Баллистический теплоперенос и баллистическая термоупругость

В.А. Кузькин

Институт проблем машиноведения РАН

27-ая Всероссийская конференция по численным методам решения задач теории упругости и пластичности,

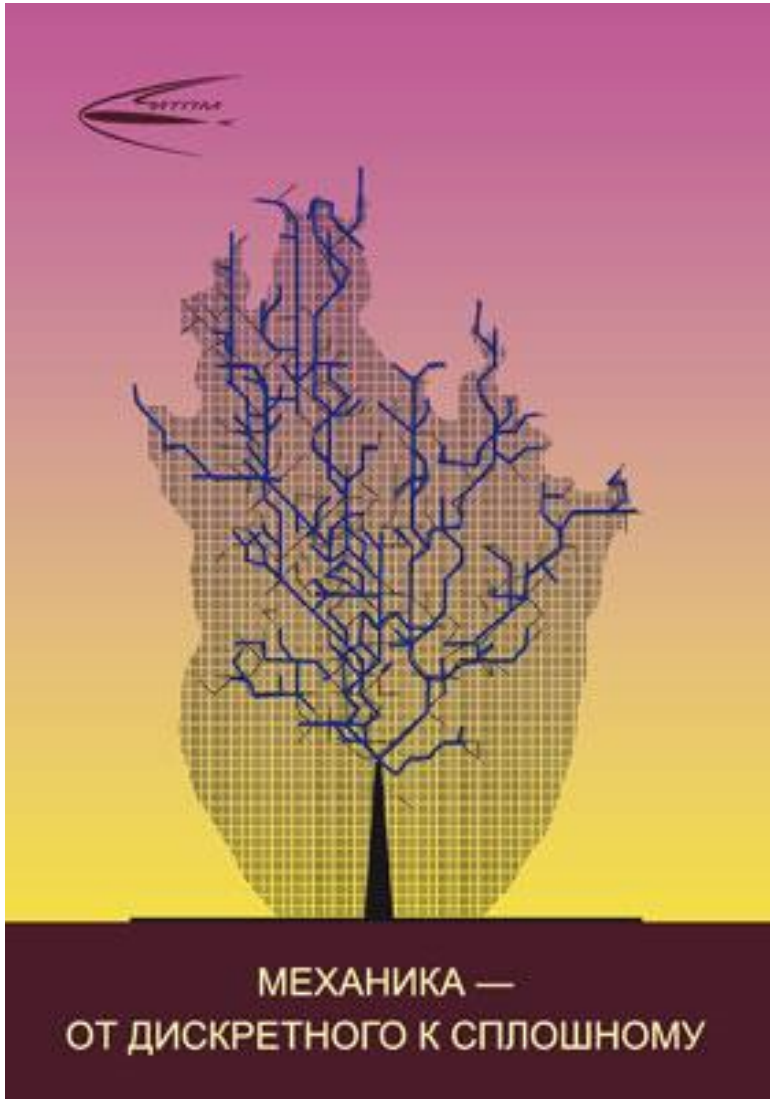
посвященная 100-летию со дня рождения Николая Николаевича Яненко

Красноярск, июль 2021

Актуальность

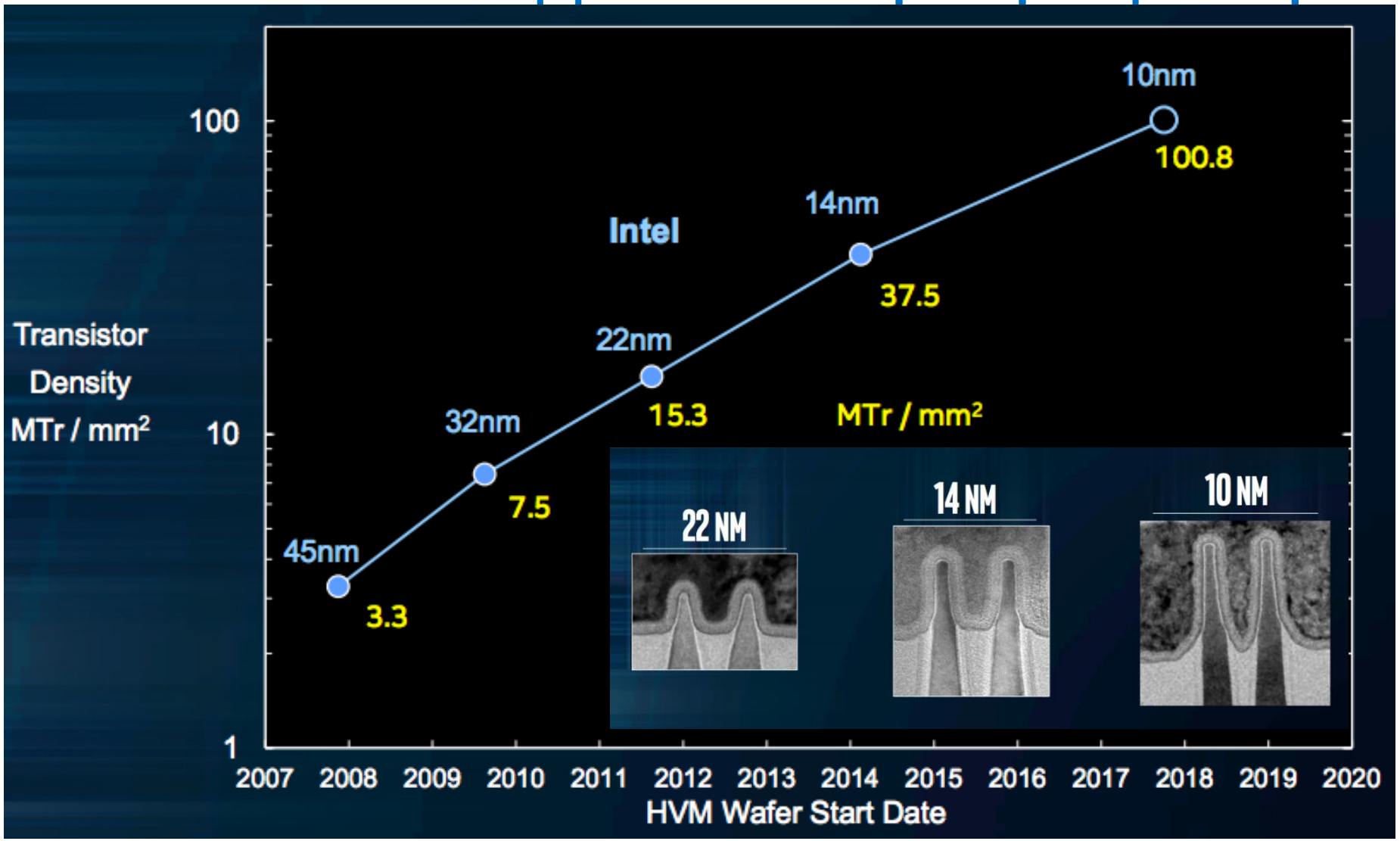
Актуальность работы обусловлена:

- необходимостью установления связи между континуальным и дискретным описание деформируемых твердых тел;
- необходимостью решения задач термомеханики на микро- и наноуровне (в т.ч. для дизайна новых процессоров);
- необходимостью рассмотрения сильно неравновесных процессов в деформируемых твердых телах, возникающих, в т.ч. при лазерном воздействии;
- отклонением от макроскопических определяющих соотношений на микро- и наноуровне (в т.ч. нарушение закона Фурье).



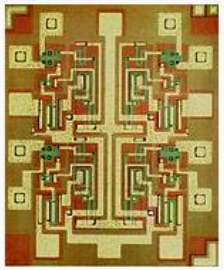
Фомин, В. М., Краус, Е. И., Шабалин, И. И. (2008). Механика - от дискретного к сплошному. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008 г., 344 с.

нано
Вызов: охлаждение ~~микро~~процессоров



https://spectrum.ieee.org/nanoclast/semiconductors/processors/intel-now-packs-100-million-transistors-in-each-square-millimeter

Semiconductor device fabrication



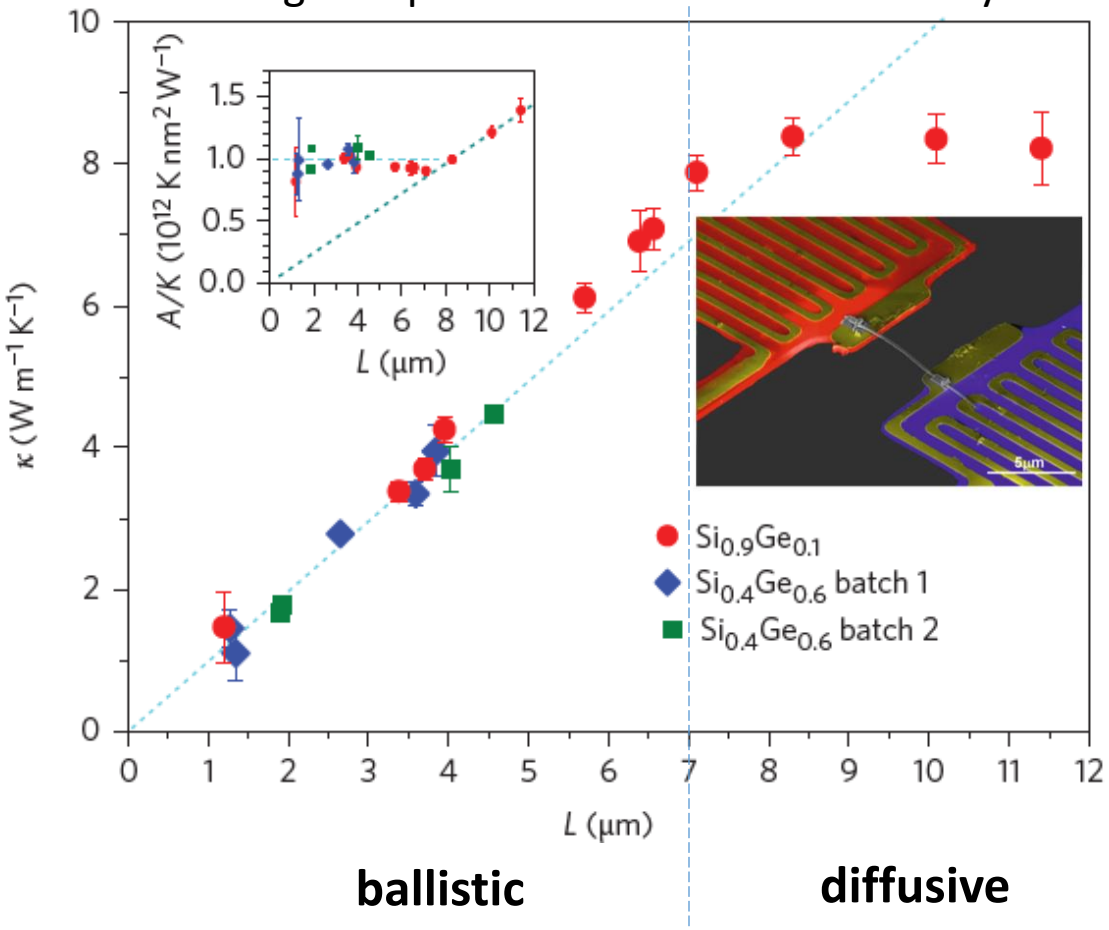
MOSFET scaling (process nodes)

10 µm – 1971
6 µm – 1974
3 µm – 1977
1.5 µm – 1981
1 µm – 1984
800 nm – 1987
600 nm – 1990
350 nm – 1993
250 nm – 1996
180 nm – 1999
130 nm – 2001
90 nm – 2003
65 nm – 2005
45 nm – 2007
32 nm – 2009
22 nm – 2012
14 nm – 2014
10 nm – 2016
7 nm – 2018
5 nm – 2020

Режимы теплопереноса

- **Диффузионный**
  - Выполняется закон Фурье
  - Коэффициент теплопроводности – константа материала
- **Баллистический**
  - Нарушение закона Фуреье
  - Эффективный коэффициент теплопроводности пропорционален размеру (K ~ L)

Length dependence of heat conductivity*

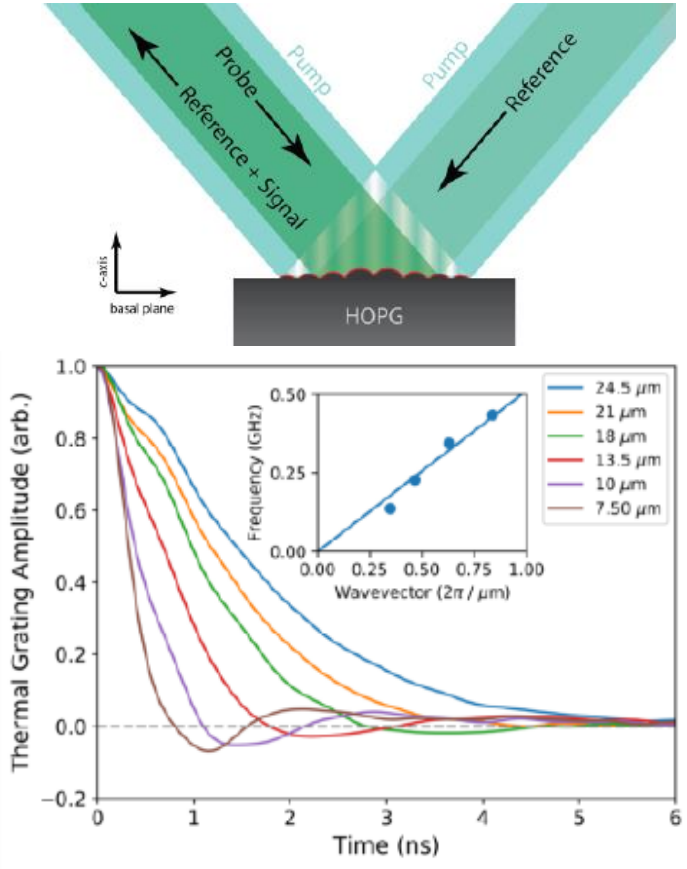


*T.-K. Hsiao et al. Observation of room-temperature ballistic thermal conduction persisting over 8.3 micron in SiGe nanowires. Nature Nanotech. 2013

Нестационарные эксперименты по теплопроводности. Метод Transient Thermal Grating*

- Синусоидальное поле температуры создается двумя лазерными лучами
- Измеряется отраженный от поверхности сигнал, зависящий от температуры
- В поликристаллическом графите при T ~ 100K амплитуда синуса затухает ***немонотонно***

Параметры:
- Период синуса ~10 µm,
- Температура фона ~100 K,
- Длительность импульса ~60 ps



S. Huberman et al. Science, 2019

- J.A. Rogers, A.A. Maznev, M.J. Banet, K.A. Nelson, Optical generation and characterization of acoustic waves in thin films: fundamentals and applications. Annu. Rev. Mater. Sci. (2000).
- S. Huberman, R.A. Duncan, K. Chen, B. Song, V. Chiloyan, Z. Ding, A.A. Maznev, G. Chen, K.A. Nelson, Observation of second sound in graphite at temperatures above 100 K, Science, (2019)

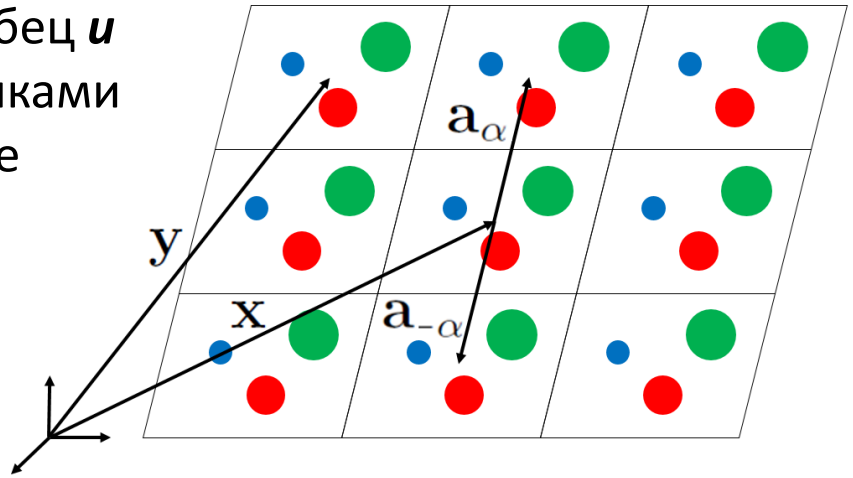
Содержание

- Гармоническая теория переноса тепловой энергии
- Баллистический теплоперенос в графене
- Отражение тепловых волн от границы
- Баллистическая термоупругость

Гармоническая теория теплопереноса

Гармонический кристалл

- Компоненты векторов перемещений частиц формируют столбец ***u***
- Частицы соединены с произвольным числом соседей пружинками
- Сила, действующая на каждую частицу, представляется в виде линейной комбинации перемещений других частиц
- Уравнения движения для частиц элементарной ячейки **x**:



$$M\dot{v}(\mathrm{x}) = \sum C_\alpha u(\mathrm{x} + \mathrm{a}_\alpha), \qquad C_\alpha = C_{-\alpha}^\top$$

Здесь ***M*** – матрица масс, ***C*** – матрицы, определяемые жесткостями связей

- Начальные условия:

$$u(\mathrm{x}) = 0, \quad v(\mathrm{x}) = v_0(\mathrm{x})$$

- Начальные скорости – некоррелированные случайные величины с нулевым мат. ожиданием

Мотивация

- Теплопроводность чисто баллистическая
- Аналитические решения
- Тестирование задач для нелинейных систем
- На малых временах линейное приближение хорошо описывает поведение нелинейных систем

Кинетическая температура и температурная матрица

- Температурная матрица ячейки ***x***:

$$k_B \boldsymbol{T}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \left\langle \boldsymbol{v}(\mathbf{x}) \boldsymbol{v}(\mathbf{x})^\top \right\rangle \boldsymbol{M}^{\frac{1}{2}} \quad \Leftrightarrow \quad k_B T_{ij} = \sqrt{M_i M_j} \left\langle v_i v_j \right\rangle$$

- Кинетическая температура

$$T(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \mathrm{tr} \boldsymbol{T}(\mathbf{x})$$

- В случае равнораспределения ***T*** **–** шаровая

Вывод формулы для температурной матрицы

- Equations of motion
- Initial conditions

Дискретное преобразование Фурье

Осреднение по реализациям

- Particle velocities (exact)

- Temperature matrix ***T***(**x**,t) (exact)

- Два масштаба времени
- Континуализация

- Температурная матрица ***T***(**x**,t) (приближенно)

- Krivtsov A.M. **Heat transfer in infinite harmonic one dimensional crystals**. Doklady Physics, 2015, Vol. 60, No. 9, pp. 407–411
- Kuzkin V.A. **Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell.** Continuum Mech. Thermodyn. 2019

Нестационарный баллистический теплоперенос в гармонических кристаллах

Эволюция температурного профиля $T_0(\boldsymbol{x})$ описывается формулой

$$T_S = \frac{1}{4N} \sum_{j=1}^{N} \int_{\mathbf{k}} \left(T_0\left(\mathbf{x} + \mathbf{v}_g^j t\right) + T_0\left(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g^j t\right) \right) \mathrm{d}\mathbf{k}.$$

тепловые волны

Формула применима

- 1D, 2D, 3D решетки
- ячейка имеет N dстепеней свободы
- произвольные линейные взаимодействия

Kuzkin V.A. **Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell.** Continuum Mech. Thermodyn. 2019

Нестационарный баллистический теплоперенос в гармонических кристаллах

$$\boldsymbol{T}_S \approx \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P}\tilde{\boldsymbol{T}}_S\boldsymbol{P}^{*\top}\mathrm{d}\mathbf{k}, \qquad \{\tilde{\boldsymbol{T}}_S\}_{ij} = \frac{1}{4}\{\boldsymbol{P}^{*\top}\left(\boldsymbol{T}_0(\mathbf{x}+\mathbf{v}_g^j t)+\boldsymbol{T}_0(\mathbf{x}-\mathbf{v}_g^j t)\right)\boldsymbol{P}\}_{jj}\delta_{ij}$$

$\boldsymbol{T}_0$ - начальное распределение температурной матрицы

ω_i - ветка дисперсионного соотношения

$\mathbf{v}_g^j$ - групповая скорость

$\boldsymbol{P}$ - поляризационная матрица

Kuzkin V.A. **Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell.** Continuum Mech. Thermodyn. 2019

Особенности баллистического теплопереноса

Гармоническая теория предсказывает:

- ✓ Конечная скорость фронта
- ✓ Несколько температур
- ✓ Анизотропия в “изотропных материалах”
- ✓ Перенос тепла “от холодного к горячему”
- ✓ Колебательное затухание температуры

Применение теории баллистического теплопереноса

- **Цепочки**
  - Цепочка Гука
  - Цепочка с взаимодействиями не ближайших соседей
  - Двухатомная цепочка
  - alpha-FPUT
  - beta-FPUT

- **2D решетки**
  - Скалярная квадратная
  - Графен (колебания в плоскости)
  - Графен (поперечные колебания)

Применение теории баллистического теплопереноса

- **Цепочки**
  - Цепочка Гука
  - Цепочка с взаимодействиями не ближайших соседей
  - Двухатомная цепочка
  - alpha-FPUT
  - beta-FPUT

- **2D решетки**
  - Скалярная квадратная
  - Графен (колебания в плоскости)
  - Графен (поперечные колебания)

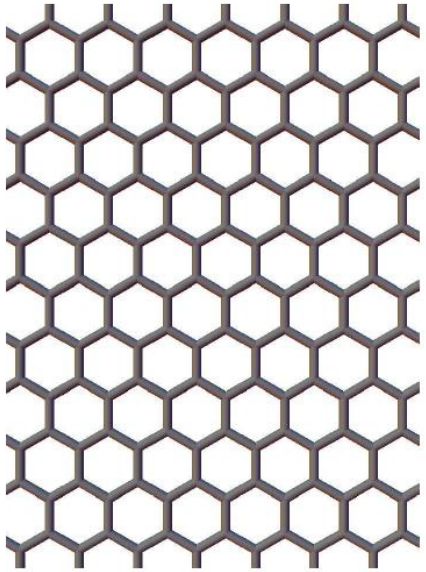
Игорь Беринский

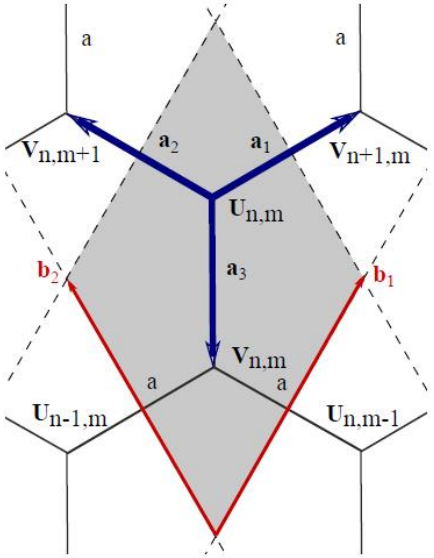
Артем Панченко

Особенности баллистического теплопереноса

Гармоническая модель графена

- Поперечные колебания
- Линейные и угловые пружины
- Случайные скорости
- Нулевые перемещения





