

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.

DOI: 10.7868/S0869565215260102

На макроскопическом уровне распространение тепла в большинстве материалов описывается законом Фурье, согласно которому тепловой поток пропорционален градиенту температуры. Являясь удобной математической моделью, закон Фурье приводит к ряду физических парадоксов, таких как мгновенное распространение тепла. Заметные отклонения от закона Фурье наблюдаются на малых временных и пространственных масштабах [1, 2]. Кроме того, известно, что в простейших дискретных системах, таких как одномерный гармонический кристалл (цепочка частиц, связанных линейными пружинами), распространение тепла не подчиняется закону Фурье [3–5]. В настоящее время вопрос о распространении тепла в идеальных кристаллических системах остается открытым. Вместе с тем данный вопрос приобретает особую актуальность, так как с развитием нанотехнологий расширяется возможность применения идеальных бездефектных кристаллов и их уникальных теплопроводящих свойств. Кроме того, рациональное описание процессов теплопереноса необходимо для замыкания уравнений механики дискретных сред [6–8] и приложения их к описанию термомеханики твердых тел на наномасштабном уровне [9, 10].

Данная работа является развитием работы [11] на случай неравновесных процессов: для одномерного гармонического кристалла аналитически выводятся уравнения связи теплового потока и кинетической температуры, получены замкну-

тые уравнения, описывающие распространение тепла, и построено их аналитическое решение, подтверждаемое результатами численного моделирования. Результаты базируются на совмещении двух подходов — корреляционного анализа и длинноволнового приближения. Основная идея корреляционного анализа состоит в использовании ковариаций\* скоростей различных частиц кристалла [3, 12]. При этом ковариации позволяют замкнуть систему уравнений, а дисперсия скоростей частиц определяет кинетическую температуру [4, 11]. Длинноволновое приближение основывается на принципе, что осредненные величины меняются мало на расстояниях, сравнимых с расстояниями между частицами [6, 13].

Рассмотрим простейшую модель одномерного кристалла, описываемую следующими уравнениями движения:

$$\ddot{u}_k = \omega_0^2(u_{k-1} - 2u_k + u_{k+1}), \quad \omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{C}{m}}, \quad (1)$$

где  $u_k$  — перемещение частицы,  $k$  — номер частицы,  $m$  — масса частицы,  $C$  — жесткость связи между частицами. Кристалл считается бесконечным: индекс  $k$  принимает произвольные целые значения. Используем следующие начальные условия:

$$u_k|_{t=0} = 0, \quad \dot{u}_k|_{t=0} = \sigma(x)\rho_k. \quad (2)$$

Здесь  $\rho_k$  — независимые случайные величины с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией;  $\sigma$  — дисперсия начальных скоростей частиц, являющаяся медленно изменяющейся функцией пространственной координаты  $x = ka$ , где  $a$  — начальное расстояние между соседними частицами. Данные начальные условия

\* Математическое ожидание (среднее) произведения двух центрированных случайных величин.

можно интерпретировать как результат воздействия на кристалл ультракороткого лазерного импульса [2]. Перепишем уравнения движения (1) в виде

$$\dot{v}_k = \omega_0^2 \Delta \varepsilon_k, \quad \dot{\varepsilon}_k = \Delta v_k, \quad (3)$$

где скорость частицы  $v_k$ , деформация связи  $\varepsilon_k$  и центральный разностный оператор  $\Delta$  определяются формулами

$$v_k \stackrel{\text{def}}{=} \dot{u}_k, \quad \varepsilon_k \stackrel{\text{def}}{=} \Delta u_k, \quad \Delta f_k \stackrel{\text{def}}{=} f_{k+1/2} - f_{k-1/2}, \quad (4)$$

причем для перемещений и скоростей используются целые значения индекса  $k$ , для деформаций – полуцелые.

