

Questo lavoro di tesi riguarda lo studio delle proprietà di trasporto in sistemi unidimensionali di oscillatori anarmonici. In particolare, si è affrontato il problema della conducibilità termica nel modello FPU- $\alpha\beta$, il quale comprende termini non lineari del terzo e quarto ordine all'interno del potenziale d'interazione a primi vicini.

Si tratta di un settore di ricerca molto attuale, che si fonda su studi numerici e teorici delle proprietà anomale di trasporto in sistemi di basse dimensioni. Più di recente, tale campo ha trovato un crescente interesse anche in ambito applicativo grazie al progresso nello studio di nanomateriali, come nanotubi e strati di grafene sospesi.

In sistemi $1d$, in cui si conservi oltre al numero di particelle e all'energia anche il momento totale, le ricerche negli ultimi decenni hanno contribuito ad indicare che la conducibilità termica, κ , dipende dalla taglia L del sistema secondo una legge di potenza, $\kappa \sim L^\gamma$, con $0 < \gamma < 1$. Pertanto risulta che il calore non diffonde, ma piuttosto si propaga in modo anomalo.

Più di recente, però, accurati studi numerici³ hanno sollevato il problema che in sistemi $1d$ con potenziali asimmetrici tale predizione non sia più valida e che, al contrario, si verifichi la conduzione diffusiva con $\gamma = 0$, in contraddizione con i precedenti studi teorici.

Tuttavia, ancora più di recente è stata proposta una teoria idrodinamica⁴, la teoria KPZ, più generale e dettagliata di quelle finora utilizzate; le predizioni di questa consentono di verificare se un sistema $1d$, come il modello FPU- $\alpha\beta$, mostri le signature caratteristiche di un regime di conduzione normale o anomala. La teoria predice che tutti i modelli con interazione asimmetrica siano descritti in modo efficace dal comportamento delle funzioni spazio-temporali delle quantità conservate. In particolare, le correlazioni dei modi acustici soddisfano relazioni di *scaling* associate ad un'equazione alla Kardar-Parisi-Zhang (KPZ). Queste relazioni sono legate a valori non universali, in particolare alla velocità del suono, c , e al coefficiente di scaling λ_s .

Nella parte originale di questo lavoro di tesi ci siamo concentrati sullo studio di tali correlazioni nel modello FPU- $\alpha\beta$, al fine di stabilire, per diversi regimi di asimmetria, se le predizioni della teoria KPZ fossero verificate. Per tale scopo abbiamo effettuato simulazioni di dinamica molecolare dalle quali sono stati estratti i valori di c e λ_s oltre al il comportamento della conducibilità termica.

Con sorpresa abbiamo trovato che i valori teorici di c sono ben riprodotti dalle simulazioni, mentre i valori di λ_s risultano molto più bassi di quelli predetti dalla teoria. Questo ci dà delle forti indicazioni che la scala di tempo del rilassamento all'equilibrio sia molto più piccola di quella idrodinamica e che, con i tempi adottati nei calcoli numerici, riusciamo solo ad esplorare la prima. Le misure numeriche della conducibilità mostrano inoltre indicazioni a favore di un trasporto anomalo in regime di bassa asimmetria, mentre vi è apparentemente un passaggio ad un regime di conducibilità diffusiva al crescere dell'asimmetria.

Questi due aspetti possono essere collegati osservando che per piccole asimmetrie, cioè nel regime del trasporto anomalo, la discrepanza tra il valore numerico e quello teorico di λ_s è piccola, mentre cresce significativamente nel regime in cui si osserva conducibilità normale.

Concludiamo che la teoria KPZ non è in grado di descrivere il comportamento del sistema con forti asimmetrie sulle taglie e scale di tempo che abbiamo esplorato con le simulazioni effettuate. Tuttavia i nostri risultati possono essere consistenti con recenti studi numerici che propongono che si ristabilisca un trasporto anomalo in sistemi molto più grandi e per tempi molto più lunghi⁵.

¹mika.straka@fu-berlin.de

²livi@fi.infn.it

³Chen et al., arXiv:1204.5933

⁴Spohn et al., J. of Stat. Phys., 154(5), 1191-1227

⁵Das et al., J. of Stat. Phys., 154(1-2), 204-213