Уравнения динамики

$$M\ddot{U}^x_{n,m} = \frac{c\sqrt{3}}{4}\left[\sqrt{3}V^x_{n+1,m} + V^y_{n+1,m} - 2\sqrt{3}U^x_{n,m} + \sqrt{3}V^x_{n,m+1} - V^y_{n,m+1}\right] +$$
$$+\frac{g}{4}\left[2\left(-U^x_{n-1,m} + \sqrt{3}U^y_{n-1,m} - U^x_{n,m-1} - \sqrt{3}U^y_{n,m-1}\right) + U^x_{n+1,m-1} +\right.$$
$$+\sqrt{3}U^y_{n+1,m-1} + U^x_{n-1,m+1} - \sqrt{3}U^y_{n-1,m+1} - 2\left(U^x_{n+1,m} + U^x_{n,m+1}\right) -$$
$$\left.+6\left(V^x_{n+1,m} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m} - 5U^x_{n,m} + 4V^x_{n,m} + V^x_{n,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n,m+1}\right)\right],$$

$$M\ddot{U}^y_{n,m} = \frac{c}{4}\left[\sqrt{3}V^x_{n+1,m} + V^y_{n+1,m} - 6U^y_{n,m} + 4V^y_{n,m} - \sqrt{3}V^x_{n,m+1} + V^y_{n,m+1}\right] +$$
$$+\frac{\sqrt{3}g}{4}\left[U^x_{n-1,m+1} - \sqrt{3}U^y_{n-1,m+1} - U^x_{n+1,m-1} - \sqrt{3}U^y_{n+1,m-1} + 2U^x_{n+1,m} -\right.$$
$$\left.-2U^x_{n,m+1} - 10\sqrt{3}U^y_{n,m} + 6\left(V^x_{n,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n,m+1} - V^x_{n+1,m} + \sqrt{3}V^y_{n+1,m}\right)\right]. \tag{3}$$

$$M\ddot{V}^x_{n,m} = \frac{\sqrt{3}c}{4}\left[\sqrt{3}U^x_{n-1,m} + U^y_{n-1,m} - 2\sqrt{3}V^x_{n,m} + \sqrt{3}U^x_{n,m-1} - U^y_{n,m-1}\right] +$$
$$+\frac{g}{4}\left[6\left(U^x_{n-1,m} - \sqrt{3}U^y_{n-1,m} + U^x_{n,m-1} + \sqrt{3}U^y_{n,m-1} + 4U^x_{n,m}\right) -\right.$$
$$-2\left(V^x_{n+1,m} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m} + V^x_{n,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n,m+1}\right) + V^x_{n+1,m-1} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m-1}$$
$$\left.+V^x_{n-1,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n-1,m+1} - 30V^x_{n,m} - 2\left(V^x_{n,m-1} + V^x_{n-1,m}\right)\right],$$

$$M\ddot{V}^y_{n,m} = \frac{c}{4}\left[\sqrt{3}U^x_{n-1,m} + U^y_{n-1,m} + 4U^y_{n,m} - 6V^y_{n,m} - \sqrt{3}U^x_{n,m-1} + U^y_{n,m-1}\right]$$
$$\frac{\sqrt{3}g}{4}\left[2\sqrt{3}\left(-\sqrt{3}U^x_{n-1,m} + 3U^y_{n-1,m} - 5V^y_{n,m} + \sqrt{3}U^x_{n,m-1} + 3U^y_{n,m-1}\right)\right.$$
$$\left.+V^x_{n+1,m-1} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m-1} - V^x_{n-1,m+1} - \sqrt{3}V^y_{n-1,m+1} - 2\left(V^x_{n,m-1} - V^x_{n-1,m}\right)\right],$$

Уравнения динамики

- 4 степени свободы
- 4 дисперсионки
- 4 температуры

$$
\begin{aligned}
k_B T_{11} &= m\left\langle \dot{U}^{x2} \right\rangle, \qquad & k_B T_{22} &= m\left\langle \dot{U}^{y2} \right\rangle, \\
k_B T_{33} &= m\left\langle \dot{V}^{x2} \right\rangle, \qquad & k_B T_{44} &= m\left\langle \dot{V}^{y2} \right\rangle.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
M\ddot{U}^x_{n,m} = {} & \frac{c\sqrt{3}}{4}\Big[\sqrt{3}V^x_{n+1,m} + V^y_{n+1,m} - 2\sqrt{3}U^x_{n,m} + \sqrt{3}V^x_{n,m+1} - V^y_{n,m+1}\Big] + \\
& + \frac{g}{4}\Big[2\left(-U^x_{n-1,m} + \sqrt{3}U^y_{n-1,m} - U^x_{n,m-1} - \sqrt{3}U^y_{n,m-1}\right) + U^x_{n+1,m-1} + \\
& + \sqrt{3}U^y_{n+1,m-1} + U^x_{n-1,m+1} - \sqrt{3}U^y_{n-1,m+1} - 2\left(U^x_{n+1,m} + U^x_{n,m+1}\right) - \\
& + 6\left(V^x_{n+1,m} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m} - 5U^x_{n,m} + 4V^x_{n,m} + V^x_{n,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n,m+1}\right)\Big], \\
M\ddot{U}^y_{n,m} = {} & \frac{c}{4}\Big[\sqrt{3}V^x_{n+1,m} + V^y_{n+1,m} - 6U^y_{n,m} + 4V^y_{n,m} - \sqrt{3}V^x_{n,m+1} + V^y_{n,m+1}\Big] + \\
& + \frac{\sqrt{3}g}{4}\Big[U^x_{n-1,m+1} - \sqrt{3}U^y_{n-1,m+1} - U^x_{n+1,m-1} - \sqrt{3}U^y_{n+1,m-1} + 2U^x_{n+1,m} - \\
& - 2U^x_{n,m+1} - 10\sqrt{3}U^y_{n,m} + 6\left(V^x_{n,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n,m+1} - V^x_{n+1,m} + \sqrt{3}V^y_{n+1,m}\right)\Big]. \qquad (3) \\
M\ddot{V}^x_{n,m} = {} & \frac{\sqrt{3}c}{4}\Big[\sqrt{3}U^x_{n-1,m} + U^y_{n-1,m} - 2\sqrt{3}V^x_{n,m} + \sqrt{3}U^x_{n,m-1} - U^y_{n,m-1}\Big] + \\
& + \frac{g}{4}\Big[6\left(U^x_{n-1,m} - \sqrt{3}U^y_{n-1,m} + U^x_{n,m-1} + \sqrt{3}U^y_{n,m-1} + 4U^x_{n,m}\right) - \\
& - 2\left(V^x_{n+1,m} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m} + V^x_{n,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n,m+1}\right) + V^x_{n+1,m-1} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m-1} \\
& + V^x_{n-1,m+1} + \sqrt{3}V^y_{n-1,m+1} - 30V^x_{n,m} - 2\left(V^x_{n,m-1} + V^x_{n-1,m}\right)\Big], \\
M\ddot{V}^y_{n,m} = {} & \frac{c}{4}\Big[\sqrt{3}U^x_{n-1,m} + U^y_{n-1,m} + 4U^y_{n,m} - 6V^y_{n,m} - \sqrt{3}U^x_{n,m-1} + U^y_{n,m-1}\Big] \\
& \frac{\sqrt{3}g}{4}\Big[2\sqrt{3}\left(-\sqrt{3}U^x_{n-1,m} + 3U^y_{n-1,m} - 5V^y_{n,m} + \sqrt{3}U^x_{n,m-1} + 3U^y_{n,m-1}\right) \\
& + V^x_{n+1,m-1} - \sqrt{3}V^y_{n+1,m-1} - V^x_{n-1,m+1} - \sqrt{3}V^y_{n-1,m+1} - 2\left(V^x_{n,m-1} - V^x_{n-1,m}\right)\Big],
\end{aligned}
$$

Начальные условия

- Случайные скорости

$$\dot{U}^x_{n,m} = \beta^x_{n,m}\sqrt{\frac{k_B}{m}T_0}\,, \qquad \dot{U}^y_{n,m} = \beta^y_{n,m}\sqrt{\frac{k_B}{m}T_0}\,,$$

$$\dot{V}^x_{n,m} = \gamma^x_{n,m}\sqrt{\frac{k_B}{m}T_0}\,, \qquad \dot{V}^y_{n,m} = \gamma^y_{n,m}\sqrt{\frac{k_B}{m}T_0}.$$

Некоррелированные

$$\left\langle \beta^x_{n,m} \right\rangle = \left\langle \beta^y_{n,m} \right\rangle = \left\langle \gamma^x_{n,m} \right\rangle = \left\langle \gamma^y_{n,m} \right\rangle = 0\,,$$

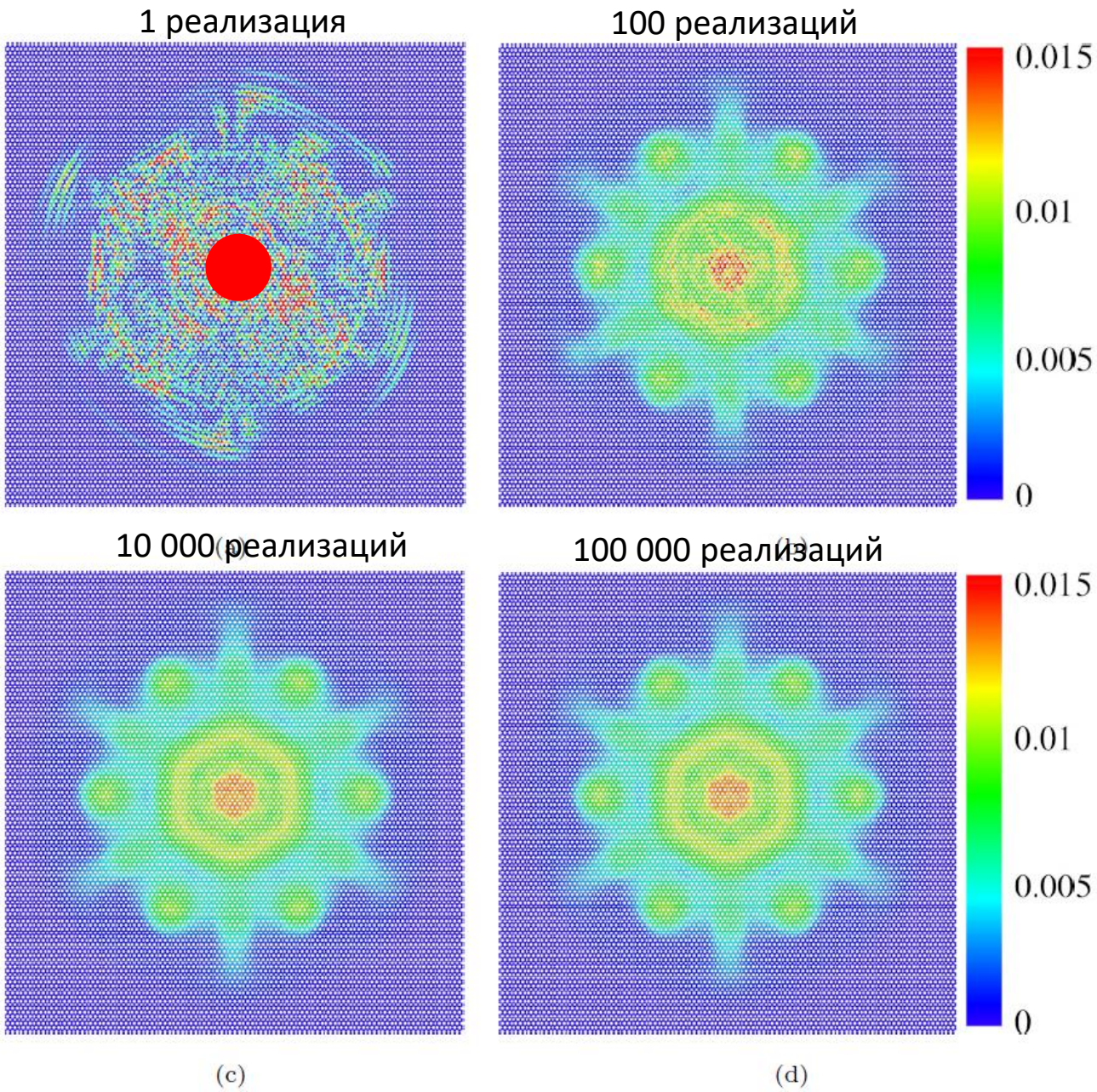
$$\left\langle (\beta^x_{n,m})^2 \right\rangle = \left\langle (\beta^y_{n,m})^2 \right\rangle = \left\langle (\gamma^x_{n,m})^2 \right\rangle = \left\langle (\gamma^y_{n,m})^2 \right\rangle = 1,$$

$$\left\langle \beta^x_{n,m}\beta^y_{n,m} \right\rangle = \left\langle \gamma^x_{n,m}\gamma^y_{n,m} \right\rangle = \left\langle \beta^x_{n,m}\gamma^y_{n,m} \right\rangle = \left\langle \gamma^x_{n,m}\beta^y_{n,m} \right\rangle = 0.$$

- Нулевые перемещения

$$U^x_{n,m} = U^y_{n,m} = 0\,, \qquad V^x_{n,m} = V^y_{n,m} = 0$$

Анизотропия теплопереноса в графене

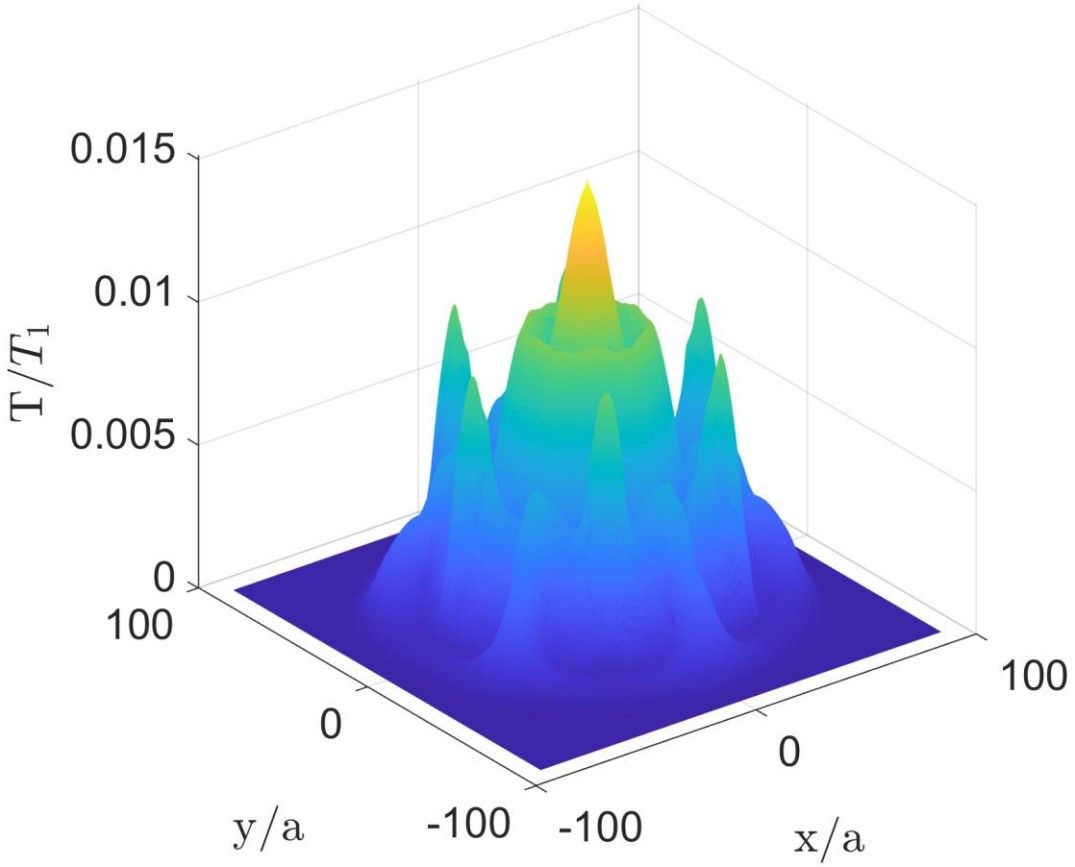


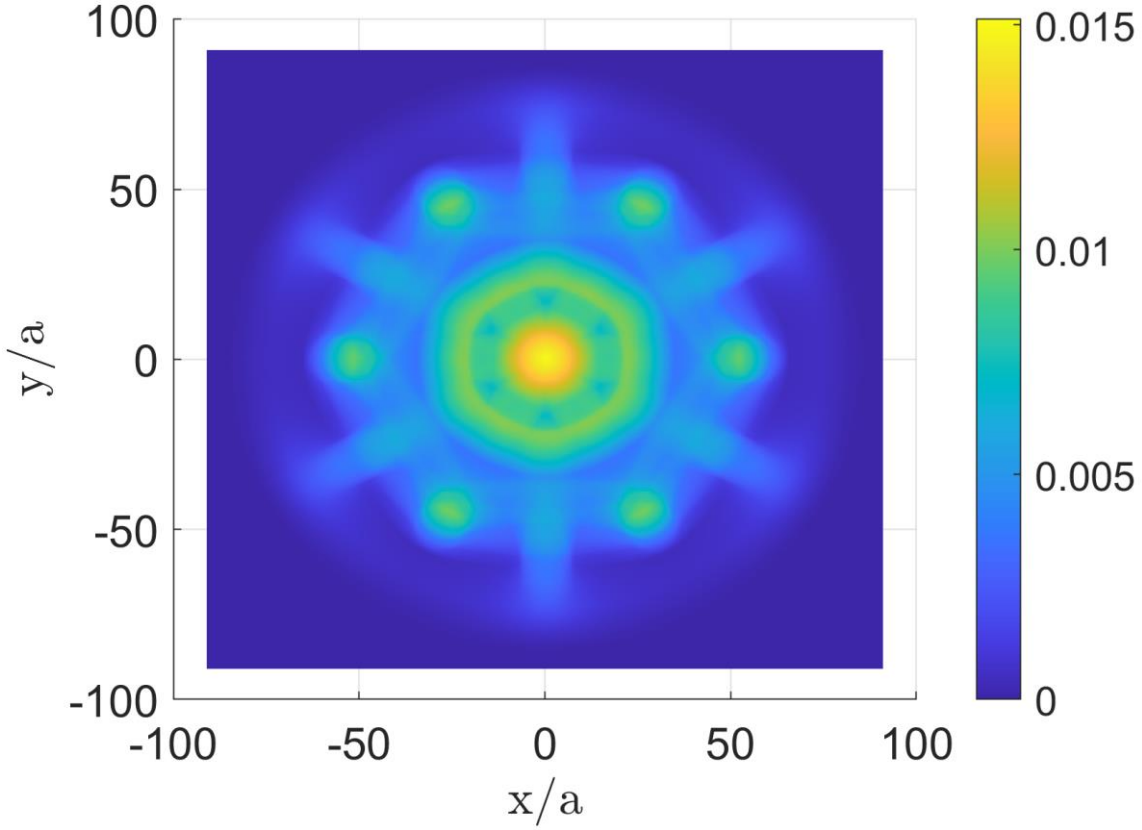
Начальные условия:

$$T_0(x,y) = \begin{cases} T_1, & x^2+y^2 \le R^2 \\ 0, & x^2+y^2 > R^2 \end{cases}$$

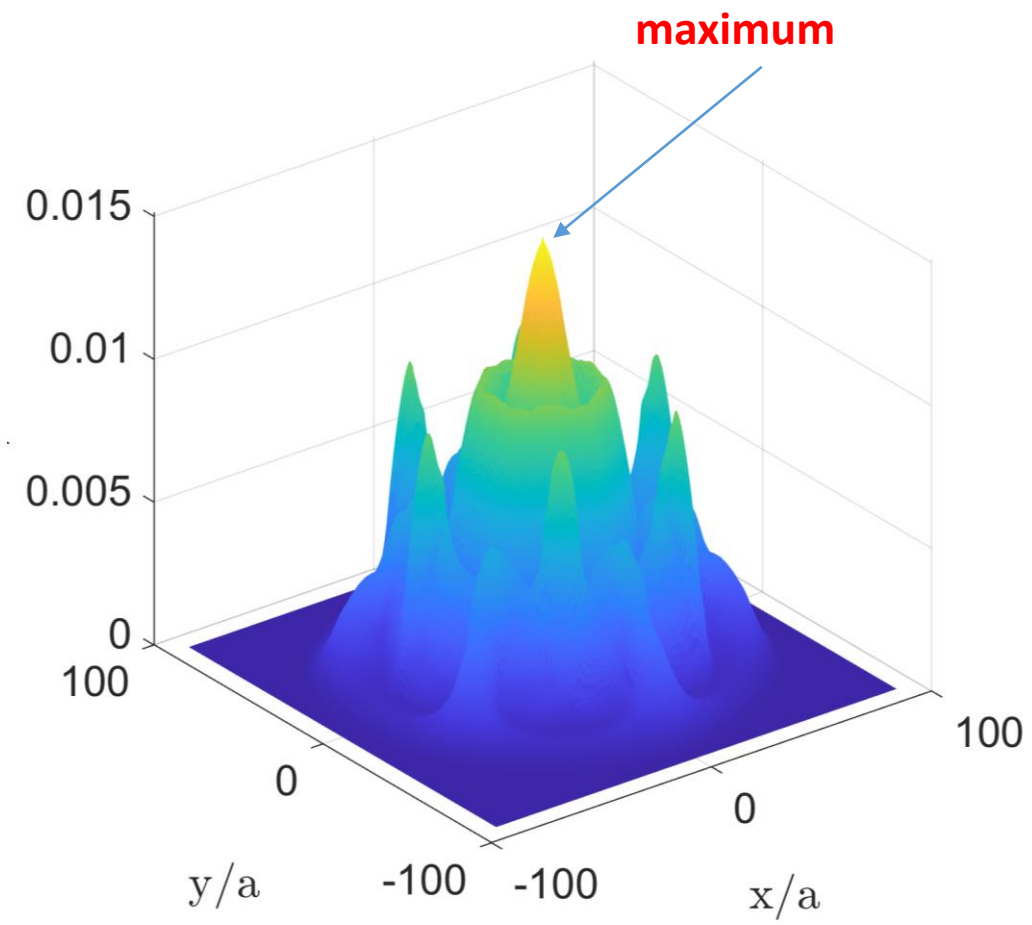
Теплоперенос в графене (в плоскости)

$$T_S = \frac{1}{8}\sum_{j=1}^{4}\int_{\mathbf{k}} T_0(\mathbf{x}+\mathbf{v}_g^j t)\mathrm{d}\mathbf{k}$$

