

УДК 536

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В КРИСТАЛЛАХ С ДЕФЕКТАМИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2008 г. А. А. Ле-Захаров, А. М. Кривцов

Представлено академиком Н.Ф. Морозовым 12.11.2007 г.

Поступило 17.12.2007 г.

Описание процесса теплообмена в периодических структурах с использованием классических уравнений теплопроводности часто сталкивается с серьезными проблемами. Так, теплопроводность в одномерной цепочке частиц на сегодняшний день широко исследуется различными методами, в том числе с помощью компьютерных экспериментов [1–3]. Кроме того, постоянно ведется изучение тепловых процессов в реальных твердых веществах, жидкостях и газах [4, 5]. Тем не менее вопрос о корректном описании процессов теплообмена [6, 7] как для одномерной решетки, так и для многомерных кристаллов до сих пор остается открытым. В представленной работе исследование процесса теплопроводности в идеальных монокристаллических решетках, а также решетках с дефектами проведено методами молекулярно-динамического моделирования. Разработанная математическая модель при своей простоте позволяет достаточно подробно изучить процессы теплообмена. В ходе исследований показано, что теплопроводность в идеальном монокристалле не описывается классическими уравнениями. Однако для кристаллов с дефектами при достаточно больших размерах образца классические соотношения оказываются верны. Кроме того, в этих случаях может быть вычислен коэффициент теплопроводности и исследована его зависимость от числа дефектов, размеров образца и размерности пространства.

Рассмотрим классическое уравнение теплопроводности

$$\dot{T} - \beta T'' = 0, \quad (1)$$

где T – температура; β – коэффициент, характеризующий теплопроводность; точкой и штрихом обозначены соответственно производные по времени t и пространственной координате x .

Зададим начальное распределение температуры в виде

$$T|_{t=0} = T_1 + T_2 \sin kx, \quad k = \frac{2\pi}{L}, \quad (2)$$

где T_1 – это среднее значение температуры, T_2 и L – амплитуда и пространственный период температурных отклонений. Точное решение уравнения (1) с начальными условиями (2) и периодом L имеет вид

$$T = T_1 + T_2 e^{-2\beta k^2 t} \sin kx, \quad k = \frac{2\pi}{L}. \quad (3)$$

Введем в рассмотрение интеграл

$$J(t) = \int_0^L (T(x, t) - T_1)^2 dx. \quad (4)$$

Значение $J(t)$ легко может быть вычислено по результатам компьютерного эксперимента. С другой стороны, аналитическое выражение данного интеграла для решения в форме (3) имеет вид

$$J(t) = \frac{T_2^2 L}{2} e^{-2\beta k^2 t}. \quad (5)$$

Из выражения (5) следует формула для вычисления коэффициента β через два известных значения интеграла J :

$$\beta = \frac{1}{2k^2(t_2 - t_1)} \ln \frac{J(t_1)}{J(t_2)}, \quad (6)$$

где t_1 и t_2 – два произвольно выбранных момента времени. Эту формулу будем использовать для получения значения коэффициента β из молекулярно-динамических экспериментов.

Воспользуемся методом молекулярной динамики, позволяющим эффективно описывать физико-механические процессы в твердых телах [8–10]. Материал представляет собой совокупность частиц, взаимодействующих посредством модифицированного закона Ленарда-Джонса, для ко-

