ebenen Welle mit $q \approx 0.195\pi$. Für beide Werte α kommt es erwartungsgemäß zur Instabilität der Anfangsbedingung, doch eine persistente Energielokalisierung ist nur für $\alpha = 5$ zu beobachten, da nur in diesem Fall die Bedingung $-H > -H_{\beta=0+}$ gilt.

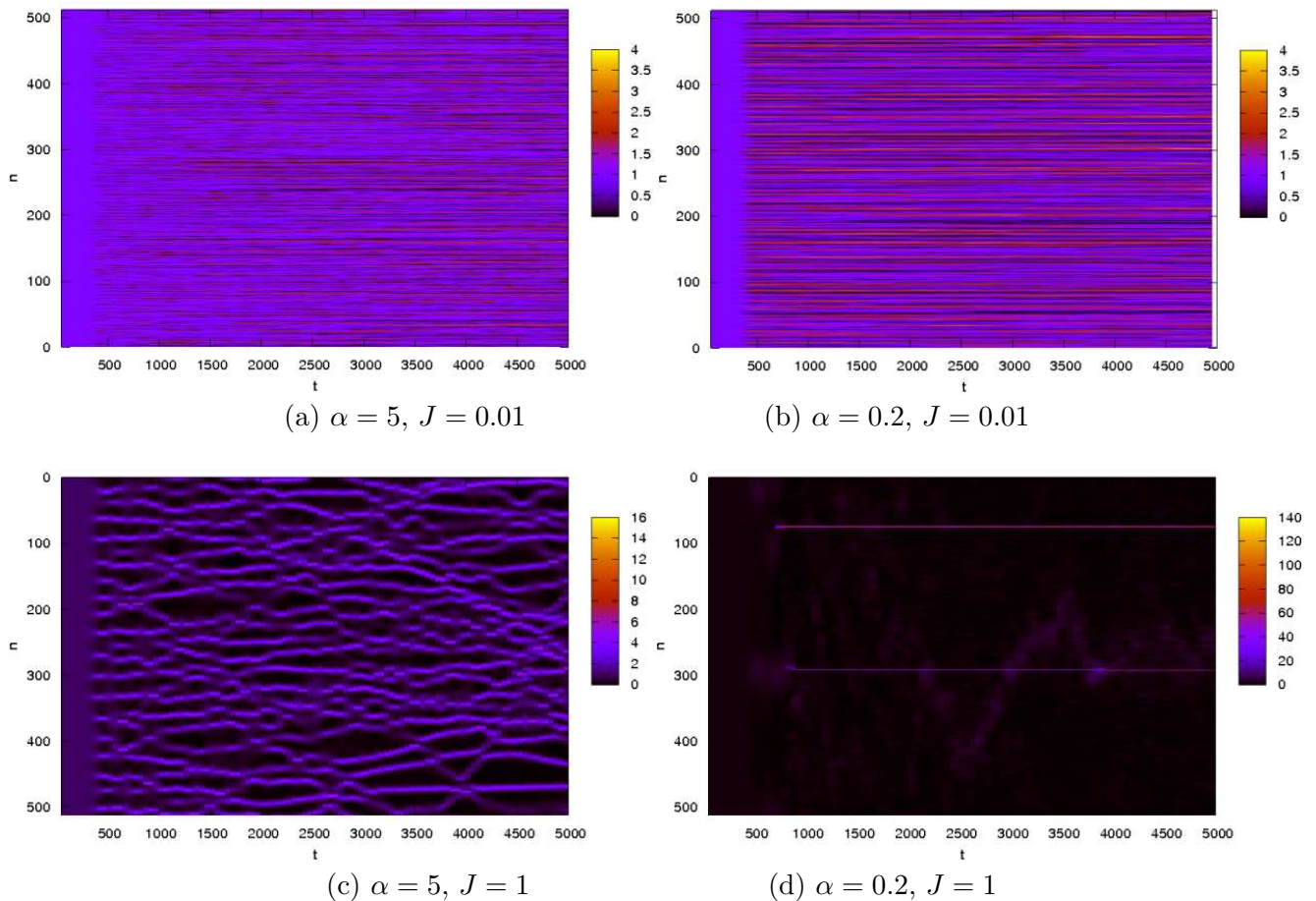


Abbildung 3.14: Die Norm-Verteilung der DNLS (3.1) mit $B = 0.1$, $\gamma = 0$ und jeweils 2 verschiedenen Werten für $J \in \{1, 0.01\}$ und für $\alpha \in \{5, 0.2\}$. Für schwache Kopplung $J = 0.01 \ll B = 0.1$ kommt es zu keiner persistenten Energielokalisierung. Für starke Kopplung $J = 1 \gg B = 0.1$ kommt es zu Energielokalisierung, da durch den großen Wert J die Energiedichte $h_{\beta=0+}$ bei extrem kleinen Werten liegt. Für $\alpha = 0.2$ ergibt sich für $J = 1$ eine sehr viel stärkere Lokalisierung als für $\alpha = 5$, da die Kurve $h^s(\alpha \rightarrow 0)$ weit oberhalb der Kurve $h^s(\alpha \rightarrow \infty)$ verläuft (siehe Abbildung 3.7 für kleine Werte a) und die von der Anfangsbedingung bereitgestellte (nicht von α abhängige) Energie somit relativ zu $h_{\beta=0+}$ sehr hoch im Energiespektrum liegt.

3.5 Zusammenfassung und Ausblick

Im Fall der DNLS konnte gezeigt werden, dass fundamentale Erweiterungen wie langreichweitige Wechselwirkungen und nichtlineare Dämpfung zu deutlichen Veränderungen des Energielokalisierungsprozesses führen. Besonders die Kombination der beiden Erweiterungen kann zu sehr intensiven stabilen persistenten Brethern führen. Bei den betrachteten Studien wurden jeweils harmonische langreichweitige Wechselwirkungen mit einer von der Oszillator-Oszillator-Distanz abhängigen Kopplung vom Kac-Baker-Typ angenommen. Der frei wählbare Parameter des Systems ist der Wechselwirkungsradius α^{-1} , der starken Einfluss auf den Lokalisierungsmechanismus des Systems hat. Die Summe der Kopplungsstärken für das System wurde unabhängig von α zu J gewählt und der beobachtete langreichweitige Transfer bei der Breather-Bildung und die erhöhte Lokalisierungsstärke sind daher als Folge der neuen Längenskala des Systems, dem Wechselwirkungsradius α^{-1} , zu sehen. Ohne Dämpfung ergibt sich im thermalisierten System durch langreichweitige Wechselwirkungen eine deutliche Veränderung der Breather-Amplituden-Statistik, die besonders bei großen Energien zu einer merklich stärkeren Energielokalisierung und zur Ausbildung persistenter „hot spots“ im System führt. Eine Messung der Lokalisierungsstärke im System in Abhängigkeit vom Wechselwirkungsradius α^{-1} für positive und negative Temperaturen wurde mit Hilfe von neuartigen Hybrid-Monte-Carlo-Simulationen für die DNLS durchgeführt, die das analytisch exakte Resultat der Phasenübergangsenergie $H_{\beta=0+}$ wiedergeben.

Die beobachteten Phänomene sollten grundsätzlich die Dynamik in realen Systemen beeinflussen, da die nichtlineare Dämpfung allgemein bei der Ankopplung eines Phononenbades an die quantenmechanischen Gleichungen für die Anregungsamplitude ϕ entsteht. Die dispersiven langreichweitigen Wechselwirkungen vom Kac-Baker-Typ stellen zwar eine spezielle Wahl dar, es wird aber erwartet, dass das Vorhandensein dispersiver Wechselwirkungen qualitativ gut mit ihnen beschrieben werden kann. Unabhängig von der aktuell vorliegenden Kopplung erwartet man, dass nichtlineare Systeme auf das Vorhandensein zusätzlicher dispersiver Wechselwirkungen mit der Schaffung von großamplitudigen Anregungen antwortet, um diese weiterhin effektiv zu lokalisieren. Technisch hat die Kac-Baker-Form den Vorteil, dass man sich durch die Wahl des Parameters α nach Belieben zwischen den Grenzfällen der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung und der gleichmäßigen Kopplung aller Oszillatoren bewegen kann. Für langreichweitige Wechselwirkungen (kleine α) ergeben sich neue Zustände des Systems, die für große α nicht möglich sind. Bei Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen (großen α) kommt es ab einem gewissen Lokalisierungsgrad im System zu einer Immobilität der Breather durch die Peierls-Nabarro-Energie, die ein Breather beim Positionswechsel aufbringen muss. Für große Wechselwirkungsradien ergibt sich für das System die Möglichkeit des langreichweitigen Energietransfers, womit sich diese Hürde umgehen lässt und das System somit in der Lage ist, sehr massive Anregungen zu generieren. Der Einfluss der Kopplungsstärke J auf die Lokalisierung kann ebenfalls sehr gut mit der statistischen Behandlung der DNLS erklärt werden. Die Hinzunahme langreichweitiger Potenziale zeigt auch, dass lineare Stabilitätsanalysen der DNLS im Allgemeinen nicht die Phase persistenter Energielokalisierung vorhersagen können.

Abgesehen von den vor allem im Bereich der Biophysik bereits diskutierten Anwendungsmöglichkeiten der DNLS mit Dämpfung und langreichweitigen Wechselwirkungen (z.B. Energielokalisierung in Proteinen, effektiver Energietransfer in Scheibe-Aggregaten, Elektronentransfer in Biomolekülen wie Enzymen und DNA) ergeben sich in vielen Systemen zwangsläufig langreichweitige Wechselwirkungen. Die DNLS ohne langreichweitige Wechselwirkungen stellt in diesen Fällen lediglich eine Beschreibung mit der Beschränkung auf Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen dar. Ein Beispiel ist die Beschreibung von Bose-Einstein-Kondensaten (BEC) in optischen Gittern oder kleinskaligen Supergittern, die sowohl vom theoretischen als auch vom experimentellen Standpunkt sehr interessante Systeme darstellen. Unter anderem wurden bereits Phänomene wie der Josephson-Effekt, Landau-Zener-Tunneln, Bloch-Oszillationen und Suprafluid-Mott-Isolator-Übergänge studiert. Die BEC könnte in der Zukunft ein vielversprechendes System zur Realisie-

nung eines Registers für Quantencomputer darstellen (siehe Referenzen in [62]). In einer Molekularfeldnäherung wird das BEC sehr gut durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung beschrieben, eine NLS-Gleichung mit externem Potenzial. Vor kurzem wurden Lösungen dieser Gleichung im Fall eines periodischen externen Potenzials (erzeugt durch ein optisches Gitter) experimentell beobachtet, sogenannte Gap-Solitonen [63]. In der Tight-Binding-Approximation kann die kontinuierliche NLS-Gleichung durch die diskrete DNLS ersetzt werden und daher sollten großamplitudige diskrete Breather beobachtbar sein. Bei der Ableitung der DNLS kommt es durch eine Expansion nach Wannier-Funktionen (die nahe der Potenzialminima lokalisiert sind) zu einer DNLS mit effektiver langreichweitiger Kopplung. In der Tight-Binding- und Einzelband-Approximation kann diese auf eine DNLS-Gleichung mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen zurückgeführt werden, die eine gute Näherung im Fall tiefer optischer Potenziale darstellt [62]. Eine Voraussage der DNLS, der mittels linearer Stabilitätsanalyse gefundene Schwellwert zur dynamischen Instabilität des Kondensates (der sogenannte Suprafluid-Mott-Isolator-Übergang) wurde vor kurzem durch experimentelle Messungen belegt [64].

Ein weiteres Beispiel sind zweidimensionale photonische Kristalle, bei denen sich gezeigt hat, dass es bei vielen Geometrien zu langreichweitiger Kopplung der einzelnen Wellenleiter kommt und dass in manchen Fällen eine exponentielle Kopplung eine gute Näherung darstellt [65]. Diese Tatsache sollte bei den beobachteten linearen Moden, die in Richtung des Wellenleiters lokalisiert sind, zu neuartigen Eigenschaften wie unter anderem zu Bistabilität führen.

Literaturverzeichnis: Kapitel 3

- [1] D.K. Campbell, S. Flach, and Y.S. Kivshar, *Phys. Today* **57**, 43 (2004)
- [2] J.C. Eilbeck and M. Johansson, Proceedings of the Third Conference „Localization and Energy Transfer in Nonlinear Systems“, June 17-21, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, eds L. Vázquez, R. S. MacKay, M. P. Zorzano, World Scientific, Singapore, 44-67 (2003)
- [3] J.C. Eilbeck, P.S. Lomdahl, and A.C. Scott, *Physica D* **16** 318 (1985)
- [4] A.C. Scott, *Physics Reports* **217** 1-67 (1992)
- [5] A.S. Davydov, *Solitons in Molecular Systems*, Reidel (1985)
- [6] A.C. Scott, *Nonlinear Science*, University Press Oxford (1999)
- [7] A.C. Scott, The development of nonlinear science, *Rivista del Nuovo Cimento* **27**, 1-115 (2004)
- [8] L.D. Landau, *Phys. Z. Sowjetunion* **3**, 644 (1933)
- [9] A. Xie, L. van der Meer, W. Hoff, and R.H. Austin, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5435 (2000)
- [10] A. Xie, A.F.G. van der Meer, and R.H. Austin, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 018102-1 (2002)
- [11] J. Edler, P. Hamm, and A.C. Scott, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 067403 (2002)
- [12] J. Edler, R. Pfister, V. Pouthier, C. Falvo, and P. Hamm, *Phys. Lett.* **93**, 106405 (2004)
- [13] P. Hamm and J. Edler, *Phys. Rev. E* **73**, 094302 (2006)
- [14] L. Cruzeiro-Hansson and L. Takeno, *Phys. Rev. E* **56**, 894 (1997)
- [15] L. Cruzeiro-Hansson and S. Silva, *J. of Biol. Phys.* **27**, 6 (2001)
- [16] N.G. Berloff, *Phys. Lett. A* **337**, 391 (2005)
- [17] S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, Yu.B. Gaididei, M. Johansson, and K.Ø. Rasmussen, *J. Biol. Phys.* **25**, 41 (1999)
- [18] S.F. Mingaleev, Yu.B. Gaididei, P.L. Christiansen, and Yu. S. Kivshar, *Europhys. Lett.* **59**, 403-409 (2002)
- [19] Yu.B. Faididei, S.F. Mingaleev, and P.L. Christiansen, *Phys. Rev. E* **62**, R53 (2000)
- [20] L. Cruzeiro-Hansson, *J. Chem. Phys.* **123**, 234909 (2005)

-
- [21] J.W. Ponder and D.A. Case, *Adv. Prot. Chem.* **66**, 27 (2003)
- [22] A.R. Bishop, G. Kalosakas, K.Ø Rasmussen, and P. G. Kevrekidis, *Chaos* **13**, 588 (2003)
- [23] N.R. Walet and W.J. Zakrzewski, *Nonlinearity* **18**, 2615 (2005)
- [24] O. Bang, P.L. Christiansen, F. If, K.Ø. Rasmussen, and Y.B. Gaididei, *Phys. Rev. E* **49**, 4627 (1994)
- [25] Y.S. Kivshar and M. Peyrard, *Phys. Rev. A* **46**, 3198
- [26] P.L. Christiansen, Yu.B. Gaididei, M. Johansson, K.Ø. Rasmussen, and I.I. Yakimenko, *Phys. Rev. E* **54**, 924 (1996)
- [27] P.L. Christiansen, Yu.B. Gaididei, M. Johansson, and K.Ø. Rasmussen, *Phys. Rev. B* **55**, 5759 (1997)
- [28] K.Ø. Rasmussen, P.L. Christiansen, M. Johansson, Yu.B. Gaididei, and S.F. Mingaleev, *Physica D* **113**, 134 (1998)
- [29] P.G. Kevrekidis, Yu.B. Gaididei, A.R. Bishop, and A. Saxena, *Phys. Rev E* **64**, 066606 (2001)
- [30] G.C. Huth, F. Gutmann, and G. Vitiello, *Phys. Lett. A* **140**, 339 (1989)
- [31] H. Kuhn, *J. Photochem.* **10**, 111 (1997)
- [32] D. Möbius and H. Kuhn, *J. of Appl. Phys.* **64**, 5138 (1988)
- [33] T. Inoue, *Thin Solid Films* **132**, 21 (1985)
- [34] E.A. Bartnik, K.J. Blinowska, and J.A. Tuszyński, *Phys. Lett. A* **169**, 46 (1992)
- [35] J.A. Tuszyński, M.F. Jørgensen, and D. Möbius, *Phys. Rev. E* **59**, 4374 (1999)
- [36] S. Aubry and G. Kopidakis, *Proceedings of the Third Conference „Localization and Energy Transfer in Nonlinear Systems“*, June 17-21, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, eds L. Vázquez, R. S. MacKay, M. P. Zorzano, World Scientific, Singapore, 1-27, (2003)
- [37] R.E. Blankenship, *Molecular Mechanics of Photosynthesis*, Blackwell Science (2002)
- [38] L. Cruzeiro-Hansson, *Proceedings of the Third Conference „Localization and Energy Transfer in Nonlinear Systems“*, June 17-21, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, eds L. Vázquez, R. S. MacKay, M. P. Zorzano, World Scientific, Singapore, 169-176 (2003)
- [39] B. Rumpf, *Phys. Rev. E* **69**, 016618 (2004)
- [40] Yu.B. Gaididei, S.F. Mingaleev, P.L. Christiansen, and K.Ø. Rasmussen, *Phys. Lett. A* **222**, 152 (1996)
- [41] V.M. Kenkre, in: *Singular Behaviour and Nonlinear Dynamics*, Vol. II, eds S. Pnevmatikos, T. Bountis and Sp. Pnevmatikos, World Scientific, Singapore (1989)
- [42] B. Rumpf, *Phys. Rev. E* **70**, 016609 (2004)
- [43] K.Ø. Rasmussen, T. Cretegny, P.G. Kevrekidis, and N. Grønbech-Jensen, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3740 (2000)
- [44] M. Johansson and K.Ø. Rasmussen, *Phys. Rev. E* **70**, 066610 (2004)
-

-
- [45] A. Smerzi and A. Tombettoni, Chaos **13**, 766 (2003), Phys. Rev. A **68**, 023613 (2003)
- [46] M. Peyrard, Nonlinearity **17**, R1 (2004)
- [47] C.H. Choi, G. Kalosakas, K.Ø. Rasmussen, M. Hiromura, A.R. Bishop, and A. Usheva, Nucleic Acids Res. **32**, 1584
- [48] B. Rumpf and A.C. Newell, Phys. Rev. Lett. **87**, 054102 (2001)
- [49] I. Daumont, T. Dauxois, and M. Peyrard, Phys. Rev. A **46**, 3198 (1996)
- [50] H. Feddersen, Phys. Lett. A **154**, 391 (1991)
- [51] M. Johansson, Physica D **216**, 62 (2006)
- [52] T. Dauxois, R. Khomeriki, F. Piazza, and S. Ruffo, Chaos **15**, 015110 (2005)
- [53] R. Reigada, A. Sarmiento, and K. Lindenberg, Phys. Rev. E **64**, 066608 (2001)
- [54] Yu.A. Kosevich and S. Lepri, Phys. Rev. B **61**, 299 (2000)
- [55] M.I. Weinstein, Nonlinearity **12**, 673 (1999)
- [56] M. Peyrard, Physica D **119** 184 (1998)
- [57] K.Ø. Rasmussen, S. Aubry, A.R. Bishop, and G.P. Tsironis, Eur. Phys. J. B **15**, 169 (2000)
- [58] M. Johansson and S. Aubry, Phys. Rev. E **61**, 5864 (2000)
- [59] M. Johansson, Phys. Rev. E **63**, 037601 (2001)
- [60] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo, and A. Torcini, Physica D **121**, 109 (1998)
- [61] D. Henning, Eur. Phys. J. B. **20**, 419 (2001)
- [62] M.A. Porter, R. Carretero-González, P.G. Kevrekidis, and B.A. Malomed, Chaos **15**, 015115 (2005)
- [63] B. Eierman, T. Anker, M. Albiez, M. Taglieber, P. Treutlein, K.-P. Marzlin, and K.M. Oberthaler, Phys. Rev. Lett. **92**, 230401 (2004)
- [64] F.S. Cataliotti, L. Fallani, F. Ferlaino, C. Fort, P. Maddaloni, and M. Inguscio, New J. Phys. **5**, 71.1 (2003).
- [65] S.F. Mingaleev, Yu.S. Kivshar, and R.A. Sammut, Phys. Rev. E **62**, 5777-5782 (2000)
-

Kapitel 4

Wärmeleitung von Kohlenstoff-Nanoröhrchen in Fermi-Pasta-Ulam Approximation

It seems there is no problem in modern physics for which there are on record as many false starts, and as many theories which overlook some essential feature, as in the problem of the thermal conductivity of nonconducting crystals

R.E. Peierls, *Theoretical Physics in the Twentieth Century*, edited by M. Fierz and V.F. Weisskopf (Wiley, New York, 1961)

4.1 Motivation

Viele alltägliche Phänomene sind die Konsequenz eines bestimmten Ungleichgewichts, wie etwa der elektrische Strom eines Leiters, wenn an seinen Enden eine Potenzialdifferenz anliegt oder der Wärmestrom durch ein Material, wenn an seiner Oberfläche verschiedene Temperaturen vorherrschen. Trotz der Allgegenwart solcher Phänomene stellt ihre theoretische Beschreibung immer noch eine große Herausforderung dar und viele Physiker versuchen, diese Nichtgleichgewichtsphänomene mikroskopisch zu erklären. Da Transportphänomene die Antwort des Systems auf einen bestimmten äußeren Zwang darstellen, hängen diese sehr mit der mikroskopischen Beschaffenheit des Systems und seiner Dimensionalität zusammen. Niedrigdimensionale Materialien rücken immer mehr in den Fokus der aktuellen Forschung. Einerseits interessieren natürlich vorkommende niedrigdimensionale Materialien wie Moleküle, Schichtstrukturen oder molekulare Röhrchen und andererseits technologisch hergestellte Nanostrukturen, die für integrierte Schaltungen oder Halbleiterlaser eingesetzt werden [1]. Hier geht es um das Wärmemanagement zur Sicherstellung der Funktionalität von Schaltungen auf Nanoskalen oder um die Manipulation von Wärmeströmen zur thermoelektrischen oder thermovoltaschen Energieumwandlung. Die moderne Silizium-Elektronik arbeitet - wie durch das Mooresche Gesetz beschrieben - bereits auf Nanoskalen. Feldeffektransistoren mit einer Kanallänge von 45 bis 32 nm sind in naher Zukunft Standard. Experimente haben gezeigt, dass kleine Abstände zwischen Schnittstellen, für die Welleneffekte der Phononen nicht vernachlässigbar sind, und extrem kleine Volumina, in denen die anfallende Joulesche Wärme dissipiert wird, die thermischen Eigenschaften der Materialien bei nanotechnologischen Anwendungen stark beeinflussen und das thermische Management erschweren. In letzter Zeit wurden aufgrund von zunehmenden Problemen mit der Abführung von Abwärme bei hohen Schaltfrequenzen energiesparende Prozessoren eingeführt (z.B. die CentrinoTM-Prozessoren). Auf längere Sicht wird aber eine weitere Miniaturisierung einsetzen, was maßgeblich dazu beitragen wird, dass sich neue Technologien und Materialien

auf dem Markt durchsetzen. Vor kurzem hat die Firma Intel die Pentium-Prozessoren durch eine neue Prozessorgeneration ersetzt, bei denen die Aufgabe der CPU von mehreren Rechnerkernen (cores) geleistet wird. Während zur Zeit Rechner mit zwei Rechnerkernen auf dem Markt sind (Intel Core2 DuoTM), wird zu Beginn des Jahres 2007 bereits ein Quad-Core-Prozessor basierend auf einer 45 nm-Technologie im Handel sein.

In der physikalischen Grundlagenforschung herrscht seit einigen Jahren sehr großes Interesse an der 1991 von Ijima entdeckten neuen Zustandsform des Kohlenstoffs, den Kohlenstoff-Nanoröhrchen. Mit ihren außergewöhnlichen elektronischen, mechanischen und thermischen Eigenschaften sind sie aussichtsreiche Kandidaten, die aktuellen Hindernisse einer weiteren Miniaturisierung der Elektronik und des damit verbundenen thermischen Managements zu lösen [2].

Niedrigdimensionalen Nanostrukturen wie Kohlenstoff-Nanoröhrchen wurden durch computer-gestützte Untersuchungen ungewöhnlich gute thermische Transporteigenschaften zugeschrieben [3]. Mit mikroelektronischen Messsystemen wurde vor kurzem die Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit eines einzelnen mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchens mit 14 nm Durchmesser bestimmt, die bei Zimmertemperatur ungefähr zwischen der thermischen Leitfähigkeit von natürlichem (2200 W/mK) und isotopisch bereinigtem Diamant (4000 W/mK) liegt [4]. Silber, das Metall mit der höchsten thermischen Leitfähigkeit bei Zimmertemperatur, erreicht dagegen nur einen Wert von 429 W/mK. In Computersimulationen wurde für ein Kohlenstoff-Nanoröhrchen mit einem vergleichbaren Durchmesser eine thermische Leitfähigkeit von 6600 W/mK vorhergesagt [3]. Experimente haben in letzter Zeit gezeigt, dass eine Beimischung von Kohlenstoff-Nanoröhrchen die thermische Leitfähigkeit von Siliziumwafern signifikant erhöhen kann [5]. Bei Messungen der thermischen Leitfähigkeit von Epoxidharz konnte durch Beimischung von 1% Kohlenstoff-Nanoröhrchen eine Verbesserung der thermischen Leitfähigkeit von 125% erzielt werden [6].

Da mikroelektronische Bauelemente bis in absehbare Zukunft zu groß für atomistische Simulationen sind, wird in der Theorie beispielsweise auf Boltzmann-Transportgleichungen zurückgegriffen, wobei aber mikroskopische Phonon-Streuraten selbst für Silizium nicht gut bekannt sind. Darüberhinaus gibt es noch prinzipielle Schwierigkeiten beim Verständnis der thermischen Leitfähigkeit in niedrigen Dimensionen. Für verschiedene eindimensionale oder zweidimensionale Beispielmodelle, wie Fermi-Pasta-Ulam (FPU)-Systeme, gilt das Fourier-Gesetz (4.1) nicht, da die Wärmeleitfähigkeit über ein Potenzgesetz mit der Systemlänge im thermodynamischen Limes divergiert [7, 8]. Dieses Verhalten wurde vor kurzem auch in Computersimulationen für Kohlenstoff-Nanoröhrchen, also quasi-eindimensionalen Strukturen, beobachtet [9]. In der aktuellen Forschung gibt es selbst bei der analytischen und computergestützten Untersuchung von relativ einfachen Modellsystemen kein einheitliches Bild der Wärmeleitung in niedrigdimensionalen Systemen. Die verschiedenen mikroskopischen Ursachen, der Einfluss der Dimensionalität, die konkrete Form des Wechselwirkungspotenzials, die Gültigkeit verschiedener Näherungen bei der Berechnung der Leitfähigkeit über die Green-Kubo-Formel oder die Boltzmann-Gleichung und auch die verschiedenen technischen Details bei der numerischen Simulation der Wärmeleitung führen zu oftmals sehr unterschiedlichen Ergebnissen.

In diesem Kapitel soll die Wärmeleitung in ein- und zweidimensionalen FPU-Systemen untersucht werden. Dabei wird das Wechselwirkungspotenzial so gewählt, dass es bei moderaten Temperaturen sehr gut das empirische Tersoff-Potenzial [10] der Kohlenstoff-Bindung wiedergibt. Diese Vorgehensweise ermöglicht einen interessanten Vergleich zwischen den grundsätzlichen theoretischen Untersuchungen der Wärmeleitfähigkeit niedrigdimensionaler Systeme und den numerischen und experimentellen Daten für die Wärmeleitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen.

