Особенности термомеханических процессов в кристаллах на наноуровне

В.А. Кузькин

II Школа-семинар
«Механика, химия и новые материалы»

26 сентября 2023

Содержание

- Диффузионный и баллистический режимы теплопроводности

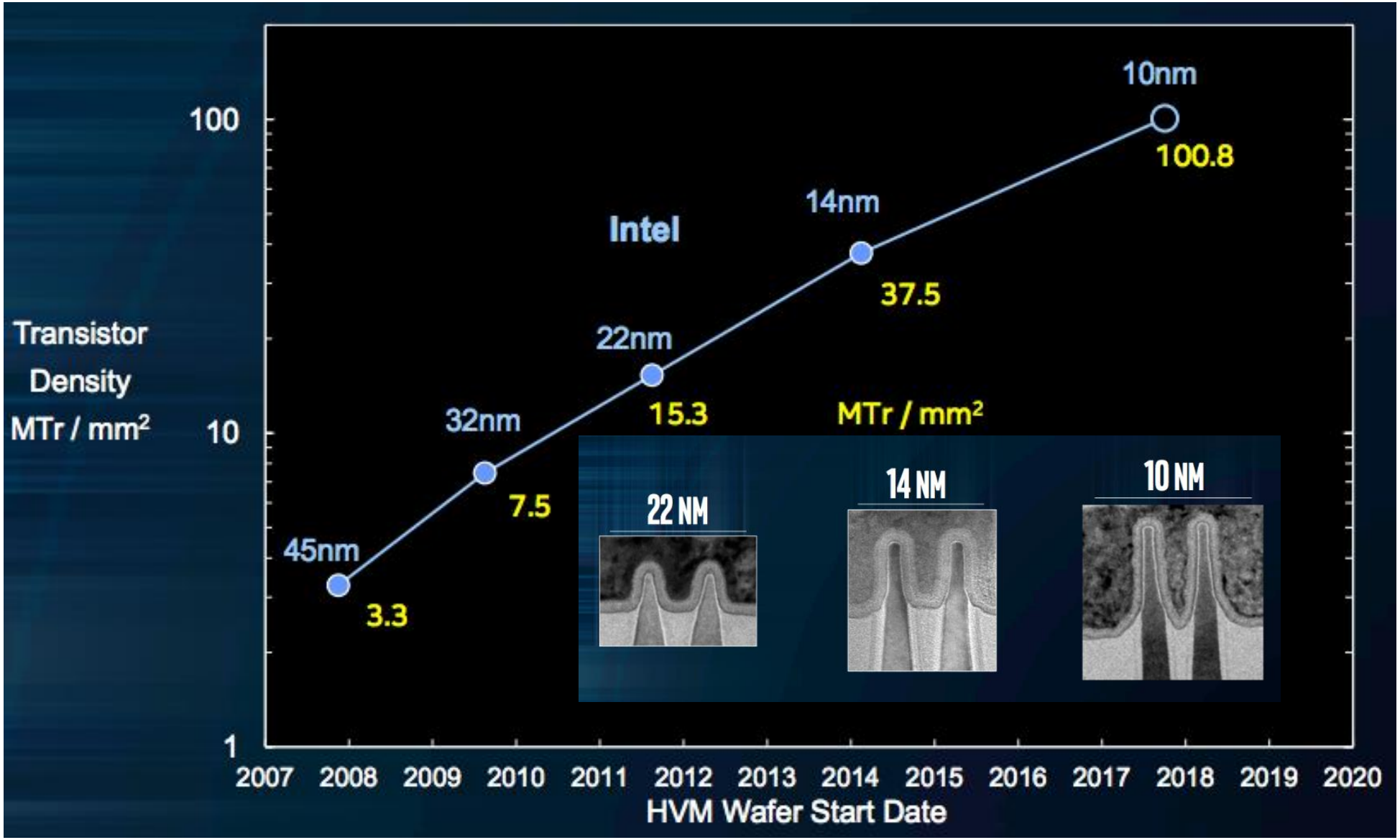
- Линейные эффекты
  - Независимость температуры и потока
  - Конечная скорость фронта
  - Несколько температур

- Нелинейные эффекты
  - Выравнивание температур
  - Баллистическая термоупругость
  - Переход от баллистики к диффузии

- Интерфейсные эффекты
  - Проблемы континуалиации
  - Акустическая прозрачность
  - Тепловые диоды

Диффузионный и баллистический режимы теплопроводности

Проблема: охлаждение ~~микро~~нано процессоров



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
3 nm – 2022

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

Закон Фурье

- Закон Фурье

$$\boldsymbol{q} = -K\,\nabla T$$

- Связь коэффициент теплопроводности с длиной свободного пробега фононов λ ([1], [2])

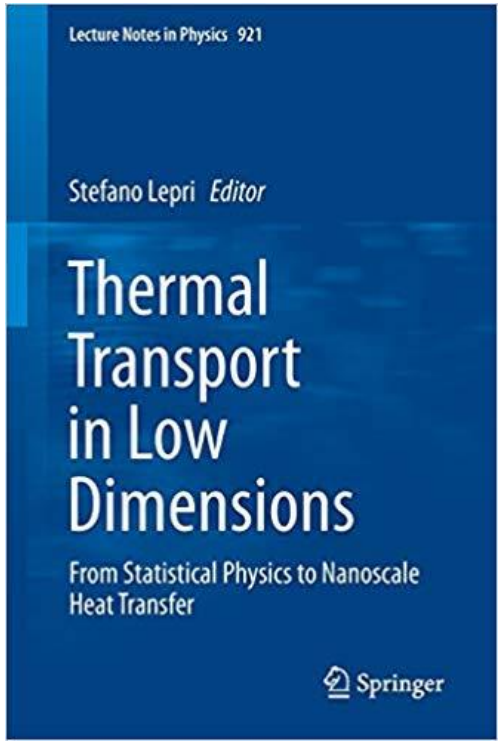
$$K \sim v\lambda$$

- Работает на макроуровне в материалах с дефектами (длина свободного пробега много меньше длины образца)

[1] R.E. Peierls, Quantum theory of solids (Oxford University Press, 1965)
[2] J.M. Ziman, Electrons and Phonons. The theory of transport phenomena in solids. (Oxford University Press, 1960)

Режимы распространения тепла

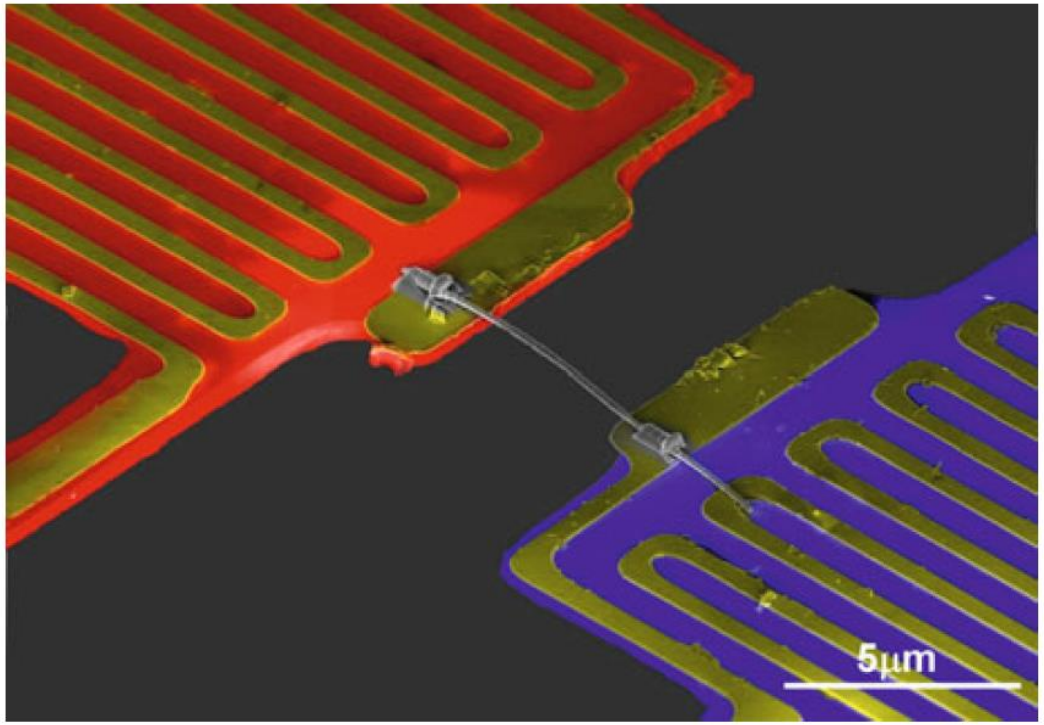
- **Диффузионный**
  - Выполняется закон Фурье
  - К-т теплопроводности – константа материала
- **Баллистический**
  - Закон Фурье НЕ выполняется
  - Эффективный к-т теплопроводности пропорционален размеру образца (K ~ L)



Баллистическое распространение тепла в нанопроволоках

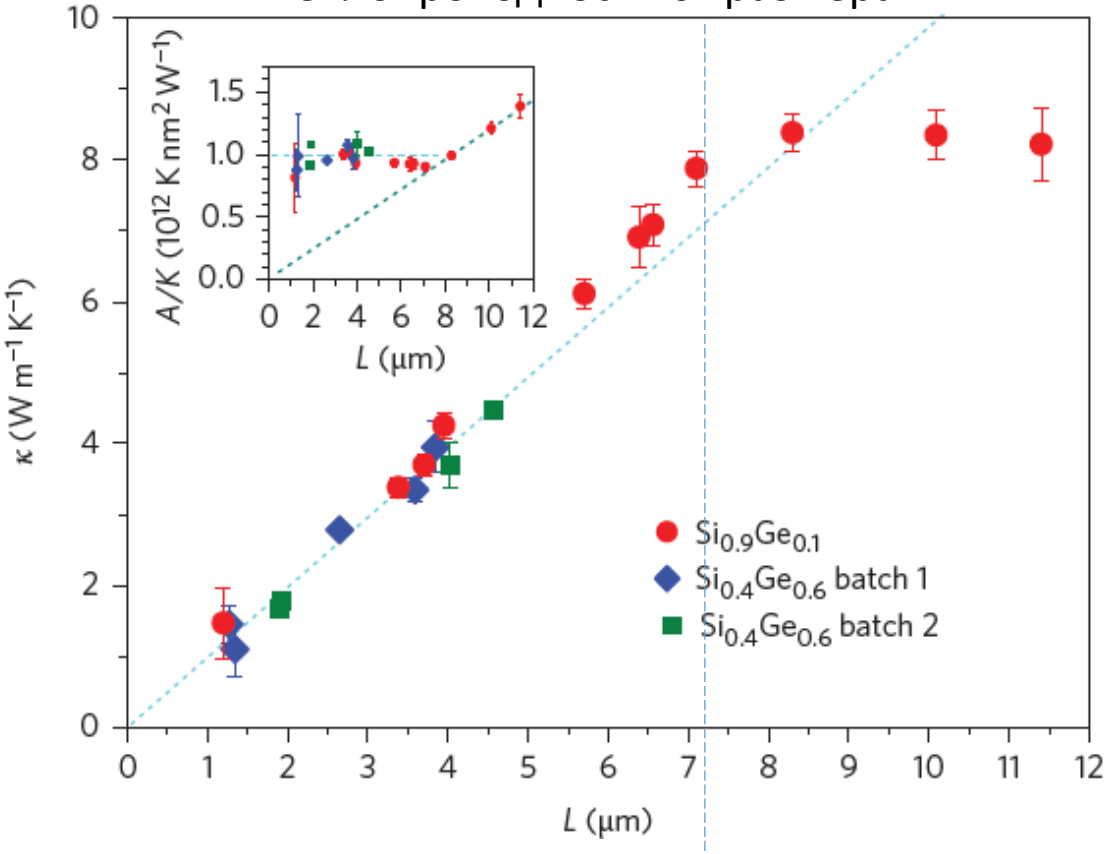
(T.-K. Hsiao et al. Observation of room-temperature ballistic thermal conduction persisting over 8.3 micron in SiGe nanowires. Nature Nanotech. 2013)

Кремний-германиевая нанопроволока



K ~ L

Зависимость эффективного к-та теплопроводности от размера



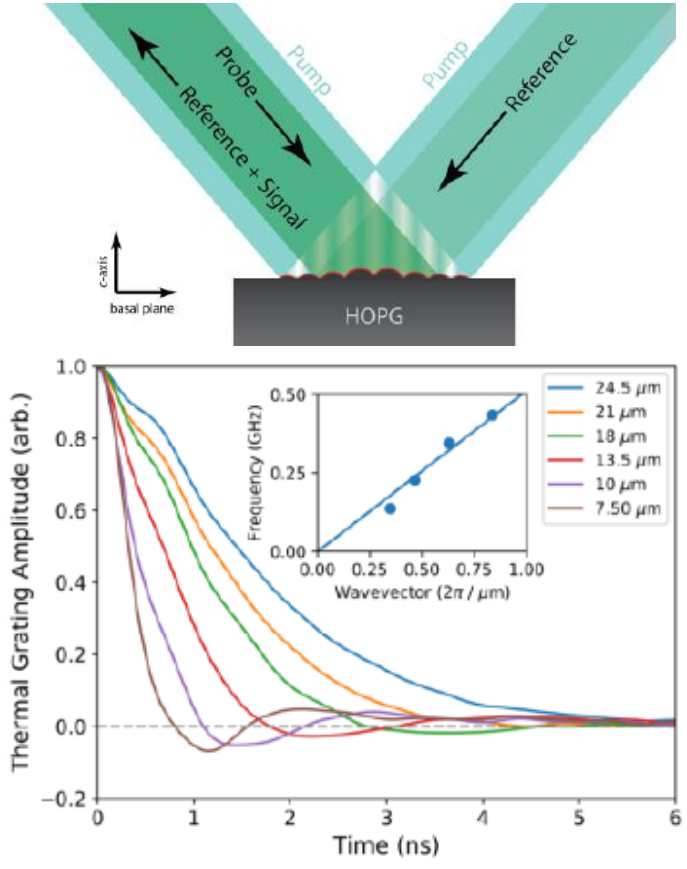
баллистический режим | **диффузионный режим**

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

- На поверхности материала генерируется синусоидальное распределение начальной температуры с помощью двух лучей лазера
- Тепловое расширение приводит к искривлению поверхности
- В поликристаллическом графите при T ~ 100K амплитуда синусоидального поля температуры затухает **немонотонно**

Параметры эксперимента:

- 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)

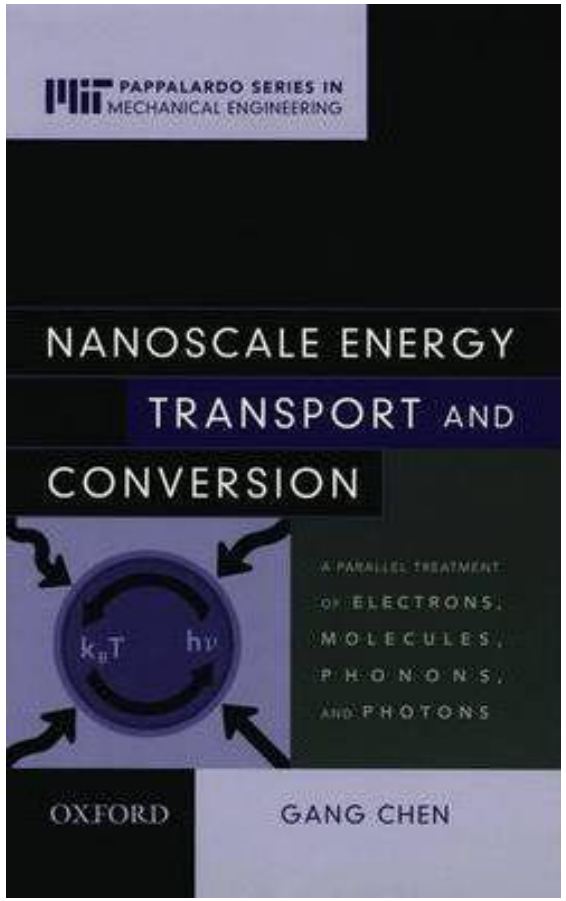
Аномальная теплопроводность: **зарубежные** ученые и научные группы

Научные группы:

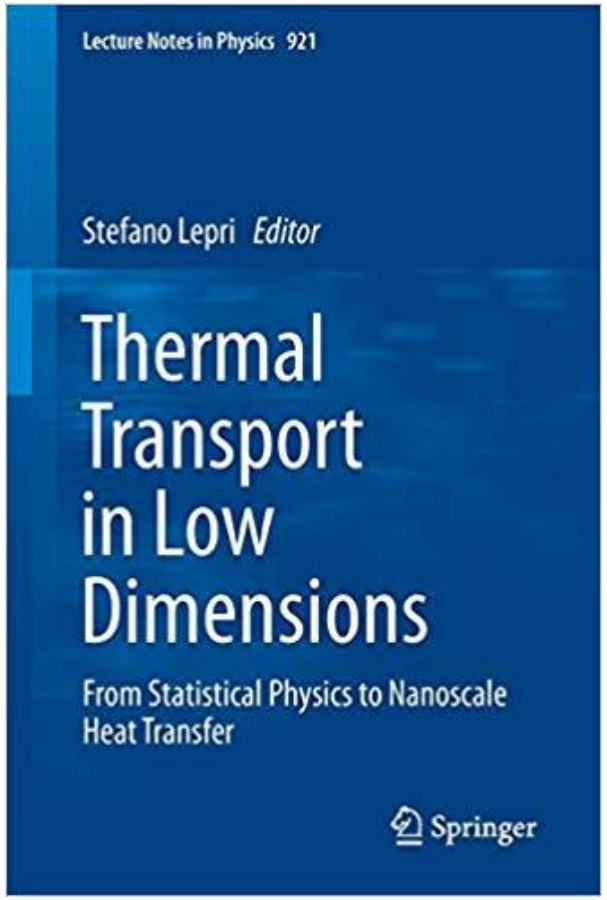
- NanoHeat Lab, Stanford
- NanoEngineering group, MIT
- The Keith Nelson group, MIT

Ученые:

- Gang Chen (H=100)
- Abhishek Dhar (H=30)
- Oleg Gendelman (H=39)
- Kenneth Goodson (H=64)
- William Hoover (H=49)
- Joel Lebowitz (H=87)
- Stefano Lepri (H=26)
- Roberto Livi (H=36)
- Alexander Mielke (H=42)
- Keith Nelson (H=69)
- Denis Nika (H=62)
- Antonio Politi (H=42)
- Herbert Spohn (H=54)
- …..