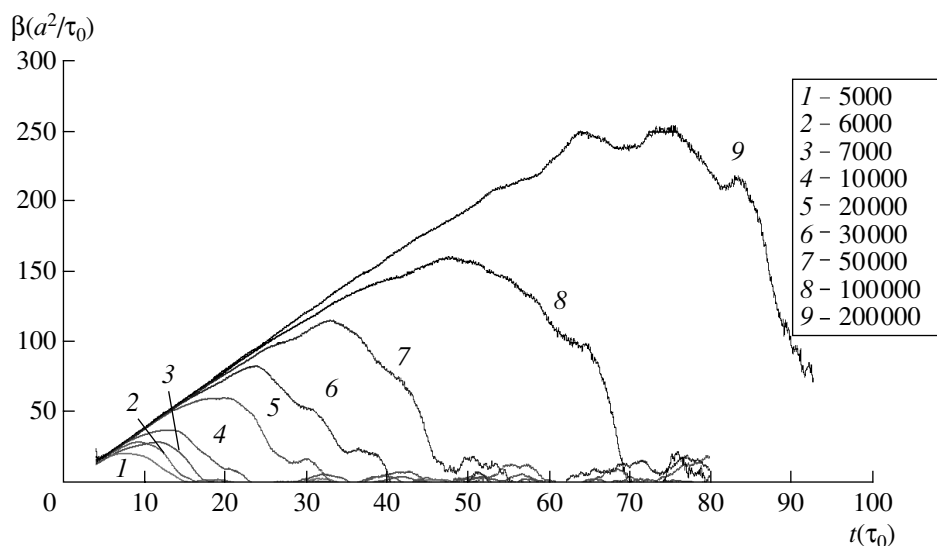


Рис. 1. Зависимость от времени коэффициента β для идеальных кристаллов при различных размерах образца (числе частиц). Двухмерная решетка

торого сила взаимодействия между частицами рассчитывается по формуле

$$f(r) = \begin{cases} f_{LJ}(r), & 0 < r < b, \\ k(r)f_{LJ}(r), & b < r < a_{cut}, \end{cases} \quad (7)$$

где $f_{LJ}(r)$ – сила взаимодействия для потенциала Ленард-Джонса, $k(r)$ – модифицирующая функция формы:

$$f_{LJ}(r) = \frac{12D}{a} \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{13} - \left(\frac{a}{r} \right)^7 \right],$$

$$k(r) = \left[1 - \left(\frac{r^2 - b^2}{a_{cut}^2 - b^2} \right)^2 \right]^2, \quad (8)$$

где D – энергия связи, a – равновесное расстояние, $b = \sqrt[6]{\frac{13}{7}} a$ – расстояние разрыва связи, $a_{cut} = 1.4a$ – расстояние обрезания силы (сохраняющее взаимодействие только ближайших соседей в плотноупакованной решетке). Температура считается пропорциональной средней кинетической энергии набора частиц (в предположении, что средняя скорость для этого набора частиц равна нулю). Рассматривается прямоугольный образец материала с распределением температуры в форме (3), где ось Ox направлена вдоль одного из ребер параллелепипеда, L – длина образца вдоль этой оси, размеры образца в ортогональных направлениях выбраны равными $\frac{L}{4}$. На всех границах моделируемого кристалла определены периодические граничные условия, частицы располагаются

в узлах плотноупакованной решетки (треугольной в двумерном и гранецентрированной кубической в трехмерном случае). Средняя температура системы принимается равной $T_1 = 3.2 \cdot 10^{-6} T_d$ для двумерного случая и $T_1 = 3.2 \cdot 10^{-5} T_d$ для трехмерного, где $T_d = \frac{v_d^2}{2}$, $v_d = \sqrt{\frac{2D}{m}}$ – скорость диссоциации, m – масса частицы. Амплитуда температурных отклонений берется равной $T_2 = \frac{2}{3} T_1$.

Значение коэффициента β рассчитывается согласно формуле (6). Для большей точности $\beta(t)$ берется как среднее из значений β , вычисленных на интервале $[t - 4\tau_0, t + 4\tau_0]$, где τ_0 – период малых колебаний частицы около положения равновесия.