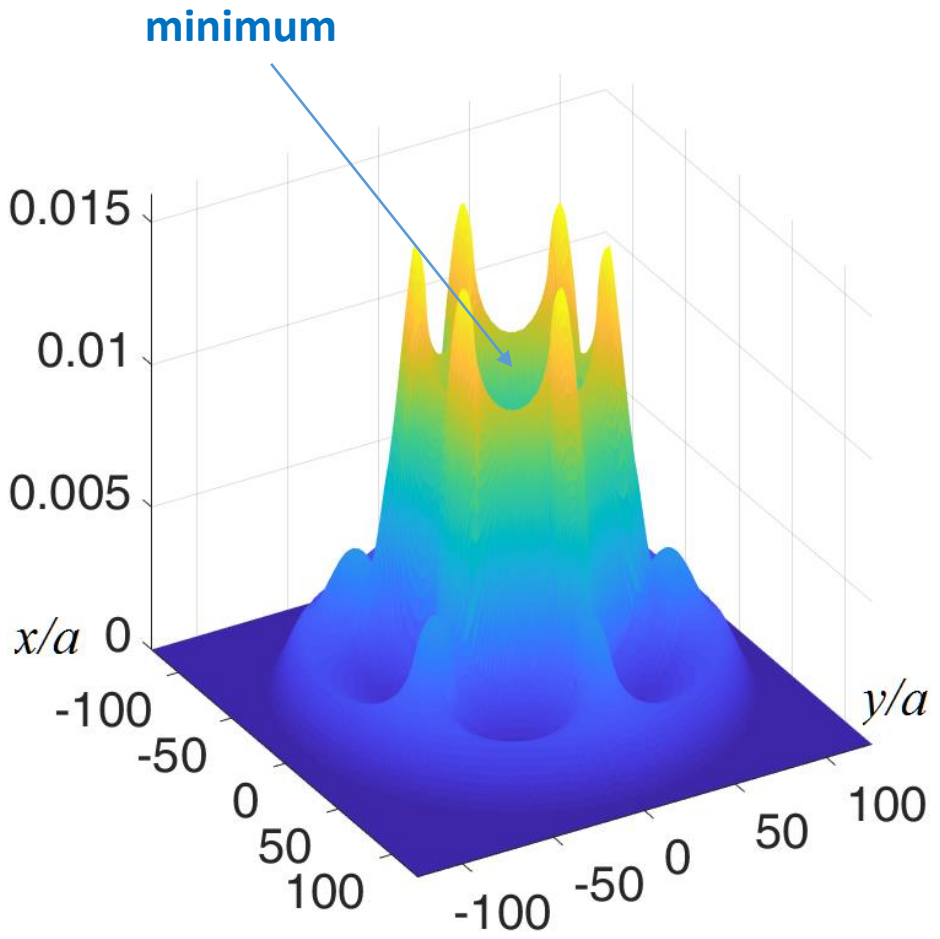




Сравнение продольных и поперечных колебаний



in-plane

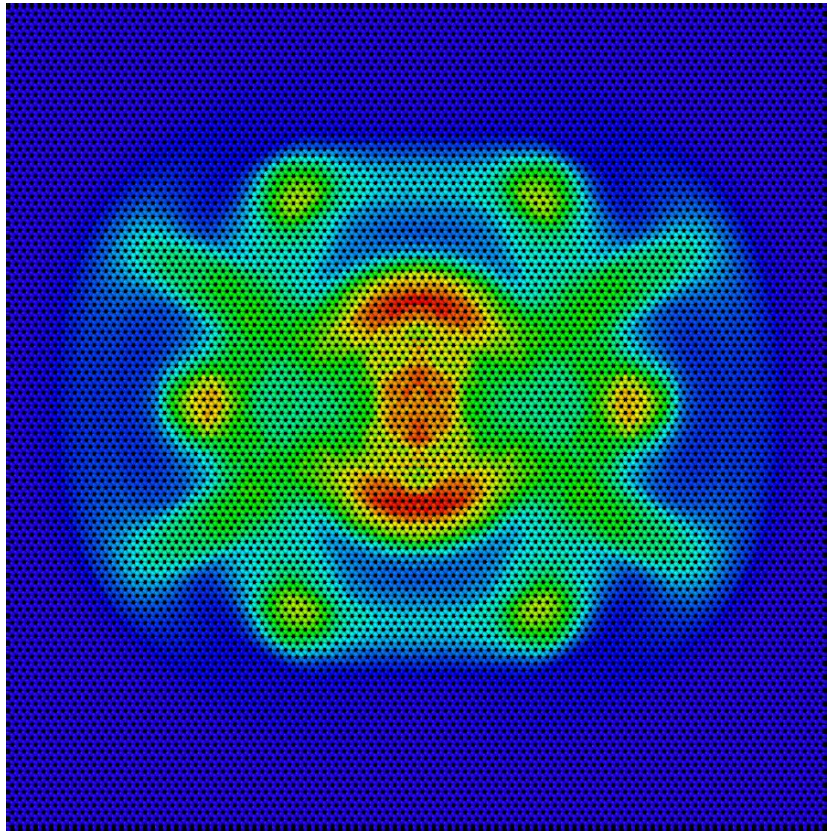


out-of-plane

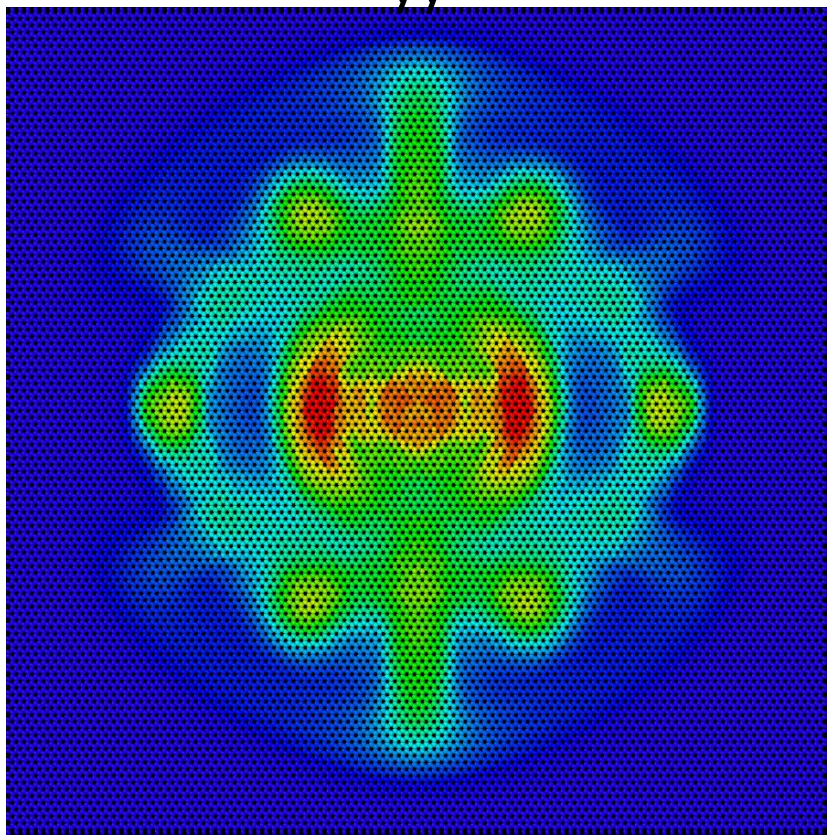
Несколько температур

Начальные условия (T_{xx}=T_{yy}): $$T_0(x,y) = \begin{cases} T_1, & x^2+y^2 \le R^2 \\ 0, & x^2+y^2 > R^2 \end{cases}$$

T_{xx}



T_{yy}



Синусоидальное поле температуры

- Начальные условия

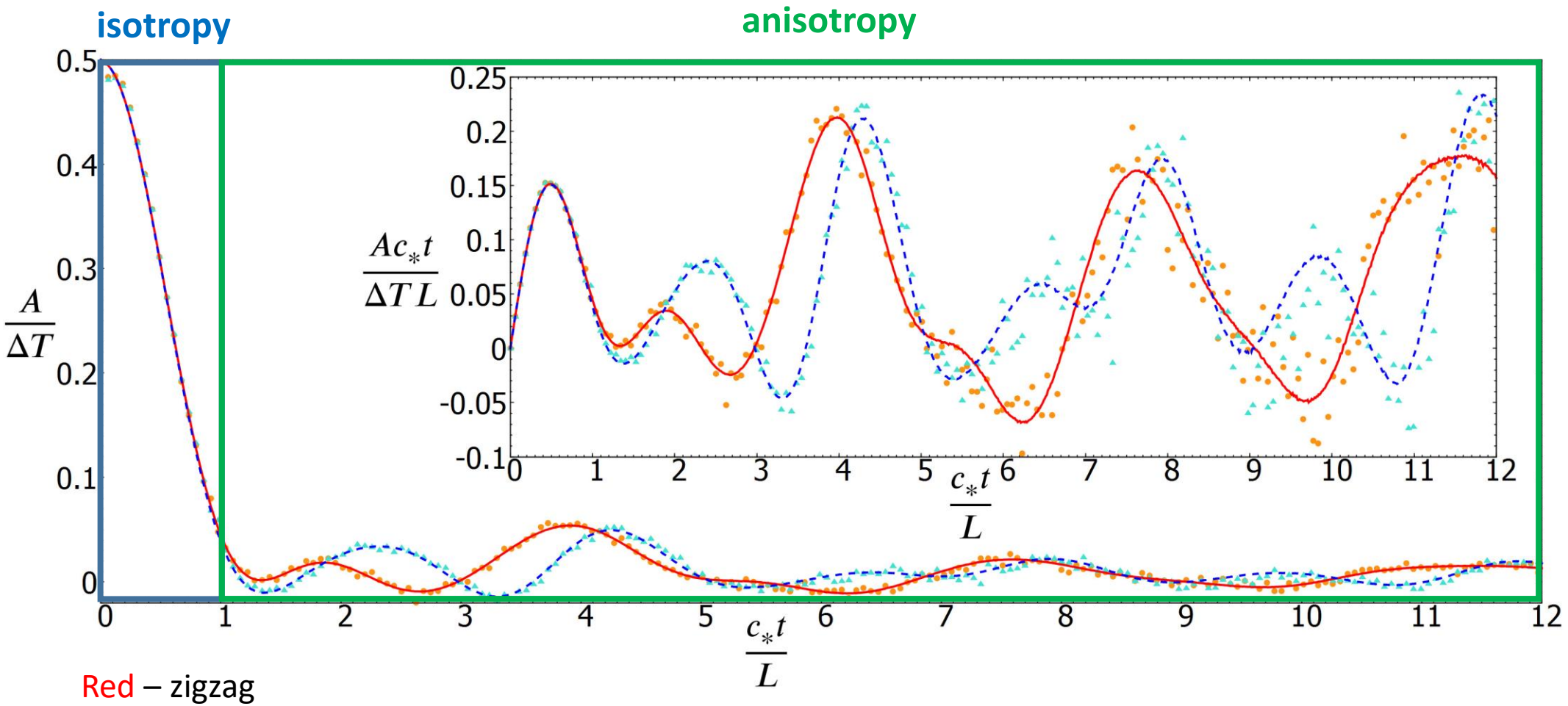
$$T_0(\mathbf{x}) = T_b + \Delta T \sin \frac{2\pi x}{L}, \qquad x = \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}$$

- Решение

A(t)

$$T_S = \frac{T_b}{2} + \frac{\Delta T}{8} \sin \frac{2\pi x}{L} \sum_{j=1}^{4} \int_{\mathbf{k}} \cos \frac{2\pi \mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_g^j t}{L} \mathrm{d}\mathbf{k}$$

Немонотонное затухание синусоидального поля



Red – zigzag
Blue – armchair

Статьи

Поперечные колебания

Continuum Mech. Thermodyn. (2019) 31:1573–1599
https://doi.org/10.1007/s00161-019-00802-1

ORIGINAL ARTICLE

Vitaly A. Kuzkin

Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell

Received: 30 March 2019 / Accepted: 6 June 2019 / Published online: 20 June 2019
© Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature 2019

Abstract We study thermal processes in infinite harmonic crystals having a unit cell with an arbitrary number of particles. Initially, particles have zero displacements and random velocities, corresponding to some initial temperature profile. Our main goal is to calculate spatial distribution of kinetic temperatures, corresponding to degrees of freedom of the unit cell, at any moment in time. An expression for the temperatures is derived from solution of lattice dynamics equations. It is shown that the temperatures are represented as a sum of two terms. The first term describes high-frequency oscillations of the temperatures caused by local transition to thermal equilibrium at short times. The second term describes slow changes in the temperature profile caused by ballistic heat transport. It is shown that during heat transport, local values of temperatures, corresponding to degrees of freedom of the unit cell, are generally different. Analytical findings are supported by results of numerical solution of lattice dynamics equations for diatomic chain and graphene lattice. Strong anisotropy of ballistic heat transport in graphene is demonstrated. Presented theory may serve for description of unsteady ballistic heat transport in real crystals with low concentration of defects. In particular, solution of the problem with sinusoidal initial temperature profile can be used for proper interpretation of experimental data obtained by the transient thermal grating technique.

Keywords Ballistic heat transport · Ballistic limit · Heat transfer · Thermal waves · Harmonic crystal · Harmonic approximation · Polyatomic crystal lattice · Complex lattice · Kinetic temperature · Transient processes · Temperature matrix · Energy transport · Graphene · Anisotropy

Колебания в плоскости

Unsteady ballistic heat transport in two-dimensional harmonic graphene lattice

A. Yu. Panchenko[a], V. A. Kuzkin[b,c], I. E. Berinskii[a,*]

[a]*School of Mechanical Engineering, Tel Aviv Univeristy, Ramat Aviv, Tel Aviv 69978, Israel*
[b]*Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, 61, Bolshoy pr. V. O., St. Petersburg, 199178, Russia*
[c]*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 29, Politechnicheskaya str., St. Petersburg, 195251, Russia*

Abstract

We study peculiarities of unsteady ballistic heat transfer in a two-dimensional graphene lattice. The evolution of two initial temperature profiles in an infinite lattice is investigated analytically and numerically using the harmonic approximation. We show that ballistic heat transfer in graphene is significantly anisotropic. In particular, the solution of the problem with circular initial temperature profile has the symmetry of the lattice rather than the radial symmetry. Additionally, the solution has many local maxima, while in a diffusive regime there is only one maximum. We also show that in the ballistic heat transfer regime each atom in graphene has two distinct temperatures corresponding to motions in zigzag and armchair directions. Presented results may serve for proper interpretation of experimental results on unsteady ballistic heat transfer in graphene.

Keywords: ballistic heat transfer, graphene, thermal anisotropy

Вопросы

- Как описать поведение на границах ?
- Будет ли работать гармоническая теория в нелинейных системах ?
- Как связаны колебания температуры с макроскопическими механическими движениями ?

Что происходит на границе?

Перенос тепла в свободном кристалле

- Уравнения динамики

$$\ddot{u}_n = \omega_e^2(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}),$$

$$\boxed{\begin{aligned} \ddot{u}_0 &= \omega_e^2(u_1 - u_0), \\ \ddot{u}_{N-1} &= \omega_e^2(u_{N-2} - u_{N-1}). \end{aligned}}$$

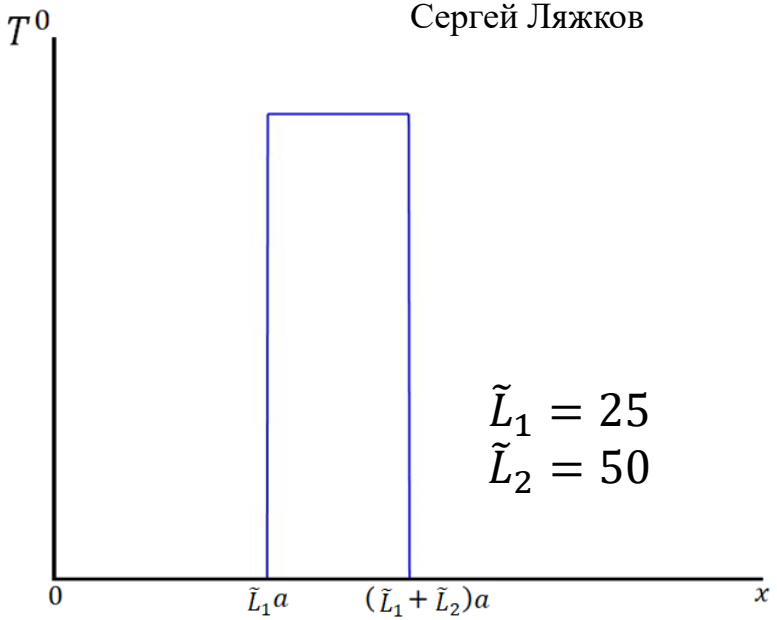
свободные концы

Сергей Ляжков

- Начальные условия

$$u_n^0 = 0, \qquad v_n^0 = \rho_n \sqrt{\frac{k_B T_n^0}{m}}$$

$$\langle \rho_n \rangle = 0, \qquad \langle \rho_n \rho_m \rangle = \delta_{nm}$$



Континуальное выражение для кинетической температуры

Поле температуры:

$$T(x,t) = T^F + T^S$$

Быстрый процесс (выравнивание кинетической и потенциальной энергий):

$$T^F(x,t) = \frac{T^0(x)}{2} J_0(4\omega_e t).$$

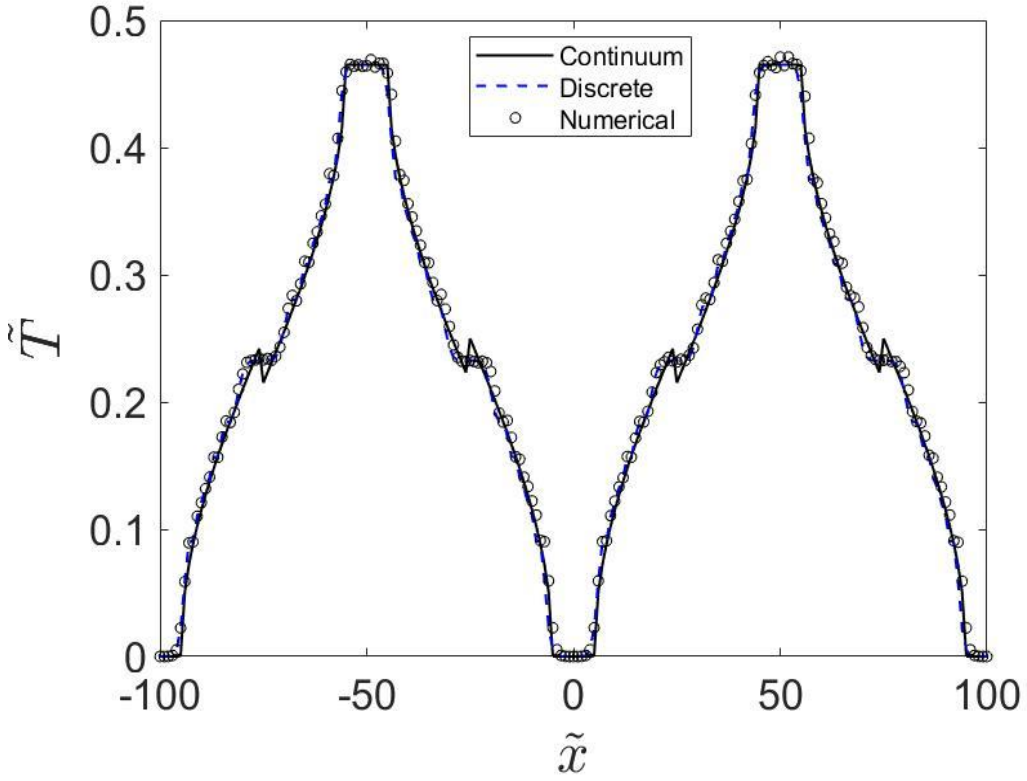
Медленный процесс (баллистическое распространение тепла):

$$T^S(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} T^0(|x + v_s t\cos\theta|)\mathrm{d}\theta$$

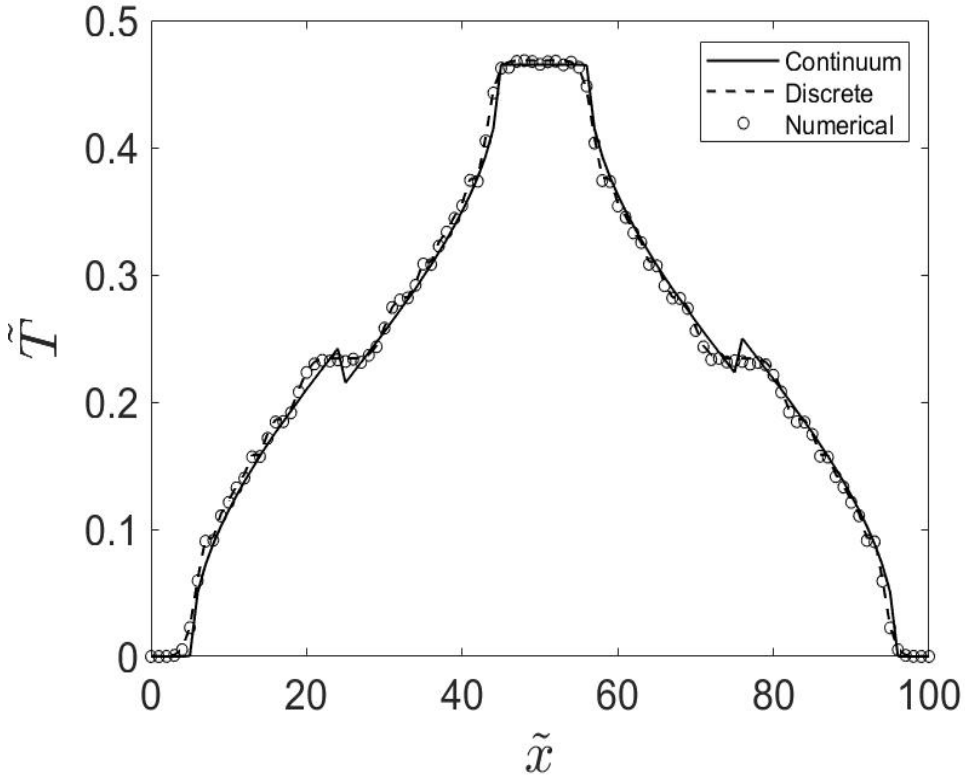
где v_s – скорость звука.