2005



2018

Стационарная задача теплопроводности

- Конечный кристалл
- Температура на двух противоположных границах поддерживается за счет термостатов
- Исследуется зависимость коэффициента теплопроводности от длины образца
- Постановка использовалась в работах Лебовица, Наказавы, Дхара, Савина, Гендельмана, Лепри, Ливи, Полити и др.

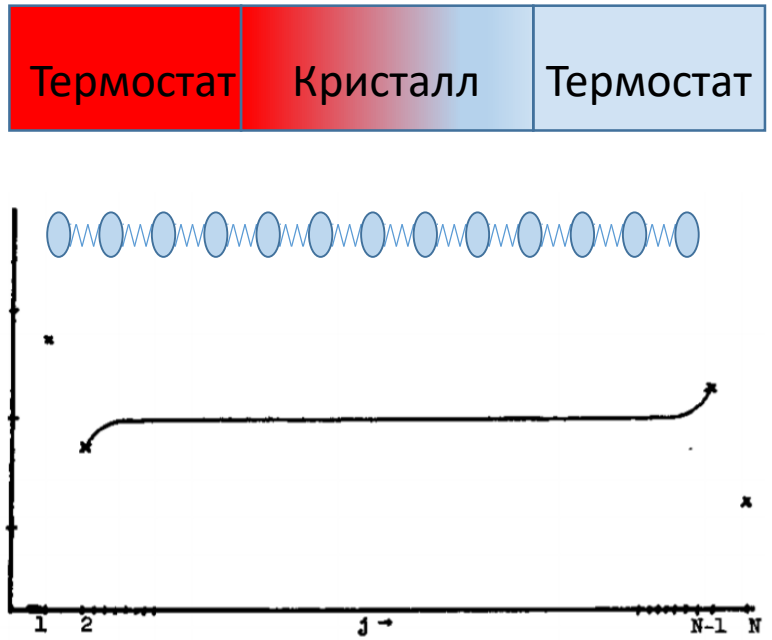


FIG. 1. Typical behavior of $T(j)$.

Rieder, Z., Lebowitz, J.L., Lieb, E. J. Math. Phys., 1967

Наша особенность – решение нестационарных задач

Работы А.М. Кривцова

ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2014, том 458, № 3, с. 279–281

МЕХАНИКА

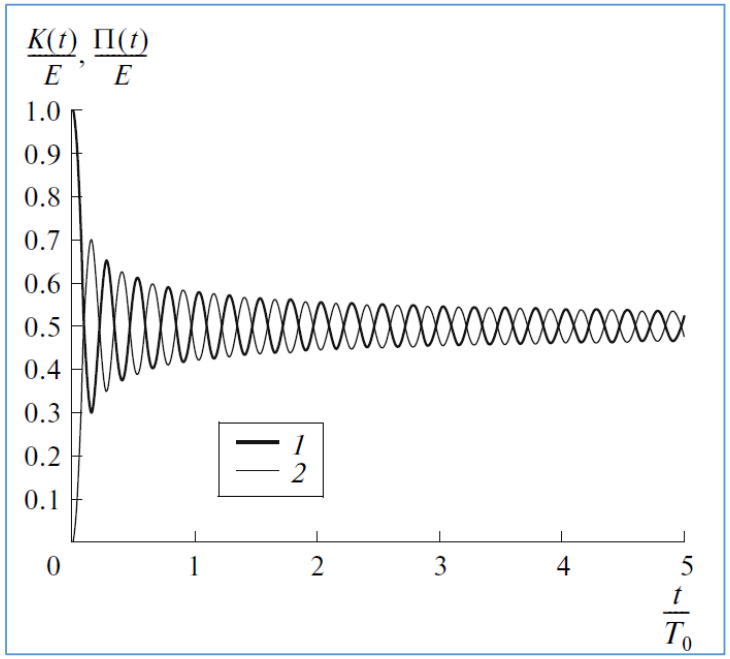
УДК 539.3, 539.4

КОЛЕБАНИЯ ЭНЕРГИЙ В ОДНОМЕРНОМ КРИСТАЛЛЕ

© 2014 г. А. М. Кривцов

Представлено академиком Н.Ф. Морозовым 03.03.2014 г.

Поступило 07.04.2014 г.



ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2015, том 464, № 2, с. 162–166

МЕХАНИКА

УДК 539.3: 539.4

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕПЛА В БЕСКОНЕЧНОМ ОДНОМЕРНОМ ГАРМОНИЧЕСКОМ КРИСТАЛЛЕ

© 2015 г. А. М. Кривцов

Представлено академиком РАН Н.Ф. Морозовым 24.11.2014 г.

Поступило 01.12.2014 г.

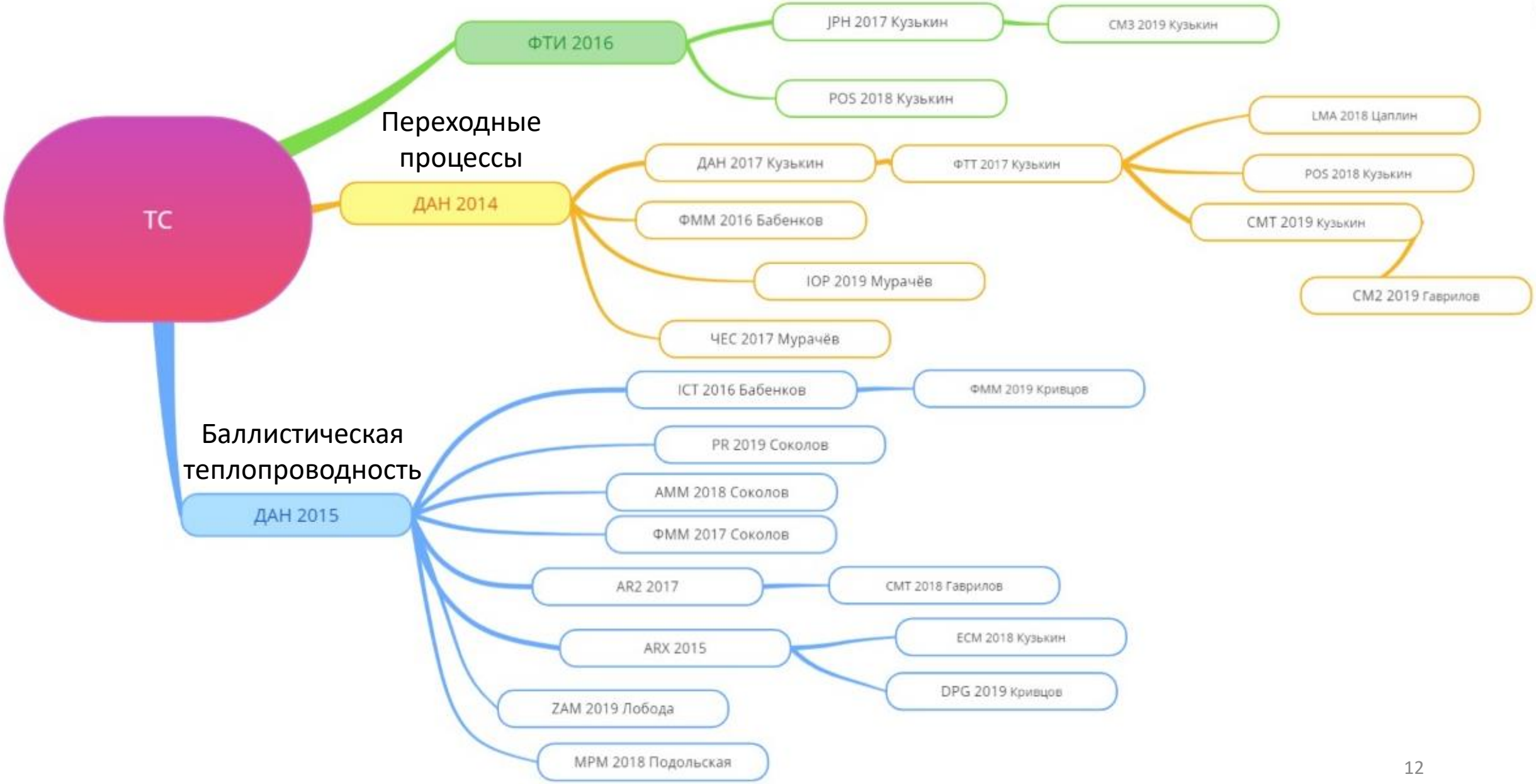
В работе получена замкнутая система дифференциально-разностных уравнений, описывающая тепловые процессы в одномерном гармоническом кристалле. Решение системы дает уравнение связи теплового потока и температуры, отличающееся от закона Фурье. Построено общее аналитическое решение полученного дифференциального уравнения, аналитические выводы подтверждены компьютерным моделированием.

$$\ddot{T} + \frac{1}{t}\dot{T} = c^2 T''$$

$$T\big|_{t=0} = T_0(x), \quad \dot{T}\big|_{t=0} = 0.$$

Задача: обобщение на случай многомерных сложных решеток

Работы научной группы А.М. Кривцова по тепловым процессам (2014-2019)



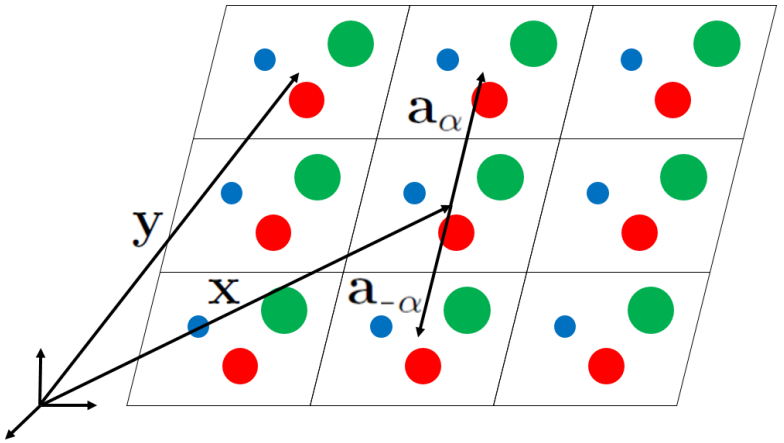
Постановка задачи

- Модель – бесконечный/полубесконечный, идеальный кристалл

- Взаимодействия между частицами:
  - линейные (в аналитике)
  - нелинейные (в численных экспериментах)

- Начальные условия случайные, соответствуют начальному полю температуры

- Основные исследуемые величины – кинетические температуры



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

Линейные эффекты

Начальные условия. “Независимость” потока и температуры

- **Поле температуры, нулевые потоки**
  - Скорости частиц – некоррелированные случайные величины с нулевым матожиданием
  - Перемещения частиц – нулевые

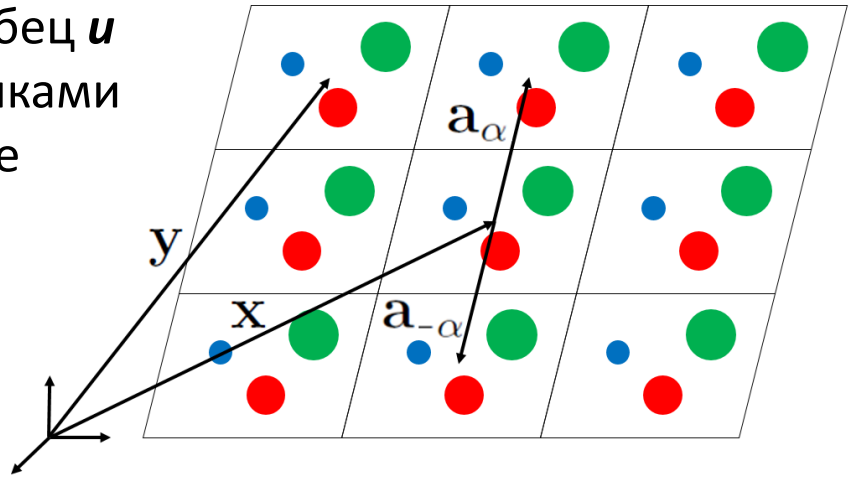
- **Поле температуры, НЕнулевые потоки**
  - Скорости и перемещения вычисляются как в суперпозиции волн со случайными фазами

$$u_n = b_{N/2}\cos(\pi n) + \sum_{q=1}^{N/2-1} b_{\mathrm{q}} \cos\left(\frac{2q\pi n}{N} \pm \omega_{\mathrm{q}} t + \delta_{\mathrm{q}}\right)$$

Korznikova E.A., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M., Xiong D., Gani V.A., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V., Equilibration of sinusoidal modulation of temperature in linear and nonlinear chains // Phys. Rev. E 102, 062148 (2020)

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**:



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

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

- Начальные условия:

$$\boldsymbol{u}(\mathrm{x}) = 0, \quad \boldsymbol{v}(\mathrm{x}) = \boldsymbol{v}_0(\mathrm{x})$$

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

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

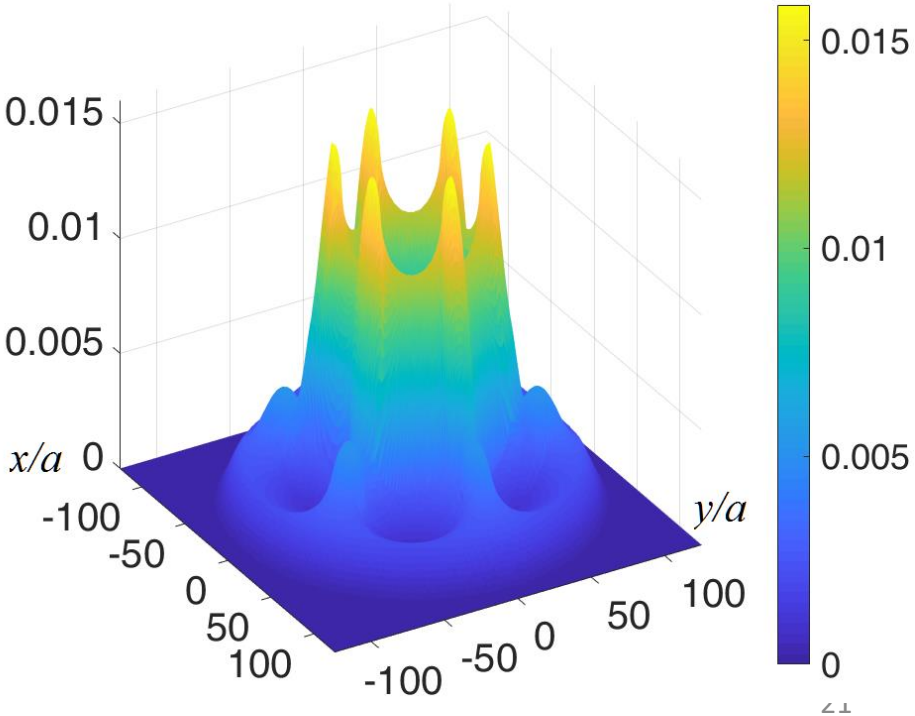
Особенности баллистического теплопереноса в бесконечных кристаллах

Гармоническая теория предсказывает:

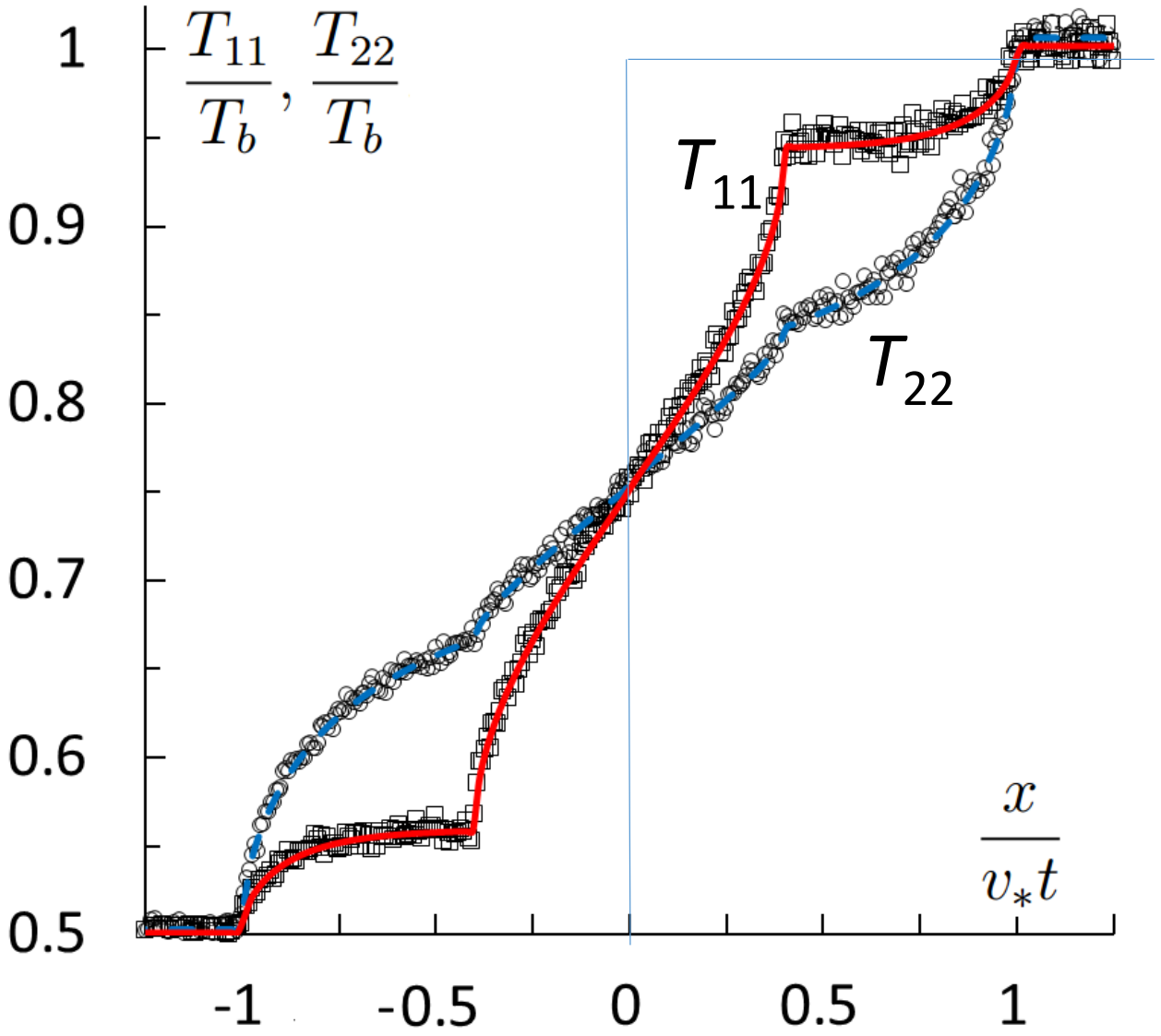
- ✓ Конечная скорость фронта
- ✓ Несколько температур
- ✓ Анизотропия в “изотропных материалах”
- ✓ Перенос тепла “от холодного к горячему”
- ✓ Колебательное затухание температуры

