Многотемпературные термомеханические процессы в идеальных кристаллах

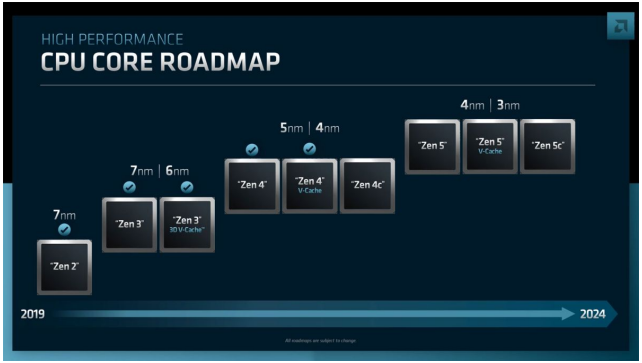
Сергей Д. Ляжков[1,2], Виталий А. Кузькин[2,1]

[1]Санкт-Петербургский политехнический университет имени Петра Великого, ВШТМиМФ

[2]Институт проблем машиноведения РАН

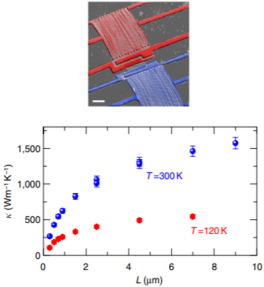
24 августа 2023г.

Актуальность: проблема охлаждения нанопроцессоров

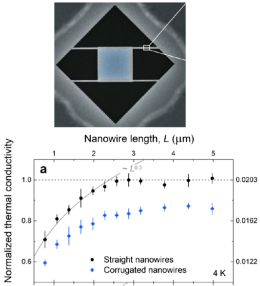


https://www.tomshardware.com/news/amd-shares-new-cpu-core-roadmap-3nm-zen-5-by-2024-4th-gen-infinity-architecture

Актуальность (отклонение от закона Фурье на микроуровне)

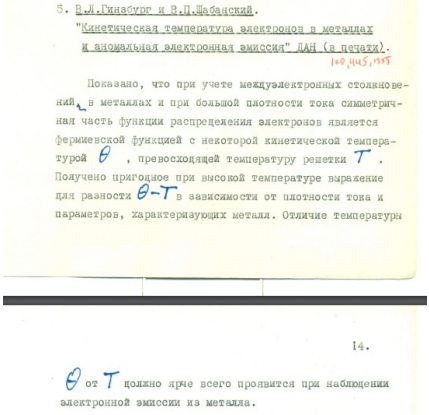


Графен [*Xu, X., Wang Yu, Zhang, K et al. Nat.Comm 5, 3689 (2014)*]



Силиконовые нановискеры [*Anufriev R. et al. ACS Nano 12, 12 (2018)*]

Модели с несколькими температурами. История



5. В.Л.Гинзбург и В.П.Шабанский.

"Кинетическая температура электронов в металлах и аномальная электронная эмиссия" ДАН (в печати).

100,445,1955

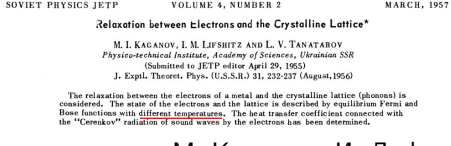
Показано, что при учете междуэлектронных столкновений в металлах и при большой плотности тока симметричная часть функции распределения электронов является фермиевской функцией с некоторой кинетической температурой θ, превосходящей температуру решетки T. Получено пригодное при высокой температуре выражение для разности $\theta - T$ в зависимости от плотности тока и параметров, характеризующих металл. Отличие температуры

14.

θ от T должно ярче всего проявится при наблюдении электронной эмиссии из металла.

Гинзбург В. Л., Шабанский В. П. Кинетическая температура электронов в металлах и аномальная электронная эмиссия //Докл. АН СССР. – 1955. – Т. 100. – №. 3. – С. 445-448.

Модели с несколькими температурами. История



SOVIET PHYSICS JETP VOLUME 4, NUMBER 2 MARCH, 1957

Relaxation between Electrons and the Crystalline Lattice*

M. I. KAGANOV, I. M. LIFSHITZ AND L. V. TANATAROV
Physico-technical Institute, Academy of Sciences, Ukrainian SSR
(Submitted to JETP editor April 29, 1955)
J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) 31, 232-237 (August, 1956)

The relaxation between the electrons of a metal and the crystalline lattice (phonons) is considered. The state of the electrons and the lattice is described by equilibrium Fermi and Bose functions with different temperatures. The heat transfer coefficient connected with the "Cerenkov" radiation of sound waves by the electrons has been determined.

Теоретическая статья М. Каганова, И. Лифшица и Л. Танатарова [*Kaganov, M. I., Lifshitz, I. M., and Tanatarov, L. V Sov. Phys. JETP. Sov. Phys. JETP, 4, 173 (1957)*]

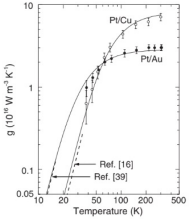


FIG. 4. Electron-phonon coupling parameter $g(T)$ of Au and Cu plotted as a function of lattice temperature with comparison to the Kaganov theory [9] [Eq. (3) solid lines]. Extrapolations of low temperature measurements (dashed lines) for Cu [16] and Au [39] extend to 1/10 of the Debye temperatures. These extrapolations assume a T^4 scaling in the low T limit.

