

01;05

О возможности нелинейного распространения тепловых импульсов в твердых телах при дебаевских температурах

© К.П. Зольников, Р.И. Кадыров, И.И. Наумов,
С.Г. Псахье, Г.Е. Руденский, В.М. Кузнецов

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

Поступило в Редакцию 19 ноября 1998 г.

В рамках метода молекулярной динамики показано, что в трехмерных кристаллических материалах возможен баллистический режим переноса тепла при температурах порядка дебаевских.

Как известно, при определенных условиях в кристаллах возможно распространение тепла на макроскопические расстояния со скоростью порядка звуковой. Так, при очень низких температурах (~ 4.2 К) в сверхчистых диэлектриках возможна генерация второго звука — волновых колебаний температуры [1–3].

В основе этого явления лежит ”вымерзание” процессов переброса и сохранение квазиимпульса фононов, а также большая (порядка длины образца) длина свободного пробега последних. При низких температурах в условиях относительно высокой тепловой накачки возможно и нелинейное (солитонное) распространение тепловых импульсов, когда эффекты дисперсии (приводящие к расплыву пакета фононов) и нелинейные эффекты (приводящие к автолокализации пакета) компенсируют друг друга. Такие нелинейные импульсы наблюдались, например, в чистом NaF в интервале температур от 1.4 до 4.2 К вдоль направлений высокой симметрии [100] [2]. Характерно, что температура в импульсах принимала лишь значения из вполне определенного интервала, зависящего от температуры кристалла. Так, при температуре кристалла 2 К температура в импульсах лежала в пределах 5 и 10 К.

В настоящем сообщении представлены результаты компьютерного моделирования, указывающие на возможность баллистического распро-

странения тепла в твердых телах и при достаточно высоких (дебаевских) температурах, когда длина свободного пробега фононов невелика и составляет всего несколько длин его волн.

Методами молекулярной динамики [4,5] исследовались трехмерные кристаллиты Al и Ni, содержащие около 8000 атомов. Быстрый локальный разогрев моделировался заданием поверхности кристалла температуры, существенно превышающей среднюю температуру по образцу. Вдоль направления распространения теплового возмущения (перпендикулярного поверхности) использовались жесткие граничные условия, а в двух других — периодические. Межатомное взаимодействие исследуемых кристаллитов описывалось на основе многочастичного потенциала, разработанного в рамках модельного функционала электронной плотности [6,7].

При "моментальном разогреве" выбранной области, начиная с температуры 50 К и выше, в кристаллитах Ni и Al формируются солитоноподобные импульсы, характеризующиеся устойчивой формой и амплитудой. Как и обычные солитоны [8], они практически не меняют свою форму при движении по образцу и восстанавливаются после взаимодействия друг с другом.

Характер распространения возмущения, сформированного локальным разогревом свободной поверхности (110) Al до 8000 К, показан на рис. 1. Видно, что от свободной поверхности (ей отвечает начало координат) распространяется тепловой фронт, впереди которого с большей скоростью движутся солитоноподобные импульсы. Первый импульс, обладающий наибольшей амплитудой, распространяется с большей скоростью (8200 м/с), чем импульсы с меньшей амплитудой. Оценки скорости распространения теплового фронта, сделанные в настоящей работе, по порядку величин согласуются с теоретическими расчетами [9].

Увеличение температуры локального разогрева приводит к увеличению амплитуды и скорости распространения импульса. Из анализа распределения направлений атомных скоростей таких импульсов следует, что они всегда представляют собой области либо сжатия, либо растяжения.

Эффекты быстрого и сильного локального разогрева (~ 10000 К) поверхности создаются, например, при облучении материала высокоэнергетическими пучками заряженных частиц [10,11], применяемыми для изменения свойств материала в нужном для практики направлении.