Введем ковариационные энергию  $\mathcal{E}$  и тепловой поток  $\mathcal{H}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{pq} &\stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{2} \langle v_p v_q \rangle + \frac{C}{2} \langle \varepsilon_p \varepsilon_q \rangle, \\ \mathcal{H}_{pq} &\stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} C \langle \varepsilon_p v_q + v_p \varepsilon_q \rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\langle \dots \rangle$  – оператор пространственного осреднения:

$$\langle f_{pq} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Lambda} \sum_{s=-\Lambda/2}^{\Lambda/2} f_{\tilde{p}+s, \tilde{q}+s}, \quad 1 \ll \Lambda \ll \frac{\lambda}{a}, \quad (6)$$

где  $\Lambda$  – интервал осреднения,  $\lambda$  – характерная длина макроскопических волн в кристалле. Индексы  $\tilde{p}$ ,  $\tilde{q}$  выбираются равными  $p, q$  или  $p + \frac{1}{2}, q + \frac{1}{2}$  для сопряжения целых и полуцелых значений индексов.

Дифференцируя по времени выражения (5) с учетом (3), получим

$$\dot{\mathcal{E}}_{pq} = -(\Delta_p + \Delta_q) \mathcal{H}_{pq}, \quad \dot{\mathcal{H}}_{pq} = -\omega_0^2 (\Delta_p + \Delta_q) \mathcal{E}_{pq}, \quad (7)$$

где  $\Delta_p$  и  $\Delta_q$  – центральные разностные операторы (4) по индексам  $p$  и  $q$ . Исключение из этой системы ковариационного теплового потока дает замкнутое уравнение для ковариационной энергии и наоборот.

Представим величины (5) как функции пространственной координаты  $x = \frac{p+q}{2} a$  и корреляционного индекса  $n = q - p$ , т.е.  $\mathcal{E}_{pq} = \mathcal{E}_n(x)$ ,  $\mathcal{H}_{pq} = \mathcal{H}_n(x)$ . Обозначим

$$\rho \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{a}, \quad h_n \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} (\mathcal{H}_{n-1/2} + \mathcal{H}_{n+1/2}), \quad (8)$$

где  $\rho$  – плотность (число частиц в единице объема),  $h_n$  – представление ковариационного теплового потока, более удобное для перехода к уравнениям сплошной среды. Так,  $h_0 = -\frac{1}{2} C \langle (\varepsilon_{k-1/2} + \varepsilon_{k+1/2}) v_k \rangle$  – известное выражение для теплового потока в одномерном кристалле [4, 6]. Будем считать, что рассматриваемые величины – медленно

изменяющиеся функции  $x$ , что позволяет использовать разложение

$$f(x+a) = f(x) + af'(x) + \frac{1}{2} a^2 f''(x) + \dots \quad (9)$$

Тогда уравнения (7) в первом приближении принимают вид

$$\rho \dot{\mathcal{E}}_n = -h'_n, \quad \dot{h}_n = -\frac{1}{4} \rho c^2 (\mathcal{E}_{n+1} + 2\mathcal{E}_n + \mathcal{E}_{n-1})', \quad (10)$$

где  $c \stackrel{\text{def}}{=} a\omega_0$  – скорость звука в одномерном кристалле, штрихом обозначена производная по  $x$ . Первое из уравнений (10) выражает баланс ковариационной энергии, второе – аналог закона Фурье для ковариационного теплового потока, вместе они дают замкнутую систему дифференциально-разностных уравнений. Начальные условия для этих уравнений, согласно (2), имеют вид

$$\mathcal{E}_n|_{t=0} = E_0(x) \delta_n, \quad h_n|_{t=0} = 0, \quad (11)$$

где  $E_0(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{m}{2} \sigma^2(x)$  – начальное распределение тепловой энергии в кристалле; символ  $\delta_n$  равен 1 при  $n = 0$  и равен 0 при  $n \neq 0$ . Исключение из системы (10) величины  $h_n$  дает замкнутую начальную задачу для ковариационной энергии

$$\begin{aligned} \ddot{\mathcal{E}}_n &= \frac{1}{4} c^2 (\mathcal{E}_{n+1} + 2\mathcal{E}_n + \mathcal{E}_{n-1})'', \quad \mathcal{E}_n|_{t=0} = E_0(x) \delta_n, \\ \dot{\mathcal{E}}_n|_{t=0} &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Решение начальной задачи (10), (11) позволяет однозначно найти ковариации  $\mathcal{E}_n(t, x)$  и  $h_n(t, x)$ . При  $n = 0$  они дают обычные (дисперсионные) энергию  $E(t, x)$  и тепловой поток  $h(t, x)$ . Для нахождения температуры требуется затухание быстрых переходных процессов, возникающих в результате перехода половины начальной энергии из кинетической в потенциальную [11]. В работе [11] показано, что лагранжиан (разность кинетической и потенциальной энергии кристалла\*) удовлетворяет дифференциальному уравнению Бесселя\*\* и выражается через функцию Бесселя 1-го рода  $J_0(z)$ :

$$\ddot{L} + \frac{1}{t} \dot{L} + 16\omega_0^2 L = 0, \quad L(t, x) = E_0(x) J_0(4\omega_0 t). \quad (13)$$