Экспериментальное подтверждение теории Каганова (основанной на нескольких температурах, статья [*Wang, W., and Cahill, D. G. Physical review letters, 109(17), 175503 (2012)*])

Модели с несколькими температурами

1. Неравновесные течения газов (В.В. Аристов, Е.В. Кустова, A. Torrente)
2. Взаимодействие твёрдого тела с лазером ($\boxed{\text{Д.А. Индейцев}}$, А.К. Беляев, С.Л. Соболев, A. Sellitto, A. Bora)
3. Баллистическое распространение тепла (В.А. Кузькин, А.М. Кривцов, A. Dhar, V. Kannan)

Модели с несколькими температурами

1. Неравновесные течения газов (В.В. Аристов, Е.В. Кустова, A. Torrente)
2. Взаимодействие твёрдого тела с лазером ($\boxed{\text{Д.А. Индейцев}}$, А.К. Беляев, С.Л. Соболев, A. Sellitto, A. Bora, D.Jou)
3. Баллистическое распространение тепла (В.А. Кузькин, А.М. Кривцов, A. Dhar, V. Kannan)
4. Ударные волны ($\boxed{\text{В.Е. Фортов}}$, W.G. Hoover, С. И. Анисимов)
5. Пористые среды (K. Harris, С.Л. Соболев)
6. Биотеплообмен между человеческими тканью и кровью (W. Roetzel, J. Fan, H. Youssef)

Задачи, разрешаемые в докладе

1. Какая степень нелинейности необходима для выравнивания температур?
2. Нахождение характерного масштаба времени выравнивания кинетических температур, соответствующих различным степеням свободы
3. Будут ли наблюдаться различные температуры (соответствующие различным степеням свободы) в неоднородно нагретых нелинейных кристаллах?

План доклада

1. Переход к тепловому равновесию в гранецентрированной кубической (ГЦК) решётке

2. Двухтемпературный перенос тепловой энергии в β-ФПУТ цепочке частиц с прикреплёнными массами

Постановка задачи (в линейном приближении)

Уравнение движения для частицы с радиус-вектором $\mathbf{x}$:

$$m\ddot{\boldsymbol{u}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}),$$

$$\boldsymbol{C}_1 = \boldsymbol{C}_{-1} = \frac{c}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{C}_2 = \boldsymbol{C}_{-2} = \frac{c}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{C}_3 = \boldsymbol{C}_{-3} = \frac{c}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{C}_4 = \boldsymbol{C}_{-4} = \frac{c}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{C}_5 = \boldsymbol{C}_{-5} = \frac{c}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{C}_6 = \boldsymbol{C}_{-6} = \frac{c}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{C}_0 = -4c\boldsymbol{I},$$

Постановка задачи (в линейном приближении)

Уравнение движения для частицы с радиус-вектором $\mathbf{x}$:

$$m\ddot{\boldsymbol{u}}(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha} \boldsymbol{C}_{\alpha} \boldsymbol{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}_{\alpha}),$$

Начальные условия

$$u_x = u_y = u_z = 0,$$

$$\dot{u}_x = \beta(\mathbf{x})\sqrt{\frac{k_{\mathrm{B}}T_0}{m}}, \quad \dot{u}_y = \dot{u}_z = 0, \quad \langle\beta(\mathbf{x})\rangle = 0, \quad \langle\beta(\mathbf{x})^2\rangle = 1,$$

где x,y,z — оси кубичекой симметрии.

Матричная и стандартная кинетическая температуры

Матричная температура, вводимая для описания теплового состояния кристалла, имеет вид

$$k_{\mathrm{B}}\boldsymbol{T} = m\begin{pmatrix} \langle \dot{u}_x^2\rangle & \langle \dot{u}_x\dot{u}_y\rangle & \langle \dot{u}_x\dot{u}_z\rangle \\ \langle \dot{u}_x\dot{u}_y\rangle & \langle \dot{u}_y^2\rangle & \langle \dot{u}_y\dot{u}_z\rangle \\ \langle \dot{u}_x\dot{u}_z\rangle & \langle \dot{u}_y\dot{u}_z\rangle & \langle \dot{u}_z^2\rangle \end{pmatrix}.$$

Диагональные элементы матричной температуры — кинетические температуры, соответствующие ортогональным пространственным направлениям:

$$k_{\mathrm{B}}T_{xx} = m\langle \dot{u}_x^2\rangle, \quad k_{\mathrm{B}}T_{yy} = m\langle \dot{u}_y^2\rangle, \quad k_{\mathrm{B}}T_{zz} = m\langle \dot{u}_z^2\rangle.$$

Здесь $\langle ...\rangle$ — среднее по **реализациям**.
Стандарная (средняя) кинетическая температура:

$$T = (T_{xx} + T_{yy} + T_{zz})/3.$$

Матричная и стандартная кинетическая температуры

Формула матричной температуры [*Kuzkin, CMAT 31, 1401—1423 (2019)*]:

$$\boldsymbol{T} = \frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P}\tilde{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{P}^{\top}\mathrm{d}\mathbf{k}, \qquad \tilde{T}_{ij} = \{\boldsymbol{P}^{\top}\boldsymbol{T}_0\boldsymbol{P}\}_{ij}\Big[\cos\Big((\omega_i-\omega_j)t\Big) + \cos\Big((\omega_i+\omega_j)t\Big)\Big],$$

$\boldsymbol{P}$ — поляризационная матрица, ω_j — ветка дисперсионного соотношения, $\mathbf{k}$ — волновой вектор, $\boldsymbol{T}_0$ — начальная матричная температура.

Формула стандартной кинетической температуры для ГЦК решётки при произвольном тепловом возмущении:

$$T = \frac{T_0}{2} + \sum_j T_j, \qquad T_j = \frac{T_0}{6}\int_{\mathbf{k}} \cos(2\omega_j(\mathbf{k})t)\mathrm{d}\mathbf{k},$$

где T_j — вклады веток дисперсионного соотношения ω_j.

