

Введение в нанотеплофизику

Теплофизика наносистем (лекция 1)

Лю Шисян

lyu@bmstu.ru

Кафедра теплофизики (Э6)
МГТУ им. Н.Э. Баумана



- 1 Информация курса
- 2 Классическая теплофизика
- 3 Основные носители
- 4 Нанотеплофизика

Содержание

- 1 Информация курса
- 2 Классическая теплофизика
- 3 Основные носители
- 4 Нанотеплофизика

Основатель курса

Хвесюк Владимир Иванович

- Доктор технических наук
- Профессор
- Заведующий кафедрой с 1996 по 2016 год
- Основатель курса «Нанотеплофизика»



Фото: В.И. Хвесюк

Контакты: khvesyuk@bmstu.ru

Основные публикации:

- Хвесюк В. И. *Статистическая термодинамика: Учебное пособие*. М.: НИЦ «Инженер», 2002.
- Хвесюк В. И. *Статистическая термодинамика (квантовые статистики)*. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2014.
- Хвесюк В. И., Скрябин А. С. // *Теплофизика высоких температур*, 2017, т. 55, № 3, с. 447–471.

Литература

- ① Дмитриев А. С. *Введение в нанотеплофизику*, 2015.
- ② Massoud Kaviani, *Heat Transfer Physics*, 2nd ed., Cambridge University Press, 2014.
- ③ Z.M. Zhang, *Nano/Microscale Heat Transfer*, Springer, Cham, 2020.
- ④ G. Chen, *Nanoscale Energy Transport and Conversion*, Oxford University Press, 2005.
- ⑤ G.P. Srivastava, *The Physics of Phonons*, 2nd ed., CRC Press, Boca Raton, 2022.
- ⑥ S.L. Shindé, G.P. Srivastava (eds.), *Length-Scale Dependent Phonon Interactions*, Springer, New York, 2014.
- ⑦ V.V. Mitin, D.I. Sementsov, N.Z. Vagidov, *Quantum Mechanics for Nanostructures*, n.d.

Программа курса

- Введение в нанотеплофизику
- Основы кристаллической структуры
- Теория упругих волн
- Теория атомных колебаний
- Квантовая теория фононов
- Ангармонические взаимодействия
- Уравнение переноса Больцмана
- ...

Содержание

- 1 Информация курса
- 2 Классическая теплофизика
- 3 Основные носители
- 4 Нанотеплофизика

Классическая теплофизика

Классическая теплофизика — наука, изучающая:

- ★ зависимости свойств веществ от температуры, объёма, давления;
- ★ процессы тепло- и массообмена как внутри тел, так и между различными объектами;
- ★ перенос энергии в газах, жидкостях, твёрдых телах и излучением.

Теплофизика включает две основные части:

- ① **Термодинамика** — изучает равновесные состояния и переходы, например фазовый переход жидкость \leftrightarrow пар. Рассматриваются изменения температуры, объёма, давления. Обычно анализируются изолированные и идеальные системы.
- ② **Тепло- и массообмен** — рассматривает случаи с неоднородным распределением параметров (температуры, плотности и т.д.), что приводит к переносу тепла и массы.

Феноменологические теории в теплофизике

Феноменологические теории — это модели, в которых вещество рассматривается как **непрерывная среда**, без учёта его атомной структуры.

☞ Основная цель — установить **общие закономерности** между макроскопическими параметрами: температурой, давлением, объёмом, тепловым потоком и др.

☞ Законы формулируются на основе **экспериментальных наблюдений**, без анализа микроскопических процессов. Например:

- Термодинамика: $pV = RT$ — уравнение состояния идеального газа;
- Теория теплопроводности: $\vec{q} = -k\nabla\vec{T}$ — закон Фурье.

Ограничение: такие теории не учитывают **микроструктуру вещества**, и не позволяют теоретически предсказать свойства материалов.

Феноменологический подход остаётся важным инструментом при инженерных расчётах и описании макроскопических процессов.

Статистическая теория в теплофизике

Статистическая теория учитывает **микроскопическое строение вещества** и описывает поведение больших систем с помощью распределения частиц по энергиям.

★ В классической теплофизике методы статистики применяются для:

- определения теплопроводности, вязкости и диффузии в газах;
- анализа теплопроводности твёрдых тел.

★ В нанотеплофизике статистическая теория становится **основным инструментом** для описания процессов переноса на атомарном уровне.

Преимущества: позволяет **теоретически предсказывать** свойства веществ (теплопроводность, сверхпроводимость, сверхтекучесть и др.), а также выводить **фундаментальные законы** (уравнение состояния, законы излучения и пр.).

