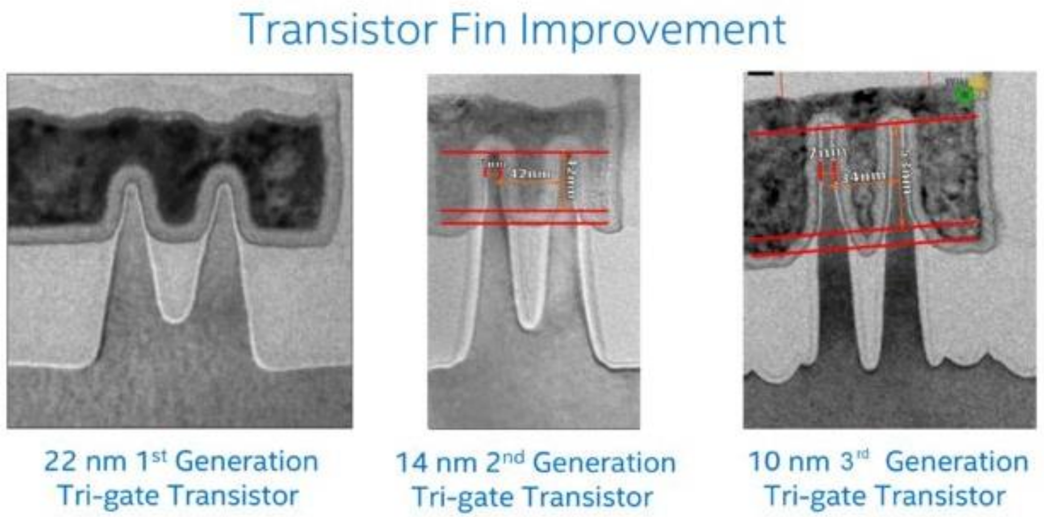
Нестационарные волновые процессы в дискретных и континуальных средах

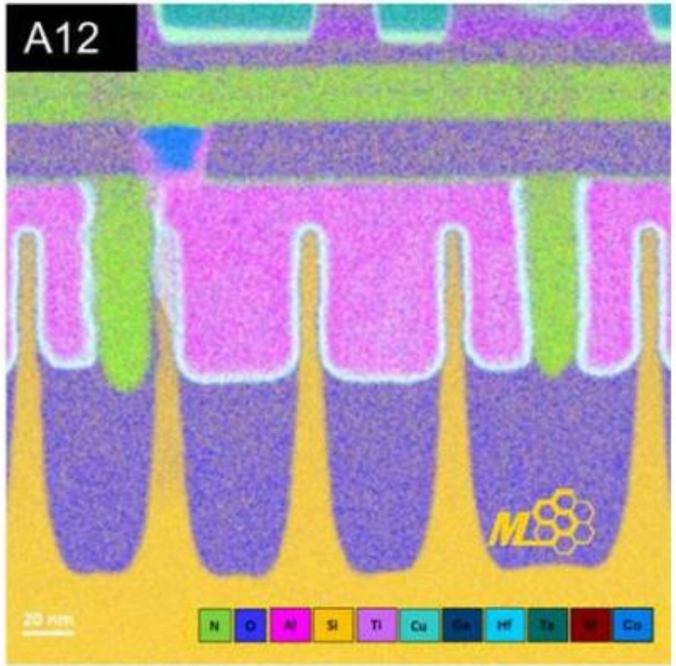
Выполнил: студент гр. 5040103/20101 И.Н. Трунова

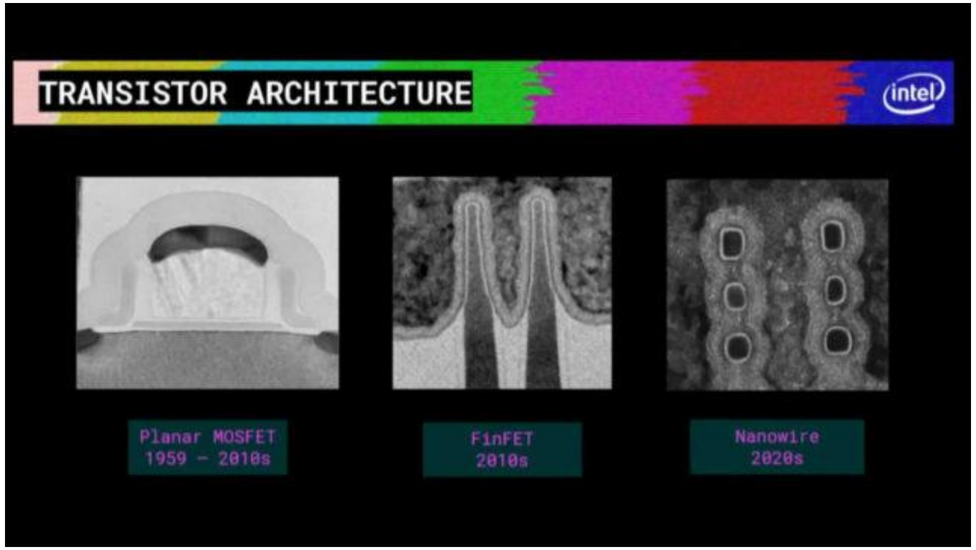
Научный руководитель: д.ф.-м.н., доцент, чл.-корр. РАН А.М. Кривцов,

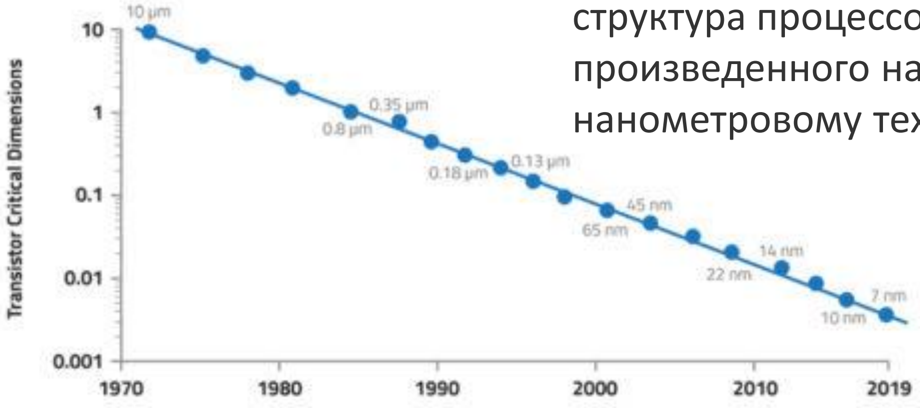
профессор ВШТМиМФ, д.ф.-м.н. В.А. Кузькин

Актуальность: волновое распространение энергии на нано- и микроуровнях. Охлаждение нанопроцессоров









структура процессора Apple A12, произведенного на заводе TSMC по 7-нанометровому техпроцессу.

1. Баллистическая термоупругость нелинейных цепочек

Уравнение движения и начальные условия

Уравнение движения частицы

$$m\dot{v}_n = F_n - F_{n-1},$$

$$F_n = \Pi'(a + \epsilon_n), \qquad \epsilon_n = u_{n+1} - u_n,$$

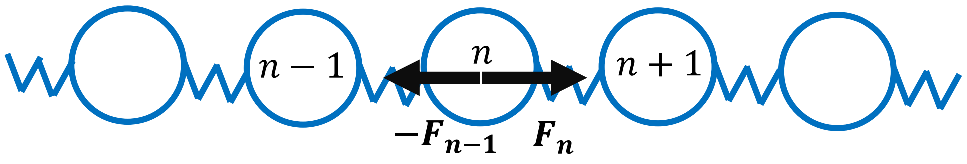
Периодические граничные условия

$$u_n = u_{n+N}$$

Начальные условия

$$u_n = 0, \qquad v_n = \xi_n \sqrt{\frac{2k_B}{m} T_0(n)},$$

$$\langle \xi_n \rangle = 0, \qquad \langle \xi_k \xi_n \rangle = \delta_{kn},$$



a – равновесное расстояние между частицами,
u_n , v_n – перемещение и скорость частицы,
$F(\epsilon)$ – сила взаимодействия между соседними частицами,
$\Pi(\epsilon)$ – потенциал взаимодействия

ξ_n – некоррелированные случайные числа с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией,
δ_{kn} – дельта Кронекера,
$T_0(n)$ – начальное распределение температуры по цепочке

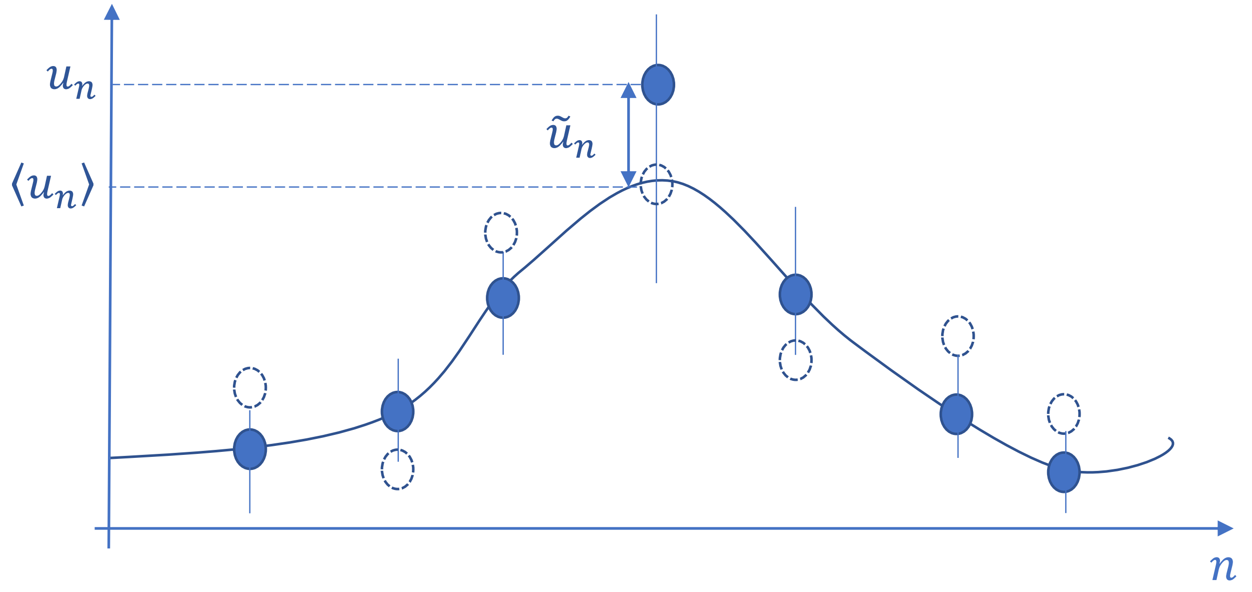
Переход к макроскопическому описанию

Определение макроскопических перемещений

$$\boxed{u(na,t) = \langle u_n \rangle}$$

Определение кинетической температуры

$$\boxed{k_B T_n = m\langle \tilde{v}_n^2 \rangle,}$$



$\langle \ldots \rangle$ – математическое ожидание
(в моделировании – среднее по реализациям)

$\langle u_n \rangle$ – механическое перемещение,

$\tilde{u}_n$ – тепловое перемещение,

$u_n = \langle u_n \rangle + \tilde{u}_n$ – полное перемещение.

k_B – постоянная Больцмана,

$\tilde{v}_n$ – скорость теплового движения,

$\langle \ldots \rangle$ – математическое ожидание.

A. M. Krivtsov and V. A. Kuzkin, in Encyclopedia of Continuum Mechanics, edited by H. Altenbach and A. Ochsner (Springer, Berlin, 2018)

Переход к макроскопическому описанию

Уравнение термоупругости

$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'),$$

Уравнение баллистической теплопроводности

$$T = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} T_0(x + v_g(p)t)\,\mathrm{d}p,$$

Начальные условия

$$u(x,0) = 0, \qquad v(x,0) = 0, \qquad T(x,0) = T_0(x).$$

Связь макро- и микропараметров

$$\rho = \frac{m}{a}, \quad C = \Pi''(a) = 72\frac{D}{a^2}, \quad E = Ca,$$

$$c_s = a\sqrt{\frac{C}{m}}, \quad \beta = -\frac{\Gamma k_B}{Ea}, \quad \Gamma = -\frac{\Pi'''(a)}{a\Pi''(a)} = 10.5,$$

Для потенциала Леннарда-Джонса

$u(x,t)$ – поле перемещений, $T(x,t)$ – поле температуры, $T_0(x)$ – начальное поле температуры, v_g – групповая скорость цепочки, c_s – скорость звука, E – модуль Юнга, ρ – погонная плотность, β – коэффициент теплового расширения.

A.M. Krivtsov. Deformation and fracture of solids with microstructure, 2007.

Общее решение задачи баллистической термоупругости

(Для цепочки с взаимодействием ближайших соседей)

$$\ddot{u} = c_s^2 (u'' - \beta T'),$$

$$T = \frac{1}{2\,\pi} \int_0^{2\,\pi} T_0(x + v_g(p)t)\, dp,$$

Начальная температура

$$T(0, x) = T_0(x)$$

Перемещения

$$u(x,t) = \frac{\beta c_s}{\pi} \int_{-t}^{t} T_0(x - c_s\tau) \frac{\tau}{\sqrt{t^2 - \tau^2}}\, \mathrm{d}\tau$$

$$u(x,t) = -\frac{\beta t}{2\pi} \int_0^{2\pi} v_g(p) T_0\left(x + v_g(p)t\right)\, \mathrm{d}p,$$

$v_g(p) = c_s \cos \frac{p}{2}$ – групповая скорость цепочки Гука

Перемещение пропорционально локальному тепловому потоку

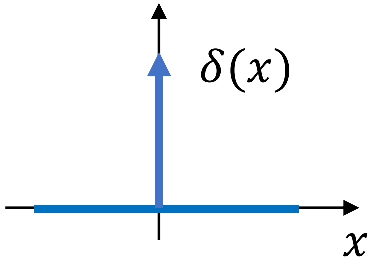
Фундаментальное решение

$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'),$$

$$T = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} T_0(x + v_g(p)t)\,dp,$$

Начальная температура

$$T_0(x) = A\delta(x),$$



Перемещения

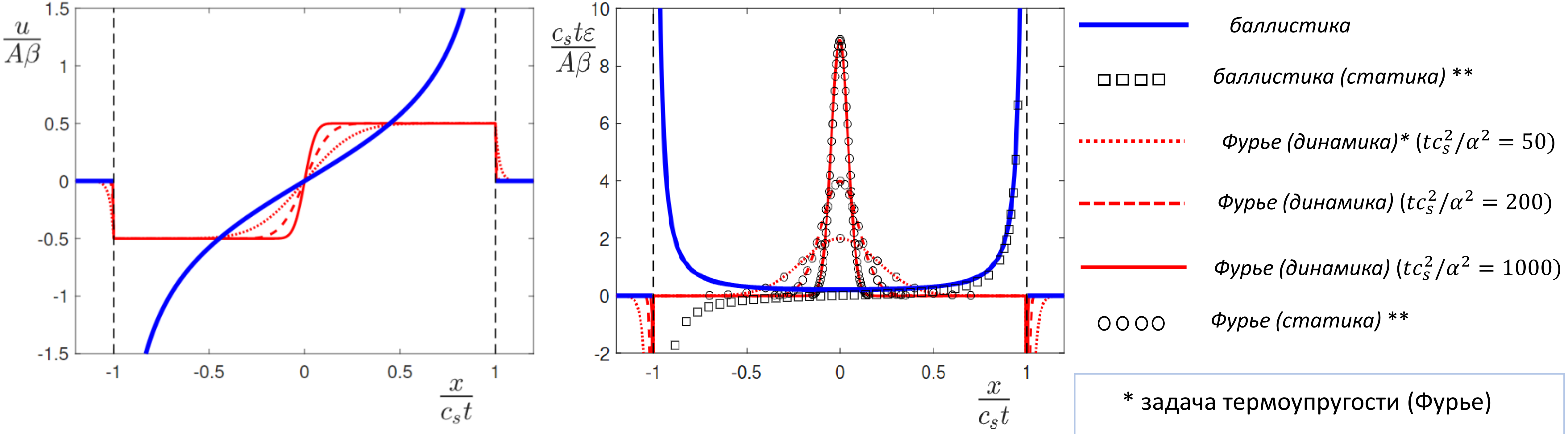
$$u(x/c_s t) = \begin{cases} \dfrac{A\beta}{\pi}\dfrac{x/c_s t}{\sqrt{1-(x/c_s t)^2}}, & |x/c_s t| < 1, \\ 0, & |x/c_s t| \geqslant 1. \end{cases}$$