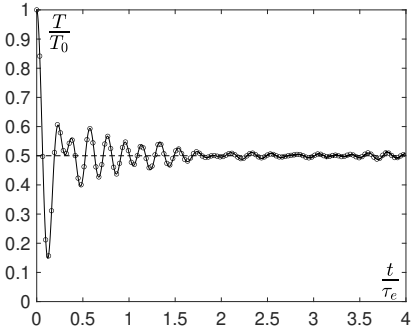
Дисперсионное соотношение

Ветки дисперсионного соотношения, ω_j, находятся как

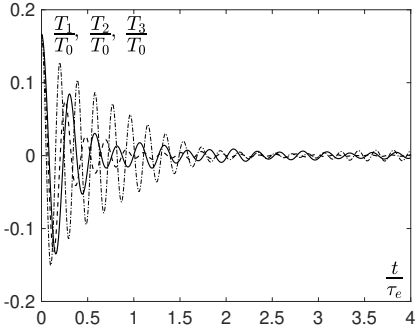
$$\Omega_{11} = f(\theta_1, \theta_3, \theta_2), \qquad \Omega_{12} = \Omega_{21} = g(\theta_1, \theta_3, \theta_2),$$
$$\Omega_{13} = \Omega_{31} = g(\theta_3, \theta_2, \theta_1), \qquad \Omega_{22} = f(\theta_2, \theta_1, \theta_3),$$
$$\Omega_{23} = \Omega_{32} = g(\theta_2, \theta_1, \theta_3), \qquad \Omega_{33} = f(\theta_3, \theta_2, \theta_1),$$
$$f(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = 2\omega_e^2 \left(\sin^2 \frac{\theta_1}{2} + \sin^2 \frac{\theta_1 - \theta_3}{2} + \sin^2 \frac{\theta_2}{2} + \sin^2 \frac{\theta_2 - \theta_3}{2} \right),$$
$$g(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = 2\omega_e^2 \left(\sin^2 \frac{\theta_1}{2} - \sin^2 \frac{\theta_2 - \theta_3}{2} \right), \quad \omega_e^2 = \frac{c}{m}.$$

где θ_1, θ_2, θ_3 — волновные числа.

Колебания стандартной кинетической температуры



Колебания стандартной кинетической температуры



Вклады веток дисперсионного соотношения в колебания стандартной кинетической температуры (сплошная линия: T_1, пунктирная линия: T_2, штрихпунктирная линия: T_3)

Колебания стандартной кинетической температуры

Особенности:

1. Вклады T_2 и T_3 затухают как $1/t^{\frac{3}{2}}$, но вклад T_1 затухает медленнее (примерно как $1/t$).

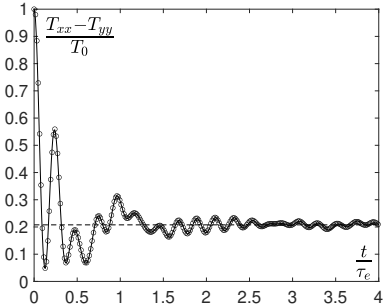
2. Колебания кинетической температуры T имеют 6 характерных частот:

$$\mathcal{W}_1/\omega_e \approx 1.41 \pm 0.03, \qquad \mathcal{W}_2/\omega_e \approx 1.99 \pm 0.03,$$

$$\mathcal{W}_3/\omega_e \approx 2.44 \pm 0.03, \qquad \mathcal{W}_4/\omega_e \approx 2.50 \pm 0.03,$$

$$\mathcal{W}_5/\omega_e \approx 2.66 \pm 0.03, \qquad \mathcal{W}_6/\omega_e \approx 2.82 \pm 0.03.$$

Перераспределение энергии по пространственным направлениям



Изменение разницы кинетических температур, вызванное перераспределением энергии по пространственным направлениям

Кинетические температуры, соответствующие направлениям x и y, не равны! Их разница стремится к значению, определяемому из формулы равновесного значения матричной температуры [*Kuzkin, CMAT 31, 1401—1423 (2019)*]:

$$\boldsymbol{T}_{eq} = \frac{1}{6}\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{T}_0\right)\boldsymbol{I} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P}\mathrm{diag}(\boldsymbol{P}^\top \mathrm{dev}\,\boldsymbol{T}_0\boldsymbol{P})\boldsymbol{P}^\top \mathrm{d}\mathbf{k}$$

Влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям

Предположения:

1. Частицы взаимодействуют парным потенциалом Леннард-Джонса:

$$\Pi(r) = \varepsilon \left(\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^{6} \right),$$

где ε — энергия связи; r — длина связи; a — длина недеформированной связи.

Влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям

Предположения:

1. Частицы взаимодействуют парным потенциалом Леннард-Джонса:

$$\Pi(r) = \varepsilon \left(\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^{6} \right),$$

   где ε — энергия связи; r — длина связи; a — длина недеформированной связи.

2. Взаимодействие частиц ограничено взаимодействием с ближайшими соседями:

$$\Pi'(r)|_{r>a_{\mathrm{cut}}} = 0,$$

   где a_{cut} — радиус обрезания, $a_{\mathrm{cut}} = 1.4a$.

Влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям

Предположения:

1. Частицы взаимодействуют парным потенциалом Леннард-Джонса:

$$\Pi(r) = \varepsilon \left(\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^{6} \right),$$

   где ε — энергия связи; r — длина связи; a — длина недеформированной связи.

2. Взаимодействие частиц ограничено взаимодействием с ближайшими соседями:

$$\Pi'(r)|_{r > a_{\text{cut}}} = 0,$$

   где a_{cut} — радиус обрезания, $a_{\text{cut}} = 1.4a$.

3. Начальные условия — такие же, как и в линейной постановке задачи.

