

УДК 539.3 : 539.4

Распространение тепла в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании

А.М. Кривцов^{1,2}, М.Б. Бабенков^{1,2}, Д.В. Цветков¹

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, 195251, Россия

² Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, 199178, Россия

В работе получена замкнутая система дифференциально-разностных уравнений, описывающая тепловые процессы в одномерном гармоническом кристалле на упругом основании. Показано, что процесс эволюции теплового возмущения в таком кристалле описывается нестационарным дискретным уравнением, частным случаем которого является гиперболическое уравнение баллистической теплопроводности. Данное уравнение остается справедливым и для случая отрицательных значений жесткости связей между частицами кристалла во всем диапазоне его устойчивости. Фронт теплового возмущения распространяется с максимальной групповой скоростью механических волн. В работе показано, что распространение короткого теплового возмущения в кристалле на упругом основании определяется уравнением баллистической теплопроводности того же вида, что и в кристалле без упругого основания. Единственным параметром данного уравнения является величина максимальной по модулю групповой скорости, т.е. максимальная скорость, с которой в кристалле на упругом основании может распространяться энергия. Данная величина пропорциональна модулю полуразности верхней и нижней частот отсечек. Скорость распространения тепловой волны в кристалле на упругом основании с положительной жесткостью всегда меньше, чем скорость тепловой волны в кристалле без упругого основания. Установлено, что полученное уравнение справедливо как для положительных значений жесткости, так и для отрицательных значений, для которых выполняется условие устойчивости цепочки. Для иллюстрации получено точное решение динамической задачи распространения тепла для параболического начального профиля температуры, моделирующее нагрев одномерного кристалла на подложке коротким лазерным импульсом. За счет наличия дисперсии механических волн в цепочке на подложке их групповая скорость зависит от волнового числа и соотношения жесткостей связей в цепочке и упругого основания. Тепловой фронт распространяется с максимально возможной в системе групповой скоростью, которая зависит только от данного соотношения.

Ключевые слова: одномерный кристалл, теплопроводность, упругое основание, отрицательный коэффициент жесткости, групповая скорость, ковариации

DOI 10.24411/1683-805X-2019-12006

Heat propagation in a one-dimensional harmonic crystal on an elastic foundation

A.M. Krivtsov^{1,2}, M.B. Babenkov^{1,2}, and D.V. Tsvetkov¹

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, 195251, Russia

² Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, St. Petersburg, 199178, Russia

A closed system of differential equations has been derived to describe thermal processes in a one-dimensional harmonic crystal on an elastic foundation. It is shown that the evolution of thermal perturbation in such a crystal is described by a discrete unsteady-state equation, a special case of which is the hyperbolic equation of ballistic heat conduction. This equation remains valid with negative stiffness of bonds between particles of the crystal in its entire stability range. The thermal perturbation front propagates with the maximum group velocity of mechanical waves. The propagation of a short-term thermal perturbation in the crystal on the elastic foundation is determined by the equation of ballistic thermal conductivity of the same type as in the crystal without an elastic foundation. The only parameter of this equation is the maximum group velocity (in absolute value), i.e., the maximum rate of energy propagation in the crystal on the elastic foundation. This quantity is proportional to the absolute value of the half-difference of the upper and lower cutoff frequencies. The rate of heat wave propagation in the crystal on the elastic foundation with positive stiffness is always lower than that in the crystal without an elastic foundation. The obtained equation is found to be valid both for positive stiffness values and for negative ones, for which the chain stability condition is satisfied. As an example, a dynamic problem of heat distribution is solved exactly for a parabolic initial temperature profile to model heating of a one-dimensional crystal on a foundation by a short laser pulse. Due to the dispersion of mechanical waves in the chain on the foundation, their group velocity depends on the wave number and the ratio of bond stiffnesses in the chain and the elastic foundation. The thermal front propagates with the maximum possible group velocity in the system, which depends only on this ratio.