Деформации

$$\varepsilon(x/c_s t, t) = \begin{cases} \dfrac{A\beta}{\pi c_s t}\dfrac{1}{(1-(x/c_s t)^2)^{3/2}}, & |x/c_s t| < 1, \\ 0, & |x/c_s t| \geqslant 1. \end{cases}$$

Фундаментальное решение

Перемещения   Деформации



(a)   (b)

* задача термоупругости (Фурье)

$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'), \quad \dot{T} - \alpha^2 T'' = 0,$$

**статическая задача

$$\varepsilon_{\text{static}} = \beta T'$$

Для теплопроводности Фурье решения стационарной
и нестационарной задач при большом времени совпадают,
Для баллистической – качественно отличаются

Ступенчатое распределение температуры

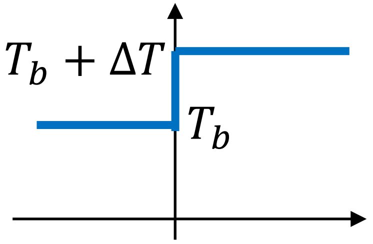
1. Ступенька. Континуальное решение

$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'),$$

$$T = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} T_0(x + v_g(p)t)\,dp,$$

Начальная температура

$$T_0(x) = T_b + \Delta T H(x),$$



Перемещения

$$u(x/c_s t, t) = \begin{cases} -\dfrac{\Delta T \beta c_s t}{\pi}\sqrt{1-(x/c_s t)^2}, & |x/c_s t| < 1, \\ 0, & |x/c_s t| \geqslant 1. \end{cases}$$

Деформации

$$\varepsilon(x/c_s t) = \begin{cases} \dfrac{\Delta T \beta}{\pi}\dfrac{x/c_s t}{\sqrt{1-(x/c_s t)^2}}, & |x/c_s t| < 1, \\ 0 & |x/c_s t| \geqslant 1. \end{cases}$$

Бесконечные деформации на фронте!

1. Ступенька. Континуальное решение

Перемещения

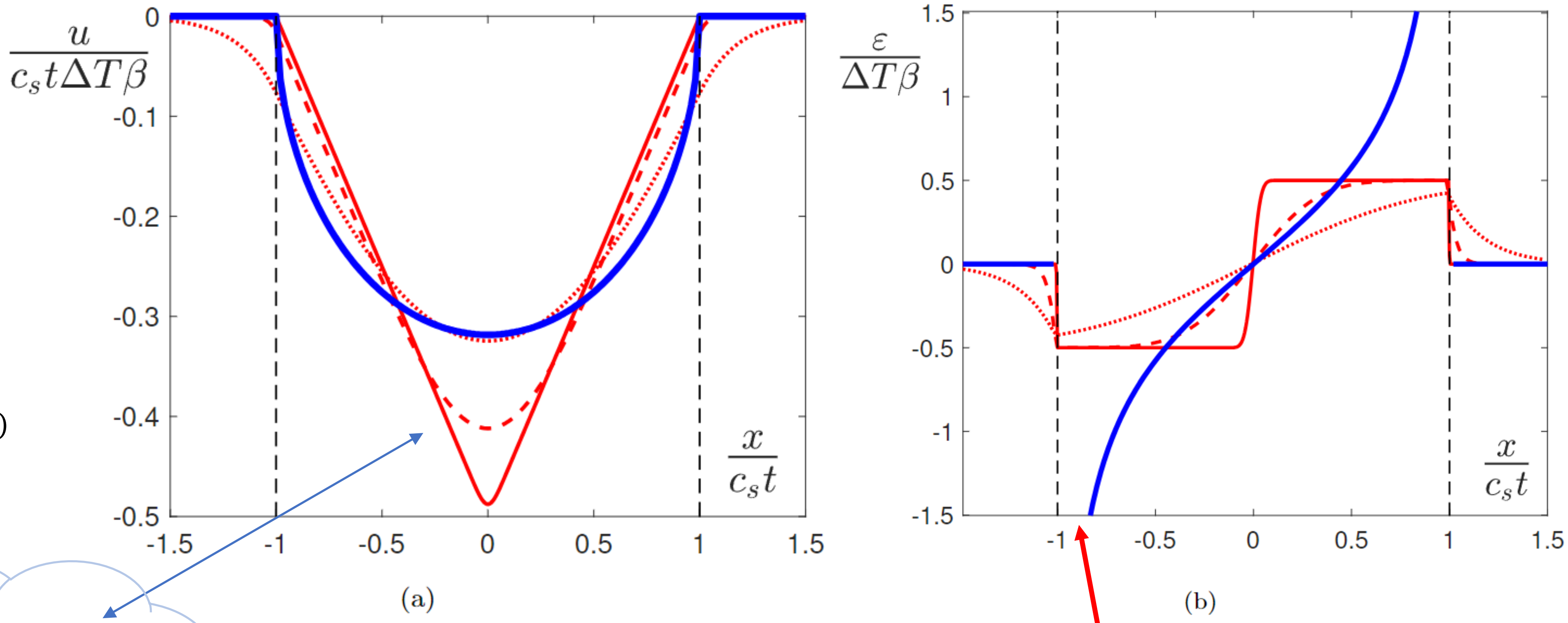
Деформации

баллистика

Фурье $(tc_s^2/\alpha^2 = 5)$

Фурье $(tc_s^2/\alpha^2 = 30)$

Фурье $(tc_s^2/\alpha^2 = 2000)$



Бесконечные деформации на фронте!

2. Ступенька. Дискретное решение для температуры

$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'),$$

$$\cancel{T = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} T_0(x + v_g(p)t)\,dp,}$$

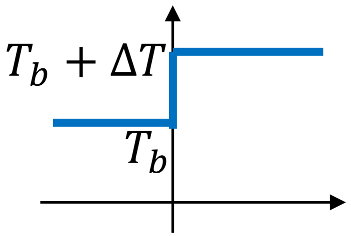
Дискретное решение для линейной цепочки

$$T_n(t) = T_b + \Delta T \sum_{k=-2n}^{+\infty} J_k^2(2\omega_0 t),$$

$$T(x,t) = T_b + \Delta T \int_{-2x/a}^{+\infty} \mathrm{J}_y^2(2\omega_0 t)\,\mathrm{d}y,$$

Начальная температура

$$T_0(x) = T_b + \Delta T H(x),$$



Деформации

$$\varepsilon(x,t) = -\frac{\beta}{2c_s}\int_0^t \Big[T'\left(x + c_s(t-\tau), \tau\right) -$$

$$-T'\left(x - c_s(t-\tau), \tau\right)\Big]\,\mathrm{d}\tau,$$

$$T'(x,t) = \frac{2\Delta T}{a}\mathrm{J}_{2x/a}^2(2\omega_0 t).$$

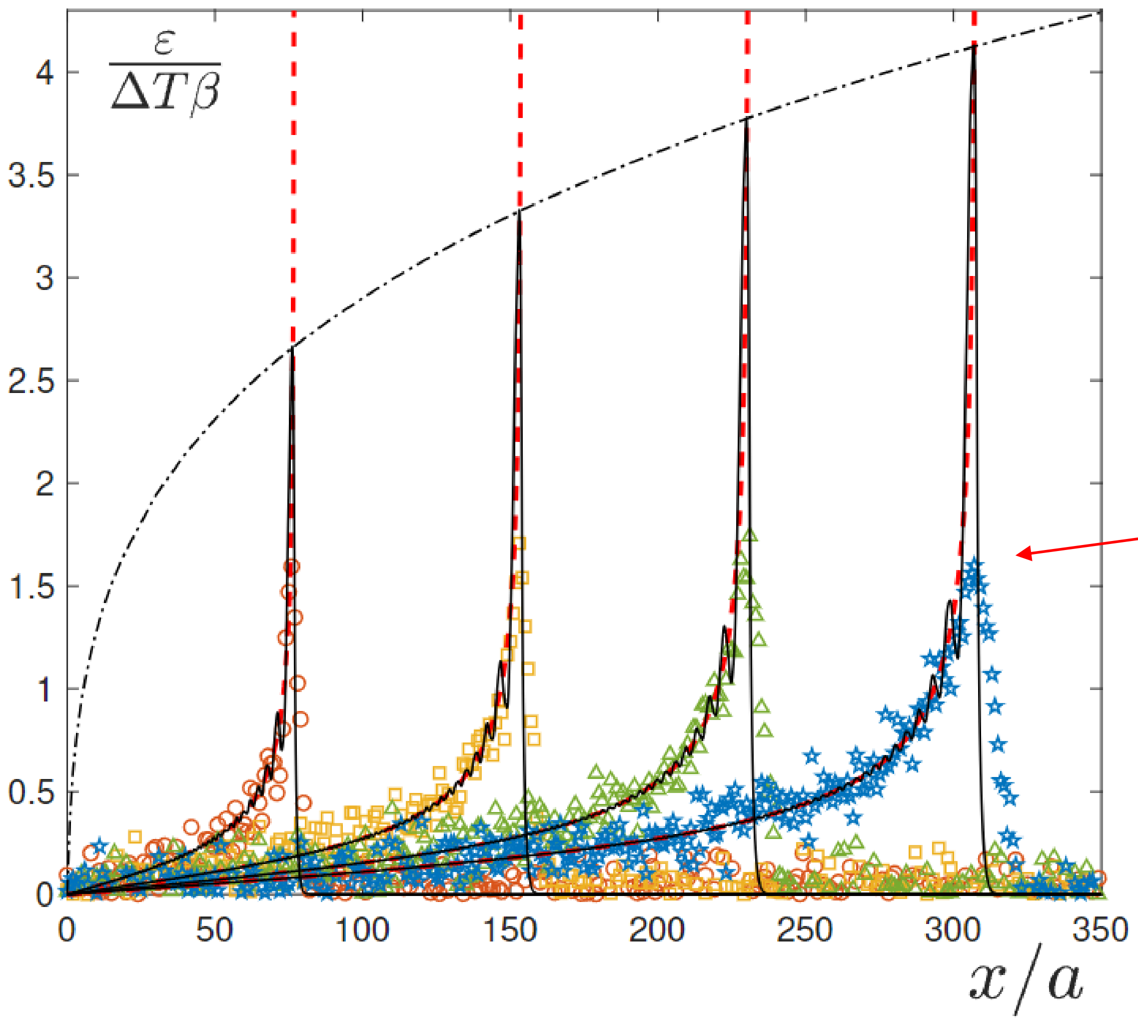
$\mathrm{J}_\nu(z)$ — функция Ангера:

$$\mathrm{J}_\nu(z) = \int_0^\pi \cos(\nu\omega - z\sin\omega)\,\mathrm{d}\omega.$$

A.A. Sokolov, Wolfgang H. Muller, A.V. Porubov, S.N. Gavrilov, Heat conduction in 1D harmonic crystal: Discrete and continuum approaches, International Journal of Heat and Mass Transfer, 176,

2. Ступенька. Дискретное решение для температуры

Деформации



Неограниченный рост деформации на фронте

$$\varepsilon(c_s t, t) \sim t^{1/3}$$

Плохое совпадение на фронте

Максимальная деформация в эксперименте выходит на постоянное значение

3. Ступенька. Влияние наклона

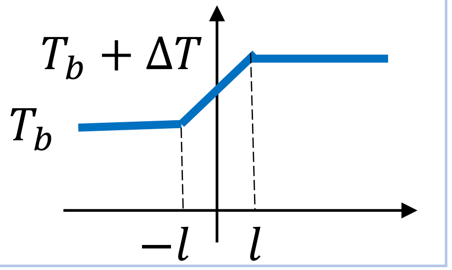
$$\ddot{u} = c_s^2(u'' - \beta T'),$$

$$T = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} T_0(x + v_g(p)t)\,dp,$$

Начальная температура

$$T_0(x) = \begin{cases} T_b, & x \leqslant -l, \\ T_b + \dfrac{\Delta T}{2}\left(1 + \dfrac{x}{l}\right), & -l < x < l, \\ T_b + \Delta T, & x \geqslant l, \end{cases}$$

$$\cancel{T_0(x) = T_b + \Delta T H(x),}$$



Деформации

при $x > 0,\ t < l/c_s$

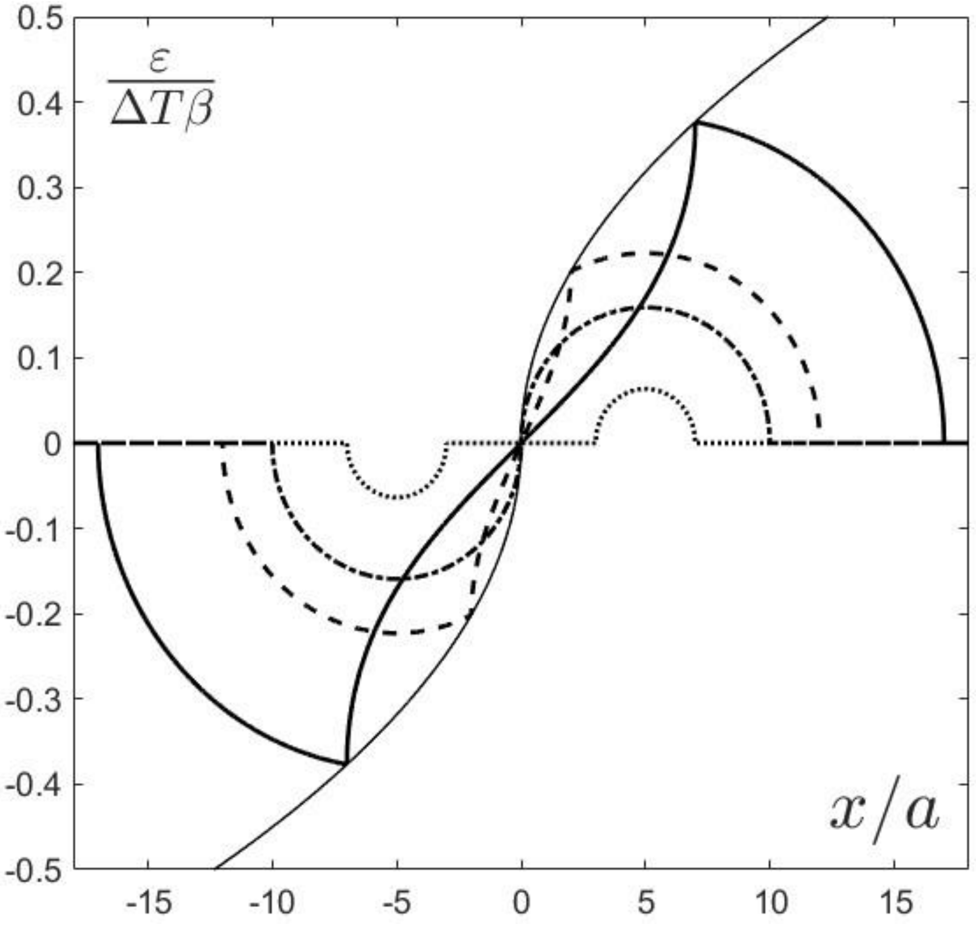
$$\varepsilon(x,t) = \begin{cases} \dfrac{\Delta T \beta c_s t}{2\pi l}\sqrt{1 - \left(\dfrac{x-l}{c_s t}\right)^2}, & |x - l| < c_s t, \\ 0, & |x - l| \geqslant c_s t, \end{cases}$$

