

Моделирование распространения тепла в скалярной треугольной кристаллической решетке

Давыдова А.В.
научный руководитель: Кузькин В.А.

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Институт прикладной математики и механики

Бакалаврская работа



Содержание

- Актуальность задачи
- Постановка задачи
- Численное решение уравнений динамики кристалла
- Дисперсионное соотношение и групповая скорость
- Моделирование однородного температурного поля
- Моделирование фундаментального решения
- Моделирование температурного поля с синусоидальным распределением
- Выводы

Актуальность задачи

- Развитие нанотехнологий;
- Экспериментальное подтверждение нарушения закона Фурье;¹
- Необходимость аналитически прогнозировать свойства наноструктур;

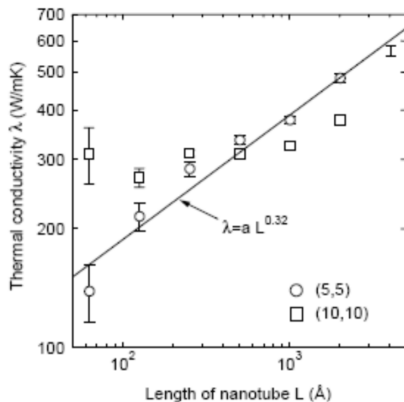


Рис.: Зависимость теплопроводности от длины для 300К.²

¹R. Anufriev, S. Gluchko, S. Volz, M. Nomura Quasi-ballistic heat conduction due to lvy phonon flights in silicon nanowires, ACS Nano, 2018, DOI: 10.1021/acsnano.8b07597

²Han Z., Fina A. Thermal conductivity of carbon nanotubes and their polymer

Постановка задачи

Дано начальное температурное поле в треугольной решетке. Требуется рассчитать его эволюцию во времени методом динамики частиц. Для этого используется следующая математическая модель:

$$m\ddot{u}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^6 C(u(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}) - u(\mathbf{x})) \quad (1)$$

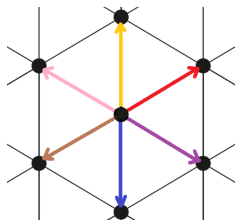


Рис.: Треугольная кристаллическая решетка, вектора $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_6$

где C - жесткость связей;

u - перемещение

m - масса частицы

\mathbf{a}_{α} - вектор, соединяющий частицу α -ой соседней

Частицы перемещаются только в направлении, перпендикулярном плоскости решетки.

Связь температуры и скоростей частиц

Кинетическая температура³ определяется как

$$T_{kin} = \frac{m}{k_b} \langle v^2(x) \rangle, \quad (2)$$

k_b - постоянная Больцмана, математическое ожидание от v^2 берется по множеству реализаций. Начальные условия имеют вид:

$$\begin{cases} u(x) = 0 \\ v(x) = v_0 \end{cases} \quad (3)$$

где $v_0 = rand(-V_{max}, V_{max})$, V_{max} определяется из начальной температуры в точке

$$V_{max} = \sqrt{\frac{3k_b T(x)}{m}} \quad (4)$$

³Krivtsov Vitaly A. Kuzkin Anton M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar [Статья] // Journal of Physics: Condensed Matter. - [б.м.] : IOP Publishing Ltd, 2017 г.. - 50 : Т. 29.

Численное решение уравнений динамики кристалла

Система уравнений (1) решалась численно методом Верле.

Были использованы периодичные граничные условия (для задач с периодичными начальными условиями на температуру).

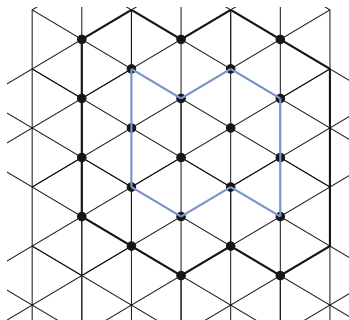


Рис.: Пример ячейки периодичности малого размера

Черный контур - частицы, хранящиеся в памяти компьютера, синий контур - "уникальные" частицы.

Дисперсионное соотношение и групповая скорость

будем искать решение уравнения (1) в виде

$$u(x, t) = Ae^{i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (5)$$

В результате подстановки выражения (2) в (1) и простейших преобразований получим

$$\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{C}{m}} \cdot \sqrt{\sin^2 \frac{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{k}}{2} + \sin^2 \frac{\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{k}}{2} + \sin^2 \frac{(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1) \cdot \mathbf{k}}{2}}. \quad (6)$$

где \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 - базисные вектора решетки

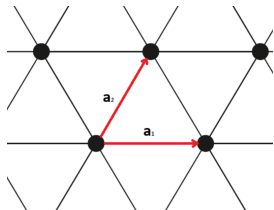


Рис.: Базисные вектора решетки

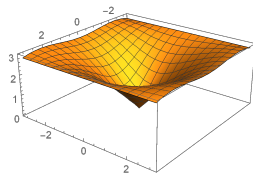


Рис.: График дисперсионного соотношения

Дисперсионное соотношение и групповая скорость

Групповая скорость - это величина, характеризующая скорость распространения локализованной квазимонохроматической волны

$$\mathbf{v}_{\text{gr}} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} \quad (7)$$