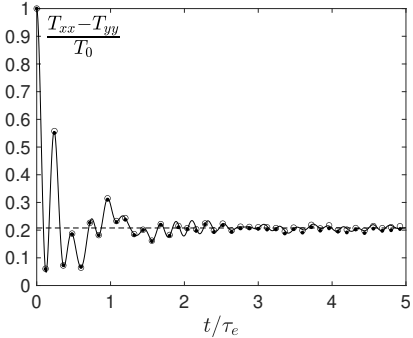
Влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям

Влияние нелинейности определяется параметром $k_{\mathrm{B}}T_0/\varepsilon$, где

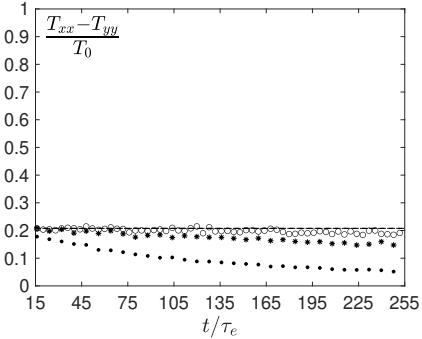
$$\frac{k_{\mathrm{B}}T_0}{\varepsilon} = \frac{2}{3}\left(\frac{v_0}{v_d}\right)^2,$$

где v_0 — амплитуда начальных скоростей частиц; v_d — скорость диссоциации.

Влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям



Перераспределение энергии на малых временах



Перераспределение энергии на больших временах

Линии — аналитическое решение в линейной теории, кружки — $v_0/v_d = 0.05$, звёздочки — $v_0/v_d = 0.1$, точки — $v_0/v_d = 0.25$.

1. На малых временах работает линейная теория.
2. На больших временах возникает эволюционный процесс перераспределения энергии,

Аппроксимация «нелинейного» масштаба времени

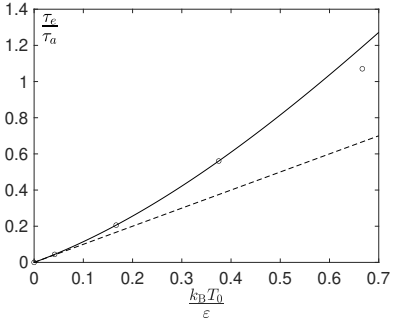
Предположение:

$$(T_{xx} - T_{yy})|_{t \gg \tau_e} = T_0 \Psi\left(\frac{t}{\tau_a}\right), \quad \tau_a = \tau_e \varphi\left(\frac{k_{\mathrm{B}} T_0}{\varepsilon}\right), \quad \tau_e = 2\pi\sqrt{\frac{m}{c}}.$$

Аппроксимация «нелинейного» масштаба времени

Предположение:

$$(T_{xx} - T_{yy})|_{t \gg \tau_e} = T_0 \Psi\left(\frac{t}{\tau_a}\right), \quad \tau_a = \tau_e \varphi\left(\frac{k_\mathrm{B} T_0}{\varepsilon}\right), \quad \tau_e = 2\pi\sqrt{\frac{m}{c}}.$$

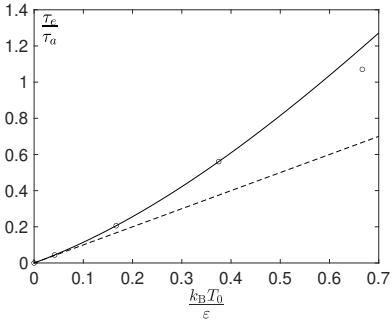


Зависимость «нелинейного» масштаба времени от начальной температуры

Аппроксимация «нелинейного» масштаба времени

Аппроксимация «нелинейного» масштаба времени

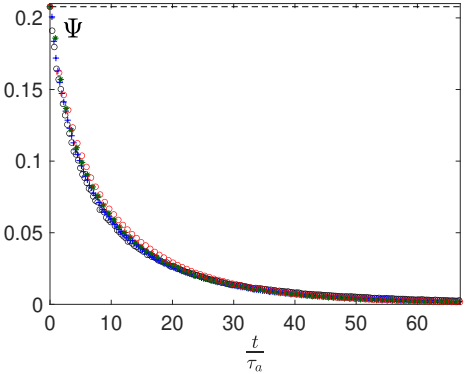
$$\frac{\tau_e}{\tau_a} \approx \frac{k_\mathrm{B}T_0}{\varepsilon} + 1.496\left(\frac{k_\mathrm{B}T_0}{\varepsilon}\right)^2 - 0.469\left(\frac{k_\mathrm{B}T_0}{\varepsilon}\right)^3$$



Зависимость «нелинейного» масштаба от начальной температуры

Аппроксимация τ_a теряет точность при существенно нелинейных взаимодействиях

Влияние нелинейности на перераспределение энергии по пространственным направлениям



Изменение разницы кинетических температур $T_{xx} - T_{yy}$ при $v_0/v_d = 0.25$ (чёрные точки), $v_0/v_d = 0.5$ (синие точки), $v_0/v_d = 0.75$ (зелёные точки), $v_0/v_d = 1$ (красные точки)

На больших временах: $\Psi|_{t \gg \tau_a} \approx Ae^{-\frac{Bt}{\tau_a}}, \quad A = 0.044 \pm 0.004, \quad B = 0.046 \pm 0.005.$

Основные результаты

1. Колебания стандартной кинетической температуры имеют 6 характерных частот (одна из которых соответсвует разрыву групповой скорости, остальные — нулевой групповой скорости) и затухают *медленнее*, чем $1/t^{\frac{3}{2}}$
2. Предложена аппроксимация масштаба времени выравнивания кинетических температур, соответствующих ортогональным направлениям, при взаимодействиях Леннард-Джонса

PHYSICAL REVIEW E **102**, 042219 (2020)

Equilibration of kinetic temperatures in face-centered cubic lattices

Vitaly A. Kuzkin [1,2] and Sergei D. Liazhkov [1]
[1] *Peter the Great Saint Petersburg Polytechnical University, Saint Petersburg, Russia*
[2] *Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, Saint Petersburg, Russia*

(Received 29 May 2020; revised 3 September 2020; accepted 2 October 2020; published 28 October 2020)

We study thermal equilibration in face-centered cubic lattices with harmonic and anharmonic (Lennard-Jones) interactions. Initial conditions are chosen such that the kinetic temperatures, corresponding to three spatial directions, are different. We show that in the anharmonic case the approach to thermal equilibrium has two time scales. The first time scale is the period of atomic vibration. At times of the order of several atomic periods, the approach to equilibrium is accompanied by decaying high frequency oscillations of the temperatures. The oscillations are described analytically using the harmonic approximation. In particular, the characteristic frequencies of the oscillations are calculated. It is shown that the oscillations decay in time more slowly than expected. The second time scale, presented in the anharmonic case only, depends on the initial temperature of the system. Normalizing time by this scale, we obtain numerically a universal curve describing equilibration in the Lennard-Jones crystal over a wide range of temperatures.