при $x > 0,\ t > l/c_s$:

$$\varepsilon(x,t) = \begin{cases} \dfrac{\Delta T \beta c_s t}{2\pi l}\left[\sqrt{1 - \left(\dfrac{x-l}{c_s t}\right)^2} - \sqrt{1 - \left(\dfrac{x+l}{c_s t}\right)^2}\right], & x \leqslant c_s t - l, \\ \dfrac{\Delta T \beta c_s t}{2\pi l}\sqrt{1 - \left(\dfrac{x-l}{c_s t}\right)^2}, & c_s t - l < x < c_s t + l, \\ 0, & x \geqslant c_s t + l. \end{cases}$$

3. Ступенька. Влияние наклона

Деформации ($l/a = 5$)

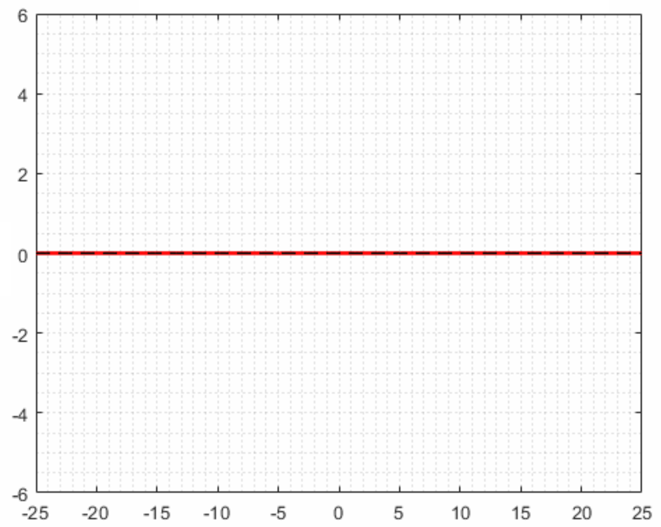


Огибающая для максимумов

$$\varepsilon_e(x) = \frac{\beta\Delta T}{\pi\sqrt{l}}\sqrt{x}.$$

Зависимость максимальной деформации от времени

$$\varepsilon(c_s t - l, t) = \frac{\beta\Delta T}{\pi\sqrt{l}}\sqrt{c_s t - l}.$$

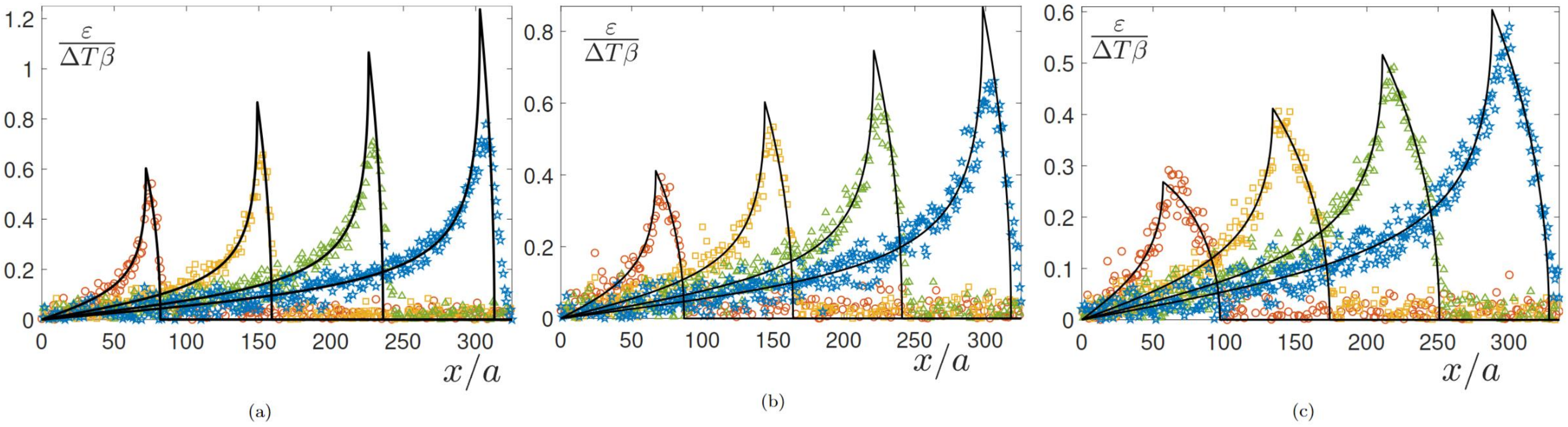


Рост максимальной деформации

$\varepsilon_{\max} \sim \sqrt{t}$

«Наклонная» ступенька. Сравнение с численным моделированием

$l/a = 5$ $l/a = 10$ $l/a = 20$



Показаны моменты времени $\omega_0 t = 77$ (красные круги), $\omega_0 t = 154$ (желтые крестики), $\omega_0 t = 231$ (зеленые квадраты), $\omega_0 t = 308$ (синие треугольники). Черными сплошными линиями показаны соответствующие аналитические решения.

Синусоидальное распределение температуры

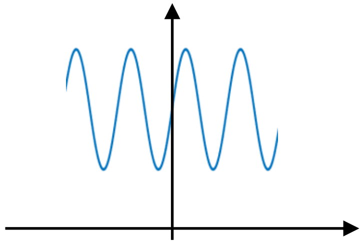
Баллистический резонанс в цепочке Леннарда-Джонса

$$\ddot{u} = c_s^2 (u'' - \beta T'),$$

$$T = \frac{1}{2\,\pi} \int_0^{2\,\pi} T_0(x + v_g(p) t)\, dp,$$

Начальная температура

$$T_0(x) = T_b + \Delta T \sin qx$$



Перемещения

$$u(x,t) = z(t) \cos qx, \qquad z(t) = -\frac{\beta \Delta T}{q} \omega t J_1(\omega t).$$

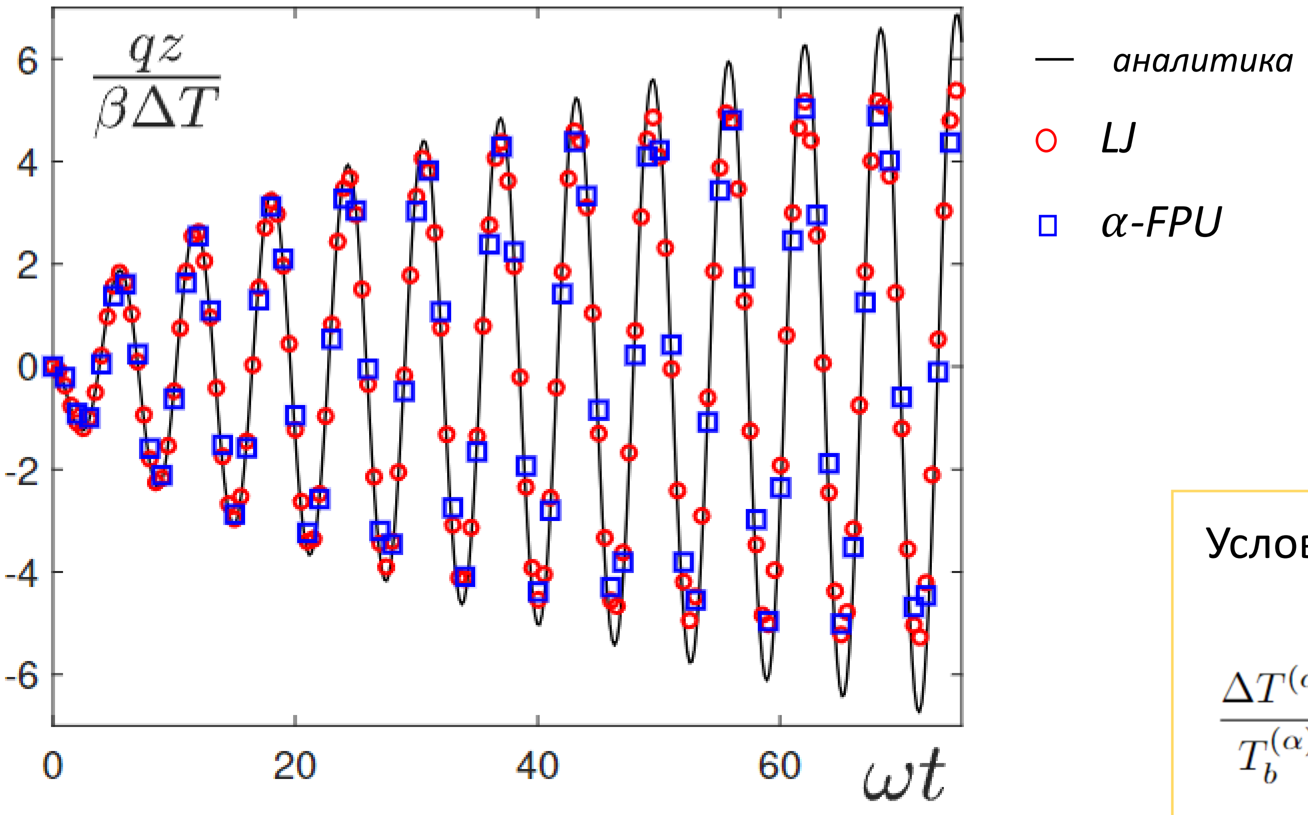
асимптотика $(\omega t \to \infty)$

$$z(t) \approx -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\beta \Delta T}{q} \sqrt{\omega t} \cos(\omega t - 3\pi/4).$$

Vitaly A. Kuzkin and Anton M. Krivtsov, Ballistic resonance and thermalization in the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature, Physical Review, E 101, 042209 (2020)

1. Влияние потенциала взаимодействия. Сравнение результатов для цепочек Леннарда-Джонса и α-FPU

Амплитуда перемещений



Потенциал α-FPU

$$\Pi(r) = C\,(r-a) + \alpha(r-a)^3$$

Потенциал Леннарда-Джонса

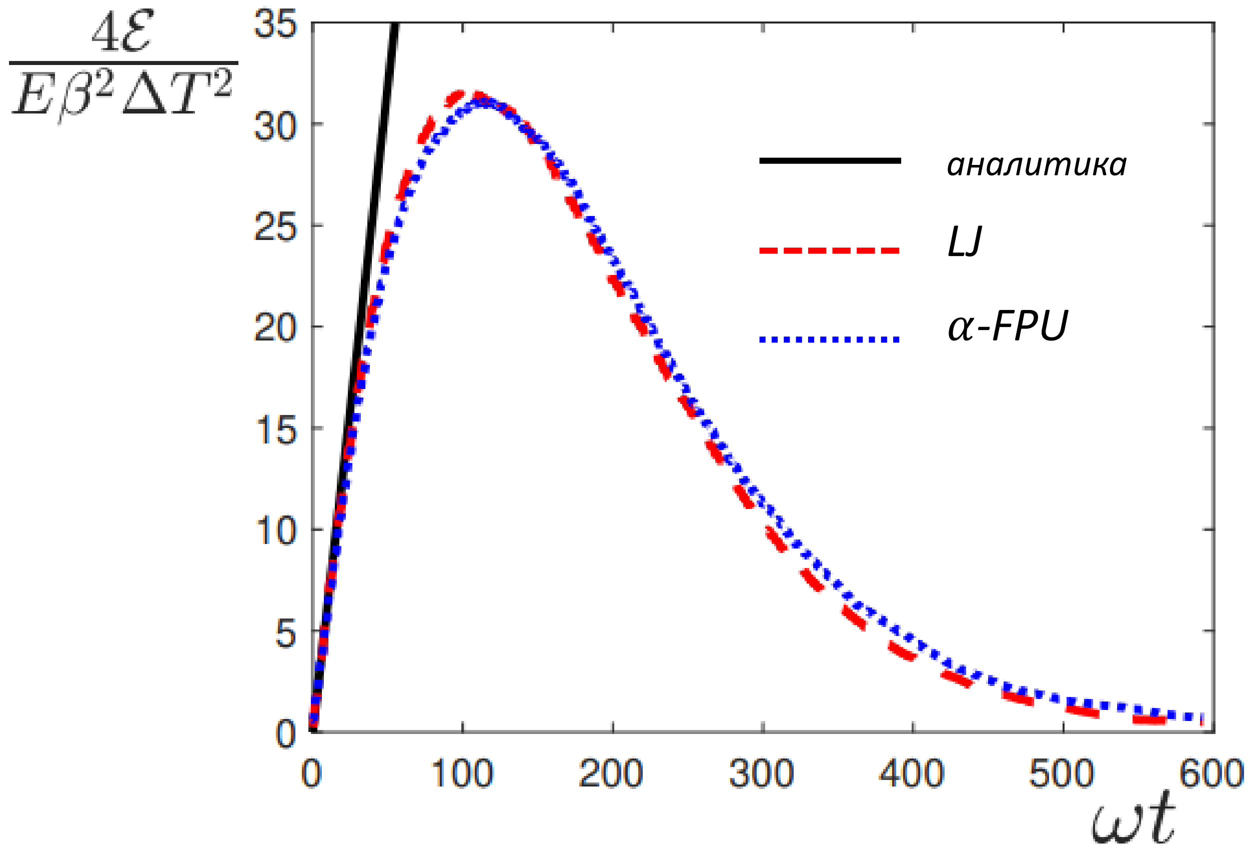
$$\Pi(r) = D\left[\left(\frac{a}{r}\right)^{12} - \left(\frac{a}{r}\right)^{6}\right],$$

Условие одинаковой нелинейности цепочек

$$\frac{\Delta T^{(\alpha)}}{T_b^{(\alpha)}} = \frac{\Delta T^{(LJ)}}{T_b^{(LJ)}}, \qquad \frac{\alpha a}{C}\sqrt{\frac{k_B T_b^{(\alpha)}}{Ca^2}} = -\frac{7}{4\sqrt{2}}\sqrt{\frac{k_B T_b^{(LJ)}}{D}}.$$

1. Влияние потенциала взаимодействия.
Сравнение результатов для цепочек Леннарда-Джонса и α-FPU

Механическая энергия



$$\mathcal{E} = \frac{1}{2L}\int_0^L \left(\rho v^2 + E u'^2\right) \mathrm{d}x = \mathcal{E}_* \omega^2 t^2 \left(J_0^2 + J_1^2\right),$$

асимптотика $(\omega t \to \infty)$

$$\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E}_* \omega t/\pi,$$

линейный рост механической энергии

$L = 2\pi/q$ – длина волны, ρ – плотность,

$\mathcal{E}_* = E\beta^2\Delta T^2/4$, E – модуль Юнга

$J_0,\ J_1$ – функции Бесселя

При теплопроводности Фурье

$$\mathcal{E}(\infty) = \frac{E\beta^2\Delta T^2}{4\left(q^2\alpha^4/c_s^2 + 1\right)}.$$

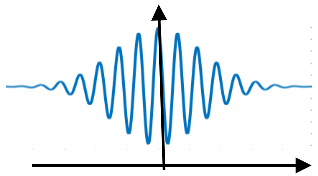
Рост механической энергии ограничен

2. Влияние ограниченности синуса

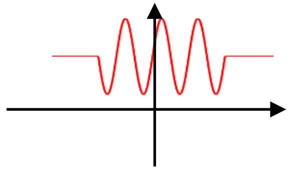
$$\ddot{u} = c_s^2 (u'' - \beta T'),$$

$$T = \frac{1}{2\,\pi} \int_0^{2\,\pi} T_0(x + v_g(p)t)\, dp,$$

Начальная температура



$$T_0(x) = T_b + A(x)\cos(qx),$$



где $A(x)$ — медленно меняющаяся амплитуда.