Вычисляя производную, получаем

$$\mathbf{v}_{\text{gr}} = v_1 \mathbf{a}_1 + v_2 \mathbf{a}_2 \quad (8)$$

где

$$v_1 = \sqrt{\frac{C}{m}} \cdot \frac{\cos \frac{k_1}{2} \sin \frac{k_1}{2} + \cos \frac{k_1 - k_2}{2} \sin \frac{k_1 - k_2}{2}}{\sqrt{\sin^2 \frac{k_1}{2} + \sin^2 \frac{k_1 - k_2}{2} + \sin^2 \frac{k_2}{2}}}$$
$$v_2 = \sqrt{\frac{C}{m}} \cdot \frac{-\cos \frac{k_1 - k_2}{2} \sin \frac{k_1 - k_2}{2} + \cos \frac{k_2}{2} \sin \frac{k_2}{2}}{\sqrt{\sin^2 \frac{k_1}{2} + \sin^2 \frac{k_1 - k_2}{2} + \sin^2 \frac{k_2}{2}}},$$

а волновой вектор \mathbf{k} в базисе $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$, взаимном к базису $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{e}_1 + k_2 \mathbf{e}_2 \quad (9)$$

Однородное температурное поле

Начальная температура решетки во всех точках одинакова:

$$T(\mathbf{x}) = \text{const}; \quad (10)$$

Зависимость температуры при однородном распределении T_F^4 :

$$T_F = \frac{T_0(x)}{2(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos 2\omega t dk_1 dk_2 \quad (11)$$

Сравнение численного решения и аналитики для быстрых процессов проходит при следующих параметрах:

- Количество реализаций - 1000
- Размер ячейки периодичности - 100×100 частиц

Масштаб по времени: $\tau = 2\pi \sqrt{\frac{m}{C}}$

⁴V.A. Kuzkin, A.M. Krivtsov, An analytical description of transient thermal processes in harmonic crystals, Phys. Solid State, 59(5), 1051 (2017).

Однородное температурное поле

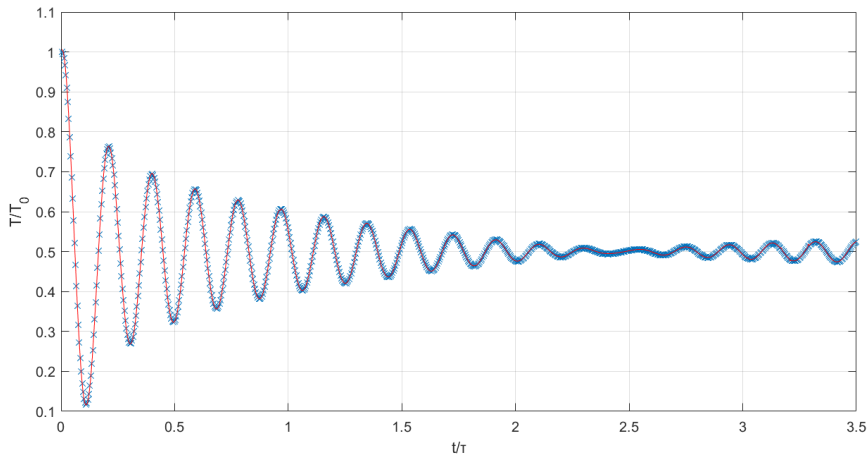
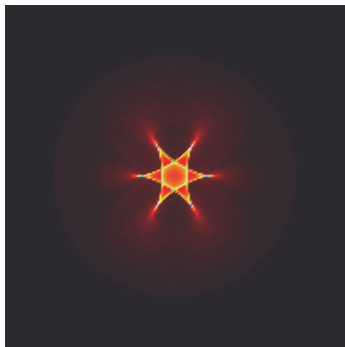


Рис.: Зависимость нормированной температуры от времени (крестики - численное решение, линия - аналитическое решение)

Процесс теплопереноса. Фундаментальное решение.

В статье² получено соотношение для процессов теплопереноса

$$T_S = \frac{1}{16\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} (T_0(\mathbf{x} + \mathbf{v}_{gr}t) + T_0(\mathbf{x} - \mathbf{v}_{gr}t)) dk_1 dk_2 \quad (12)$$



На рисунке виден круглый фронт тепловой волны и анзотропия решения.