4.2 Fourier-Gesetz

In Gasen sagt die kinetische Theorie, die vor allem mit den Namen Boltzmann, Maxwell und Clausius [11] verknüpft ist, die Gültigkeit des Fourierschen Gesetzes

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \kappa \nabla T(\vec{r}, t) \quad (4.1)$$

voraus, dass die Wärmestromdichte $\vec{j}(\vec{r}, t)$ über die Wärmeleitfähigkeit κ mit dem lokalen Temperaturgradienten $\nabla T(\vec{r}, t)$ verknüpft. Dieses Resultat kann man im Wesentlichen durch die Annahme der Existenz einer lokalen Temperatur (lokales thermisches Gleichgewicht) und einer mittleren freien Weglänge $\lambda \sim 1/\rho\pi\sigma^2$ für die Gasteilchen gewinnen, wobei ρ die Dichte und σ den effektiven Durchmesser der Atome/Moleküle darstellt. Man erhält eine von der Teilchendichte unabhängige Wärmeleitfähigkeit $\kappa \sim \sqrt{T}$, was für nicht zu dichte Gase experimentell bestätigt werden konnte und zu dieser Zeit erste Hinweise auf die Existenz von Atomen lieferte. Neuere Arbeiten, bei denen die stationäre Boltzmann-Gleichung störungstheoretisch unter Nichtgleichgewichtsbedingungen gelöst wird, bestätigen die Gültigkeit des Fourier-Gesetzes und ergeben eine Lösung für die Verteilungsfunktion, die (für kleine Temperaturgradienten) nahe an einer Maxwell-Verteilung liegt [12]. Die andere historisch bedeutende Theorie der Wärmeleitung in drei Dimensionen beschreibt die Wärmeleitung in Kristallen durch Phononen und trägt vor allem die Namen von P. Debye und R. Peierls [13]. Dabei wurden Konzepte der kinetischen Theorie, wie das der mittleren freien Weglänge, auf das Phononengas in Festkörpern übertragen. Anharmonische Effekte und Fehlstellen im Kristall ergeben im Gegensatz zum harmonischen Kristall, bei dem Phononen nicht wechselwirken, eine endliche freie Weglänge und eine Wärmeleitfähigkeit der Form

$$\kappa \sim Cv^2\tau, \quad (4.2)$$

bei der im Vergleich zur kinetischen Gastheorie die spezifische Wärme C die Teilchendichte ρ , die Schallgeschwindigkeit v das \sqrt{T} und das Produkt $v\tau$ die mittlere freie Weglänge λ ersetzen. Peierls benutzte eine Boltzmann-Gleichung, um die Temperaturabhängigkeit von τ , der mittleren Zeit zwischen zwei Phononenstößen, zu bestimmen (Phonon-Elektron-Stöße sind bei Nichtleitern vernachlässigbar). Peierls stellte fest, dass primär Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse, bei denen der Impuls wechselwirkender Phononen modulo einem Gittervektor erhalten bleibt, die mittlere freie Weglänge der Phononen bestimmen und konnte somit die Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit von Isolatoren korrekt beschreiben [14].

Abgesehen vom Erfolg der kinetischen Theorie bleibt das Fourier-Gesetz eine Herausforderung für die Theoretische Physik und viele wichtige Fragen sind noch ungeklärt [15]. Die Frage nach den notwendigen Voraussetzungen, die die Gültigkeit des Fourierschen Gesetzes gewährleisten, ist bisher unbeantwortet. Die Gültigkeit der Annahme eines lokalen thermischen Gleichgewichts, die Existenz und Eindeutigkeit eines stationären Nichtgleichgewichtszustands bei verschiedenen Systemen und der Zusammenhang der in Nichtgleichgewichtssituationen bestimmten Wärmeleitfähigkeit mit der Green-Kubo-Formel (bei der die Wärmeleitfähigkeit aus der Wärmefluss-Autokorrelationsfunktion im Gleichgewicht berechnet wird) stellen Punkte dar, die noch nicht streng mathematisch bewiesen wurden. Analytische Beweise, z.B. der Existenz und Eindeutigkeit eines stationären Nichtgleichgewichts, gelangen nur für wenige Systeme [15]. Man muss im Allgemeinen Numerik betreiben (z.B. Simulationen), um die Wärmeleitung in komplexen Systemen zu untersuchen.

Die Wärmeleitung in niedrigdimensionalen Systemen unterscheidet sich sehr von der dreidimensionalen Wärmeleitung in Kristallen. Schon Peierls stellte fest, dass aufgrund des eingeschränkten Phasenraums in einer Dimension in niedrigster Ordnung seiner Störungsrechnung keine Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse zum thermischen Widerstand beitragen (siehe [7]). In den letzten Jahren wurden verstärkt Versuche unternommen, die Ingredienzen zu bestimmen, die in eindimensionalen Systemen für die Gültigkeit oder das Versagen des Fourier-Gesetzes entscheidend sind.

Computergestützte Untersuchungen an eindimensionalen Modellen, die sich bezüglich wichtiger Eigenschaften wie der Integrierbarkeit, der Chaotizität, der Ergodizität und der Anwesenheit von Substrat-Potenzialen (die die Gesamtimpulserhaltung verletzen) unterscheiden, zeigen seit kurzem ein klareres Bild der Wärmeleitung in einer Dimension [16]. Dabei hat sich gezeigt, dass entgegen früherer Annahmen Chaos im Sinne positiver Lyapunov-Exponenten keine nötige oder hinreichende Bedingung für die Gültigkeit des Fourier-Gesetzes ist. Derzeit lässt sich sicher sagen, dass die Integrierbarkeit eines Systems die Gültigkeit des Fourier-Gesetzes ausschließt und zu ballistischer Leitung führt. Im Fall der harmonischen Kette sind die wechselwirkungsfreien Phononen die Wärmeträger und es stellt sich in der Kette bei Ankopplung an zwei Wärmebäder mit dem Temperaturunterschied ΔT ein flaches Temperaturprofil entlang der Kette ein, das an den Rändern eine charakteristische exponentielle Krümmung zeigt (stets entgegen der Badtemperatur). Die Wärmeleitung ist ballistisch $\kappa \sim L$, da der Wärmestrom proportional zur angelegten Temperaturdifferenz ist [17]. Die Anwesenheit eines Substratpotenzials in integrierbaren Systemen und der damit verbundene Verlust der Gesamtimpulserhaltung (wie bei der linearen optischen Kette) führt ebenfalls zu ballistischer Wärmeleitung und zur Verletzung des Fourier-Gesetzes. Die Anwesenheit von Nichtlinearitäten in integrierbaren Systemen im Wechselwirkungspotenzial (z.B. bei der Toda-Kette) oder im Substratpotenzial (z.B. bei der diskreten Izergin-Korepin-Sine-Gordon-Gleichung) führt ebenfalls zu ballistischem Transport, der von den Solitonen im System getragen wird.

Für bestimmte nichtintegrierbare Modelle zeigt sich aber die Gültigkeit des Fourier-Gesetzes. Wie in Frenkel-Kontorova-, ding-a-ling- oder ding-dong-Modellen [16] beobachtet, scheint die Anwesenheit eines Substratpotenzials, das die Gesamtimpulserhaltung des nichtintegrierbaren Systems verletzt, eine wichtige Rolle zu spielen. Modelle, bei denen der Gesamtimpuls erhalten ist, wie FPU- und diatomare Todaketten, zeigen eine Divergenz der Wärmeleitfähigkeit mit einer Potenz $\kappa \sim L^\alpha$, $\alpha \approx 0.4$. Dieses Phänomen lässt vermuten, dass „hydrodynamische“ langwellige Phonon-Moden die Divergenz mit einer Potenz $0 < \alpha < 1$ verursachen, was die Anwendung der Modenkopplungstheorie nahelegt [7]. Die Modenkopplungstheorie, die in der Vergangenheit zum Beispiel vielfach auf die Dynamik dichter Fluide angewendet wurde, führt auf einen Wert $\alpha = 2/5$, wohingegen in einem „thermodynamischen“ Zugang unter Verwendung von Renormierungsgruppen-Konzepten eine Divergenz mit $\alpha = 1/3$ vorhergesagt wird [18]. Einige Systeme, wie Gaskanäle oder diatomare Harte-Kugel-Modelle, bestätigen die Vorhersage $\alpha = 1/3$ [19]. Andere eindimensionale Systeme wie das β -FPU-Modell oder die diatomare Toda-Kette divergieren mit einer Potenz, die näher am Wert $2/5$ liegt, den man in der Modenkopplungstheorie [7] (oder durch einen kinetischen Ansatz [20]) aus der Green-Kubo-Formel gewinnen kann. Für die α -FPU-Kette mit kubischer Anharmonizität [21] oder einer Kette mit transversaler Kopplung [22] wurde vor kurzem mit Hilfe der Modenkopplungstheorie ebenfalls der Wert $\alpha = 1/3$ vorhergesagt. Eine Besonderheit stellt das sogenannte Rotator-Modell dar, ein nichtintegrierbares gesamtimpulserhaltendes System mit einem kosinusförmigen Wechselwirkungspotenzial. Es wurde in Simulationen die Gültigkeit des Fourier-Gesetzes nachgewiesen. Bei den vorher erwähnten nichtlinearen nichtintegrierbaren impulserhaltenden Modellen zeigte sich aber die potenzförmige Divergenz der Wärmeleitfähigkeit mit der Systemlänge. Es wird vermutet, dass das Rotator-Modell wegen dem Verschwinden des Gesamtdrucks keine langwelligeren energietragenden Phonon-Moden bereitstellen kann. Trotzdem gibt es keinen offensichtlichen Grund, der dieses Modell von der Vorhersage $\alpha = 1/3$ in [18] ausschließt.

Der derzeitige Ergebnisstand basiert vorwiegend auf Simulationsergebnissen und es fehlt ein rigoroser Beweis für die notwendigen Kriterien, die die Gültigkeit des Fourier-Gesetzes garantieren. Die Einteilung in die oben genannten Systemklassen und die Situation jenseits der Gültigkeit der linearen Antwort-Theorie (auf der alle bisher genannten theoretischen Zugänge basieren) bedarf weiterer Studien.

Die außergewöhnlichen thermischen Eigenschaften eindimensionaler Systeme lassen vor allem

auf dem Gebiet der Nanotechnologie, wo derzeit Nanoröhrchen und Nanodrähte im Fokus der Forschung stehen, auf neuartige technologische Anwendungen hoffen. Verglichen zu den mechanischen und elektronischen Eigenschaften stecken die Ideen zur Anwendung quasi-eindimensionaler Wärmeleiter noch in den Kinderschuhen. Theoretisch wurde 2002 von Terrano, Peyrard und Casati ein thermischer Gleichrichter vorgeschlagen, der anisotropen Wärmefluß entlang einer Kette zeigt [23]. Kürzlich wurde mit Hilfe von zwei gekoppelten Frenkel-Kontorova-Ketten eine thermische Diode vorgeschlagen [24], bei der das Vorzeichen des Temperaturgradienten einen Wärmestrom oder Wärmeisolation zur Folge hat. Diese Idee wurde bereits zu einem thermischen Transistor weiterentwickelt, bei dem Wärmeströme durch Anlegen von Temperaturen gesteuert werden können [25].

In dieser Arbeit geht es vor allem um zweidimensionale Fermi-Pasta-Ulam-Systeme. Die Dimensionalität ist oft die ausschlaggebende Größe, die das statistische Verhalten von Systemen beeinflusst. Die ersten Versuche, die Wärmeleitung in zweidimensionalen Systemen mittels umfangreicher Simulationen zu erforschen, liegen bereits fast vier Dekaden zurück [26]. Diese Simulationen behandelten bereits ein relativ komplexes System, eine zweidimensionale ungeordnete Lennard-Jones-Ebene. Leider fiel den Autoren keine Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Systemgröße auf. Das lag wohl an der Erwartung, dass bei starker Nichtlinearität und Unordnung die Peierlsschen Phonon-Phonon-Streuungen zur Gültigkeit des Fourier-Gesetzes führen sollten. Bei späteren Untersuchungen an triangularen Lennard-Jones-Ebenen wurde die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit untersucht, wobei sich eine T^{-1} -Abhängigkeit ergab, die in Übereinstimmung mit der Peierls-Theorie stand [27]. Die erste Untersuchung zweidimensionaler FPU-Systeme, bei der auch Längeneffekte beobachtet wurden, ist [28], in der die Autoren anmerken, dass es keinen Hinweis gibt, dass sich im thermodynamischen Limes ein endlicher Wert κ ergibt. Es ergaben sich in der Vergangenheit noch viele scheinbar in Widerspruch stehende Ergebnisse [7], je nach der Art der untersuchten Systeme und der Sorgfalt bei der Interpretation der Messergebnisse. Die Ursachen waren wohl die fehlenden theoretischen Konzepte und nicht vorhandene Rechnerressourcen, um große zweidimensionale Systeme sorgfältig zu untersuchen. Ein erster theoretischer Ansatz, der eine Längenabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit vorhersagte, wurde von der Gruppe um R. Livi und S. Lepri mit der aus der Dynamik dichter Fluide stammenden Modenkopplungstheorie gemacht, die vorher ebenfalls auf eindimensionale Systeme angewendet wurde [7]. Es ergibt sich eine logarithmische Divergenz mit der Systemlänge, die für relativ kleine Systeme in Simulationen bestätigt wurde [29]. Kürzlich haben O. Narayan und S. Ramaswamy [18] mit einem renormierungsgruppentheoretischen Ansatz gezeigt, dass das Fourier-Gesetz für Systeme mit weniger als drei Dimensionen nicht gültig ist. Wie bereits erwähnt, ergab sich bei ihnen ein Anwachsen der Wärmeleitfähigkeit mit der Potenz $\alpha = 1/3$ der Systemlänge in einer Dimension und eine schwächere logarithmische Divergenz in zwei Dimensionen. Für zweidimensionale Systeme existieren immer noch wesentlich weniger verlässliche Daten als für eindimensionale Modelle. Die Simulationen an den bisher größten zweidimensionalen FPU-Systemen mit quartischer Anharmonizität [30] legen eher ein Anwachsen der Wärmeleitfähigkeit mit der Potenz $\alpha \approx 0.22$ der Systemlänge L nahe, als eine logarithmische Divergenz. Dieser Wert wird von keiner vorhandenen Theorie gestützt.

4.2.1 Anomale Diffusion

Ein fruchtbarer Ansatz könnte die Verbindung zwischen anomalem Wärmetransport und der Superdiffusion von Energiefluktuationen sein, der sich für viele Systeme bestätigt hat [31]. Es wurde außerdem im Rahmen der Modenkopplungstheorie gezeigt, dass die Energiediffusion durch langwellige Phonon-Moden auf fraktale Diffusionsgleichungen führt [21]. Diese sind seit langer Zeit für ihre anomalen Transporteigenschaften bekannt [32].

In einem allgemeinen Zugang zur Wärmeleitung in einer Dimension wurde in [31] eine bisher unbekannte Verbindung zwischen mikroskopischer anomaler Energiediffusion und makroskopischer anomaler Wärmeleitung postuliert. Wenn die Energiediffusion $\sigma(t)^2 = 2Dt^s$ normal ($s = 1$), subdiffusiv ($s < 1$) oder superdiffusiv ($s > 1$) ist, ist über den Zusammenhang $\alpha = 2 - 2/s$ normale ($\alpha = 0$), konvergierende ($\alpha < 0$) oder divergierende ($\alpha > 1$) Wärmeleitung in Abhängigkeit von der Systemlänge L zu erwarten.

Es wird dabei angenommen, dass die Energie von Anregungen oder Teilchen (Phononen, Solitonen, Partikel) mit einer Geschwindigkeit v getragen wird, die eine Positionsvarianz

$$\text{Var}[x] = 2Dv^s t^s \quad (4.3)$$

zeigen. Wenn sich die Energieträger zwischen einem heißen (T_+) und einem kalten (T_-) Wärmereservoir befinden, gilt für den Mittelwert der Zeit zur ersten Passage des Weges von Bad + nach Bad – bzw. von Bad – nach Bad +

$$\langle t_{+-} \rangle \approx \langle t_{-+} \rangle \sim L^{2/s} . \quad (4.4)$$

Der Wärmestrom für einen einzelnen Energieträger p ist dann im Mittel

$$j_p = \frac{E_+ - E_-}{\langle t_{+-} \rangle + \langle t_{-+} \rangle} \sim \frac{\Delta T}{\langle t_{+-} \rangle} . \quad (4.5)$$

Wenn der gesamte Wärmestrom proportional zu L ist ($j \sim j_p L$), ergibt sich

$$j \sim \Delta T L^{1-2/s} \quad (4.6)$$

$$\kappa \sim \frac{j}{\Delta T/L} \sim L^\alpha \quad (4.7)$$

mit $\alpha = 2 - 2/s$. Die Annahme dieser Ableitung ist, dass der Exponent s in (4.3) und (4.4) der gleiche ist, was auf die Beschreibung von diffusiven Prozessen durch fraktale Differentialgleichungen zurückgeht, die sich in vielen chaotischen und quasi-chaotischen Systemen als nützlich erwiesen hat. In [31] wurde die Richtigkeit dieser Annahme numerisch für einige Systeme wie der β -FPU-Kette, dem Frenkel-Kontorova-Modell, dem ϕ^4 -Modell, Polymer-ähnlichen eindimensionalen Ketten, schmalen Kohlenstoff-Nanoröhrchen und verschiedenen Gaskanälen (bei dem Partikel die Wärmeleitung übernehmen) bestätigt.

4.2.2 Lineare-Antwort-Theorie

Eine Störungsrechnung geht normalerweise von einer dem Hamilton-Operator des Systems zugeordneten kleinen Störung aus. Ein Beispiel für eine solche Störung ist das Vorhandensein einer elektromagnetischen Welle, die mit den Hüllenelektronen eines Atoms wechselwirkt. Bei der thermischen Leitfähigkeit hat man es mit Störungen an den Rändern zu tun, wodurch im System kein kleiner Parameter zur Verfügung steht, mit dem die Störungsrechnung betrieben werden könnte. Dieses Problem kann durch die (stärkere) Annahme eines lokalen thermischen Gleichgewichts umgangen werden, was die Definition einer lokalen Temperatur rechtfertigt. Strenge Beweise für die Gültigkeit dieser Annahme sind selbst für einfache Modelle höchst schwierig [15]. Geht man aber von der Gültigkeit eines stationären Temperaturfeldes $T(x)$ aus, wobei die Ortsvariable x makroskopisch kleine (aber mikroskopisch große) Bereiche im System adressiert, lässt sich eine Nichtgleichgewichtsfunktion

$$\rho = Z^{-1} \exp \left(- \int dx \beta(x) h(x) \right) \quad (4.8)$$

einführen. Dabei stellt $h(x)$ die Energiedichte und Z die Zustandssumme für das System dar. Unter der Annahme, dass das System nur wenig vom Gleichgewichtszustand abweicht, kann man mit $\beta(x) = \beta(1 - \Delta T(x)/T)$ den Störoperator

$$H' = -\frac{1}{T} \int dx \Delta T(x) h(x) \quad (4.9)$$

definieren. Die auf diese Annahmen basierende Störungsrechnung liefert die sogenannte Green-Kubo-Formel [7, 33]

$$\kappa = \frac{1}{k_B T^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \lim_{V \rightarrow \infty} V^{-1} \langle J(\tau) J(0) \rangle, \quad (4.10)$$

wobei $J = \int dV j$ der (eindimensionale) Wärmestrom (Einheit: Wm) im System ist. Die Green-Kubo-Formel verbindet auf diese Weise den Transportkoeffizienten κ des Wärmestroms J , die (lineare) Antwort des Systems auf das Ungleichgewicht durch ΔT , mit den Fluktuationen des Stroms J im thermischen Gleichgewicht. Die Mittelung $\langle \cdot \rangle$ bezeichnet in der Herleitung von Kubo das kanonische Mittel, wohingegen bei Green damit das mikrokanonische Mittel gemeint ist.

Die Wärmestrom-Autokorrelationsfunktion lässt sich beispielsweise durch die Modenkopplungstheorie bestimmen [7], die vor einigen Jahrzehnten zur Analyse der langwelligen Dynamik zeitabhängiger Korrelationsfunktionen bei dichten Fluiden entwickelt wurde [34].

Im folgenden soll die Berechnung des Green-Kubo-Ausdrucks skizziert werden. Eine umfassendere Diskussion findet sich in [7]. Dort wird näher auf die generalisierten Langevin-Gleichungen für die Normalkoordinaten der langwelligen Phonon-Moden eingegangen, die man im Rahmen des Mori-Zwanzig-Formalismus erhält. Deren selbstkonsistente Lösung führt unter gewissen Näherungen auf die Dämpfungsraten der langwelligen Phonon-Moden, die durch die Modenkopplung entstehen. Das Erscheinen der generalisierten Langevin-Gleichungen und die damit verbundene anomale Energiediffusion durch die langwelligen Phonon-Moden ist die Ursache für den in der vorigen Untersektion abgeleiteten Zusammenhang zwischen α und dem Koeffizienten s .

Der Wärmestrom ist eine Summe über die Beiträge aller Phonon-Moden mit Wellenvektor k

$$J = \sum_k \hbar \omega_k v_{gk} \delta n_k(t), \quad (4.11)$$

wobei ω_k die Dispersionsrelation, v_{gk} die Moden-Gruppengeschwindigkeit und δn_k die Abweichung der Phononenzahl vom Gleichgewicht darstellt. Die Autokorrelationsfunktion ergibt sich somit zu

$$\langle J(0) J(t) \rangle \sim \sum_k (\hbar \omega_k v_{gk})^2 \langle \delta n_k(0) \delta n_k(t) \rangle, \quad (4.12)$$

was oft durch eine exponentiell abklingende Funktion $\langle \delta n_k(0) \delta n_k(t) \rangle = \langle \delta n_k(0)^2 \rangle e^{-t/\tau_k}$ vereinfacht wird. Benutzt man

$$\langle \delta n_k(0)^2 \rangle = \langle n_k(0)^2 \rangle = \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_k} \right)^2, \quad (4.13)$$

was einer Approximation des Rauschterms im Mori-Zwanzig-Formalismus für die Phonon-Normalkoordinaten durch weißes Rauschen entspricht, so ergibt sich

$$\langle J(0) J(t) \rangle \sim (k_B T)^2 \sum_k v_{gk}^2 e^{-t/\tau_k}, \quad (4.14)$$

was mit dem zentralen Ergebnis der Modenkopplungstheorie bezüglich der Dämpfung der Normalmoden mit $1/\tau_k \sim k^\delta$ und mit dem Übergang zu einer Integration den Ausdruck

$$\langle J(0) J(t) \rangle \sim (k_B T)^2 \frac{V_k}{(2\pi)^d} \int_k k^{d-1} e^{-tck^\delta} \quad (4.15)$$

ergibt (mit d als Dimension des Materials). Nach kurzer Rechnung erhält man durch Einsetzen in (4.10)

$$\langle J(0)J(t) \rangle \sim t^{-d/\delta} \quad (4.16)$$

und damit das Resultat, dass sich bei $d/\delta < 1$ eine unendlich große thermische Leitfähigkeit für das (unendlich lange) System ergibt. Die Abhängigkeit von der Systemlänge kann durch die Einführung des Abschneidewertes $t = L/v$ (v : Schallgeschwindigkeit) für die Zeitintegration in (4.10) gewonnen werden. Das konkrete Ergebnis hängt von der Abhängigkeit $\tau_k(k)$ ab. In eindimensionalen, zweidimensionalen und dreidimensionalen Systemen sagt die Modenkopplungstheorie nacheinander $1/\tau_k \sim k^{5/3}$, $1/\tau_k \sim |k|^2 \ln |k|$ und $1/\tau_k \sim |k|^2$ voraus. Es ergeben sich damit die folgenden Abhängigkeiten der Wärmeleitung von der Systemlänge für die verschiedenen Dimensionen $d = 1, 2$ und 3

$$\kappa_{d=1} \sim L^{2/5} \quad , \quad \kappa_{d=2} \sim \ln(L) \quad , \quad \kappa_{d=3} \sim \text{endlich} \quad . \quad (4.17)$$

In [20] führte eine Rechnung im Rahmen der kinetischen Theorie für die β -FPU-Kette ebenfalls auf $\alpha = 2/5$.

4.3 Wärmeleitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen

Angesichts des derzeitigen großen Interesses an Riesenmolekülen aus Kohlenstoffatomen könnte man fast vergessen, dass vor gar noch nicht allzu langer Zeit nur zwei kristalline Formen des Kohlenstoffs bekannt waren: Graphit und Diamant. Graphit zeichnet sich durch die Aufschichtung von zweidimensionalen Ebenen mit einer sechseckigen bienenwabenartigen Struktur aus. Diese Struktur entsteht, weil der Kohlenstoff beim Graphit drei kovalente Bindungen aufweist, die in einer Ebene liegen. Beim Diamant bildet der Kohlenstoff dagegen ein dreidimensionales Gitter, weil es vier kovalente Bindungen gibt, die in die Ecken eines Tetraeders zeigen. Diamant ist ein elektrischer Isolator, weil alle Elektronen der äußersten Schale kovalente Bindungen eingehen, wohingegen beim Graphit pro Atom ein Elektron im p-Orbital senkrecht zur Kohlenstoffebene in einem π -Elektronensystem delokalisiert ist, was zu elektrischer Leitfähigkeit führt. Kohlenstoff-Nanoröhrchen (carbon nanotubes), die sich im Wesentlichen von einer einzigen Graphitschicht ableiten, wurden 1991 von Iijima entdeckt [35]. Sie sind natürliche Erweiterungen der Fullerene, wobei die Entdeckung des Fußballmoleküls C_{60} im Jahre 1985 [36] die Euphorie um die neuen Zustandsformen des Kohlenstoffs ausgelöst hat. Dafür bekamen Robert F. Curl jr. (USA), Sir Harold W. Kroto (England) und Richard E. Smalley (USA) 1996 den Nobelpreis für Chemie.

Bei den einwandigen Nanoröhrchen unterscheidet man Armsessel (armchair), Zickzack- und chirale Struktur. Bei Zickzack-Nanoröhrchen wird die (imaginäre) Graphitschicht entlang des Einheitsvektors \vec{a}_1 (chiraler Winkel 0) aufgerollt, Armsessel-Nanoröhrchen zeichnen sich durch einen chiralen Winkel von 30 Grad aus und chirale Nanoröhrchen entstehen durch andere mögliche Aufrollwinkel $\in [0, 30]$ (siehe Abbildung 4.1). Der chirale Vektor \vec{C}_h setzt sich aus den Basisvektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2 der Graphitebene zusammen ($\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$) und verbindet die beiden Atome, die durch „Aufrollen“ der Ebene ineinander übergehen. Durch den chiralen Winkel wird die Orientierung der Kohlenstoff-Hexagone auf der Oberfläche des Röhrchens relativ zur Achse bestimmt (siehe Abbildung 4.1). Die Zickzack-Röhrchen (mit chiralem Vektor $(n, 0)$ und chiralem Winkel 0) zeichnen sich dadurch aus, dass die Enden der Hexagone am Beginn des Röhrchens ein Zickzack-Muster bilden. Die Verteilung der Kohlenstoffatome an den Enden der Armsessel-Nanoröhrchen mit (n, n) ergibt entsprechend ein Muster, das an einen Armsessel in Frontansicht erinnert [2]. Da die Kohlenstoff-Nanoröhrchen quasi-eindimensionale elektrische Leiter sind, die abhängig von ihrer Chiralität (n, m) metallisch oder halbleitend sein können, ergeben sich in der Nanoelektronik vielerlei Anwendungen als Dioden, Datenspeicher und Transistoren. Die Bedingung zum Verschwinden der Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband bei den Kohlenstoff-Nanoröhrchen lautet $n - m = 3i$ mit $i = 0, 1, 2, \dots$. Somit ist klar, dass Armsessel-Nanoröhrchen (n, n) metallisch sind. Mit einem Knick in einem Kohlenstoff-Nanoröhrchen, der links und rechts zu zwei unterschiedlichen Chiralitäten führt, kann zum Beispiel eine Nanodiode konstruiert werden [2]. Für die thermische Leitfähigkeit spielt die Chiralität eine eher untergeordnete Rolle.