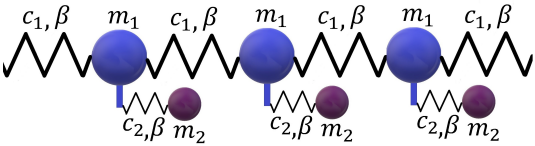
DOI: 10.1103/PhysRevE.102.042219

План доклада

1. Переход к тепловому равновесию в гранецентрированной кубической (ГЦК) решётке

2. Двухтемпературный перенос тепловой энергии в β-ФПУТ цепочке частиц с прикреплёнными массами

Цепочка частиц с прикреплёнными массами (mass-in-mass)



Цепочка частиц с прикряеплёнными массами (моделируется как акустический метаматериал в работах [*Boechler, N., Eliason, J.K. et al. Phys. Rev. Lett. 111, 036103 (2013)*; *Boechler, N., Eliason, J.K. et al. Phys. Rev. Lett. 111, 036103 (2013)*;*Milton, G.M. New Journal of Physics 9 359 (2007)*; *Porubov, A.V. Int. J. Nonlin. Mech., Vol. 137, 103788 (2021)*])

Постановка задачи

Уравнения движения

$$m_1\ddot{u}_{1,j} = c_1\left(u_{1,j+1} - 2u_{1,j} + u_{1,j-1}\right) + c_2\left(u_{2,j} - u_{1,j}\right)$$
$$+\beta(u_{2,j} - u_{1,j})^3 + \beta\left((u_{1,j+1} - u_{1,j})^3 + (u_{1,j-1} - u_{1,j})^3\right),$$
$$m_2\ddot{u}_{2,j} = c_2\left(u_{1,j} - u_{2,j}\right) + \beta(u_{1,j} - u_{2,j})^3, \quad c_1 = c_2 = c.$$

Начальные условия

$$u_{1,j} = u_{2,j} = 0,$$
$$\dot{u}_{1,j} = \rho_{1,j}\sqrt{\frac{k_\mathrm{B}T_j^0}{m_1}}, \quad \dot{u}_{2,j} = \rho_{2,j}\sqrt{\frac{k_\mathrm{B}T_j^0}{m_2}},$$
$$\langle\rho_{1,j}\rangle = \langle\rho_{2,j}\rangle = 0, \quad \langle\rho_{1,j}\rho_{2,j}\rangle = 0, \quad \langle\rho_{1,j}^2\rangle = \langle\rho_{2,j}^2\rangle = 1.$$

Кинетические температуры подрешёток

Матричная температура

$$k_\mathrm{B}\boldsymbol{T}_j = \begin{pmatrix} m_1\langle \dot{u}_{1,j}^2\rangle & \sqrt{m_1 m_2}\langle \dot{u}_{1,j}\dot{u}_{2,j}\rangle \\ \sqrt{m_1 m_2}\langle \dot{u}_{2,j}\dot{u}_{1,j}\rangle & m_2\langle \dot{u}_{2,j}^2\rangle \end{pmatrix}$$

Кинетическая температура β—FPUT цепочки: $k_\mathrm{B}T_{11,j} = m_1\langle \dot{u}_{1,j}^2\rangle$
Кинетическая температура прикреплённых осцилляторов:
$k_\mathrm{B}T_{22,j} = m_2\langle \dot{u}_{2,j}^2\rangle$

Кинетические температуры подрешёток

Матричная температура

$$k_{\mathrm{B}}\boldsymbol{T}_j = \begin{pmatrix} m_1\langle \dot{u}_{1,j}^2\rangle & \sqrt{m_1 m_2}\langle \dot{u}_{1,j}\dot{u}_{2,j}\rangle \\ \sqrt{m_1 m_2}\langle \dot{u}_{2,j}\dot{u}_{1,j}\rangle & m_2\langle \dot{u}_{2,j}^2\rangle \end{pmatrix}$$

Кинетическая температура β—FPUT цепочки: $k_{\mathrm{B}}T_{11,j} = m_1\langle \dot{u}_{1,j}^2\rangle$

Кинетическая температура прикреплённых осцилляторов:

$k_{\mathrm{B}}T_{22,j} = m_2\langle \dot{u}_{2,j}^2\rangle$

Стандартная кинетическая температура: $T_j = \frac{1}{2}\left(T_{11,j} + T_{22,j}\right)$.

В начальный момент времени каждой подрешётке задаётся температура T_j^0.

Дисперсионное соотношение и групповые скорости

Дисперсионное соотношение (формула)

$$\omega_{1,2}(k) = \frac{\omega_e}{\sqrt{\gamma}}\sqrt{R(k) \mp \sqrt{R(k)^2 - 4\gamma \sin^2 \frac{k}{2}}},$$
$$R(k) = \tfrac{1+\gamma}{2} + 2\gamma \sin^2 \tfrac{k}{2}, \quad \omega_e = \sqrt{c/m_1}, \quad \gamma = m_2/m_1,$$

где k — волновое число.

Дисперсионное соотношение и групповые скорости

Дисперсионное соотношение (формула)

$$\omega_{1,2}(k) = \frac{\omega_e}{\sqrt{\gamma}}\sqrt{R(k) \mp \sqrt{R(k)^2 - 4\gamma \sin^2 \frac{k}{2}}},$$
$$R(k) = \tfrac{1+\gamma}{2} + 2\gamma \sin^2 \tfrac{k}{2}, \quad \omega_e = \sqrt{c/m_1}, \quad \gamma = m_2/m_1,$$

где k — волновое число.