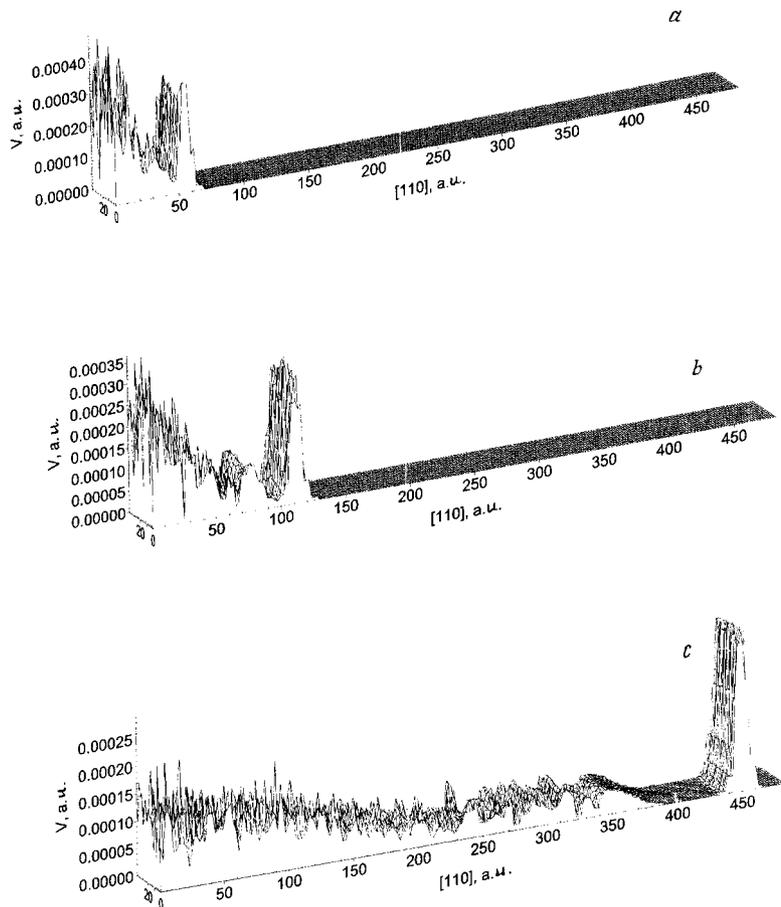


Рис. 1. Положения солитонообразного импульса, инициированного разогревом свободной поверхности алюминия, в различные моменты времени.

Так, в [10] наблюдалась биполярная волна (представляющая собой волну сжатия и растяжения), сформированная путем быстрого разогрева очень тонкого поверхностного слоя низкоэнергетическими сильноточными электронными пучками, подобно тому как в наших расчетах структура