Wie bei der eindimensionalen elektronischen Bandstruktur kann auch die Phononendispersionsrelation durch die Zonenfaltungsmethode aus der Phononendispersionsrelation der Graphitschicht bestimmt werden. Durch Auffinden der Nullstellen der Determinante der dynamischen Matrix eines einfachen harmonischen Modells für die Graphitebene mit experimentell angepassten Parametern (für verschiedene Werte des Wellenvektors) ergibt sich der Verlauf der Dispersionsrelation in der ersten Brillouin-Zone [2]. Die Phononendispersionsrelation einer einzelnen (imaginären) Graphitschicht besteht aus 3 akustischen und 3 optischen Phononenzweigen. Bei den akustischen liegt der Zweig am höchsten, der Bewegungen entlang der Bindungsrichtung der zwei Kohlenstoffatome der Einheitszelle beschreibt (Bindungsstreckung). Dann folgt der Zweig für die Bewegung transversal dazu in der Graphitebene und aus der Ebene heraus (Biegeschwingung). Während die beiden erstgenannten zu einer linearen Dispersionsrelation führen, ergibt sich für die Biegeschwingung wegen der dreizähligen Symmetrieachse senkrecht zur Ebene eine k^2 -Abhängigkeit. Der am niedrigsten liegende optische Zweig der imaginären Graphitschicht für Schwingungen senkrecht zur Graphi-

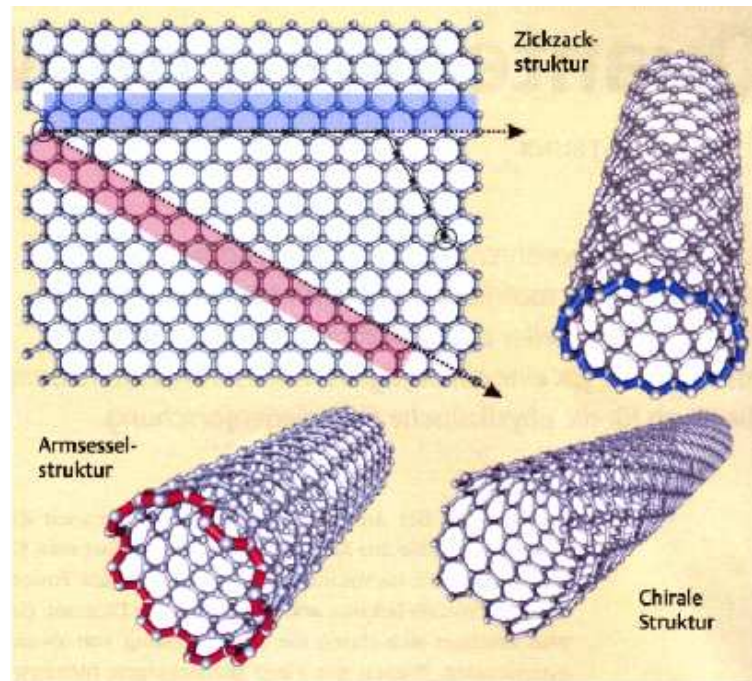


Abbildung 4.1: Graphit und die verschiedenen Arten von Kohlenstoff-Nanoröhrchen, die durch „Aufrollen“ der Graphitebene in unterschiedlichen Winkeln zum Kristallgitter entstehen. (Grafik: Chem. unserer Zeit 2005, 39(1), 17)

tebene erscheint bei $\omega \sim 865 \text{ cm}^{-1}$ bei $k = 0$.

Bei der Zonenfaltungsmethode wird der Wellenvektor der Graphitebene durch die reziproken Gittervektoren der Nanoröhrchen ausgedrückt, wobei es bei $2N$ C-Atomen im Röhrchen zu N möglichen Werten für den Anteil des Wellenvektors entlang des Umfangs des Zylinders kommt. Diese Methode gibt aber nicht die exakten Dispersionsrelationen im Nanoröhrchen wieder. Beispielsweise entspricht die akustische Biegeschwingung in Graphit bei $k = 0$ im Nanoröhrchen einer in radialer Richtung schwingenden Mode mit nicht verschwindender Frequenz. Um die dynamische Matrix für das Nanoröhrchen exakt zu bestimmen, sind etwas aufwendigere Berechnungen für die Kopplungsmatrizen nötig, in die auch der Wert des chiralen Winkels eingeht. Die Zustandsdichte als Funktion der Energie ergibt sich ähnlich wie in Graphit. Es kommt aber bei der quasi-eindimensionalen Struktur der Kohlenstoff-Nanoröhrchen zu wurzelförmigen van Hove-Singularitäten. Abbildung 4.2 zeigt einige Phonon-Dispersionskurven bei geringen Energien. Der longitudinal akustische (LA) Phononenzweig führt zu Bewegungen entlang der Zylinderachse (Schallgeschwindigkeit $v = 24 \text{ km/s}$). Die beiden entarteten transversal akustischen (TA) Moden führen zu Bewegungen senkrecht zur Zylinderachse ($v = 9 \text{ km/s}$). Die Torsions-Mode (twist mode) führt zu einer Verdrillung des Zylinders um seine Achse ($v = 15 \text{ km/s}$). Während die LA-Moden in Nanoröhrchen und Graphit einander entsprechen und die Torsions-Mode von der TA-Mode in der Graphitebene herrührt, entstehen die TA-Moden des Nanoröhrchens durch eine Kombination der TA-Moden in Graphit mit Schwingungen in und senkrecht zur Kohlenstoffebene. Die Zustandsdichte bei der (imaginären) Graphitebene (gestrichelt-punktierte Linie in Abbildung 4.2 a) ist endlich bei $k = 0$. Das liegt an der TA-Schwingungsmoden senkrecht zur Graphitebene, die quadratisch in k ist (weil die Schwingung invariant unter C_3 -Rotationen der Ebene ist). In dreidimensionalem Graphit ist dieser Effekt wegen der Wechselwirkung zwischen den Ebenen zu größeren Energien verschoben (gestrichelte Linie).

Für die Zustandsdichte der Phononen im (10,10)-Nanoröhrchen ergibt sich ein ähnlicher Verlauf wie für Graphit (durchgezogene Linie in Abbildung 4.2 a), doch bei den Energien, bei denen die durch die diskreten Werte des Wellenvektors entlang des Umfangs des Nanoröhrchens entstandenen Subbänder beitragen, erscheinen die für eindimensionale Systeme typischen (wurzelförmigen) van Hove-Singularitäten.

Es hat sich in theoretischen und experimentellen Studien gezeigt, dass der dominierende Beitrag zur Wärmeleitung in Graphit und Nanoröhrchen von den Phononen und nicht von den Elektronen stammt. Für den Festkörperkristall sagt die kinetische Theorie eine thermische Leitfähigkeit proportional zur spezifischen Wärme, zur Gruppengeschwindigkeit und zur mittleren freien Weglänge der Phononen voraus. Die Wärmeleitung in Nanoröhrchen wird sich durch die räumliche Beschränkung auf zwei Dimensionen sehr von den dreidimensionalen Formen des Kohlenstoffs unterscheiden, da die neuen Subbänder veränderte Phonon-Phonon-Wechselwirkungen zur Folge haben. Grobe Abschätzungen zur Größenordnung der Wärmeleitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen und der Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit können mit den Gesetzen der kinetischen Theorie recht einfach gewonnen werden. Die mittlere freie Weglänge setzt sich aus zwei Beiträgen zusammen, Streuung an Probenrändern (b) und Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse (u)

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda_b} + \frac{1}{\lambda_u} . \quad (4.18)$$

Da die erstgenannte mittlere freie Weglänge temperaturunabhängig ist ($\lambda_b \sim v/L$) und Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse nur bei hohen Temperaturen beitragen, sollte die thermische Leitfähigkeit für wesentlich kleinere Temperaturen $T < \theta_D/10$ als die Debye-Temperatur θ_D die gleiche Temperaturabhängigkeit aufweisen wie die spezifische Wärme

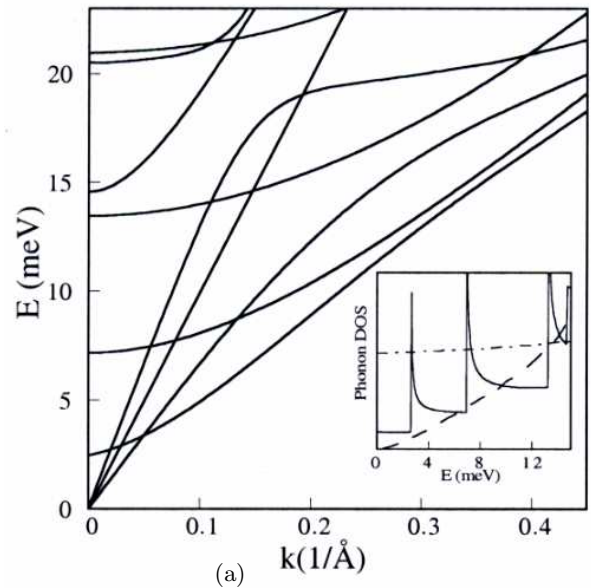
$$\kappa \sim C \sim T^{d/\delta} \quad (4.19)$$

für ein d -dimensionales System mit δ aus der Dispersionsrelation $\omega \sim k^\delta$. Defekte sind in Kohlenstoff-Nanoröhrchen meist isotopischer Natur. Fehlstellen oder Fremdatome kommen kaum vor. Es scheint unmöglich, einen mikroskopisch exakten Ausdruck für λ_u abzuleiten. Aber abhängig vom vorliegenden Kristall werden wie schon von Peierls vorgeschlagene Ausdrücke der Art

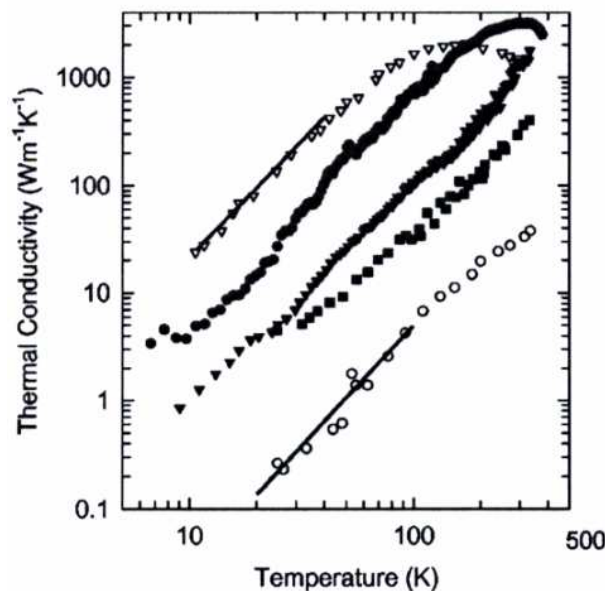
$$\lambda_u \sim T^{-\nu} e^{-\theta_D/\eta T} \quad (4.20)$$

verwendet, wobei oftmals $(\nu, \eta) \sim (1, 1)$ gewählt wird [13]. Es gibt jedoch noch eine Vielzahl anderer Approximationen für verschiedene Materialien [37] und den darin vorherrschenden Phononenstreuungmechanismen. Bei hohen Temperaturen fällt die thermische Leitfähigkeit gemäß der Formel (4.20) nach einem Maximum bei typischerweise $T \sim \theta_D/10$, bei dem $\lambda_b \sim \lambda_u$ gilt, mit $\kappa \sim 1/T$ ab.

Generell gibt es zwei Methoden, die thermische Leitfähigkeit in Computersimulationen zu bestimmen. Die eine besteht aus Molekulardynamik-Simulationen mit geeigneten Thermostaten und einer direkten Messung des Wärmestroms. Die andere besteht aus einer Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit mit Hilfe der Green-Kubo-Formel aus der Linearen-Antwort-Theorie durch die Berechnung der Autokorrelationsfunktion des Wärmestroms in mikrokanonischen Simulationen. Aufgrund der großen Anzahl von Teilchen in Kohlenstoff-Nanoröhrchen mit einigen μm Länge und der langen Zeiten, die zur Einstellung eines stationären Nichtgleichgewichtszustands bzw. zur Berechnung der Wärmestrom-Autokorrelationsfunktion nötig sind, ist es numerisch sehr aufwendig, für realistische Systeme Voraussagen zu machen. Eine der frühesten Analysen zur thermischen Leitfähigkeit in Kohlenstoff-Nanoröhrchen ist [3], wo durch eine Kombination der beiden Methoden eine schnelle Konvergenz bei der Zeitintegration in der Green-Kubo-Formel (4.10) erzielt wurde. Die dabei beobachtete Temperaturabhängigkeit der thermischen Wärmeleitfähigkeit eines (10,10)-Nanoröhrchens (mit 400 Atomen in der Einheitszelle und periodischen Randbedingungen) ergab bei kleinen Temperaturen einen Verlauf proportional zur Wärmekapazität C . Bei einer Temperatur von etwa



(a)



(b)

Abbildung 4.2: a: Die Dispersionskurven für ein (10,10)-Nanoröhrchen bei kleinen Energien. Es gibt vier akustische Moden, zwei entartete TA-Moden ($v = 9 \text{ km/s}$), eine Torsionsmode ($v = 15 \text{ km/s}$) und eine LA-Mode ($v = 24 \text{ km/s}$). Der Inset zeigt bei kleinen Energien die Phononenzustandsdichte für Nanoröhrchen (durchgezogene Linie), für Graphit (gestrichelte Linie) und für eine einzelne Graphitschicht (punktiert-gestrichelte Linie). Die Zustandsdichte für Nanoröhrchen ist konstant unterhalb 2.5 meV und nimmt schrittweise zu, wenn höhere Energiebänder beitragen, wobei bei jeder Subband-Kante eine van Hove-Singularität erscheint. (Grafik aus [2])

b: Es sind thermische Leitfähigkeiten eines (einzelnen) mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchens mit 14 nm Durchmesser (volle Kreise), Bündel aus mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchen mit 80 nm (volle Dreiecke) und 200 nm (volle Rechtecke) Durchmesser dargestellt. Zusätzlich sind zum Vergleich die thermischen Leitfähigkeiten von durch Gasablagerung entstandenen Graphit-Fasern gezeigt, wobei eine bei 3000 K wärmebehandelt wurde (leere Dreiecke) und die andere unbehandelt ist (leere Kreise). Die Linien stellen die berechnete thermische Leitfähigkeit der Graphitebene mit einer mittleren freien Weglänge $\lambda \sim \lambda_b$ der Phononen von $2.9 \mu\text{m}$ (obere Linie) und 3.9 nm (untere Linie) dar. (Grafik aus [38])

100 K zeigte sich ein Maximum von etwa 36000 W/mK, gefolgt von einem Abfall der thermischen Leitfähigkeit $\kappa \sim \lambda_u \sim T^{-1}$ bei höheren Temperaturen durch Umklapp-Prozesse. Das Maximum liegt etwa im Bereich des Leitfähigkeit-Rekords von 41000 W/mK für 99.9 % reinem Diamant. Bei Raumtemperatur ergab sich jedoch eine thermische Leitfähigkeit des Kohlenstoff-Nanoröhrchens von 6600 W/mK, die den entsprechenden Wert des reinen Diamants (3320 W/mK) deutlich übertrifft. Der langsamere Abfall der Wärmeleitfähigkeit bei großen Temperaturen durch Umklapp-Streuung ist ein Effekt der niedrigen Dimensionalität der Kohlenstoff-Nanoröhrchen. Simulationen mit mehreren Kohlenstoffschichten zeigen in Übereinstimmung mit experimentellen Werten für Graphit thermische Leitfähigkeiten, die etwa eine Größenordnung kleiner sind als für Kohlenstoff-Nanoröhrchen.

Experimentelle Ergebnisse für die thermische Leitfähigkeit eines einzelnen mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchens mit einem Durchmesser von 14 nm zeigen bei Raumtemperatur vergleichbare Werte von ~ 3000 W/mK [4] (siehe Abbildung 4.2). In Abbildung 4.2 (b) ist ebenfalls zu sehen, dass bei Bündeln von Kohlenstoff-Nanoröhrchen die thermische Leitfähigkeit wesentlich kleiner ist und eine andere Temperaturabhängigkeit besteht, was auf die stärkere Streuung an den Kontaktstellen der Röhrchen zurückzuführen ist, $\lambda_u \gg \lambda_b$. Bei Experimenten mit Matten aus einwandigen Nanoröhrchen (mit mittlerem Durchmesser 1.4 nm) ist durch Ausrichten der Stränge aus Nanoröhrchen (durch starke magnetische Felder) eine Verbesserung von etwa 35 W/mK auf 200 W/mK bei Raumtemperatur erzielt worden [39, 40].

Das Abknicken der thermischen Leitfähigkeit des einzelnen mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchens bei 300 K in Abbildung 4.2 deutet auf Umklapp-Streuung hin. Bei Zimmertemperatur zeigt das mehrwandige Kohlenstoff-Nanoröhrchen deutlich höhere thermische Leitfähigkeiten als temperaturbehandelte Kohlenstoff-Fasern, die aus vielen meist axialsymmetrischen Graphitschichten bestehen. Sie finden in der Industrie vielfach Anwendung wegen ihrer Leichtigkeit und ihrer großen Härte (härter als Stahl). Entgegen den Simulationen [3] und Rechnungen erscheint das Leitfähigkeitsmaximum für das mehrwandige Nanoröhrchen in Abbildung 4.2 bei ~ 320 K. Das liegt vor allem am Einfluss der Kontaktstellen mit den Metallelektroden der Messapparatur in [4], deren Längen wie die Länge der Kohlenstoff-Nanoröhrchen (3 μm) selbst im μm -Bereich liegen. Für sehr lange Nanoröhrchen (das ist die Annahme der Green-Kubo-Theorie) rückt das Maximum zu kleineren Temperaturen und nimmt größere Werte an. Dieser Effekt ist in [41] gezeigt. Dort wird von Messungen der thermischen Leitfähigkeit eines einzelnen einwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchens berichtet. Dabei wurde die thermische Leitfähigkeit des einzelnen einwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchens durch seine ($I - V$)-Charakteristik im Temperaturbereich 300 – 800 K durch Joulesches Selbstheizen gewonnen. Das Nanoröhrchen liegt dabei über einem lithographisch erzeugten Graben auf zwei Pt-Kontakten. Die Abmessungen des Nanoröhrchens wurden mit Kraftspektroskopie und Elektronenmikroskopie gewonnen (siehe Abbildung 4.3). Die thermische Leitfähigkeit liegt dabei im Bereich von 3500 W/mK bei Zimmertemperatur, für ein Kohlenstoff-Nanoröhrchen der Länge $L = 2.6 \mu\text{m}$ und einem Durchmesser von $D = 1.7 \text{ nm}$ (siehe Abbildung 4.3 b). Mit der Annahme, dass die Länge L in die thermische Leitfähigkeit nur über das Verhältnis λ/L eingeht (mit $\lambda \approx 0.5 \mu\text{m}$), ergibt sich die phänomenologische Formel

$$\kappa(L, T) = \left(aT + bT^2 + c(1 + 0.5/L)T^{-2} \right)^{-1} \quad (4.21)$$

für die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Systemlänge L in μm und der Temperatur T in Kelvin (siehe Abbildung 4.3 c). Die Parameter a , b und c wurden durch Fit an die Messwerte im Bereich $T \in [300 \text{ K}, 800 \text{ K}]$ und für die Werte bei niedrigeren Temperaturen aus Referenz [42] zu $a = 3.7 \cdot 10^{-7}$, $b = 9.7 \cdot 10^{-10}$ und $c = 9.3$ bestimmt. Die Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit stimmt gut mit theoretischen Vorhersagen [43] überein. Bei großen Temperaturen fällt auf, dass die thermische Leitung stärker als $1/T$ abfällt. Dafür sind Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse in der zweiten Ordnung verantwortlich, die quadratisch von T abhängen (Abbildung 4.3

b). Da es in der Literatur unterschiedliche Werte für λ gibt, hängt die Qualität der Vorhersage für die Längenabhängigkeit mit der Qualität der Abschätzung für λ und der ad-hoc angenommenen Form der phänomenologischen Gleichung (4.21) für $\kappa(L, T)$ zusammen.

Es gibt bisher keine Messungen der thermischen Leitfähigkeit von Kohlenstoff-Nanoröhrchen, die den Wert α , die Potenz mit der die Wärmeleitfähigkeit von der Systemlänge abhängt, direkt ermitteln. Aktuelle Experimente zeigen aber einen Übergang von ballistischer zu diffusiver Wärmeleitung bei mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchen für Längen von $\sim 0.5 \mu m$, gemittelt über verschiedene mögliche Radien [44]. Bei sehr kurzen Längen und sehr hohen elektrischen Strömen kommt es in den Nanoröhrchen zu Temperaturen von etwa $900 K$, bei denen die Ablation einzelner Schalen beobachtet wurde. In diesem Zustand ergeben sich Messwerte für die thermische Leitung in den Nanoröhrchen, die nahe am Maximalwert $G^{max} = \pi^2 k_B^2 T / 3h$ (dem Wärmeleitungsquantum) liegen [44].

Es hat sich also theoretisch und experimentell gezeigt, dass Kohlenstoff-Nanoröhrchen außerordentlich gute Wärmeleiter sind. Sie liegen als quasi-eindimensionale Phonon-Leiter mit sehr reiner geordneter Struktur vor. Die sp^2 -Bindungen sind sogar stärker als die sp^3 -Bindungen in Diamant und führen zu sehr hohen Schallgeschwindigkeiten. Die große Debye-Temperatur führt dazu, dass das Maximum der Wärmeleitfähigkeit bei höheren Temperaturen liegt als bei vielen anderen Materialien. Die niedrige Dimensionalität von Kohlenstoff-Nanoröhrchen führt zu einem langsamen Abfall der Wärmeleitfähigkeit für Temperaturen $T > \theta_D/10$, weil in quasi-eindimensionalen Materialien die Energie- und Impulserhaltung (modulo einem Gittervektor) bei Drei-Phononen-Umklapp-Prozessen schwieriger zu erfüllen ist. Die relativ schwachen Wechselwirkungen zwischen den Röhrchen sind zwar für mechanische Anwendungen ein Nachteil, wirken sich aber positiv auf die thermische Leitfähigkeit aus.

Im folgenden soll ein Modell abgeleitet werden, das Kohlenstoff-Nanoröhrchen durch Fermi-Pasta-Ulam-Ebenen beschreibt. Dabei wird der zylinderförmigen Gestalt der Nanoröhrchen durch das Setzen von periodischen Randbedingungen in der Richtung senkrecht zur Zylinderachse Rechnung getragen. Durch Simulationen dieses Modells ergibt sich die interessante Perspektive, die Ergebnisse einerseits mit den Resultaten für Kohlenstoff-Nanoröhrchen und andererseits mit den Resultaten für nichtlineare Hamiltonsche Gitter vergleichen zu können.

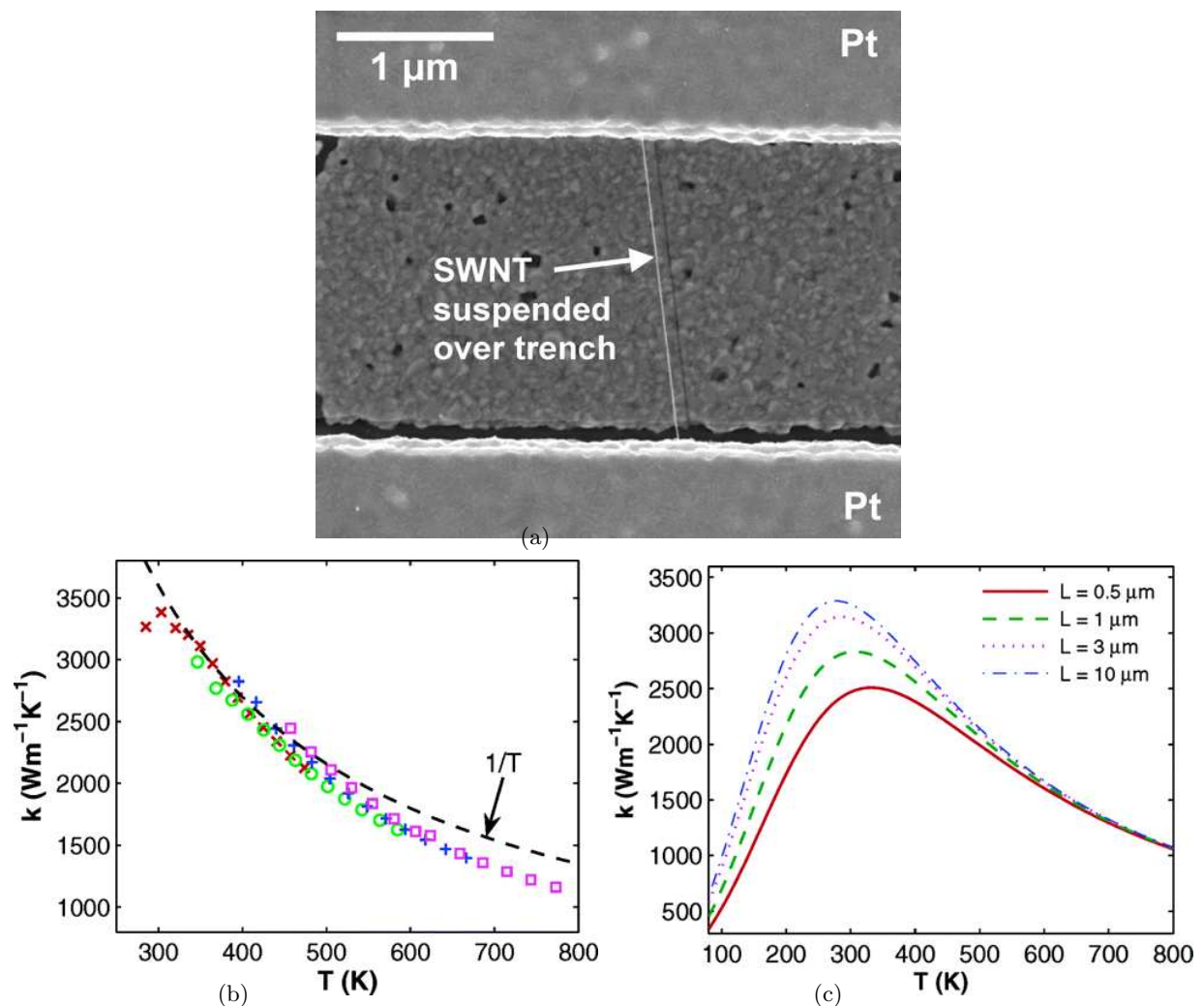


Abbildung 4.3: a: Elektronenmikroskop-Bild für ein typisches einwandiges Kohlenstoff-Nanoröhrchen, das über einen $2 \mu\text{m}$ breiten Graben auf zwei Pt-Kontakten liegt.

b: Aus Widerstandsmessungen und unter Benutzung der Wärmeleitungsgleichung bestimmte Werte der Wärmeleitfähigkeit für Umgebungstemperaturen von $T_o = 250 \text{ K}$ (x), $T_o = 300 \text{ K}$ (o), $T_o = 350 \text{ K}$ (+) und $T_o = 400 \text{ K}$ (Quadrate) für das Kohlenstoffröhrchen aus (a) mit Länge $L = 2.6 \mu\text{m}$ und Durchmesser $D = 1.7 \text{ nm}$. Die gestrichelte Linie zeigt den $1/T$ -Abfall aufgrund der Umklapp-Prozesse. Bei großen Temperaturen trägt Streuung zwischen (einem) optischen und (zwei) akustischen Phononen bei, die eine Streuzeit und einen Beitrag zur thermischen Leitfähigkeit $\sim T^2$ zeigen.

c: Verlauf der thermischen Leitfähigkeit nach der Abschätzung (4.21). Die Längenabhängigkeit wurde phänomenologisch unter der Annahme eingeführt, dass die mittlere freie Weglänge der Phononen etwa $0.5 \mu\text{m}$ beträgt. Die Abhängigkeit der Systemgröße ist vernachlässigbar bei hohen Temperaturen, weil der Wärmetransport vorwiegend diffusiver Natur ist. Ein ballistischer Wärmetransport ergibt sich bei $L \leq \lambda$ und nicht zu großen Temperaturen. (Abbildungen aus [41])

4.4 Modell

4.4.1 FPU-Hamiltonfunktion

Als Modell soll eine FPU-Ebene dienen, an deren gegenüberliegenden Seiten zwei Wärmebäder angeschlossen werden und bei der in transversaler Richtung periodische Randbedingungen vorliegen. Da es sich bei den Partikeln um Kohlenstoffatome handelt, wird als Wechselwirkungspotenzial das Tersoff-Potenzial [10] angenommen und bis zur vierten Ordnung für kleine Auslenkungen aus der Ruhelage entwickelt. Für 2 C-Atome bei $\vec{n} = (n_x, n_y)$ und $\vec{m} = (m_x, m_y)$ in der Ebene lautet das Tersoff-Potenzial:

$$V_{\vec{n}\vec{m}} = f_c(r_{\vec{n}\vec{m}})(V_R(r_{\vec{n}\vec{m}}) + b_{\vec{n}\vec{m}}V_A(r_{\vec{n}\vec{m}})) . \quad (4.22)$$

Dabei bezeichnet

$$f_c(r_{\vec{n}\vec{m}}) = \begin{cases} 1 & r < R \\ 1 + \cos(\pi(r - R)/(S - R)) & R \leq r \leq S \\ 0 & r > S \end{cases} \quad (4.23)$$

eine Abschneide-Funktion des repulsiven und attraktiven Teils, V_R und V_A , der kovalenten Bindung

$$V_R(r_{\vec{n}\vec{m}}) = -B \exp(-\mu r_{\vec{n}\vec{m}}) , \quad V_A(r_{\vec{n}\vec{m}}) = A \exp(-\lambda r_{\vec{n}\vec{m}}) \quad (4.24)$$

und $b_{\vec{n}\vec{m}}$ den Einfluss der lokalen Umgebung (Anzahl und Art der Nachbaratome bzw. Fehlstellen von \vec{n}), der hier nicht weiter diskutiert werden soll und im folgenden zu 1 gesetzt wird. Für die Potenzialparameter werden die Werte in [10]

$$\begin{aligned} A &= 1393.6 \text{ eV} , \quad B = 346.7 \text{ eV} , \quad \lambda = 34.879 \text{ nm}^{-1} \\ \mu &= 22.119 \text{ nm}^{-1} , \quad R = 0.22 \text{ nm} , \quad S = 0.21 \text{ nm} \end{aligned} \quad (4.25)$$

benutzt. Die daraus folgende Ruhelage von $a = 0.1447 \text{ nm}$ stimmt gut mit dem gemessenen Wert für Graphit von $a = 0.1421 \text{ nm}$ überein.

