

УДК 536.62

Влияние процессов релаксации на перенос тепла, возникающего под действием интенсивных потоков энергии

© 2010 М.М.Якункин

Московский институт электроники и математики
E-mail: yakunkin@mail.ru
Поступила в редакцию 15 марта 2010 г.

Представлена феноменологическая модель эволюции температурного поля и исследовано влияние процессов релаксации, обусловленных термически активируемыми дефектами и инерцией среды, на теплопроводность твердых тел под действием интенсивных потоков энергии.

Ключевые слова: перенос тепла, релаксация, лазерное и электронное облучение.

Phenomenological model of temperature field evolution and effect of the relaxation processes caused by thermally activated defects and inertia of the medium on the thermal conductivity of solids under the action of intense energy flows is presented.

Keywords: heat transfer, relaxation, laser and electron irradiation.

Введение

Одной из проблем феноменологической теории высокотемпературной теплопроводности твердых тел является учет влияния процессов релаксации на перенос тепла в условиях воздействия интенсивных электронных или лазерных пучков. В последнее время интерес к этой проблеме возрос в связи с переходом в нано- и пикосекундный диапазоны длительности импульсного воздействия и радиочастотный диапазон следования импульсов [1-3].

Если пренебречь малыми временами электронно-ионной релаксации [4], то в металлических кристаллах можно выделить два экспериментально наблюдаемых релаксационных процесса. Первый связан с конечным временем $\tau_d \sim D/l_d^2$ (D — коэффициент диффузии, l_d — расстояние между источниками (стоками) термически активируемых дефектов) установления равновесной концентрации n_d^e термически активируемых дефектов (вакансий, активируемых

комплексов), второй — со временем τ образования и рассасывания температурных флуктуаций. Так как эти процессы удовлетворяют предельным соотношениям $\tau_d \gg \tau_T$ и $\tau \ll \tau_T$ ($\tau_T \sim a/l^2$ — масштаб гидродинамической шкалы, на которой протекает тепловой процесс, l — геометрический размер системы, $a = \lambda/C_p\rho$ — коэффициент температуропроводности), то способ их описания оказывается различным.

В литературе подробно изучено влияние кинетики установления n_d^e на величину высокотемпературной теплоемкости C_p [5-7]. Было отмечено [8], что при нагреве интенсивными периодическими источниками тепла образец действует как фильтр, выделяющий релаксационный процесс. В этом случае диффузионная кинетика установления n_d^e и тепловой процесс протекают на крупномасштабной (гидродинамической) временной шкале, а трудности аналитического описания связаны лишь с линеаризацией исходной нелинейной краевой задачи.

Другая ситуация возникает при учете инерции среды путем введения в феноменологическое описание процесса теплопроводности малого времени τ , характеризующего эффект релаксации на мелкомасштабной (флуктуационной) временной шкале. Такое смешение двух временных шкал не вполне соответствует известной процедуре вывода уравнений дифференциального баланса [9], согласно которой в масштабе гидродинамической шкалы быстрые временные флуктуации усредняются и исключаются из рассмотрения. Однако оно часто используется при построении моделей, в которых при переходе к гидродинамическому приближению сохраняются члены, характеризующие мелкомасштабный процесс [10-13]. Очевидно, что если существует инерция среды τ , то всегда в процессе теплового процесса текущее значение температуры будет отставать от значения, рассчитанного на гидродинамической шкале. Связь между двумя явлениями — теплопроводностью и быстрым релаксационным процессом с характерным временем τ — можно установить, рассматривая их как единый флуктуационно-диссипативный процесс. Однако в твердых телах переход к количественному описанию такого процесса с использованием “первых принципов” связан с известными трудностями [14].

В данной работе рассмотрена полуфеноменологическая модель, позволяющая упростить вывод аналитических выражений, описывающих эволюцию температурного поля к полю, описываемому законом Фурье.

Влияние на теплопроводность процесса релаксации термически активируемых дефектов ($\tau_d \gg \tau_T$)

Впервые процесс релаксации термически активируемых дефектов был исследован путем измерения высокотемпературной теплоемкости модуляционным методом [5], поэтому для простоты рассматривается случай поверхностного нагрева в вакууме пленок толщиной l периодическим тепловым источником $q(t) = 2q_0 \operatorname{Re}(e^{xri\omega t})$.

Влияние кинетических свойств дефектов на затухание температурных колебаний учитывается введением в дифференциальное уравнение теплового баланса скорости изменения внутренней энергии в единице объема $\Delta \dot{n}_d = E_d^f \Delta \dot{n}_d$, где n_d — текущая концентрация дефектов, E_d^f — энергия образования дефектов.

Рассматривается одномерное уравнение теплопроводности

$$\rho C_l \frac{\partial T}{\partial t} + \beta_d \frac{\partial(\Delta n_d)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2};$$

$$T = T(t, x);$$

$$x \in [0, l];$$

$$t \geq 0,$$

где $\beta_d = \rho E_d^f$; C_l — решеточная составляющая теплоемкости.