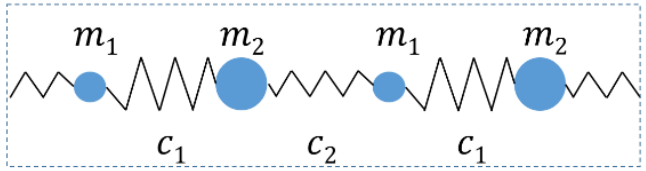
Chapter 24
Discrete Thermomechanics: From Thermal Echo to Ballistic Resonance (A Review)

Ekaterina A. Podolskaya, Anton M. Krivtsov, and Vitaly A. Kuzkin



Несколько температур





Температуры подрешеток НЕ равны

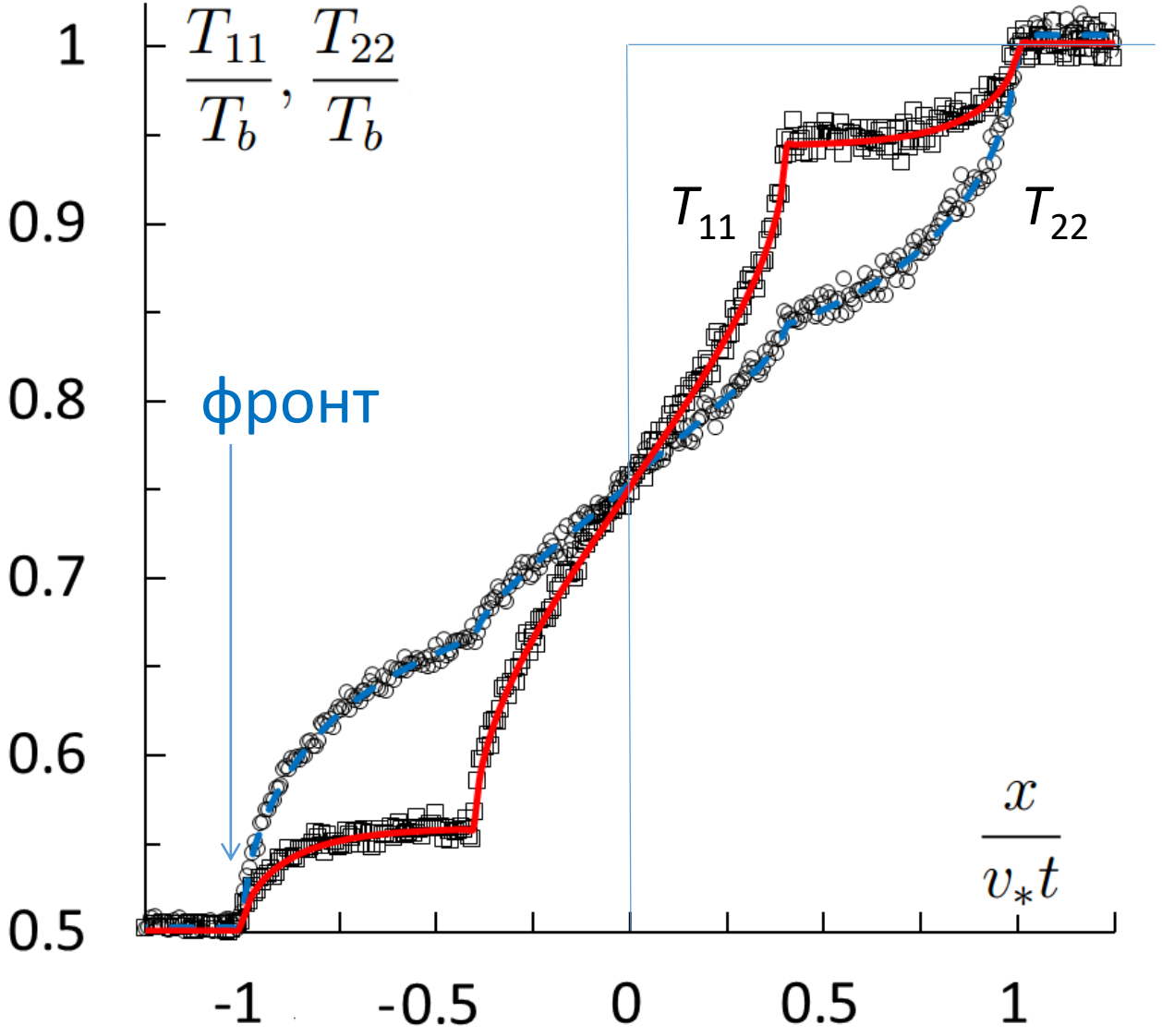
Точки – результаты моделирования
Линии - аналитика

Параметры:

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

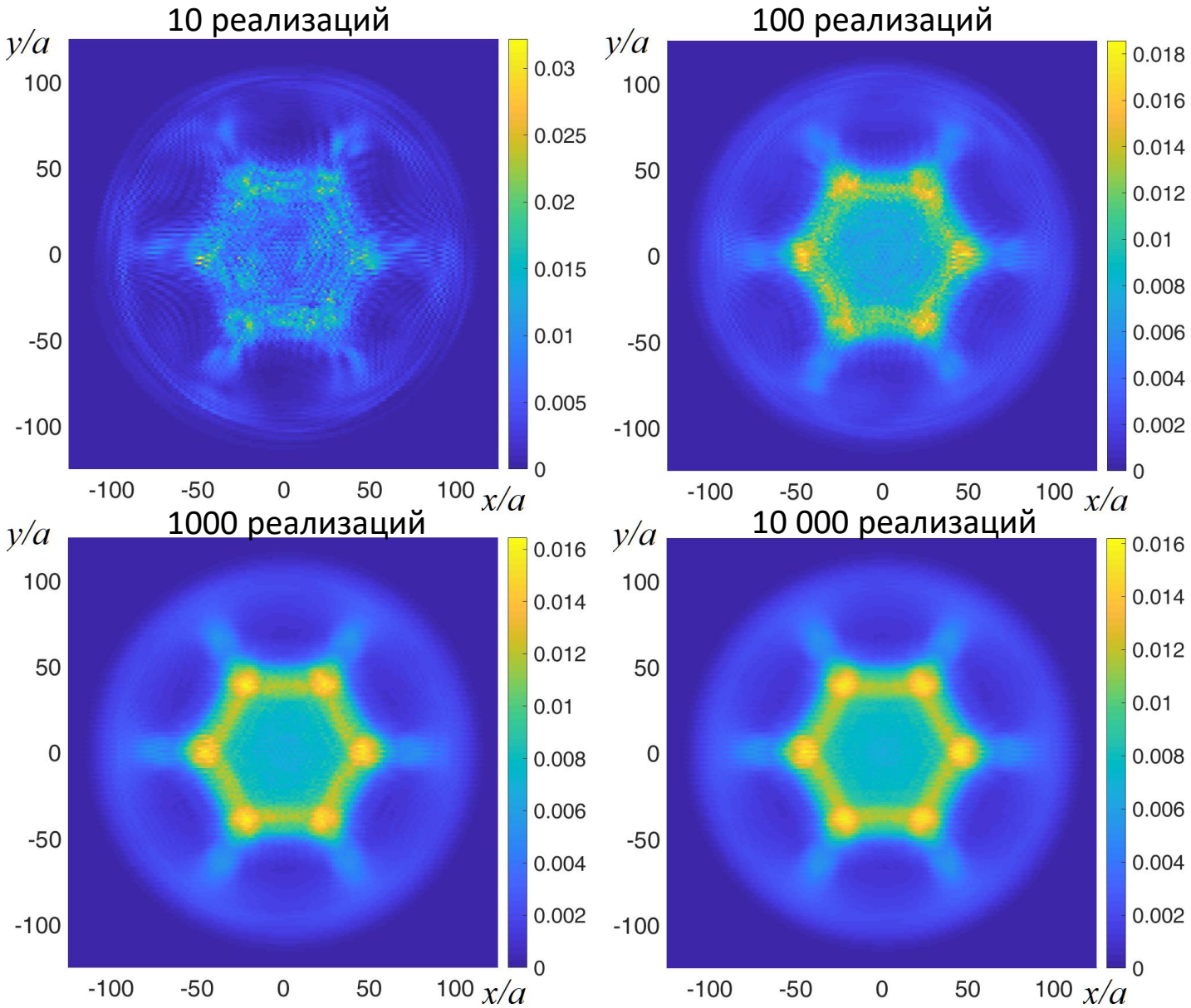
число реализаций - 10^4

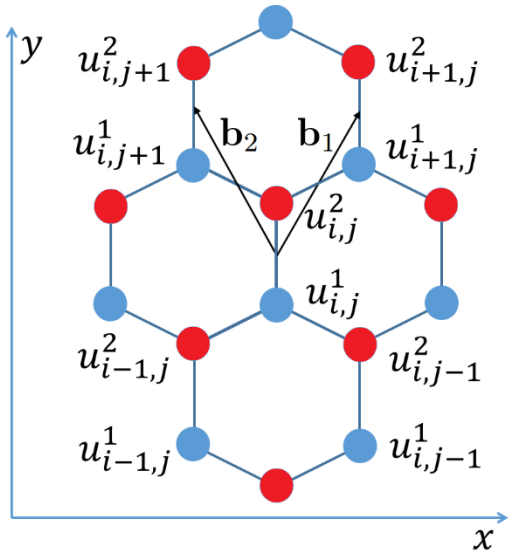
Конечная скорость фронта



Фронт распространяется с максимальной групповой скоростью

Анизотропия распространения тепла

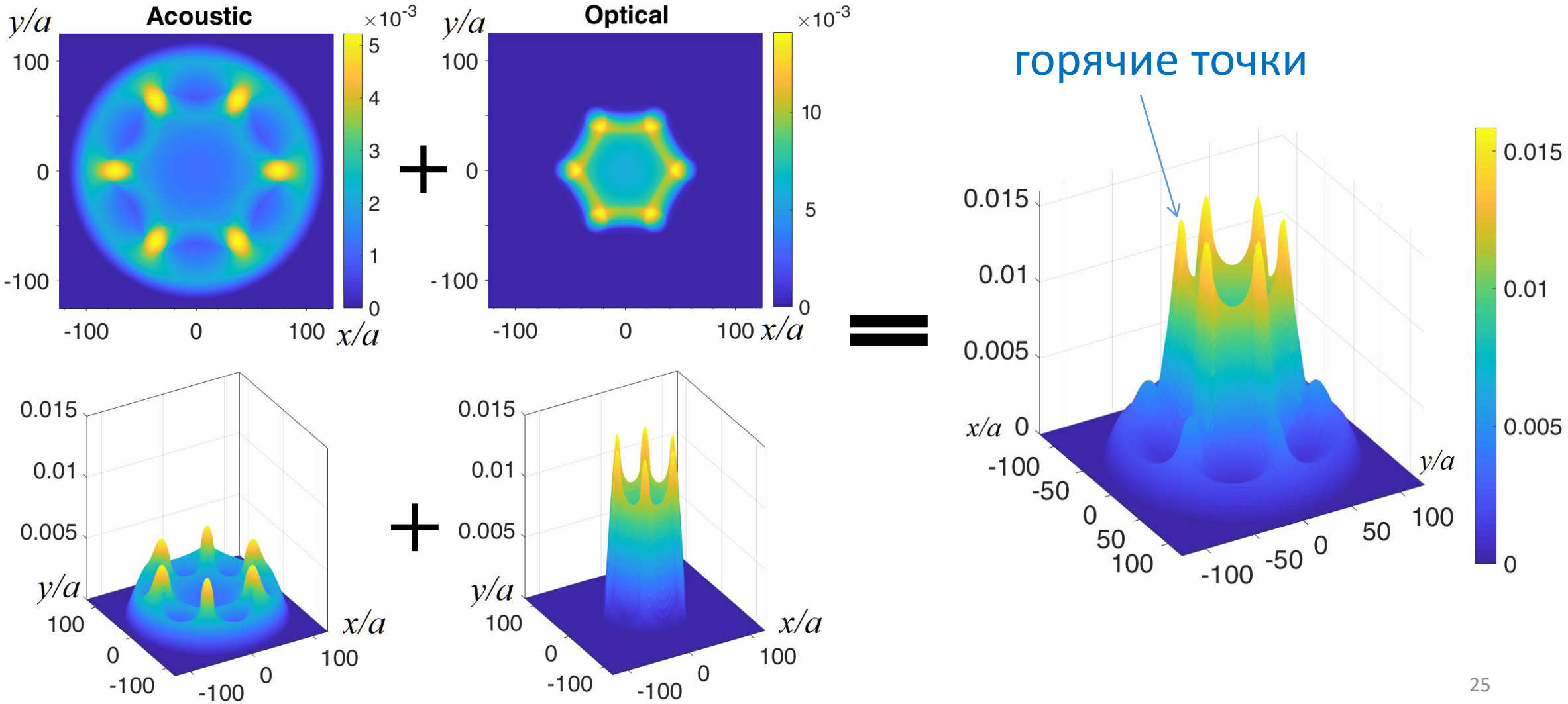




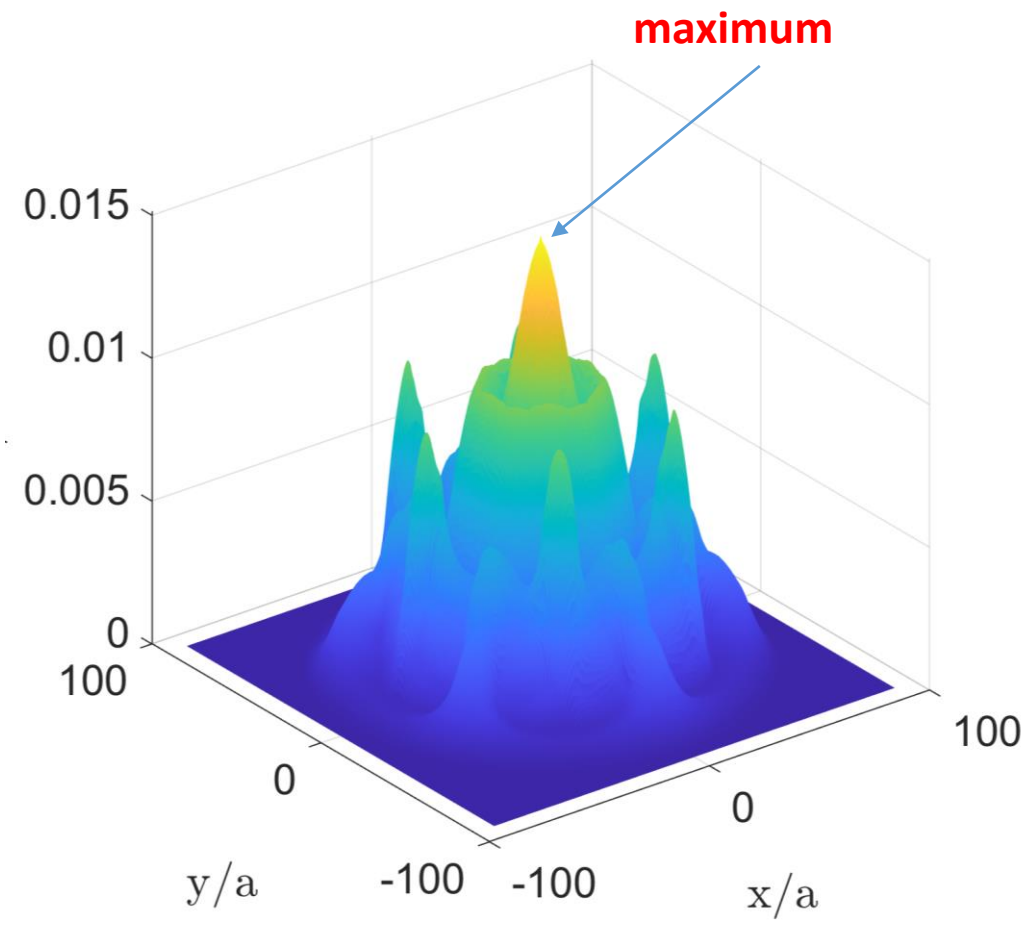
Начальное распределение температуры:

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

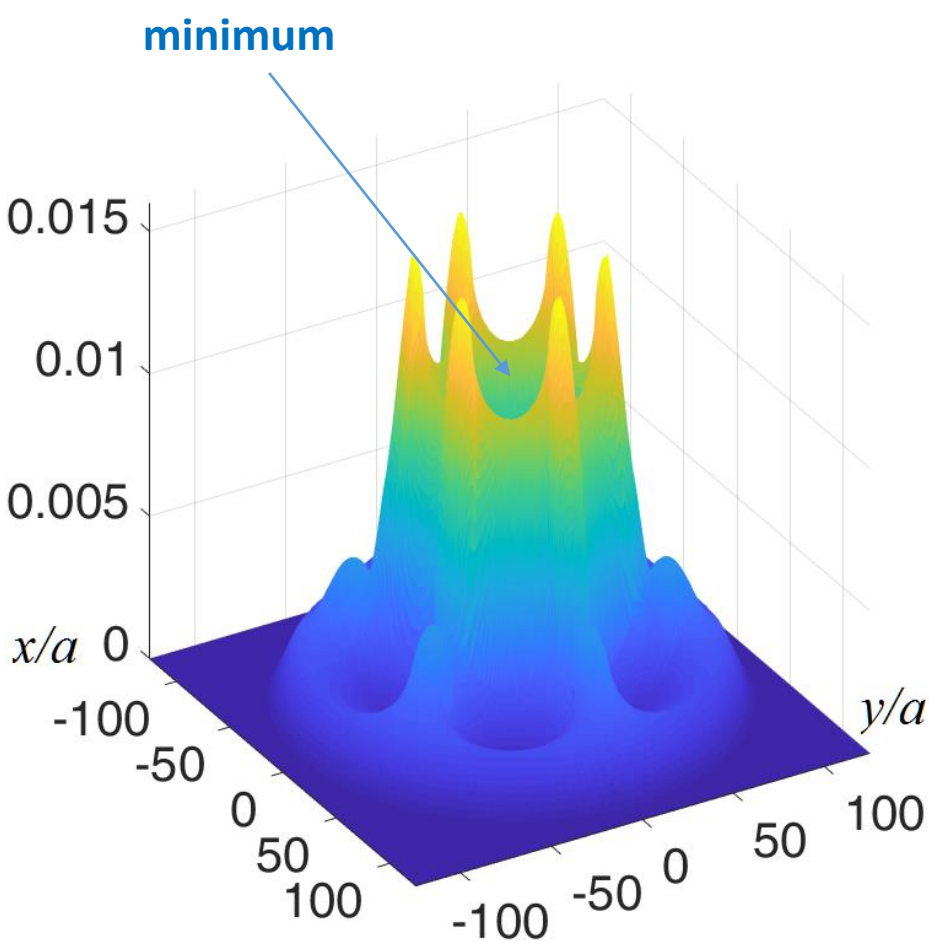
Перенос тепла “от холодного к горячему”



Вклады продольных и поперечных колебаний



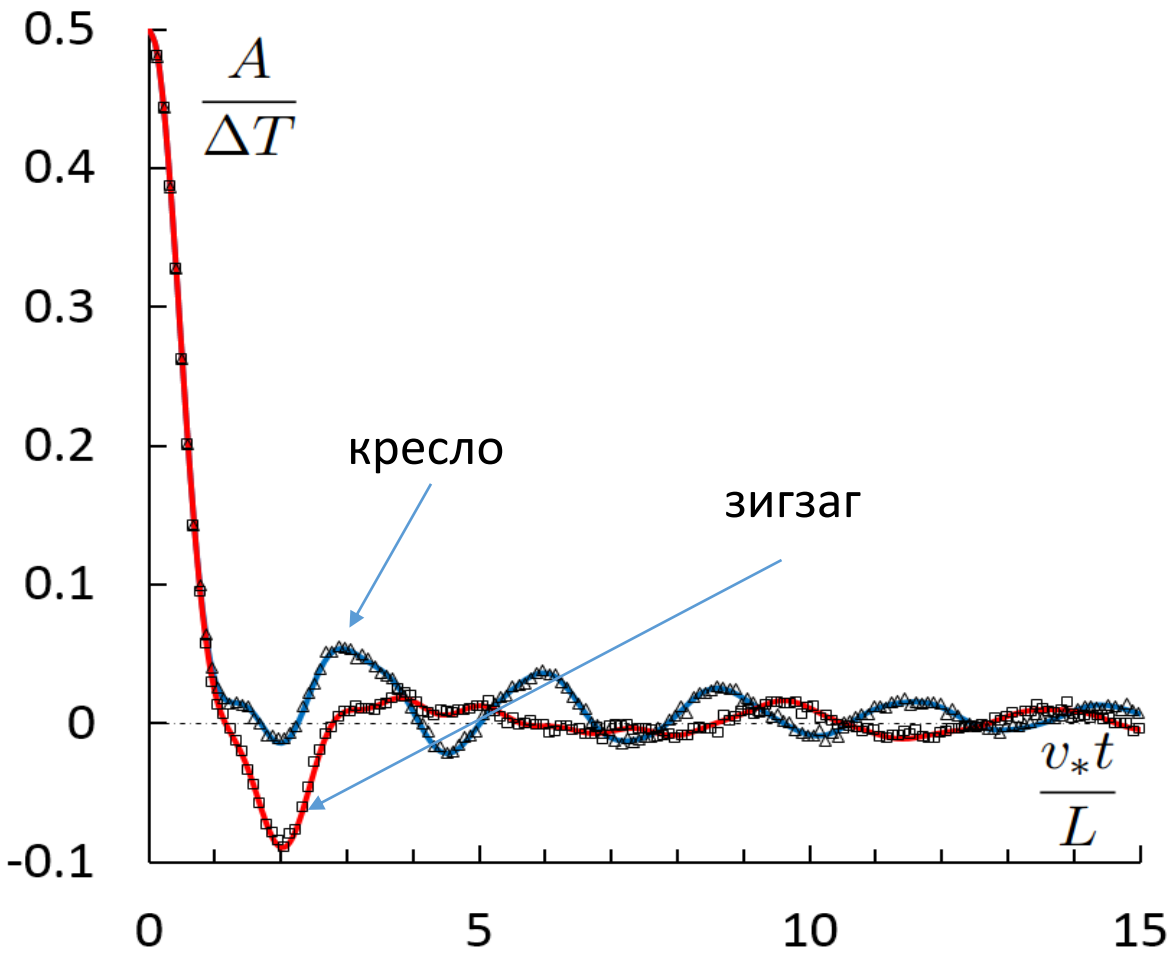
in-plane



out-of-plane

Panchenko A.Yu., Kuzkin V.A., Berinskii I.E. Unsteady ballistic heat transport in two-dimensional harmonic graphene lattice // J. Phys.: Cond. Matter, 34, 165402 (2022)

Немонотонное затухание синусоидального температурного поля в графене (поперечные колебания)



Начальное распределение:

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

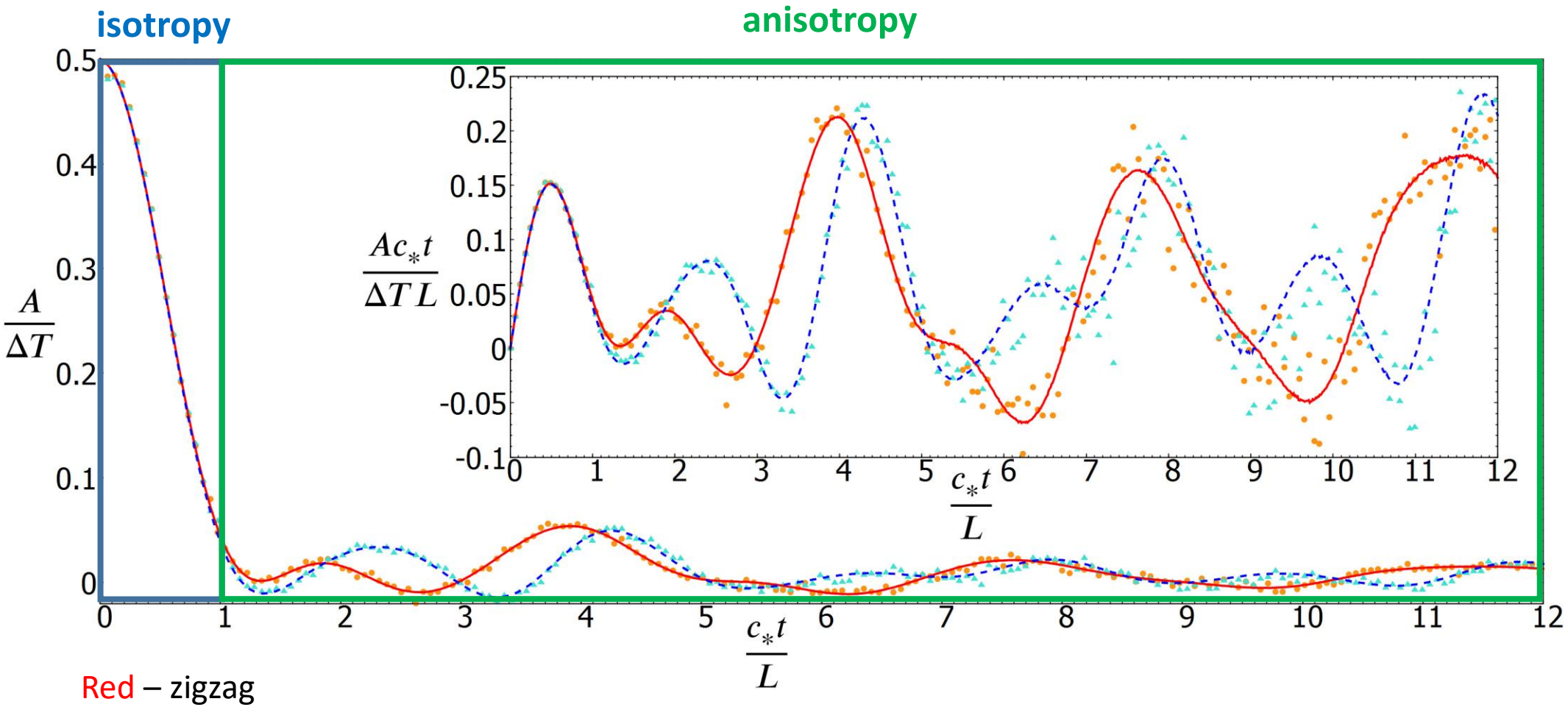
Исследуемая величина:

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

Эффекты:

1) Немонотонное затухание
2) Асимптотика 1/t, а НЕ e^{-t}
3) Анизотропия

Немонотонное затухание синусоидального температурного поля в графене (колебания в плоскости)



Red – zigzag
Blue – armchair

Panchenko A.Yu., Kuzkin V.A., Berinskii I.E. Unsteady ballistic heat transport in two-dimensional harmonic graphene lattice // J. Phys.: Cond. Matter, 34, 165402 (2022)

Нелинейные эффекты

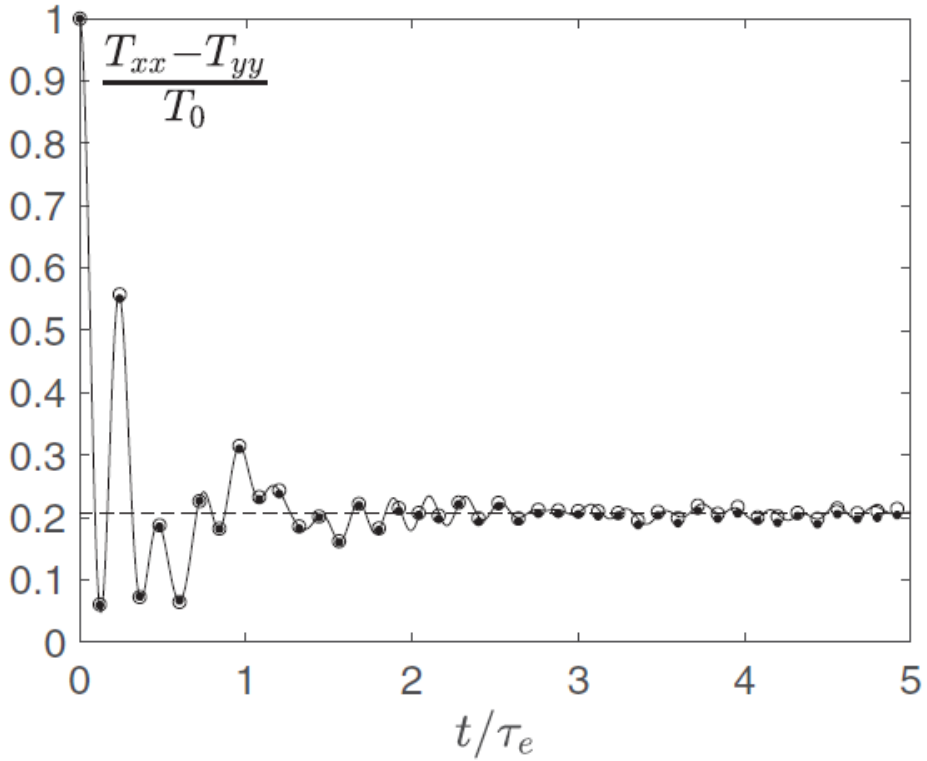
Особенности баллистического теплопереноса в бесконечных кристаллах

Гармоническая теория предсказывает:

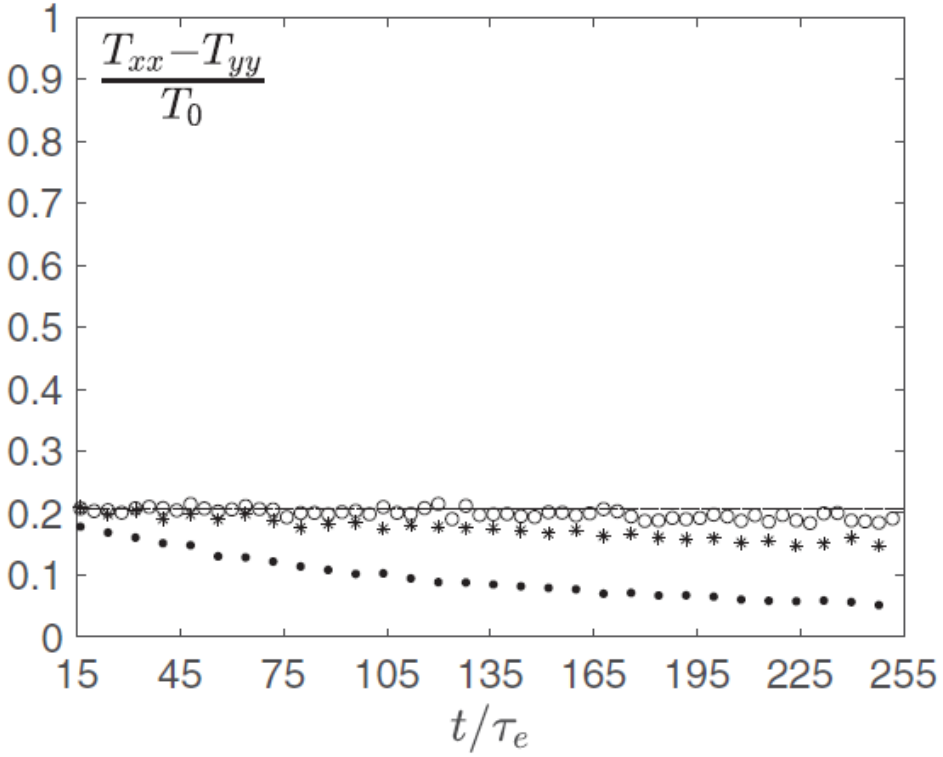
- ✓ Конечная скорость фронта
- ✓ Несколько температур
- ✓ Колебательное затухание температуры
- ✓ Перенос тепла “от холодного к горячему”

Несколько температур в ГЦК решетке Леннарда-Джонса

Малые времена



Большие времена



На “малых” временах работает линейная теория

Kuzkin V.A., Liazhkov S.D. Equilibration of kinetic temperatures in face-centered cubic lattices // Phys. Rev. E 102, 042219 (2020)

Несколько температур в ГЦК решетке Леннарда-Джонса

Масштабирование времени:

$$T_{xx} - T_{yy} = T_0 \Psi(t/\tau_a)$$

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

Выравнивание температур при разной степени нелинейности происходит подобным образом.

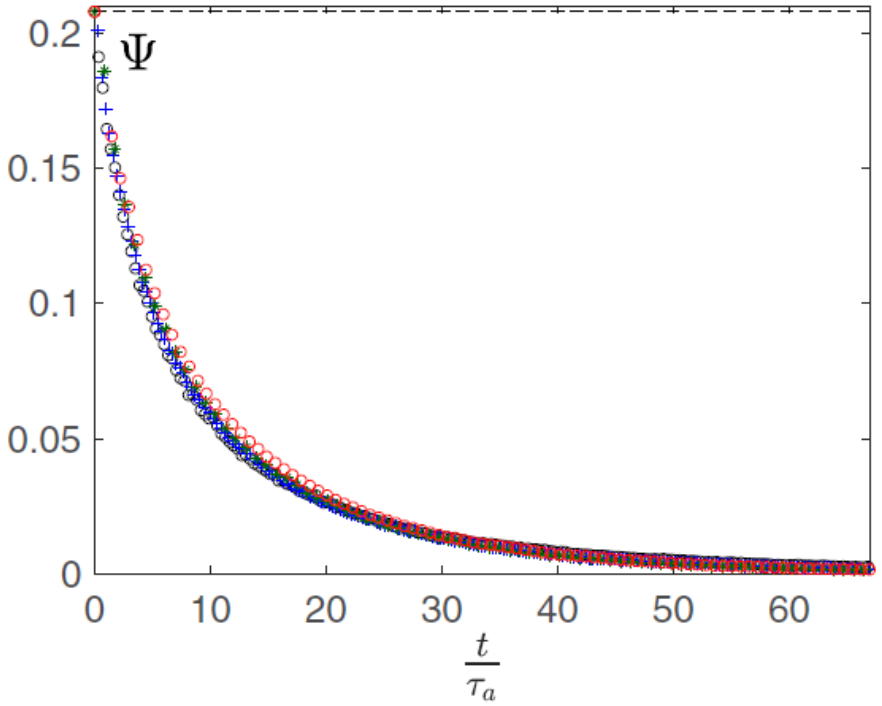


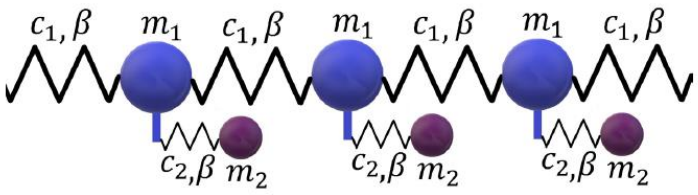
FIG. 8. Equilibration of kinetic temperatures in the Lennard-Jones crystal at different temperatures T_0 [$v_0/v_d = 0.25$ (black circles), $v_0/v_d = 0.5$ (blue crosses), $v_0/v_d = 0.75$ (dark green asterisks), and $v_0/v_d = 1$ (red circles)]. The dashed line shows the equilibrium value, as predicted by the harmonic approximation (15).