Bei der Approximation dieses Potenzials durch ein FPU-Potenzial soll gelten, dass die Temperatur im System ausreichend klein ist, damit größere Bindungsabstände als R nicht berücksichtigt werden müssen. Außerdem werden die im System vorkommenden Energien auf A , die Längen auf a und die Massen auf m_c (Masse eines Kohlenstoff-Atoms) skaliert. Man erhält damit eine Hamiltonfunktion der Form

$$H = \sum_{\vec{n}} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{dx_{\vec{n}}}{d\tau} \right)^2 + \sum_{\langle \vec{n}, \vec{m} \rangle} (e^{-\gamma x_{\vec{n}\vec{m}}} - \epsilon e^{\eta x_{\vec{n}\vec{m}}}) \right) \quad (4.26)$$

mit

$$\begin{aligned} x_{\vec{n}\vec{m}} &= \frac{r_{\vec{n}\vec{m}}}{a} = 1 + q_{\vec{n}\vec{m}} , \quad \tau = \sqrt{\frac{A}{m_c a}} t = 0.73110^{15} \frac{1}{s} t , \quad \epsilon = \frac{B}{A} = 0.24878 \\ \gamma &= \lambda a = 5.04772 , \quad \eta = \mu a = 3.20108 . \end{aligned} \quad (4.27)$$

Die Summation im Wechselwirkungsanteil von (4.26) erfolgt nur über die vier nächsten Nachbarn \vec{m} des C-Atoms \vec{n} des quadratischen zweidimensionalen FPU-Gitters. Die normierte relative Auslenkung aus der Ruhelage $q_{\vec{n}\vec{m}}$ wird als klein angenommen und die Paar-Wechselwirkungsfunktion der Hamiltonfunktion (4.26)

$$V_{\vec{n}\vec{m}} = e^{-5.04772(1+q_{\vec{n}\vec{m}})} - 0.24878 e^{-3.20108(1+q_{\vec{n}\vec{m}})} \quad (4.28)$$

um den Gleichgewichtspunkt $q_{\vec{n}\vec{m}} = 0$ entwickelt:

$$V_{\vec{n}\vec{m}}^{FPU} = -0.00370591 + 0.0299369q_{\vec{n}\vec{m}}^2 - 0.0823225q_{\vec{n}\vec{m}}^3 + 0.129451q_{\vec{n}\vec{m}}^4 . \quad (4.29)$$

Benutzt man noch, dass die Geschwindigkeit des Kohlenstoffatoms \vec{n} statt in Absolutkoordinaten in den Auslenkungskoordinaten angegeben werden kann ($\dot{x}_{\vec{n}} = \dot{q}_{\vec{n}}$), ergibt sich in der FPU-Approximation die Hamiltonfunktion

$$H^{FPU} = \sum_{\vec{n}} \left(\frac{1}{2} \left(\frac{d\vec{q}_{\vec{n}}}{d\tau} \right)^2 + \sum_{\langle \vec{n}, \vec{m} \rangle} V_{\vec{n}\vec{m}}^{FPU} \right) . \quad (4.30)$$

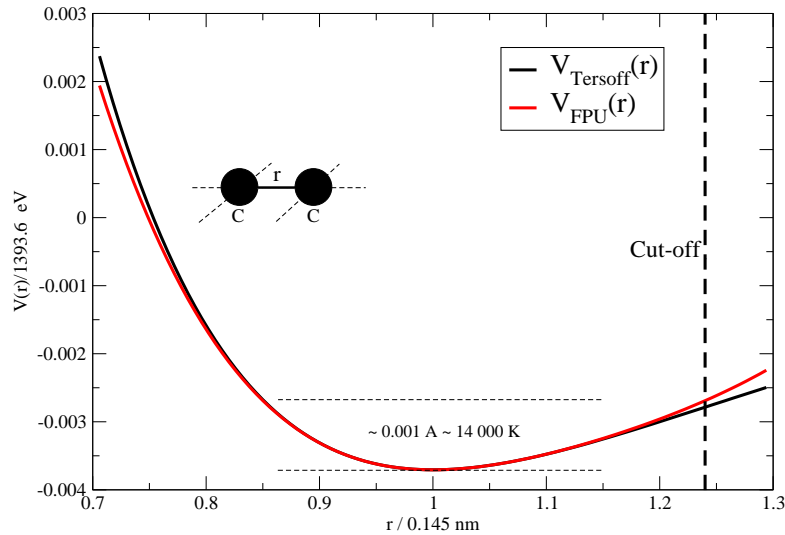


Abbildung 4.4: Das empirische Tersoff-Potenzial für die C-C-Bindung in Graphit kann für kleinere Auslenkungen als dem Cut-off-Wert R sehr gut durch die FPU-Näherung approximiert werden. Die Bindungsenergien dieses Bereichs entsprechen sehr großen Temperaturen von einigen tausend Kelvin.

Das System (4.26) ist streng genommen kein FPU-System. Hierfür muss gelten, dass sich die Ortskoordinate $q_{\vec{n}\vec{m}} = x_{\vec{n}\vec{m}} - 1$ in der Hamiltonfunktion aus der Differenz der Auslenkung benachbarter Atome \vec{n} und \vec{m} berechnet

$$q_{\vec{n}\vec{m}} = | \vec{q}_{\vec{n}} - \vec{q}_{\vec{m}} | . \quad (4.31)$$

Diese Identität ist aber nur für kleine Auslenkungen der Atome \vec{n} und \vec{m} richtig. Es gilt mit

$$\Delta \vec{q}_{\vec{n}\vec{m}} = \vec{q}_{\vec{n}} - \vec{q}_{\vec{m}} \quad (4.32)$$

in erster Ordnung in $| \Delta \vec{q}_{\vec{n}\vec{m}} |$

$$x_{\vec{n}\vec{m}}^2 = ((\vec{n} - \vec{m}) + \Delta \vec{q}_{\vec{n}\vec{m}})^2 = \vec{1}^2 + \Delta \vec{q}_{\vec{n}\vec{m}}^2 + 2 | \Delta \vec{q}_{\vec{n}\vec{m}} | \cos \phi_{\vec{n}\vec{m}} \approx 1 + 2 | \Delta \vec{q}_{\vec{n}\vec{m}} | , \quad (4.33)$$

da der Kosinus von $\phi_{\vec{n}\vec{m}}$, dem Winkel zwischen dem Verbindungsvektor $\vec{n} - \vec{m}$ und der relativen Auslenkung der beiden Atome $\Delta\vec{q}_{\vec{n}\vec{m}}$, in nullter Näherung gleich 1 ist. Aus der Definition $x_{\vec{n}\vec{m}} = 1 + q_{\vec{n}\vec{m}}$ folgt nach Entwicklung der Wurzel von Gleichung (4.33)

$$q_{\vec{n}\vec{m}} = |\Delta\vec{q}_{\vec{n}\vec{m}}| = |\vec{q}_{\vec{n}} - \vec{q}_{\vec{m}}| . \quad (4.34)$$

Diese Näherung stellt zwar auf den ersten Blick eine relativ starke Beschränkung dar, da der Zusammenhang (4.31) nur in erster Ordnung in $|\Delta\vec{q}_{\vec{n}\vec{m}}|$ gilt, wohingegen die Entwicklung des Paar-Wechselwirkungspotenzials $V_{\vec{n}\vec{m}}^{FPU}$ bis zur vierten Ordnung betrieben wurde. Intuitiv scheint diese Näherung aber durch die Annahme eines lokalen thermischen Gleichgewichtes sehr treffend zu sein. Im thermischen Gleichgewicht sollten sich für die vernachlässigten Größen $\Delta\vec{q}_{\vec{n}\vec{m}}^2$ und $\phi_{\vec{n}\vec{m}}$ die Mittelwerte $fk_B T/2$ und 0 ergeben. Sie hätten somit im Mittel keinen Einfluss auf die Bewegungsgleichungen eines Teilchens.

Letztendlich wird die Annahme kleiner Auslenkungen und die Verwendung des FPU-Potenzials durch die Beschränkung auf moderate Temperaturen legitimiert. Technologisch sind Temperaturen von einigen hundert Kelvin interessant. Durch die Annahme $r_{\vec{n}\vec{m}} < R$ beschränkt man sich auf Auslenkungen im FPU-Modell von etwa $q_{\vec{n}\vec{m}} < 0.24$. Für solche Auslenkungen müsste eine Energie von etwa $V_{\vec{n}\vec{m}}(R) \approx 0.001A$ aufgewendet werden, was einer Temperatur von etwa $1.4 \cdot 10^4 K$ entspricht (siehe Abbildung 4.4). Bei Temperaturen von weniger als 1000 K befindet man sich sicher im Bereich kleiner Auslenkungen $q_{\vec{n}\vec{m}} < 0.1$ und die gemachten Näherungen sind gut erfüllt.

Die größte Abweichung von den realen Bindungsverhältnissen in Kohlenstoff-Nanoröhrchen kommt durch die Annahme eines quadratischen Gitters zustande, das sehr zweckmäßig für die numerische Behandlung ist. Trotz der Tatsache, dass die genaue Struktur des Systems, wie die Chiralität des Kohlenstoff-Nanoröhrchens, eher zweitrangig ist für das thermische Verhalten, sind im quadratischen FPU-Modell durch das Vorhandensein von vier statt drei Bindungspartnern wichtige Unterschiede zu erwarten. Weitere Verbesserungen einer FPU-Approximation sollten daher die bienenwabenförmige Struktur der Kohlenstoff-Nanoröhrchen berücksichtigen.

4.4.2 Wärmeleitfähigkeit

Da die Wärmeleitfähigkeit κ für das FPU-System bestimmt werden soll, müssen die Temperatur $T_{\vec{n}}$ und der Wärmestrom $\vec{J}_{\vec{n}}$ im System definiert werden. Geht man von der lokalen Energiedichte $h_{\vec{n}}$ am Ort \vec{n} aus

$$h_{\vec{n}} = \frac{1}{2} \dot{q}_{\vec{n}}^2 + \frac{1}{4} \sum_{\langle \vec{m} \rangle} V^{FPU}(q_{\vec{n}\vec{m}}) , \quad (4.35)$$

wobei $\langle \vec{m} \rangle$ die vier nächsten Nachbarn von \vec{n} bezeichnet

$$\langle \vec{m} \rangle = \{ \vec{m}_1 = (n_x + 1, n_y), \vec{m}_2 = (n_x - 1, n_y), \vec{m}_3 = (n_x, n_y + 1), \vec{m}_4 = (n_x, n_y - 1) \} , \quad (4.36)$$

kann man aus der Kontinuitätsgleichung

$$\dot{h}_{\vec{n}} + \text{div}(\vec{J}_{\vec{n}}) = 0 \quad (4.37)$$

den lokalen Wärmestrom ermitteln [7]. Für den zweidimensionalen Wärmestrom $\vec{J}_{\vec{n}}$ gilt:

$$J_{\vec{n}}^x = -\frac{1}{4} \left(f_{\vec{n}}^{xx}(p_{\vec{n}}^x + p_{\vec{m}_1}^x) + f_{\vec{n}}^{yx}(p_{\vec{n}}^y + p_{\vec{m}_1}^y) + f_{\vec{n}}^{zx}(p_{\vec{n}}^z + p_{\vec{m}_1}^z) \right) \quad (4.38)$$

$$J_{\vec{n}}^y = -\frac{1}{4} \left(f_{\vec{n}}^{xy}(p_{\vec{n}}^x + p_{\vec{m}_3}^x) + f_{\vec{n}}^{yy}(p_{\vec{n}}^y + p_{\vec{m}_3}^y) + f_{\vec{n}}^{zy}(p_{\vec{n}}^z + p_{\vec{m}_3}^z) \right) \quad (4.39)$$

mit den lokalen Kraftkomponenten

$$\begin{aligned}
 f^{xx} &= -\frac{\partial V^{FPU}(q_{\vec{n}_1\vec{n}})}{\partial q_{\vec{n}}^x}, & f^{yx} &= -\frac{\partial V^{FPU}(q_{\vec{n}_1\vec{n}})}{\partial q_{\vec{n}}^y} \\
 f^{zx} &= -\frac{\partial V^{FPU}(q_{\vec{n}_1\vec{n}})}{\partial q_{\vec{n}}^z}, & f^{xy} &= -\frac{\partial V^{FPU}(q_{\vec{n}_3\vec{n}})}{\partial q_{\vec{n}}^x} \\
 f^{yy} &= -\frac{\partial V^{FPU}(q_{\vec{n}_3\vec{n}})}{\partial q_{\vec{n}}^y}, & f^{zy} &= -\frac{\partial V^{FPU}(q_{\vec{n}_3\vec{n}})}{\partial q_{\vec{n}}^z}.
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Das räumliche und zeitliche Mittel des Wärmestroms ergibt sich zu ($N_{x/y}$: Anzahl der C-Atome in Richtung parallel/senkrecht zur Zylinderachse)

$$\vec{J} = \left\langle \frac{\sum_{\vec{n}} \vec{J}_{\vec{n}}}{N_x N_y} \right\rangle, \tag{4.41}$$

wobei $\langle \cdot \rangle$ immer einem Zeitmittel der Form $\langle \cdot \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} (1/T) \int_0^T \cdot dt$ entspricht. Unter der Annahme eines lokalen thermischen Gleichgewichts kann man sofort mit Hilfe des Virial-Theorems eine Definition für die lokale Temperatur

$$T_{\vec{n}} = \left\langle p_{\vec{n}}^j \frac{\partial h_{\vec{n}}}{\partial p_{\vec{n}}^j} \right\rangle = \left\langle q_{\vec{n}}^j \frac{\partial h_{\vec{n}}}{\partial q_{\vec{n}}^j} \right\rangle \tag{4.42}$$

mit $j = \{x, y, z\}$ angeben, was im Fall der FPU-Hamiltonfunktion

$$T_{\vec{n}} = \langle p_{\vec{n}}^{j^2} \rangle = \langle p_{\vec{n}}^{x^2} + p_{\vec{n}}^{y^2} + p_{\vec{n}}^{z^2} \rangle / 3 \tag{4.43}$$

entspricht. Der Quotient

$$\kappa_x^{FPU} = \frac{\langle \frac{1}{N_x N_y} \sum_{\vec{n}} J_{\vec{n}}^x \rangle}{|\nabla T|} \tag{4.44}$$

bezeichnet dann die Leitfähigkeit des FPU-Systems in dimensionslosen Einheiten. Man kann sich relativ schnell klarmachen, dass man durch eine Multiplikation mit dem Faktor $A^{3/2}/m_c^{1/2}$ den Wärmestrom in der Einheit Wm erhält, wobei m_c die Masse der Kohlenstoff-Atome bezeichnet. Um die Wärmestromdichte \vec{j} (in Einheiten W/m^2) zu berechnen, für die das Fourier-Gesetz gilt, muss \vec{J} noch durch das Volumen des Systems geteilt werden. Dabei gilt $V = N_x a N_y a \delta$, wobei für die Dicke δ der Ebene in der Literatur bei Kohlenstoff-Nanoröhrchen entweder $\delta = 0.34 \text{ nm}$ (Ebenenabstand in Graphit) oder $\delta = 0.142 \text{ nm}$ (Länge der sp^2 -Bindung in Graphit) verwendet wird. Um die Wärmeleitfähigkeit entlang der x -Achse $\kappa_x = j_x / |\nabla T|$ zu bestimmen, muss noch die Temperatur, die dimensionslos in Einheiten von A angegeben wird, auf Kelvin umgerechnet werden. Letztendlich erhält man die Umrechnungsvorschrift

$$\kappa_x = \frac{j_x}{|\nabla T|} = \frac{A^{1/2} k_B}{a \delta m_c^{1/2}} \kappa_x^{FPU} = \begin{cases} 29.725 \text{ W/mK } \kappa_x^{FPU} & \text{mit } \delta = 0.34 \text{ nm} \\ 71.152 \text{ W/mK } \kappa_x^{FPU} & \text{mit } \delta = 0.142 \text{ nm} . \end{cases}$$

Da bei kleinen Systemgrößen an den Systemenden Temperatursprünge auftreten, wird in den Simulationen der Temperaturgradient durch Fit des Temperaturprofils im Systemzentrum von $N_x/4$ bis $3N_x/4$ festgelegt.

4.5 Simulationen

Die Wärmeleitfähigkeit in der FPU-Carbon-Ebene soll im folgenden genauer untersucht werden. Dabei stehen vor allem die Längen- und Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit im Mittelpunkt. Die FPU-Ebene soll $N_y = 10$ Atomabstände breit sein und die Länge $L = N_x a$ besitzen. Der Durchmesser der aufgerollten Kohlenstoff-Ebene mit $N_y = 10$ würde somit ungefähr dem Durchmesser $D = \sqrt{3}a\sqrt{n^2 + nm + m^2}/\pi$ eines (6,0)-Nanoröhrchens entsprechen. Im Gegensatz zur bienenwabenartigen Graphit-Struktur wird hier ein quadratisches Gitter untersucht, wodurch sicherlich andere Werte für die Leitfähigkeit zu erwarten sind, da jedes Atom vier anstatt drei nächste Nachbarn besitzt. Es wird sich jedoch zeigen, dass die quadratische FPU-Carbon-Ebene auf ähnliche Werte für κ führt, wie sie bereits aus Rechnungen [45], Experimenten [41] und Molekulardynamik-Simulationen [46, 47] bekannt sind. Ziel der Untersuchungen ist die Beantwortung der Frage, inwiefern zweidimensionale FPU-Systeme Kohlenstoff-Nanoröhrchen beschreiben können und ob sie zu vergleichbaren Abhängigkeiten der Wärmeleitfähigkeit κ von der Systemlänge L und der Temperatur T führen wie experimentelle, analytische und rechnergestützte Studien. Auf der anderen Seite bietet es sich durch die Verwendung der FPU-Approximation des Kohlenstoff-Wechselwirkungspotenzials an, die Ergebnisse mit den vorhandenen analytischen Vorhersagen, z.B. aus der Modenkopplungstheorie, zu vergleichen.

Um die Unterschiede der FPU-Carbon-Ebene mit einem eindimensionalen System zu veranschaulichen, wird ebenfalls eine hypothetische Kohlenstoff-Kette mit $N_y = 1$ untersucht.

4.5.1 Nichtgleichgewichtssimulationen

Numerische Untersuchungen im Bereich der Statistischen Physik basieren auf einer realistischen Modellierung von thermischen Reservoiren. Wenn das Verhalten eines Systems im Gleichgewicht untersucht werden soll, kommen zumeist wohlbekannte Monte-Carlo-Techniken und mikrokano-nische Simulationen zum Einsatz. Bei Nichtgleichgewichtssimulationen ist man durch das Fehlen einheitlicher theoretischer Konzepte und analytischer Methoden oftmals auf realistische Simulationen der Wechselwirkungen zwischen dem zu untersuchenden System und den Wärmebädern angewiesen. Eine detailgetreue Modellierung von Wärmebädern aus Partikeln mit (nicht)linearen Wechselwirkungen scheidet am zu großen numerischen Aufwand. Immerhin müsste das Wärmebad viel mehr Teilchen beinhalten als das eigentliche System, das mit dem Bad kontaktiert werden soll. Analytische Ergebnisse sind nur für harmonische Systeme vorhanden, in denen die Existenz eines stationären Nichtgleichgewichtszustands bewiesen werden kann [7].

Die traditionelle Methode besteht darin, die Wechselwirkungen mit einem Wärmebad über die Einführung von Rausch- und Dämpfungstermen zu modellieren, wobei beide das Fluktuation-Dissipations-Theorem erfüllen müssen. Bei einer anderen Möglichkeit werden elastische Kollisionen zwischen Gasmolekülen mit den thermostatisierten Teilchen simuliert, wobei die Geschwindigkeiten der Gasmoleküle einer Maxwell-Verteilung gehorchen.

In dieser Arbeit wird ein Nosé-Hoover-Thermostat benutzt [48]. Dem Nosé-Hoover-Algorithmus wurde in der Vergangenheit die meiste Aufmerksamkeit zuteil, denn es konnte gezeigt werden, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilungen im thermostatisierten System dem kanonischen Ensemble entsprechen [49]. Dabei wird eine Hilfsvariable ζ eingeführt, die die mikroskopische Wirkung des Thermostats auf die Bewegungsgleichungen beinhaltet.

Der Nosé-Hoover-Algorithmus ist invariant unter Zeitumkehr und hängt mit den Fluktuationstheoremen der Nichtgleichgewichtsthermodynamik zusammen. Während im Gleichgewicht $\langle \zeta_{\pm} \rangle = 0$ wegen der Reversibilität der Gleichgewichtszustände gilt, wird im Nichtgleichgewicht $\langle \zeta_+ \rangle + \langle \zeta_- \rangle > 0$ mit einer Entropieproduktion und Irreversibilität verbunden.

Die Bewegungsgleichungen für eine zweidimensionale Anordnung $\vec{n} = (n_x, n_y)$ wechselwirkender Teilchen in einer Nichtgleichgewichtssituation mit der Temperatur T_+ und T_- an den Rändern bei

$\vec{n}_+ = (1, n_y)$ und $\vec{n}_- = (N_x, n_y)$ lauten:

$$\dot{\vec{q}}_{\vec{n}} = \vec{p}_{\vec{n}} \quad (4.45)$$

$$\dot{\vec{p}}_{\vec{n}} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{q}_{\vec{n}}} - (\delta_{\vec{n}\vec{n}_+} + \delta_{\vec{n}\vec{n}_-})\zeta_{\vec{n}}\vec{p}_{\vec{n}} \quad (4.46)$$

$$\dot{\zeta}_{\vec{n}_{\pm}} = \frac{1}{\theta^2} \left(\frac{\vec{p}_{\vec{n}_{\pm}}^2}{fT_{\pm}} - 1 \right). \quad (4.47)$$

Anschaulich kann man sich die Wirkung der Hilfsvariable ζ als Reibung bzw. Antrieb vorstellen, je nachdem, ob die kinetische Energie des Partikels kleiner oder größer als der Mittelwert des thermischen Gleichgewichts (fT , wobei f die Anzahl der Freiheitsgrade des Teilchens ist und $k_B = 1$ gesetzt wurde) ist. Die Zeitintegration wurde mit einem Runge-Kutta-Schema durchgeführt. Der in der Simulation verwendete Zeitschritt von $d\tau = 0.05$ entspricht einer Zeit von $dt = 0.0684fs$. Die mittlere Antwort-Zeit θ des Bades ist im Prinzip ein frei wählbarer Parameter des Systems, sollte aber typischerweise das Reziproke einer typischen Frequenz des Systems sein. Durch den Wert des harmonischen Anteils im FPU-Potenzial bietet sich hier die Festlegung $\theta = 0.1$ an, für die sich relativ kleine Temperatursprünge ergeben. In der Praxis wählt man den Wert θ meist empirisch und versucht sicherzustellen, dass er die Resultate der Simulationen nicht beeinflusst.

Das Problem an der numerischen Simulation sind die relativ langen Zeiten, die zur Einstellung eines stationären Nichtgleichgewichtszustands nötig sind. Dieser ist durch ein stationäres Temperaturprofil entlang der Richtung des Energieflusses gegeben. Die Temperatur an einer Stelle n_x ist (in dimensionslosen Einheiten) gegeben durch

$$T_{n_x} = \sum_{n_y} T_{(n_x, n_y)} / N_y, \quad T_{\vec{n}} = \langle \vec{p}_{\vec{n}}^2 \rangle / f. \quad (4.48)$$

Im stationären Nichtgleichgewichtszustand sollte sich ein konstanter Strom J_x , ein verschwindender Strom J_y und ein lineares Temperaturprofil ergeben. An den Schnittstellen zwischen Wärmebad und System kommt es aber besonders bei kleinen Systemen zu Diskontinuitäten des Temperaturprofils, was auch als Kapitza-Widerstand bekannt ist und an den unterschiedlichen Phononenspektren der aufeinandertreffenden Materialien liegt. Der sich im Zentrum des Systems ausbildende (lineare) Temperaturgradient ist kleiner als der mittlere Temperaturgradient $(T_+ - T_-) / L = \Delta T / L$. Die thermische Leitfähigkeit $\kappa_{eff} = j_x L / \Delta T$ beinhaltet diese Randeffekte. In den folgenden Simulationen wurde daher der Temperaturgradient durch Fit einer Gerade an die Temperaturen im Mittelbereich der Kette, T_i mit $i \in [0.25N_x, 0.75N_x]$, ermittelt. Durch Simulationen an der β -FPU-Kette [50] lässt sich zeigen, dass die Temperatursprünge δT an den Rändern proportional zur mittleren freien Weglänge λ und zum Temperaturgradienten am Rand (von der Mitte zu den Rändern extrapoliert) sind. Damit ergibt sich durch Vergleich mehrerer Simulationsläufe

$$\kappa_{eff} = \frac{j_x}{\Delta T / L} = \frac{\kappa}{1 + 2\epsilon\lambda / L}, \quad (4.49)$$

wobei ϵ ein Maß für die Kopplungsstärke zwischen Bad und System ist. In [7, 50] hat sich gezeigt, dass Nosé-Hoover-Thermostate sich durch relativ kleine Werte ϵ und somit relativ kleine Temperatursprünge auszeichnen. In [51] werden verschiedene Thermostate in starken Nichtgleichgewichtszuständen untersucht, wobei das Nosé-Hoover-Thermostat wiederum die kleinsten Temperatursprünge zeigt.

In Abbildung 4.5 sind die lokalen Temperaturen T_i (mit $T_- = 303 K$ (30 Grad Celsius) und $T_+ = 367.5 K$ (etwa 94.5 Grad Celsius)) für eine FPU-Carbon-Kette mit $N_x = 316$ und $N_x = 3160$ und eine FPU-Carbon-Ebene ($N_y = 10$) mit $N_x = 178$ und $N_x = 1780$ zu sehen, wobei als x -Koordinate die auf eins normierte Systemlänge x/L gewählt wurde. Für längere Systeme ergeben sich wesentlich kleinere Temperatursprünge an den Rändern. Das Fehlen langwelliger

Phonon-Moden führt zu einer langsamen Konvergenz zum stationären Nichtgleichgewichtszustand, was man an den Werten für die normierte Kurtosis am Ort i

$$Q_i = \frac{N_y \langle \sum_{i_y=1}^{N_y} p_{(i_x, i_y)}^4 \rangle}{\langle \sum_{i_y=1}^{N_y} p_{(i_x, i_y)}^2 \rangle^2} - 3 \quad (4.50)$$

sehen kann. Für kleinere Systemlängen, $N_x = 316$ für die FPU-Carbon-Kette und $N_x = 178$ für die FPU-Carbon-Ebene, sind speziell an den Rändern relativ große Abweichungen vom Wert $Q_i = 0$ zu beobachten. Die Kurtosis Q_i ist ein Maß für die Asymmetrie einer Verteilung. Beim Erreichen des lokalen thermischen Gleichgewichts sollte sich eine symmetrische Normalverteilung für die Impulse der Atome und somit ein Wert $Q_i = 0$ ergeben. Man sieht, dass nach langen Zeiten bei kleinen Werten N_x besonders an den Rändern starke Abweichungen vom lokalen thermischen Gleichgewicht auftreten, die erst nach sehr viel größeren Zeiten verschwinden als bei längeren Systemen. Generell scheint sich der stationäre Nichtgleichgewichtszustand, der zu einem lokalen thermischen Gleichgewicht und einem konstanten Wärmestrom $J_x = const$ ($J_y \sim 0$) führt, schneller für große d und L einzustellen. Große L ermöglichen die für die Wärmeleitung maßgeblichen langwelligen akustischen Phonon-Moden und große d erleichtern ihre Wechselwirkungen. In Abbildung 4.5 (d) ist deutlich zu sehen, dass sich bei der FPU-Carbon-Ebene trotz der geringeren Länge $L = 178 a$ und kleineren Simulationszeiten kleinere Werte für die Kurtosis Q_i ergeben als für die FPU-Carbon-Kette mit $L = 316 a$ (Abbildung 4.5 b). Deshalb ergeben sich in Abbildung 4.5 für die FPU-Carbon-Ebene nach wesentlich kürzerer Zeit lineare T_i -Profile als bei der FPU-Carbon-Kette. Für kurze Systeme mit niedriger Dimensionalität kann der langsame Trend zum stationären Nichtgleichgewichtszustand mit $J_x = const$ ($J_y \sim 0$) zu relativ langen Simulationszeiten führen, innerhalb derer sich kein konstanter Wert κ einstellt, obwohl die Standardabweichung $s_\kappa = \sqrt{\langle \kappa^2 \rangle - \langle \kappa \rangle^2}$ durch die vielen Messungen sehr klein ist. Wie bereits erwähnt, ist die Sonderrolle eindimensionaler Systeme schon aus der Peierls-Theorie bekannt, da sich in einer Dimension (in niedrigster Ordnung der Störungsrechnung) aufgrund der Energie- und Impulserhaltung für das System keine Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse ergeben. Für große Systeme mit vielen Freiheitsgraden stellt sich der stationäre Nichtgleichgewichtszustand schneller ein. Jedoch nimmt der numerische Aufwand bei zweidimensionalen Systemen mit N_x^2 zu.