Согласно (13) лагранжиан  $L$  совершает затухающие колебания и стремится к нулю на временах,

\* В работе [11] рассматривалось осреднение по всему кристаллу, однако эти результаты легко переносятся на осреднение (6), применяемое  $\Lambda$ -окрестности точки  $x$ .

\*\* В уравнении (10) работы [11] была допущена опечатка – коэффициент при  $\dot{L}$  вместо  $\frac{1}{t}$  был ошибочно записан как  $16\omega_0^2 \frac{1}{t}$ , что, впрочем, никак не повлияло на остальные результаты работы.

много больших  $\tau_0 = \frac{2\pi}{\omega_0}$ . Характерные времена для

уравнений (10) имеют порядок  $\frac{\lambda}{c} \gg \tau_0$ . Следова-

тельно, после затухания высокочастотных процессов кинетическая энергия  $K$  становится равной половине полной энергии  $E$ , что дает для кинетической температуры одномерного кристалла

выражение  $\frac{1}{2}kT = K = \frac{1}{2}E$ , где  $k$  – постоянная

Больцмана. Таким образом, после решения системы (10) температура  $T$  и тепловой поток  $h$  могут быть найдены как

$$kT(t, x) = \mathcal{E}_0(t, x), \quad h(t, x) = h_0(t, x), \quad (14)$$

что дает полное описание тепловых процессов в кристалле.

Решение начальных задач (10)–(12) получим с использованием интегрального преобразования Фурье. Для фурье-образов ковариаций реализуются начальные задачи, близкие к рассмотренной в [11], что позволяет построить их решения через функции Бесселя 1-го рода  $J_{2n}(z)$ . Применение обратного преобразования Фурье позволяет получить явные формулы для искоемых функций:

$$\mathcal{E}_n(t, x) = \frac{(-1)^n}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} E_0(y) J_{2n}(kct) e^{ik(x-y)} dk dy, \quad (15)$$

$$h_n(t, x) = (-1)^n \frac{i\rho c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} E_0(y) J'_{2n}(kct) e^{ik(x-y)} dk dy, \quad (16)$$

Вычисление интегралов по  $k$  при  $n = 0$  дает явные представления для кинетической температуры и теплового потока:

$$T(t, x) = \frac{1}{\pi} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} d\tau, \quad (17)$$

$$h(t, x) = \frac{k\rho c}{\pi t} \int_{-t}^t \frac{T_0(x - c\tau)}{\sqrt{t^2 - \tau^2}} \tau d\tau,$$

где  $kT_0(x) = E_0(x)$  – начальное распределение температуры\*. Непосредственным дифференцированием выражений (15), (16) при  $n = 0$  с использованием дифференциального уравнения Бесселя и тождества  $J_1(z) = -J'_0(z)$  [14] получим модифици-

рованный закон Фурье, связывающий величины (14):

$$\dot{h} + \frac{1}{t}h = -k\rho c^2 T'. \quad (18)$$

Используя закон баланса энергии  $\rho \dot{E} = -h'$ , продифференцируем данное соотношение по  $x$ , что дает замкнутую начальную задачу для температуры  $T$ :

$$\ddot{T} + \frac{1}{t}\dot{T} = c^2 T'', \quad T|_{t=0} = T_0(x), \quad \dot{T}|_{t=0} = 0. \quad (19)$$

Вычислим по формуле (17) эволюцию температуры и теплового потока для двух вариантов начального распределения температуры.

1. Синусоидальное распределение:  $T_0(x) = A \sin kx + B$ . Решение: температура и поток

$$T(t, x) = A J_0(kct) \sin kx + B, \quad (20)$$

$$h(t, x) = -k\rho c A J_1(kct) \cos kx$$

совершают колебания, амплитуда которых, согласно свойствам функции Бесселя [14], затухает со временем как  $\frac{1}{\sqrt{t}}$ . Для сравнения: уравнение

теплопроводности в этом случае дает экспоненциальное затухание (без колебаний), волновое уравнение – гармонические колебания постоянной амплитуды.