На рисунке 1 показано изменение коэффициента β с течением времени, полученное в результате расчета по указанной выше методике для идеального двумерного монокристалла при различных размерах образца. Если бы уравнение (1) было справедливо для рассматриваемой модели, расчеты должны были дать приблизительно постоянное значение β . Однако, согласно рис. 1, коэффициент β растет практически линейно до достижения некоторого критического значения, после которого начинается его быстрый спад, связанный с тем, что изменения температуры по координате x становятся сравнимыми с температурными флуктуациями, обусловленными дискретностью системы. Чем больше образец, тем дольше продолжается линейный рост коэффициента β .

На рисунке 2 приведены результаты трехмерных расчетов для идеального монокристалла и

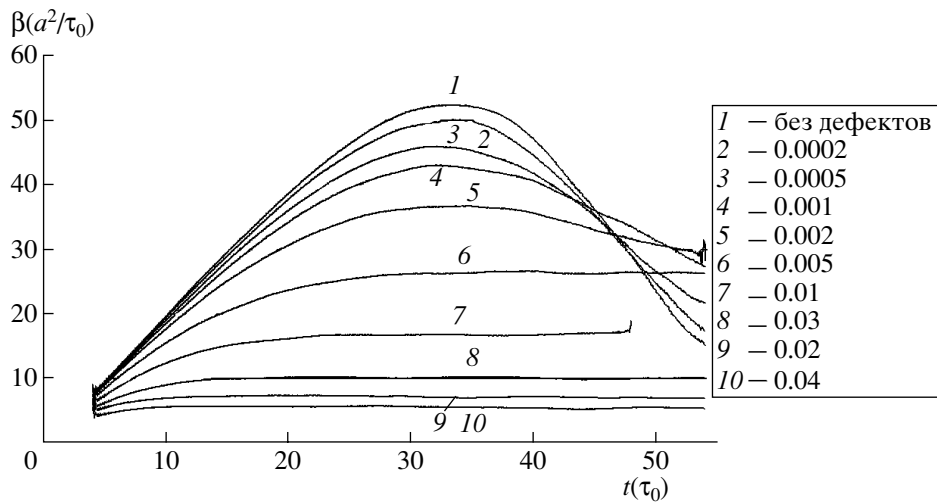


Рис. 2. Зависимость от времени коэффициента β для различной плотности дефектов в материале, а также для случая идеального кристалла. Число частиц $N = 500000$. Трехмерная решетка.

монокристалла с дефектами (равномерно распределенными вакансиями). Число частиц в образце составило примерно 500000. В случае отсутствия дефектов и при их малой плотности отчетливо виден рост коэффициента β , за которым следует его плавный спад практически до нуля. Если плотность дефектов достаточно высока, то после переходного процесса зависимость $\beta(t)$ выходит на постоянное значение, что позволяет сделать вывод о том, что в этом случае классическое уравнение теплопроводности (1) адекватно описывает распространение тепла в кристалле.

По результатам расчетов было проведено исследование зависимости β от числа дефектов в материале. Выяснилось, что β линейно зависит от величины, обратно пропорциональной квадрат-

ному корню из плотности дефектов p (рис. 3) с точностью до небольших отклонений, обусловленных недостатком статистических данных. Для трехмерного случая эти отклонения настолько малы, что изображенная линия тренда визуально неотличима от собственно графика зависимости.

На основе этих результатов была получена следующая аппроксимация зависимости β от плотности дефектов

$$\beta = A(p^{-1/2} - p_0^{-1/2}), \quad (9)$$

где A – размерный коэффициент, p_0 – критическое значение плотности дефектов, при котором эффект теплопроводности полностью исчезает. Здесь приведены значения этих двух параметров, полученные по результатам компьютерных экс-