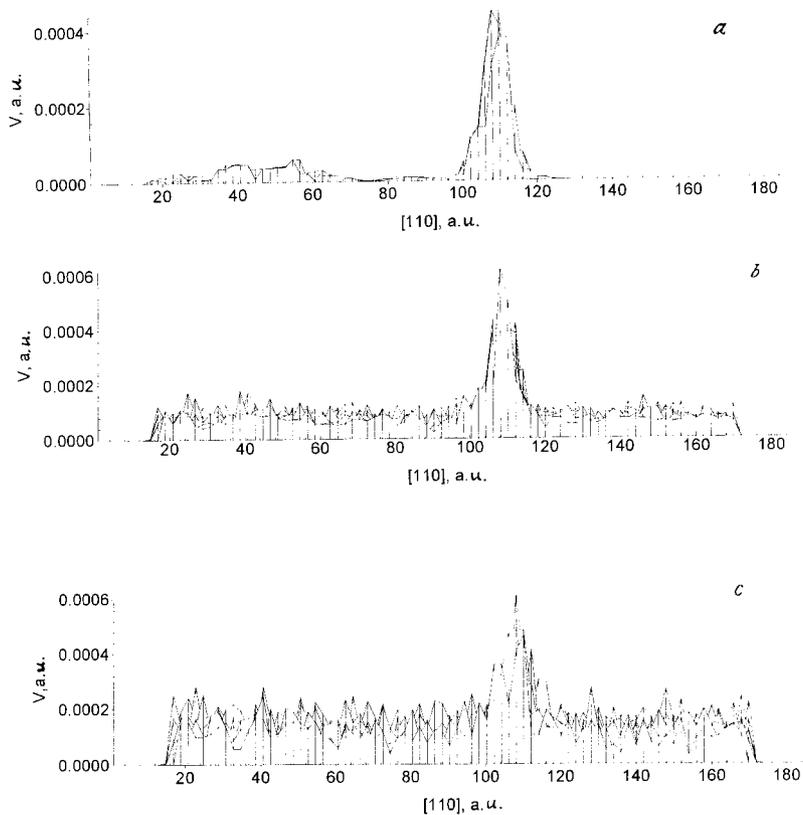


Рис. 2. Изменения формы солитонообразного импульса в Ni при различных температурах образца: *a* — $T = 0$ К; *b* — $T = 100$ К; *c* — $T = 300$ К.

уединенных импульсов во многом зависела от условий энергетической накачки, так и в работе [10] профиль биполярной волны во многом определялся режимом облучения.

Имея в виду, что при механическом нагружении и при локальном разогреве формируются уединенные импульсы с подобными характеристиками, мы исследовали влияние температуры кристалла на характер распространения импульсов, индуцированных высокоскоростным сжа-

тием при температурах образца 0, 100 и 300 К (рис. 2) (конкретно рассчитывался кристаллит Ni). Оказалось, что температура образца практически не влияет на скорость распространения солитоноподобных импульсов, но достаточно сильно сказывается на форме импульса. В частности, при ненулевых температурах возникают флуктуации гребня солитоноподобных импульсов, а сам он расширяется (рис. 2, *b, c*). При 300 К, например, его ширина на половине высоты примерно в два раза больше, чем при 0 К.

Таким образом, даже при температурах порядка дебаевской перенос тепла в кристаллах может осуществляться в баллистическом режиме (температура Дебая в Ni, например, близка к 300 К). Переносчиками тепла выступают солитоноподобные импульсы, не испытывающие сколь-нибудь заметного затухания.

Следует заметить, что, хотя нами моделировались металлы, выводы работы более всего применимы к диэлектрикам, где фононный механизм теплопроводности является доминирующим.

Список литературы

- [1] *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. М.: Мир, 1979. Т. 2. 424 с.
- [2] *Narayanamurti V., Varma С.М.* // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 25. P. 1105–1107.
- [3] *Tappert F.D., Varma С.М.* // Phys. Rev. Lett. 1970. V. 25. P. 1108–1110.
- [4] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. В. 3. С. 42–46.
- [5] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Сараев Д.Ю.* // ФГВ. 1997. Т. 33. № 2. С. 43–46.
- [6] *Kuznetsov V.M., Rudenskii G.E., Kadyrov R.I., Kaminskii P.P.* // J. Mater. Sci. Technol. 1998. V. 14. P. 429–433.
- [7] *Kuznetsov V.M., Kadyrov R.I., Rudenskii G.E.* // J. Mater. Sci. Technol. 1998. V. 14. P. 320–322.
- [8] *Псахье С.Г., Зольников К.П., Коростелев С.Ю.* // Письма в ЖТФ. 1995. Т. 21. В. 13. С. 1–5.
- [9] *Соболев С.Л.* // Успехи физических наук. 1997. Т. 167. № 10. С. 1095–1106.
- [10] *Лыков С.В., Итин В.И., Месяц Г.А., Проскуровский Д.И., Ротштейн В.П.* // Докл. АН. 1990. Т. 310. № 4. С. 858–860.
- [11] *Итин В.И., Кашинская И.С., Лыков С.В., Озур Г.Е., Проскуровский Д.И., Ротштейн В.П.* // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. В. 5. С. 89–92.