2. Ступенчатое распределение:  $T_0(x) = A$  при  $x < 0$ , иначе  $T_0(x) = 0$ . Решение:

$$|x| \leq ct: T(t, x) = \frac{A}{\pi} \arccos \frac{x}{ct}, \quad (21)$$

$$h(t, x) = \frac{k\rho A}{\pi t} \sqrt{c^2 t^2 - x^2};$$

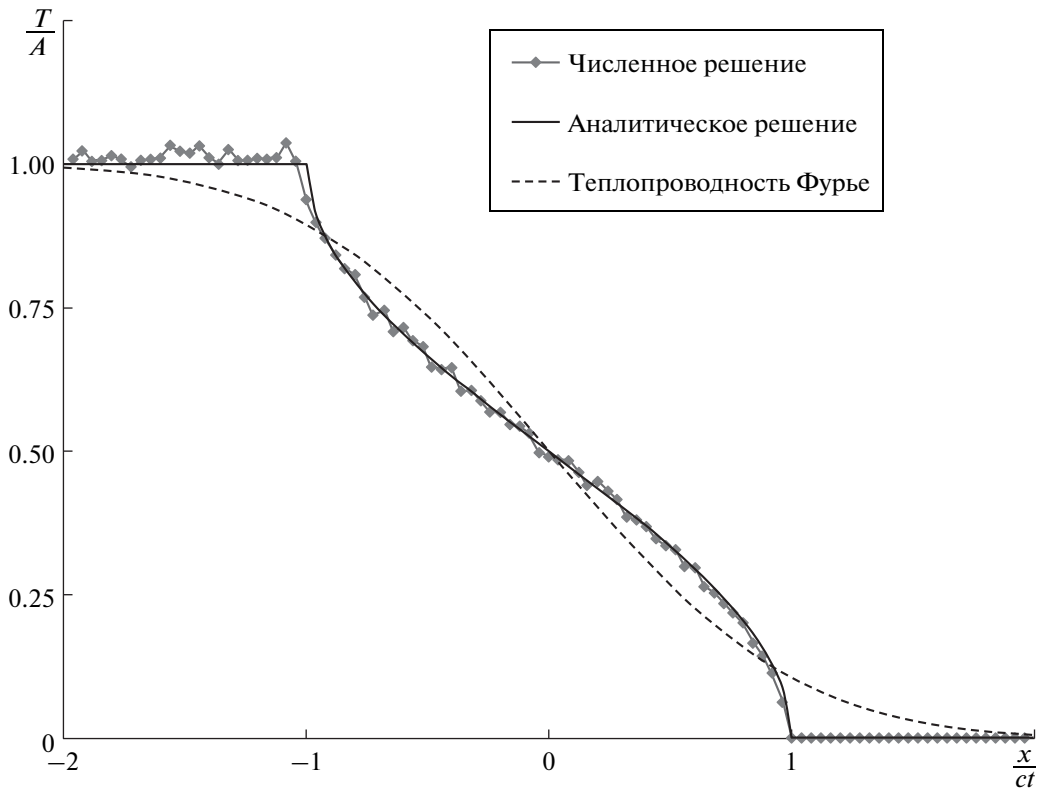
при  $|x| > ct$  сохраняется начальное распределение температуры и  $h \equiv 0$ . Полученное решение демонстрирует два принципиальных отличия от теплопроводности на базе закона Фурье: 1) фронт возмущения распространяется с конечной скоростью  $c$ ; 2) из горячей области в холодную идет

постоянный тепловой поток  $h|_{x=0} = \frac{k\rho c A}{\pi}$  (для теплопроводности Фурье при  $t = 0$  поток бесконечен, а при  $t > 0$  убывает как  $\frac{1}{\sqrt{t}}$ ).

На рис. 1 аналитическое решение (21) сравнивается с численным решением начальной задачи (1), (2) для цепочки, содержащей  $10^6$  частиц. Видно, что решения совпадают с точностью до малых тепловых осцилляций.