Keywords: one-dimensional crystal, thermal conductivity, elastic foundation, negative stiffness coefficient, group velocity, covariance

1. Введение

Современные технологии позволяют получать образцы одномерного кристалла углерода (карбина), состоящего из более чем 6 тысяч атомов углерода, собранных внутри двойной углеродной нанотрубки [1]. Одномерные кристаллы, состоящие из атомов различных веществ (так называемые «ионные кристаллы»), могут быть выращены внутри углеродных нанотрубок, обеспечивающих их устойчивость [2]. Развитие технологий, позволяющих получать одномерные структуры, ставит вопрос о физических свойствах синтезированных объектов. Согласно теоретически предсказанным свойствам [3], данные материалы являются отличными проводниками тепла и могут быть полезны, например, для контактного отвода тепла в MEMS/NEMS и в молекулярной электронике, в случаях когда естественное конвекционное и лучистое охлаждение затруднено или невозможно.

Особенностью синтеза устойчивых одномерных структур, обусловленной их высокой химической активностью, является необходимость использования молекулярного «термоса», роль которого выполняет двойная углеродная нанотрубка [2]. Моделью системы «углеродная нанотрубка – одномерный кристалл» в линейном приближении может служить одномерная цепочка масс с гармоническим потенциалом взаимодействия частиц между собой и с закрепленным основанием. При линеаризации сложного потенциала взаимодействия между частицами вещества, находящимися в поле потенциала подложки, жесткость межатомной связи может оказаться отрицательной [4] и в ряде случаев несимметричной [5]. Полученное в работе уравнение переноса тепла применимо как для положительных, так и для отрицательных жесткостей связи при выполнении условий устойчивости такой системы.

Дискретность атомарного строения вещества существенно влияет на волновые процессы в нем [6, 7], внося дисперсию в закон распространения волн. Наличие свободных электронов теплопроводности в решетке проводников создает фотоакустический эффект, влияющий на процесс распространения механических волн [8]. Механические волны, распространяющиеся в системе с потенциалом подложки, имеют фильтрующий закон дисперсии, характеризующийся нижней и верхней частотами среза (отсечки). Сходные эффекты возникают вnanoструктурах, в частности в массиве параллельных друг другу наноразмерных осцилляторов. В работах [9, 10] было установлено, что закон дисперсии волн для такого массива является разрывной функцией частоты. К особенностям термомеханических процессов в дискретных системах относятся негативное тепловое расширение [11, 12] и возможность структурных переходов [13, 14]. Подобное разнообразие тепловых

явлений определяет высокую степень сложности описания теплопереноса в дискретных средах.

Результаты последних экспериментальных исследований [15–17] показали, что закон теплопроводности Фурье нарушается в низкоразмерных nanoструктурах. Указанные аномалии наиболее ярко проявляются в простейших решеточных моделях, в частности одномерных гармонических кристаллах [18–20]. Аналитические и компьютерные исследования [21–24] показывают существенные отклонения от классической теплопроводности Фурье в идеальном монокристалле. Стоит отметить, что эти отклонения, в принципе, могут быть уменьшены или даже полностью устранены использованием специальных законов взаимодействия [25–28] или достаточно сложных структур [29, 30].

По сравнению с принятыми моделями волнового переноса тепла наnano- и микромасштабном уровне в сплошных средах [31–35], протекание тепловых процессов в дискретных средах существенно отличается. В частности, при резком тепловом воздействии на дискретную систему в ней инициируются высокочастотные колебания [36], связанные с выравниванием значений потенциальной и кинетической энергии, согласно теореме о вириале [37]. Точное решение, описывающее протекание такого процесса в гармоническом кристалле, получено в работе [38, 39]. В работах [40, 41] получено фундаментальное решение через полиномы Чебышева и функции Бесселя и исследовано распределение температуры внутри одномерного гармонического кристалла с учетом корреляций, связывающих положение частиц. В работе [42] получено решение для высокочастотных колебаний энергии в гармоническом кристалле наупругом основании и построены его асимптотики для случаев жесткой и мягкой подложки. В работе [43] исследованы высокочастотные тепловые процессы в векторных решетках. В [44] получено общее решение для задачи распространения тепла в 1D и 2D случаях для скалярных решеток, исследованы медленные и быстрые колебания, найдена скорость фронта теплового импульса.