Приближенное решение для перемещений

$(\omega t \to \infty)$

$$u(x,t) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\beta}{q} \sqrt{\omega t} \left[A(x - c_s t) \cos\left(qx - \omega t + \pi/4\right) - \right.$$
$$\left. - A(x + c_s t) \cos\left(qx + \omega t - \pi/4\right) \right],$$

Приближенное решение для температуры

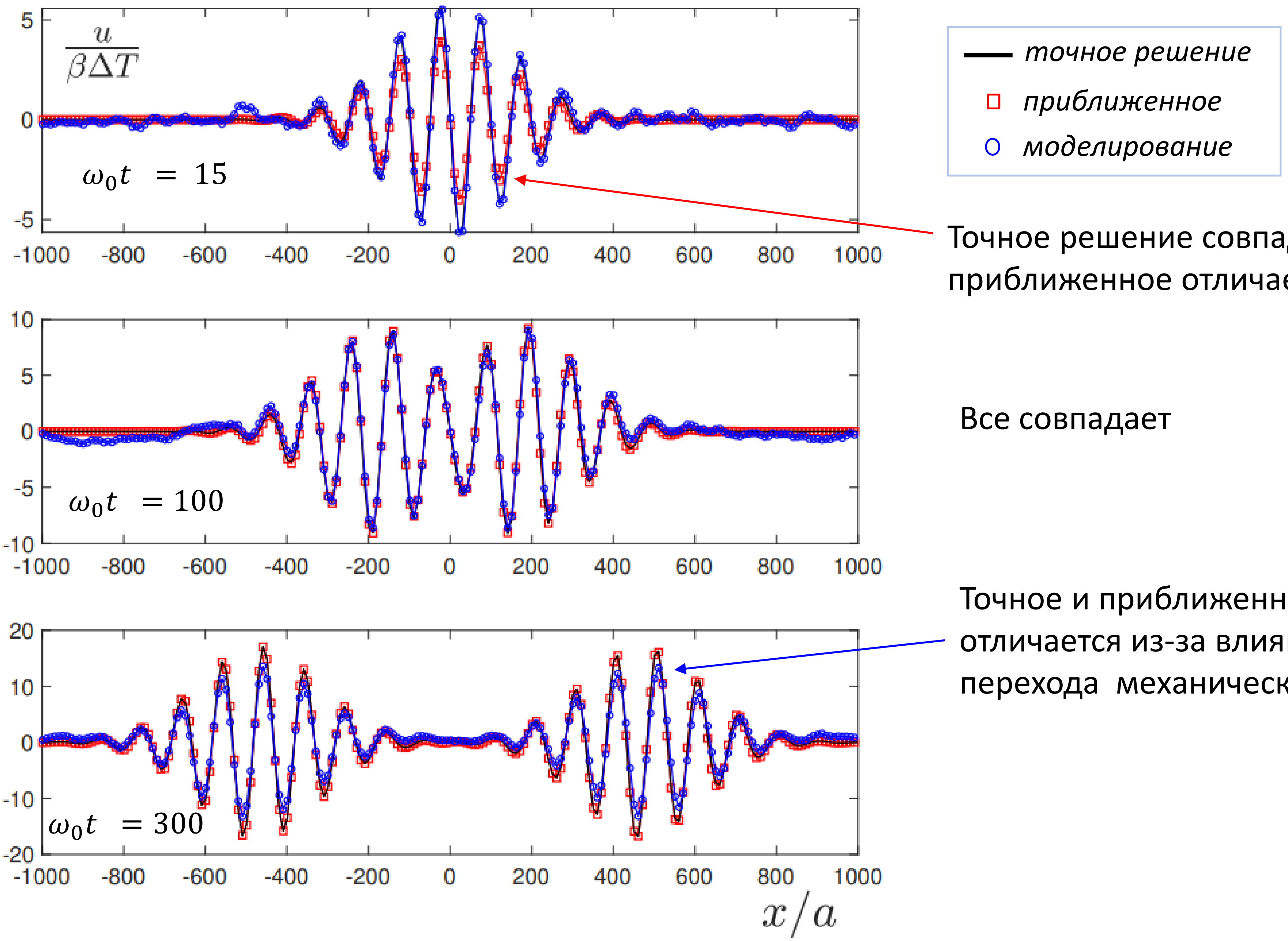
$(\omega t \to \infty)$

$$T(x,t) \approx T_b + \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega t}} \left[A(x + c_s t) \sin\left(qx + \omega t + \frac{\pi}{4}\right) - \right.$$
$$\left. - A(x - c_s t) \sin\left(qx - \omega t - \frac{\pi}{4}\right) \right].$$

$$\omega = q\, c_s$$

Начальная температура $T_0(x) = T_b + \Delta T e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \cos qx$

Перемещения



Точное решение совпадает с моделированием, приближенное отличается

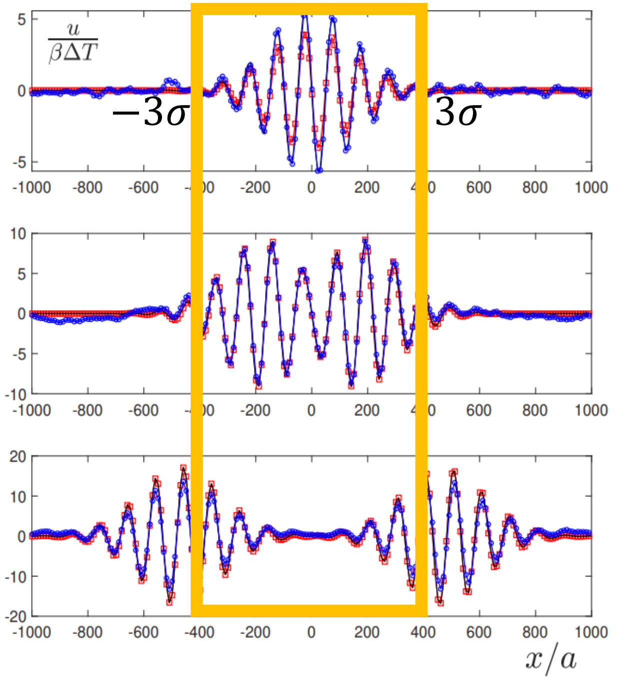
Все совпадает

Точное и приближенное совпадают, эксперимент отличается из-за влияния нелинейности и обратного перехода механической энергии в тепловую

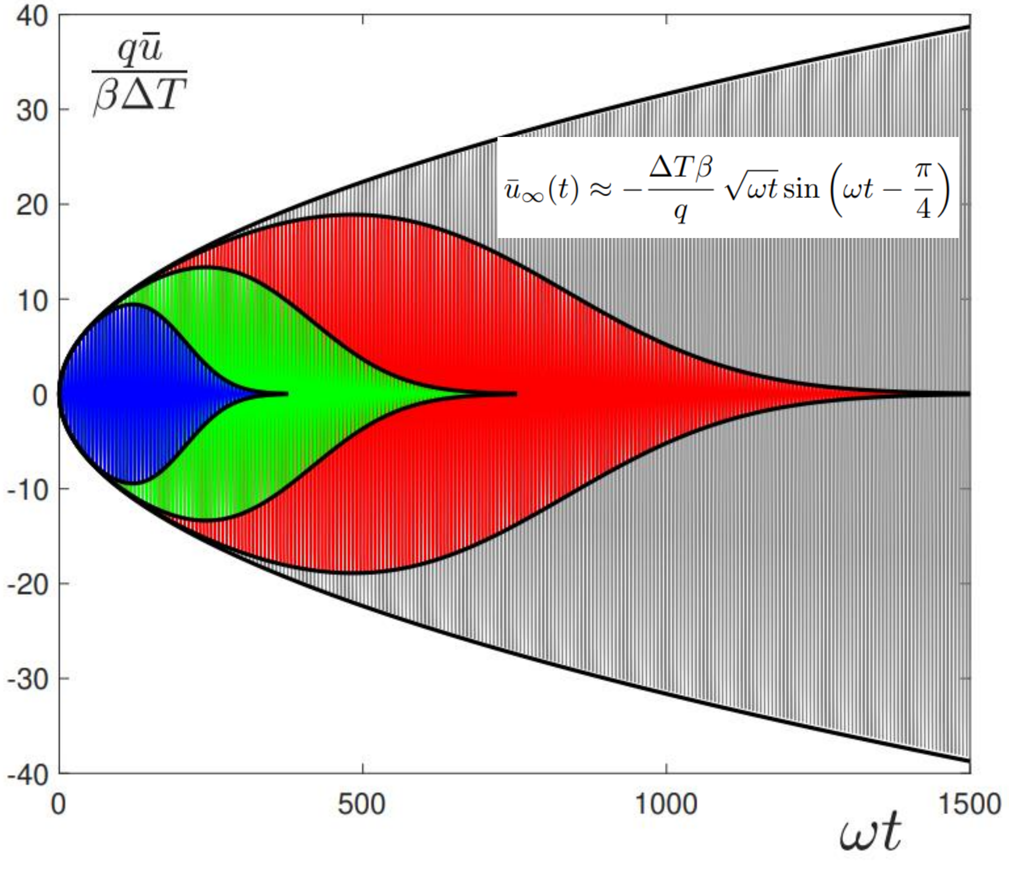
Будет ли баллистический резонанс при ограниченном синусе?

«Средняя амплитуда перемещений»
в области начального возмущения

$$\bar{u}(t) = \frac{1}{\sigma}\int_{-3\sigma}^{3\sigma} u(x,t)\cos(qx)\,\mathrm{d}x.$$



$$\bar{u}(t) = -\frac{\Delta T\beta}{2q}\sqrt{\omega t}\left[\mathrm{erf}\left(\frac{3}{\sqrt{2}} - \frac{\omega t}{q\sigma}\right) + \mathrm{erf}\left(\frac{3}{\sqrt{2}} + \frac{\omega t}{q\sigma}\right)\right]\sin\left(\omega t - \frac{\pi}{4}\right)$$



$\sigma/\lambda = 10$

$\sigma/\lambda = 20$

$\sigma/\lambda = 40$

$\sigma/\lambda \to \infty$

$\lambda = 2\pi/q$ – длина волны синуса

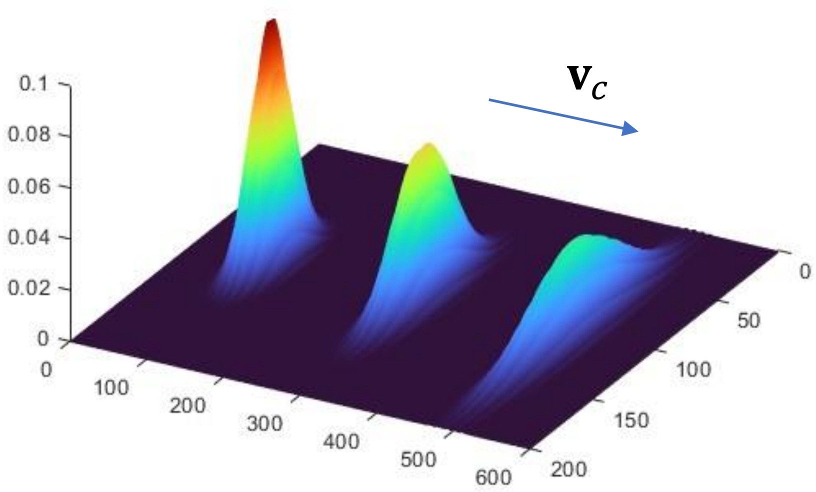
$\omega = qc_s$

Сначала амплитуда растет, затем убывает из-за разбегания волн

2. Дисперсия энергии при движении локализованного возмущения

Цель

- Описать изменение формы энергетического возмущения, движущегося в упругой среде (не решая уравнения динамики среды)



A.M. Krivtsov, Dynamics of matter and energy, Z Angew Math Mech. e202100496 (2022)

J.A. Baimova, N.M. Bessonov, A.M. Krivtsov, Motion of localized disturbances in scalar harmonic lattices, Phys. rev. E (2023)

Уравнение движения

Дискретная среда

$$m\,\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}t^2} = \sum_\alpha C_\alpha\Big(u(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha) - u(\mathbf{r})\Big),$$

Континуальная среда

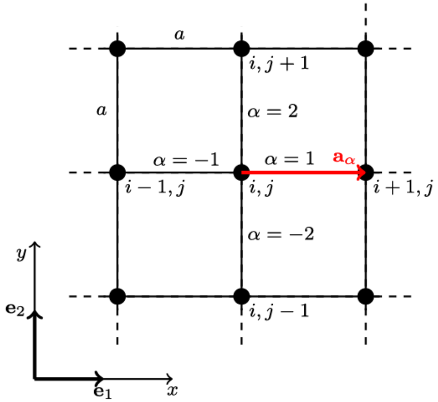
$$\rho\ddot{u} = \mathbf{C}\cdot\cdot\nabla\nabla u,$$

$\mathbf{C}$ — тензор жесткости, ρ — плотность среды.