Прямоугольное тепловое возмущение, не касающееся границы

До отражения тепловой волны $\left(\tilde{L}_1 = 25,\ \ \tilde{L}_2 = 50\right)$:



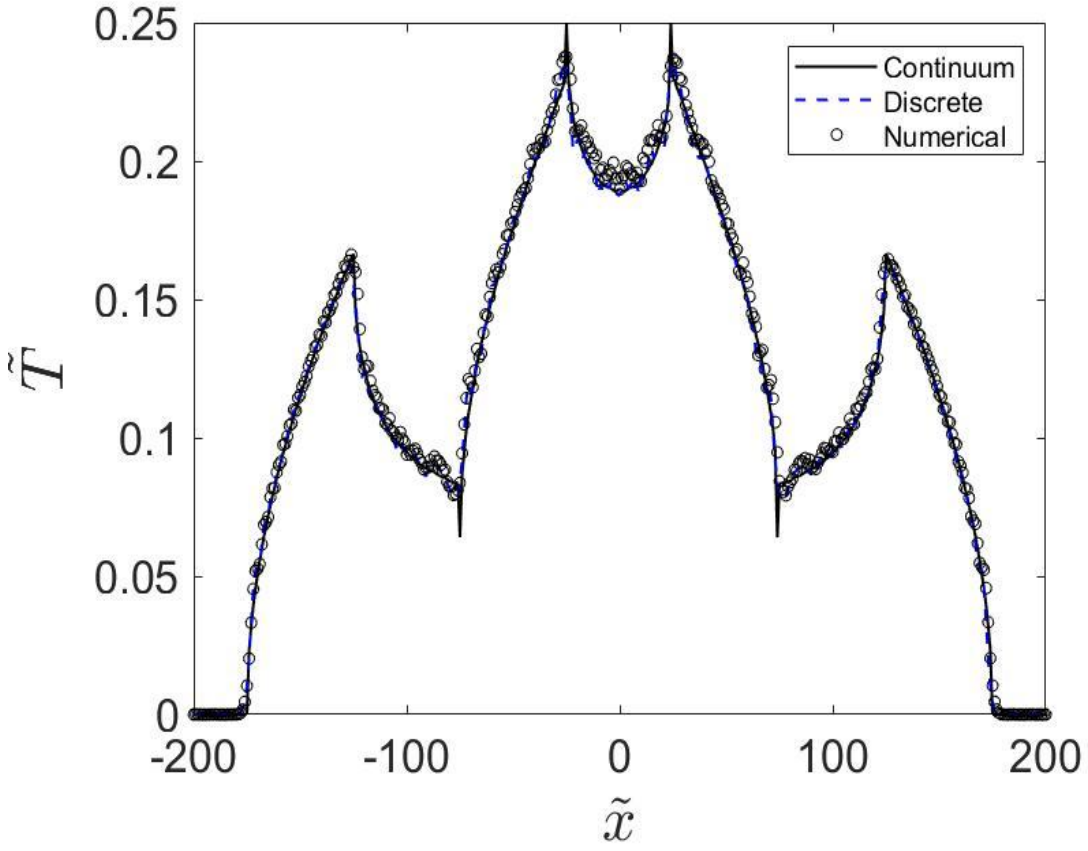
Бесконечная цепочка $(\tilde{t} = 20)$



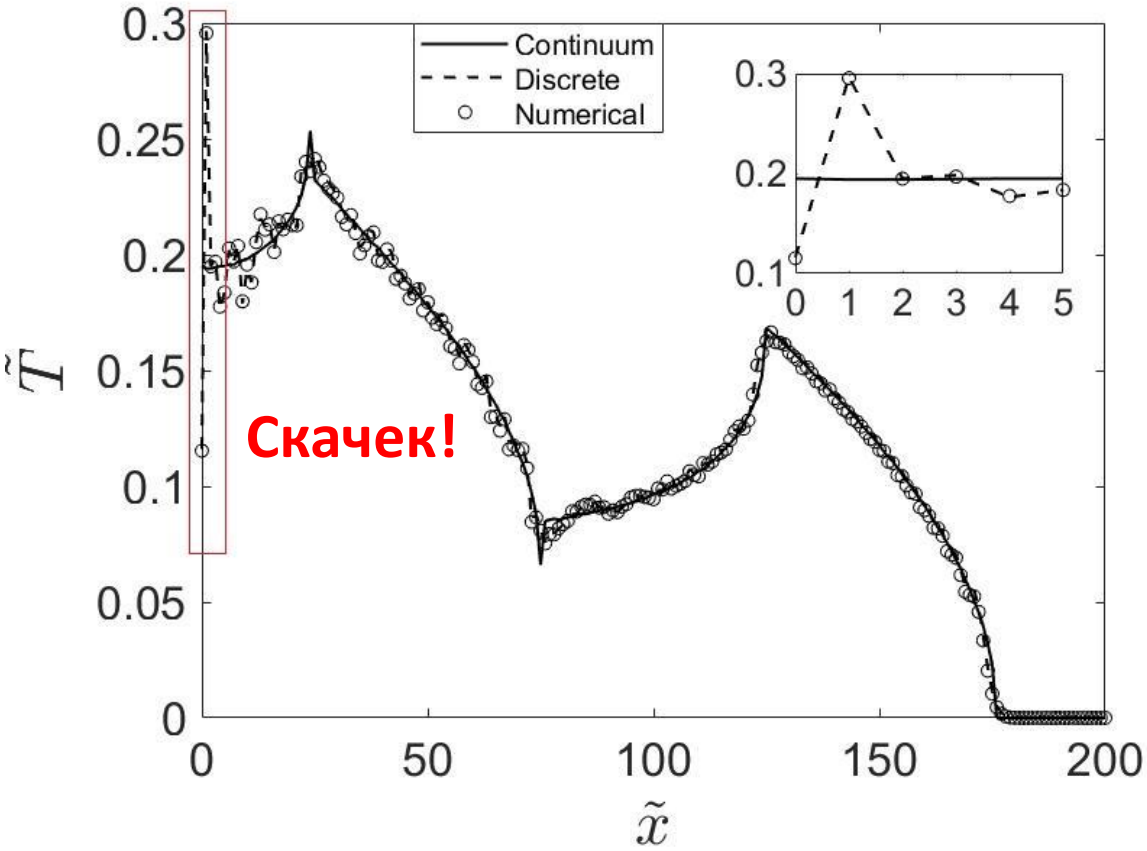
Полубесконечная цепочка $(\tilde{t} = 20)$

Скачек на границе

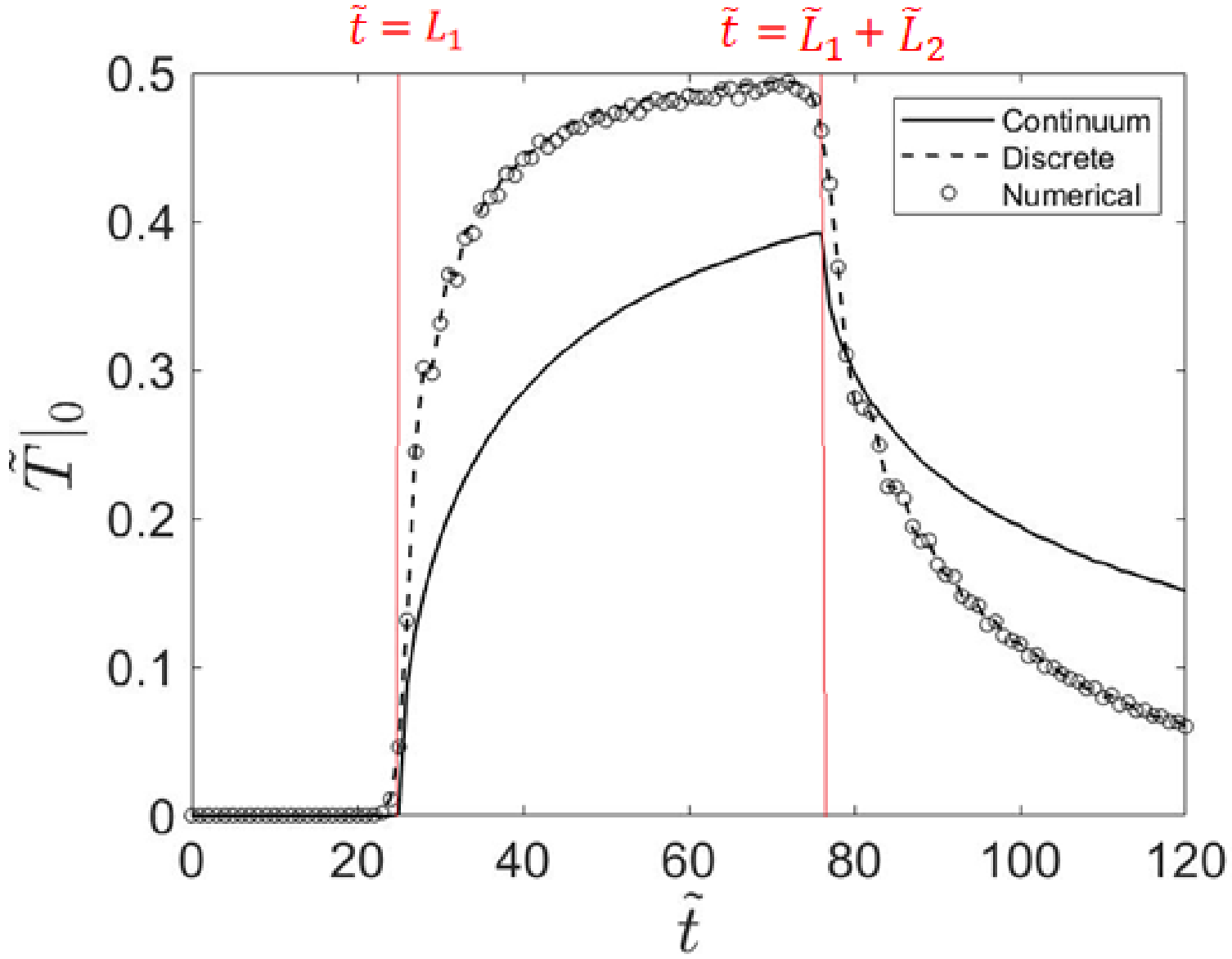
Периодическая цепочка



Свободная цепочка

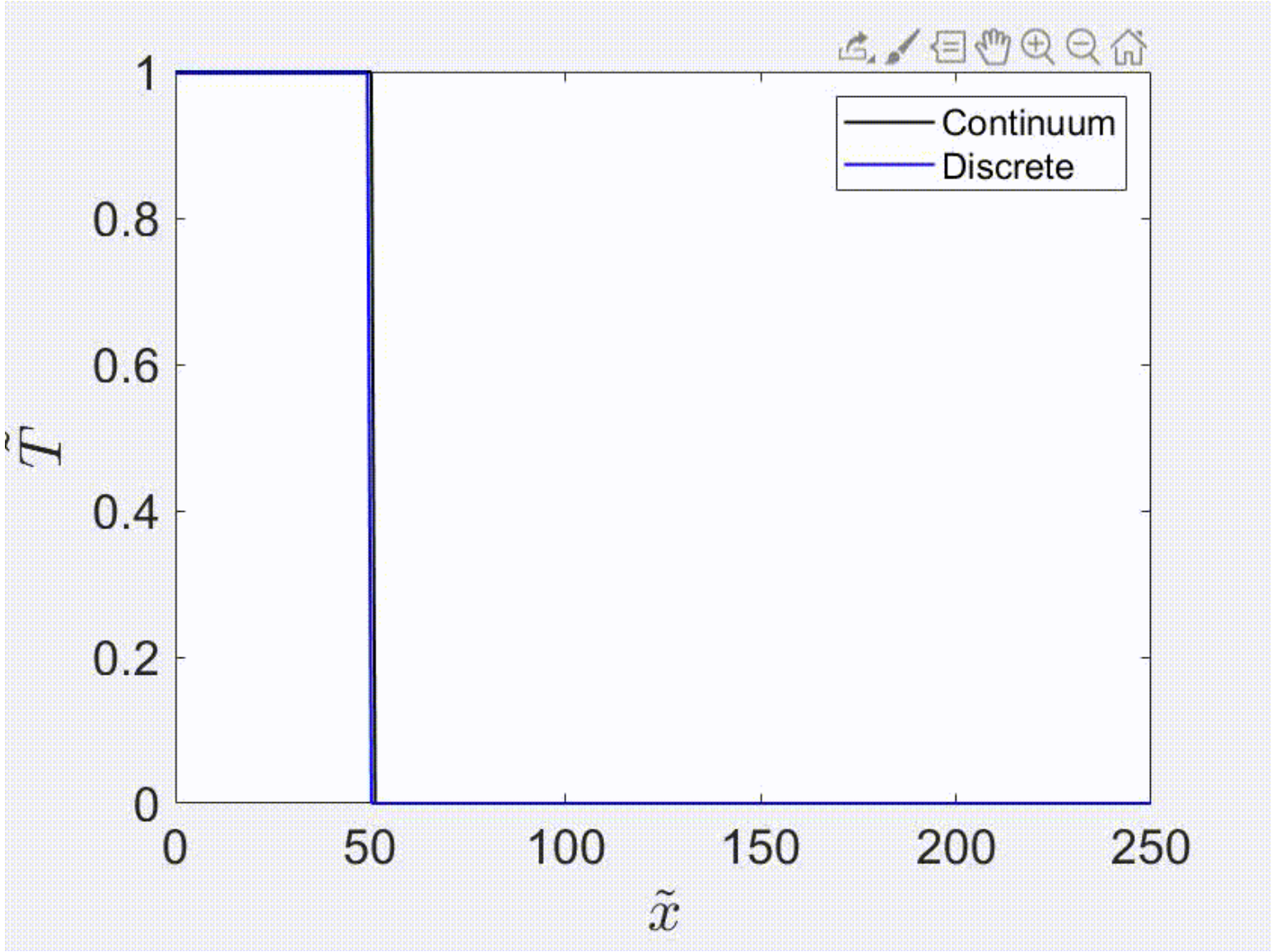


Температура на свободной границе цепочки



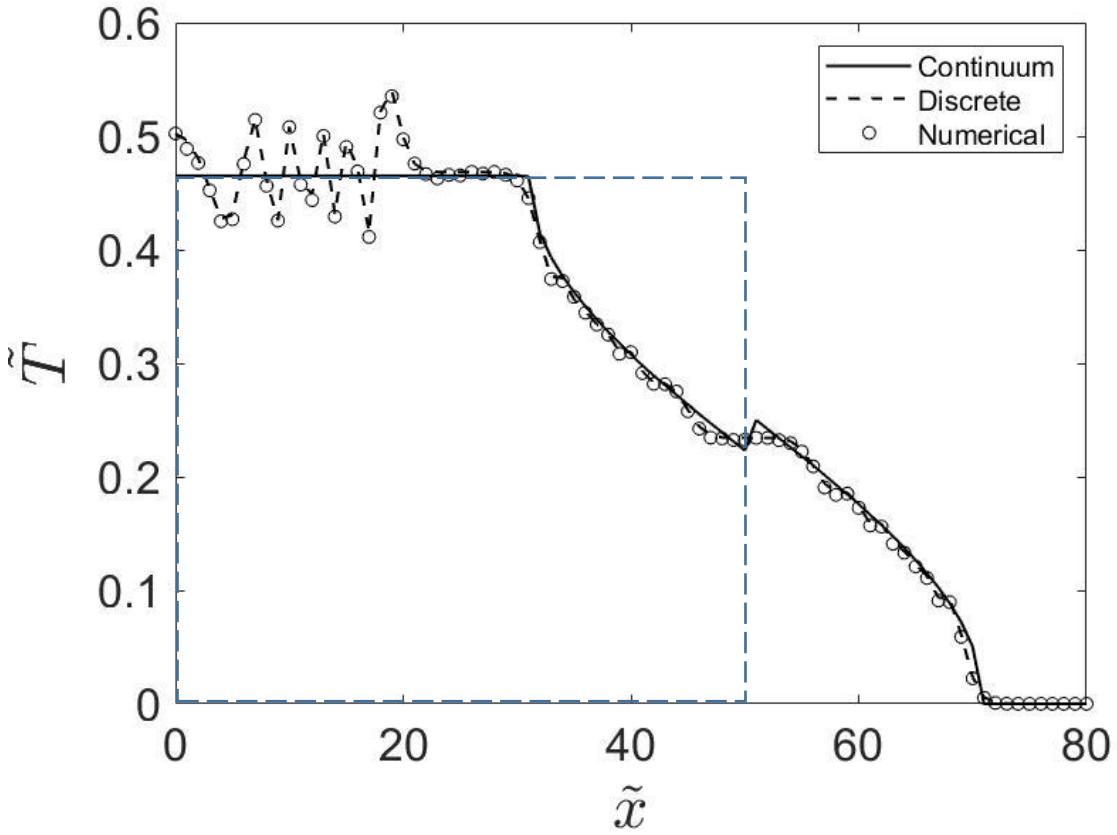
Континуальное решение на границе на работает

Скачек на границе

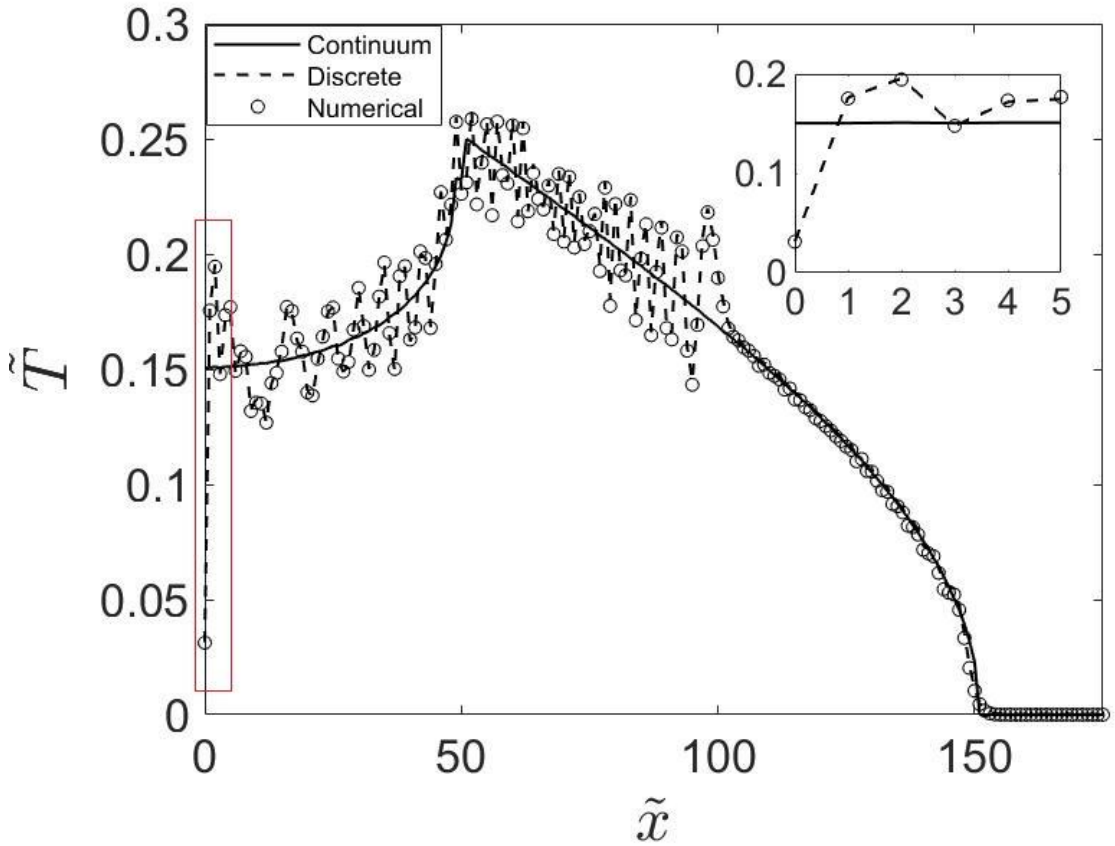


Прямоугольное тепловое возмущение, касающееся границы

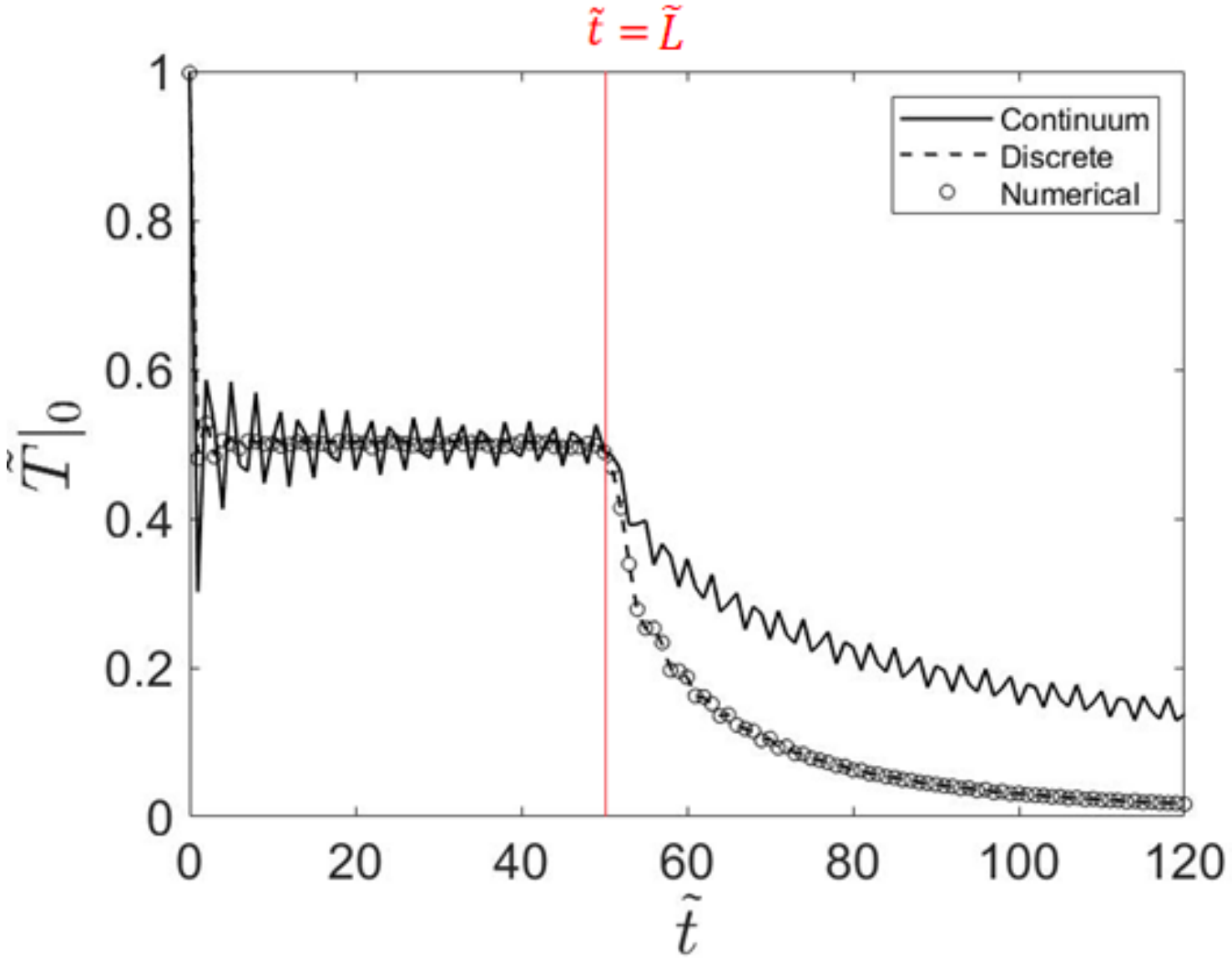
До отражения ($\tilde{t} = 20$):



После отражения ($\tilde{t} = 100$):



Изменение во времени температуры на границе



Дискретное и континуальное решения на границе имеют разную асимптотику

Баллистическая термоупругость

Постановка задачи (microlevel)