Kuzkin V.A., Liazhkov S.D. Equilibration of kinetic temperatures in face-centered cubic lattices // Phys. Rev. E 102, 042219 (2020)

Теплопроводность в цепочке mass-in-mass

Уравнения динамики

$$
\begin{aligned}
m_1\ddot{u}_{1,j} = {} & c_1(u_{1,j+1} - 2u_{1,j} + u_{1,j-1}) + c_2(u_{2,j} - u_{1,j}) \\
& + \beta(u_{2,j} - u_{1,j})^3 + \beta[(u_{1,j+1} - u_{1,j})^3 \\
& + (u_{1,j-1} - u_{1,j})^3], \\
m_2\ddot{u}_{2,j} = {} & c_2(u_{1,j} - u_{2,j}) + \beta(u_{1,j} - u_{2,j})^3,
\end{aligned}
$$



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

Начальные условия

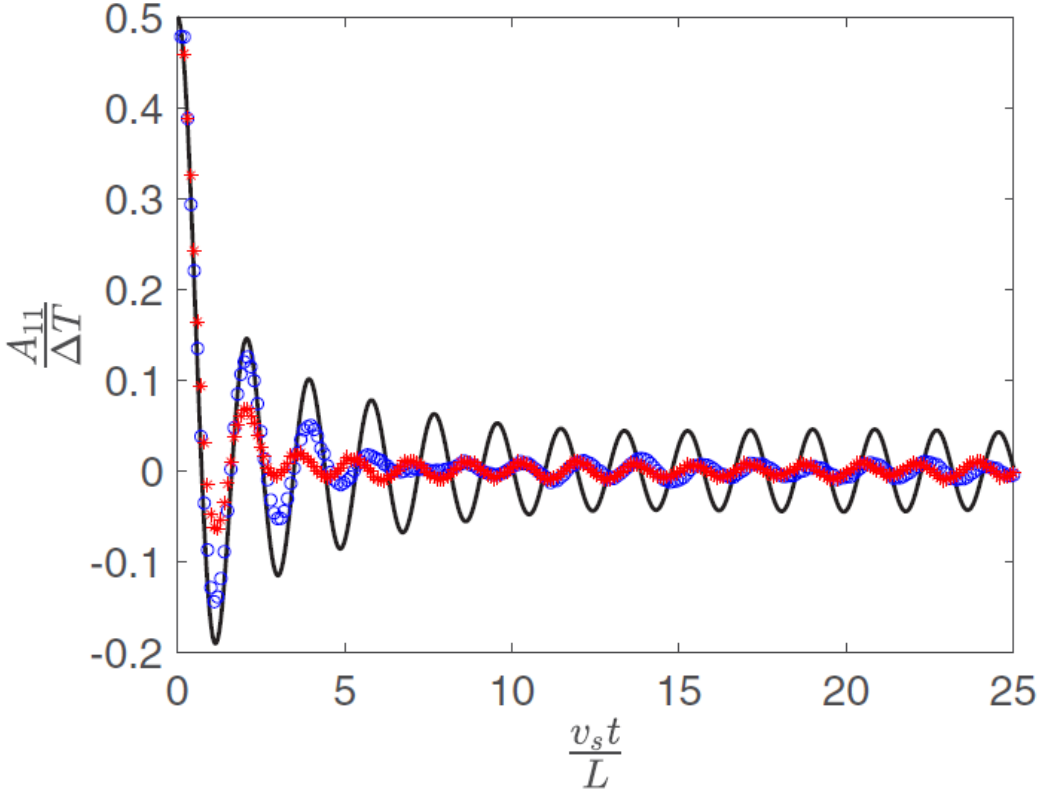
$$
\begin{aligned}
& u_{1,j} = u_{2,j} = 0, \\
& \dot{u}_{1,j} = \rho_{1,j}\sqrt{k_B T_j^0/m_1}, \quad \dot{u}_{2,j} = \rho_{2,j}\sqrt{k_B T_j^0/m_2}.
\end{aligned}
$$

Начальные температуры подрешеток равны

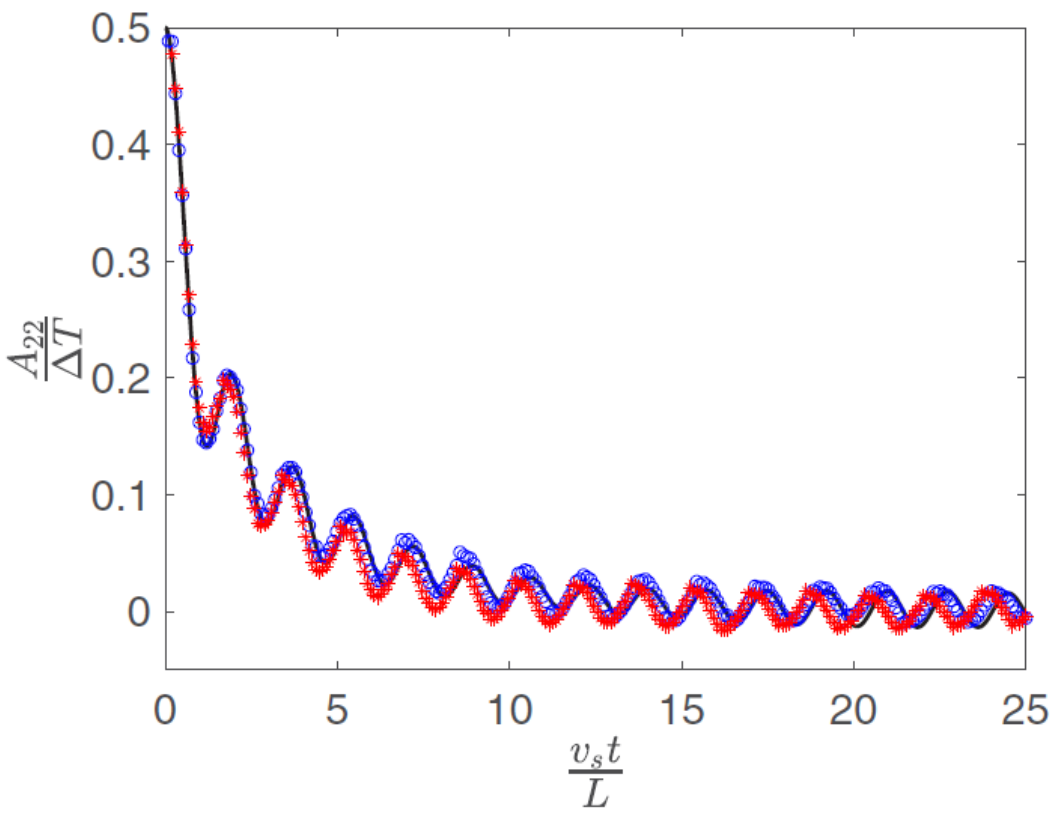
Liazhkov S.D., Kuzkin V.A., Unsteady two-temperature heat transport in mass-in-mass chains // Phys. Rev. E, 105, 054145 (2022)

Колебания температур в цепочке mass-in-mass

Температура цепочки



Температура прикрепленных масс



(b)

FIG. 7. The amplitudes A_{11} (a) and A_{22} (b) of sinusoidal temperature profiles in the weakly anharmonic case for $\gamma = 2$. The analytical solution [Eq. (26), solid line] and numerical simulation results for $\tilde{\beta} = 0.05$ (blue circles), $\tilde{\beta} = 0.1$ (red asterisks) are shown.

Температуры подрешеток в нелинейном случае совершают колебания

Несколько температур в цепочке mass-in-mass

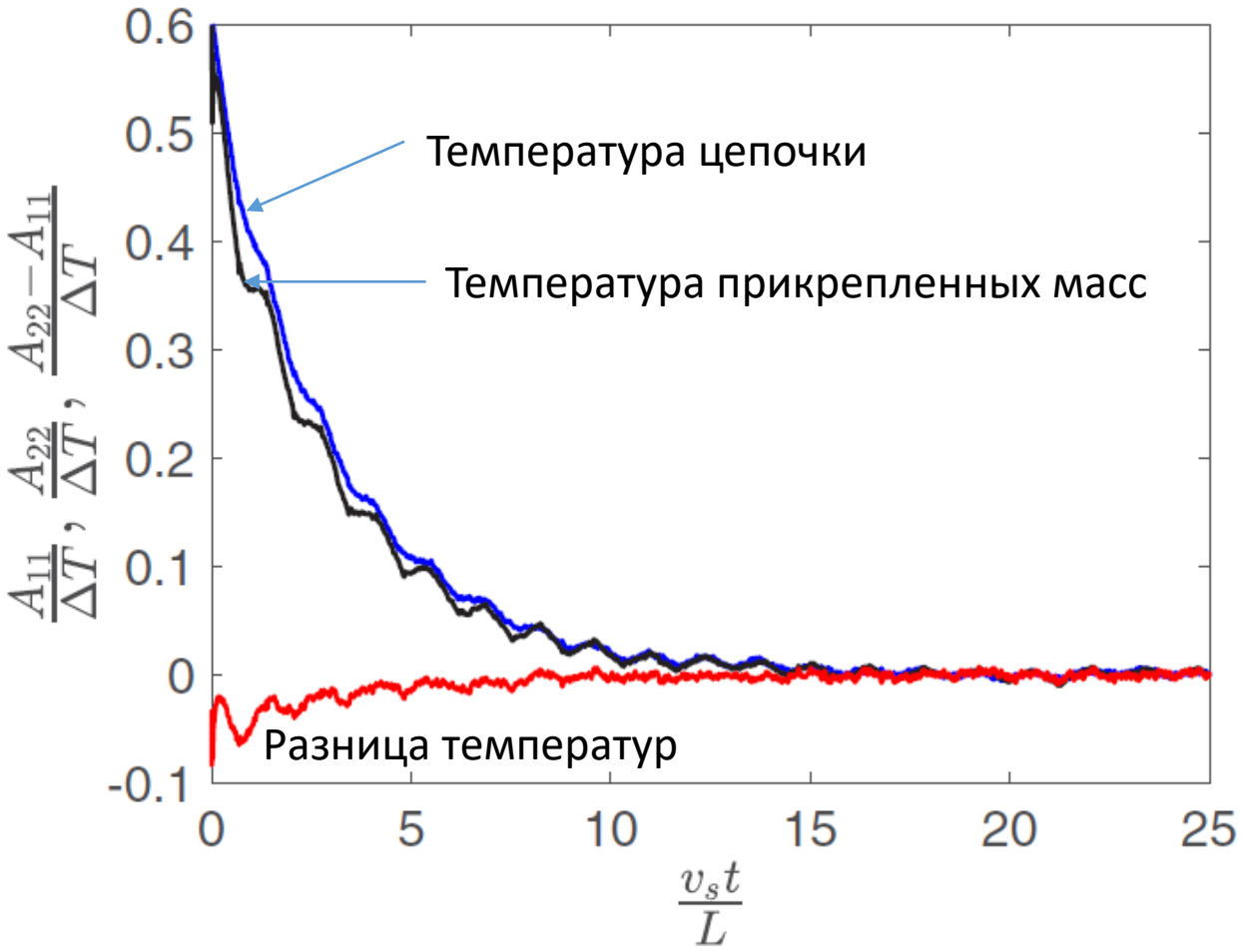


FIG. 8. The amplitudes A_{11} (blue line) and A_{22} (black line) of sinusoidal temperature profiles and their difference (red line) in case of strong anharmonicity ($\tilde{\beta} = 2$) for $\gamma = 2$.

Температуры подрешеток в процессе теплопроводности отличаются, хотя изначально они равны!

Несколько температур в цепочке mass-in-mass

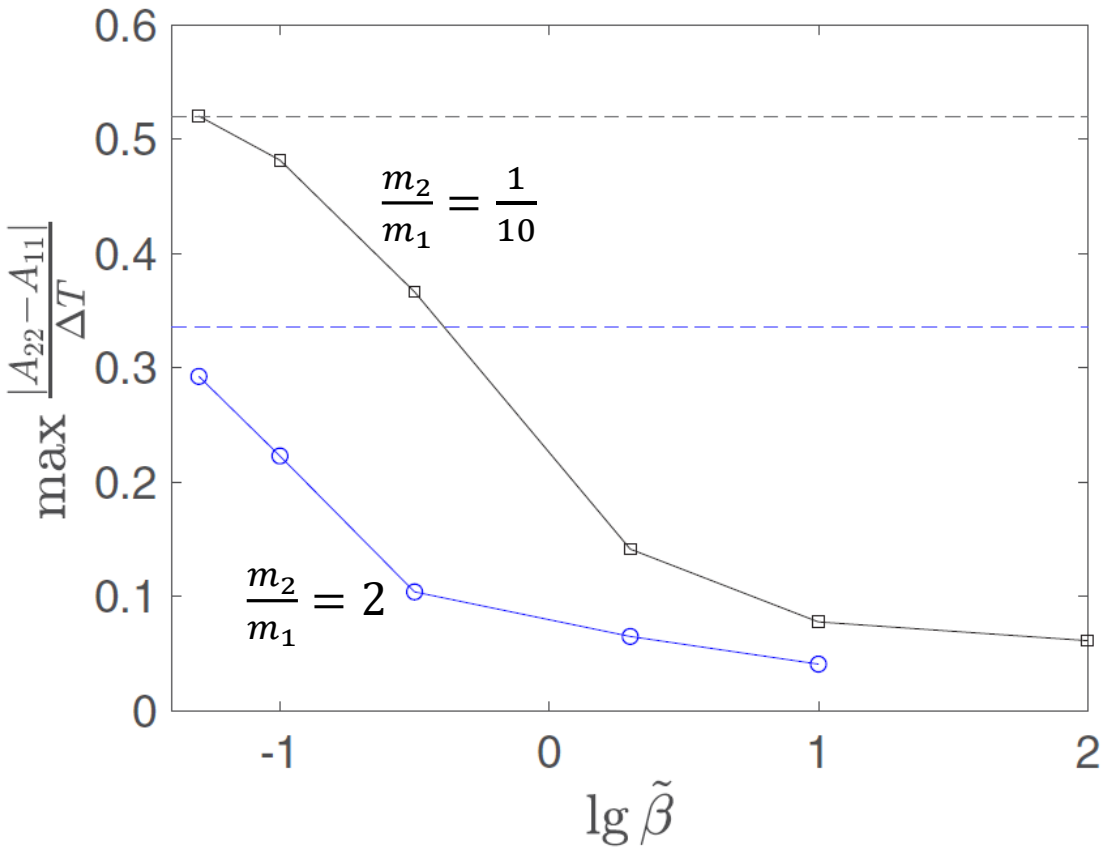


FIG. 11. Dependence of the maximum difference of temperatures on the nonlinearity coefficient for $\gamma = 2$ (blue circles) and $\gamma = 0.1$ (black squares). Dashed horizontal lines correspond to maximum difference in the harmonic case $\tilde{\beta} = 0$.

Разница температур тем больше, чем сильнее отличаются массы

Нелинейные эффекты.
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

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

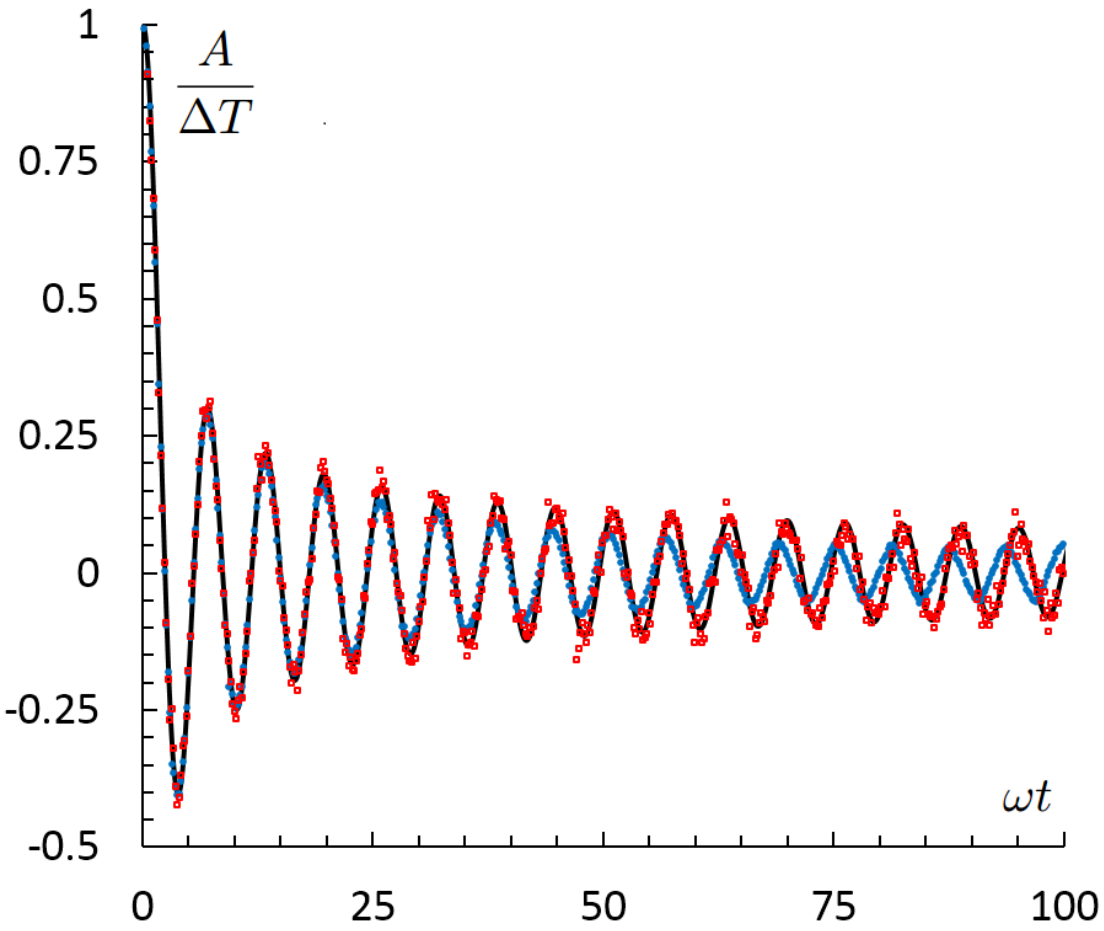
Выводятся из уравнений динамики решетки

- Начальные условия

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

- Периодические граничные условия

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

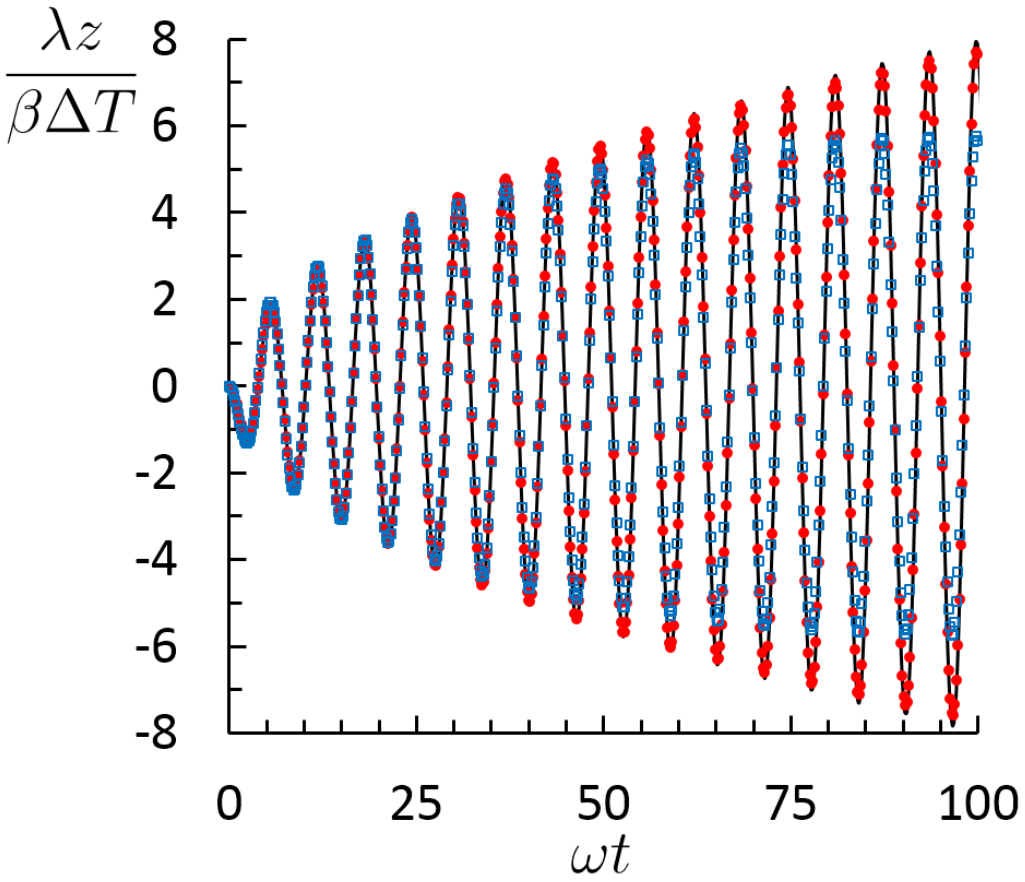
Решение:

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

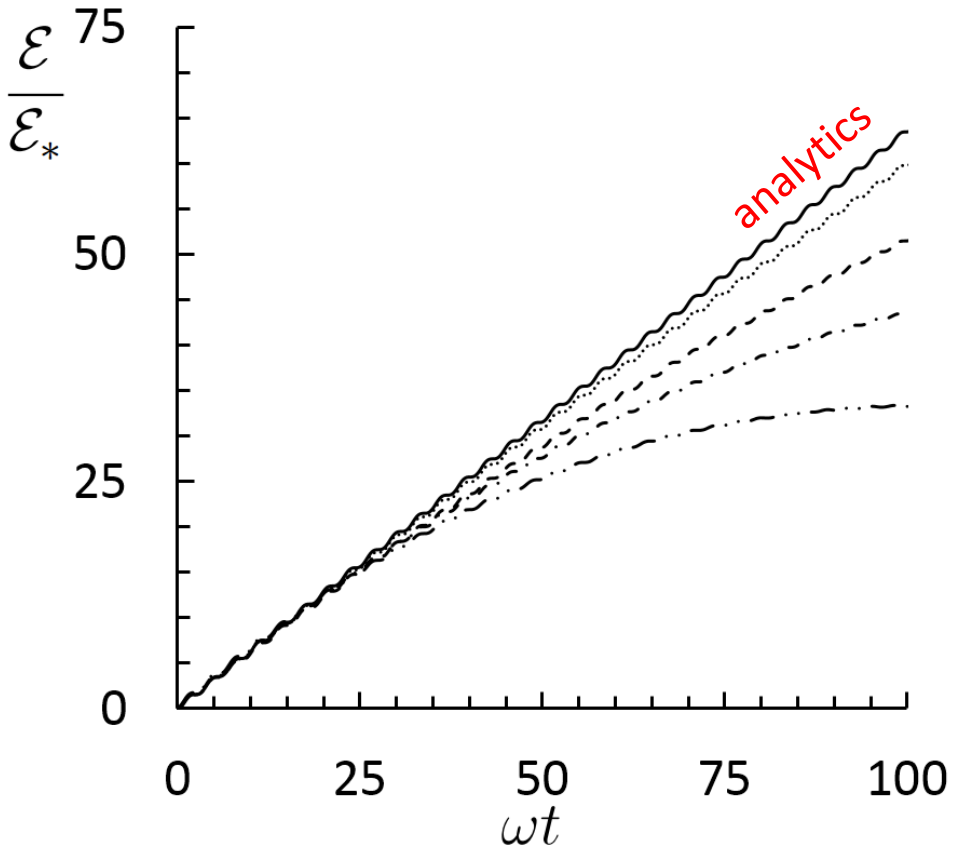
Рост амплитуды без внешнего воздействия!

Баллистический резонанс: численные результаты

Амплитуда механических колебаний



Механическая энергия



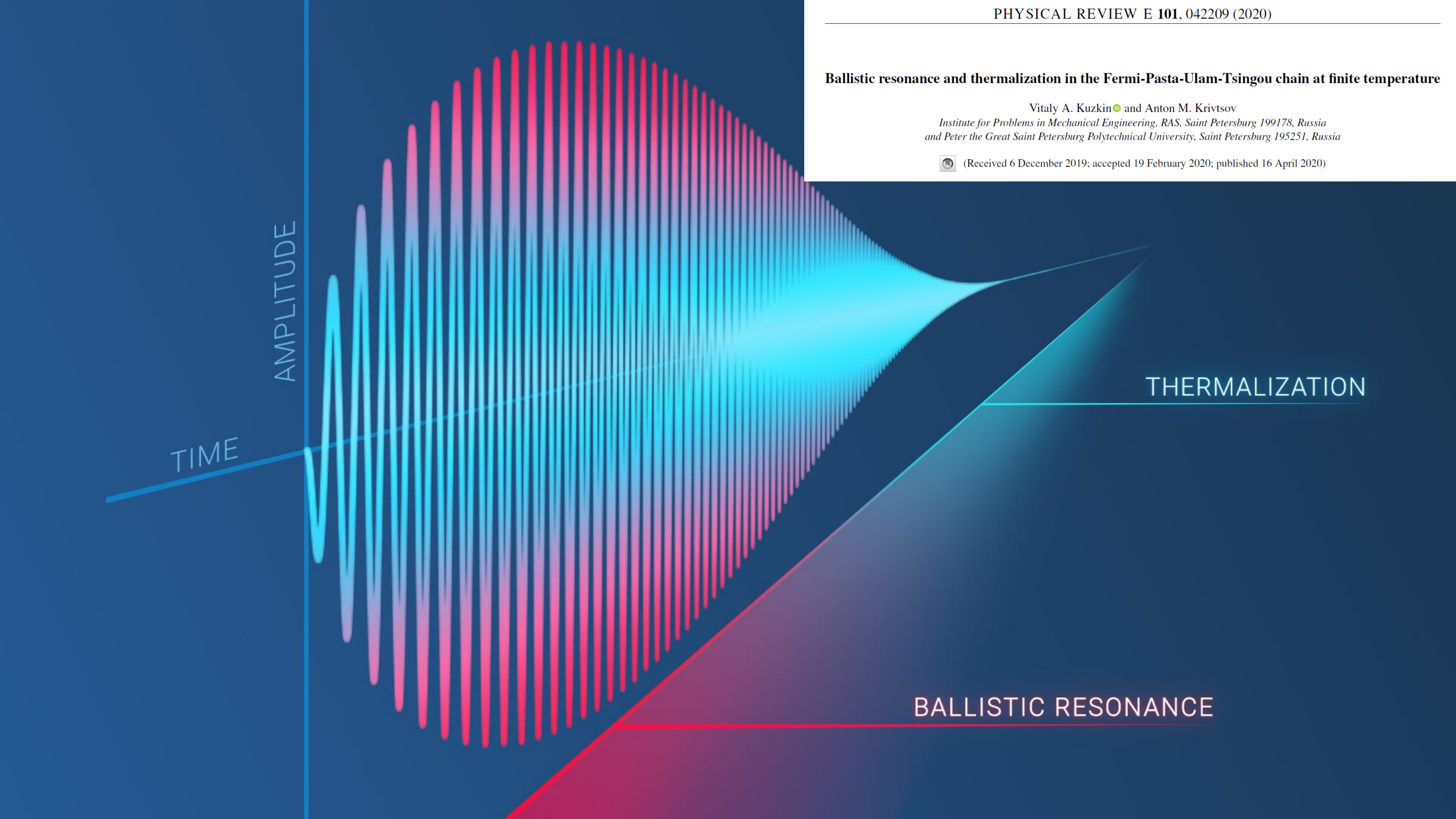
Рост амплитуды без внешнего воздействия!

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)



Интерфейсные эффекты. Отражение тепловых волн

Перенос тепла в свободном кристалле

- Уравнения динамики

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

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

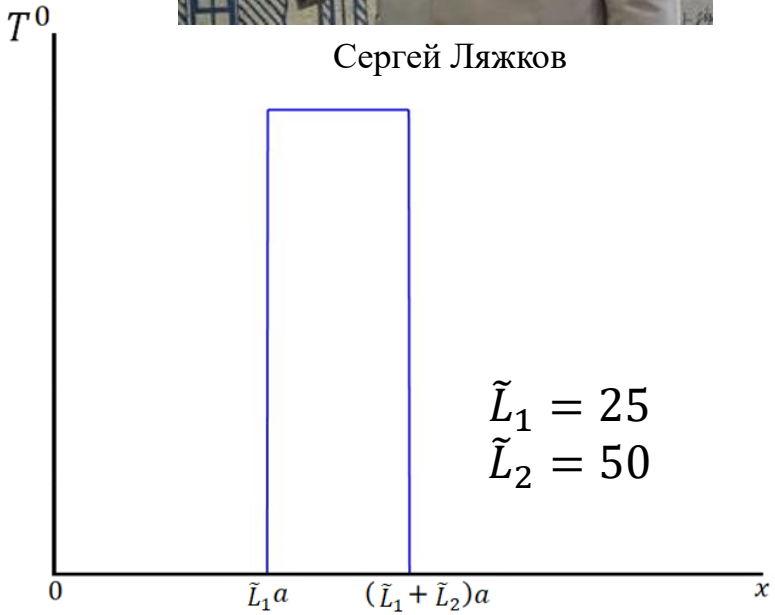
свободные концы

- Начальные условия

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

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

Сергей Ляжков



Liazhkov S.D. Unsteady heat transport in an instantly heated semi-infinite free end Hooke chain // CMAT 35(2) 413-430 (2023)

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):

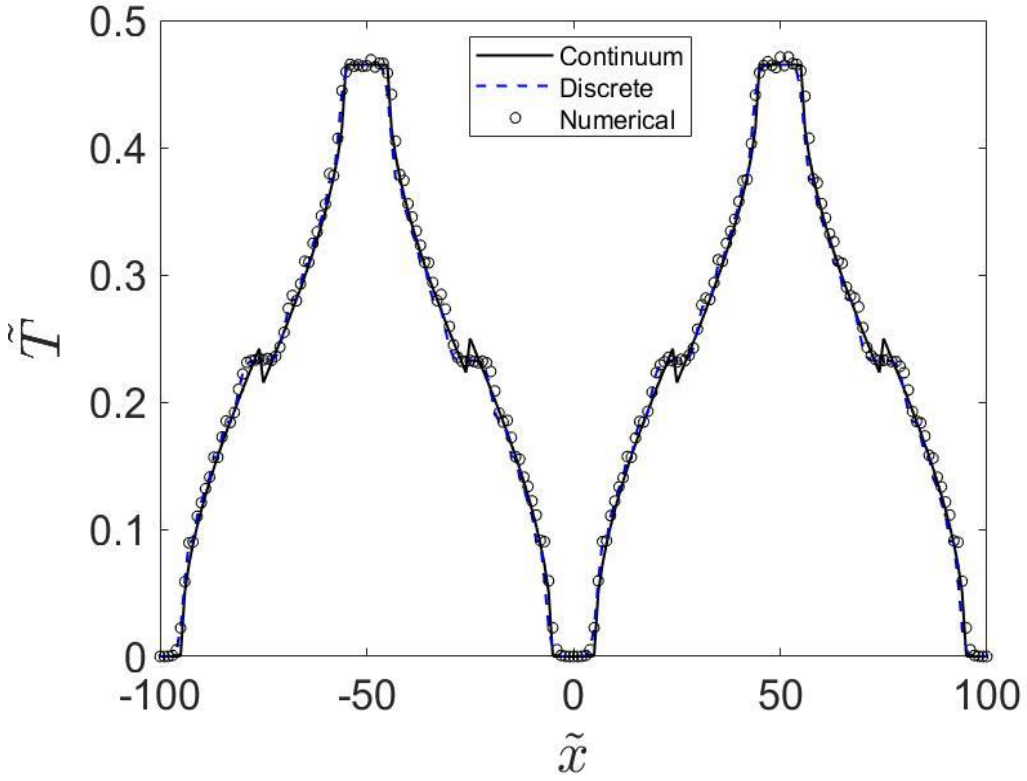
$$T^S(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi} T^0(|x + v_s t\cos\theta|)\mathrm{d}\theta$$

где v_s – скорость звука.

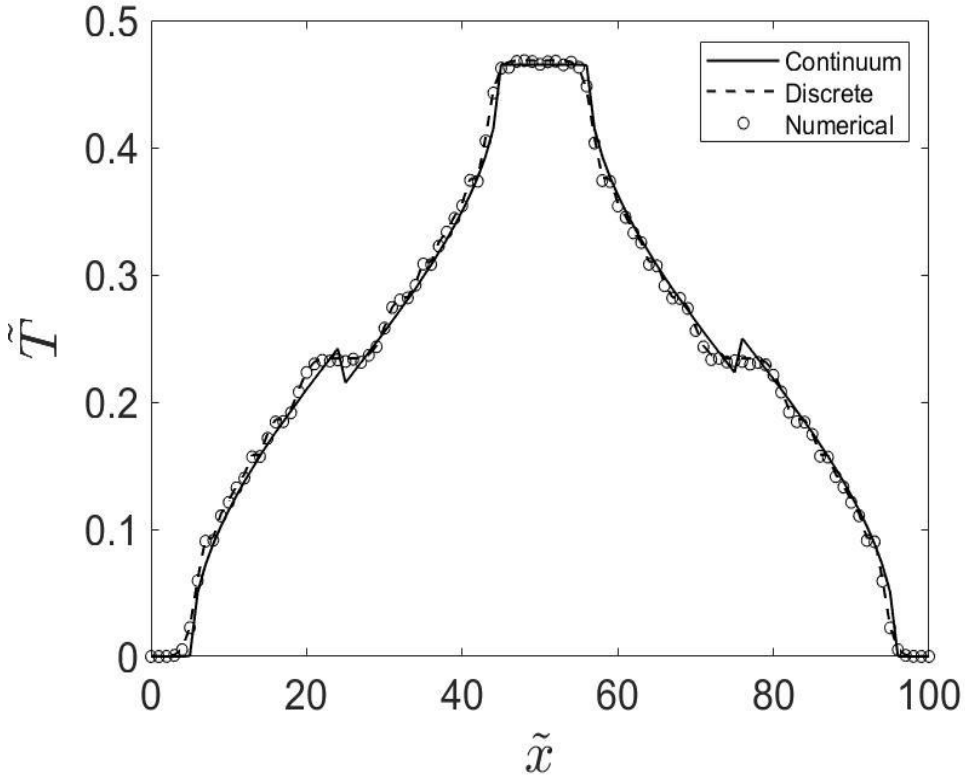
Liazhkov S.D. Unsteady heat transport in an instantly heated semi-infinite free end Hooke chain // CMAT 35(2) 413-430 (2023)