Групповые скорости (формула)

$$v^g_{1,2} = \frac{v_s\sqrt{\gamma}}{2}\frac{\left(1 \pm \dfrac{1 - R(k)}{\sqrt{R^2(k) - 4\gamma \sin^2 \frac{k}{2}}}\right)\sin k}{\sqrt{R(k) \mp \sqrt{R^2(k) - 4\gamma \sin^2 \frac{k}{2}}}}, \quad v_s = \omega_e a,$$

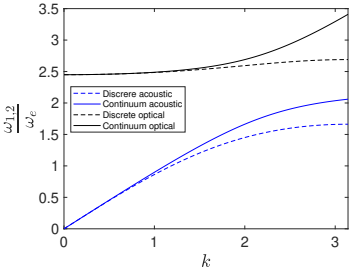
v_s — скорость звука.

Дисперсионное соотношение (в континуальном пределе)

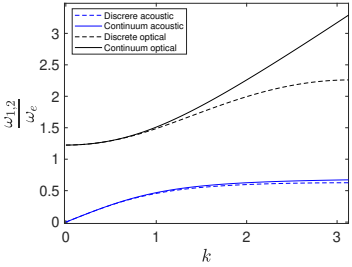
Дисперсионное соотношение $\omega_{1,2}$ в континуальном приближении:

$$\omega_1 = \omega_e \sqrt{\frac{\gamma(k^2+1)+1-\sqrt{\left(\gamma(k^2+1)+1\right)^2-4k^2\gamma}}{2\gamma}},$$

$$\omega_2 = \omega_e \sqrt{\frac{\gamma(k^2+1)+1+\sqrt{\left(\gamma(k^2+1)+1\right)^2-4k^2\gamma}}{2\gamma}}$$



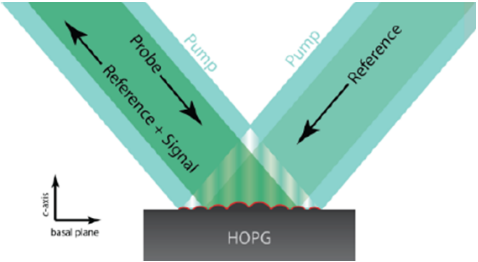
$\gamma = 1/5$



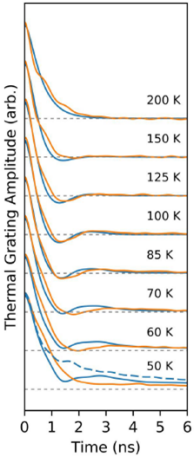
$\gamma = 2$

Синусоидальное возмущение: эксперимент 1

$$T^0(x) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L}$$

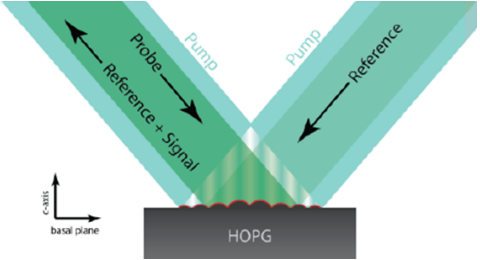


Эксперимент с Thermal Technique Grating [*Huberman, S. et al. Science 364, 6438 (2019)*]

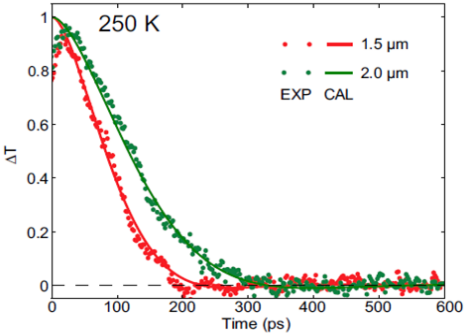


Синусоидальное возмущение: эксперимент 2

$$T^0(x) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L}$$



Эксперимент с Thermal Technique Grating [*Zhiwei, D. et al. Nat.Comm 13, 285 (2022)*]



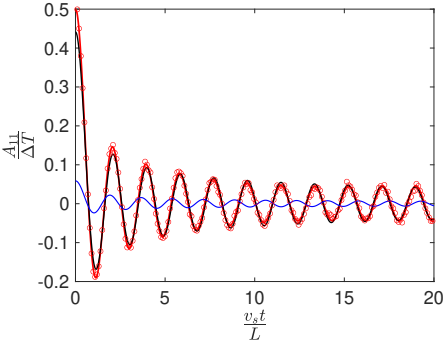
Вывод амплитуд кинетических температур

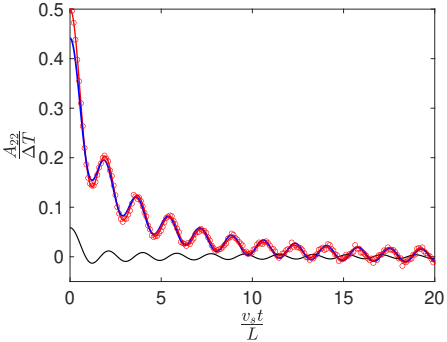
1. Нахождение скоростей частиц через интегрирование уравнений динамики ($L = 1000a$, $\Delta T = 0.1T_b$)
2. Вычисление соответствующих кинетических энергий
3. Осреднение по реализациям ($N_r = 10^4$)
4. Нахождение амплитуд кинетических температур [*Kuzkin, V.A., CMAT 31, 1573–1599 (2019)]*] $A_{jj}(t) = \frac{2}{L}\int_0^L T_{jj}(t)\sin\frac{2\pi x}{L}\mathrm{d}x$

Аналитическое решение: ($\beta = 0$):

$$A_{jj} = A_{jj}^{\mathrm{ac}} + A_{jj}^{\mathrm{op}}, \quad A_{jj}^{\mathrm{ac}} = \frac{\Delta T}{4\pi}\int_0^{2\pi} P_{j1}^2 \cos\frac{2\pi v_1^g(k)t}{L}\mathrm{d}k, \quad A_{jj}^{\mathrm{op}} = \frac{\Delta T}{4\pi}\int_0^{2\pi} P_{j2}^2 \cos\frac{2\pi v_2^g(k)t}{L}\mathrm{d}k.$$