- Цепочка Ферми-Паста-Улама:

$$m\dot{v}_n = c(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) + \boxed{\alpha\Big((u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2\Big)}.$$

nonlinearity

- Начальные условия

$$u_n = 0, \quad v_n = \gamma_n\sqrt{\frac{2k_B}{m}\left(T_0 + \Delta T \sin\frac{2\pi n}{N}\right)}, \quad \left\langle \gamma_n \right\rangle = 0, \quad \left\langle \gamma_n^2 \right\rangle = 1$$

Or any other function

Переход к континуальному пределу

- Осреднение по реализациям
- Разделение тепловых и механических движений
- Континуализация
- Вывод определяющих соотношений
- Теплопроводность описывается гармонической теорией

$$u_n = \underbrace{\left\langle u_n \right\rangle}_{\text{механика}} + \underbrace{\tilde{u}_n}_{\text{тепло}}$$

A.M. Krivtsov, V.A. Kuzkin, Discrete and continuum thermomechanics. In: Encyclopedy of continuum mechanics

Уравнения баллистической термоупругости

- Динамика

$$\dot{v} = v_s^2\left(u'' - \beta T'\right)$$

- Баллистический теплоперенос

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

Выводятся из уравнений динамики решетки

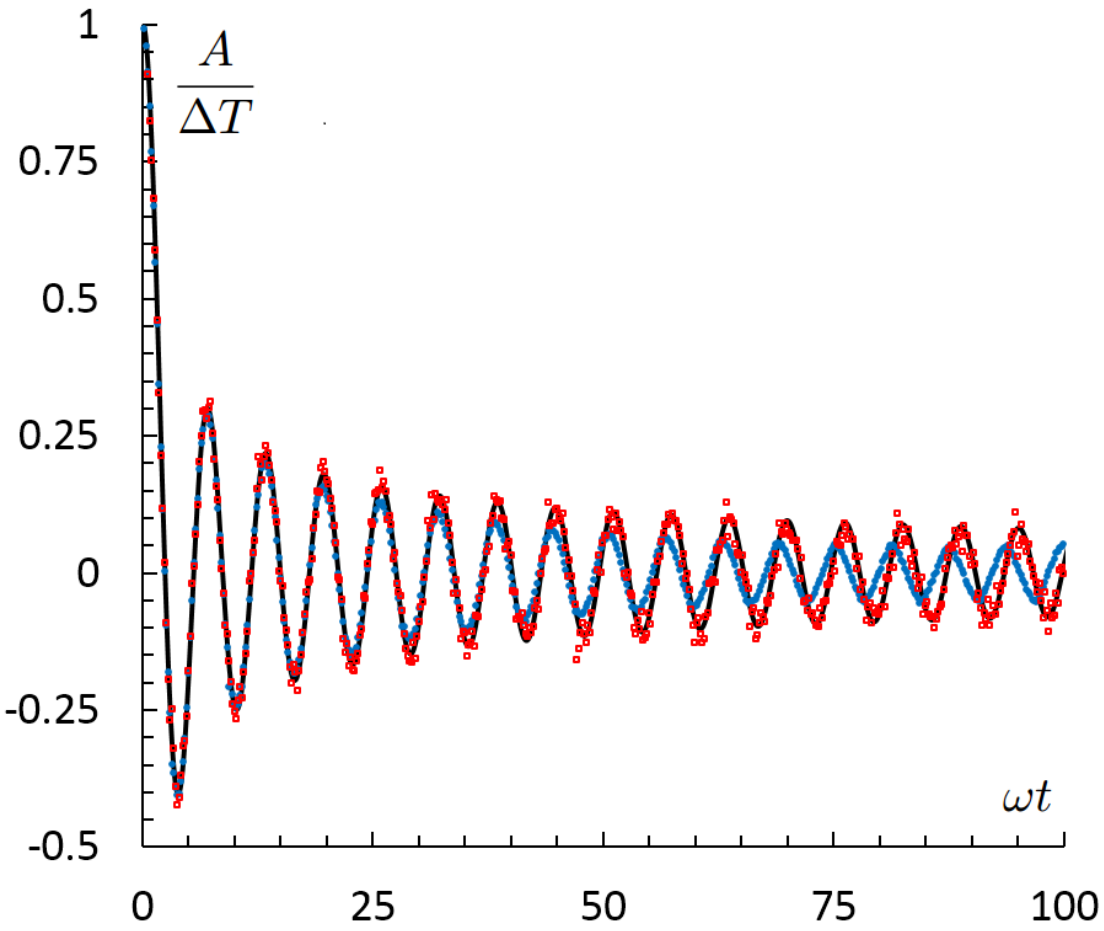
- Начальные условия

$$u = 0, \quad v = 0$$

- Периодические граничные условия

Баллистический резонанс

Колебания температуры



Analytical solution (line) and numerical results (points) for αa/c = -0.25 (red), αa/c = -1 (blue)

Решение (Кривцов, 2015)

$$T = T_b + A(t)\sin(\lambda x), \qquad A(t) = \Delta T J_0(\omega t)$$

Результаты:

1) Колебания температуры
2) Гармоническая теория работает в слабонелинейном случае

Баллистический резонанс: теория

Динамические уравнения:

$$\ddot{u} = v_s^2 u'' - \underline{\lambda v_s^2 \beta \Delta T J_0(\omega t) \cos(\lambda x)}$$

Periodic “external force” with frequency equal to the 1st eigenfrequency

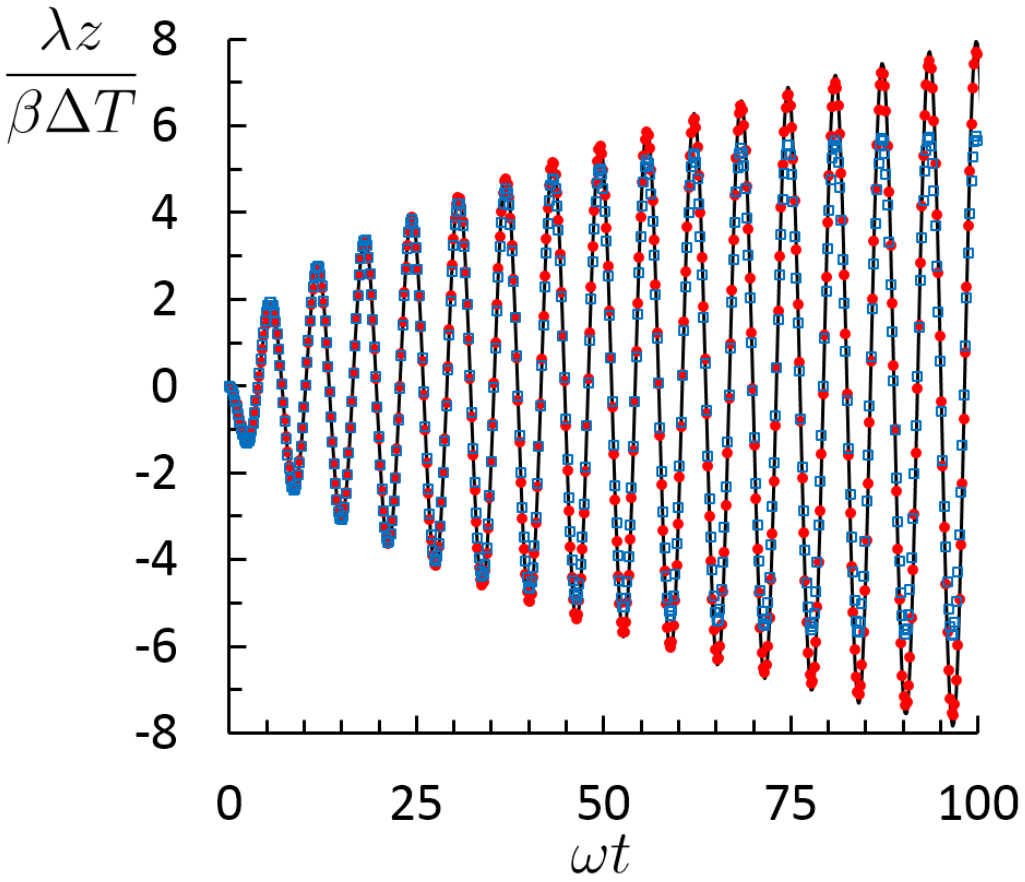
Решение:

$$\boxed{u(x,t) = z(t)\cos(\lambda x), \qquad z(t) \approx -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\beta \Delta T}{\lambda}\sqrt{\omega t}\cos\left(\omega t - \frac{3\pi}{4}\right)}$$

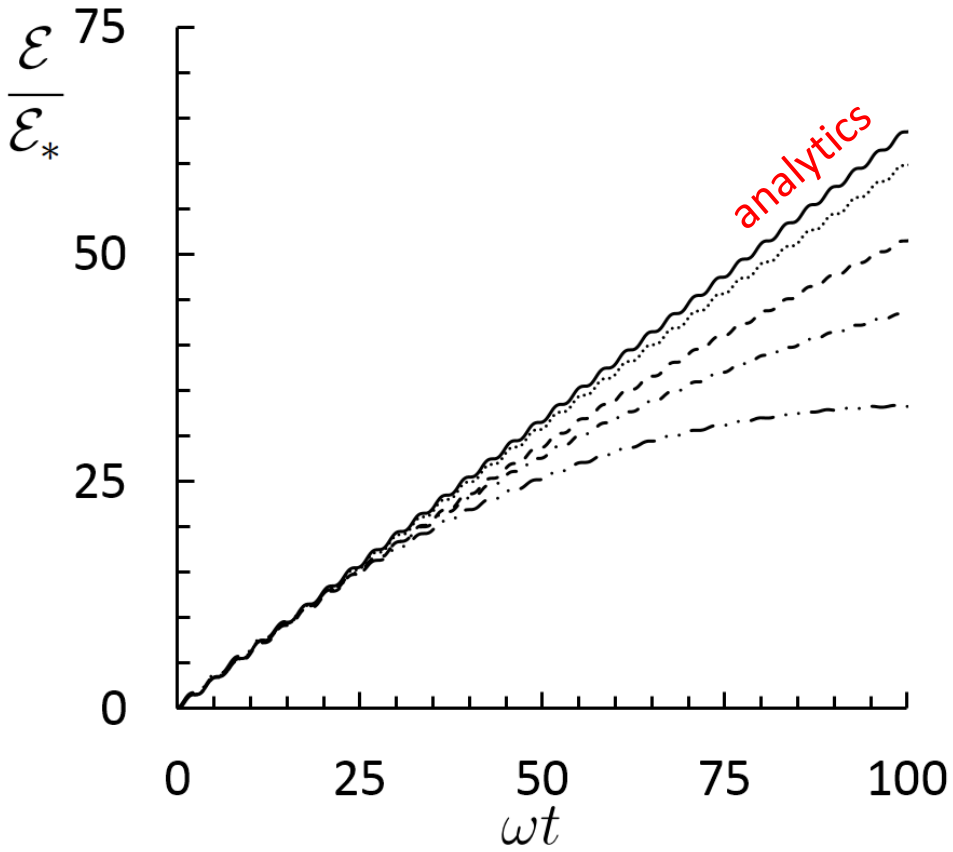
Рост амплитуды без внешнего воздействия!

Баллистический резонанс: численные результаты

Амплитуда механических колебаний



Механическая энергия



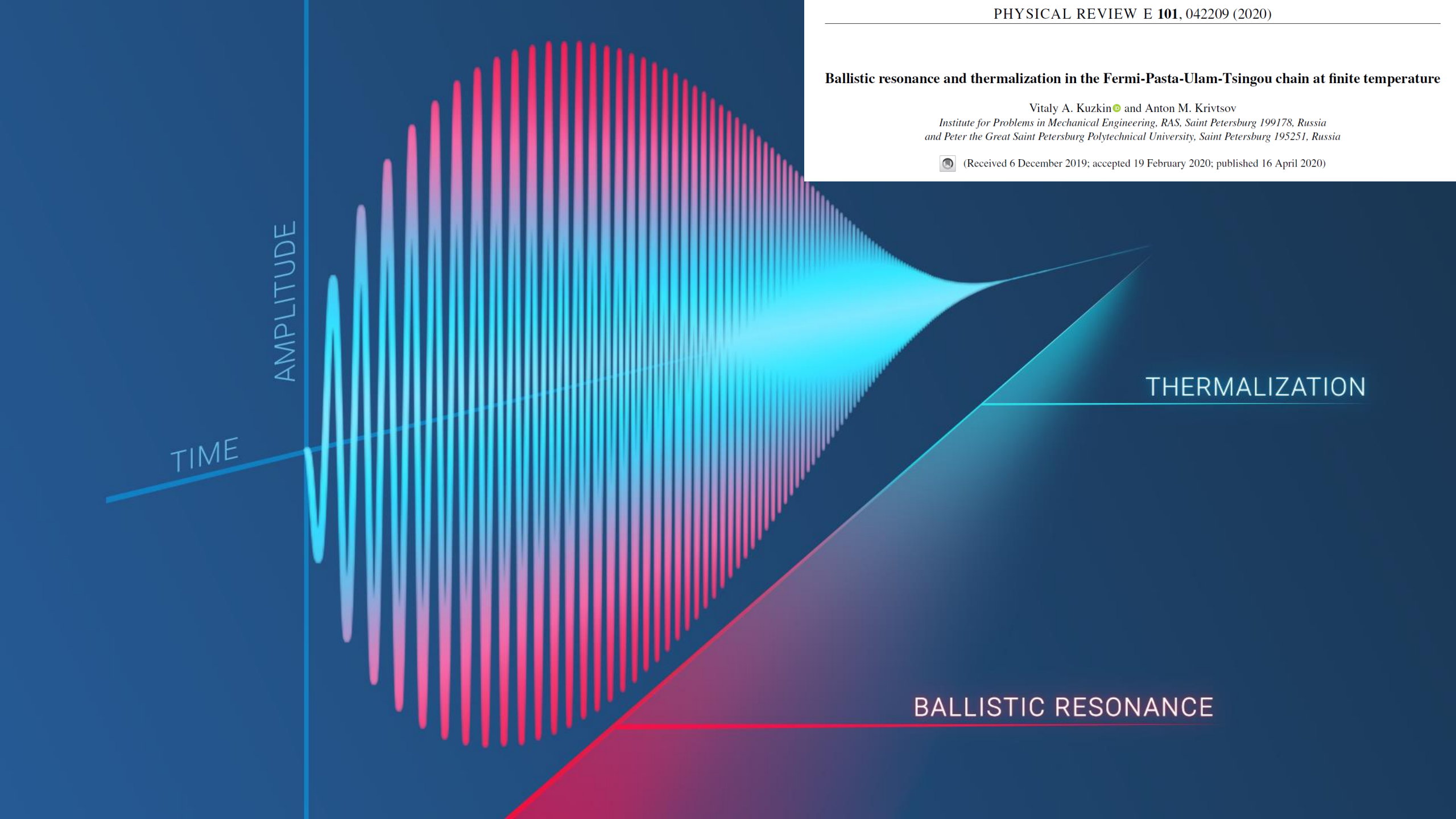
Рост амплитуды без внешнего воздействия!

PHYSICAL REVIEW E **101**, 042209 (2020)

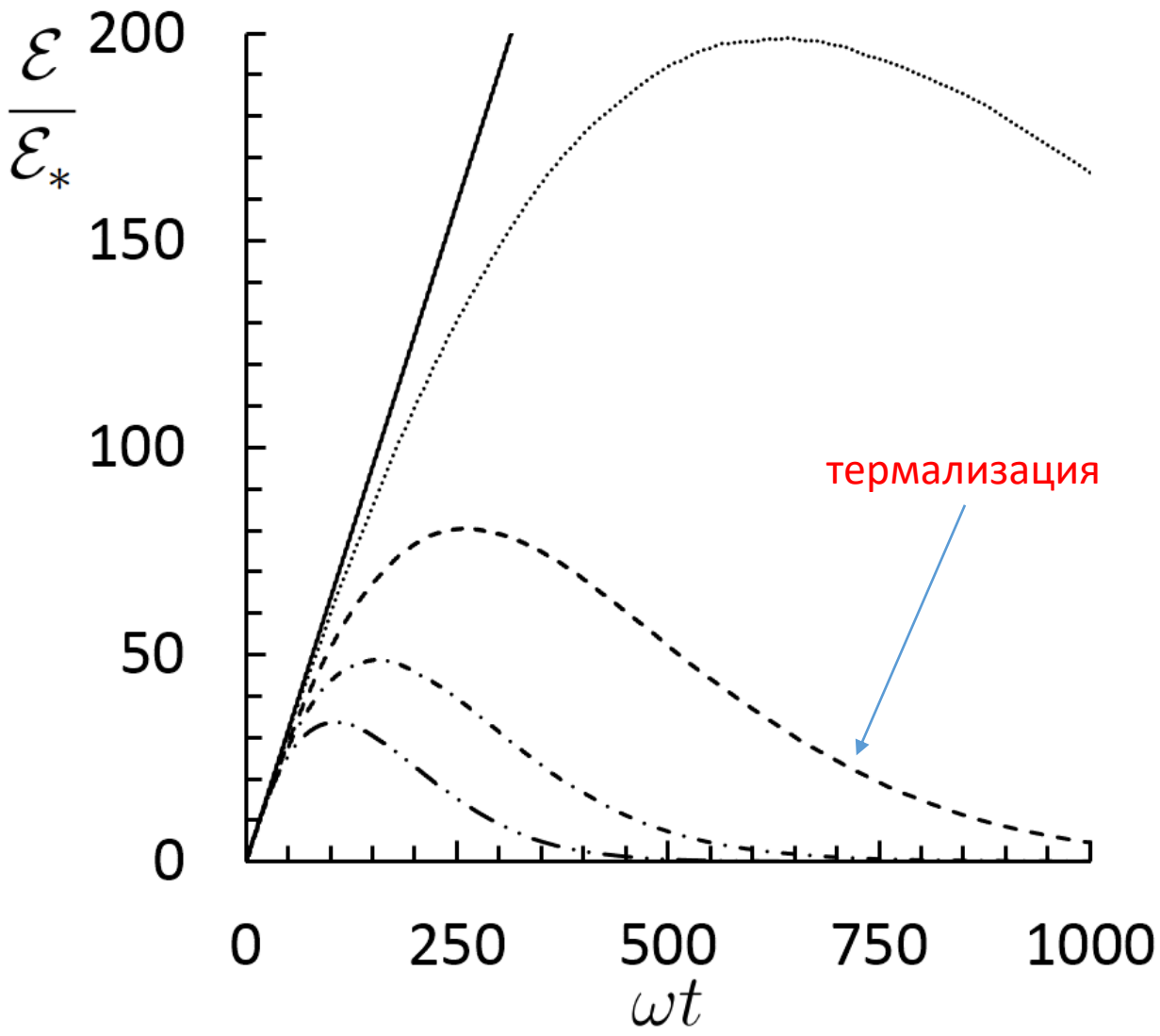
Ballistic resonance and thermalization in the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature

Vitaly A. Kuzkin and Anton M. Krivtsov
Institute for Problems in Mechanical Engineering, RAS, Saint Petersburg 199178, Russia
and Peter the Great Saint Petersburg Polytechnical University, Saint Petersburg 195251, Russia

(Received 6 December 2019; accepted 19 February 2020; published 16 April 2020)

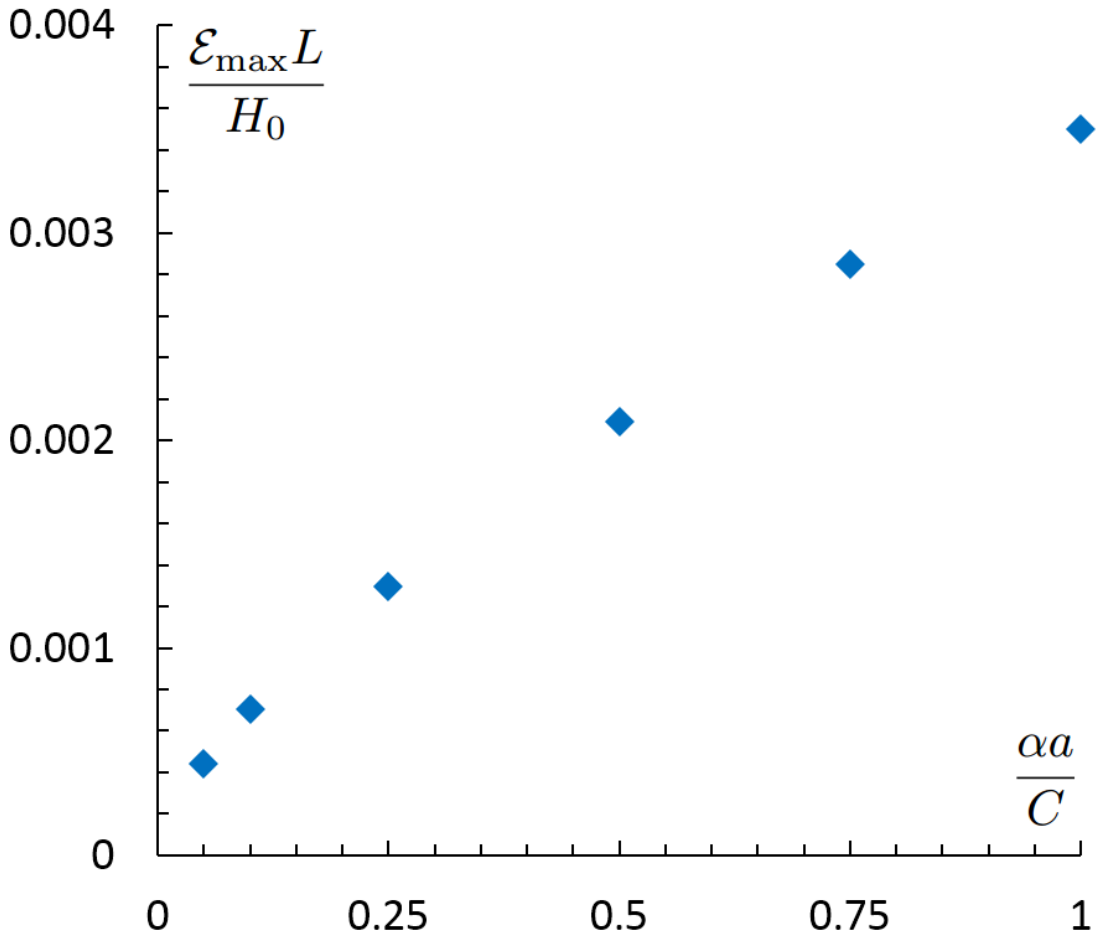


Термализация. Затухание механической энергии



При конечной температуре парадокса возвращения нет!