Прямоугольное тепловое возмущение, не касающееся границы

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



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

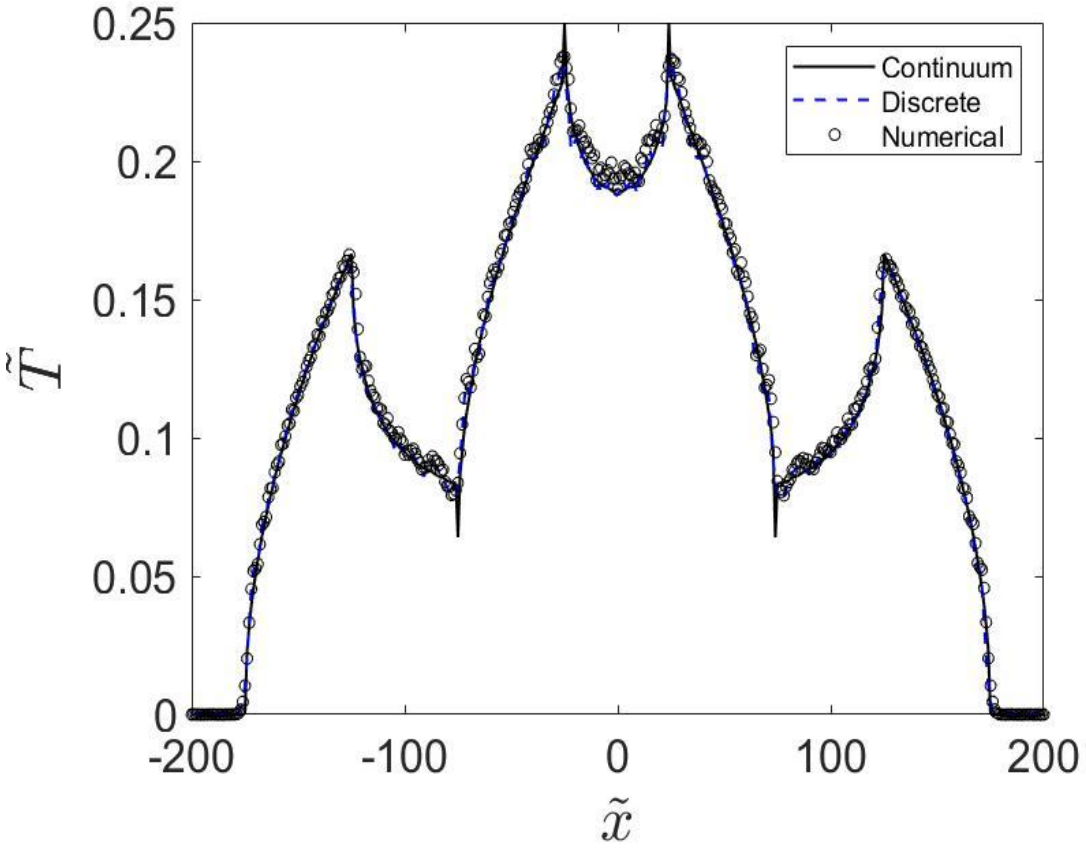


Полубесконечная цепочка $(\tilde{t} = 20)$

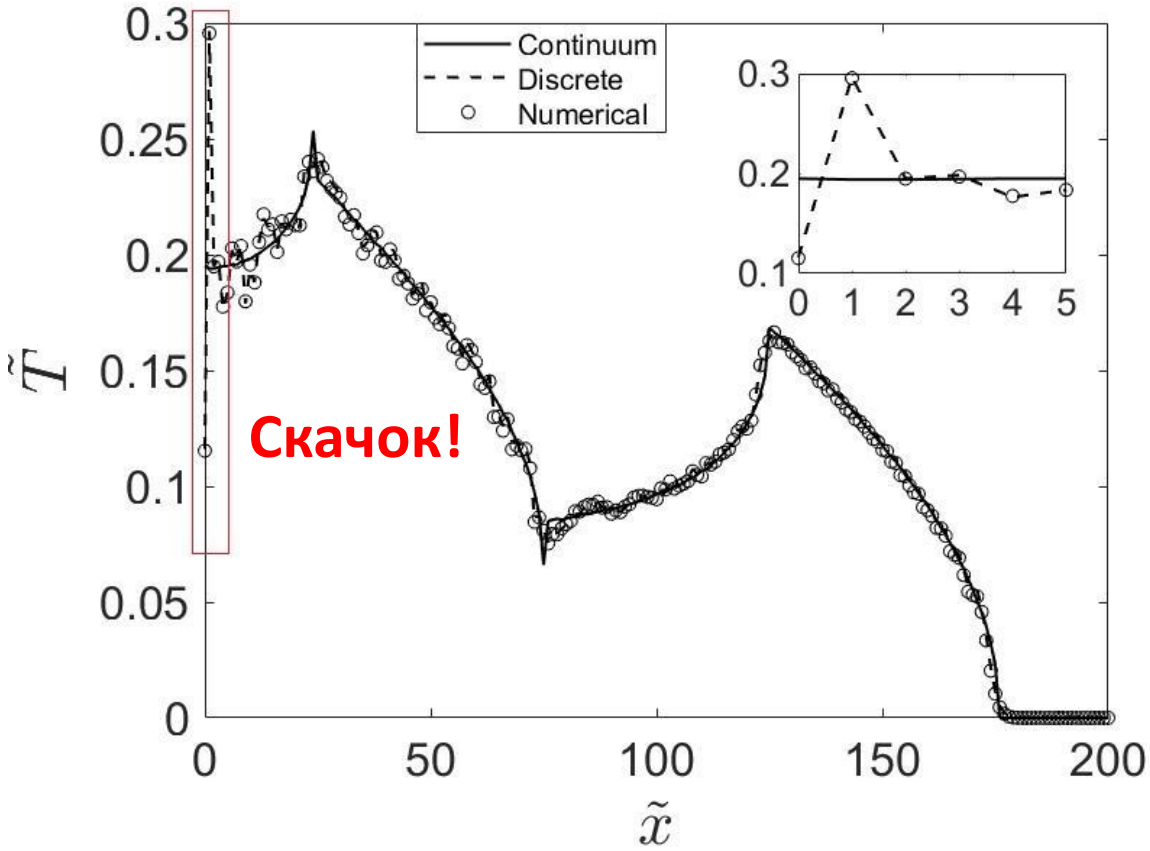
Liazhkov S.D. Unsteady heat transport in an instantly heated semi-infinite free end Hooke chain // CMAT 35(2) 413-430 (2023)

Скачек на границе

Периодическая цепочка

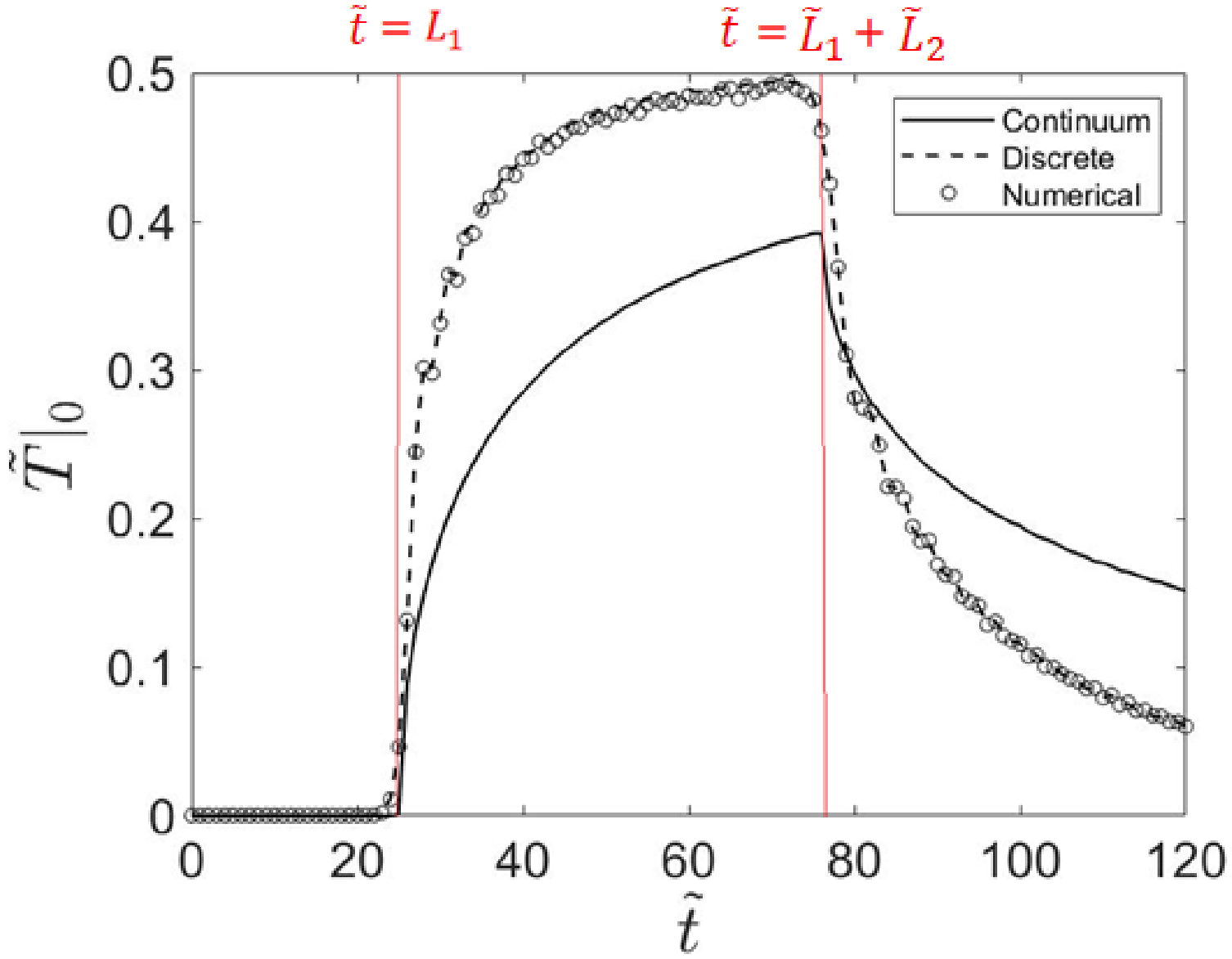


Свободная цепочка



Liazhkov S.D. Unsteady heat transport in an instantly heated semi-infinite free end Hooke chain // CMAT 35(2) 413-430 (2023)

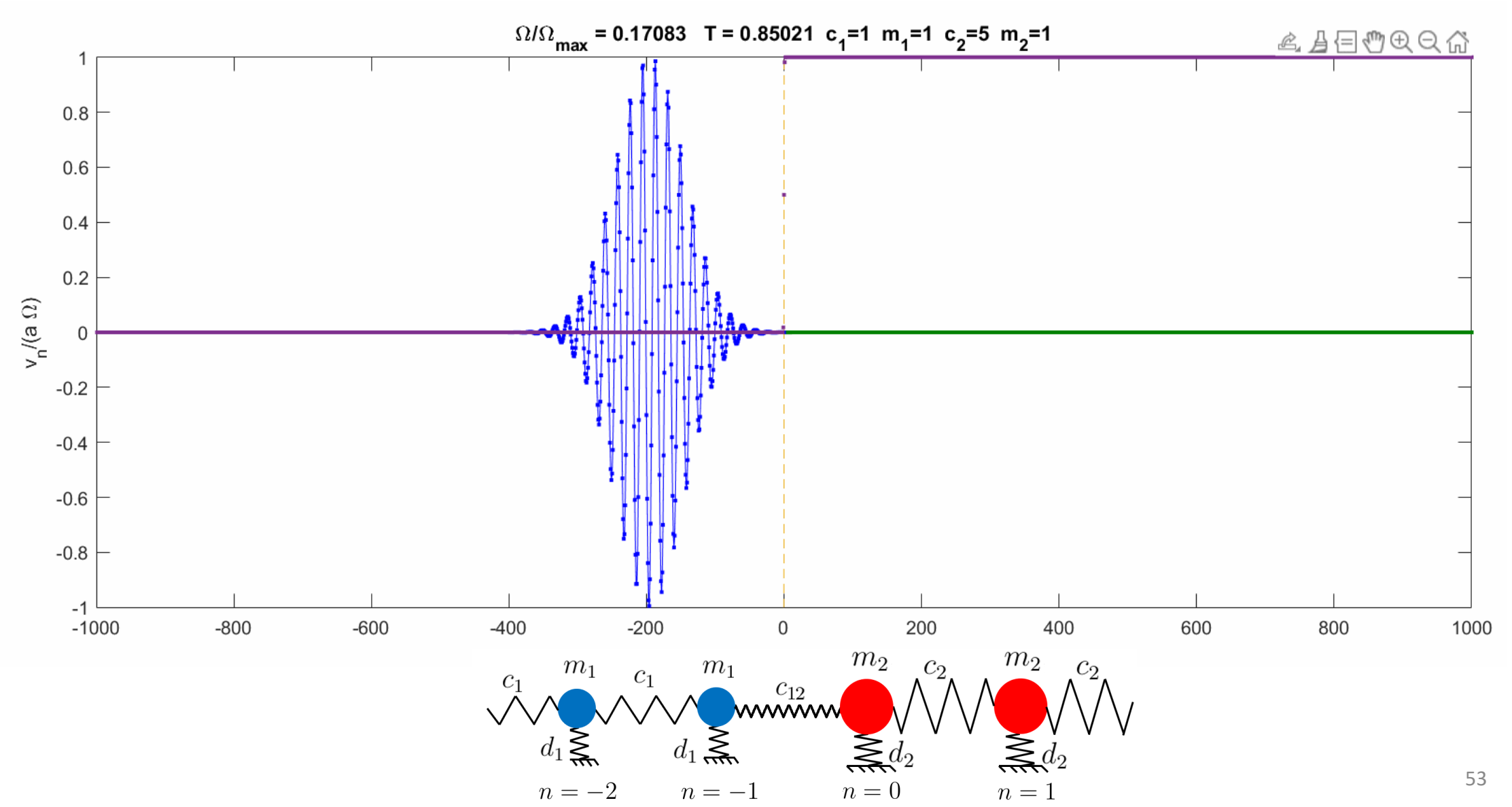
Температура на свободной границе цепочки



Континуальное решение на границе на работает

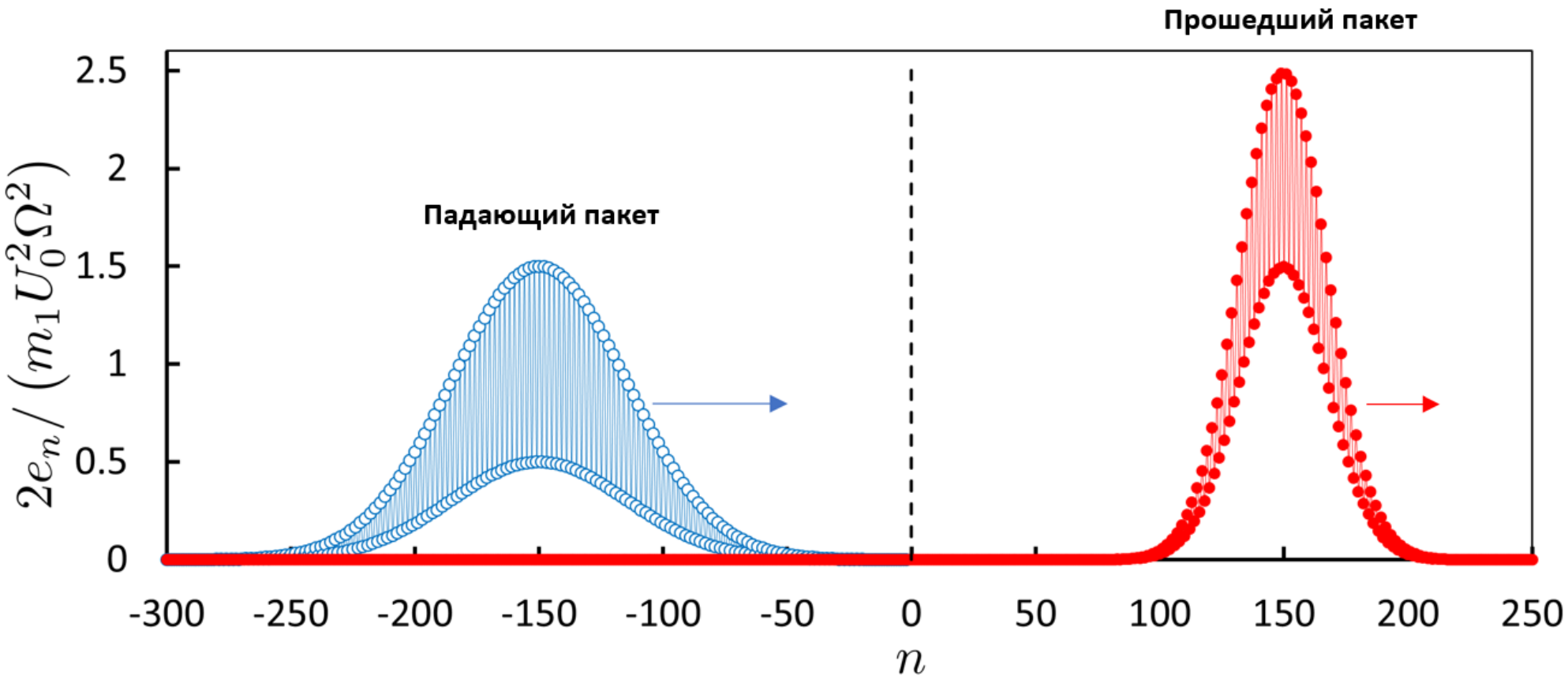
Интерфейсные эффекты. Акустическая прозрачность

Прохождение волновых пакетов через границу



Акустическая прозрачность

Условие прозрачности $\Omega^2 = \Omega_t^2 = \dfrac{d_1 - d_2}{m_1 - m_2}, \qquad c_1 = c_2 = c,$

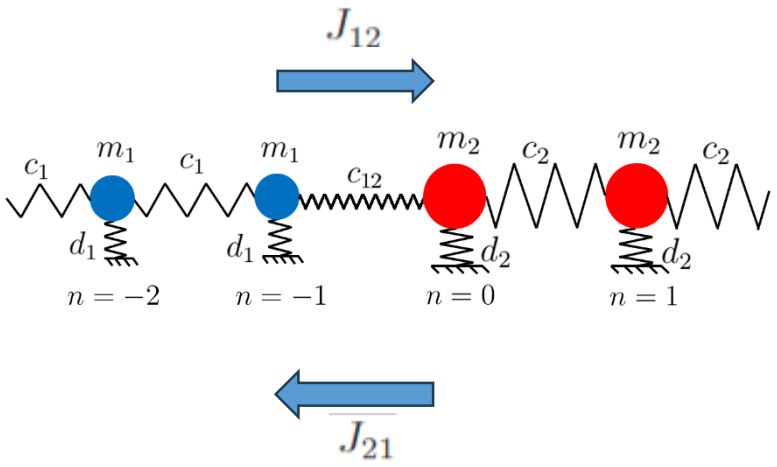


Kuzkin V.A. Acoustic transparency of the chain-chain interface // Phys. Rev. E, 107, 065004 (2023)

Интерфейсные эффекты. Тепловые диоды

Тепловой диод. Постановка задачи

- Рассматривается интерфейс двух цепочек на упругом основании
- В одной из цепочек задается распределение энергии по волновым числам
- Вычисляется тепловой поток
- Определяется диодный коэффициент



$$\varepsilon = \frac{J_{12} - J_{21}}{J_{12} + J_{21}}.$$

Dmitriev S.V., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. Nonequilibrium thermal rectification at the junction of harmonic chains // Phys. Rev. E [submitted]

Формула для диодного коэффициента

- Диодный коэффициент:

$$\varepsilon = \frac{\int_{\Omega_{\min}}^{\Omega_{\max}} T_e(\Omega)\,[E(q_1) - E(q_2)]\,d\Omega}{\int_{\Omega_{\min}}^{\Omega_{\max}} T_e(\Omega)\,[E(q_1) + E(q_2)]\,d\Omega}. \qquad q_j(\Omega) = 2\arcsin\sqrt{\frac{m_j\Omega^2 - d_j}{4k_j}}.$$