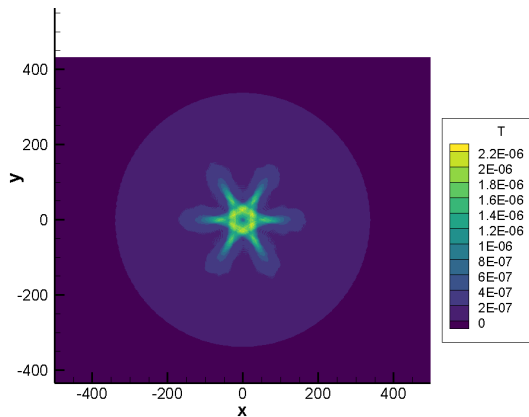
$$t = 2.2\tau$$

$$R_0 = 0.2$$

Рис.: Аналитическое решение

³V.A. Kuzkin, A.M. Krivtsov, Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices. J. Phys.: Condens. Matter, 29, 505401 (2017).

Фундаментальное решение. Численное моделирование



На рисунке виден круглый фронт тепловой волны - это согласуется с теоретическим предсказанием. Параметры расчета:

- $R_0 = 10$
- $t = 50\tau$
- $N_{realization} = 1000$

Рис.: Визуализация численного решения

Синусоидальное распределение

Начальное температурное поле задается соотношением

$$T_0 = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_t}{L}$$

Зависимость от времени амплитуды синуса получена в статье³

$$A = \frac{\Delta T}{2} \int_{\mathbf{k}} \left(\cos 2\omega t + \cos \frac{2\pi v_t t}{L} \right) d\mathbf{k} \quad (13)$$

В численном эксперименте амплитуда оценивается как

$$A_{exp} = \frac{1}{\pi} \int_0^L T(x_t) \sin \frac{2\pi x_t}{L} dx_t \quad (14)$$

³V.A. Kuzkin, A.M. Krivtsov, Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices. J. Phys.: Condens. Matter, 29, 505401 (2017).

Сопоставление результатов аналитического и численного решения

Перераспределение температуры вдоль направления межатомных связей

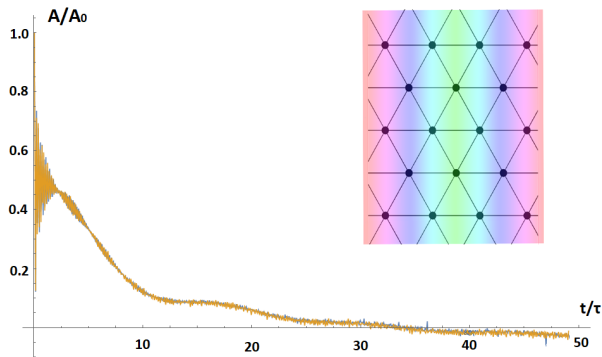


Рис.: Зависимость амплитуды температурного синуса от времени

Синий график - аналитическое решение, оранжевый - численное

Сопоставление результатов аналитического и численного решения

Перераспределение температуры перпендикулярно направлению межатомных связей

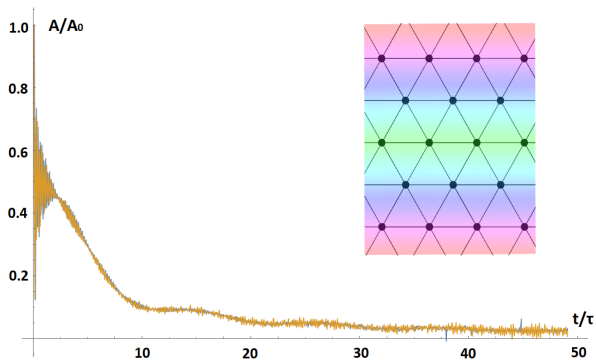


Рис.: Зависимость амплитуды температурного синуса от времени

Синий график - аналитическое решение, оранжевый - численное

Сопоставление результатов эксперимента для двух направлений

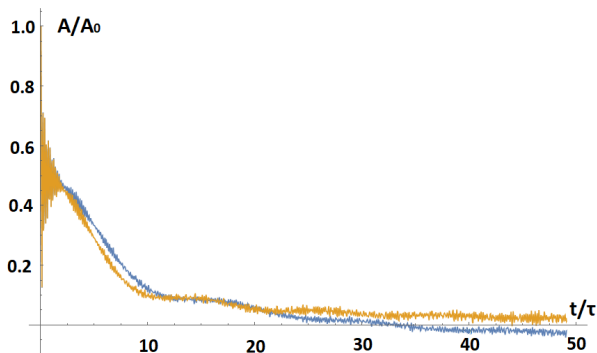


Рис.: Зависимость амплитуды температурного синуса от времени при различных направлениях распространения тепла

Синий график - вдоль x, оранжевый - вдоль y

Выводы

- Фронт имеет форму окружности для фундаментального решения.
- Теплопроводящие свойства для треугольной решетки анизотропны, несмотря на изотропию упругих свойств.
- Аналитическое решение предсказывает результаты численного эксперимента с высокой точностью
- При перераспределении температуры вдоль направления межатомных связей устанавливается температурное поле, в котором “горячие” и “холодные” области меняются местами.