Локальная и удельная энергия

$$\epsilon(\mathbf{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{2}v^2(\mathbf{r}) + \frac{1}{4}\sum_\alpha C_\alpha\Big(u(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha) - u(\mathbf{r})\Big)^2$$

Энергия, соответствующая узлу решетки



$$\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\left(\rho\dot{u}^2 + \nabla u\cdot\mathbf{C}\cdot\nabla u\right)$$

Энергия, приходящаяся на единицу пространственного объема

J.A. Baimova, N.M. Bessonov, A.M. Krivtsov, Motion of localized disturbances in scalar harmonic lattices, Phys. rev. E (2023)

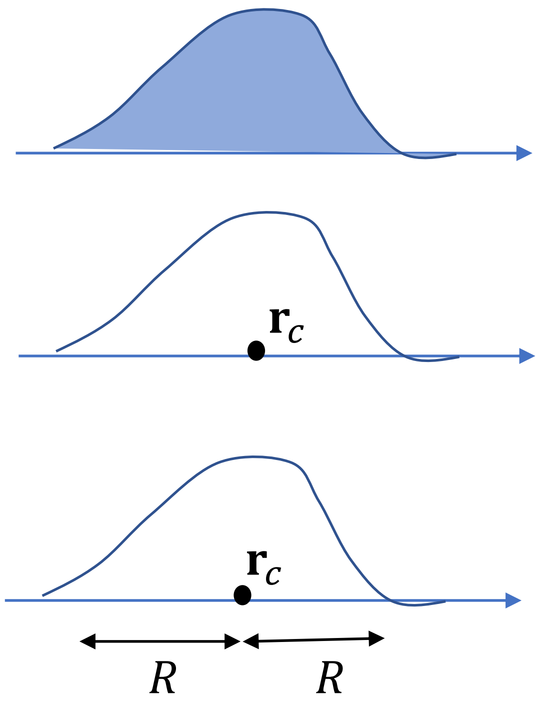
Глобальные энергетические характеристики

энергия	поток энергии	суперпоток энергии
$E \stackrel{\text{def}}{=} M,$	$\mathbf{h} \stackrel{\text{def}}{=} \dfrac{\mathrm{d}\mathbf{M}_1}{\mathrm{d}t},$	$\mathbf{G} \stackrel{\text{def}}{=} \dfrac{1}{2}\dfrac{\mathrm{d}^2\mathbf{M}_2}{\mathrm{d}t^2},$

$$\epsilon = -\nabla \cdot \boldsymbol{h}$$
$$\boldsymbol{h} = -\nabla \cdot \boldsymbol{g}$$

Дискретная среда

$$M \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}),$$
$$\mathbf{M}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r}),$$
$$\mathbf{M}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r}),$$

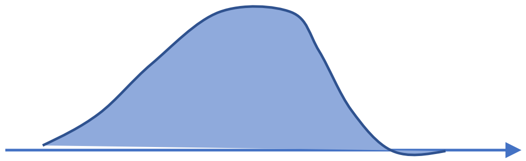


Континуальная среда

$$M \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V(\mathbf{r}),$$
$$\mathbf{M}_1 \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V(\mathbf{r}),$$
$$\mathbf{M}_2 \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} \mathbf{r}\mathbf{r}\epsilon(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V(\mathbf{r}),$$

Энергия

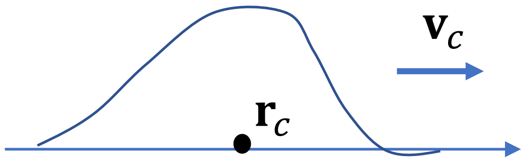
$$\boxed{E = \mathrm{const}}$$



Энергетический центр и его скорость

$$\boxed{\mathbf{h} = \mathrm{const}}$$

$$\mathbf{r}_c \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{\mathbf{M}_1}{E}, \qquad \mathbf{v}_c \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{\mathbf{h}}{E}.$$



$$\mathbf{h} = \mathrm{const}, \quad \Rightarrow \quad \mathbf{r}_c = \mathring{\mathbf{r}}_c + \mathbf{v}_c t,$$

Энергетический центр движется с постоянной скоростью

J.A. Baimova, N.M. Bessonov, A.M. Krivtsov, Motion of localized disturbances in scalar harmonic lattices, Phys. rev. E (2023)

Суперпоток энергии

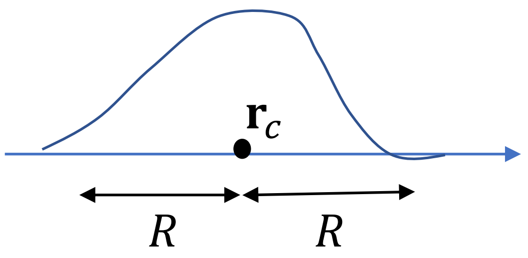
Центральный суперпоток

$$\mathbf{G}_c \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{M}_c}{\mathrm{d}t^2}$$

Центральный момент

$$\mathbf{M}_c \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{\mathbf{r}} (\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)\epsilon(\mathbf{r}),$$

$$\mathbf{M}_c \stackrel{\mathrm{def}}{=} \int_{\mathbf{r}} (\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)(\mathbf{r}-\mathbf{r}_c)\epsilon(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V(\mathbf{r})$$



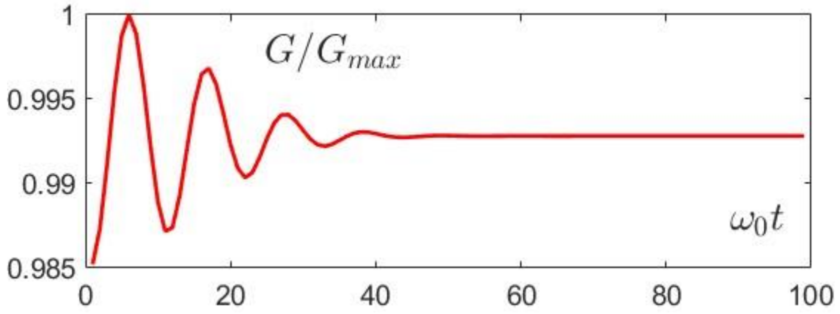
Связь с суперпотоком и потоком

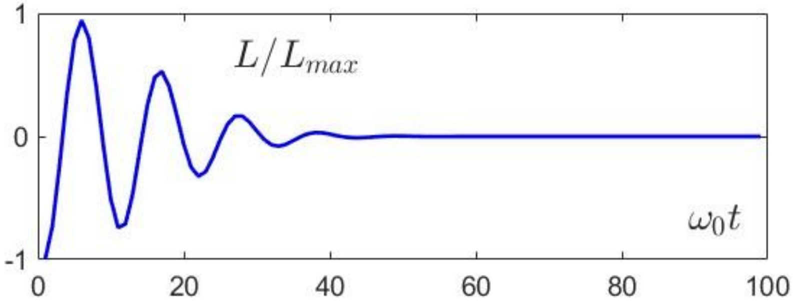
$$\mathbf{G}_c = \mathbf{G} - \frac{\mathbf{hh}}{E}$$

В 1D* $\mathbf{G} = \mathrm{const}$

В общем случае

$$\boxed{\mathbf{G} \neq \mathrm{const}}$$





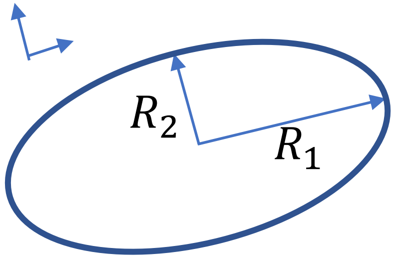
*A.M. Krivtsov, Dynamics of matter and energy, Z Angew Math Mech. e202100496 (2022)

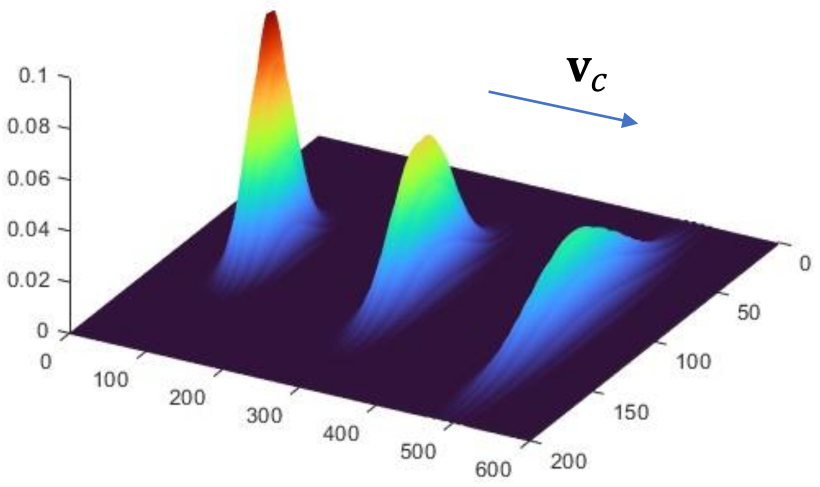
Эллипс энергии

Энергетические радиусы $R_i \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\lambda_i},$

где λ_i — собственные числа тензора $\boldsymbol{\Lambda} \stackrel{\text{def}}{=} \dfrac{\mathbf{M}_c}{E}$

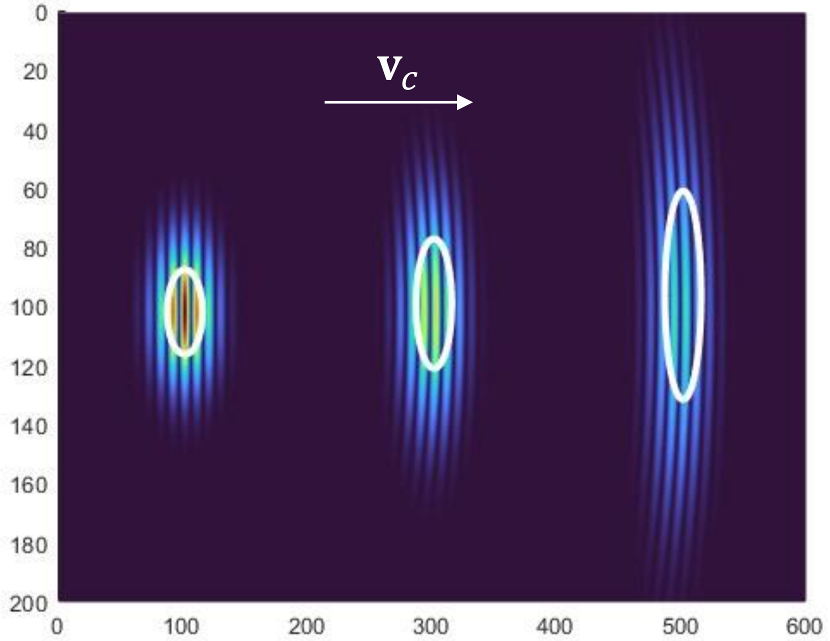
Направление осей определяется собственными векторами $\boldsymbol{\Lambda}$





$$\mathbf{G}_c = \text{const}$$

$$\mathbf{G}_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{M}_c}{\mathrm{d}t^2} \Rightarrow \quad \boldsymbol{\Lambda} = \frac{\mathbf{G}_c t^2 + \dot{\mathbf{M}}_0 t + \mathbf{M}_0}{E}$$



$\mathbf{M}_0,\ \dot{\mathbf{M}}_0$ Начальные значения центрального момента и его производной

Выражения через скорости и перемещения точек среды

$$\mathbf{h} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r},\,\alpha} \mathbf{a}_\alpha C_\alpha u(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha)$$

$$\mathbf{G} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{r},\,\alpha} \frac{C_\alpha}{m}\mathbf{a}_\alpha\mathbf{a}_\alpha\left(\kappa(\mathbf{r}) - \pi(\mathbf{r})\right) +$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{\mathbf{r},\,\alpha,\,\beta} \frac{C_\alpha C_\beta}{m}\mathbf{a}_\alpha\mathbf{a}_\beta\, u(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha)\, u(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\beta)$$

$$\kappa(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m v^2(\mathbf{r}),$$

$$\pi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4}\sum_{\alpha} C_\alpha\left(u(\mathbf{r}+\mathbf{a}_\alpha) - u(\mathbf{r})\right)^2$$

$$\mathbf{h} = \mathbf{C}\cdot\int_{\mathbf{r}} v\nabla u\,\mathrm{d}V(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{G} = \frac{1}{\rho}\int_{\mathbf{r}}\Big((\mathbf{C}\cdot\nabla u)(\mathbf{C}\cdot\nabla u) + \mathbf{C}\left(\kappa(\mathbf{r}) - \pi(\mathbf{r})\right)\Big)\,\mathrm{d}V(\mathbf{r})$$

$$\kappa(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\rho v^2,$$

$$\pi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\left(\nabla u\cdot\mathbf{C}\cdot\nabla u\right)$$

Пример: волновой пакет в изотропной континуальной среде

Предполагаем, что решение имеет вид

$$u(\mathbf{r}, t) \approx A(|\mathbf{r} - \mathbf{v}_{\mathrm{g}} t|) \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

$\mathbf{k}$ — волновой вектор,
$\boldsymbol{v_g} = c\mathbf{k}/k$ — групповая скорость,
$\omega = c\,k$ — частота,
$c = \sqrt{C/\rho}$ — скорость звука в среде

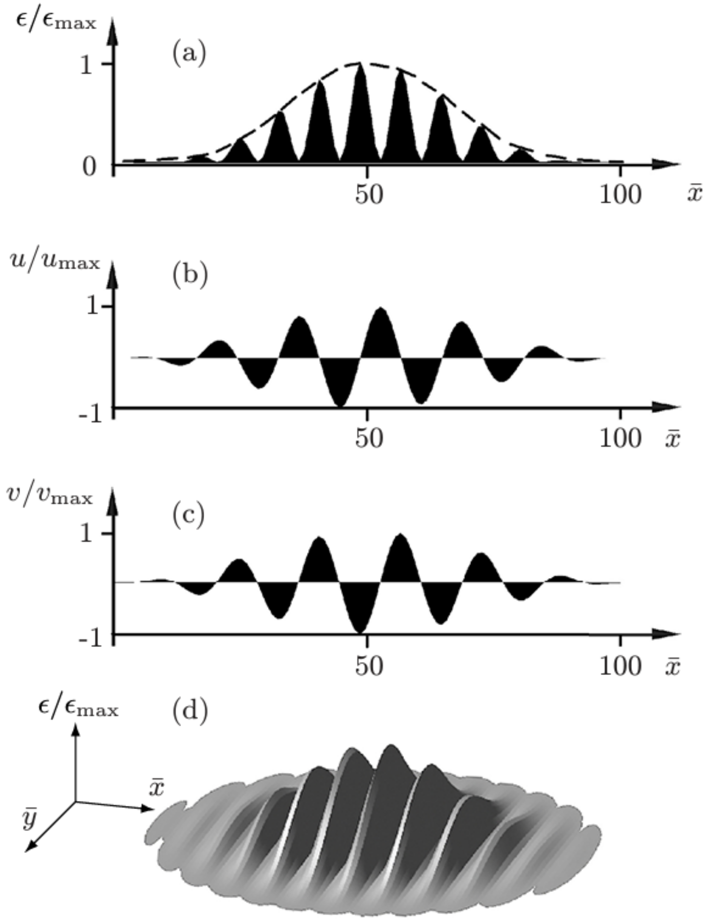
Начальные условия

$$u(\mathbf{r}, 0) = A(r) \sin\theta,$$

$$v(\mathbf{r}, 0) = -A(r)\omega\cos\theta - \nabla A(r) \cdot \mathbf{v}_{\mathrm{g}} \sin\theta, \quad \theta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}.$$

Дальше используются предположения:

- Размер огибающей много больше длины волны
- Начальная огибающая зависит только от модуля радиуса-вектора
- $A(r,t)$ – медленно меняющаяся функция времени и координаты
- $\int f(r)\sin^2\theta \, \mathrm{dV(r)}, \int f(r)\cos^2\theta \, \mathrm{dV(r)} \longrightarrow \frac{1}{2}\int f(r) \mathrm{dV(r)}$,
- $\int f(r) \sin\theta \cos\theta \, \mathrm{dV(r)} \longrightarrow 0$