В данной работе исследуется медленный процесс распространения тепла в кристалле, реализующийся после затухания быстрого переходного процесса [42, 45, 46]. Кристалл рассматривается как стохастическая система, случайность в которую вводится через начальные условия, а детерминированные динамические уравнения получаются для ковариаций скоростей и перемещений частиц. Подход, излагаемый в данной статье, основан на работах [38, 45, 47, 48] и позволяет получить достаточно простое динамическое уравнение переноса тепла в частных производных, которое содержит информацию о дисперсии и характере затухания тепловых волн в одномерном кристалле наупругом основании.

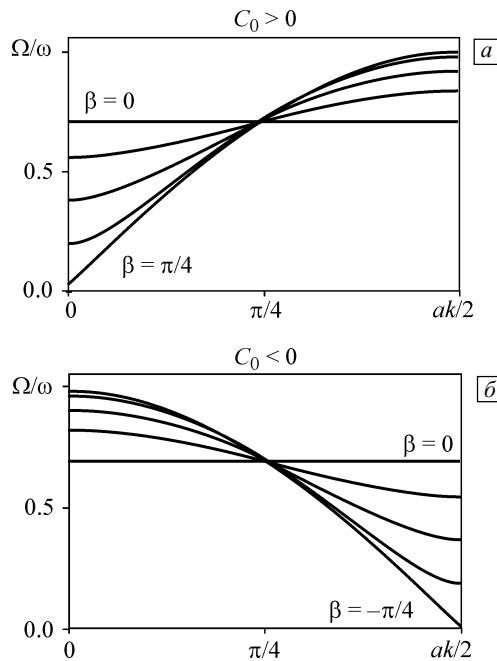


Рис. 2. Дисперсионная характеристика волн в цепочке на упругом основании при различных значениях параметра β , который меняется в пределах от 0 до $\pi/4$ с шагом $\pi/16$, для положительных $C_0 > 0$ (а) и отрицательных $C_0 < 0$ значений жесткости (б)

отсечек:

$$\omega_1 = \omega \sin\left(\beta + \frac{\pi}{4}\right), \quad \omega_2 = \omega \cos\left(\beta + \frac{\pi}{4}\right). \quad (40)$$

Зависимость групповой скорости от волнового числа примет вид

$$C_{\text{gr}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d\Omega}{dk} = \frac{a\omega \sin(2\beta) \sin(ak)}{2\sqrt{2} \sqrt{1 - \sin(2\beta) \cos(ak)}}. \quad (41)$$

Групповая скорость волн в цепочке на подложке всегда меньше, чем в цепочке без подложки, которой соответствует график при $\beta = \pi/4$ на рис. 3, а. При положительных и отрицательных значениях жесткости графики групповой скорости расположены антисимметрично. При $C_0 > 0$ групповая скорость положительна, при $C_0 < 0$ отрицательна и направлена противоположно фазовой. Максимальное по модулю значение групповой скорости в цепочке на подложке определяет максимальную скорость распространения энергии в системе, которая составляет

$$c_* = \frac{a |\omega_2 - \omega_1|}{2}.$$

Величина c_* пропорциональна разности верхней и нижней частот отсечек. Переходя к параметрам β и ω запишем выражение для скорости:

$$c_* = \frac{a\omega}{\sqrt{2}} |\sin \beta|. \quad (42)$$

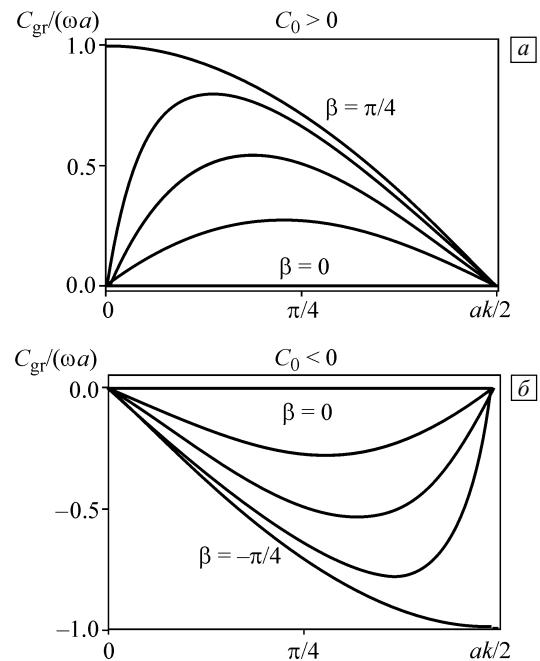


Рис. 3. Групповая скорость волн в цепочке на упругом основании при различных значениях параметра β , который меняется в пределах от 0 до $\pi/4$ с шагом $\pi/16$, для положительных $C_0 > 0$ (а) и отрицательных $C_0 < 0$ значений жесткости (б)

В случае отсутствия подложки, при $\omega_l = 0$ и, следовательно, $\beta = \pi/4$, скорость c_* принимает значение $c = a\omega_0$.

Параметр ω при различных допустимых значениях жесткости $-C_1/4 \leq C_0 < \infty$ и $0 \leq C_1 < \infty$ меняется в пределах $-14C_1/m \leq \omega < \infty$ и входит в выражения для дисперсионной зависимости (39), групповой скорости (41), а также максимальной по модулю групповой скорости волн (42) только как масштабный множитель. Таким образом интерес представляет только зависимость перечисленных величин от параметра β .

На рис. 4 показана зависимость максимальной по модулю групповой скорости (42) от параметра β . При отрицательных значениях параметра $-\pi/4 \leq \beta \leq 0$, соответствующих отрицательным значениям жесткости $-C_1/4 \leq C_0 < 0$, график зависимости ведет себя симметрично интервалу $0 \leq \beta \leq \pi/4$, соответствующему значениям положительной жесткости $0 \leq C_0 < \infty$. Видно, что в крайних точках графика $\beta = -\pi/4, \pi/4$ (т.е. при $C_0 = -C_1/4$ и $C_0/C_1 \rightarrow \infty$ соответственно) скорость c_* принимает свое наибольшее значение, равное скорости распространения длинных волн в цепочке без подложки: $c = a\omega_0$. В случае $\beta = 0$, соответствующем $C_0 = 0$, волны в цепочке не распространяются: $c_* = 0$.

Принятый в работе способ параметризации дисперсионных соотношений позволяет выделить две вели-

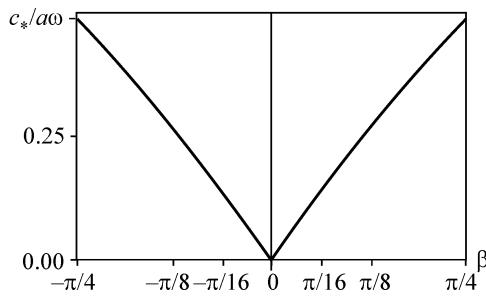


Рис. 4. Зависимость максимальной по модулю групповой скорости от параметра β

чины, одна из которых, ω , входит в соотношения дисперсии как множитель и является масштабным фактором, другая, β , определяет качественное поведение графиков зависимостей $\Omega(k, \beta)$, $C_{\text{gr}}(k, \beta)$ и $c_*(\beta)$. Обе величины единственным образом определяются из параметров модели (1), при этом выполняется соответствие между β , ω и другими использованными обозначениями, см. таблицу.