In der Vergangenheit wurden in Molekulardynamik-Simulationen aus diesem Grund relativ kurze Systemlängen von maximal einigen $0.1 \mu m$ betrachtet [46, 47]. Bei solch kurzen Systemen erhält man kleinere Werte als die in Experimenten [41, 52] gemessenen Wärmeleitfähigkeiten (einige hundert W/mK statt wenige tausend W/mK) für einzelne Nanoröhrchen. Hier befindet man sich wohl in einem Bereich, der laut neueren Studien ballistische Phonon-Leitung zeigt [43, 44].

In den Simulationen wurde typischerweise nach einigen 10^7 Zeitschritten (einige Hundertstel Millisekunden) der stationäre Zustand erreicht. Den Simulationen wurde der Wert der Wärmeleitfähigkeit entnommen, wenn die Relation $J_y/J_x \ll 0.01$ (dauerhaft) erfüllt war. Für kurze Systeme waren aber auch sehr lange Integrationszeiten und Verhältnisse von $J_y/J_x \ll 0.001$ möglich.

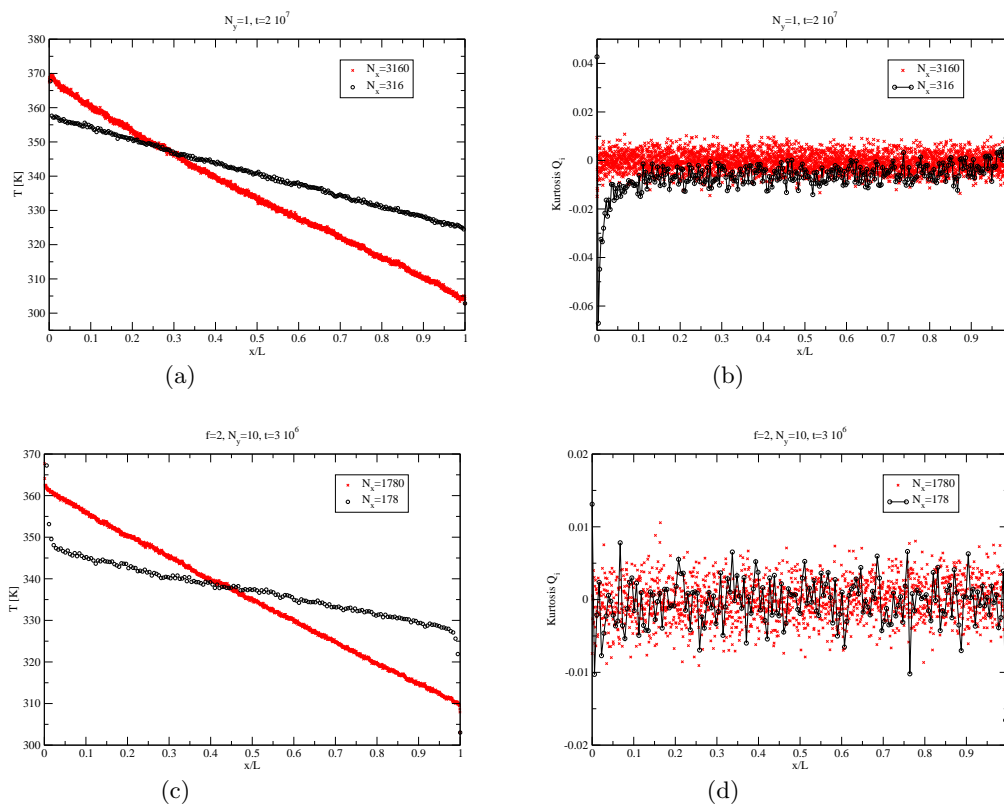


Abbildung 4.5: Temperaturprofil T_i und Kurtosis Q_i (a,b: FPU-Carbon-Ketten, c,d: FPU-Carbon-Ebenen) für FPU-Carbon-Ketten mit $N_x = 316$ und $N_x = 3160$ und FPU-Carbon-Ebenen mit $N_x = 178$ und $N_x = 1780$ bei $N_y = 10$. Zur Einstellung eines Temperaturprofils ohne Temperatursprünge an den Rändern sind bei der FPU-Carbon-Kette und der FPU-Carbon-Ebene große Längen von $L > 3160 a$ nötig. Bei den FPU-Carbon-Ketten wird der stationäre Nichtgleichgewichtszustand mit kleinen Werten Q_i erst nach deutlich längeren Zeiten erreicht als für gleich lange FPU-Carbon-Ebenen.

4.5.2 Simulationsergebnisse: Anomale Wärmeleitung

Die Wärmeleitfähigkeit der FPU-Carbon-Ebene mit $N_y = 10$ wurde für verschiedene Längen $L = N_x a$ bestimmt, wobei $T_- = 303 \text{ K}$ (30 Grad Celsius) und $T_+ = 367.5 \text{ K}$ (94.5 Grad Celsius) gesetzt wurde, um etwa in der Nähe des technologisch wichtigen Temperaturbereichs zu sein. Bei den in Abbildung 4.6 gezeigten Messkurven wurden die Werte der Wärmeleitfähigkeit κ dann bestimmt, wenn die Relation $J_y/J_x < 0.01$ dauerhaft erfüllt war. Für kleine $N_x \approx 100$ sind dazu oftmals sehr lange Simulationsläufe (einige 10^8 Zeiteinheiten, die einigen Hundert Mikrosekunden entsprechen) erforderlich. Dabei wird zwischen den Situationen $f = 1$ (Teilchen bewegen sich nur parallel zur Achse des Röhrchens), $f = 2$ (Teilchen bewegen sich in der FPU-Ebene) und $f = 3$ (Teilchen bewegen sich in alle drei Raumrichtungen) unterschieden. Außerdem wurde die Wärmeleitfähigkeit einer FPU-Carbon-Kette bestimmt. In Abbildung 4.6 kann man sehen, dass sich für die FPU-Kette und die FPU-Ebenen mit $f = 2$ für Längen $L > 0.1 \mu\text{m}$ ein relativ ähnlicher Verlauf einstellt. Die Verhältnisse der FPU-Carbon-Ebene für $f = 2$ sollten am ehesten denen in echten Kohlenstoff-Nanoröhrchen entsprechen. Die $f = 3$ - und $f = 1$ -Ebenen dienen zum Vergleich und sollen die Gemeinsamkeiten zwischen der FPU-Carbon-Kette und der FPU-Carbon-Ebene (mit $f = 2$) unterstreichen. Bei der $f = 1$ - und $f = 3$ -Ebene gibt es wichtige Unterschiede zum $f = 2$ -Modell, da, wie bereits erwähnt, die transversal-akustischen Moden (die beim $f = 1$ -Modell verloren gehen) eine wichtige Rolle spielen und es beim Phononenspektrum eines Kohlenstoff-Nanoröhrchen und einer Graphitschicht (was der $f = 3$ -Ebene entspricht) zu markanten Unterschieden kommt. Durch die doppelt-logarithmische Darstellung ist gut zu sehen, dass die Divergenz $\kappa \sim L^\alpha$ der Wärmeleitfähigkeit der Carbon-Kette mit der Potenz $\alpha \approx 0.227$ geht.

Für die thermische Leitfähigkeit der FPU-Carbon-Ebene mit $f = 2$ ergibt sich ab Längen von $0.1 \mu\text{m}$ ein gute Übereinstimmung mit der FPU-Carbon-Kette. Die FPU-Carbon-Ebene mit $f = 2$ scheint eine ähnliche Divergenz mit der Systemlänge zu besitzen wie die FPU-Carbon-Kette. Bei kleineren L weicht der Verlauf des zweidimensionalen $f = 2$ -Modells deutlich von diesem potenzartigen Verlauf ab. Für die betrachteten zweidimensionalen Systeme mit $f = 1$, $f = 2$ und $f = 3$ zeigt sich gleichermaßen diese Abweichung der thermischen Leitfähigkeit von einem Potenzgesetz bei kleinen Längen. Die Potenz α läuft für sehr kleine L von einem Wert nahe $\alpha \approx 1$ (dem Grenzwert harmonischer Systeme) gegen einen kleineren Wert α_l für große L .

In [45] wurde dieses Verhalten anhand einer Landauer-Formel für Phononentransport aus den numerisch bestimmten Phonon-Dispersionsrelationen und -Zustandsdichten berechnet. Dabei wurde ad-hoc ein aus der elektrischen Leitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen bekannter Transmissionskoeffizient der Form $\Gamma(q, \omega_n) = \lambda/(L + \lambda)$ verwendet, wobei $\lambda(q, \omega_n(q))$ die mittlere freie Weglänge der Phononen darstellt und eine Funktion des Wellenvektors q ist. Diese Rechnung ergibt, dass der Exponent α für ein Kohlenstoff-Nanoröhrchen mit dem Durchmesser $D = 1.5 \text{ nm}$ (was in etwa der Breite der FPU-Carbon-Ebene von $N_y a = 10a = 1.45 \text{ nm}$ entspricht) etwa ein $\alpha_l \approx 0.35$ aufweisen sollte, also einen etwas größeren Wert als in Abbildung 4.6 zu sehen ist. Es gibt bislang noch keine direkten Messungen der Längenabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit und des Wertes α . In [41] wurde aber aufgrund von Messungen der Wärmeleitfähigkeit eines einzelnen einwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchens mit Durchmesser $D = 1.7 \text{ nm}$ und Länge $L \approx 3 \mu\text{m}$ bei unterschiedlichen Temperaturen eine phänomenologische Formel $\kappa(L, T, \lambda)$ des Temperaturverlaufs der Wärmeleitfähigkeit eines kürzeren Nanoröhrchens mit $L = 0.5 \mu\text{m}$ gemacht (siehe Abbildung 4.3). Es ergeben sich für dieses dem $f = 2$ -Modell mit $N_y = 10$ ähnliche System Werte von $\kappa \approx 2400 \text{ W/mK}$ bei der Temperatur $T = 335.25 \text{ K}$. Die in den Simulationen bei dieser Temperatur $T = (T_+ + T_-)/2 = 335.25 \text{ K}$ bestimmten Werte für die FPU-Carbon-Ebene mit $f = 2$ und die FPU-Carbon-Kette in Abbildung 4.6 erscheinen mit $\kappa \approx 2000 \text{ W/mK}$ in der gleichen Größenordnung.

Der Wert $\alpha \approx 0.227$, der sich durch Fit der Simulationsergebnisse der FPU-Carbon-Kette ergibt, zeigt eine deutliche Ähnlichkeit mit der in einer anderen Studie für große FPU-Ebenen (mit quartischer Anharmonizität) ermittelten Divergenz von $\kappa(L)$ mit der Potenz $\alpha_{2d-FPU} = 0.22$ [30]. Dieser

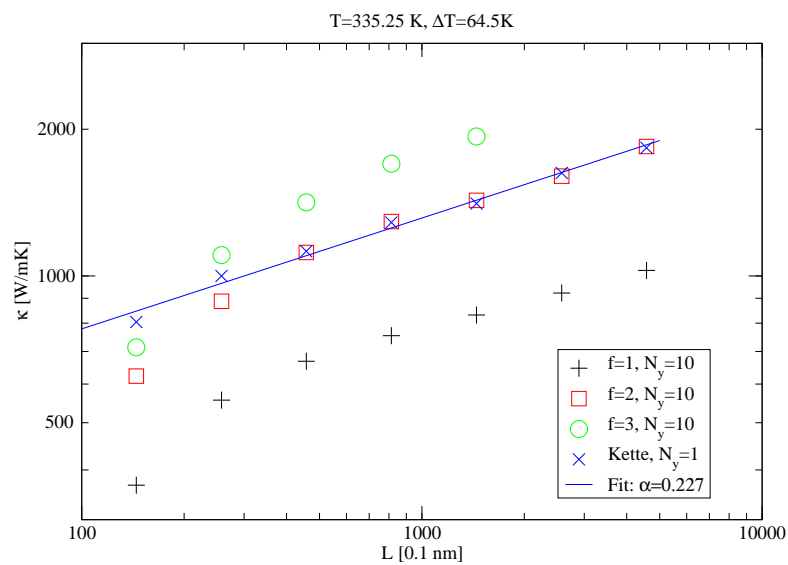


Abbildung 4.6: Thermische Leitfähigkeit κ für die FPU-Carbon-Kette ($N_y = 1$) und die FPU-Carbon-Ebene ($N_y = 10$) mit periodischen Randbedingungen entlang der y -Richtung mit $f = 1, 2$ und 3 (f bezeichnet die Anzahl der Freiheitsgrade der Atome) für verschiedene Systemlängen. Neben der FPU-Carbon-Ebene $f = 2$, bei der sich die Atome innerhalb der Ebene bewegen, sind noch die Ergebnisse der FPU-Carbon-Ebenen mit $f = 1$ (ein Freiheitsgrad in Richtung der Zylinderachse) und $f = 3$ (Bewegung in alle drei Raumrichtungen erlaubt) dargestellt. Für große Systemlängen und technologisch relevante Temperaturen zeigen die FPU-Carbon-Kette und die FPU-Carbon-Ebene einen sehr ähnlichen Verlauf. Die Divergenz der Wärmeleitfähigkeit der FPU-Carbon-Kette mit der Systemlänge, $\kappa \sim L^\alpha = (N_x a)^\alpha$, folgt einem Potenzgesetz mit $\alpha \approx 0.227$.

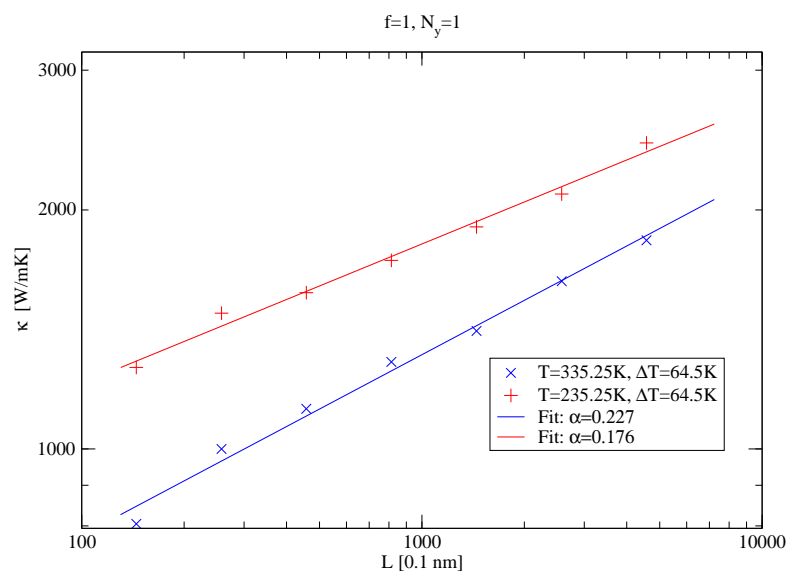


Abbildung 4.7: Thermische Leitfähigkeit κ der FPU-Carbon-Kette ($N_y = 1$) für zwei verschiedene mittlere Systemtemperaturen $T = (T_+ + T_-)/2 = 335.25 \text{ K}$ (blau) und $T = (T_+ + T_-)/2 = 235.25 \text{ K}$ (rot) bei der Temperaturdifferenz der Bäder von $\Delta T = T_+ - T_- = 64.6 \text{ K}$. Für die niedrigere mittlere Systemtemperatur $T = 235.25 \text{ K}$ ergeben sich (erwartungsgemäß) größere Absolutwerte für κ und eine deutlich langsamere Divergenz der Wärmeleitfähigkeit mit der Systemlänge, $\kappa \sim L^\alpha$, mit $\alpha \approx 0.176$.

Wert erscheint für die FPU-Ebenen in [30] immer dann, wenn bei einem festen Längenverhältnis $r = N_x/N_y$ die Ebene genügend groß wird. Der Übergang zu zweidimensionalem Verhalten und $\alpha = \alpha_{2d-FPU}$ findet selbst für sehr schmale Systeme mit z.B. $r = 64$ bei Werten $N_x > 1000$ statt, weshalb spekuliert wurde, dass dieser Wert auch in Nanoröhrchen mit einer Länge von einigen μm zu beobachten sein sollte.

Die in Molekulardynamik-Simulationen bei $T \approx 273 K$ bestimmten Werte für (5,5)-Nanoröhrchen von $\alpha \approx 0.27$ [46] liegen ebenfalls in diesem Größenbereich, sind aber tendenziell zu groß, da nur Systemlängen von einigen Hundert nm untersucht wurden, wo die Phonon-Leitung noch ballistischen Charakter hat. Der in [9] (vom selben Autor wie in [46]) bestimmte Wert von $\alpha = 0.32$, der nahe am theoretischen Wert $\alpha = 1/3$ für eindimensionale Wärmeleitung aus [18] liegt, hatte sich aufgrund einer anderen Thermostat-Realisierung ergeben. In [47] ergibt sich für das (5,5)-Nanoröhrchen hingegen ein Wert von $\alpha \approx 0.4$ bei $300 K$ und $\alpha \approx 0.26$ bei $800 K$. In [47] kann man aufgrund der relativ stark von einem Potenzgesetz abweichenden Messwerte für κ in Abhängigkeit von L bereits vermuten, dass sich die Kohlenstoff-Nanoröhrchen aufgrund ihrer kurzen Längen $L \sim 0.1 \mu m$ noch in einem Bereich befinden, wo ballistische Phonon-Leitung beiträgt.

Generell ergeben sich also in der bestehenden Literatur oftmals sehr unterschiedliche Werte für κ oder α aus Molekulardynamik-Simulationen in Gleichgewichts- oder Nichtgleichgewichtssituationen, die stark von den jeweils gewählten Parametern wie der Systemlänge und -breite, Temperatur oder der Thermostat-Realisierung abhängen.

Nach der qualitativen Übereinstimmung für die Werte κ und die Potenz α der Simulationsergebnisse für die FPU-Carbon-Ebene mit experimentellen [41] und theoretischen [45] Ergebnissen ist besonders interessant, dass sich für die FPU-Carbon-Kette ein Wert für α ergibt, der wesentlich kleiner ist als die bereits erwähnten theoretischen Vorhersagen für die Wärmeleitung in eindimensionalen nicht-integrablen Ketten ($\alpha = 1/3$ und $\alpha = 2/5$). Da sich für das FPU-System mit rein kubischen oder quartischen Anharmonizitäten deutlich größere Werte ergeben, liegt es nahe zu vermuten, dass das Carbon-Wechselwirkungspotenzial diesen Unterschied verursacht. Neben der konkreten Wahl des FPU-Potenzials und der Abhängigkeit der Potenz α von der Systemlänge L sind die Systemtemperatur T und der Temperaturgradient $|\nabla T|$ noch frei wählbare Parameter, die die mikroskopischen Wechselwirkungen und somit die Längenabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit beeinflussen können. Da der Temperaturgradient wegen der vielen Atome in Nanoröhrchen von einigen μm Länge als klein angenommen werden kann, soll im folgenden nur untersucht werden, ob die Potenz α von der Systemtemperatur T abhängt.

In einer weiteren Simulationsreihe für die FPU-Kette in Abbildung 4.7 kann man deutlich sehen, dass eine kleinere Systemtemperatur $T = 235.25 K$ (bei gleicher Temperaturdifferenz ΔT) deutlich andere Werte der Wärmeleitfähigkeit und einen Wert $\alpha \approx 0.176$ liefert. Durch eine andere Systemtemperatur kommt es zu einer veränderten Besetzung des Phonon-Spektrums und zu anderen mittleren freien Weglängen, was die Werte κ und ihre Abhängigkeit von der Systemlänge beeinflusst. Die Divergenz mit der Systemlänge bei $T = 235.25 K$ ist überraschenderweise etwas kleiner als bei $T = 335.25 K$. Eigentlich würde man bei kleineren Temperaturen größere mittlere freie Weglängen und einen Transport mit größerem ballistischen Anteil erwarten. Die absoluten Werte von κ für $T = 235.25 K$ sind aber, wie zu erwarten, deutlich größer als die für $T = 335.5 K$.

Die Ergebnisse der Simulationen widersprechen also der These, dass sich die Divergenz der Wärmeleitfähigkeit in niedrigdimensionalen Systemen mit einem konstanten Wert α beschreiben lässt. In den Simulationen zeigt sich deutlich, dass α von der Systemlänge und der Temperatur abhängt. Für die längsten Systeme mit $N_x = 3160$ (was relativ kurzen Kohlenstoff-Nanoröhrchen entspricht) scheint sich aber, wie theoretisch vorhergesagt, ein konstantes α_l zu ergeben. Andere experimentelle und theoretische Ergebnisse zeigen ebenfalls eine Abhängigkeit vom Durchmesser des Nanoröhrchens [45, 47]. Experimentell zeigt sich eine Wärmeleitung G für Nanoröhrchen, die nur schwach vom Durchmesser D abhängt, was für die Wärmeleitfähigkeit $\kappa = L/S G$ (S : Querschnittsfläche des Nanoröhrchens) einen Abfall $\sim 1/D$ bedeutet [2].

Beim Vergleich mit anderen Arbeiten zur Divergenz der Wärmeleitfähigkeit fallen neben den Übereinstimmungen für die Absolutwerte von κ und α_s (Potenz bei kleinen Längen) einige gravierende Unterschiede auf. Der Wert α_l ist deutlich kleiner als z.B. in [45] vorhergesagt und wird nach wesentlich kürzeren Längen von $\sim 0.1 \mu m$ erreicht als in anderen Arbeiten [43].

Das interessanteste Ergebnis in diesem Abschnitt bezüglich der Wärmeleitung zweidimensionaler FPU-Systeme ist, dass sich für lange FPU-Carbon-Ebenen und FPU-Carbon-Ketten Werte für α ergeben, die denen in [30] für die FPU-Ebene mit quartischer Anharmonizität gleichen. Dabei nähern sich die Werte der Wärmeleitfähigkeit der $f = 2$ -FPU-Carbon-Ebene für große L deutlich an die Werte der FPU-Carbon-Kette an. Ein langes Nanoröhrchen könnte demnach qualitativ gut durch eine FPU-Carbon-Kette beschrieben werden, was bei Simulationen eine große Zeitersparnis bedeutet. Bei [30] ergaben sich für die quartische FPU-Kette und -Ebene noch sehr unterschiedliche Werte von $\alpha_{1d-FPU} \approx 0.37$ und $\alpha_{2d-FPU} \approx 0.22$. Der Wert $\alpha \approx 0.227$ für die FPU-Carbon-Kette weicht deutlich von den Ergebnissen und Vorhersagen für rein quartische (oder kubische) FPU-Ketten ab. Ob dieser Unterschied auf das Carbon-Potenzial oder womöglich unterschiedliche Systemtemperaturen zurückzuführen ist, ist bisher unklar und bedürfte weiterer Studien. Bei den in der Literatur vorhandenen Studien bezüglich der Wärmeleitfähigkeit von FPU-Ketten wurden stets skalierte Temperaturen im Bereich $T \sim 1$ verwendet, die also wesentlich größer als die hier verwendeten (auf A skalierten) Temperaturen von maximal einigen 10^{-5} sind. Da durch eine Zunahme der Systemtemperatur von $T = 235.25 K$ (skaliert: $T = 1.46 \cdot 10^{-5}$) auf $T = 335.25 K$ (skaliert: $T = 2.07 \cdot 10^{-5}$) bereits ein Anstieg von $\alpha \approx 0.176$ auf $\alpha \approx 0.226$ beobachtet wurde, könnte es sein, dass die aus der Literatur bekannten Werte $\alpha \in \{1/3, 2/5\}$ Hochtemperaturgrenzfälle für bestimmte FPU-Potenziale darstellen.

Der Grund, wieso sich in früheren Arbeiten [31, 47] für die Carbon-Kette mit Tersoff-Potenzial kein Temperaturgradient ergab, könnte an zu kurzen Systemlängen liegen, oder an der oftmals standardmäßig getroffenen Wahl $\theta = 1$ für den Nosé-Hoover-Thermostat. Wenn bei den in dieser Arbeit verwendeten Programmen $\theta = 0.1$ durch $\theta = 1$ ersetzt wird, ergibt sich für die FPU-Carbon-Kette im betrachteten Temperaturbereich ebenfalls kein Temperaturgradient.

4.5.3 Ballistische Wärmeleitung in Kohlenstoff-Nanoröhrchen

Im folgenden sollen die Ergebnisse für die Längenabhängigkeit der $f = 2$ -FPU-Carbon-Ebene genauer mit aktuellen theoretischen Ergebnissen verglichen werden [43, 45]. Die Simulationen der FPU-Carbon-Ebenen führen für große L auf einen Übergang zu einer konstanten Potenz α_l für die Divergenz mit der Systemlänge, der aber für wesentlich kürzere Längen $L \approx 0.1 \mu m$ eintritt als in [43] und [45], wo sich für Kohlenstoff-Nanoröhrchen mit ähnlichen Durchmessern zum Erreichen von α_l Längen im μm -Bereich ergeben.

Ein Anfitzen der Ergebnisse für den Bereich $N_x \leq 3160$ führt zum Ergebnis, dass die Divergenz des Exponenten α über einige $0.01 \mu m$ auf den Grenzwert α_l abfällt. In der Grafik 4.8 sind die Ergebnisse für die FPU-Carbon-Ebene mit $f = 2$ dargestellt, wobei die durchgezogene Linie einen Fit der Datenpunkte darstellt, bei der in der Relation $\log_{10}\kappa = \alpha \log_{10}L + \log_{10}\kappa_0$ der Exponent α durch ein Polynom dritter Ordnung $P_3(u)$ in $u = \log_{10}L$ beschrieben wird (L ist dabei in Einheiten von $0.1 nm$ gegeben). Man kann am Verlauf der im Inset dargestellten Größe $\alpha = d\log_{10}\kappa/d\log_{10}L$ den Wert des Exponenten α bei der Länge L ablesen. Der Wert startet bei etwa $\alpha = \alpha_s \approx 0.8$ bei $L \approx 15 nm$ und nimmt für $L > 300 nm$ ein $\alpha = \alpha_l \approx 0.22$ an. Die Tatsache, dass der Wert α ein (schwach ausgeprägtes) Minimum durchläuft, entspricht nicht der Vorhersage in [45] und könnte an Ungenauigkeiten bei der numerischen Bestimmung von κ liegen. Der Wert für $\alpha_s \approx 0.8$ stimmt mit der Vorhersage in [45] gut überein. Der Wert für α_l ist in [45] mit $\alpha \approx 0.35$ deutlich größer als der hier bestimmte. Für eine genauere Bestimmung von α_l wären aber noch wesentlich längere Systeme nötig, was aber momentan am zu großen numerischen Aufwand scheitert.