Волновой пакет в изотропной континуальной среде

Энергию и поток вычисляем по начальным условиям

$$E = \frac{C}{2}\int_{\mathbf{r}} (Ak)^2\,\mathrm{d}V(\mathbf{r}) + \frac{C(d+1)}{4d}\int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2\,\mathrm{d}V(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{h} = cE\mathbf{i} - \frac{cC(d-1)}{4d}\int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2\,\mathrm{d}V(\mathbf{r})\,\mathbf{i}$$

d — размерность пространства

A — начальная огибающая

$$\mathbf{i} = \mathbf{k}/k$$

Суперпоток вычисляем в момент времени t^*, когда лагранжиан уже равен нулю.
Но предполагаем, что $A(r,t^*) \approx A(r,0) = A$.

$$\mathbf{G} = c^2 E\mathbf{ii} + \frac{Cc^2}{4d}\int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2\,\mathrm{d}V(\mathbf{r})(\mathbf{E} - d\mathbf{ii})$$

$$\boxed{\mathbf{G}_c = G_c(\mathbf{E} - \mathbf{ii}), \quad G_c = \frac{c^2 C}{2d}\int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2\,\mathrm{d}V(\mathbf{r}).}$$

Начальные значения центрального момента и его производной

$$\mathbf{M}_0 = M_0\mathbf{E}, \quad \dot{\mathbf{M}}_0 = 0,$$

$$M_0 \approx \frac{Ck^2}{2d}\int_{\mathbf{r}} A^2 r^2\,\mathrm{d}V(\mathbf{r}),$$

Волновой пакет в изотропной континуальной среде

Меняется только радиус, перпендикулярный направлению движения

$$R_\perp = \sqrt{R_0^2 + v_\perp^2 t^2}$$

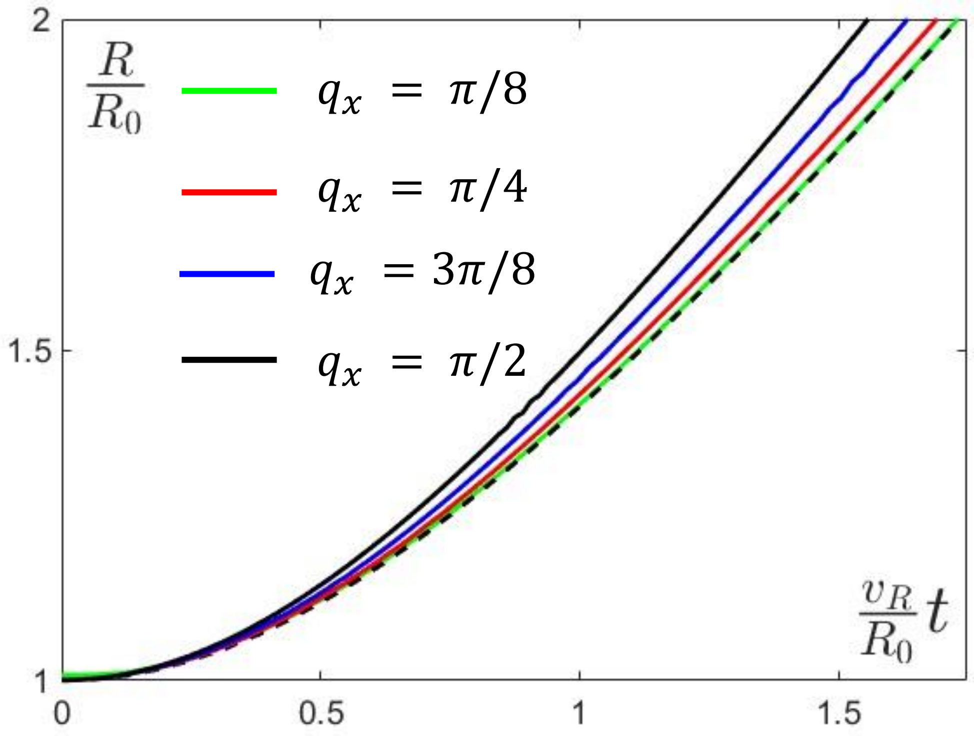
$$R_0 \approx \sqrt{\frac{\int_{\mathbf{r}} A^2 r^2 \,\mathrm{d}V(\mathbf{r})}{d\int_{\mathbf{r}} A^2 \,\mathrm{d}V(\mathbf{r})}}, \qquad v_\perp \approx \frac{c}{k}\sqrt{\frac{\int_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \,\mathrm{d}V(\mathbf{r})}{d\int_{\mathbf{r}} A^2 \,\mathrm{d}V(\mathbf{r})}}.$$

$$\mathbf{\Lambda} = \frac{\mathbf{G}_c t^2 + \dot{\mathbf{M}}_0 t + \mathbf{M}_0}{E}$$

Огибающая: кривая Гаусса в 2D $A(r) = e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}}$

$$\bar{R}_\perp = \sqrt{1+\bar{t}^2},$$

$$\bar{R}_\perp = \frac{\sqrt{2}}{\sigma} R_\perp, \quad \bar{t} = \frac{c}{k\sigma^2} t.$$



Пример: волновой пакет в дискретной среде

Начальные условия

$$u(\mathbf{r},0) = A(r)\sin\theta,$$

$$v(\mathbf{r},0) = -A(r)\omega\cos\theta - \nabla A(r)\cdot\mathbf{v}_{\mathrm{g}}\sin\theta, \quad \theta = \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}.$$

Дисперсионное соотношение

$$\omega^2 = \omega_0^2\sum_\alpha\left(1-\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_\alpha)\right), \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}.$$

Групповая скорость

$$\mathbf{v}_{\mathrm{g}} = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}\mathbf{k}} = \frac{\omega_0^2}{2\omega}\sum_\alpha \mathbf{a}_\alpha \sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_\alpha).$$

Групповая скорость и волновой вектор не всегда сонаправлены

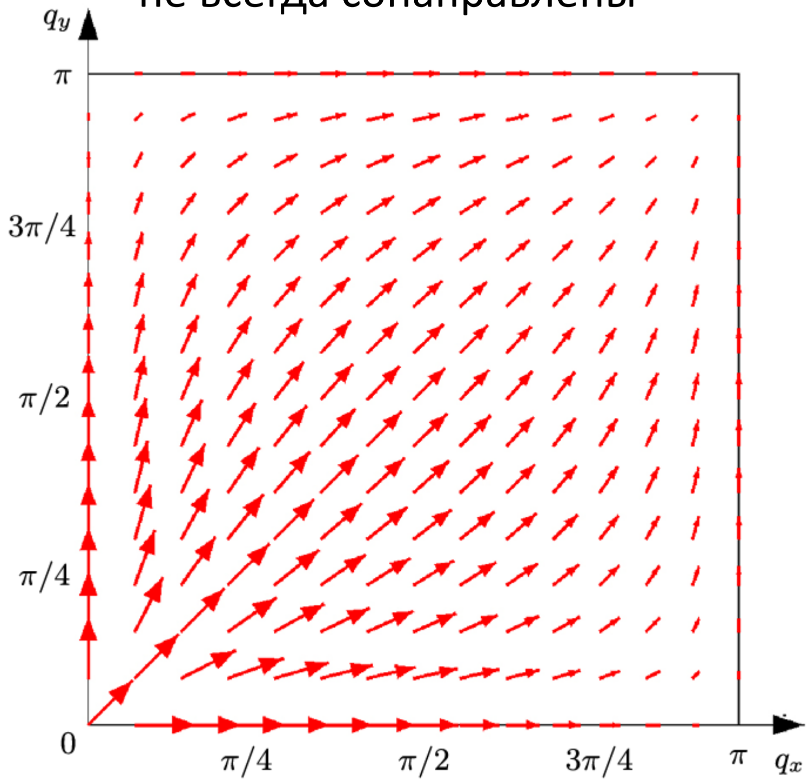


FIG. 2. Velocity vector field. The arrows indicate the magnitude and direction of the velocity vector.

J.A. Baimova, N.M. Bessonov, A.M. Krivtsov, Motion of localized disturbances in scalar harmonic lattices, Phys. rev. E (2023)

Волновой пакет в дискретной среде

Энергию и поток вычисляем по начальным условиям

$$E = \frac{m\omega^2}{2}\sum_{\mathbf{r}} A^2 + \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4d}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2 + \frac{C}{4d}T\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2$$

$$\mathbf{h} = \mathbf{v}_g E - \frac{m\omega^2 a^2}{4d}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2\mathbf{v}_g - \frac{m\mathbf{v}_g^2}{4}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2\mathbf{v}_g - \frac{C}{4d}T\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2\mathbf{v}_g + \frac{C}{4d}\mathbf{v}_g\cdot\mathbf{T}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2$$

d — размерность пространства

A — начальная огибающая

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha}\mathbf{a}_\alpha\mathbf{a}_\alpha\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_\alpha)$$

$$T = \mathrm{tr}\mathbf{T}$$

Суперпоток вычисляем в момент времени t^*, когда лагранжиан уже равен нулю.
Но предполагаем, что $A(r,t^*) \approx A(r,0) = A$.

$$\mathbf{G} = E\mathbf{v}_g\mathbf{v}_g + \frac{C^2}{2md}\mathbf{T}\cdot\mathbf{T}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2 - \frac{m\omega^2 a^2}{2d}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2\mathbf{v}_g\mathbf{v}_g - \frac{CT}{2d}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2\mathbf{v}_g\mathbf{v}_g.$$

$$\boxed{\mathbf{G}_c = \frac{m}{2d}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2\left(\omega_0^2\mathbf{T} - \mathbf{v}_g\mathbf{v}_g\right)^2}$$

Начальные значения центрального момента и его производной

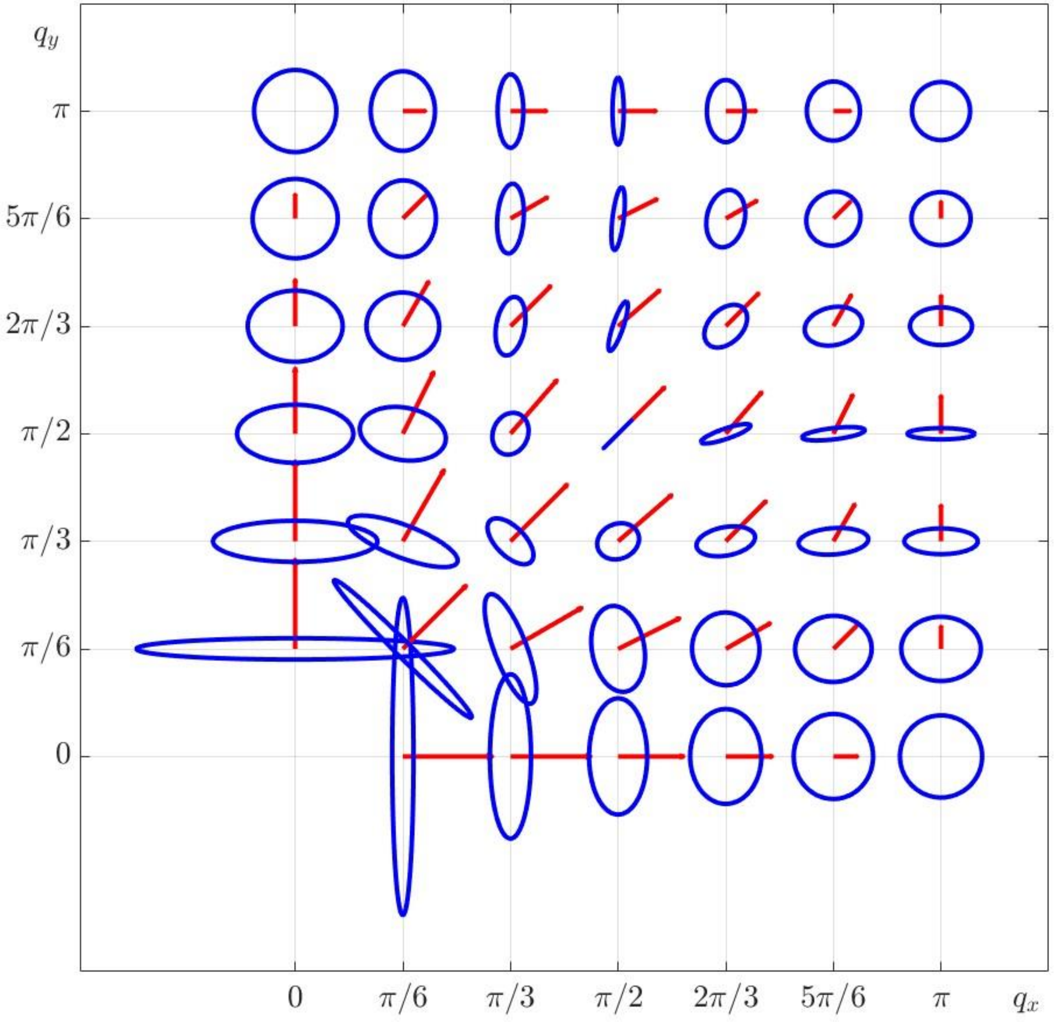
$$\mathbf{M}_0 \approx \frac{m\omega^2}{2d}\sum_{\mathbf{r}} A^2 r^2\mathbf{E},$$