Известно [3, 15], что при таком нагреве на больших временах возникает квазистационарный тепловой режим $T(t, x) = \bar{T}(x) + \Theta(t, x)$, при котором температура осциллирует около среднего значения $\bar{T}(x)$. Поскольку при квазистационарном тепловом режиме изменение $\bar{T}(x)$ по глубине образца незначительно, теплофизические характеристики материала можно считать постоянными. Условие существования установившегося квазистационарного режима имеет вид

$$\exists \Delta > 0 : \lim_{t \rightarrow 0} \int_t^{t+\Delta} \Theta(\tau, x) d\tau = 0.$$

В случае, если функция $\bar{T}(x)$ близка к линейной, величиной $T''(x)$ можно пренебречь, и тогда уравнение для осциллирующей составляющей квазистационарного теплового режима с учетом конечного времени релаксации термически активируемых дефектов можно записать как

$$\rho C_l \frac{\partial \Theta}{\partial t} + \beta_d \frac{\partial(\Delta n_d)}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2};$$

$$\Theta = \Theta(t, x),$$

(1)

$$x \in [0, l],$$

$$t \geq 0,$$

Адекватные эксперименту граничные условия определяются в предположении, что основной механизм потери тепла связан с излучением с поверхности образца в вакуум

$$\left[-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sigma \varepsilon (T^4 - T_0^4) \right]_{x=0} = q(t),$$

$$\left[\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sigma \varepsilon (T^4 - T_0^4) \right]_{x=l} = 0.$$

При $|\Theta| \ll \bar{T}$, $T \approx \bar{T}$ и можно пренебречь величиной Θ/T и ее степенями. В результате краевые условия для функции $\Theta(t, x)$ линеаризуются

$$\begin{aligned} \left(-\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial x} + \alpha \Theta\right)_{x=0} &= \bar{q}(t), \\ \left(\lambda \frac{\partial \Theta}{\partial x} + \alpha \Theta\right)_{x=l} &= 0, \\ \bar{q}(t) &= -\bar{q} + q(t), \\ \bar{q} &= \sigma \varepsilon \left[\bar{T}^4(0) - T_0^4\right] - \lambda \bar{T}'_x(0), \end{aligned} \quad (2)$$

где $q(t)$ и \bar{q} — текущий и средний интегральный за период тепловой поток соответственно; T_0 — температура стенок камеры; σ — коэффициент Стефана-Больцмана; ε — степень черноты; $\alpha = 4\sigma\varepsilon\bar{T}^3(0)$ — линеаризованный коэффициент тепловых потерь.

В приближении “времени релаксации” уравнение кинетики установления равновесной концентрации дефектов имеет вид

$$\frac{\partial(\Delta n_d)}{\partial t} = -\frac{(n_d - n_d^e)}{\tau_d}, \quad (3)$$

где $n_d^e = \bar{n}_d^e + \Phi\Theta$ — равновесная концентрация дефектов при температуре $T(t,x)$; $\bar{n}_d^e = n_0 \exp(-E_d^f/k\bar{T})$ — равновесная концентрация дефектов при температуре $\bar{T}(x)$; $\tau = \tau_0 \exp(E_d^m/k\bar{T})$ — время релаксации; E_d^f — энергия миграции дефектов; $\Delta n_d = n_d - n_d^e$; $\Phi = \bar{n}_d^e E_d^f/k\bar{T}^2$.

С использованием интегрального преобразования Лапласа решение системы (1)-(3) при нулевых начальных условиях $\Theta(0,x)=0$, $\Delta n_d(0,x)=0$ можно представить в виде контурного интеграла

$$\Theta(t,x) = \frac{\alpha^{-1} p_0 + i\omega}{2\pi i} \int_{p_0 - i\infty}^{p_0 + i\infty} \tilde{q}(p) H(p,x) \exp(pt) dp, \quad (4)$$

где $H(p,x) = A(p,x)/\Delta(p)$;

$$\begin{aligned} A(p,x) &= h(p) \operatorname{ch}[(1-x/l)\beta] + \operatorname{sh}[(1-x/l)\beta]; \\ \Delta(p) &= 2h \operatorname{ch}\beta + (1+h^2) \operatorname{sh}\beta; \quad h(p) = \alpha^{-1} \lambda \sqrt{p/a(p)}; \\ \beta(p) &= l \sqrt{p/a(p)}; \quad a(p) = a_l / [1 + C_d^e/C_l(1+p\tau)]; \\ \tilde{q}(p) &= q_0 / (p \pm i\omega). \end{aligned}$$

Согласно теории вычетов, основной вклад в интеграл дают точки $p \pm i\omega$. Следовательно, решение задачи (1)-(3) имеет вид

$$\Theta(t,x) = \frac{2q_0}{\alpha} \operatorname{Re} [H(i\omega, x) \exp(i\omega t)], \quad (5)$$

где коэффициент теплопроводности $a(i\omega) = a_l / [1 + C_d^e/C_l(1+i\omega\tau_d)]$ оказывается комплексной величиной.