Методы статистической физики играют ключевую роль в исследовании наноструктур.

Феноменологическое и статистическое описание переноса

Феноменологический закон	Статистическое выражение
Закон Фика: $\mathbf{J} = -D\nabla c$	Диффузия: $D \sim \frac{1}{3}l\bar{v} \quad [\text{м}^2/\text{с}]$
Закон Ньютона: $\tau_{ij} = \mu \frac{du_i}{dx_j}$	Вязкость: $\mu \sim \frac{1}{3}\rho l\bar{v} \quad [\text{Па} \cdot \text{с}]$
Закон Фурье: $\mathbf{q} = -\kappa\nabla T$	Теплопроводность: $\kappa \sim \frac{1}{3}c_v\rho l\bar{v} \quad [\text{Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})]$

Макроскопическое уравнение теплопроводности

* Закон Фурье:

$$\vec{q} = -\kappa \nabla T$$

где \vec{q} — плотность теплового потока, κ — теплопроводность, ∇T — градиент температуры.

* Уравнение теплопроводности:

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \dot{q} = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}$$

- \dot{q} — объёмная плотность тепловыделения
- ρc_p — объёмная теплоёмкость

★ Стационарный случай, без источника, $\kappa = \text{const}$:

$$\nabla^2 T = 0 \quad (\text{уравнение Лапласа})$$

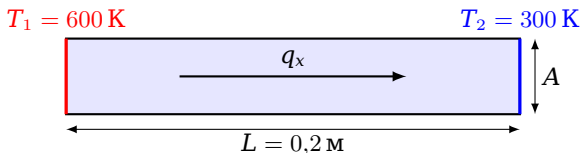
★ Типовые граничные условия:

- 1 Постоянная температура
- 2 Постоянный тепловой поток
- 3 Конвективный теплообмен

Задача: Одномерная стационарная теплопроводность

Условия:

- Однородный стержень длиной $L = 0,2 \text{ м}$
- Площадь поперечного сечения: $A = 0,001 \text{ м}^2$
- Температура на концах: $T_1 = 600 \text{ К}$, $T_2 = 300 \text{ К}$
- Теплопроводность постоянна: $\kappa = 150 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$
- Боковая поверхность теплоизолирована
- Процесс — стационарный, одномерный
- Без внутреннего тепловыделения



Требуется:

- Найти распределение температуры $T(x)$ вдоль стержня
- Определить плотность теплового потока q_x

Содержание

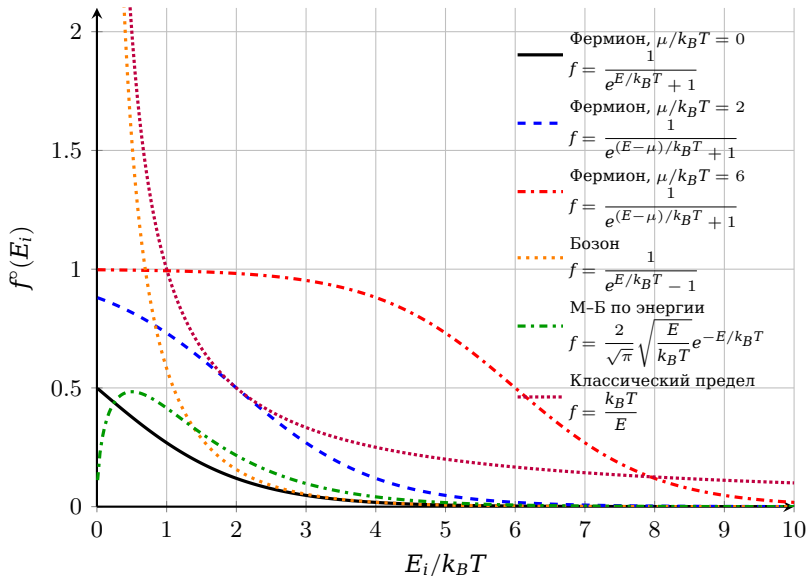
- 1 Информация курса
- 2 Классическая теплофизика
- 3 Основные носители**
- 4 Нанотеплофизика

Сравнение основных носителей энергии

Свойства	Фонон	Электрон
Тип частиц	Бозон (Бозе-Эйнштейна)	Фермион (Ферми-Дирака)
Уравнение энергии	$E = \hbar\omega$	$E = E_k + E_p, \quad E_k = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m}$
Функция распределения	$f = \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1}$	$f = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1}$
Носимая энергия	Квант решеточной колебательной энергии	Кинетическая + энергия зоны проводимости