Затухание амплитуд в гармонической цепочке с прикреплёными массами

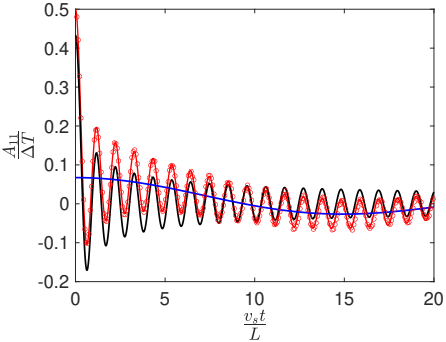


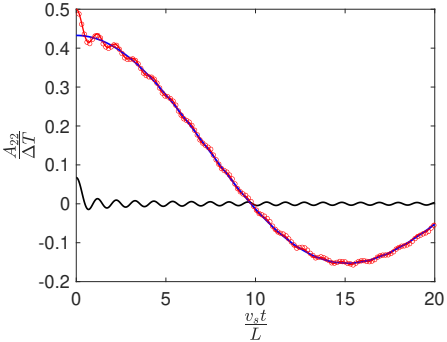


$$m_2 = 2m_1$$

Красная линия – аналитическое решение, чёрная линия – вклад акустической ветки дисперсионного соотношения, синяя линяя – вклад оптической ветки, точки – численное решение

Затухание амплитуд в гармонической цепочке с прикреплёными массами





$$m_2 = m_1/10$$

Красная линия – аналитическое решение, чёрная линия – вклад акустической ветки дисперсионного соотношения, синяя линяя – вклад оптической ветки, точки – численное решение

Каждый вклад имеет одну характерную частоту

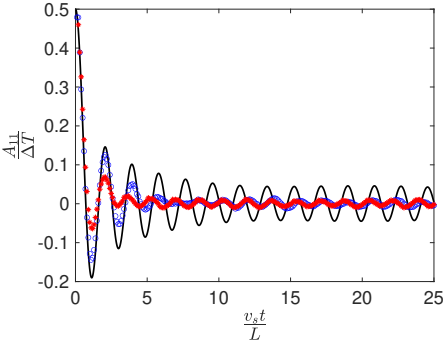
Приближённое решение для амплитуд нескольких температур

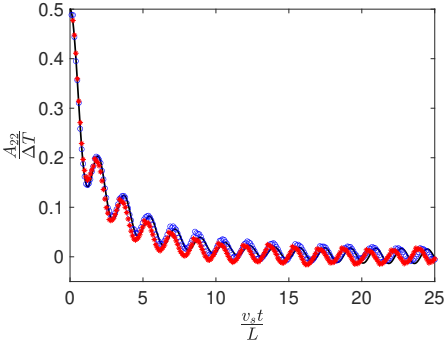
При $\gamma \ll 1$ выражения для амплитуд A_{11} и A_{22} можно записать в замкнутой форме

$$A_{11} \approx \frac{\Delta T}{2} J_0\left(\frac{2\pi w_1 t}{L}\right), \quad A_{22} \approx \frac{\Delta T}{2} J_0\left(\frac{2\pi w_2 t}{L}\right), \quad w_{1,2} = \max v^g_{1,2}.$$

Вклад низкочастотной ветки совершает высокочастотные колебания, вклад высокочастнотной ветки совершает низкочастотные колебания — **баллистическая инверсия спектров**

Затухание амплитуд в ангармонической цепочке с прикреплёнными массами. Влияние слабой нелинейности



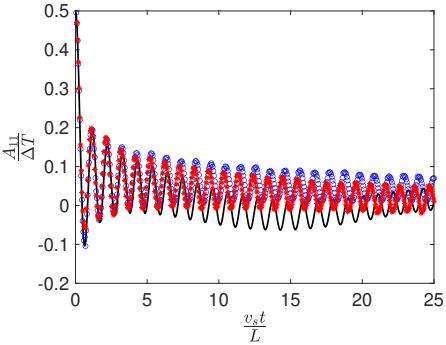


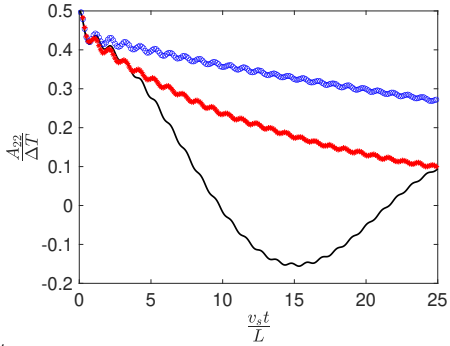
$$m_2 = 2m_1$$

Чёрная линия – аналитическое решение для гармонической цепочки, синие точки – численное решение при $\frac{k_{\text{B}} T_b \beta}{c^2} = 0.05$, красные точки – численное решение при $\frac{k_{\text{B}} T_b \beta}{c^2} = 0.1$

Кинетические температуры не выравниваются, но затухают быстрее

Затухание амплитуд в ангармонической цепочке с прикреплёнными массами. Влияние слабой нелинейности



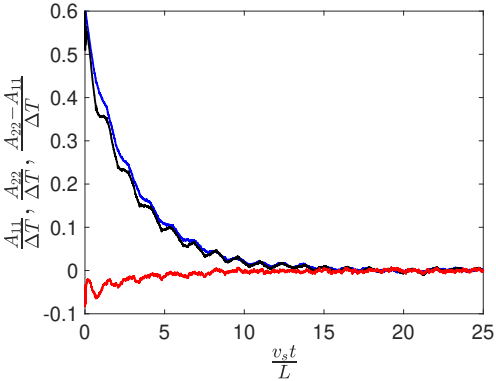


$$m_2 = m_1/10$$

Чёрная линия – аналитическое решение для гармонической цепочки, синие точки – численное решение при $\frac{k_B T_b \beta}{c^2} = 0.05$, красные точки – численное решение при $\frac{k_B T_b \beta}{c^2} = 0.1$