Максимальная механическая энергия



Максимальная механическая энергия существенно меньше тепловой

Распространение термоупругих волн

Точечное тепловое возмущение

- Начальное распределение температуры

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

- Перемещения (ballistic thermoelasticity)

$$u = \frac{A\beta x}{\pi c_s t}\frac{1}{\sqrt{1-(x/c_s t)^2}}, \qquad |x| < c_s t$$

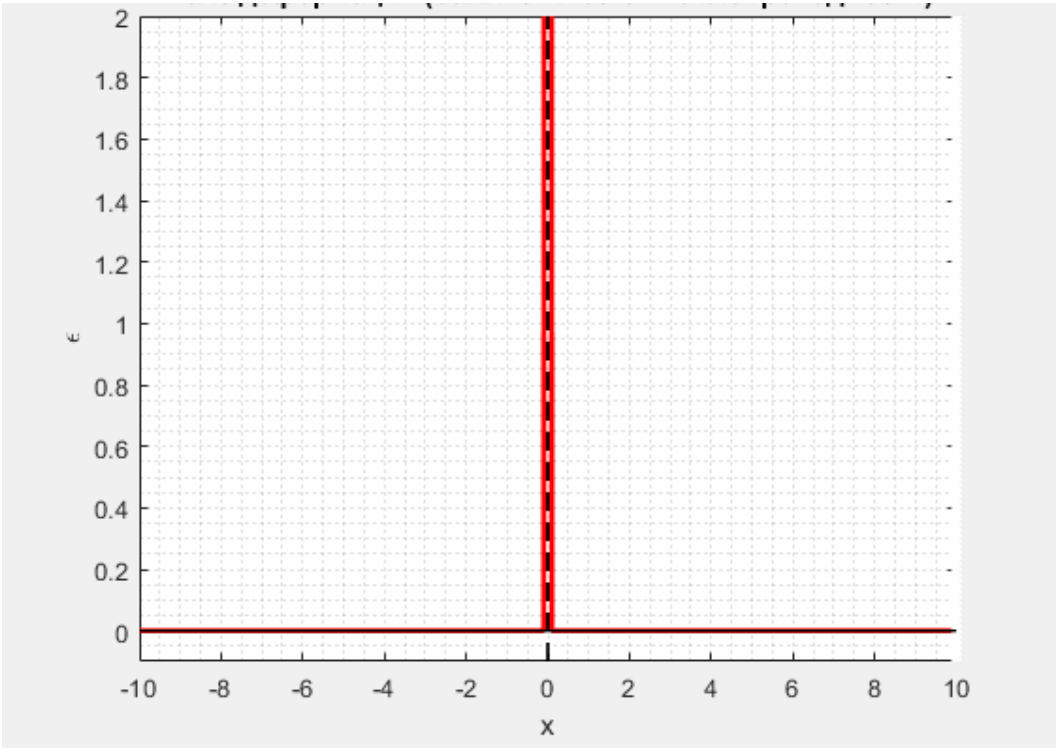
- Перемещения (classical thermoelasticity)

$$u = \frac{A\beta c_s\sqrt{\pi}}{4\alpha}\int_0^t \frac{1}{\sqrt{\tau}}\left(e^{-\frac{(c_s(t-\tau)-x)^2}{4\alpha^2\,\tau}} - e^{-\frac{(c_s(t-\tau)+x)^2}{4\alpha^2\,\tau}}\right)\mathrm{d}\tau$$

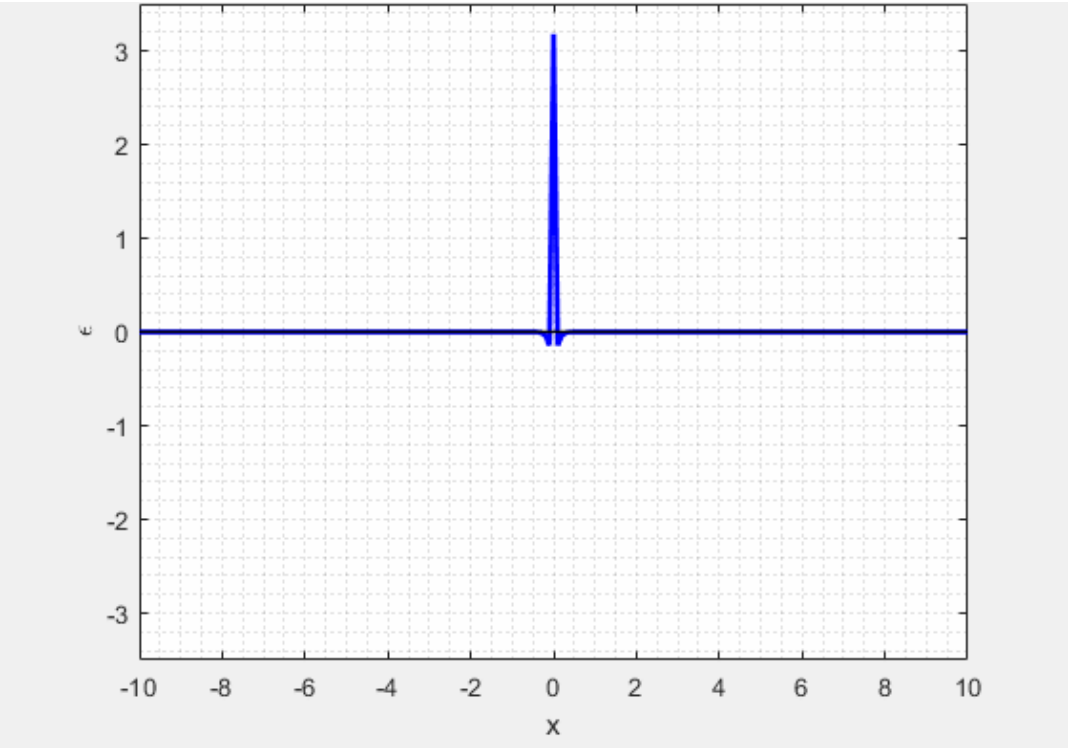
I. Trunova

Сравнение с классической термоупругостью

Деформации (баллистическая термоупругость)



Деформации (классическая термоупругость)



$$u = \frac{\beta x}{\pi c_s t} \frac{1}{\sqrt{1-(x/c_s t)^2}}$$

$$u = \frac{\beta c_s \sqrt{\pi}}{4\alpha} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\tau}} \left(e^{-\frac{(c_s(t-\tau)-x)^2}{4\alpha^2 \tau}} - e^{-\frac{(c_s(t-\tau)+x)^2}{4\alpha^2 \tau}} \right) \mathrm{d}\tau$$

Прямоугольное начальное поле температуры

- Начальное поле температуры

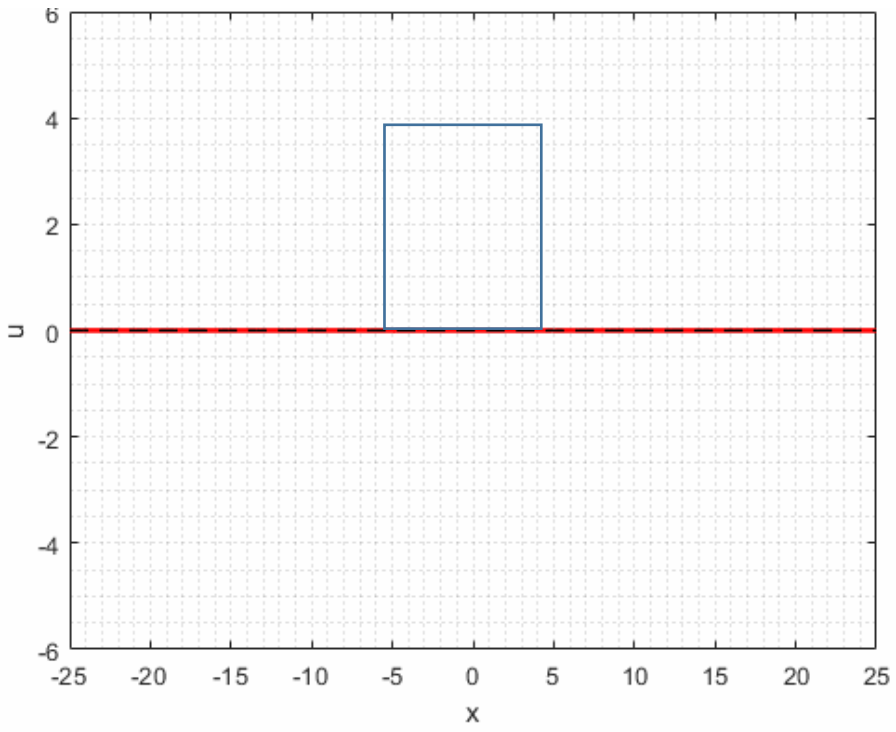
$$T_0(x) = \frac{A}{2}\big(H(x+a) - H(x-a)\big)$$

- Перемещения (ballistic thermoelasticity)

$$u = \frac{A\beta c_s t}{\pi}\big(W_-(x,t) - W_+(x,t)\big)$$

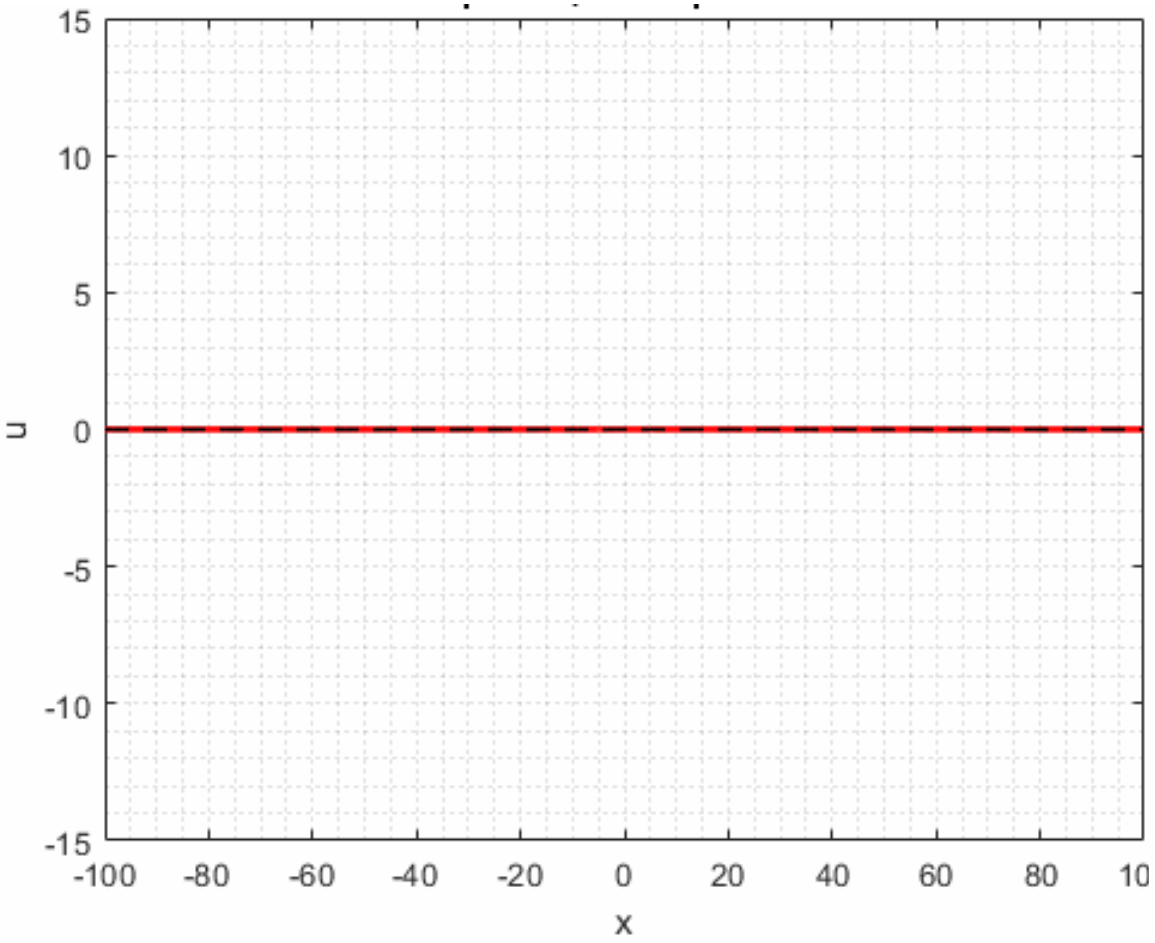
$$W_\pm(x,t) = \left[1 - \left(\frac{x \pm a}{c_s t}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}} \mathrm{H}(c_s t - |x \pm a|)$$

Перемещения

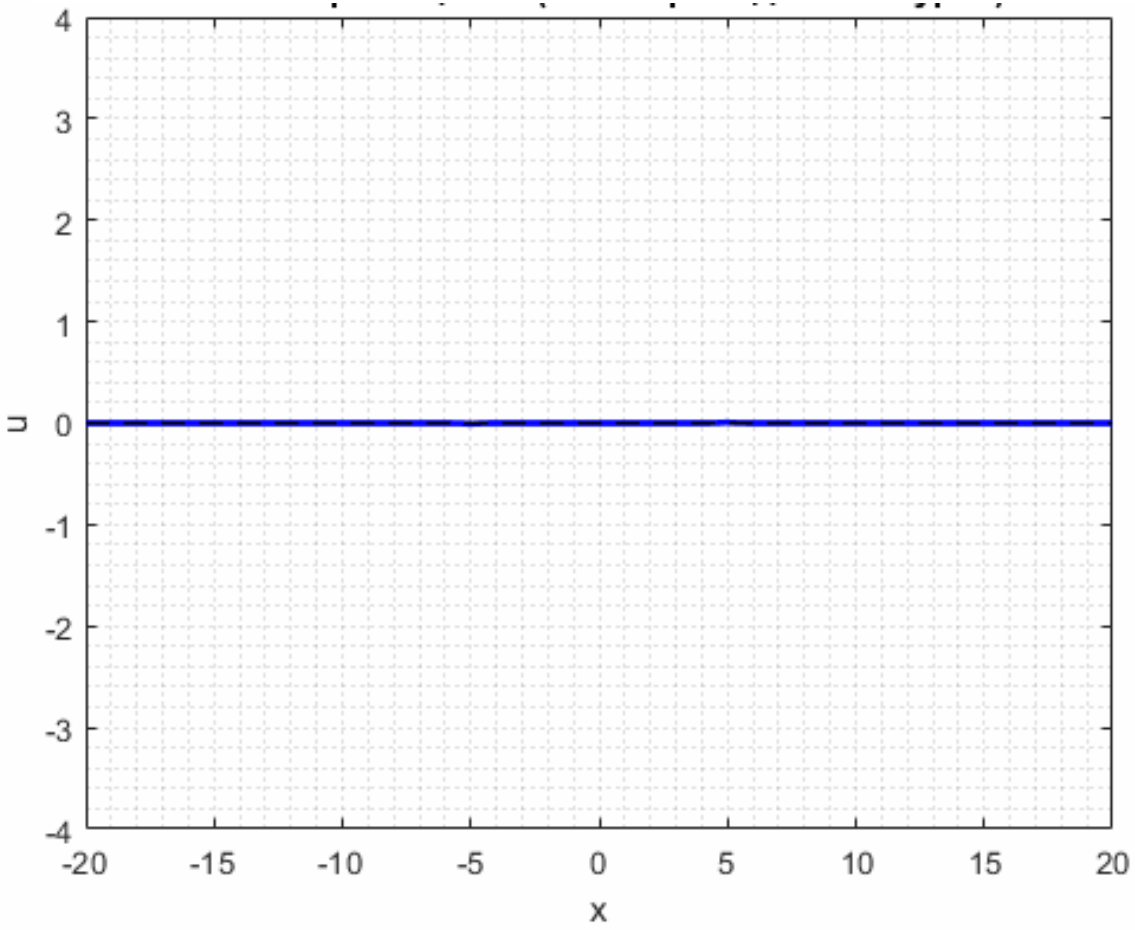


Прямоугольное распределение температуры

Перемещения (ballistic thermoelasticity)

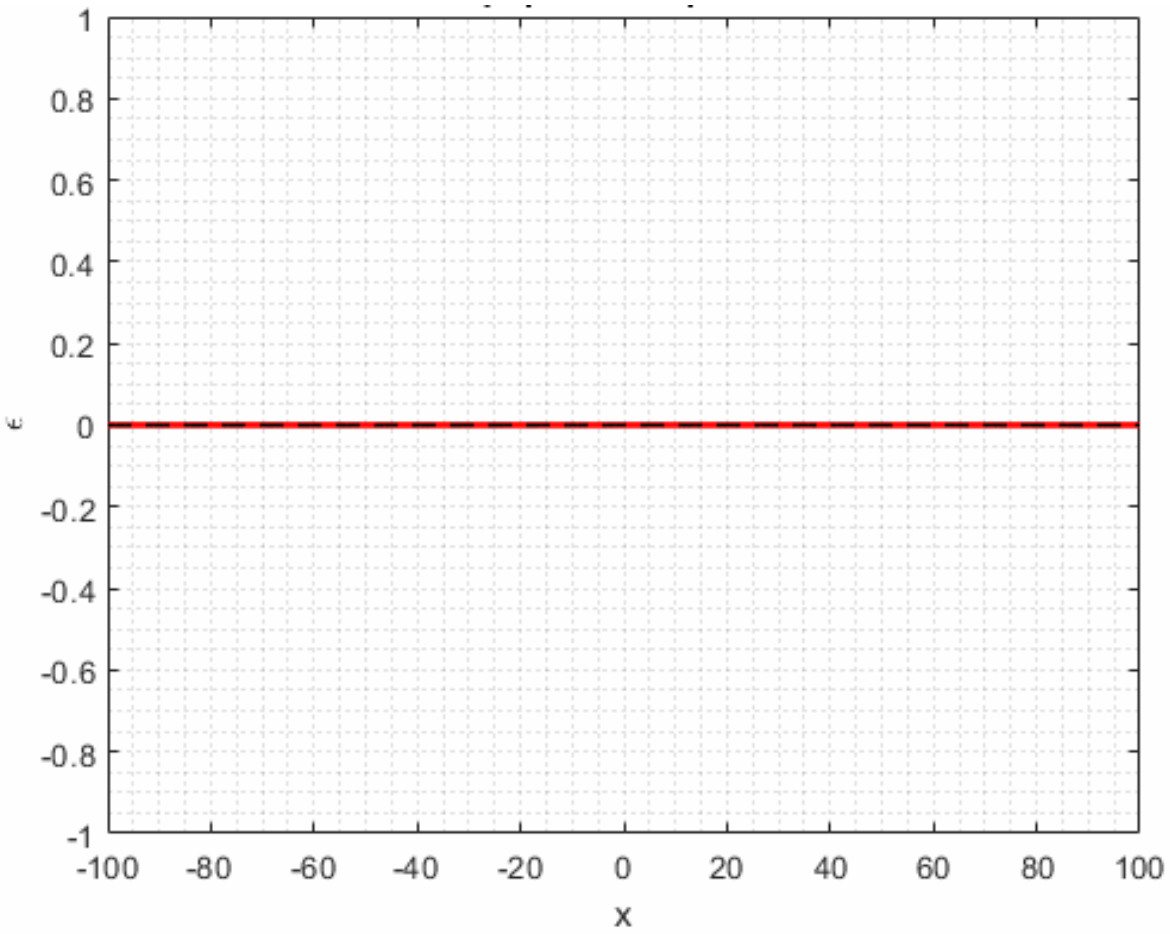


Перемещения (classical thermoelasticity)

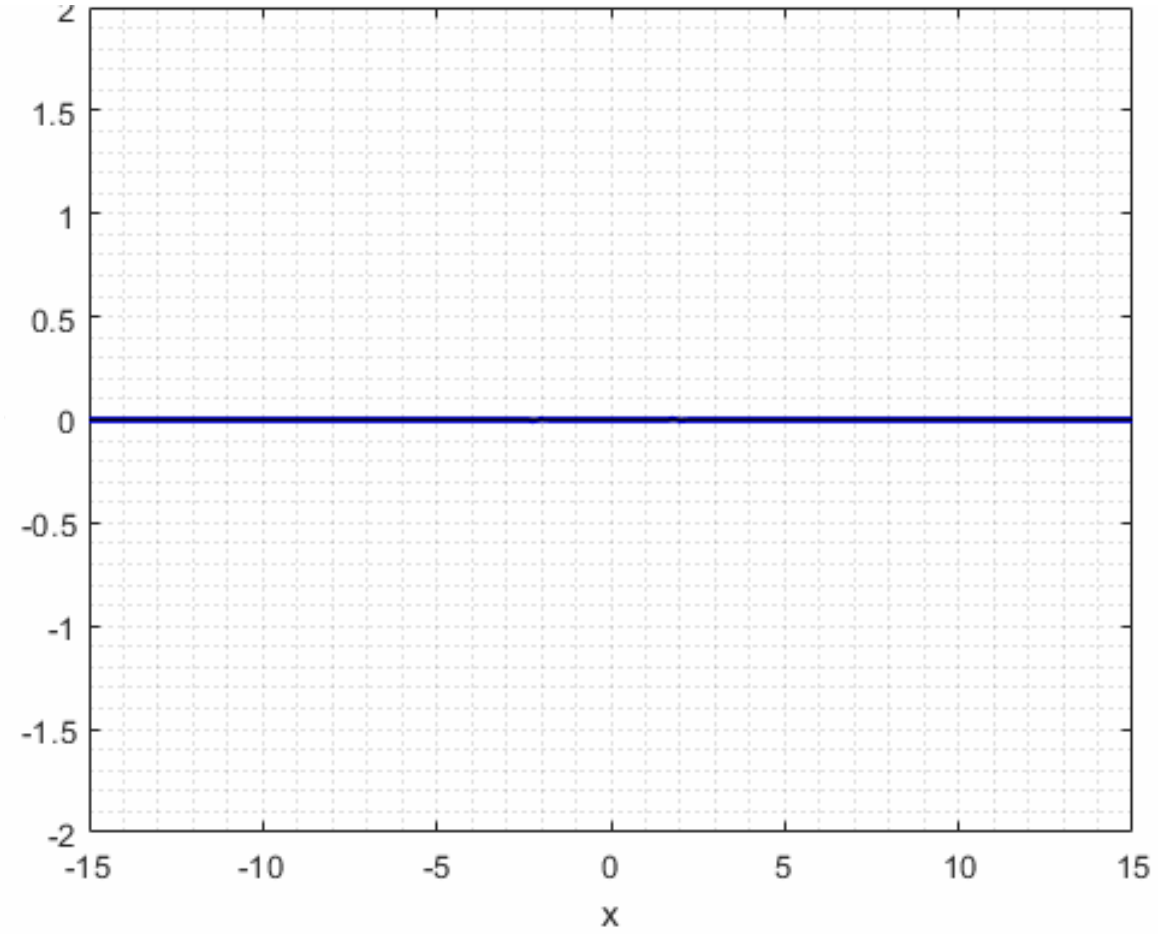


Прямоугольное распределение температуры

Деформации (ballistic thermoelasticity)



Деформации (classical thermoelasticity)



Результаты

- Баллистический теплоперенос приводит к новым эффектам
- Баллистический теплоперенос хорошо описывается линейной теорией
- Поведение слабонелинейных систем хорошо описывается уравнениями **баллистический термоупругости**
- **Баллистическая термоупругость** предсказывает новые эффекты, например баллистический резонанс

Открытые вопросы

- Linking different theories of heat transport (lattice dynamics, kinetic theory, fluctuating hydrodynamics etc.)
- Transition between different heat transport regimes
- Interaction of thermal waves with defects, boundaries and interfaces
- Transition of mechanical energy into heat
- Quantum effects at low temperatures
- Real experiments on unsteady heat transport

Further details mech.spbstu.ru/TC

mech.spbstu.ru/TC

Page | ACL | Discussion | Read | Edit | View history | More | Search

Main page
Recent changes
Random page
Help

Tools
What links here
Related changes
Upload file
Special pages
Printable version
Permanent link
Page information

In other languages
Русский

Share
Поделиться...