Der Grund für das Erreichen des asymptotischen Wertes $\alpha_l \approx 0.227$ für kleine Werte L ist, dass klas-

sische Methoden, wie Molekulardynamik-Simulationen und Kinetische-Theorie-Rechnungen, zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit für kleine Nanoröhrchen nicht geeignet sind. In [43] wird auf der Basis eines Landauer-Formalismus gezeigt, dass frühere Ergebnisse aus Molekulardynamik-Simulationen [46] und der kinetischen Theorie [53] für kurze Kohlenstoff-Nanoröhrchen und/oder kleine Temperaturen die (aus der quantenmechanischen Behandlung des Systems abgeleitete) obere Grenze der Wärmeleitfähigkeit für ballistische Wärmeleitung verletzen. Bei der Molekulardynamik-Simulation [46] verletzen alle Nanoröhrchen mit Längen $L < 0.1 \mu\text{m}$ die obere Grenze der ballistischen Wärmeleitung und bei der Kinetischen-Theorie-Rechnung in [53] erscheint das Maximum für die thermische Leitfähigkeit eines (6, 0)-Nanoröhrchens von etwa 30000 W/mK bei 85 K mindestens eine Größenordnung zu hoch. In Abbildung 4.9 sind neben den Simulationsergebnissen für die FPU-Carbon-Kette und die FPU-Carbon-Ebene ($f = 2$) die zugehörigen maximalen Wärmeleitfähigkeiten $\kappa^{max} = L/S G^{max}$ eines Kohlenstoff-Nanoröhrchens mit dem Querschnitt $S = N_y a \delta$ ($N_y = 1$ im Fall der Kette) eingezeichnet. Das Wärmeleitungsquant G^{max} beträgt $\pi^2 k_B^2 T / 3h \approx 9.456 \cdot 10^{-13} \text{ W/K}^2 T$ pro beitragenden Phononenzweig [54]. Da in Abbildung 4.9

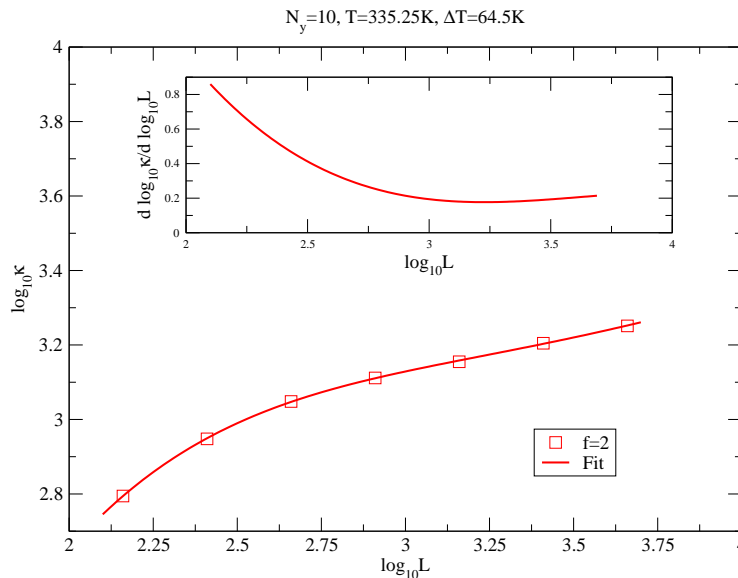


Abbildung 4.8: Die Simulationsergebnisse für $\log_{10}\kappa$ wurden gegen $\log_{10}L$ aufgetragen, wobei L in Einheiten von 0.1 nm angegeben ist. Mit dem Fit an die Datenpunkte wurde der Verlauf $\alpha = d\log_{10}\kappa/d\log_{10}L$ berechnet (Inset), der einen Abfall von α von einem Wert $\alpha_s \approx 0.8$ nach $\alpha_l \approx 0.21$ nach einigen $0.1 \mu\text{m}$ ergibt. Die Ausbildung eines schwachen Minimums bei $\log_{10}L \approx 3.25$ könnte an Fehlern bei der Auswertung der Simulationsdaten oder an Ungenauigkeiten beim Datenfit liegen.

klar zu sehen ist, dass auch im Fall der FPU-Carbon-Systeme (wie in den anderen klassischen Molekulardynamik-Simulationen) Werte mit $L < 0.1 \mu\text{m}$ die obere Grenze der ballistischen thermischen Leitfähigkeit verletzen, ergeben sich für die FPU-Carbon-Kette und die FPU-Carbon-Ebene ungenaue Voraussagen für die Divergenz der Wärmeleitfähigkeit mit der Systemlänge. In den neueren Arbeiten [43–45] zeigte sich, dass der Bereich der ballistischen Wärmeleitung im μm -Bereich liegt. Die Berechnungen hängen aber sehr stark von den gemachten Annahmen (z.B. bezüglich der Abhängigkeit der Streuraten von Temperatur und Phonon-Frequenzen) und den verwendeten technischen Methoden ab. So ergibt sich bei [43] durch Verwendung einer Boltzmann-Peierls-Gleichung bei Raumtemperatur für ein (10, 0)-Nanoröhrchen eine Länge von $2.31 \mu\text{m}$, bis der Exponent α (von

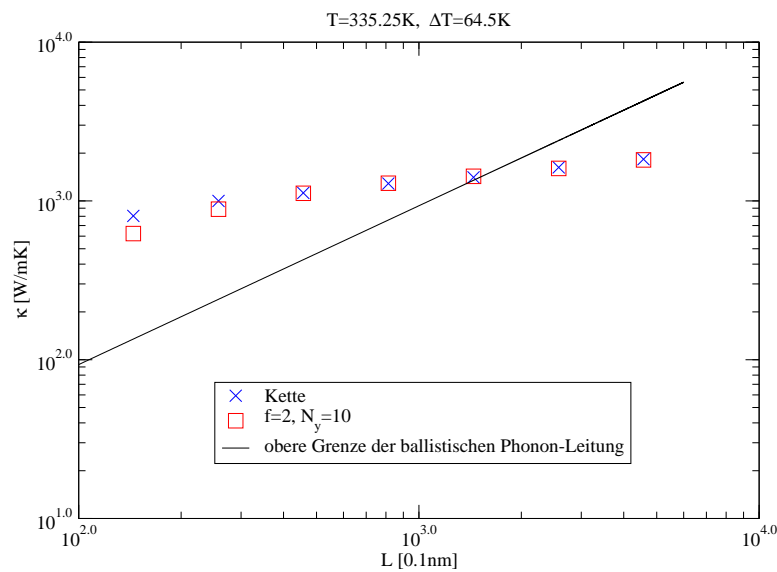


Abbildung 4.9: Die bereits in Abbildung 4.6 dargestellten Werte für die Wärmeleitfähigkeit der FPU-Carbon-Kette und der FPU-Carbon-Ebene mit $f = 2$ und die berechneten Werte κ^{max} , die sich aufgrund des oberen Grenzwertes der ballistischen Wärmeleitfähigkeit durch das Wärmeleitungsquant G^{max} ergeben. Wie schon bei anderen klassischen Molekulardynamik-Simulationen beobachtet, ergibt sich eine Verletzung dieses Quantenlimits für kleine Systemlängen. Bei der FPU-Carbon-Ebene mit $N_y = 10$ und der FPU-Carbon-Kette (ein Phonon-Kanal) ergeben sich Werte $\kappa > \kappa^{max}$ für $L < 0.1 \mu m$. Die Verläufe von κ^{max} stimmen für die FPU-Carbon-Ebene (mit $N_y = 10$) und die FPU-Carbon-Kette überein, weil angenommen wurde, dass bei großen Temperaturen bei der FPU-Carbon-Ebene etwa zehn Phonon-Kanäle zum Wärmetransport beitragen [42].

oben) den Wert $\alpha = 0.5$ erreicht. Bei [45] ergeben sich dagegen bei einem Landauer-Formalismus (mit einer ad-hoc angenommenen Transmissionsfunktion) deutlich kleinere Werte.

Die Frage nach der Richtigkeit des Wertes α_l hängt stark von der in der Rechnung angenommenen Abhängigkeit $1/\lambda \sim \omega^p$ der mittleren freien Weglänge ab. In [45] wird gezeigt, dass die bei hohen Temperaturen dominierende Umklapp-Streuung (üblicherweise $p = 2$) zu einem Wert $\alpha = (p - 1)/p = 0.5$ führen sollte. Die Möglichkeit kleinerer Werte für α_l oder gar die Elimination der Divergenz von κ hängt somit stark vom Vorhandensein von Streumechanismen $1/\lambda \sim \omega$ ab.

4.5.4 Temperaturabhängigkeit

Die Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit von Kohlenstoff-Nanoröhrchen zu berechnen, ist ein relativ kompliziertes Unterfangen. Zum einen müssen die Dispersionsrelationen der Phononenzweige im Nanoröhrchen bekannt sein. Zum anderen gilt es, die vorhandenen Streumechanismen zwischen den verschiedenen Phononen zu berücksichtigen, die stark von den Anharmonizitäten des Materials, der vorliegenden Temperatur und den Phonon-Frequenzen abhängen. Eine exakte Berechnung der temperaturabhängigen Wärmeleitfähigkeit ist praktisch unmöglich. Theoretisch muss man sich meist auf eine kinetische Beschreibung mit empirischen Phononen-Streuratens für Defekt- oder Umklapp-Streuung beschränken [37, 38]. Für Kohlenstoff-Nanoröhrchen werden meist die Phononen-Streuratens für Graphit verwendet. Es ist aber bekannt, dass sich die mikroskopischen Wechselwirkungen in Graphit und in Bündeln von mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchen in einigen Punkten deutlich unterscheiden, wie z.B. bei den schwächeren Wechselwirkungen zwischen coaxialen Nanoröhrchen im Vergleich zu den van der Waals-Wechselwirkungen der Kohlenstoffebenen in Graphit. Ein Beispiel für solche Unstimmigkeiten sind die Resultate in [53] (siehe Abbildung 4.10), wo die Rolle des Drei-Phononen-Umklapp-Prozesses für Zickzack-Nanoröhrchen untersucht wurde. Es erscheinen deutlich zu große Maxima der thermischen Leitfähigkeit von etwa $\kappa = 30000 \text{ W/mK}$ für ein (6,0)-Nanoröhrchen bei $T = 85 \text{ K}$, die das Limit der ballistischen Phonon-Leitung übersteigen. In [43] wird gezeigt, dass ein (6,0)-Nanoröhrchen mit einer Länge von $L = 1 \mu\text{m}$ bei $T \approx 100 \text{ K}$ maximal Werte von $\kappa \approx 3000 \text{ W/mK}$ annimmt.

Auch computergestützte Untersuchungen mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen in Nichtgleichgewichtszuständen [46, 47] oder mikrokanonische Simulationen zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit mit Hilfe der Green-Kubo-Formel aus der Linearen-Antwort-Theorie [3, 57] zeigen Bereiche, wo die maximale Wärmeleitfähigkeit der ballistischen Leitung übertroffen wird. Bei den mikrokanonischen Simulationen, wo entlang der Achse des Röhrchens periodische Randbedingungen vorliegen, ergeben sich in [57] (trotz größerer Einheitszellen als in [3] von einigen tausend Teilchen) Werte $\kappa \approx 12000 \text{ W/mK}$ für ein (10,10)-Nanoröhrchen bei $T \approx 85 \text{ K}$. In [3] haben sich sogar Spitzenwerte von 37000 W/mK für ein (mehrwandiges) (10,10)-Nanoröhrchen ergeben. Bei größeren Temperaturen und Systemlängen, wenn der Phononentransport diffusiven Charakter hat, liefern Molekulardynamik-Simulationen relativ gute Übereinstimmungen mit experimentellen Ergebnissen, die typischerweise für einzelne Kohlenstoff-Nanoröhrchen (mit Länge $L \approx 3 \mu\text{m}$ und Durchmesser $D \approx 2 \text{ nm}$) Werte von $\kappa \approx 3000 \text{ W/mK}$ ergeben. Die Vorhersage bei [3] von $\kappa \approx 6600 \text{ W/mK}$ bei Zimmertemperatur erscheint wiederum um mindestens einen Faktor zwei zu hoch.

Aufgrund der Unstimmigkeiten bei Molekulardynamik-Simulationen für kleine Temperaturen und kurze Systeme und der schwierigen Aufgabe, die sehr komplizierten Phonon-Phonon-Wechselwirkungen in den verschiedenen Längen- und Temperaturbereichen einheitlich zu beschreiben, kommt dem Experiment eine große Bedeutung zu. Wie schon erwähnt, gibt es seit kurzer Zeit Messungen der Wärmeleitfähigkeit einzelner ein- und mehrwandiger Kohlenstoff-Nanoröhrchen [4, 41, 42]. Typischerweise ergibt sich folgendes Bild:

Bei sehr kleinen Temperaturen, im einstelligen Kelvin-Bereich, zeigt sich aufgrund der bal-

listischen Phonon-Leitung gemäß der quantenmechanischen oberen Grenze der Wärmeleitung ein linearer Temperaturverlauf. Bei Temperaturen von ungefähr 30 K (für ein Nanoröhrchen mit $D = 1.4\text{ nm}$) ist dann eine quadratische Abhängigkeit von T zu beobachten, was für ein zweidimensionales akustisches Phononengas zu erwarten ist. Bei mehrwandigen Nanoröhrchen ist (ähnlich wie in Graphit) bis ca. 50 K eine $\sim T^{2.5}$ Proportionalität zu beobachten, was von den Wechselwirkungen der einzelnen Kohlenstoff-Zylinder herrührt. Ab 50 K , wenn die Debye-Temperatur für diese Wechselwirkung überschritten ist, kommt es bis ca. 150 K ebenfalls zu einer quadratischen T -Abhängigkeit. Bei größeren Temperaturen kommt es dann verstärkt zu Drei-Phononen-Umklapp-Prozessen, weshalb nach einem Peak bei typischerweise 320 K ein schneller Abfall beginnt (Abbildungen 4.3 c und 4.2 b).

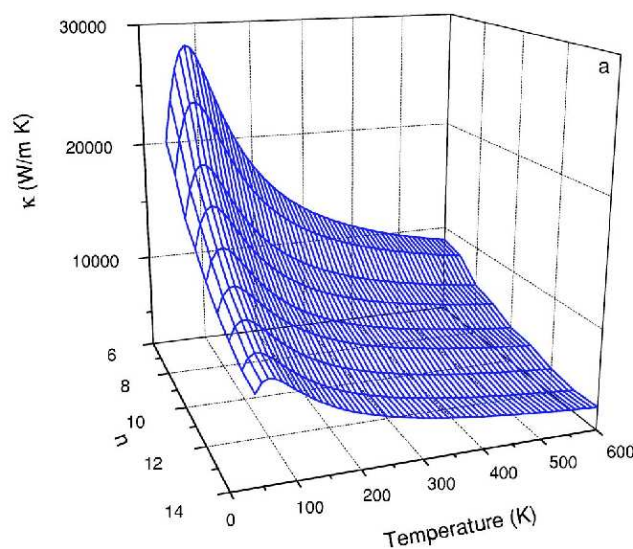


Abbildung 4.10: Ergebnisse einer Kinetischen-Theorie-Rechnung [53] für die Wärmeleitfähigkeit von $(n, 0)$ -Nanoröhrchen im Bereich großer Temperaturen, bei denen Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse dominieren. Die Phonon-Dispersionsrelationen wurden mit einem Kraft-Konstanten-Modell [55] berechnet, woraus sich die Phononen-Streuratzen für Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse als Resultat einer Ersten-Ordnung-Störungsrechnung [56] ergaben. In [43] wurde gezeigt, dass das ausgeprägte Maximum bei $T \approx 85\text{ K}$ den oberen Grenzwert der ballistischen Phonon-Leitung verletzt. (Abbildung aus [53])

Für ein mehrwandiges Nanoröhrchen mit $L \approx 2.5\ \mu\text{m}$ und $D \approx 1.4\text{ nm}$ ergibt sich ein Maximalwert von etwas mehr als 3200 W/mK [4] (siehe Abbildung 4.2). Bei einem vergleichbaren einwandigen Nanoröhrchen mit $L \approx 2.6\ \mu\text{m}$ und $D = 1.7\text{ nm}$ ergibt sich ein Wert von etwa 3500 W/mK [41]. In [41] wurden auch erstmals Werte für κ bei höheren Temperaturen bis etwa 800 K gemessen, nahe der Temperatur für die Oxidation der Kohlenstoff-Nanoröhrchen von $T \approx 900\text{ K}$. Durch einen Landauer-Büttiker-Ansatz für den elektrischen Widerstand des Kohlenstoff-Nanoröhrchens zwischen zwei Pt-Elektroden (siehe Abbildung 4.3 a) wurde durch ein iteratives Verfahren mit wiederholtem Lösen der Wärmeleitungsgleichung für das Abfließen der durch den Strom entstandenen Jouleschen Wärme (entlang des Nanoröhrchens) die Wärmeleitfähigkeit κ bestimmt, mit der sich die gemessene (V, I) -Charakteristik ergibt. Durch diese iterative Prozedur für (I, V) -Messungen bei verschiedenen Umgebungstemperaturen T_o (siehe Abbildung 4.3 b) konnte festgestellt werden, dass die Wärmeleitfähigkeit κ bis zu Temperaturen von etwa 500 K einen Abfall $\sim 1/T$ zeigt, der

für höhere Temperaturen durch Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse zweiter Ordnung (mit einem Anteil $\sim 1/T^2$) noch verstärkt wurde.

Da das Maximum der Wärmeleitung bei der Messung der thermischen Leitfähigkeit in den Kohlenstoff-Nanoröhrchen dann eintritt, wenn Defektstreuung und Umklapp-Streuung etwa gleich stark sind und $\lambda_b \sim \lambda_u$ gilt, wurde in [4] vom Maximalwert $\kappa \approx 3200 \text{ W/mK}$ und der Kenntnis der spezifischen Wärme und der mittleren Schallgeschwindigkeit auf eine mittlere freie Weglänge $\lambda_b \sim \lambda_u \sim 0.5 \text{ }\mu\text{m}$ geschlossen. Dieser Wert stimmt auch in etwa mit der Boltzmann-Transportgleichung-Rechnung aus [43] überein.

Computergestützte Vorhersagen ergeben ähnliche Werte bei Zimmertemperatur wie die experimentellen Messungen, zeigen aber alle im Gegensatz zum Experiment ein Maximum der Wärmeleitfähigkeit bei Temperaturen $T \approx 100 \text{ K}$ [3, 53, 57], ähnlich wie es bei Diamant oder Graphit der Fall ist [37]. Die Tatsache, dass Messungen der Wärmeleitfähigkeit von Matten aus ein- oder mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchen einen ähnlichen Temperaturverlauf wie die Messungen für einzelne Nanoröhrchen zeigen (bei um Größenordnungen kleineren Werten κ), weist darauf hin, dass bei der Messung der thermische Widerstand an den Kontaktstellen und die damit verbundene Phononenstreuung das Maximum der intrinsischen Wärmeleitfähigkeit zu größeren Temperaturen $T \approx 320 \text{ K}$ verschiebt. Es ist bekannt, dass sich die thermischen Eigenschaften von Nanomaterialien sehr von denen ihrer dreidimensionalen kristallinen Modifikationen unterscheiden können. Dünne Diamantfilme, die oftmals beim thermischen Management in der Optoelektronik Anwendung finden, zeigen ebenfalls kein Maximum von κ bei $T \approx 100 \text{ K}$ wie beim Diamant-Kristall. Durch die Streuung an den Rändern der polykristallinen Bereiche tritt stattdessen (wie im Fall der Kohlenstoff-Nanoröhrchen) ein stetiger Anstieg von κ bis zu Temperaturen von $T \approx 300 \text{ K}$ ein [37]. Im Fall der Messung von κ einzelner Nanoröhrchen ist der Effekt des thermischen Widerstands des Kontakts zwischen dem Kohlenstoffzylinder und der Metallelektrode in der Messung enthalten. Es ist bekannt, dass Kontakte zwischen Modifikationen des Kohlenstoffs und Metallen sehr hohe thermische Widerstände aufweisen [38]. Die Messungen in [42] und die Rechnungen in [43] weisen auch auf den Einfluss der temperaturunabhängigen Kontakt-Streuung hin, denn es zeigt sich, dass bis zu Temperaturen von $T < 300 \text{ K}$ die Werte für κ einzelner Kohlenstoff-Nanoröhrchen bis auf einen Faktor von etwa 0.4 den theoretischen Werten für die ballistische Phonon-Leitung entsprechen.

Ein Vergleich mit der Temperaturabhängigkeit eines FPU-Systems ist schwierig, da bei den Studien von FPU-Systemen stets skalierte Temperaturen von der Größenordnung $T \sim 1$ betrachtet wurden [7]. Die skalierten Temperaturen hier sind lediglich von der Größenordnung 10^{-5} (entspricht etwa 166 K). Ein Ausnahme bildet [50], wo für die FPU-Kette mit quartischer Anharmonizität das Temperaturverhalten für Temperaturen im Bereich $\{10^{-3}, 10^4\}$ untersucht wurde. Im Bereich kleiner Temperaturen $0.001 < T < 0.1$ wurde eine $1/T$ -Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit beobachtet, die auch bei Kohlenstoff-Nanoröhrchen auftritt, hier aber als der Bereich großer Temperaturen gilt, wo Umklapp-Streuung dominiert. Die Ergebnisse für die quartische FPU-Kette lassen sich kompakt folgendermaßen zusammenfassen:

$$\kappa = \begin{cases} 1.2L^\alpha T^{-1} & T \leq 0.1 \quad (\alpha \approx 0.37) \\ 2.0L^\alpha T^{1/4} & T \geq 50 \quad (\alpha \approx 0.37) \end{cases} \quad (4.51)$$

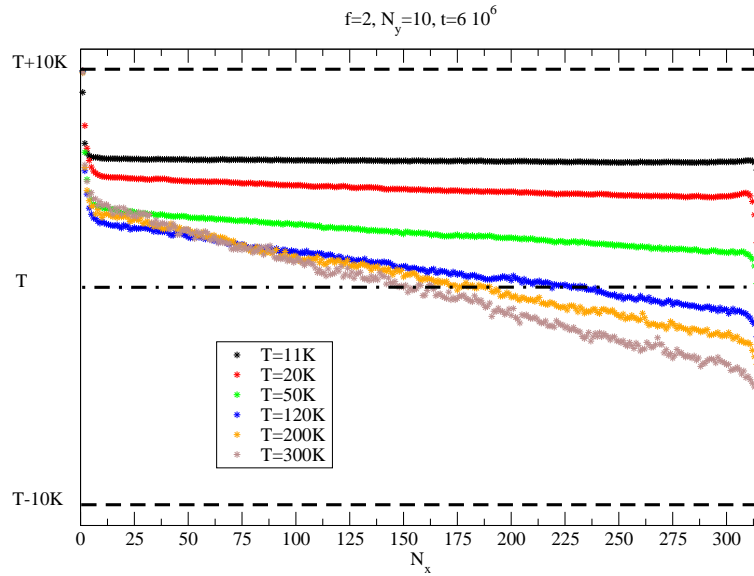
Untersuchungen im Bereich skaliertener Temperaturen von $T \sim 1$ sind auch technologisch nicht von großem Interesse, da bei Temperaturen von $T \approx 870 \text{ K}$ bereits die Oxidation der Kohlenstoff-Nanoröhrchen einsetzt.

4.5.5 Simulationsergebnisse: Temperaturabhängigkeit

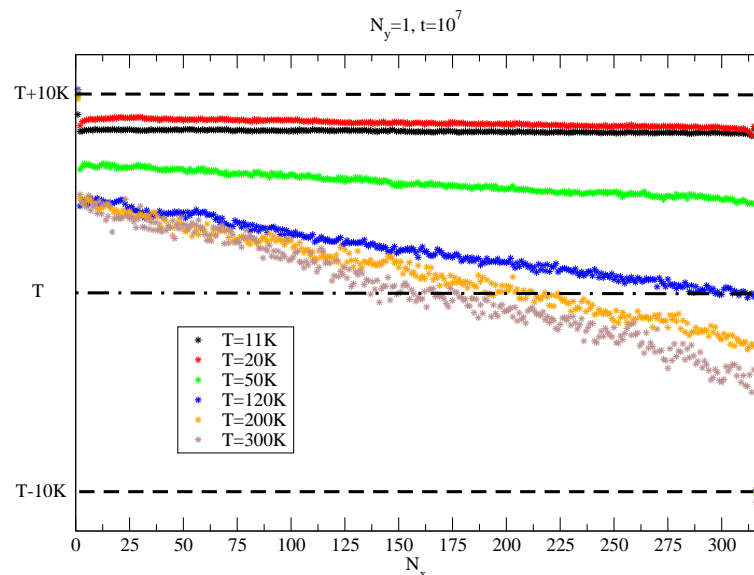
Bei der Messung der Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit wurden FPU-Carbon-Ebenen (mit $N_y = 10$) mit einer festen Länge von $L = 316 a$ verwendet. Die beiden Bäder wurden jeweils auf die Temperaturen $T_+ = T + 10 K$ und $T_- = T - 10 K$ gebracht. Wie in Abbildung 4.11 zu sehen ist, ergeben sich für kleine Temperaturen wie $T = 11 K$ und $T = 20 K$ sehr kleine kaum erkennbare Temperaturgradienten und das System verhält sich quasi-harmonisch. Für Temperaturen bis zu $T \approx 300 K$ wächst der mittlere Temperaturgradient stetig an und die Temperatursprünge an den Rändern werden kleiner und symmetrischer. Für längere Systeme mit größeren N_x verschwinden die Temperatursprünge an den Enden der FPU-Carbon-Ebene und -Kette, wie in den Abbildungen 4.5 bereits gesehen. Für die FPU-Carbon-Ebene (siehe Abbildung 4.11 a) ergeben sich nach kürzeren Zeiten bereits glattere Temperaturprofile als für die zum Vergleich gezeigten Temperaturverläufe der FPU-Carbon-Kette (siehe Abbildung 4.11 b). Eine Analyse der Kurtosis für beide Fälle zeigt deutlich, dass es bei kleinen Temperaturen wie $T = 11 K$ und $T = 20 K$ zu sehr starken Verletzungen des lokalen thermischen Gleichgewichts kommt (siehe Abbildung 4.12). Für die FPU-Carbon-Kette sind diese Abweichungen selbst nach langen Zeiten von $t \approx 5 \cdot 10^7$ noch wesentlich größer als für die FPU-Carbon-Ebene bei $t \approx 2 \cdot 10^7$. Wie auch schon beim Vergleich mit dem Grenzfall der ballistischen Leitung gesehen, bestätigt sich die Tendenz, dass in Systemen mit kurzen Längen, kleiner Dimension und bei kleiner Temperatur, wenn Quanteneffekte dominieren, Molekulardynamik-Simulationen zu falschen Ergebnissen führen. Zum Beispiel zeigt sich bei der Kurtosis der FPU-Carbon-Kette bei $T = 11 K$ in Abbildung 4.12 (b) neben den sehr großen Abweichungen vom Wert Null an den Rändern auch im Zentrum der Kette ein relativ großer nicht-verschwindender Wert. Die im folgenden bestimmten Werte für die Wärmeleitfähigkeit bei kleinen Temperaturen sind dadurch eher nur als grobe Abschätzungen zu sehen. Im Gegensatz zu den Messungen vorher wird jetzt nicht die Wärmeleitfähigkeit κ (durch Bestimmung von $|\nabla T|$ durch Fit des Temperaturprofils im Kettencentrum), sondern die effektive Wärmeleitfähigkeit $\kappa_{eff} = j_x L / \Delta T$ bestimmt. Dieser Ansatz entspricht der experimentellen Realität, wo man ebenfalls nur die Temperaturunterschiede zwischen den Enden der Nanoröhrchen kennt. Der Wert für κ ist für kleine Temperaturen sehr viel größer als κ_{eff} , da das System quasi-harmonisch ist und der Fit des Temperaturgradienten sehr kleine Werte nahe Null ergibt.

Für die FPU-Carbon-Ebene mit $N_x = 316$ und $N_y = 10$ ergibt sich für verschiedene Temperaturen der in Abbildung 4.13 gezeigte Verlauf. Die maximalen Werte von κ_{eff} liegen ähnlich wie bei Diamant oder Graphit im Bereich $T \approx 100 K$, was zwar den Ergebnissen anderer Molekulardynamik-Simulationen entspricht, aber nicht den experimentellen Resultaten. Abgesehen vom thermischen Widerstand an den Rändern, der im Prinzip durch die Wahl größerer L vermieden werden kann, erleiden die Phononen in den Simulationen keine Randstreuung. Bei den experimentellen Messungen ergeben sich je nach vorliegender Probe spezielle Randbedingungen, die zu bestimmten Werten λ_b führen und die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit stark beeinflussen können.