5. Заключение

В работе показано, что распространение короткого теплового возмущения в кристалле на упругом основании определяется уравнением баллистической теплопроводности того же вида, что и в кристалле без упругого основания [45]:

$$\ddot{T} + \frac{1}{t} \dot{T} = c_*^2 T'', \quad T|_{t=0} = T_0(x), \quad \dot{T}|_{t=0} = 0,$$

единственным параметром данного уравнения является величина $c_* = a |\omega_2 - \omega_1|/2$ — максимальная по модулю групповая скорость, т.е. максимальная скорость, с которой в кристалле на упругом основании может распространяться энергия. Данная величина пропорциональна модулю полуразности верхней ω_2 и нижней ω_1 частот отсечек и если жесткость подложки много больше жесткости цепочки ($C_1 \gg C_0$), то $c_* \approx c \sqrt{C_0/C_1}$, напротив, если $C_1 \ll C_0$, то $c_* \approx c$. Скорость распространения тепловой волны c_* в кристалле на упругом основании с положительной жесткостью C_0 всегда меньше, чем скорость тепловой волны c в кристалле без упругого основания $c_* < c$.

Установлено, что уравнение (31) справедливо как для положительных значений жесткости цепочки, так и для отрицательных, для которых выполняется соотношение $C_0 > -C_1/4$. Если жесткость цепочки отрицательна и выполняется условие $C_0 > -C_1/4$, то скорость тепловых волн остается вещественной величиной и может быть найдена по формуле (42).

Для иллюстрации получено точное решение уравнения (31) для параболического начального профиля температуры, моделирующее нагрев одномерного кристалла на подложке коротким лазерным импульсом.

За счет наличия дисперсии механических волн в цепочке на подложке их групповая скорость зависит от волнового числа k и соотношения жесткостей связей в цепочке и упругом основании β . Тепловой фронт распространяется с максимально возможной в системе групповой скоростью, которая зависит только от β . Таким образом, скорости тепловых и акустических волн при фиксированном значении β могут отличаться. Скорость переноса тепла может превышать скорость акустических волн, если жесткость связи между массами в цепочке положительна $C_0 > 0$, так и, наоборот, может быть меньше скорости акустических волн при $C_0 < 0$ (рис. 3).

Авторы выражают благодарность за всестороннее обсуждение работы А.К. Беляеву, О.В. Гендельману, В.А. Кузькину. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-11-00201).

Приложение А. Представление решения уравнения переноса кинетической энергии с помощью функций Бесселя

Докажем, что выполняется следующее равенство:

$$\frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos \left(\frac{a C_0 k t \sin \delta}{\sqrt{am(1+4C_0/C_1 \cos^2 \delta/2)}} \right) d\delta = J_0(c_* k t). \quad (\text{A1})$$

Пользуясь интегральным представлением функции Бесселя [59], преобразуем правую часть

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \cos \left(\frac{a C_0 k t \sin \delta}{\sqrt{am(1+4C_0/C_1 \cos^2(\delta/2))}} \right) d\delta = \\ = \int_0^\pi \cos(c_* k t \sin(\delta/2)) d\delta. \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

Выполним интегральное преобразование Лапласа правой и левой части равенства (A2) по времени $t \rightarrow \omega$:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \left(\frac{a(C_0 k \sin \delta)^2}{m\omega(1+4C_0/C_1 \cos^2(\delta/2))} \right)^{-1} d\delta = \\ = \int_0^\pi \frac{\omega}{c_*^2 k^2 \sin^2(\delta/2) + \omega^2} d\delta. \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

Вычислим определенный интеграл по δ в левой и правой части (A3). В предположении, что $c_* = a/2 \times \times |\omega_2 - \omega_1|$, полученное выражение сводится к алгебраическому тождеству, которое после упрощающих преобразований принимает вид

$$\begin{aligned} & \sqrt{\mu + 2\omega^2 - 2\sqrt{c^4 k^4 + \mu\omega^2 + \omega^4}} + \\ & + \sqrt{2(\mu + 2\omega^2) - 2c^2 k^2 \sqrt{\lambda^2 - 4}} = \\ & = \sqrt{\mu + 2\omega^2 + 2\sqrt{c^4 k^4 + \mu\omega^2 + \omega^4}}, \quad \mu = c^2 k^2 \lambda. \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