Свойства	Частица жидкости	Фотон
Тип частиц	Классическая частица (Максвелла-Больцмана)	Бозон (Бозе-Эйнштейн)
Уравнение энергии	$E = \frac{p^2}{2m} + E_{\text{внутр}}$	$E = \hbar\omega$
Функция распределения	$f = \frac{1}{e^{E/k_B T}}$	$f = \frac{1}{e^{E/k_B T} - 1}$
Носимая энергия	Механическая + внутренняя энергия	Энергия электромагнитного поля

Сравнение распределений носителей



От микросостояния к макросостоянию: пример с фононами

- * Вероятность каждого микросостояния j задаётся функцией распределения f_j ;
- * Макроскопическая величина вычисляется как среднее:

$$\langle \phi \rangle = \sum_j \phi_j f_j$$

► Применение к системе фононов:

- Распределение Бозе-Эйнштейна для фононов:

$$f_{ph}(\boldsymbol{\kappa}, s, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_s(\boldsymbol{\kappa})}{k_B T}\right) - 1}$$

- Плотность энергии фононов:

$$E_{ph} = \sum_{\boldsymbol{\kappa}, s} \hbar\omega_s(\boldsymbol{\kappa}) f_{ph}$$

- Плотность теплового потока фононов:

$$\mathbf{q}_{ph} = \sum_{\boldsymbol{\kappa}, s} \hbar\omega_s(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{v}_s(\boldsymbol{\kappa}) f_{ph}$$

- Численная плотность фононов:

$$n_{ph} = \sum_{\boldsymbol{\kappa}, s} f_{ph}$$

Содержание

- 1 Информация курса
- 2 Классическая теплофизика
- 3 Основные носители
- 4 Нанотеплофизика**

Что такое нанотеплофизика?

Нанотеплофизика — это современное направление теплофизики, посвящённое изучению переноса тепла и термодинамических свойств в системах, хотя бы один размер которых находится в нано- или микрометровом диапазоне.

В таких системах классические законы (например, закон Фурье) теряют применимость, и становятся необходимыми методы статистической физики, квантовой теории твёрдого тела и атомарного моделирования.

Основные научные задачи:

- Учёт сложных фонон-фононных взаимодействий: трёх- и четырёхфононные процессы для графена.
- Исследование влияния размера системы, шероховатости границ, анизотропии, локальных источников тепла и других факторов на теплопроводность.
- Разработка и применение численных методов: молекулярная динамика (MD), теория функционала плотности (DFT), уравнения переноса Больцмана (BTE).

Пространственное ограничение: режимы переноса тепла

Число Кнудсена:

$$Kn = \frac{l}{L}$$

где l — длина свободного пробега фононов, L — характерный размер системы.

Режим переноса	Характеристика
Диффузионный ($Kn \ll 1$)	Применим закон Фурье. Перенос тепла обусловлен частыми рассеяниями фононов внутри материала.
Квази-баллистический ($Kn \sim 1$)	Необходимо уравнение Больцмана. Учитываются рассеяния внутри объёма и взаимодействие с границами.
Баллистический ($Kn \gg 1$)	Рассеяния внутри объёма несут существенны; доминируют границы. Используются методы трассировки лучей.

Количественные свойства объемного кремния

Temperature (K)	5	10	20	100	300	1000
Thermal conductivity κ (W/m K)	424	2110	4940	884	148	31.2
Specific heat c_p (J/kg K)	0.034	0.28	3.43	260	712	921
Mean free path Λ (m)	2.7×10^{-3}	1.6×10^{-3}	3.1×10^{-4}	7.3×10^{-7}	4.5×10^{-8}	7.3×10^{-9}
Scattering rate $1/\tau$ (rad/s)	2.2×10^6	3.7×10^6	1.9×10^7	8.2×10^9	1.3×10^{11}	8.3×10^{11}
Thermal diffusivity α (m ² /s)	5.4	3.3	0.62	1.5×10^{-3}	8.9×10^{-5}	1.5×10^{-6}

Длина свободного пробега фононов зависит от температуры!

Для определения режима теплопереноса нужно учитывать и характерный размер, и температуру.

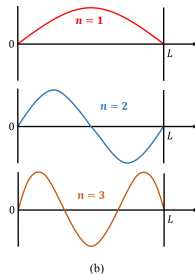
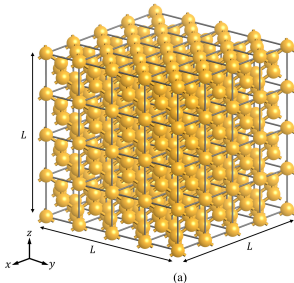
Квантовое ограничение

Размеры системы сравнимы с длиной волны фононов: $\lambda \sim L$.