Таким образом, в работе получена замкнутая система дифференциально-разностных уравнений (10), описывающая тепловые процессы в одномерном гармоническом кристалле. Ее решение в случае мгновенного теплового возмущения приводит

\* Используется начальное распределение температуры, установившееся после завершения быстрого переходного процесса (13), в результате которого тепловая энергия распределяется поровну между кинетической и потенциальной [11].



**Рис.1.** Сравнение аналитического решения (21) с численным решением уравнения (1) (цепочка, содержащая  $10^6$  частиц; каждая точка – осреднение по интервалу, содержащему  $10^4$  частиц; интегрирование методом центральных разностей с шагом  $\frac{1}{40} \tau_0$ ; зеркальные граничные условия). Штриховая линия – график, соответствующий решению аналогичной задачи на основе закона теплопроводности Фурье.

к соотношению, отличающемуся от закона Фурье. Ниже приведено сравнение закона Фурье (а), эмпирического закона теплопроводности Максвелла–Каттанео–Вернотте (b) [1, 15] и полученного соотношения (с):

$$\begin{aligned}
 \text{а) } h &= -\kappa T', & \text{б) } \dot{h} + \frac{1}{\tau} h &= -\frac{\kappa}{\tau} T', \\
 \text{с) } \dot{h} + \frac{1}{t} h &= -k\rho c^2 T', & &
 \end{aligned}
 \tag{22}$$

где  $\kappa$  – коэффициент теплопроводности,  $\tau$  – время релаксации,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\rho$  – плотность,  $c$  – скорость звука. В уравнении (с) место постоянной  $\tau$  занимает физическое время  $t$ . Поэтому при временах, близких к времени релаксации, законы (b) и (с) близки, но при малых и больших временах они существенно различаются. Использование закона (с) приводит к модифицированному уравнению теплопроводности (19):  $\ddot{T} + \frac{1}{t} \dot{T} = c^2 T''$ , которое содержит только один параметр – скорость звука  $c$  и является аналитическим следствием уравнений динамики частиц кристалла. Уравнение (19) совмещает свойства классического уравнения теплопроводности

и волнового уравнения, но при этом оно является обратимым по времени (не меняется при замене  $t$  на  $-t$ ). Представляется, что процессы, описываемые законом (18) и уравнением (19), играют важную роль в неравновесной термодинамике идеальных бездефектных кристаллов, использование которых будет расширяться по мере развития нанотехнологий.

Автор благодарен Д.А. Индейцеву и В.А. Кузькину за полезные обсуждения, Д.В. Цветкову за численные расчеты.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант 14–11–00599.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chandrasekharaiah D.S. // Appl. Mech. Rev. 1986. V. 39. № 3. P. 355–376.
2. Poletkin K.V., Gurzadyan G.G., Shang J., Kulish V. // Appl. Phys. B. 2012. V. 107. P. 137–143.
3. Rieder Z., Lebowitz J.L., Lieb E. // J. Math. Phys. 1967. V. 8. № 5. P. 1073–1078.
4. Dhar A. // Adv. Phys. 2008. V. 57. № 5. P. 457–537.
5. Кривоцов А.М., Ле-Захаров А.А. // ДАН. 2008. Т. 420. № 1. С. 45–49.

6. *Кривцов А.М.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. 304 с.
7. Механика — от дискретного к сплошному / Под ред. В.М. Фомина. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008. 343 с.
8. *Hoover W.G., Hoover C.G.* Time Reversibility, Computer Simulations, Algorithms, Chaos. Advanced Series in Nonlinear Dynamics. Singapore: World Sci., 2012. V. 13. 397 p.
9. *Гольдштейн Р.В., Морозов Н.Ф.* // Физ. мезомеханика. 2007. Т. 10. № 5. С. 17–30.
10. *Кривцов А.М., Морозов Н.Ф.* // Физика твердого тела. 2002. Т. 44. № 12. С. 2158–2163.
11. *Кривцов А.М.* // ДАН. 2014. Т. 458. № 3. С. 279–281.
12. *Krivtsov A.M.* In.: Proc. XXXIV Summer School “Advanced Problems in Mechanics”. St.-Petersburg, 2007. С. 261–273.
13. *Борн М., Кунь Х.* Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит., 1958. 488 с.
14. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовича, И. Стигана. М.: Наука, 1979. 830 с.
15. *Babenkov M.B., Ivanova E.A.* // Continuum Mech. and Thermodyn. 2013. V. 26. № 4. С. 483–502.