Die Datenpunkte wurden durch drei verschiedene Funktionen gefittet. Das beste Ergebnis erhält man mit der Fit-Funktion $\kappa_1 = 1/(a_1 T^{-2} + b_1 T^{m_1})$. Diese Form spiegelt wider, dass es sich bei dem System um ein zweidimensionales akustisches Phononengas handelt (deswegen der Term $\kappa_1 \sim a_1 T^2$) und dass die Umklapp-Streuung mit $\kappa_1 \sim b_1 T^{-m_1}$, $m_1 \approx 0.201$ wesentlich schwächer abfällt als für dreidimensionale Kristallgitter ($\kappa_{3d} \sim 1/T$). Die beiden anderen Fit-Funktionen κ_2 und insbesondere κ_3 liefern eine weniger gute Übereinstimmung. Bei κ_2 scheint der Term $\kappa_2 \sim a_2 T$, der für eindimensionale Systeme gültig wäre, zu Abweichungen zu führen, da ansonsten der Teil für die Umklapp-Streuung dem von κ_1 entspricht. Die noch stärkeren Abweichungen für die Form κ_3 , bei der die charakteristische Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit aus der Peierls-Theorie $\kappa_3 \sim 1/T$ angenommen wurde und dafür die Abhängigkeit $\kappa_3 \sim a_3 T^{m_3}$ allgemein gewählt wurde, belegt, dass der Mechanismus der Phononen-Umklapp-Streuung wesentlich schwächer ausgeprägt ist als in dreidimensionalen Kristallen.



(a)



(b)

Abbildung 4.11: Verlauf der Systemtemperatur (4.48) für eine FPU-Carbon-Ebene mit $f = 2$, $N_y = 10$, $N_x = 316$ (a) und eine FPU-Carbon-Kette mit $f = 1$, $N_y = 1$, $N_x = 316$ (b) für verschiedene mittlere Systemtemperaturen T . An ihren Enden liegen die Systeme an einem heißen ($T_+ = T + 10 \text{ K}$) und einem kalten ($T_- = T - 10 \text{ K}$) Wärmereservoir. Für große Temperaturen $T \approx 300 \text{ K}$ stellen sich die größten Temperaturgradienten im System und die kleinsten Temperatursprünge an den Rändern ein. Bei kleinen Temperaturen verhält sich das System quasi-harmonisch und es kommt zu ballistischer Phonon-Leitung. Die Temperatursprünge in der FPU-Carbon-Ebene und -Kette kommen zustande, weil durch die kurze Systemlänge $L = 316 a$ sehr langwellige Phonon-Moden nicht zur Ausbildung des thermischen Gleichgewichtes beitragen können. Im Fall der FPU-Carbon-Kette sind wegen der Eindimensionalität Phonon-Phonon-Wechselwirkungen erschwert und es kommt erst nach wesentlich längeren Zeiten zur Ausbildung eines stationären Nichtgleichgewichtszustands mit einem glatten Temperaturverlauf und symmetrischen Temperatursprüngen an den Rändern.

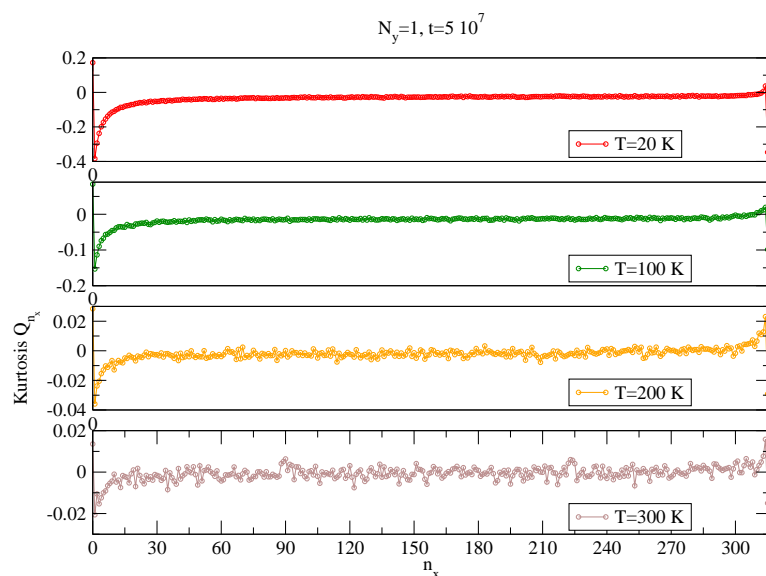
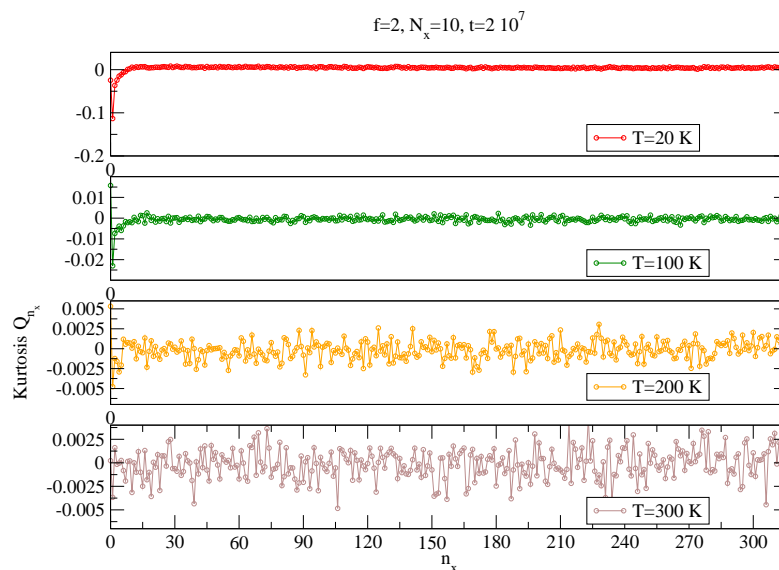


Abbildung 4.12: Kurtosis Q_i für die in Abbildung 4.11 beschriebene FPU-Carbon-Ebene (a) und -Kette (b) für vier Temperaturen. Für kleine Temperaturen wie $T \leq 20 \text{ K}$ kommt es im Zentrum der Kette und insbesondere an den Rändern zu starken Abweichungen vom Wert $Q_i = 0$, was starke Verletzungen des lokalen thermischen Gleichgewichts anzeigt. Für größere Temperaturen $T > 200 \text{ K}$ sind die Abweichungen klein. Generell führen höhere Systemtemperaturen und hohe Dimensionalität der Systeme zu stärkeren Phonon-Phonon-Wechselwirkungen und damit zu einer schnelleren Ausbildung des lokalen thermischen Gleichgewichts.

Ob die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit auch für längere Systeme diese Form

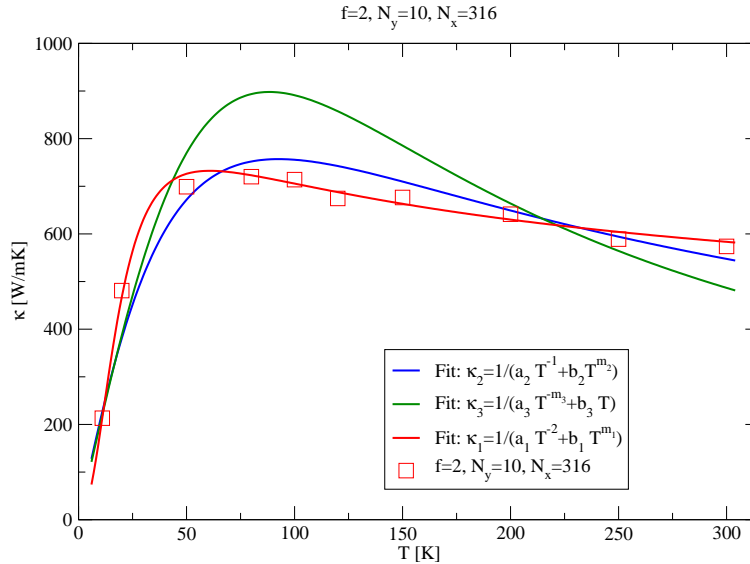


Abbildung 4.13: In den Simulationen bestimmte thermische Leitfähigkeit der FPU-Carbon-Ebene mit $f = 2$, $N_y = 10$, $N_x = 316$ für verschiedene Temperaturen (Quadrate) und drei verschiedene Datenfits. Die besten Ergebnisse erzielt die Fit-Funktion $\kappa_1 = 1/(a_1 T^{-2} + b_1 T^{m_1})$, die von einer quadratischen Abhängigkeit $\kappa \sim T^2$ für kleine Temperaturen ausgeht (gemäß der Vorstellung eines zweidimensionalen akustischen Phononengases) und von einer Abnahme $\kappa \sim T^{-m_1}$ mit $m_1 \approx 0.2$ durch Phononen-Umklapp-Prozesse.

($m_1 = 0.201$, $m_2 = 0.602$, $m_3 = 1$, $a_1 = 5.45 \cdot 10^{-4}$, $a_2 = 5.39 \cdot 10^{-5}$, $a_3 = 6.30 \cdot 10^{-6}$, $b_1 = 0.459$, $b_2 = 0.046$, $b_3 = 0.049$)

zeigt, müsste durch weitere Simulationen untersucht werden. Für schnelle Abschätzungen von Längeneffekten haben sich Ausdrücke wie (4.21) bewährt, die die Temperaturabhängigkeit unverändert lassen und lediglich die Systemlänge und die mittlere freie Weglänge durch eine einfache Matthiessen-Abschätzung in Betracht ziehen. Da aber die Systemlänge $L = 316 a \approx 0.045 \mu\text{m}$ in den betrachteten Fällen wesentlich kleiner ist als realistische Abschätzungen der mittleren freien Weglänge, wird an dieser Stelle auf eine Einbeziehung der Systemlänge L verzichtet. In Zukunft wäre eine Messung der Wärmeleitfähigkeit für wesentlich längere Systeme und höhere Temperaturen nützlich, um für die Kohlenstoff-Nanoröhrchen in der Fermi-Pasta-Ulam-Approximation eine phänomenologische Formel ähnlich (4.21) festzulegen. Insbesondere wäre interessant zu klären, ob sich bei genügend großen Temperaturen ein Abfall $\kappa \sim 1/T$ (bzw. $\kappa \sim 1/T^2$) durch Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse zeigt, wie er in [41] für ein einzelnes einwandiges Kohlenstoff-Nanoröhrchen bei $T > 400 \text{ K}$ gemessen wurde (siehe Abbildung 4.3 b).

4.6 Zusammenfassung und Ausblick

Aktuelle Experimente und Rechnungen deuten darauf hin, dass die in vielen niedrigdimensionalen Systemen beobachtete Divergenz der thermischen Leitfähigkeit $\kappa \sim L^\alpha$ auch auf Kohlenstoff-Nanoröhrchen zutrifft, aber nicht durch einen konstanten Wert wie z.B. $\alpha \in \{1/3, 2/5\}$ beschrieben werden kann, den man aus der analytischen und numerischen Behandlung von FPU-Systemen kennt. In Kohlenstoff-Nanoröhrchen kommt es über Längen von einigen μm zu ballistischer Phonon-Leitung, weil Drei-Phononen-Umklapp-Prozesse erst ab Temperaturen $T > 300\text{ K}$ zu vergleichbar kleinen mittleren freien Weglängen führen [41–43]. In Molekulardynamik-Simulationen ergaben sich in der Vergangenheit stark unterschiedliche Werte für die Wärmeleitfähigkeit und ihre Längendivergenz α [3, 9, 46, 47]. Das Resultat $\alpha \approx 0.32$ aus [9] für (5, 5)-Kohlenstoff-Nanoröhrchen mit kleinen Längen $L \leq 0.1\ \mu\text{m}$ kam dem theoretischen Wert $\alpha = 1/3$ aus [18] sehr nahe. Es stellte sich aber heraus, dass die in Molekulardynamik-Simulationen bestimmten Werte von κ für kleine Systemlängen den oberen Grenzwert κ^{max} der ballistischen Phonon-Leitung überschreiten [43]. Für die hier betrachteten FPU-Systeme wurde gezeigt, dass sich für Längen von $L < 0.1\ \mu\text{m}$ ebenfalls Werte $\kappa > \kappa^{max}$ ergeben.

Für große FPU-Carbon-Ebenen und -Ketten ergibt sich für größere Längen $L > 0.1\ \mu\text{m}$ ein ähnlicher Verlauf der Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit von der Systemlänge mit einer Divergenz $\alpha \approx 0.227$. Dieser Wert liegt relativ nahe an den in [30] beobachteten Wert $\alpha_{2d-FPU} = 0.22$ für große FPU-Ebenen mit quartischer Anharmonizität. Innerhalb welchem Parameterbereich diese Übereinstimmung gültig ist, müsste durch weitere Simulationen für größere FPU-Carbon-Ebenen bei verschiedenen Temperaturen untersucht werden. Für die FPU-Carbon-Kette konnte allerdings gezeigt werden, dass der Wert α von der Systemtemperatur T abhängt.

Für die Temperaturabhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit ergeben sich ebenfalls große Unterschiede in experimentellen, theoretischen und rechnergestützten Studien. Experimentelle Messungen an einzelnen einwandigen und mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhrchen zeigen ein Maximum bei Temperaturen von $T \approx 320\text{ K}$, wohingegen Molekulardynamik-Simulationen, Kinetische-Theorie-Rechnungen und das hier eingeführte FPU-Carbon-Modell Maximalwerte bei $T \approx 100\text{ K}$ zeigen [3, 53, 57]. In den experimentellen Messungen von einzelnen Nanoröhrchen (mit $L \approx 3\ \mu\text{m}$) beginnt die Umklapp-Streuung erst ab Temperaturen $T > 320\text{ K}$ beizutragen. Für kleinere Temperaturen dominiert Kontaktstreuung und die Temperaturabhängigkeit entspricht dem Ergebnis der ballistischen Phonon-Leitung, was bei Raumtemperatur auf mittlere freie Weglängen im μm -Bereich schließen lässt. Bei den Simulationen der FPU-Carbon-Ebene ergeben sich bei Temperaturen von $T \approx 300\text{ K}$ ebenfalls relativ schwache Beiträge durch Umklapp-Prozesse, die sich gut durch die Abhängigkeit $\kappa \sim T^{-0.2}$ beschreiben lassen. Es wäre interessant zu studieren, ob sich bei höheren Temperaturen die Abhängigkeit $\kappa \sim 1/T$ ergibt, die sich experimentell für einwandige Nanoröhrchen [41] gezeigt hat.

Neben den intrinsischen Wärmeleiteigenschaften von Kohlenstoff-Nanoröhrchen, der Abhängigkeit der thermischen Leitfähigkeit von der Länge L , der Temperatur T oder dem Durchmesser D , des Wertes der mittleren freien Weglänge und dem Beitrag durch ballistische Phonon-Leitung, stehen bei den Anwendungen in der Nanoelektronik als thermische Schichtmaterialien technische Aspekte im Vordergrund [59].

Es gibt bereits hoffnungsvolle Ansätze mit neuartigen Verbundwerkstoffen aus Feldern von Kohlenstoff-Nanoröhrchen, die auf Siliziumwafer aufgebracht wurden und deutlich bessere Wärmeleiteigenschaften besitzen als die gegenwärtig verwendeten Wärmeleitpasten [5]. Bei Zugaben von Kohlenstoff-Nanoröhrchen zu Materialien wie Polymeren oder organischen Fluiden zum Design elektrischer und thermischer Materialeigenschaften kann man feststellen, dass der thermische Kontaktwiderstand zwischen den Nanoröhrchen und dem Medium die Steigerung der thermischen Leitfähigkeit sehr stark beeinflusst. Um hohe thermische Leitfähigkeit zu erzielen, ist es beispiels-

weise wegen den auftretenden thermischen Kontaktstellen sehr viel effektiver, Nanoröhrchen mit großen Durchmessern (zur Verringerung des Oberflächen-Volumen-Verhältnisses) und kleineren intrinsischen Wärmeleitfähigkeiten heranzuziehen, als sehr schmale Nanoröhrchen mit hohen Wärmeleitfähigkeiten [58].

Um aber Wärmeleitfähigkeiten zu erhalten, die die Werte von einzelnen Kohlenstoff-Nanoröhrchen erreichen, sind neue Technologien zur Reduzierung von thermischen Kontaktwiderständen zwischen Kohlenstoff-Nanoröhrchen und den Halbleitermaterialien nötig. In einer Studie wurden Felder aus orientierten Kohlenstoff-Nanoröhrchen benutzt, die vertikal auf die Halbleiteroberflächen aufgebracht wurden. Dieser Ansatz nutzt gleichermaßen die Vorteile der hohen thermischen Leitfähigkeit entlang der Zylinderachse der Nanoröhrchen und ihre mechanische Stabilität in der orthogonalen Richtung aus [60].

Vor kurzem haben Forscher in Berkeley Experimente durchgeführt, die auf die Existenz von solitären Anregungen in den Gitterschwingungen von Kohlenstoff-Nanoröhrchen hinweisen [61]. In asymmetrisch mit einer Platinlegierung bedampften Kohlenstoff- und Bornitrid-Nanoröhrchen zeigte sich, dass die thermische Leitfähigkeit in der Richtung vom dicken zum dünnen Ende des Nanoröhrchens um sieben Prozent höher ist, als in der entgegengesetzten Richtung. Ausgehend von theoretischen Ergebnissen in eindimensionalen nichtlinearen Systemen, wo gezeigt wurde, dass Solitonen beim Eindringen in Bereiche wachsender Massendichte stärker zurückgeworfen werden als im umgekehrten Fall, konnte die Gruppe um A. Zettl [61] tatsächlich abschätzen, dass die resultierende Asymmetrie der Wärmeleitfähigkeit für die Nanoröhrchen im beobachteten Bereich liegen sollte.

Im Licht dieser verbleibenden anspruchsvollen Aufgaben werden computergestützte Analysen sicherlich unverzichtbar sein, um den Entwicklungen in der Nanotechnologie mögliche Pfade aufzuzeigen und um Ressourcen in der kostenintensiven experimentellen Forschung zu sparen. Da es sich herausgestellt hat, dass die Methoden der Molekulardynamik gute Resultate für große Systeme und hohe Temperaturen liefern, könnten unkomplizierte und leicht implementierbare Fermi-Pasta-Ulam-Modelle gute Beiträge liefern. Besonders bei Nanoröhrchen mit sehr vielen Atomen oder bei Feldern von Nanoröhrchen hat man es mit aufwendigen numerischen Simulationen zu tun, die durch eine möglichst einfache Modellierung wesentlich effektiver behandelt werden können. Fermi-Pasta-Ulam-Systeme eignen sich zum Beispiel sehr gut zur Implementierung und Programmierung von Codes für Parallelrechner und Rechencluster.

Dass Fermi-Pasta-Ulam-Systeme und die darin existierenden solitären Anregungen bei der Modellierung neuartiger nanoelektronischer Bauelemente eine wichtige Rolle spielen könnten, zeigt einmal mehr die Vielseitigkeit des vor mehr als 50 Jahren konzipierten FPU-Modells.

Literaturverzeichnis: Kapitel 4

- [1] G. Chen, D. Borca-Tasciuc and R.G. Yang, in *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, edited by H.S. Nalwa, (American Scientific Publishers, Stevenson Ranch, CA, 2004), Vol. **7**, N68
- [2] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P.C. Eklund, *Carbon Nanotubes*, Academic Press, San Diego (1996)
- [3] S. Berber, Y.-K. Kwon, and D. Tománek, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4613 (2000)
- [4] P. Kim, L. Shi, A. Majumar, and P.L. McEuen, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 215502 (2001)
- [5] J. Xu and T.S. Fisher, *Heat and Mass Transfer* **49**, 1658 (2006)
- [6] M.J. Biercuk, M.C. Llaguno, M. Radosavljevic, J. K. Hyun, A.T. Johnson, and J.E. Fischer, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 2767 (2002)
- [7] S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, *Phys. Rep.* **377**, 1
- [8] R. Livi and S. Lepri, *Nature* **421**, 327 (2003)
- [9] S. Maruyama, *Physica B* **323**, 193 (2002)
- [10] J. Tersoff, *Phys. Rev. B* **39** 5566 (1989)
- [11] S. Brusch, *The kind of motion we call heat*, North Holland (1976)
- [12] R. Esposito, J.L. Lebowitz, and R. Marra, *J. Stat. Phys.* **90**, 1129, (1998)
- [13] R. Peierls, *Ann. d. Phys.* **3**, 1055 (1929)
- [14] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Reinehart and Winston (1976)
- [15] F. Bonetto, J.L. Lebowitz, and L. Rey-Bellet, *Fourier's Law: a Challenge for Theorists*, *Mathematical Physics 2000*, Edited by A. Fokas, A. Grigoryan, T. Kibble and B. Zegarlinsky, Imperial College Press, 128-151 (2000), arXiv:math-ph/0002052
- [16] T. Prozen and D.K. Campbell, *Chaos* **15**, 015117 (2005)
- [17] Z. Rieder, J.L. Lebowitz, and E. Lieb, *J. Math. Phys.* **8**, 1073 (1967)
- [18] O. Narayan and S. Ramaswamy, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 200601 (2002)
- [19] T. Mai and O. Narayan, *Phys. Rev. E* **73**, 061202 (2006)

-
- [20] A. Pereverzev, Phys. Rev. E **68**, 056124 (2003)
- [21] L. Delfini, S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. E **73**, 060201(R) (2006)
- [22] J.-S. Wang and B. Li, Phys. Rev. E **70**, 021204 (2004)
- [23] M. Terrano, M. Peyrard, and G. Casati, Phys. Rev. Lett. **88**, 094302 (2002)
- [24] B. Li, L. Wang, and G. Casati, Phys. Rev. Lett. **93**, 184301 (2004)
- [25] B. Li, J. Wang, and G. Casati, cond-mat/0410172
- [26] D.N. Payton, M. Rich, and W.M. Visscher, Phys. Rev. **160**, 706 (1967)
- [27] R.D. Mountain and R.A. MacDonald, Phys. Rev. B **28** 3022 (1983)
- [28] E.A. Jackson and A.D. Mistriotis, J. Phys. Condens. Matter **1**,1223 (1989)
- [29] A. Lippi and R. Livi, J. Stat. Phys. **100**, 1147 (2000)
- [30] P. Grassberger and L. Yang, arXiv:cond-mat/0204247 (2002)
- [31] B. Li, J. Wang, L. Wang, and G. Zhang, Chaos **15**, 015121 (2005)
- [32] R. Metzler and J. Klafter, Phys. Rep. **339**, 1 (2000)
- [33] R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II: Nonequilibrium statistical mechanics*, Springer, Heidelberg (1991)
- [34] Y. Pomeau and R. Resibois, Phys. Rep. **19** (1975) 63
- [35] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991)
- [36] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brian, R.F. Curl, and R.E. Smalley, Nature **318**, 162 (1985)
- [37] *Thermal conductivity theory, properties, and applications*, edited by Terry M. Tritt, Springer (2004)
- [38] D.G. Cahill, W.K. Ford, K.E. Goodson, G.D. Mahan, A. Majumdar, H.J. Maris, R. Merlin, and S.R. Phillpot, Applied Physics Reviews, J. Appl. Phys. **93**, 793 (2003)
- [39] J. Hone, M. Whitney, C. Piskoti, and A. Zettl, Phys. Rev. B **59**, R2514 (1999)
- [40] J. Hone, M.C. Llaguno, N.M. Nemes, A.T. Johnson, J.E. Fischer, D.A. Walters, M.J. Casavant, J. Schmidt, and R.E. Smalley, Appl. Phys. Lett. **77**, 666 (2000).
- [41] E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson, and H. Dai, Nano Letters **6**, 96 (2006)
- [42] C. Yu, L. Shi, and Z. Yao, et al., Nano Letters **5**, 1842 (2005)
- [43] N. Mingo and D.A. Broido, Phys. Rev. Lett. **95**, 096105 (2005)
- [44] H.-Y. Chiu, V.V. Deshpande, H.W.Ch. Postma, C.N. Lau, C. Mikó, L. Forró, and M. Bockrath, Phys. Lett. Lett. **95**, 226101 (2005)
- [45] J. Wang and J.-S. Wang, Appl. Phys. Lett. **88**, 11909 (2006)
- [46] S. Maruyama, Microscale Thermophys. Eng. **7**, 41 (2003)
-

-
- [47] G. Zhang and B. Li, Chem. Phys. **123**, 114714 (2005)
- [48] S. Nosé, Molecular Physics **52**, 255 (1984)
- [49] W.G. Hoover, Phys. Rev. A **31**, 1695 (1985)
- [50] K. Aoki and D. Kusnezov, Phys. Rev. Lett. **86**, 4029 (2001)
- [51] A. Ueda and S. Takesue, arXiv:cond-mat/0508619
- [52] J. Hone, Carbon Nanotubes: Thermal Properties, in Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, Marcel Dekker (2004)
- [53] J.X. Cao, X.H. Yan, Y. Xiao, and J.W. Ding, Phys. Rev. B **69**, 073407 (2004)
- [54] K. Schwab, J.L. Arlett, J.M. Worlock, and M.L. Roukes, Physica E **9**, 60 (2001)
- [55] J.X. Cao, X.H. Yan, Y. Xiao, Y. Tang, and J.W. Ding, Phys. Rev. B **67**, 045413 (2003)
- [56] A. Khitun and K.L. Wang, Appl. Phys. Lett. **79**, 851 (2001)
- [57] M. Grujicic, G. Cao, and W.N. Roy, J. Mater. Sci. **40**, 1943 (2005)
- [58] C.W. Nan, G. Liu, Y. Lin, and M. Li, Appl. Phys. Lett. **85**, 3549 (2004)
- [59] P.K. Schelling, L. Shi, and K.E. Goodson, Materials Today **8**, 30-35 (2005)
- [60] X. Hu, L. Jiang, and K.E. Goodson, Proc. 9th IITHERM Conference, 63-69, Las Vegas, NV (2004)
- [61] C.W. Chang, A. Majumdar, and A. Zettl, Science **314**, 1121 (2006)
-

Kapitel 5

Schluss

Eine detailgetreue Berechnung oder Simulation der Dynamik in Biomolekülen oder nanostrukturierter Materie ist aufgrund der vielen mikroskopischen Wechselwirkungen meist sehr aufwendig oder nahezu unmöglich. Deshalb greift man zur Erforschung wichtiger Prozesse in molekularen Systemen oder in Festkörpern, wie dem Energietransfer in Biomolekülen, der Wärmeleitung in Nanoröhrchen und den Lokalisierungsmechanismen in optischen Gittern auf möglichst einfache Beschreibungen zurück. Nichtlineare Modelle wie die Fermi-Pasta-Ulam-Kette, die diskrete nichtlineare Schrödingergleichung und die Kohlenstoff-Nanoröhrchen in der Fermi-Pasta-Ulam-Approximation zeigen, dass relativ einfache Modelle mit den herangezogenen Erweiterungen, wie thermischem Rauschen, Dämpfung und langreichweitigen Wechselwirkungen sehr unterschiedliche Systeme beschreiben können.

Ziel dieser Arbeit war es, in Computersimulationen die neuen Systemeigenschaften durch die vorgenommenen Erweiterungen der nichtlinearen Systeme zu untersuchen und nach Möglichkeit durch Methoden wie der Kontinuumsapproximation, der Kollektivvariablen-Theorie und der stochastischen Störungsrechnung ein tieferes Verständnis zu erlangen.

Die wichtigsten Ergebnisse und Erfolge bei der Untersuchung der drei genannten komplexen Systeme lassen sich wie folgt zusammenfassen:

In Kapitel 2 wurde die klassische Fermi-Pasta-Ulam-Kette durch langreichweitige Wechselwirkungen erweitert und an ein thermisches Bad angekoppelt. Es hat sich gezeigt, dass selbst bei geringen Wechselwirkungsradien deutlich stabilere Gittersolitonen entstehen, die Energie über große Distanzen transportieren können. Der Haupteffekt der thermischen Fluktuationen ist eine Diffusionsbewegung der Gittersolitonen, die im Gegensatz zur Brownschen Bewegung superdiffusive Anteile besitzt. Durch analytische Rechnungen und Simulationen wurde gezeigt, dass es unabhängig von der konkreten Form des Wechselwirkungspotenzials nach genügend langen Zeiten zu einer superdiffusiven Zeitabhängigkeit $\sim t^{3/2}$ der Positionsvarianz kommt.

In Kapitel 3 wurden Lokalisierungsmechanismen in der diskreten nichtlinearen Schrödingergleichung mit langreichweitigen Wechselwirkungen behandelt. Im Fall eines Systems mit nichtlinearer Dämpfung wurde durch Rechnung und Simulationen gezeigt, dass sich die Norm \mathcal{N} , die Erhaltungsgröße des Systems, auf lokalisierte diskrete Breather aufteilt, deren Abstände und Größen mit dem Wechselwirkungsradius α^{-1} anwachsen. Die Präsenz von langreichweitigen Wechselwirkungen sollte somit z.B. in Biomolekülen in Gegenwart von Dämpfungsmechanismen zu einer sehr starken Lokalisierung von Vibrationsquanten führen. Für das ungedämpfte System hat sich gezeigt, dass sich persistente Breather ausbilden, wenn die Energiedichte im System bei fester Norm einen bestimmten Schwellenwert übersteigt, der sich mit Hilfe einer Statistischen-Mechanik-Beschreibung der langreichweitigen DNLS bestimmen ließ. Mit Hilfe von Monte-Carlo-Verfahren wurde bewiesen, dass dieser Übergang einer Systemtemperatur $T \rightarrow \infty$ entspricht und dass die persistente Breather-Phase mit formal negativen absoluten Temperaturen deutlich höhere Lokalisierung zeigt.