- Здесь $T_e(\Omega)$ - коэффициент прохождения,
- *E(q)* – распределение энергии по длинам волн

Пример. Кусочно-постоянное распределение энергии

$$E(q) = \begin{cases} E_l, & |q| \le q_*, \\ E_s, & q_* < |q| \le \pi, \end{cases} \qquad \varepsilon = \frac{E_s - E_l}{E_s + E_l}.$$

Dmitriev S.V., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. Nonequilibrium thermal rectification at the junction of harmonic chains // Phys. Rev. E [submitted]

Идеальный тепловой диод (максимальный эффект)

Система становится идеальным тепловым диодом (пропускает тепло только в одну сторону) при условии

$$\varepsilon = 1 \Leftrightarrow \begin{cases} E(q) = 0, \quad \forall q \in (q_2(\Omega_{\min}); q_2(\Omega_{\max})), \\ \int_{\Omega_{\min}}^{\Omega_{\max}} T_e(\Omega) E(q_1(\Omega)) d\Omega \neq 0, \end{cases}$$

Dmitriev S.V., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. Nonequilibrium thermal rectification at the junction of harmonic chains // Phys. Rev. E [submitted]

Идеальный тепловой диод. Примеры

- Только длинные волны

$$E(q) = \begin{cases} f_l(q), & |q| \le q_*, \\ 0, & q_* < |q| \le \pi, \end{cases} \qquad \varepsilon = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \omega_1^{\min} > \omega_2^*.$$

$$\omega_j^* = \omega_j(q_*).$$

- Только короткие волны

$$E(q) = \begin{cases} 0, & |q| \le q_*, \\ f_s(q), & q_* < |q| \le \pi, \end{cases} \qquad \varepsilon = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \omega_1^{\max} < \omega_2^*.$$

Dmitriev S.V., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. Nonequilibrium thermal rectification at the junction of harmonic chains // Phys. Rev. E [submitted]

Диодный эффект

- **Отсутствует в линейных системах, находящихся в равновесии** (если распределение энергии равномерное или соответствует статистике Бозе-Эйнштейна)

- **Может наблюдаться в линейных системах при неравновесном распределении энергии**

- Максимален, если волны, соответствующие полосе пропускания, имеют нулевую энергию для одной из цепочек

Dmitriev S.V., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M. Nonequilibrium thermal rectification at the junction of harmonic chains // Phys. Rev. E [submitted]

Открытые вопросы/проблемы

- Определение температуры
- Определение границ применимости континуального описания баллистической теплопроводности
- Описание влияния неидеальностей (дефектов, изотопного состава и тд.)
- Описание перехода от баллистического режима теплопроводности к диффузионному
- Описание перехода механической энергии в тепловую
- Учет электронной подсистемы
- Постановка реальных экспериментов (нестационарная постановка)

Публикации группы А.М. Кривцова

tm.spbstu.ru Проект "Термокристалл" — Department of Theoretical and...

Kuzkin Обсуждение Настройки Список наблюдения Вклад Выйти

Статья ACL Обсуждение Читать Править История Ещё Поиск

Проект "Термокристалл" [править]

(перенаправлено с «ТС»)

Заглавная страница
Как к нам поступить?
Контакты
Портал сообщества
Текущие события
Свежие правки
Случайная статья
Справка

Инструменты
Ссылки сюда
Связанные правки
Загрузить файл
Спецстраницы
Версия для печати
Постоянная ссылка
Сведения о странице

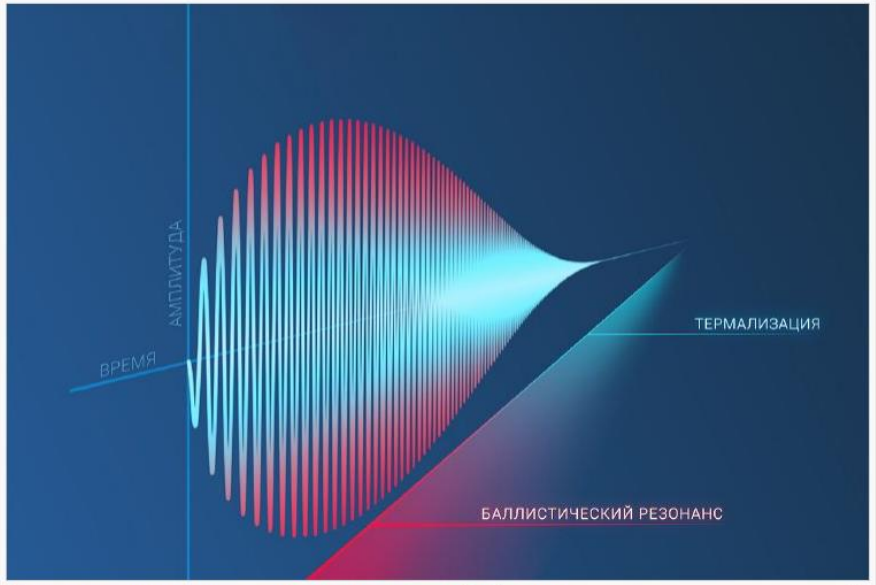
На других языках
English

Поделиться
Поделиться...

ТМ > **Проект "Термокристалл"**

Проект посвящен построению аналитических моделей неравновесных тепловых процессов в сверхчистых кристаллах. Является развитием проекта "Кристалл" на случай неравновесных тепловых процессов.

Содержание [убрать]



Баллистический резонанс и термализация в ФПУ цепочке

tm.spbstu.ru/ТС

Дополнительные слайды

Многотемпературные модели

- **Ударные волны** (Зельдович, Холиан, Хувер, Фортов и др.)
- **Лазерное воздействие на твердые тела** (Беляев, Индейцев, Петров, Фортов и др.)
- **Баллистическое распространение тепла в твердых телах** (Kato, Jou, 2001; Dhar, Lebowitz, 2012; Xiong, 2013 и др.)
- **Неравновесные течения газов** (Аристов, Кустова и др.)

Анисимов, Жаховский, Фортов, Письма ЖЭТФ, 1997

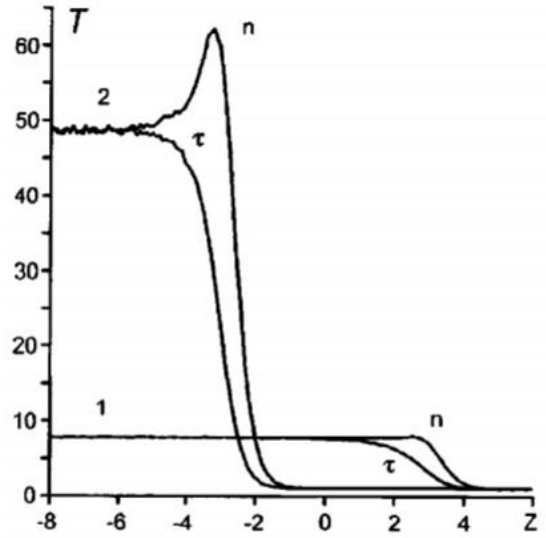


FIG. 1. Spatial profiles of the mean-square fluctuations of the longitudinal (n) and transverse (τ) velocity components in stationary shock waves. Upstream velocities are: curve *1*) $|V_1|=2.48$ and curve *2*) $|V_1|=4.95$.

Статьи по теме доклада

PHYSICAL REVIEW E **107**, 065004 (2023)

Acoustic transparency of the chain-chain interface

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

(Received 23 February 2023; accepted 30 May 2023; published 28 June 2023)

We study propagation of wave packets through the interface between two dissimilar harmonic chains with on-site potentials (e.g., chains lying on elastic foundations). An expression for the transmission coefficient, relating energies of the incident and transmitted wave packets is derived using two different approaches. Without elastic foundation, the transmission coefficient monotonically decreases with increasing wave frequency. We show that by adding elastic foundations, one can qualitatively change this dependence and make it nonmonotonic or even increasing. Moreover, in some cases, the interface is totally transparent (the transmission coefficient is equal to unity at some frequency) if at least one of the chains has the elastic foundation. Presented results may serve for manipulation of the transmission coefficient and corresponding interfacial thermal resistance in low-dimensional nanosystems.

DOI: 10.1103/PhysRevE.107.065004

Nonequilibrium thermal rectification at the junction of harmonic chains

Sergey V. Dmitriev[1,2,*] Vitaly A. Kuzkin[3,4,†] and Anton M. Krivtsov[4,3‡]
[1] *Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Centre of RAS, Ufa 450054, Russia*
[2] *Ufa State Petroleum Technological University, Ufa 450062, Russia*
[3] *Institute for Problems in Mechanical Engineering RAS, Saint Petersburg 199178, Russia*
[4] *Peter the Great Saint Petersburg Polytechnic University, Saint Petersburg 195251, Russia*

A thermal diode or rectifier is a system that transmits heat/energy in one direction better than in the opposite direction. We investigate the influence of distribution of energy among wavenumbers on the diode effect for the junction of two dissimilar harmonic chains. An analytical expression for the diode coefficient, characterizing difference between heat fluxes through the junction in opposite directions, is derived. It is shown that the coefficient depends on the energy transmission coefficient and the distribution of energy among wavenumbers. For an equilibrium energy distribution, the diode effect is absent, while for non-equilibrium energy distributions the diode effect is observed even though the system is harmonic. We show that the diode effect can be maximized by varying the energy distribution and relative position of spectra. Conditions are formulated under which the system acts as an ideal thermal rectifier, i.e. transmits heat only in one direction. The results obtained are important for understanding of the heat transfer in heterogeneous low-dimensional nanomaterials.

PACS numbers: 05.45.Yv, 63.20.-e
Keywords: harmonic chain, thermal equilibrium, non-equilibrium state, junction, thermal diode effect, thermal rectifier

tm.spbstu.ru/TC

Избранные публикации

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

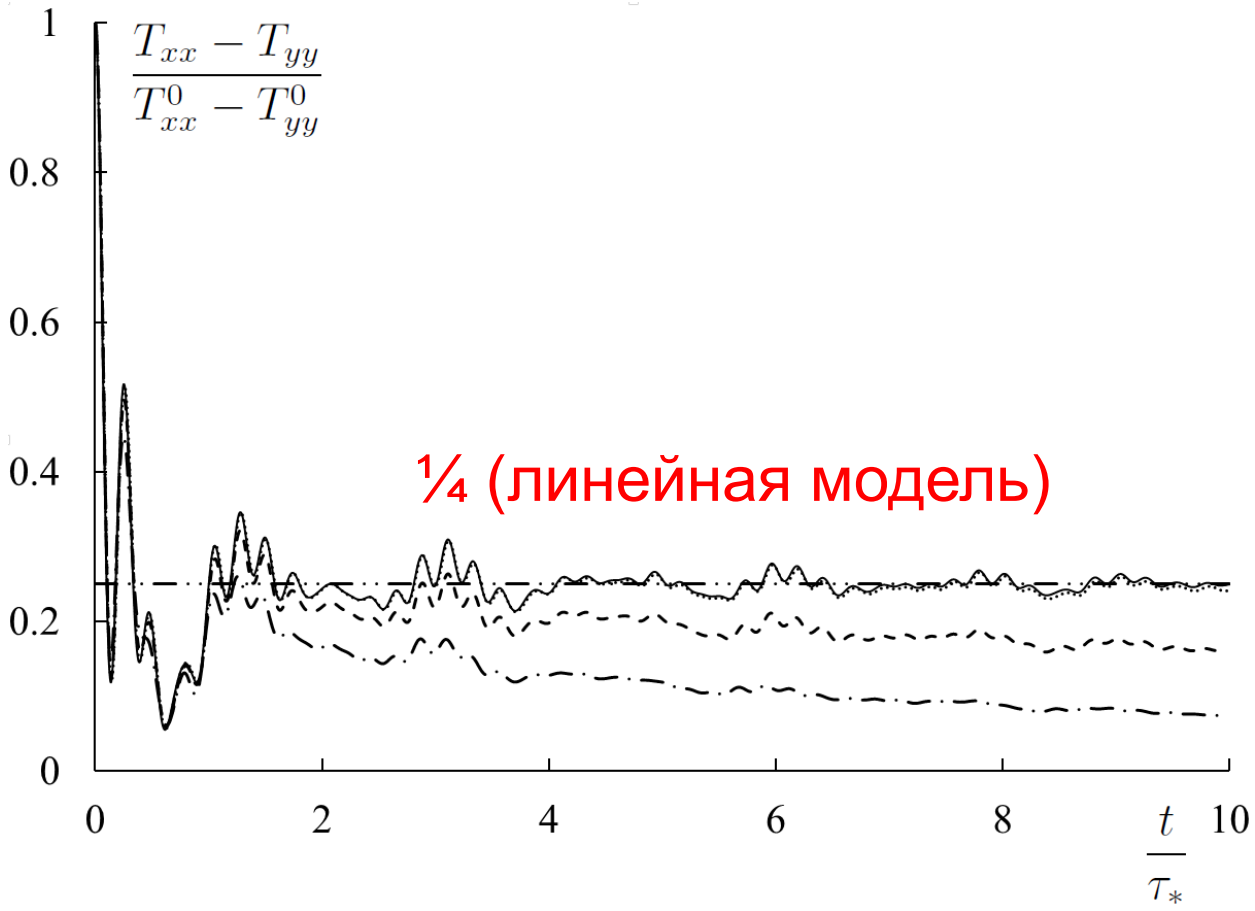
2. Kuzkin V.A. **Thermal equilibration in infinite harmonic crystals**. *Cont. Mech. Thermodyn*, 2019

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

Пример: двумерная треугольная решетка Леннарда-Джонса



Амплитуда начальных скоростей (по отношению к скорости диссоциации):

- 0.05 (точки)
- 0.25 (пунктир)
- 0.5 (штрих-пунктир)

Наличие нелинейности приводит к выравниванию кинетических энергий, соответствующих разным степеням свободы.

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	$\mathcal{E} = \mathcal{E}_*\omega^2 t^2\left(J_0^2(\omega t) + J_1^2(\omega t)\right)$ $\mathcal{E}_* = \frac{1}{4}\rho v_s^2\beta^2\Delta T^2.$	$\mathcal{E} \approx \frac{2}{\pi}\mathcal{E}_*\omega t.$

Сравнение формул для *T*(x,t)

Точная формула для *T*(x,t)	**Приближенная формула для *T*(x,t)**
$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{T}_F + \boldsymbol{T}_S$	$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{T}_F + \boldsymbol{T}_S$
$\boldsymbol{T}_F(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}_1}\int_{\mathbf{k}_2}\sum_{\mathbf{y}} \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{T}'_F\boldsymbol{P}_2^{*\top} e^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\mathrm{d}\mathbf{k}_1\mathrm{d}\mathbf{k}_2, \quad \boldsymbol{T}_S(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{k}_1}\int_{\mathbf{k}_2}\sum_{\mathbf{y}} \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{T}'_S\boldsymbol{P}_2^{*\top} e^{\mathrm{i}(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2)\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\mathrm{d}\mathbf{k}_1\mathrm{d}\mathbf{k}_2$ $\{\boldsymbol{T}'_F\}_{ij} = \frac{1}{2}\{\boldsymbol{P}_1^{*\top}\boldsymbol{T}_0(\mathbf{y})\boldsymbol{P}_2\}_{ij}\left[\cos((\omega_i(\mathbf{k}_1)+\omega_j(\mathbf{k}_2))t) + (1-\delta_{ij})\cos((\omega_i(\mathbf{k}_1)-\omega_j(\mathbf{k}_2))t)\right],$ $\{\boldsymbol{T}'_S\}_{ij} = \frac{1}{2}\{\boldsymbol{P}_1^{*\top}\boldsymbol{T}_0(\mathbf{y})\boldsymbol{P}_2\}_{ij}\delta_{ij}\cos\left((\omega_j(\mathbf{k}_1)-\omega_j(\mathbf{k}_2))t\right).$	$\boldsymbol{T}_F \approx \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P}\tilde{\boldsymbol{T}}_F\boldsymbol{P}^{*\top}\mathrm{d}\mathbf{k}, \quad \boldsymbol{T}_S \approx \int_{\mathbf{k}} \boldsymbol{P}\tilde{\boldsymbol{T}}_S\boldsymbol{P}^{*\top}\mathrm{d}\mathbf{k},$ $\{\tilde{\boldsymbol{T}}_F\}_{ij} = \frac{1}{2}\{\boldsymbol{P}^{*\top}\boldsymbol{T}_0(\mathbf{x})\boldsymbol{P}\}_{ij}\left[\cos((\omega_i+\omega_j)t) + (1-\delta_{ij})\cos((\omega_i-\omega_j)t)\right],$ $\{\tilde{\boldsymbol{T}}_S\}_{ij} = \frac{1}{4}\{\boldsymbol{P}^{*\top}\left(\boldsymbol{T}_0(\mathbf{x}+\mathbf{v}_g^j t) + \boldsymbol{T}_0(\mathbf{x}-\mathbf{v}_g^j t)\right)\boldsymbol{P}\}_{jj}\delta_{ij}.$
Симметрична по отношению к времени	Симметрична по отношению к времени
Бесконечная скорость распространения сигнала	Тепловой фронт распространяется с максимальной групповой скоростью
Медленно считается (двойной интеграл и сумма)	Быстро считается (один интеграл)

Синусоидальное распределение температуры

- Начальное распределение температуры:

$$\boldsymbol{T}_0(\mathbf{x}) = \left(T_b + \Delta T \sin\frac{2\pi x}{L}\right)\boldsymbol{E}, \qquad x = \mathbf{x}\cdot\mathbf{e}$$

- Амплитуда теплового профиля:

$$A = \frac{1}{N}\mathrm{tr}\boldsymbol{A} = \frac{2}{L}\int_0^L T(x,t)\sin\frac{2\pi x}{L}\mathrm{d}x$$

- Формула для амплитуды:

$$\boxed{A = \frac{\Delta T}{2N}\sum_{j=1}^{N}\int_{\mathbf{k}}\left(\cos(2\omega_j t) + \cos\frac{2\pi v_g^j t}{L}\right)\mathrm{d}\mathbf{k}.}$$

разные характерные времена

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