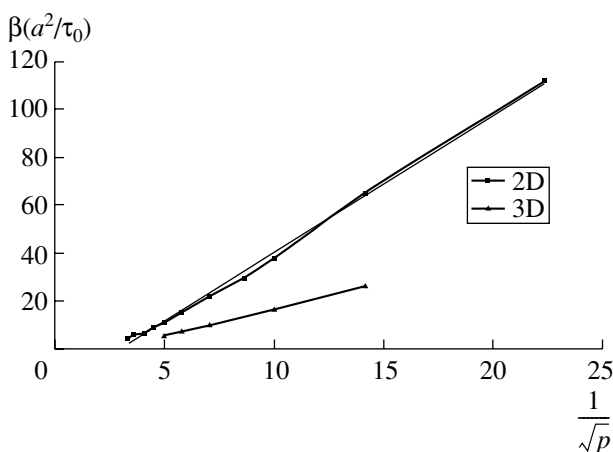


Рис. 3. Зависимость коэффициента β от плотности дефектов p для двухмерного (2D) и трехмерного (3D) случаев.

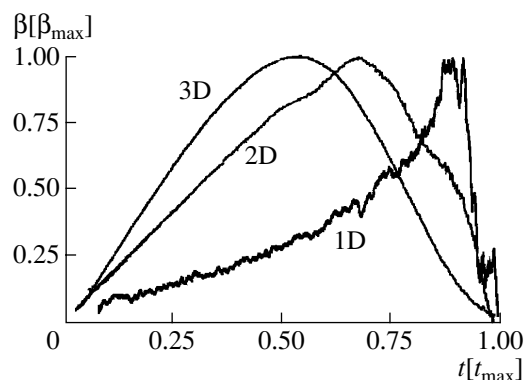


Рис. 4. Форма графиков изменения во времени коэффициента β для разных размерностей кристаллической решетки. Шкалы величин β и t нормализованы относительно максимального достигнутого в ходе эксперимента значения β и полного времени протекания процесса теплообмена.

периментов для двухмерных и трехмерных кристаллов;

	2D	3D
$A, a^2/t_0$	5.72	2.29
P_0	0.117	0.144

На рисунке 4 показано сравнение формы временной зависимости β для идеальных кристаллических решеток размерности 1–3. Во всех трех случаях коэффициент β растет со временем, однако в одномерном случае рост происходит с положительной второй производной, в двухмерном случае – практически линейно, в трехмерном – с отрицательной второй производной. Когда амплитуда пространственного изменения температуры оказывается сравнимой с амплитудой тепловых флуктуаций, то это приводит к уменьшению значения коэффициента β вплоть до обращения в ноль, причем чем ниже размерность пространства, тем резче проявляется этот эффект.

Таким образом, в данной работе показано, что в идеальном монокристалле процесс теплопроводности не описывается классическими уравнениями. По крайней мере, этот вывод справедлив для систем, размеры которых сравнимы с рассматриваемыми в работе, что, в частности, относится к большинству наноструктур с идеальной кристаллической решеткой. Для кристаллов со

случайно распределенными дефектами показано, что процесс теплообмена описывается классическим уравнением теплопроводности и получена зависимость теплопроводности от плотности дефектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Giardina C., Livi R., Politi A., Vassalli M.* // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 84. № 10. P. 2144–2147.
2. *Lepri S., Livi R., Politi A.* // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. № 10. P. 1896–1899.
3. *Безручко Б.П., Прохоров М.Д.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. В. 12. С. 51–57.
4. *Broido D.A., Ward A., Mingo N.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. № 1. P. 014308–1–014308–8.
5. *Celata G.P.* Heat Transfer & Fluid Flow in Microchannels. N.Y.: Begell House, 2004. V. 1. 280 p.
6. *Gendelman O.V., Savin A.V.* // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 84. № 11. P. 2381–2384.
7. *Mai T., Narayan O.* // Phys. Rev. E. 2006. V. 73. № 6. P. 061202–061202–7.
8. *Кривцов А.М.* Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. М.: Физматлит, 2007. Т. 1. 304 с.
9. *Кривцов А.М., Мясников В.П.* // Изв. РАН. МТТ. 2005. № 1. С. 87–102.
10. *Кривцов А.М.* // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. В. 6. С. 64–69.