In Kapitel 4 dienten Fermi-Pasta-Ulam-Ebenen, die in Längsrichtung zwischen zwei Wärmebäder gebracht und in Querrichtung mit periodischen Randbedingungen versehen wurden, als Modelle für Kohlenstoff-Nanoröhrchen. Durch ein Anpassen des Fermi-Pasta-Ulam-Potenzials an die Form des Kohlenstoff-Wechselwirkungspotenzials ergaben sich Werte für die thermische Leitfähigkeit, die im Bereich der in Molekulardynamik-Simulationen und Experimenten gemessenen Werte liegen. Bezüglich der Divergenz der Wärmeleitfähigkeit der FPU-Carbon-Ebenen mit der Systemlänge, $\kappa \sim L^\alpha$, zeigte sich für genügend große Systeme ein Verlauf ähnlich zur FPU-Carbon-Kette, für die sich der Wert $\alpha \approx 0.22$ ergab. Dieser Wert gleicht den Ergebnissen früherer Studien für FPU-Ebenen mit quartischer Anharmonizität (ohne langreichweitige Wechselwirkungen) bei wesentlich größeren Systemtemperaturen. Die beobachtete Temperaturabhängigkeit des Exponenten α für die FPU-Carbon-Kette war in früheren Simulationen mit einfacheren Wechselwirkungspotenzialen und höheren Temperaturen nicht beobachtet worden. Die Wärmeleitfähigkeit langer Nanoröhrchen kann somit gut durch eindimensionale FPU-Ketten beschrieben werden, wobei die genaue Abhängigkeit des Exponenten α von der Temperatur und der Systemlänge weiterer Studien bedarf.

Durch die stetig wachsenden Kapazitäten an Rechnerleistung ist es mittlerweile möglich, für die genannten Modelle realistische Systemgrößen und Wechselwirkungspotenziale zu betrachten. Diese Entwicklung könnte die Grundlage zum Verständnis vieler komplizierter Probleme aus der Biophysik und Nanotechnologie sein. In der neueren Forschung zeichnet sich ab, dass nichtlineare Anregungen wie diskrete Breather sehr robust sind und in einer Vielzahl von unterschiedlichen nichtlinearen Systemen existieren.

Einige Modelle aus der Vergangenheit, die zum Beispiel frei bewegliche Solitonen in DNA-Strängen und Proteinen vorhersagten, sind vermutlich zu grob, um realistische Vorgänge zu beschreiben. Nichtsdestotrotz gibt es mittlerweile verlässliche experimentelle Beweise, dass es in Proteinen zu der von Davydov mit Hilfe der nichtlinearen Schrödinger-Gleichung beschriebenen Lokalisierung von Vibrationsenergie kommen kann.

In einem Artikel von H. Frauenfelder et al. mit dem Titel „Biological Physics“ aus dem Jahre 1999, also vor den jüngsten Erfolgen der Davydov-Theorie für Energietransport in Proteinen, ist zu lesen:

„Solitons exist and are very important but the relevance to biological systems is still very much in doubt and await new experiments. The critical event in enzyme catalysis, the breakage of a bond, still remains the province of the chemist. Perhaps in the future aspects of nonlinear dynamics and energy flow will help us obtain insight into general aspects of this complex event.“

H. Frauenfelder, P.G. Wolynes, and R.H. Austin, Rev. Mod Phys. **71**, 419 (1999)

Wichtige Schritte, um die Rolle nichtlinearer Anregungen in realen Systemen zu verstehen, wurden seitdem bereits getan. In der Zukunft wird die computergestützte Physik bei der Untersuchung des komplizierten Wechselspiels zwischen Nichtlinearitäten und thermischen oder langreichweitigen Effekten sicherlich noch wertvolle Beiträge liefern, um die vielen komplexen Systeme in der uns umgebenden Welt zu verstehen.

Anhang A

Fluktuations-Dissipations-Theorem

Die Bewegungsgleichungen (2.7) in Auslenkungs koordinaten u_n und $p_n = \dot{u}_n$ lassen sich bei An-
koppelung an ein Wärmereservoir und bei Vorhandensein einer Stokesschen oder hydrodynamischen
Dämpfung schreiben als

$$\frac{du_n}{dt} = p_n \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{dp_n}{dt} = -\underbrace{\frac{\partial H}{\partial u_n}}_{T_n} + F_n^D + F_n^N(t) . \quad (\text{A.2})$$

Für die beiden möglichen Dämpfungsmechanismen gilt

$$F_n^D = F_n^{St} = -\nu_{St} \frac{du_n}{dt} \quad (\text{A.3})$$

für die Stokessche Dämpfung, bzw.

$$F_n^D = F_n^{hy} = -\nu_{hy} \left(\frac{du_{n+1}}{dt} - 2\frac{du_n}{dt} + \frac{du_{n-1}}{dt} \right) . \quad (\text{A.4})$$

für die hydrodynamische Dämpfung. Im Fall der Stokesschen Dämpfung folgt aus der Forderung,
dass das Gleichungssystem

$$\frac{du_n}{dt} = p_n \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{dp_n}{dt} = T_n - \nu_{St} p_n + F_n^N(t) \quad (\text{A.6})$$

das Fluktuations-Dissipations-Theorem erfüllen soll:

$$F_n^N(t) = \sqrt{D^{St}} \xi_n(t) , \quad D^{St} = 2\nu_{St} k_B T , \quad (\text{A.7})$$

wobei es sich bei $\xi_n(t)$ um Gaußsches weißes Rauschen handelt

$$\left\langle \xi_n(t) \xi_{n'}(t') \right\rangle = \delta_{n,n'} \delta(t - t') . \quad (\text{A.8})$$

Dieses Ergebnis lässt sich leicht nachrechnen, indem man die Fokker-Planck-Gleichung von (A.6)
für die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \langle \prod_n \delta(p_n - p_n(t)) \delta(u_n - u_n(t)) \rangle \sim \exp(-H/k_B T)$ löst. Im
Fall der hydrodynamischen Dämpfung ergibt sich ein ähnliches Gleichungssystem, nachdem man

die vom Ort n abhängigen Größen $u_n(t)$, $p_n(t)$, $T_n = -\partial H/\partial u_n$, F_n^N und F_n^{hy} durch ihre diskreten Fouriertransformationen ersetzt, z.B.

$$u_n(t) = \sum_k \tilde{u}_k e^{ikn}$$

$$F_n^{hy} = \nu_{hy} \left(\frac{du_{n+1}}{dt} - 2\frac{u_n}{dt} + \frac{du_{n-1}}{dt} \right) = 2\nu_{hy} \sum_k (\cos(k) - 1) \tilde{p}_k(t) e^{ikn} . \quad (\text{A.9})$$

Es ergibt sich das Gleichungssystem:

$$\frac{d\tilde{u}_k}{dt} = \tilde{p}_k \quad (\text{A.10})$$

$$\frac{d\tilde{p}_k}{dt} = \tilde{T}_k - \nu_{hy} \gamma_k \tilde{p}_k + \tilde{F}_k^N(t) \quad (\text{A.11})$$

mit $\gamma_k = 2(\cos(k) - 1)$. Analog zum Fall der Stokesschen Dämpfung wird das Fluktuations-Dissipations-Theorem von einem Rauschterm der Form

$$\tilde{F}_k^N = \sqrt{D(k)} \xi_k(t) \quad (\text{A.12})$$

mit dem Gaußschen weißen Rauschen $\xi_k(t)$ und

$$D(k) = 2\nu_{hy} k_B T \gamma_k \quad (\text{A.13})$$

erfüllt. Daraus kann man für den Rauschterm im Ortsraum die Bedingung

$$\left\langle F_n^N(t) F_{n'}^N(t') \right\rangle = \sum_{k,k'} e^{ikn} e^{ik'n'} \underbrace{\left\langle \tilde{F}_k^N(t) \tilde{F}_{k'}^N(t') \right\rangle}_{D(k) \delta(t-t') \delta_{k,k'}} = \underbrace{2\nu_{hy} k_B T}_{D^{hy}} \left(\delta_{n-1,n'} - 2\delta_{n,n'} + \delta_{n+1,n'} \right) \quad (\text{A.14})$$

ableiten, die vom Rauschterm

$$F_n^N(t) = \sqrt{D^{hy}} \left(\xi_{n+1}(t) - \xi_n(t) \right) \quad (\text{A.15})$$

erfüllt wird.

Anhang B

Quasikontinuumsnäherung

Bei der Quasikontinuumsnäherung geht die diskrete Variable n in die kontinuierliche Variable x über. Funktionen, die am Ort $n \pm m$ gegeben sind, werden durch Taylor-Entwicklung der Funktion am Ort x gewonnen:

$$n \rightarrow x, w_n(t) \rightarrow w(x, t), w_{n+m}(t) \rightarrow e^{m\partial_x} w(x, t). \quad (\text{B.1})$$

Terme der Form $f_{n+1} - 2f_n + f_{n-1}$ ergeben im Kontinuumsfall $2(\cosh\partial_x - 1)f(x, t)$. Es ergibt sich aus (2.7) mit J_m aus (2.9)

$$\begin{aligned} \partial_t^2 w = 2(\cosh\partial_x - 1) & \left[V'(w) + \frac{J}{4}(e^\alpha - 1)\coth\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cdot (\cosh\alpha - \cosh\partial_x)^{-1} w \right] + \\ & + 2(\cosh\partial_x - 1) \left[\nu_{hy}\dot{w} + \sqrt{D^{hy}}\xi(x, t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Dabei wurde die Identität

$$2 \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\alpha|m|} (1 - \cosh(m\partial_x)) = \frac{1 - \cosh\partial_x}{\cosh\alpha - \cosh\partial_x} \coth\left(\frac{\alpha}{2}\right) \quad (\text{B.3})$$

verwendet. Die Quasikontinuumsnäherung besteht nun darin, auf die Gleichung (B.2) den Operator $1/2 \partial_x^2 (\cosh\partial_x - 1)^{-1}$ anzuwenden. Auf der linken Seite wird der resultierende Ausdruck $1/2 \partial_x^2 (\cosh\partial_x - 1)^{-1} \approx 1 - 1/12 \partial_x^2$ bis zur 2. Ordnung entwickelt. Auf der rechten Seite wird im zweiten Term der Operator $\cosh\partial_x \approx 1 + \partial_x^2/2$ im Nenner ebenfalls bis zur 2. Ordnung entwickelt

$$\underbrace{\frac{1}{2} \frac{\partial_x^2}{\cosh\partial_x - 1}}_{\approx 1 - \frac{\partial_x^2}{12}} \partial_t^2 w = \partial_x^2 \left[\underbrace{V'(w)}_{w-w^2} + \frac{J}{4}(e^\alpha - 1)\coth\left(\frac{\alpha}{2}\right) \cdot \underbrace{(\cosh\alpha - \cosh\partial_x)^{-1} w}_{\approx 2(\kappa^2 - \partial_x^2)^{-1}} + \nu_{hy}\dot{w} + \sqrt{D^{hy}}\xi(x, t) \right], \quad (\text{B.4})$$

was zur der nicht-lokalen Boussinesq-Gleichung führt:

$$\partial_t^2 w - \lambda \partial_x^2 \partial_t^2 w = (c^2 - 1) \frac{\kappa^2 \partial_x^2}{\kappa^2 - \partial_x^2} w + \partial_x^2 (w - w^2) + \nu_{hy} \partial_x^2 \partial_t w + \sqrt{D^{hy}} \partial_x^2 \xi(x, t). \quad (\text{B.5})$$

Dabei wurden die folgenden Größen eingeführt:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{12}, \quad \kappa^2 = 4 \sinh^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \\ \frac{J}{2}(e^\alpha - 1)\coth\left(\frac{\alpha}{2}\right) &= \kappa^2 (c^2 - 1). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Anhang C

Stochastische Störungsrechnung

Die Vorgehensweise der im folgenden geschilderten stochastischen Störungsrechnung orientiert sich an der Referenz [1].

Für die Langevin-Gleichungen (2.52) und (2.62) führt man formal eine Expansion der kollektiven Variablen nach einem kleinen Parameter ϵ durch, der eingeführt wird um den Effekt des schwachen Rauschterms zu berücksichtigen ($\sqrt{D^{hy}} \sim \epsilon$)

$$X_1(t) = X_1^{(0)}(t) + \epsilon X_1^{(1)}(t) + \dots \quad (\text{C.1})$$

$$X_2(t) = X_2^{(0)}(t) + \epsilon X_2^{(1)}(t) + \dots \quad (\text{C.2})$$

Dieser Ansatz wird in die Lagrange-Gleichungen eingesetzt, wobei die Diffusionsterme erst in der Ordnung $\mathcal{O}(\epsilon)$ erscheinen, da sie proportional zu $\sqrt{D^{hy}}$ sind. Die Driftterme hängen über die zeitlich fluktuierenden kollektiven Variablen \vec{X} vom Rauschterm ab, weswegen man die Beiträge in den einzelnen Ordnungen durch die Expansion

$$\begin{aligned} a_i(X_1(t)) &= a_i\left(X_1^{(0)} + \sum_{m=1}^{\infty} \epsilon^m X_1^{(m)}(t)\right) \\ &= a_i^{(0)}(t) + \epsilon X_1^{(1)}(t) \frac{da_i(X_1^{(0)}(t))}{dX_1^{(0)}(t)} + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

berechnet. Im Fall der Langevin-Systeme (2.52) und (2.62) hängen die Driftterme ausschließlich von der inversen Breite $X_1(t)$ und nicht von der Position $X_2(t)$ ab.

Die Gleichungen in nullter Ordnung, was dem Fall einer gedämpften Kette ohne Rauschen entspricht, lauten

$$dX_1^{(0)}(t) = a_1(X_1^{(0)}(t))dt \sim -\nu_{hy}X_1(t)^3dt \quad (\text{C.4})$$

$$dX_2^{(0)}(t) = v_d(X_1^{(0)}(t))dt \quad (\text{C.5})$$

Die Lösung für die inverse Solitonenbreite hängt im gedämpften Fall nur von der Zeitskala $t_r \sim \nu_{hy}X_1(0)^2t$ ab. Dieses Ergebnis wird dann in erster Ordnung in ϵ benutzt:

$$\begin{aligned} dX_1^{(1)}(t) &= X_1^{(1)}(t) \frac{da_1(X_1^{(0)}(t))}{dX_1^{(0)}(t)} dt + b_{11}(\vec{X}^{(0)})dW_1(t) \\ dX_2^{(1)}(t) &= X_2^{(1)}(t) \frac{da_2(X_1^{(0)}(t))}{dX_1^{(0)}(t)} dt + b_{22}(\vec{X}^{(0)})dW_2(t) \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Bei einer Störungsrechnung erster Ordnung ergibt sich die Positionsvarianz des Solitons durch die Berechnung von

$$\text{Var}[X_2^{(1)}(t)] = \lim_{s \rightarrow t} \langle X_2^{(1)}(t)X_2^{(1)}(s) \rangle . \quad (\text{C.7})$$

Der kleine Parameter wird zu eins gesetzt ($\epsilon = 1$), was gerechtfertigt ist, wenn die Temperatur im System hinreichend klein gewählt ist. Das Ergebnis für die Positionsvarianz hängt in erster Ordnung in $\sqrt{D^{hy}}$ wegen der Abhängigkeit $X_1(t_r)$ ebenfalls nur von der neuen Zeitskala t_r ab. Im Falle der Kac-Baker-Wechselwirkungen ergeben sich mit der folgenden Approximation der deterministischen Solitonengeschwindigkeit

$$v_d \approx c + \frac{4 A_o}{9 c} \gamma(t) - \left(\frac{8 A_o^2}{81 c^3} + \frac{2(c^2 - 1)}{3 c \kappa^2} \right) \gamma(t)^2 , \quad (\text{C.8})$$

die für relativ breite Solitonen ($\theta \geq 2$, $c_o \leq 1.07$) gerechtfertigt ist, die Ergebnisse

$$\begin{aligned} dX^{(1)}(t) &= \gamma^{(1)}(t) \left(c + \frac{4 A_o}{9 c} - \left(\frac{16 A_o^2}{81 c^3} + \frac{4(c^2 - 1)}{3 c \kappa^2} \right) \gamma^{(0)}(t) \right) dt \\ &+ \sqrt{\frac{1}{6} + \frac{\pi^2}{180}} \frac{\sqrt{D}}{\sqrt{\gamma^{(0)} A_o v}} dW_2 \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

$$\begin{aligned} d\gamma^{(1)}(t) &= -2.4 \nu_{hy} \gamma^{(1)}(t) \gamma^{(0)}(t)^2 dt \\ &+ \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{\sqrt{D} \gamma^{(0)}(t)^{\frac{3}{2}}}{A_o v} dW_1 \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

$$\gamma^{(0)} = \frac{\gamma_o}{\sqrt{1 + 1.6 t r}} , \quad t_r = \nu_{hy} \gamma_o^2 t . \quad (\text{C.11})$$

Im Fall der potenzartigen Wechselwirkungen kann man die Geschwindigkeit v_d für die in den Simulationen verwendeten Parameter stets sehr gut durch

$$v_d(\sigma(t)) = c + \frac{A_o}{4c} \sigma(t) \quad (\text{C.12})$$

approximieren. Die Korrekturterme ergeben sich somit in erster Ordnung zu:

$$dX^{(1)}(t) = \sigma^{(1)}(t) \frac{A_o}{4c} dt + \frac{\sqrt{D}}{\sqrt{\sigma^{(0)}} \sqrt{\pi} A_o v} dW_2 \quad (\text{C.13})$$

$$d\sigma^{(1)}(t) = -\sigma^{(1)}(t) \frac{3}{2} \nu_{hy} \sigma^{(0)}(t)^2 dt + \frac{\sqrt{D} \sigma^{(0)}(t)^{\frac{3}{2}}}{A_o \sqrt{\pi} v} dW_1 \quad (\text{C.14})$$

$$\sigma^{(0)} = \frac{\sigma_o}{\sqrt{1 + t r}} , \quad t_r = \nu_{hy} \sigma_o^2 t . \quad (\text{C.15})$$

Anhang D

Bestimmung des Startsolitons

Die nicht-lokale Boussinesq-Gleichung kann, wie in [2] beschrieben, in impliziter Form gelöst werden. Dabei wird die nicht-lokale Boussinesq-Gleichung auf ein mitbewegtes Koordinatensystem $z = x - vt$ transformiert und zweimal räumlich integriert mit $w(\pm\infty) = 0$ und $w_x(\pm\infty) = 0$:

$$\lambda v^2 \partial_z^2 w + (c^2 - 1) \frac{\kappa^2}{\kappa^2 - \partial_z^2} w - (v^2 - 1)w - w^2 = 0 . \quad (\text{D.1})$$

Diese Gleichung kann nach einigen Rechenschritten auf die Form

$$(\partial_z^2 - s_+^2)(\partial_z^2 - s_-^2)w = \frac{1}{v^2 \lambda} (\partial_z^2 - \kappa^2)w^2 \quad (\text{D.2})$$

mit

$$s_{\pm 1}^2 = \frac{1}{2} \left(\kappa^2 + \frac{v^2 - 1}{v^2 \lambda} \pm \sqrt{\left(\kappa^2 - \frac{v^2 - 1}{v^2 \lambda} \right)^2 + 4 \frac{\kappa^2 (c^2 - 1)}{v^2 \lambda}} \right) \quad (\text{D.3})$$

gebracht werden, an der man sofort erkennt, dass die Dynamik von zwei Längenskalen s_+ und s_- ($s_+ > s_-$) bestimmt wird. Da man für Geschwindigkeiten nahe c breite Lösungen erwartet, scheint in diesem Fall die s_- -Skala den dominierenden Beitrag zu liefern, was eine Expansion des Operators auf der linken Seite von (D.1) in Ordnungen von ∂_z^2/s_+^2 nahelegt. Die resultierende Gleichung kann in der folgenden Form

$$\partial_{\bar{z}}^2 (\bar{w} - \bar{w}^2) - \bar{w} + A \bar{w}^2 = 0 \quad (\text{D.4})$$

mit

$$w = -s_+^4 \frac{v^2 \lambda}{s_+^2 - \kappa^2} \bar{w} , \quad \bar{z} = s_- z , \quad A = \frac{s_+^2}{s_-^2} \frac{\kappa}{s_+^2 - \kappa^2} \quad (\text{D.5})$$

geschrieben werden. Diese Gleichung kann anstatt der impliziten Lösung in [2] auf eine Bernoulli-Differentialgleichung für $\bar{w}' = d\bar{w}/d\bar{z}$ zurückgeführt werden, die für die Funktion $y(\bar{w}) = \bar{w}'^2$ eine lineare Differentialgleichung ergibt (siehe [3], Formel 6.54):

$$y'(\bar{w}) + 2f(\bar{w})y(\bar{w}) + 2h(\bar{w}) = 0 \quad (\text{D.6})$$

mit

$$f(\bar{w}) = \frac{-2}{1 - 2\bar{w}} , \quad h(\bar{w}) = -\frac{\bar{w} - A\bar{w}^2}{1 - 2\bar{w}} . \quad (\text{D.7})$$

Das Problem ist somit auf eine Integration zurückgeführt:

$$\sqrt{y(\bar{w})} = \bar{w}' = \sqrt{\frac{\bar{w}^2 - \bar{w}^3\left(\frac{4}{3} - \frac{2}{3}A\right) + A\bar{w}^4}{(2\bar{w} - 1)^2}}, \quad (\text{D.8})$$

die (z.B. mit MATHEMATICA) numerisch relativ einfach durchgeführt werden kann und weniger problematisch ist, als die numerische Bestimmung der impliziten Lösung in [2].

Anhang E

Großkanonische Zustandssumme

Die Hamiltonfunktion (3.3) mit den Variablen $A_n(t)$ und $\theta_n(t)$, auch Feynman-Variablen genannt, ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
 H &= J\mathcal{N} - \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N J \frac{(e^\alpha - 1)}{(1 - e^{-\alpha N})} e^{-\alpha m} \sqrt{A_n A_{n+m}} \cdot \\
 &\quad \cos(\theta_n - \theta_{n+m}) - \sum_{n=1}^N \frac{3}{4} B A_n^2 .
 \end{aligned} \tag{E.1}$$

Die Grundzustandsenergie der Hamiltonfunktion wird durch die gestaffelte Wellenfunktion (staggered wave function) $\phi_n^s = \sqrt{a} e^{in\pi}$ realisiert, die von α abhängt

$$H^s(\alpha) = 2J\mathcal{N} \frac{e^\alpha}{e^\alpha + 1} - \frac{3}{4} B N a^2 . \tag{E.2}$$

Für $\alpha = 0.2$ ergibt sich zum Beispiel eine Grundzustandsenergie von $-H^s \approx -7$, wohingegen bei $\alpha = 5$ der Wert $H^s \approx -15$ beträgt (für die Parameter $B = J = 0.1$, $N = 512$). Die großkanonische Zustandssumme der DNLS ist definiert als

$$\begin{aligned}
 Z &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} d\theta^N dA^N e^{\beta(H - \mu\mathcal{N})} \\
 &\stackrel{(E.1)}{=} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} d\theta^N dA^N e^{\beta J \mathcal{N}} \prod_n^N e^{\beta(-\frac{3}{4} B A_n^2 - \mu A_n)} \cdot \\
 &\quad \cdot \prod_m^N e^{-J_m e^{-\alpha m} \sqrt{A_n A_{n+m}} \cos(\theta_n - \theta_{n+m})} \\
 &= e^{\beta J \mathcal{N}} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} dA^N \prod_n^N e^{\beta(-\frac{3}{4} B A_n^2 - \mu A_n)} \cdot \\
 &\quad \cdot \prod_m^N 2\pi I_0(-\beta J_m e^{-\alpha m} \sqrt{A_n A_{n+m}}) ,
 \end{aligned} \tag{E.3}$$

wobei $I_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{z \cos \theta} d\theta$ die modifizierte Besselfunktion erster Art ist. Die Vorgehensweise bei der Berechnung der Phasenübergangsenergie in [4] kann in gleicher Weise auf das System mit langreichweitigen Wechselwirkungen angewendet werden, wenn man den Grenzwert $\beta = 0^+$, $\mu = \infty$

(mit $\beta\mu = \Gamma$ endlich) betrachtet. In diesem Grenzfall kann $I_o \approx 1$ gesetzt werden, woraus sich

$$\begin{aligned} Z^{\beta^{0+}} &\approx e^{\beta J N} \left((2\pi)^N \int_0^\infty dx e^{-\mu\beta x} \left(1 - \frac{3}{4}\beta B x^2\right) \right)^N \\ &\approx (2\pi)^{2N} e^{\beta J N} \frac{1}{(\mu\beta)^N} \left(1 - \frac{3}{4}\beta B \frac{2}{(\beta\mu)^2}\right)^N \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

ergibt. Die mittlere Energie und Norm im kanonischem Ensemble ergibt sich zu

$$\begin{aligned} -H_{\beta=0^+} &= \left(\frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{\partial}{\partial \beta} \right) \ln Z \\ &= -JN + \frac{3}{2}NB \frac{1}{(\beta\mu)^2} \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

$$\bar{\mathcal{N}} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mu} = \frac{N}{\beta\mu} - \frac{3NB\beta}{(\mu\beta)^3}. \quad (\text{E.6})$$

Vernachlässigt man den zweiten Term in $\bar{\mathcal{N}}$, so ergibt sich die $\beta = 0^+$ -Übergangslinie im (h, a) -Phasenraum zu

$$-h_{\beta=0^+} = -Ja + \frac{3}{2}Ba^2, \quad (\text{E.7})$$

wobei $-h = -H/N$ und $a = \bar{\mathcal{N}}/N$ die mittlere Energie und Norm pro Oszillator darstellen (siehe Abbildung 3.7). In Simulationen mit den Parameterwerten $a = 0.16$, $J = B = 0.1$ und $N = 512$ sollte der Phasenübergang demnach bei der Energie

$$-H_{\beta=0^+} = -6.23 \quad (\text{E.8})$$

eintreten, die durch die gestrichelte Linie in Abbildung 3.9 markiert ist.

Literaturverzeichnis : Anhang

- [1] C.W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods*, Springer Verlag (1983)
- [2] Y.B. Gaididei, N. Flytzanis, A. Neuper, and F.G. Mertens, *Physica D* **107**, 83
- [3] E. Kamke, *Differentialgleichungen, Lösungsmethoden und Lösungen*, Chelsea Publishing Company (1971)
- [4] M. Johansson, and K.Ø. Rasmussen, *Phys. Rev. E* **70**, 066610 (2004)

Danksagung

Am Ende dieser Arbeit und am Ende eines sehr schönen Lebensabschnitts ist es an der Zeit, den vielen Menschen zu danken, die mich immer tatkräftig unterstützt haben und durch deren Hilfe und Zuneigung mein Leben sehr bereichert wurde:

An meine Familie, insbesondere meine Mutter und meinen Vater, denen ich eine sorgenfreie Studienzeit zu verdanken habe und die mich auf unzählbar viele Weisen unterstützt und gefördert haben.

An meine Freundin Sonja, die mir auf meinem Weg stets viel Kraft gegeben hat und ohne die mein Leben so viel ärmer wäre.

An meinen Doktorvater Prof. Dr. Franz Georg Mertens für das Interesse, das er meiner Arbeit entgegengebracht hat, die vielen anregenden Diskussionen, die Ermöglichung meiner Auslandsaufenthalte und die gute Arbeitsatmosphäre in den letzten vier Jahren.

Weiterhin möchte ich Prof. Dr. Werner Pesch danken, weil er sich so spontan als Zweitgutachter dieser Arbeit zur Verfügung gestellt hat.

Stellvertretend für alle netten Menschen, die mir während meiner Zeit an der Universität Bayreuth begegnet sind möchte ich vor allem meinem Systemadministrator (und Freund) Jochen Endrejat, meinen Zimmergenossen Christian Schuster und Christopher Gaul, meinen langjährigen Studienkollegen Christian Hörhammer und Florian Pump, unserer Sekretärin Sigrid Glas und allen anderen Mitglieder unserer stetig gewachsenen „Essens- und Teerunde“ danken. Ich hoffe ihr versteht Euch auch weiterhin so gut und sprengt durch Eure Größe noch so manche Sitzordnung.

Vielen Dank!