Project "Thermocrystal" [edit]

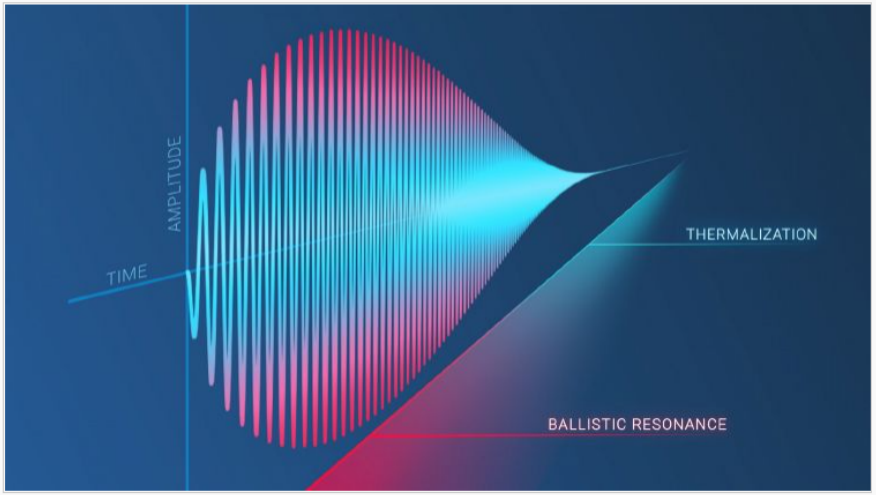
(Redirected from TC)

TM > **Project "Thermocrystal"**

The project is devoted to development of analytical models of nonequilibrium thermal processes in ultrapure crystals.

Contents [hide]

1 Publications
2 Additional publications
3 Preprints
4 Virtual laboratory
5 Conferences talks
6 Links



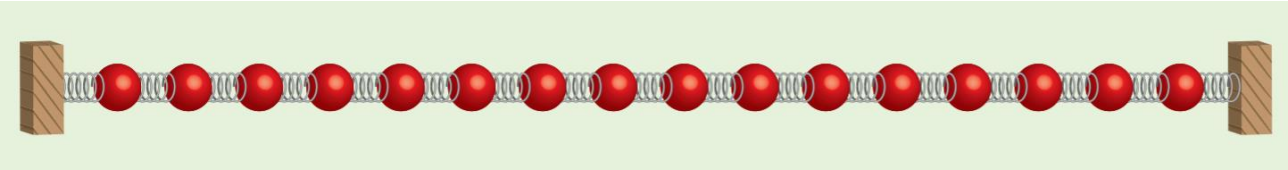
Ballistic resonance and thermalization in FPU chain

Publications [edit]

- V.A. Kuzkin, A.M. Krivtsov. **Ballistic resonance and thermalization in the Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature**. 2020, Physical Review, E 101, 042209 (abstract, download pdf)
- A.M. Krivtsov, M.B. Babenkov, D.V. Tsvetkov. **Heat Propagation in a One-Dimensional Harmonic Crystal on an Elastic Foundation.** 2020, Physical Mesomechanics, Vol. 23, No. 2, pp. 109–119 (abstract, download pdf)
- S.N. Gavrilov, A.M. Krivtsov. **Steady-state kinetic temperature distribution in a two-dimensional square harmonic scalar lattice lying in a viscous**

Additional slides

Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou problem



- Nonlinear chain
- Initial conditions correspond to excitation of the 1st normal mode
- <u>Zero temperature</u>

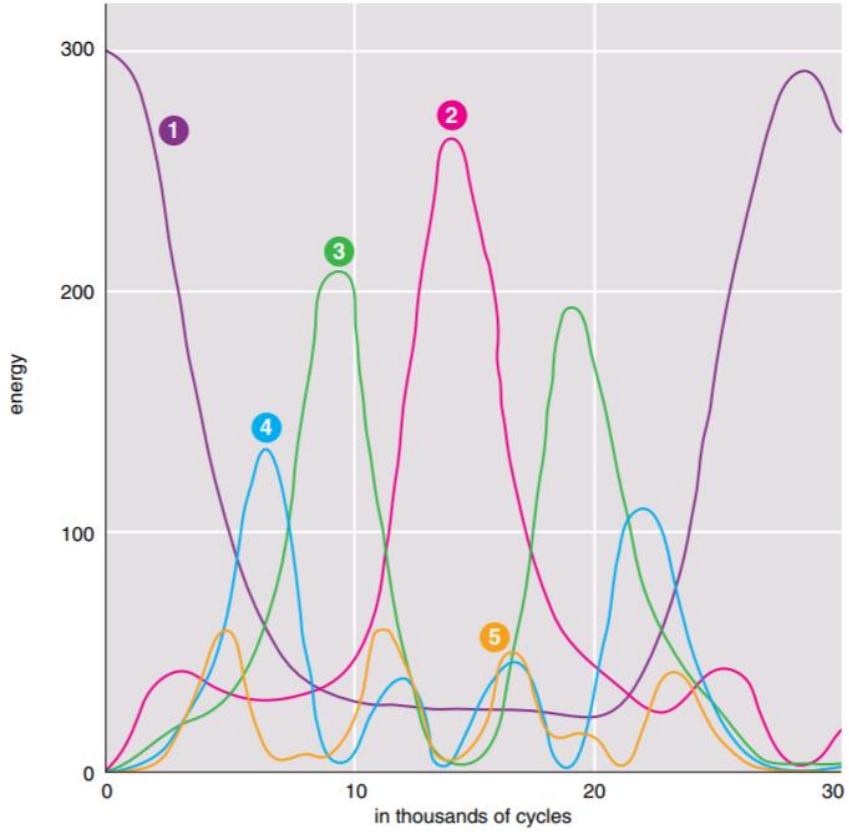
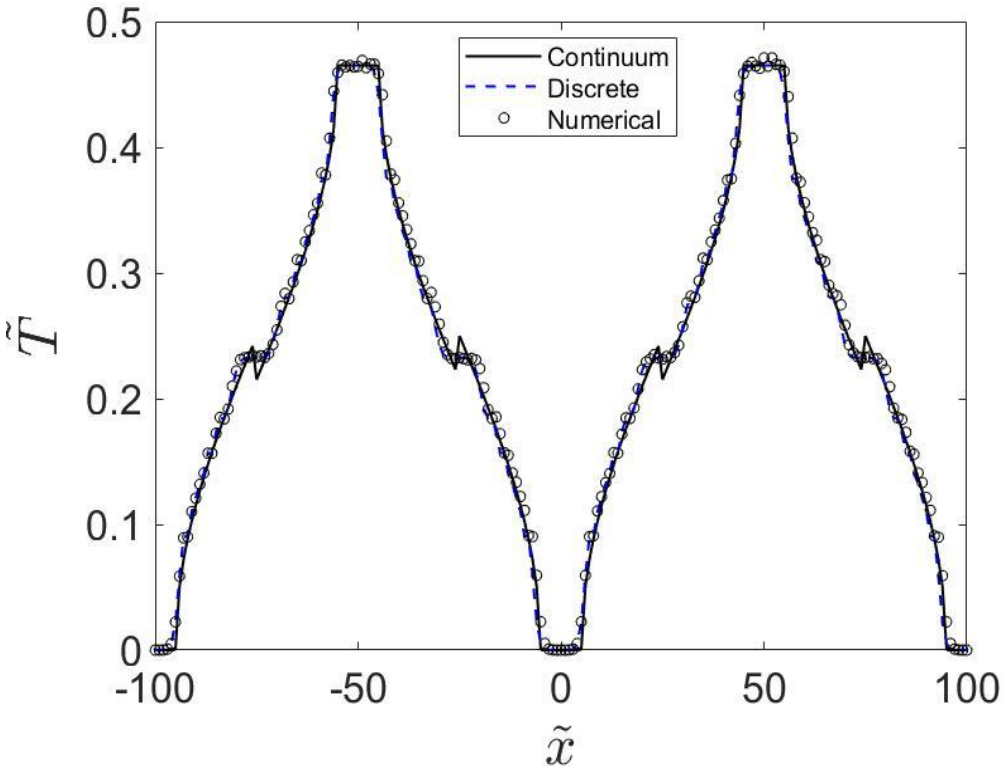


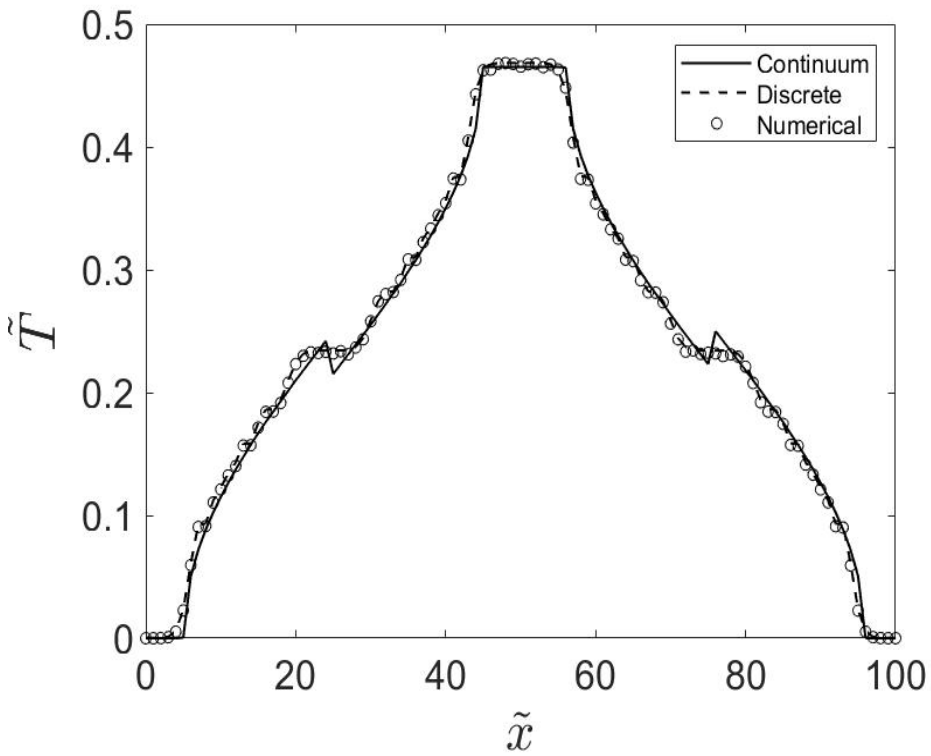
Figure 4. Fermi, Pasta and Ulam initialized their system with all energy in the lowest mode of vibration *(1)* and calculated what would ensue. They expected that energy would eventually become shared equally among all possible modes. Instead they found that after being shared among a few low-order modes, a very large fraction of the energy later returned to the mode they had used to initialize the system. (Colors correspond to the analogous modes shown in Figure 3.) This observation, which they modestly dubbed "a little discovery," marked the birth of experimental mathematics. (Adapted from Fermi, Pasta and Ulam 1955.)

Fermi, E., J. R. Pasta and S. Ulam. 1955. Studies of nonlinear problems. I. Report LA-1940. Los Alamos: Los Alamos Scientific Laboratory.

Rectangular temperature profile in the semi-infinite chain



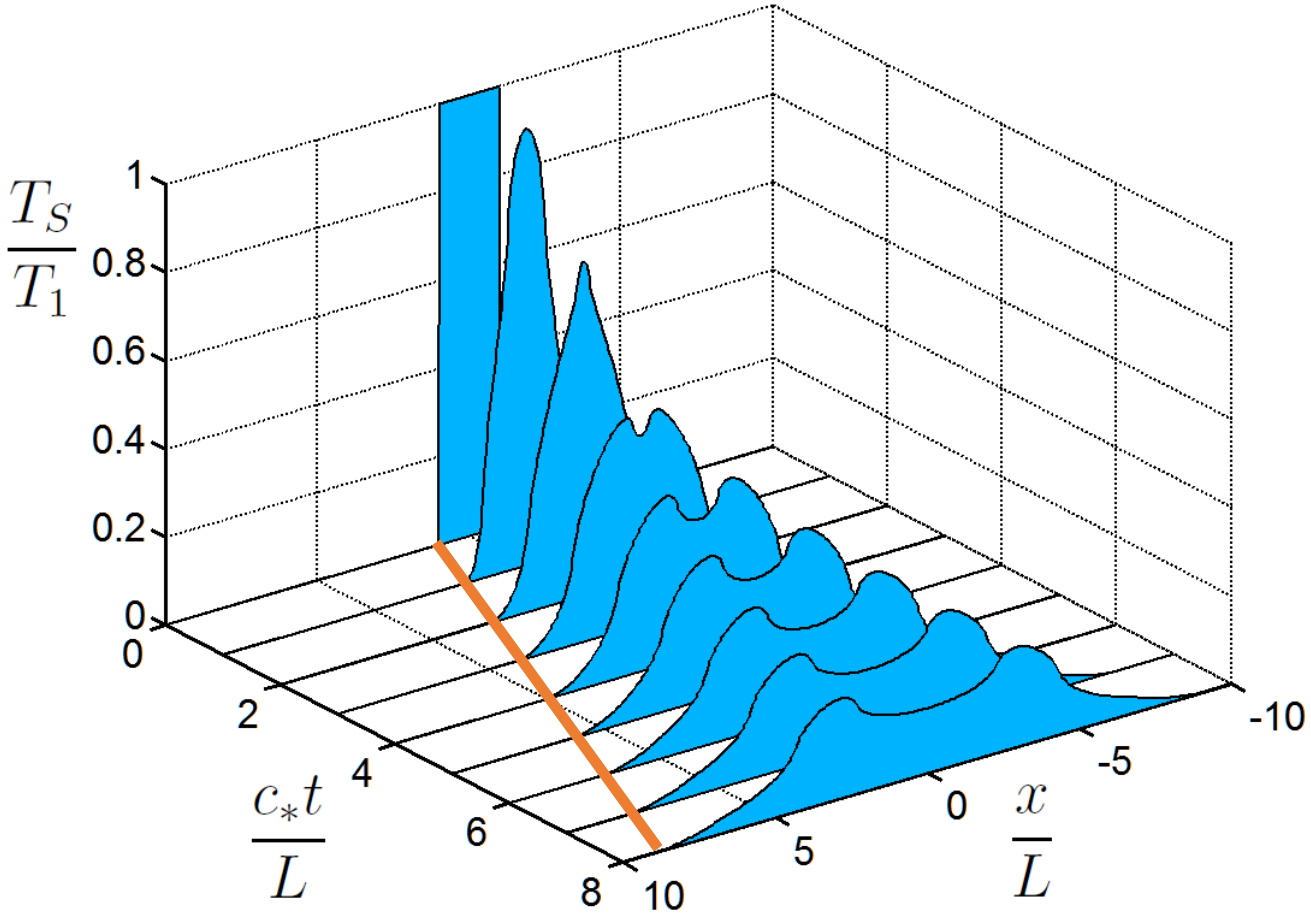
Infinite chain at $\tilde{t} = 20$



Semi-infinite chain at $\tilde{t} = 20$

Finite speed of the heat front

Ballistic heat transport in the scalar square lattice

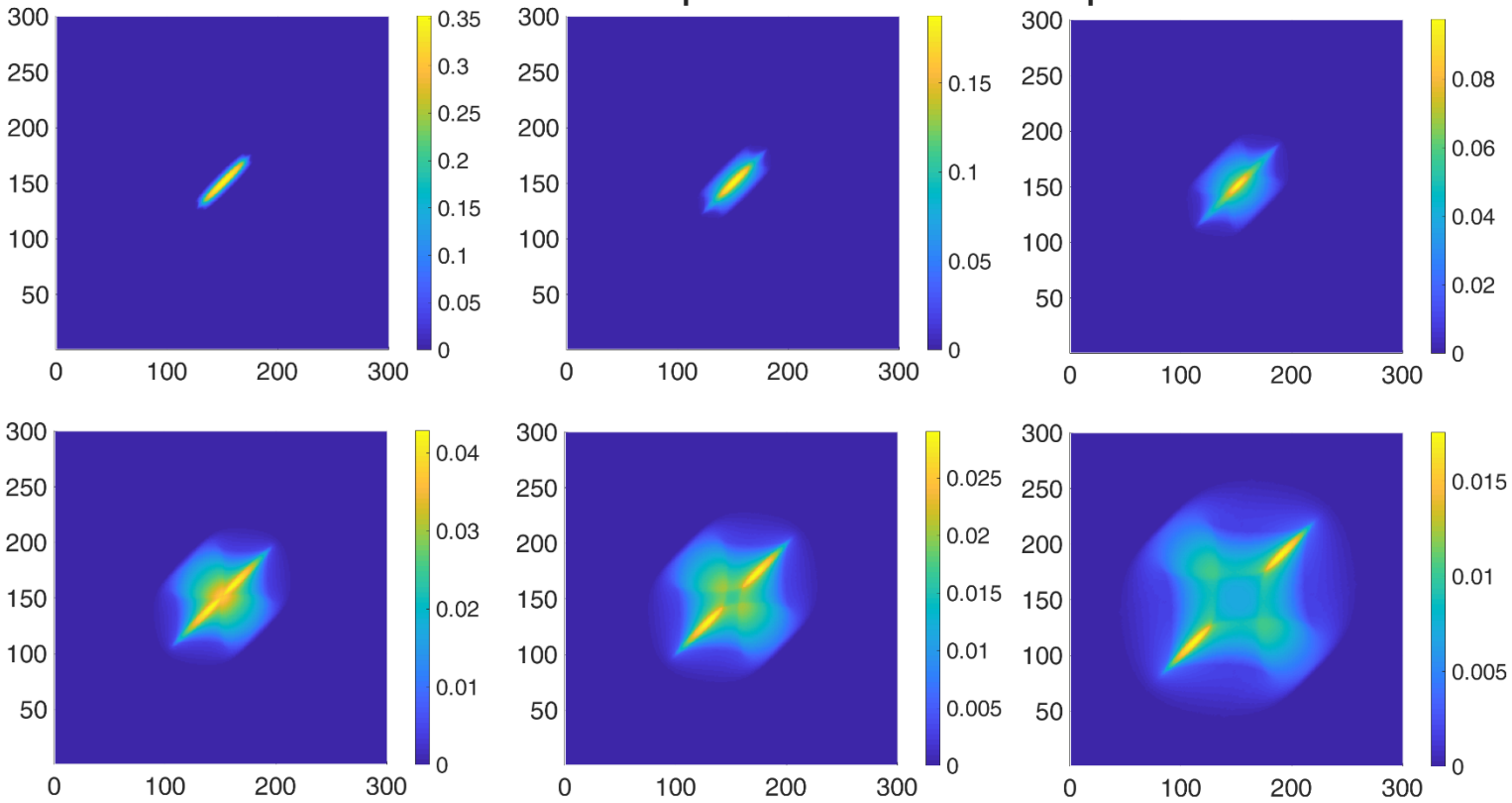


Front speed is equal to the maximum group velocity

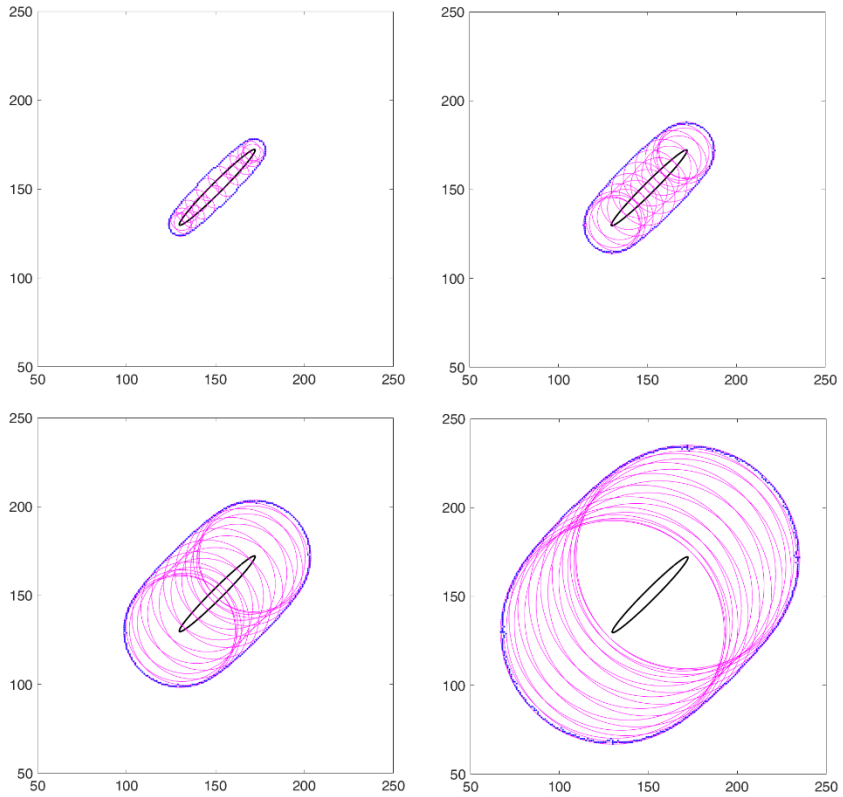
Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices // J. Phys.: Condens. Matter, 29, 505401, 2017