Кинетические температуры не выравниваются, но затухают быстрее

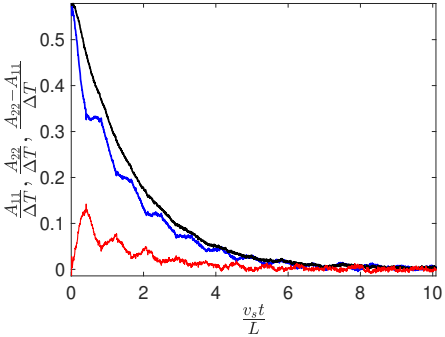
Затухание амплитуд в ангармонической цепочке с прикреплёнными массами. Влияние сильной нелинейности

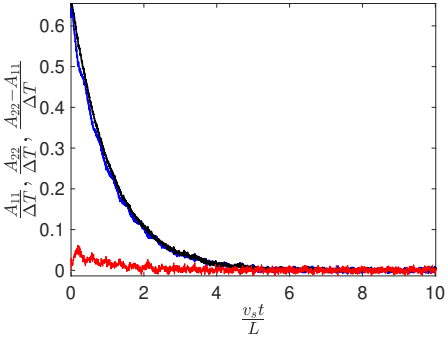


Изменение во времени амплитуд кинетических температур A_{11} (синяя линия), A_{22} (черная линия) и их разницы при $\frac{k_B T_b \beta}{c^2} = 2$, $m_2 = 2m_1$

Существенная нелинейность ведет к переходу из баллистического режима в аномальный диффузионный. Разница между кинетическими температурами в течение перехода остается конечной!

Затухание амплитуд в ангармонической цепочке с прикреплёнными массами. Влияние сильной нелинейности

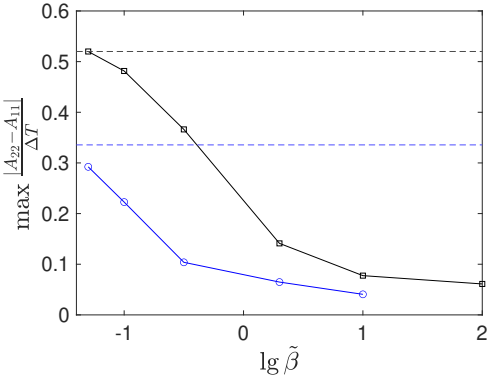




Изменение во времени амплитуд кинетических температур A_{11} (синяя линия), A_{22} (чёрная линия) и их разницы при $\frac{k_B T_b \beta}{c^2} = 2$ (слева), $\frac{k_B T_b \beta}{c^2} = 100$ (справа), $m_2 = m_1/10$

Существенная нелинейность ведет к переходу из баллистического режима в аномальный дифузионный. Разница между кинетическими температурами в течение перехода остается конечной!

Зависимость разницы кинетических температур от коэффициента нелинейности



Зависимость максимальной разницы амплитуд кинетических температур от безразмерного нелинейого коэффициента при $m_2 = 2m_1$ (синяя линия), $m_2 = m_1/10$ (чёрная линия). Решение в гармоническом приближении (пунктирные линии)

Различие кинетических температур зависит от соотношения между массами прикреплённых частиц и β—FPUT цепочки.

Основные результаты

1. Приближённая форма аналитического решения для амплитуд кинетических температур, описывающая явление «баллистической инверсии спектров»
2. Качественные признаки баллистического распространения тепла наблюдаются при слабых нелинейных взаимодействиях
3. Различные кинетические температуры наблюдаются при переходе из баллистического режима теплопроводности в аномальный диффузионный

PHYSICAL REVIEW E **105**, 054145 (2022)

Unsteady two-temperature heat transport in mass-in-mass chains

Sergei D. Liazhkov [1,2] and Vitaly A. Kuzkin [2,1]
[1] *Peter the Great Saint Petersburg Polytechnical University, Saint Petersburg, Russia*
[2] *Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, Saint Petersburg, Russia*

(Received 8 February 2022; revised 30 March 2022; accepted 28 April 2022; published 25 May 2022)

We investigate the unsteady heat (energy) transport in an infinite mass-in-mass chain with a given initial temperature profile. The chain consists of two sublattices: the β-Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou (FPUT) chain and oscillators (of a different mass) connected to each FPUT particle. Initial conditions are such that initial kinetic temperatures of the FPUT particles and the oscillators are equal. Using the harmonic theory, we analytically describe evolution of these two temperatures in the ballistic regime. In particular, we derive a closed-form fundamental solution and solution for a sinusoidal initial temperature profile in the case when the oscillators are significantly lighter than the FPUT particles. The harmonic theory predicts that during the heat transfer the temperatures of sublattices are significantly different, while initially and finally (at large times) they are equal. This may look like an artifact of the harmonic approximation, but we show that it is not the case. Two distinct temperatures are also observed in the anharmonic case, even when the heat transport regime is no longer quasiballistic. We show that the value of the nonlinearity coefficient required to equalize the temperatures strongly depends on the particle mass ratio. If the oscillators are much lighter than the FPUT particles, then a fairly strong nonlinearity is required for the equalization.

DOI: 10.1103/PhysRevE.105.054145

Открытые вопросы и задачи

1. Многотемпературные модели в задачах термоупругости и термоэлектромагнетизма на микро- и наноуровне
2. Взаимосвязь между масштабом времени выравнивания кинетических температур и временем релаксации из кинетической теории
3. Проверка наличия нескольких температур в углеводородных цепях с помощью DFT
4. Построение определяющих соотношений в задачах термомеханики многокомпонентных сред на микро- и наноуровне