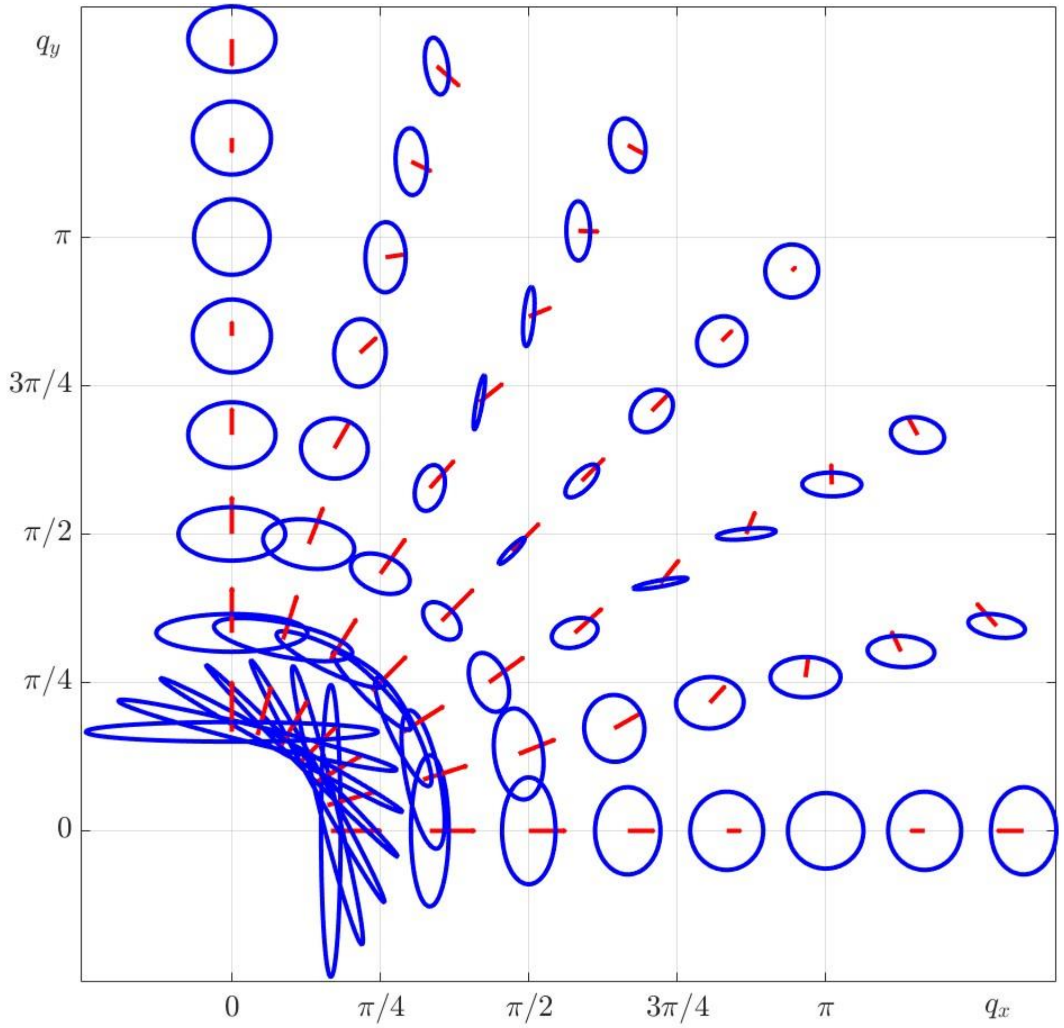
$$\dot{\mathbf{M}}_0 = 0.$$

Квадратная решетка

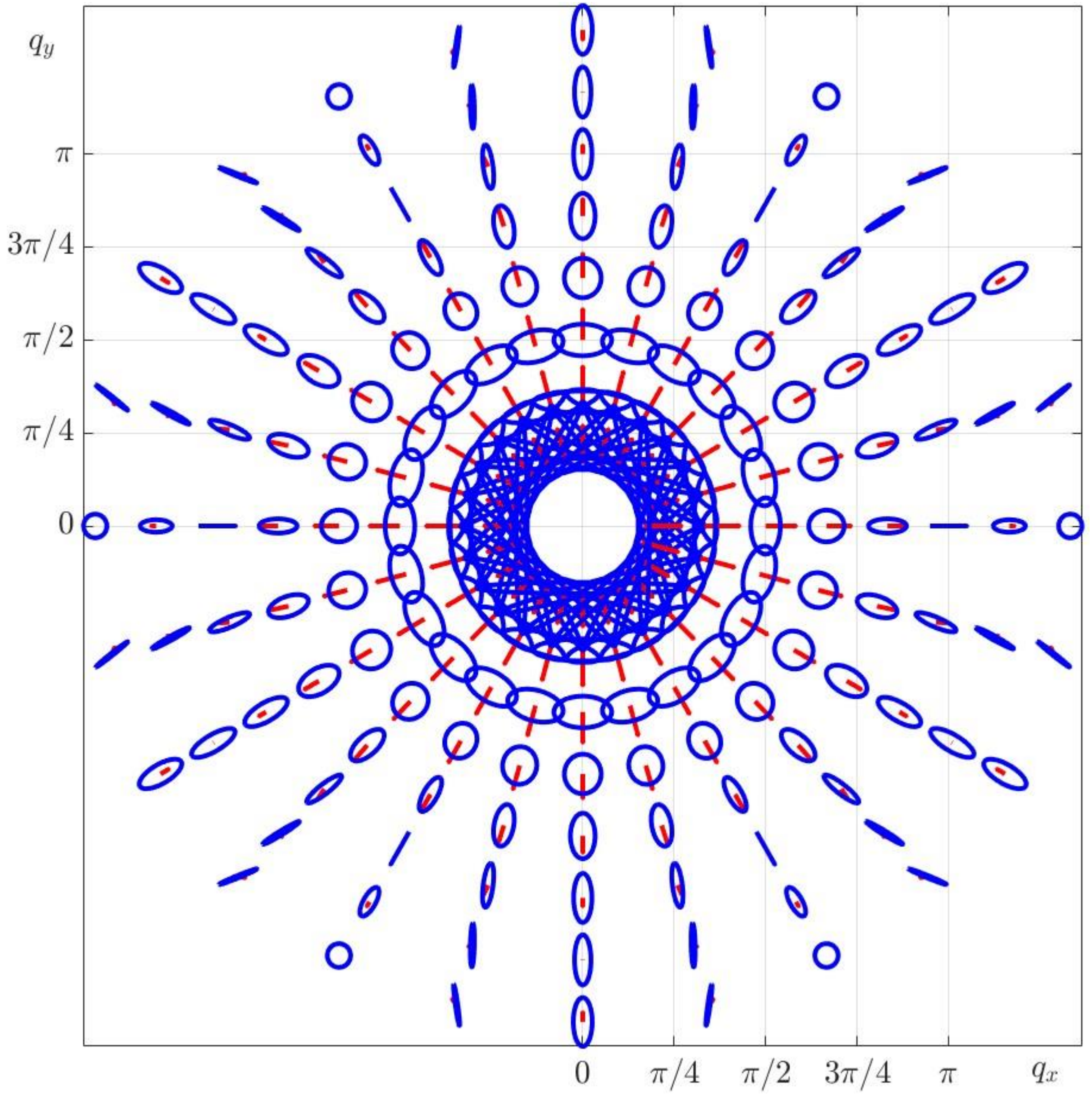
Направления групповых скоростей и скоростей изменения энергетических радиусов при разных волновых векторах

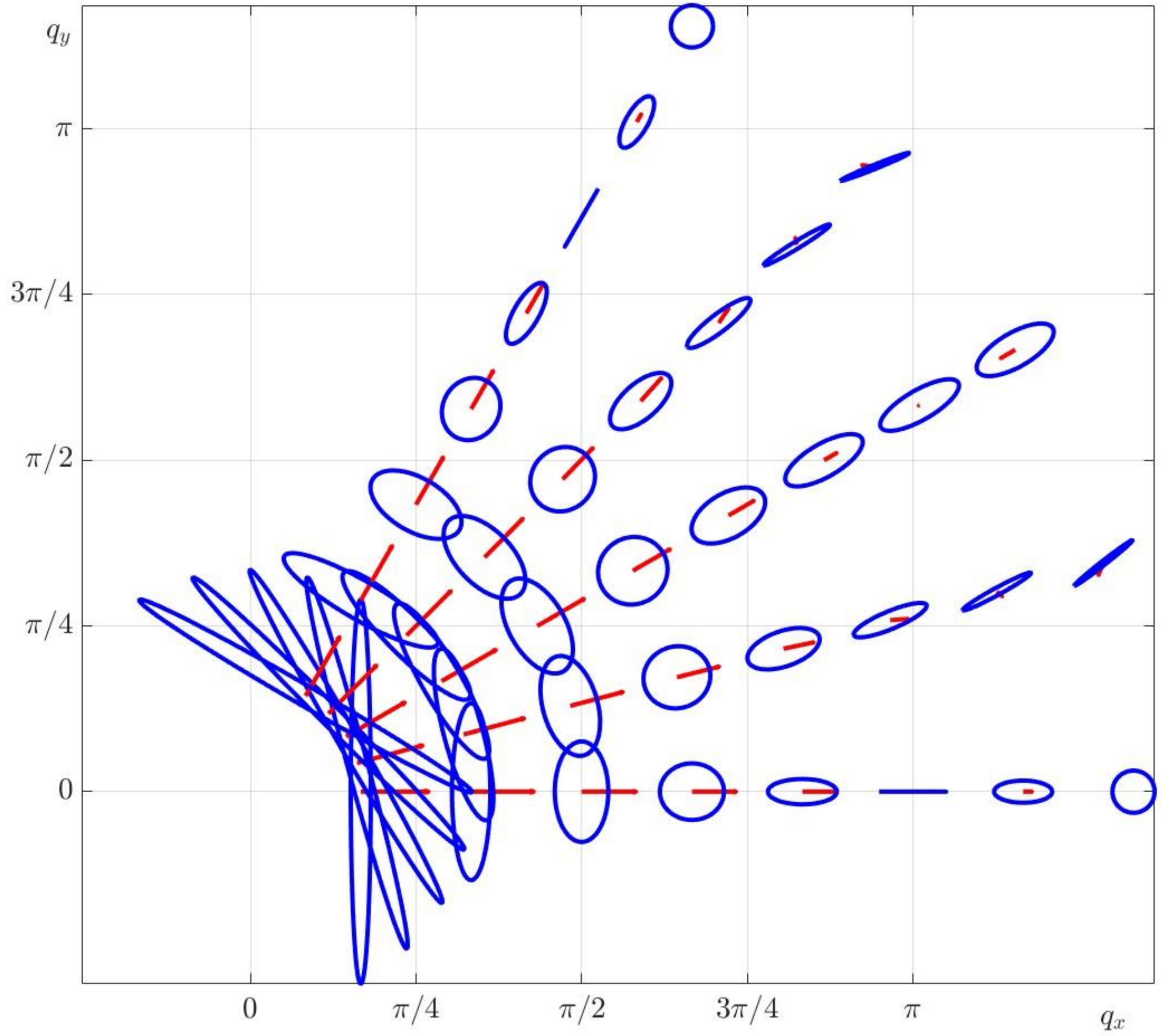
$$\frac{\omega_e^2\mathbf{T} - \mathbf{v}_\mathrm{g}\mathbf{v}_\mathrm{g}}{\omega a c} = \frac{1}{ac}\sqrt{\frac{\mathbf{G}_c}{E}}\sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{r}} A^2}{2\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2}}$$





Треугольная решетка





Волновой пакет в дискретной среде

- Длинные волны $(ak \to 0)$ - совпадение с континуальным случаем
- Квадратная решетка. Движение вдоль связи. $\mathbf{k} = k\mathbf{i}$

$$\mathbf{G}_c = \frac{mc^4}{2d} \sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2 \left(\sin^4 \frac{ak}{2} \mathbf{ii} + \mathbf{jj} \right)$$

$$R_\perp = \sqrt{R_0^2 + v_\perp^2 t^2}, \quad v_\perp = v_R.$$

$$R_\parallel = \sqrt{R_0^2 + v_\parallel^2 t^2}, \quad v_\parallel = v_R \sin^2 \left(\frac{ak}{2} \right)$$

$$R_0 = \sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{r}} A^2 r^2}{d \sum_{\mathbf{r}} A^2}}, \quad v_R = \frac{c^2}{\omega} \sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{r}} (\nabla A)^2}{d \sum_{\mathbf{r}} A^2}}.$$

Меняются оба радиуса, но поперечный всегда быстрее

Волновой пакет в дискретной среде

- Квадратная решетка. Движение по диагонали. $\mathbf{k} = k(\mathbf{i}+\mathbf{j})$

$$\mathbf{G}_c = \frac{mc^4}{2d}\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2\left(\sin^4\frac{ak}{2}\mathbf{e}_v\mathbf{e}_v + \cos^2(ak)(\mathbf{E}-\mathbf{e}_v\mathbf{e}_v)\right)$$

$$\mathbf{e}_v = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{i}+\mathbf{j})$$

$$\boxed{\begin{aligned} R_\perp &= \sqrt{R_0^2 + v_\perp^2 t^2}, \quad v_\perp = v_R\cos(ak). \\ R_\parallel &= \sqrt{R_0^2 + v_\parallel^2 t^2}, \quad v_\parallel = v_R\sin^2\left(\frac{ak}{2}\right) \end{aligned}}$$

$$R_0 = \sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{r}} A^2 r^2}{d\sum_{\mathbf{r}} A^2}}, \quad v_R = \frac{c^2}{\omega}\sqrt{\frac{\sum_{\mathbf{r}}(\nabla A)^2}{d\sum_{\mathbf{r}} A^2}}.$$