Front tracking using the Huygens–Fresnel principle

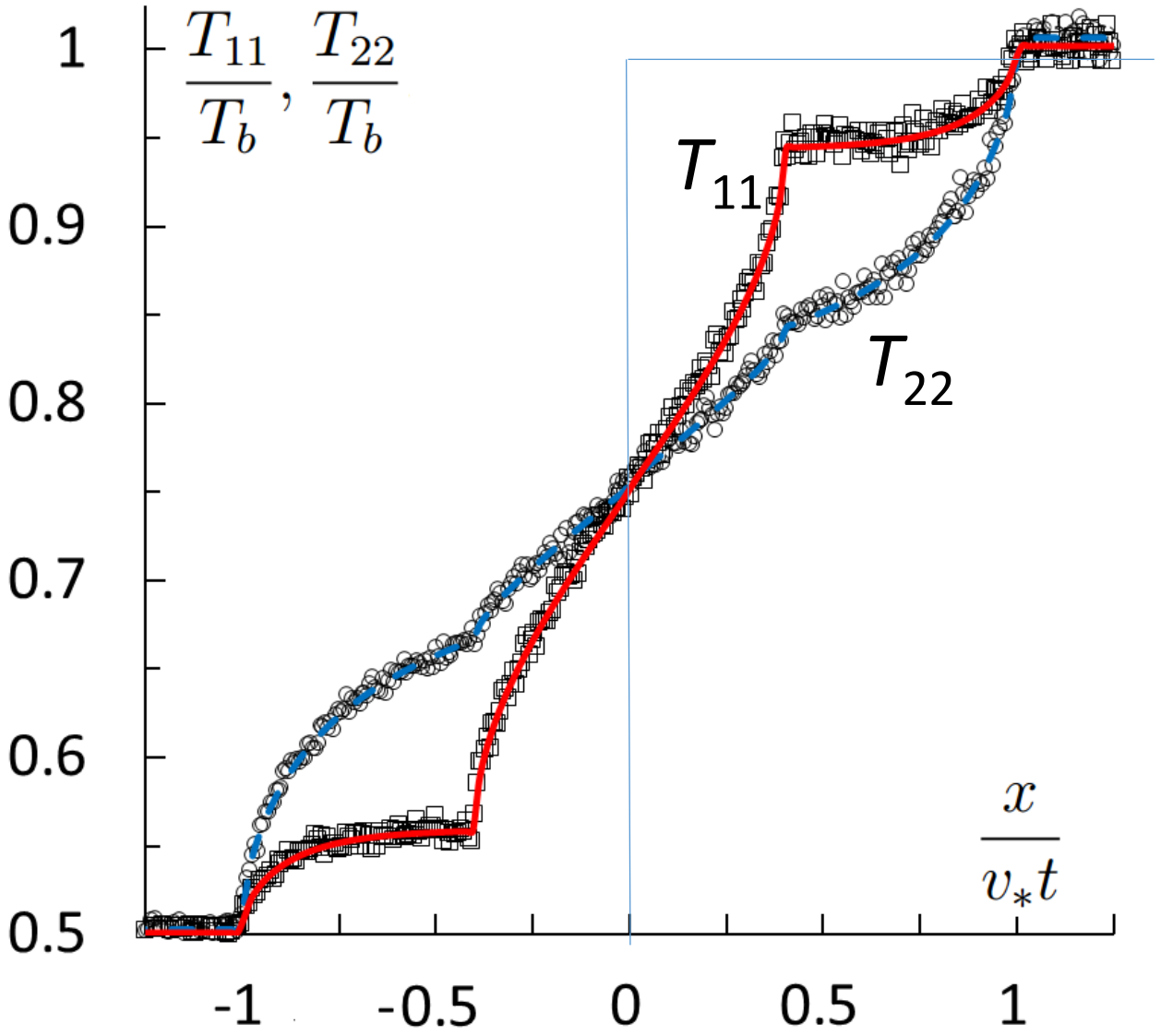
Ballistic heat transport in the scalar square lattice

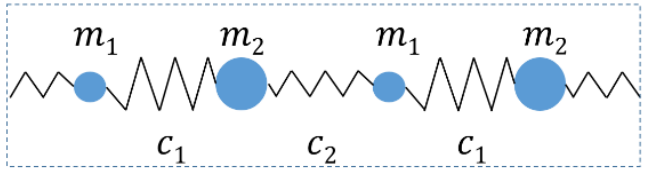


Front tracking



Multiple temperatures (unsteady case)





Temperatures of sublattices are different

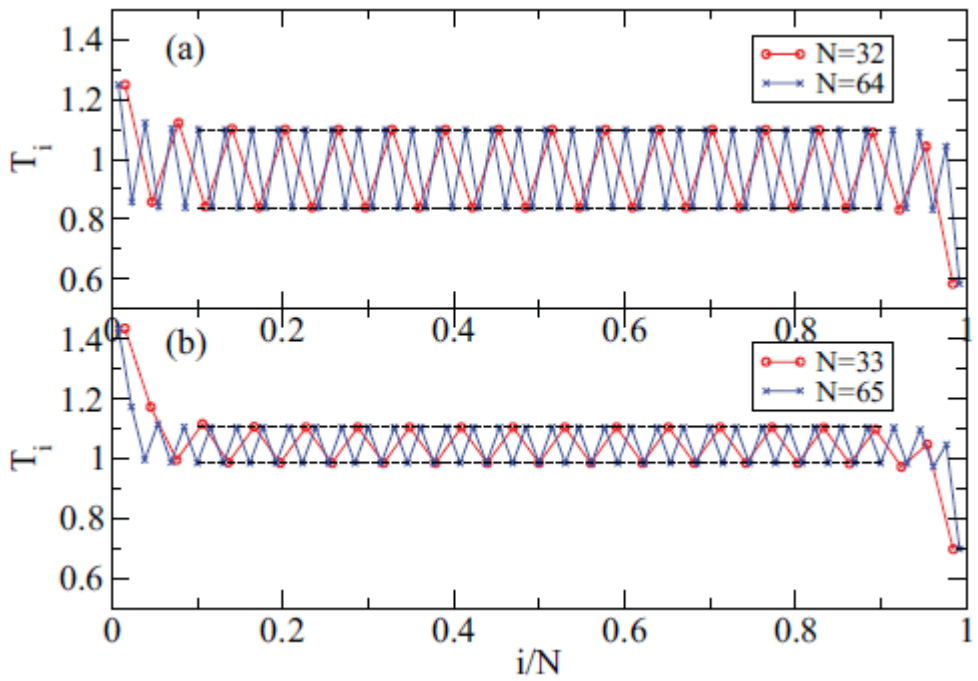
Parameters:

$m_2 = 2m_1$, $c_1 = c_2$ time $500\tau_{min}$

Number of realizations 10^4

Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Cont Mech Thermodyn, 2019

Multiple temperatures (noneq. steady state)



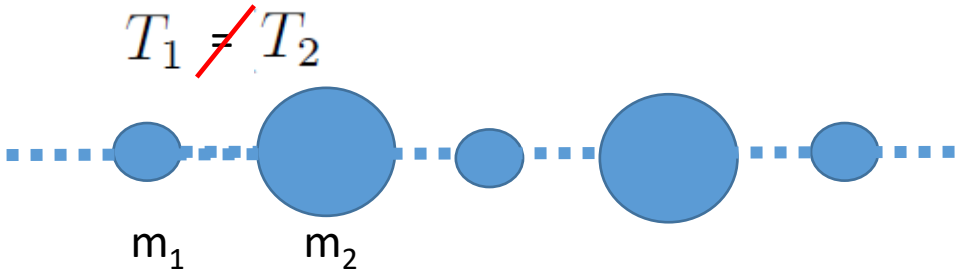
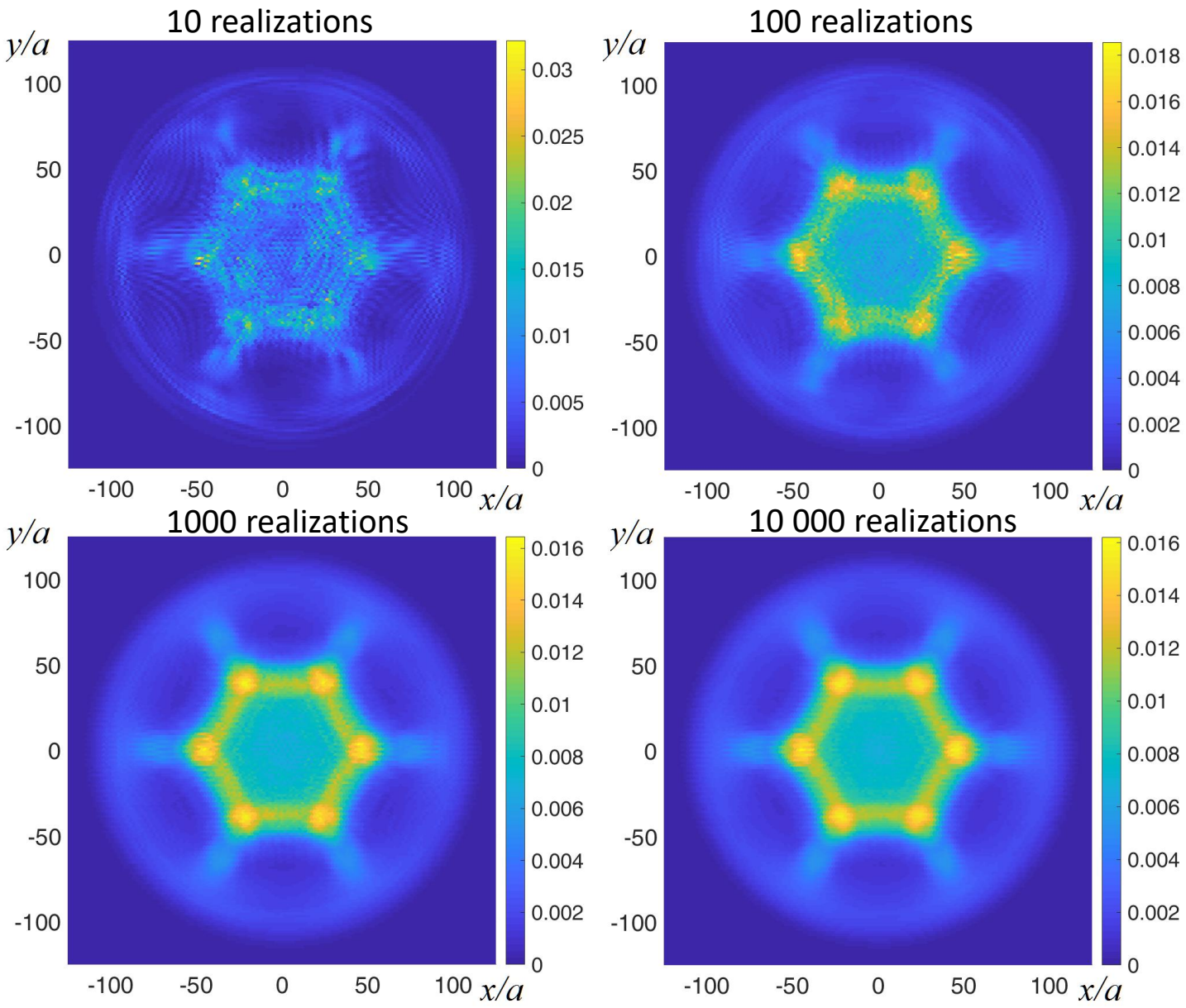
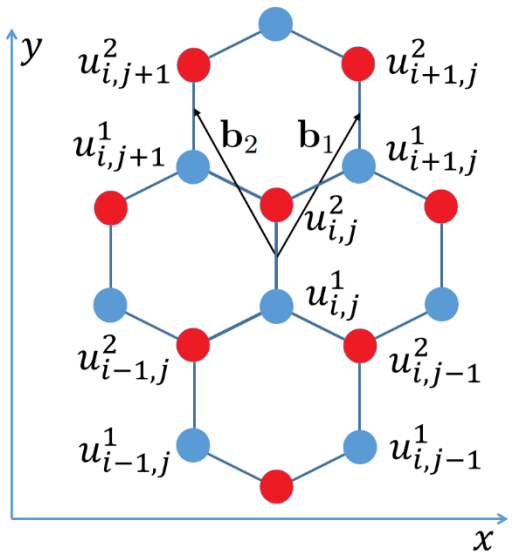


FIG. 1. (Color online) Temperature profiles for (a) system with even number of sites $N = 32,64$ and with $\gamma_L = \gamma_R = 1.0$ and (b) system with odd number of sites $N = 33,65$ and with $\gamma_L = 1.5, \gamma_R = 0.5$. Other parameters were set to $m_a = 0.75, m_b = 0.25, k = 1, T_L = 1.5, T_R = 0.5$. The mass of the first particle is always taken to be m_a. Note that in (a), the heavier particles are hotter, while in (b), the lighter particles are hotter. The horizontal dashed lines indicate the analytic predictions for $N \to \infty$, from Eqs. (11), (12).

V. Kannan, A. Dhar, J.L. Lebowitz, Nonequilibrium stationary state of a harmonic crystal with alternating masses, Phys. Rev. E, (2012).

Anisotropy of heat transport in graphene (out-of-plane)



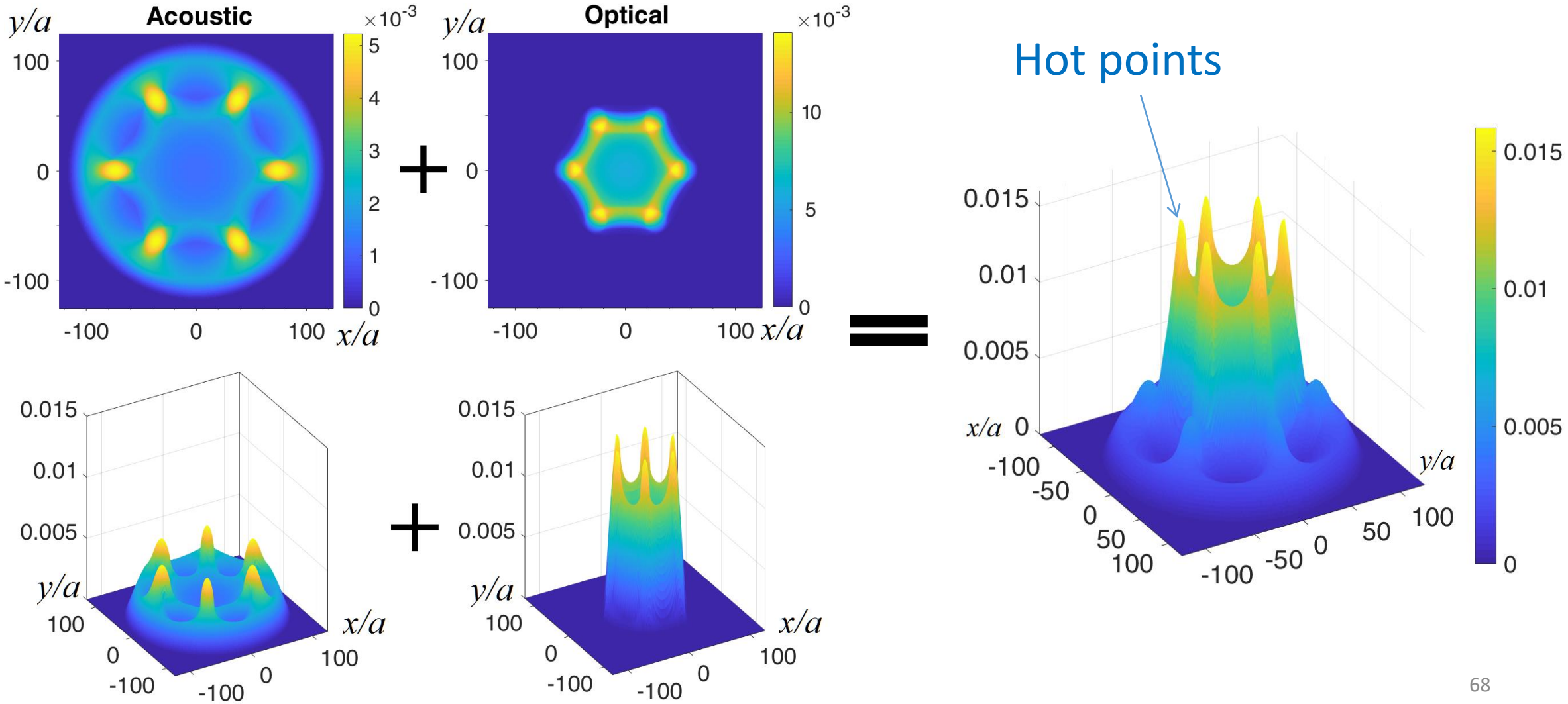


Initial conditions:

$$T_0(x,y) = \begin{cases} T_1, & x^2+y^2 \le R^2, \\ 0, & x^2+y^2 > R^2, \end{cases}$$

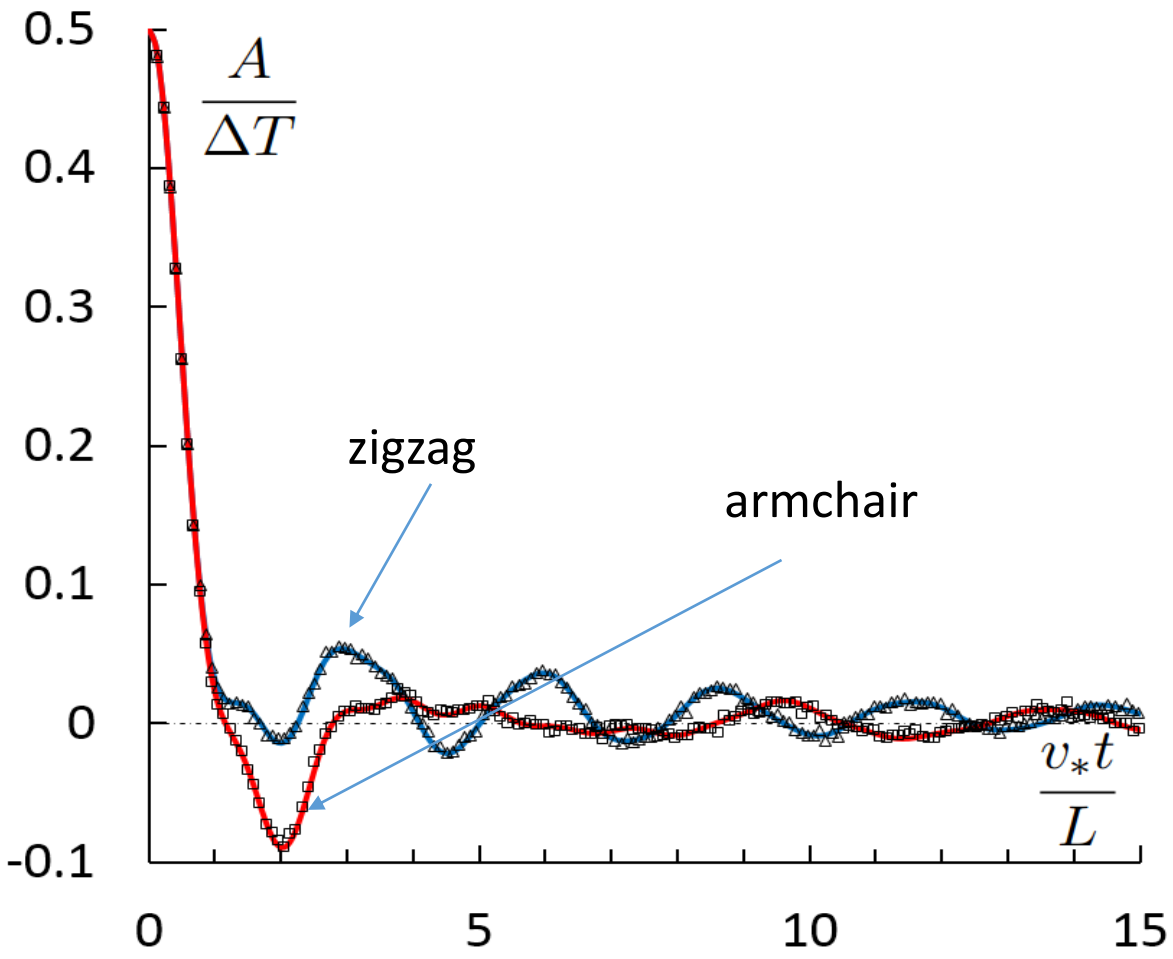
Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Cont Mech Thermodyn, 2019

Heat transport “from cold to hot”



Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Cont Mech Thermodyn, 2019

Oscillatory decay of sinusoidal temperature profile in graphene



Initial conditions:

$$\boldsymbol{T}_0 = T_0(x,y)\mathbf{E}, \qquad T_0(x,y) = T_b + \Delta T \sin\frac{2\pi x}{L}$$

Computed value:

$$A = \frac{2}{L^2}\int_0^L \int_0^L T(x,y)\sin\frac{2\pi x}{L}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

Effects:

1) Nonmonotonic decay
2) Decay as 1/t rather than e^{-t}
3) Anisotropy

Kuzkin V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Cont Mech Thermodyn, 2019

Избранные публикации

1. Kuzkin V.A. **Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell**. *Cont. Mech. Thermodyn*., 2019

2. Kuzkin V.A. **Thermal equilibration in infinite harmonic crystals**. *Cont. Mech. Thermodyn*, 2019

3. Кузькин В.А., Кривцов А.М. **Высокочастотные тепловые процессы в гармонических кристаллах**. *ДАН*, 2017

4. Кузькин В.А., Кривцов А.М. **Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах**. *ФТТ*, 2017.

5. Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. **Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices**. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2017

Отличия от гиперболической теплопроводности

- Уравнения Максвелла-Каттанео-Вернотта:

$$\dot{h} + \frac{1}{\tau}h = -\frac{\kappa}{\tau}T' \qquad \ddot{T} + \frac{1}{\tau}\dot{T} = \frac{\alpha}{\tau}T''$$

- Решение в случае косинусоидального начального возмущения [1]

$$4\alpha\tau k^2 > 1:$$

$$T(t,x) = \delta T e^{-\frac{t}{2\tau}}(\cos\omega^* t + A^* \sin\omega^* t)\cos kx + T_0 \qquad \omega^* = \frac{\sqrt{4\alpha\tau k^2 - 1}}{2\tau}, \quad A^* = \frac{1}{\sqrt{4\alpha\tau k^2 - 1}}, \quad \kappa = \rho c_V \alpha$$

- Отличия:
  - Не описывает распространение тепла в линейных и слабо нелинейных цепочках [2,3]
  - Дает экспоненциальное затухание, в численном эксперименте – степенное затухание
  - Нет зависимости от закона взаимодействия (дисперсионного соотношения). Для разных цепочек закон изменения температуры будет одинаковым (не согласуется с результатами моделирования)

[1] A.A. Sokolov, A.M. Krivtsov, W.H. Müller, E.N. Vilchevskaya, Physical Review E, 99, 042107 (2019)
[2] O.V. Gendelman, A.V. Savin, Physical Review E, 81, 020103R (2010)
[3] А.М. Кривцов, Доклады академии наук. 2015, том 464, №2, с. 162–166

Аналитическое решение (баллистический резонанс)

	Точная формула	Асимптотика при больших *t*
Перемещения	$u(x,t) = -\frac{\beta\Delta T}{\lambda}\omega t J_1(\omega t)\cos(\lambda x).$	$u \approx -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\beta\Delta T}{\lambda}\sqrt{\omega t}\cos\left(\omega t - \frac{3\pi}{4}\right)\cos(\lambda x).$
Механическая энергия	$\mathcal{E} = \mathcal{E}_*\omega^2 t^2\left(J_0^2(\omega t) + J_1^2(\omega t)\right)$ $\mathcal{E}_* = \frac{1}{4}\rho v_s^2\beta^2\Delta T^2.$	$\mathcal{E} \approx \frac{2}{\pi}\mathcal{E}_*\omega t.$

Связь микро- и макропараметров

- Механические параметры

$$\rho = \frac{m}{a}, \qquad E = ca, \qquad v_s = a\sqrt{\frac{c}{m}}$$

- Тепловые параметры

$$c_V = k_B, \qquad \beta = -\frac{\alpha k_B}{ac^2}.$$

A.M. Krivtsov From nonlinear oscillations to equation of state in simple discrete systems // CSF, 2003
А.М. Кривцов, В.А. Кузькин Получение уравнений состояния идеальных кристаллов простой структуры // МТТ, 2011