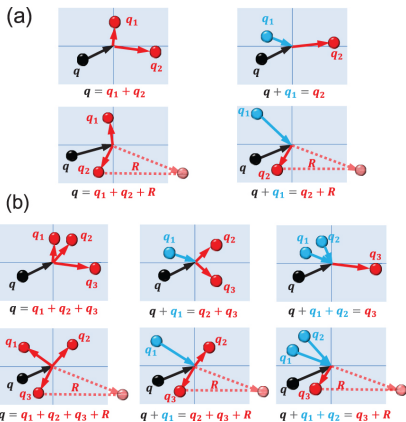
- Волны с длиной $\lambda > L$ не могут существовать в системе — они подавляются.
- Допускаются только стоячие волны, длины которых удовлетворяют условию:

$$L = n \frac{\lambda}{2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

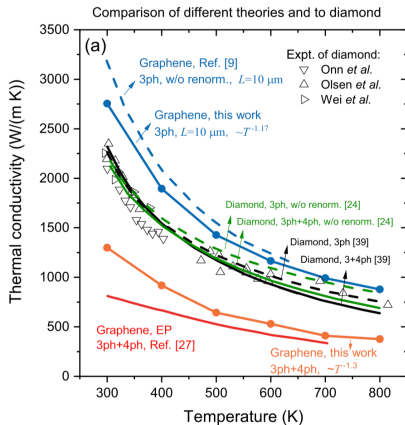
- Энергетические уровни квантуются, а распределение фононов становится ступенчатым (дискретным).



Трёхфононные и четырёхфононные взаимодействия

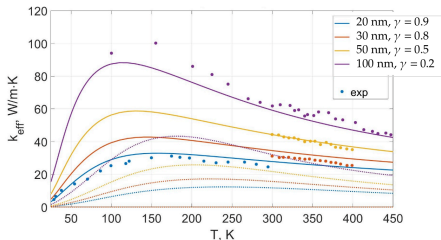
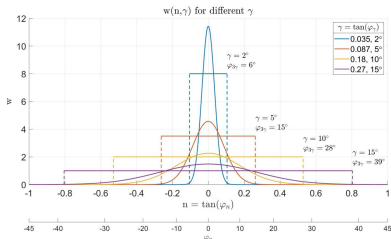
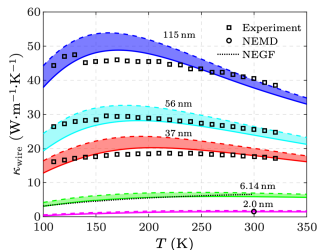
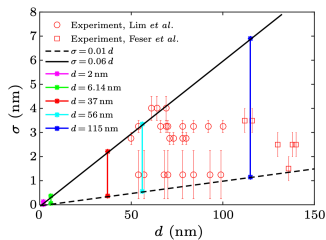


Схематическое представление
трёх- и четырёхфононных
процессов

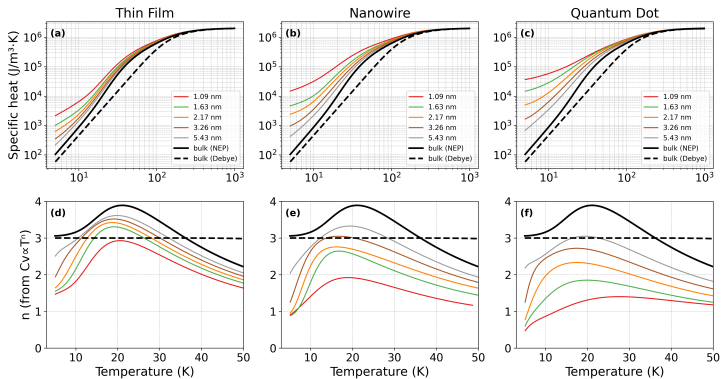


Теплопроводность графена с
учетом трёх- и четырёхфононных
процессов

Влияние пространственного ограничения на теплопроводность

Теплопроводность
кремниевых нанопленокТеплопроводность
кремниевых нанопленок

Влияние квантовых эффектов на теплоёмкость



- В наноструктурах из-за квантового ограничения и поверхностных мод теплоёмкость при низких температурах оказывается выше, чем в объёмных кристаллах.
- Введена температурно-зависимая степень $n(T)$ в законе:

$$C_V \sim T^{n(T)}$$