Волновой пакет в дискретной среде
Квадратная решетка. Движение по диагонали

$$ak_x = ak_y < \arccos\frac{1}{3}$$

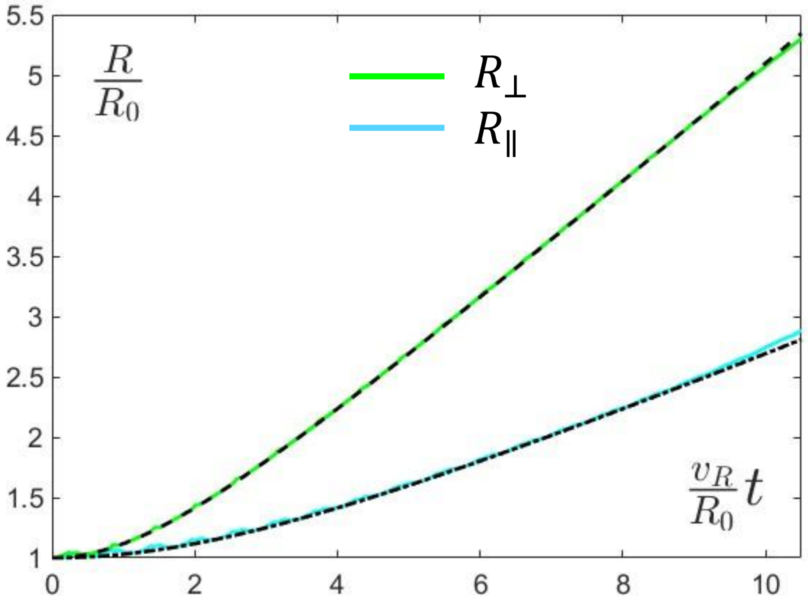
$$v_\parallel < v_\perp$$

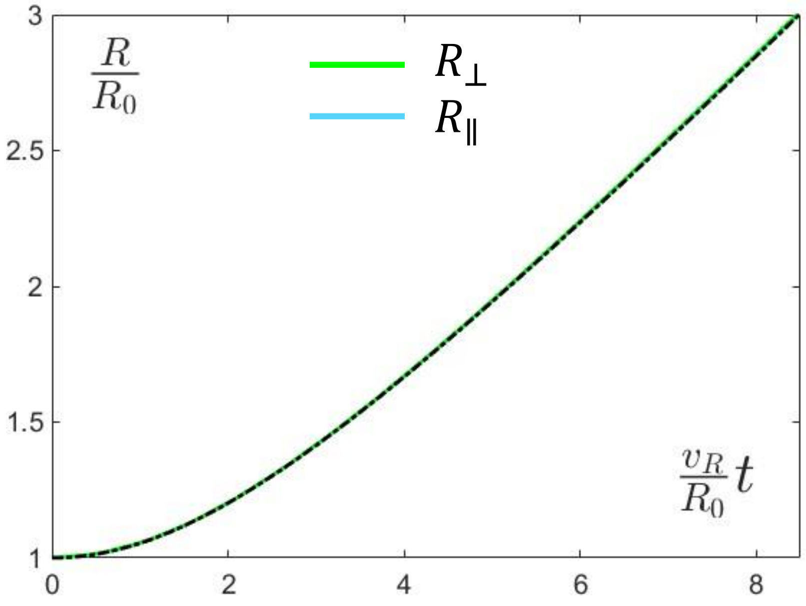
$$ak_x = ak_y = \arccos\frac{1}{3}$$

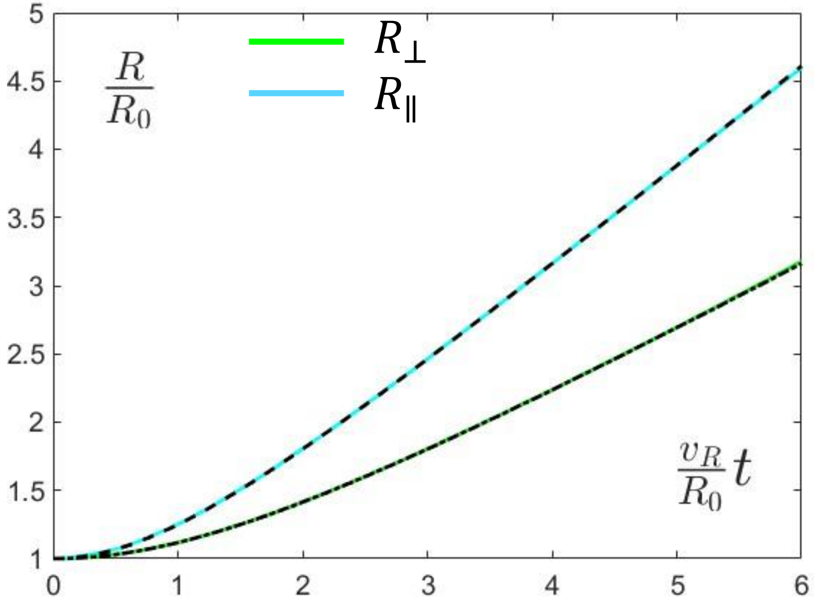
$$v_\parallel = v_\perp$$

$$ak_x = ak_y > \arccos\frac{1}{3}$$

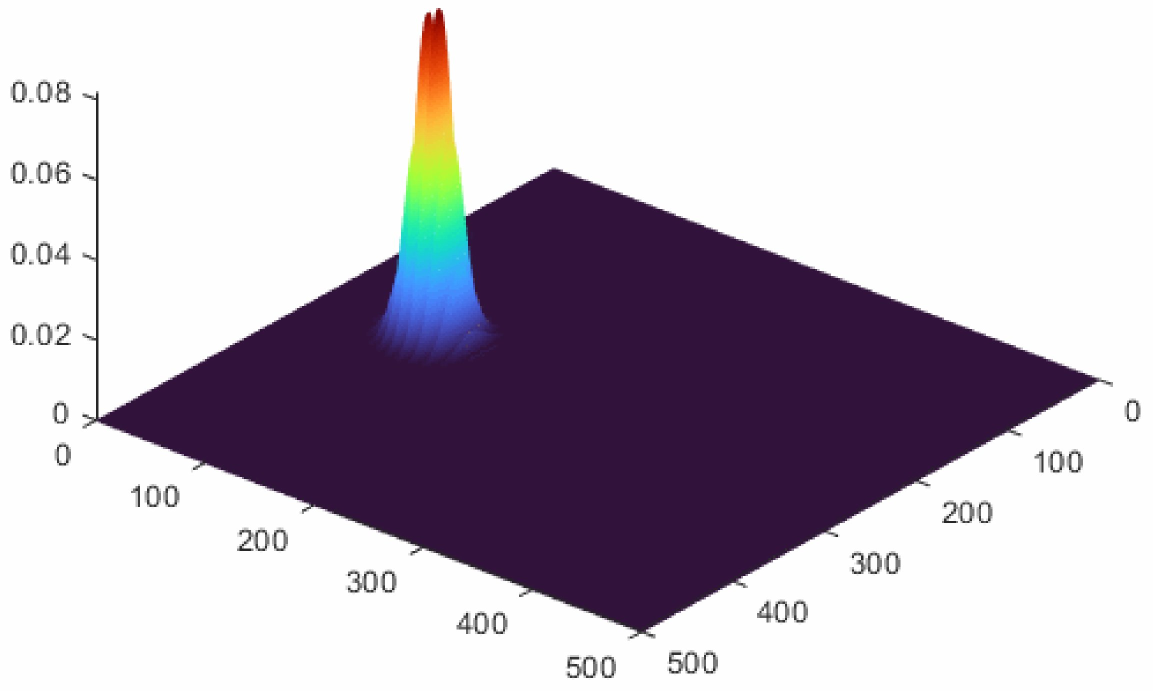
$$v_\parallel > v_\perp$$

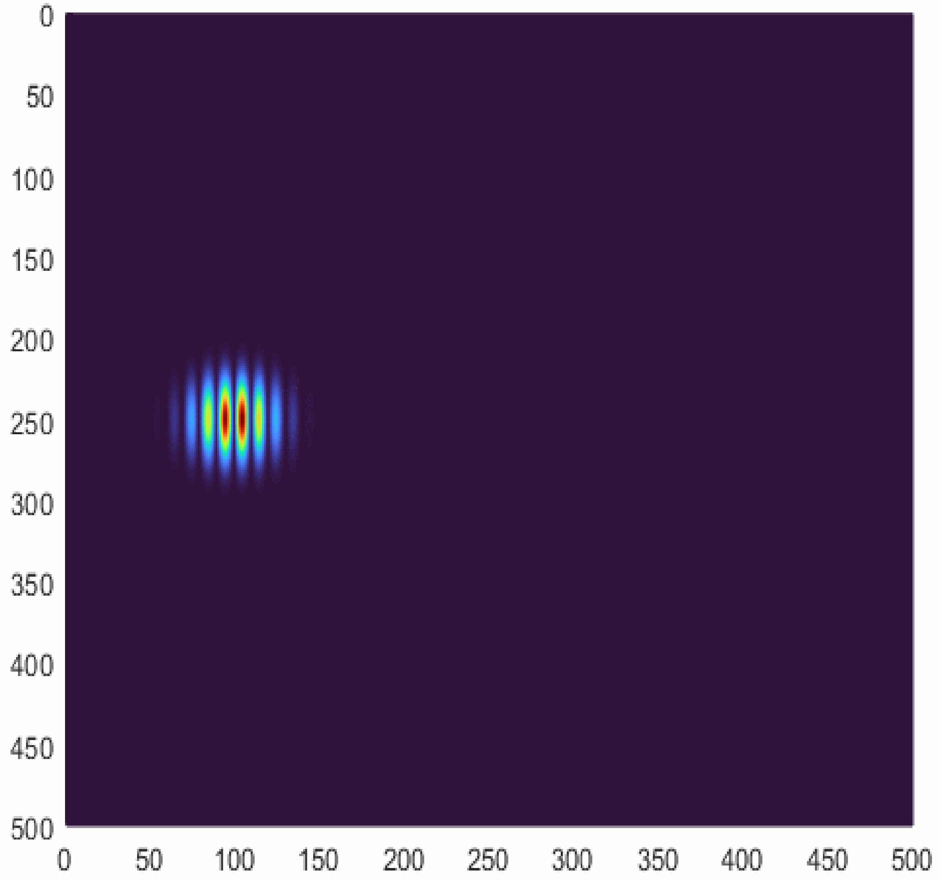






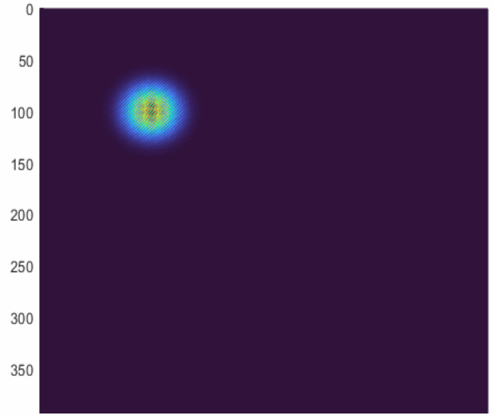
Волновой пакет в изотропной континуальной среде



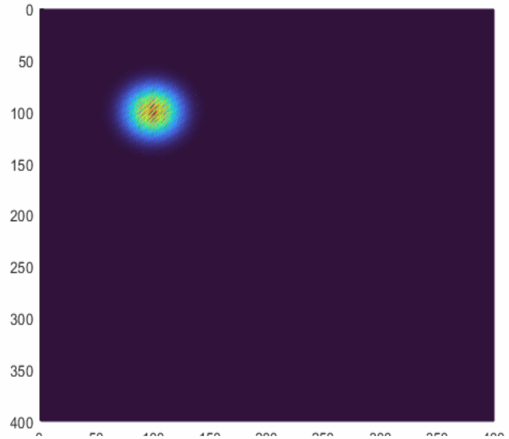


Движение по диагонали

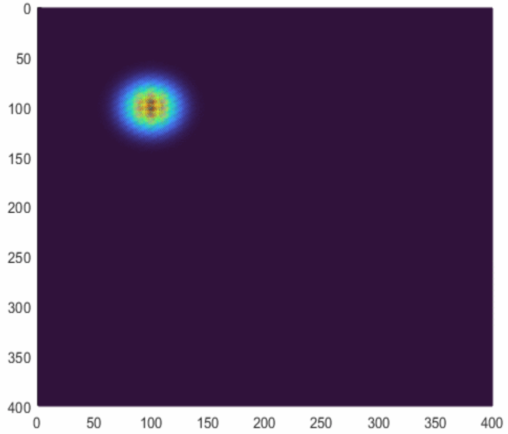
$$ak_x = ak_y = \frac{\pi}{3}$$



$$ak_x = ak_y = \arccos\frac{1}{3}$$

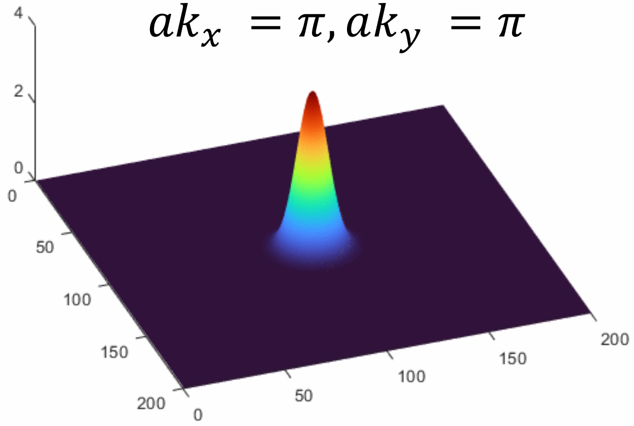


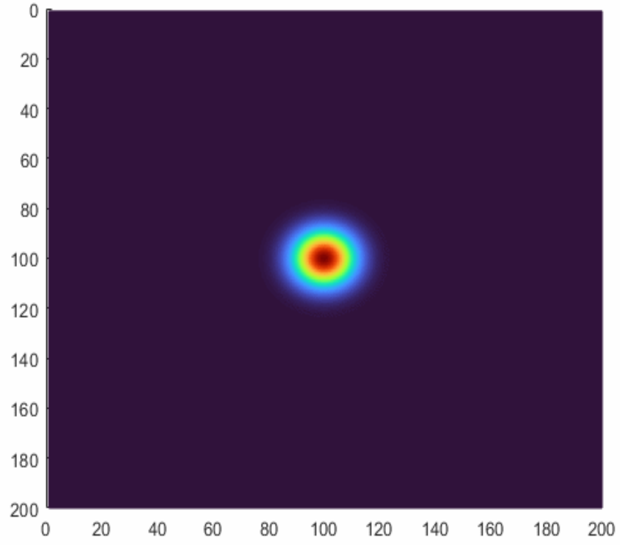
$$ak_x = ak_y = \frac{\pi}{2}$$



Стоячая волна

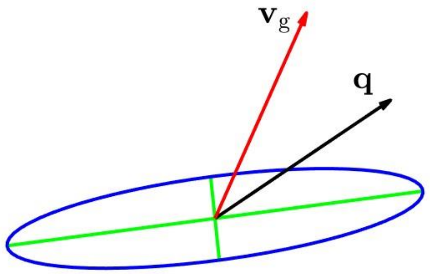
$$ak_x = \pi, ak_y = \pi$$

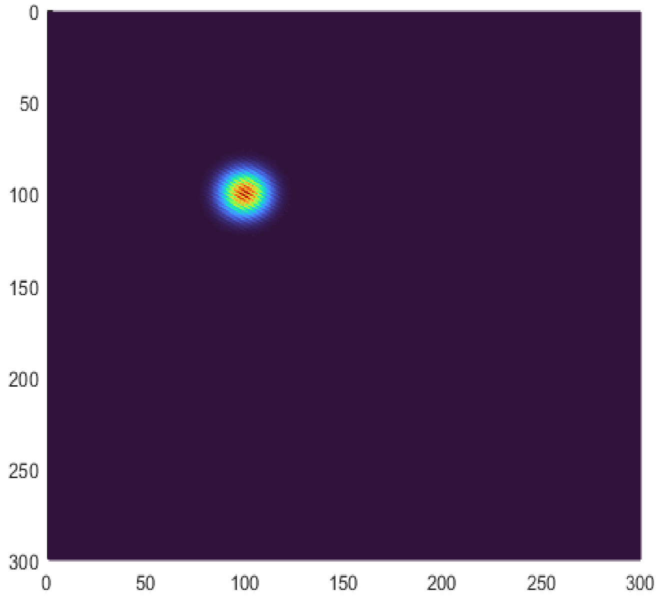




Движение по направлению "шахматного коня"

$$ak_x = \frac{3\pi}{4}, ak_y = \frac{3\pi}{8}$$



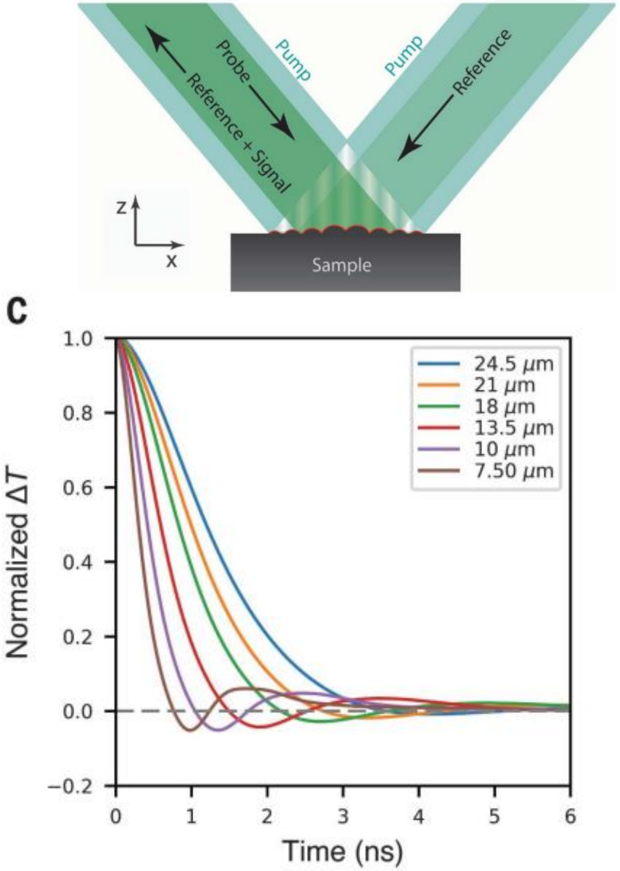


Результаты

- 1
- 2
- 3
- 4

Спасибо за внимание!

Эксперименты по нестационарному распространению тепла на наноуровне. Метод Transient Thermal Grating



- С помощью двух лучей лазера на поверхности материала генерируется синусоидальное распределение начальной температуры

- Тепловое расширение приводит к искривлению поверхности

- По искривлению поверхности находят температуру

...термоупругость!

- В поликристаллическом графите при T ~ 100K амплитуда синусоидального поля температуры затухает немонотонно

- S. Huberman, R. A. Duncan, K. Chen, B. Song, V. Chiloyan, Z. Ding, A. A. Maznev, G. Chen, and K. A. Nelson, Observation of second sound in graphite at temperatures above 100 K, Science 364, 375 (2019).
- O.W. Kading, H. Skurk, A.A. Maznev, E. Matthias, Transient thermal gratings at surfaces for of bulk materials and thin films, Appl. Phys. A 61,253-261 (1995)