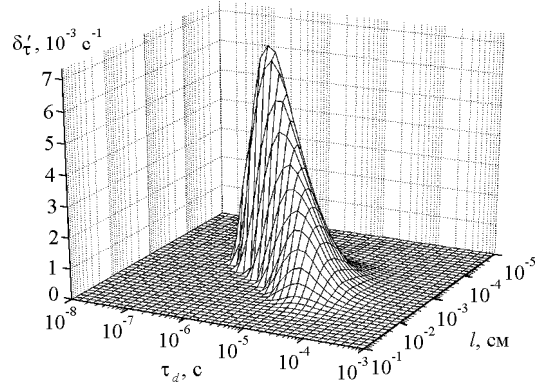


Рис.1. Изменение производной коэффициента затухания $\delta'_\tau = -\partial\delta/\partial\tau$ колебательной составляющей температурного поля в зависимости от времени релаксации дефектов τ_d и толщины l образца молибдена при средней температуре образца 2000 К.

Величина $a(i\omega)$ принимает действительные значения a_l при высокой частоте колебаний температуры $\omega\tau_d \gg 1$, когда не успевает установиться равновесная концентрация дефектов n_d^e , и в квазиравновесных условиях $a = \lambda/\rho(C_l + C_p^d)$ на низких частотах $\omega\tau_d \ll 1$. Поэтому анализ влияния процесса релаксации на теплопроводность удобно проводить с использованием коэффициента затухания колебаний температуры $\delta = (\Theta_1^a - \Theta_2^a)/\Theta_1^a$, где $\Theta_1^a = \max \Theta(t,0)$, а $\Theta_2^a = \max \Theta(t,l)$. Анализ соотношения (5) показывает, что параметром, чувствительным к изменению времени релаксации, является не сам коэффициент затухания δ , а его производная по времени релаксации $\delta'_\tau = -\partial\delta/\partial\tau_d$. Очевидно, что если релаксационный эффект отсутствует, то $\delta'_\tau = 0$ во всем диапазоне изменения значений (ω, l) .

Зависимость $\delta'_\tau(\tau_d, l)$ в области существования релаксационного эффекта показана на рис.1. Расчет проводился для молибдена при $\bar{T} = 2000$ К при величине равновесного вклада дефектов в теплоемкость $C_d^e/C_l = 0,1$ и частоте колебаний $\omega = 1$ МГц. Величина τ_d считалась независимой переменной. Как видно, зависимость $\delta'_\tau(\tau_d, l)$ носит экстремальный характер, причем $\max \delta'_\tau$ достигается при $\omega\tau_d \approx 1$ в диапазоне толщин образца $l \approx 5-15$ мкм.

Влияние на теплопроводность инерции среды ($\tau \ll \tau_T$)

При выводе соотношений (1), (3) предполагалось, что дефекты образуют подсистему, слабо связанную с кристаллом, так что ее релаксационные свойства можно рассчитывать независимо. Более сложная ситуация возникает при учете релаксационных свойств самого кристалла (инерции среды).

Считается [10-13], что в этом случае тепловые процессы под действием интенсивных потоков энергии могут быть описаны релаксационным выражением для потока [16,17]

$$\tau \dot{q} + q = -\lambda T'_x \quad (6)$$

и связанным с ним уравнением теплопроводности гиперболического типа

$$\hat{L}T = 0, \quad (7)$$

где оператор $\hat{L} = \tau \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} - a \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $T = T(t, x)$.

Подобное уравнение и его модификации подробно рассмотрены в [10-13,18-26]. В нашем случае важно отметить, что закон сохранения тепла, который определяет характер возможных решений, в этом уравнении отсутствует. Действительно, после преобразования Фурье по переменной x ур-е (7) принимает вид

$$\left(\tau \frac{d^2}{dt^2} + \frac{d}{dt} - a\zeta^2 \right) \hat{T} = 0, \\ \hat{T} = \hat{T}(t, \zeta),$$

откуда при $\zeta=0$ следует, что интегральное количество тепла Q , поглощенного образцом, равно

$$\hat{T}(t, 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} T(t, x) dx = \\ = \hat{T}_-(0) + \hat{T}_+(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) = \frac{Q}{C_p \rho} \quad (8)$$

и $\dot{Q} \neq 0$, то есть закон сохранения ($\dot{Q} = 0$) не выполняется. Отсюда следует, что решению ур-я (7) нельзя придать вероятностный смысл и нормировать его на константу. Известная вероятностная интерпретация такого решения [27] описывает только инвариантную во времени часть Фурье-образа решения $\hat{T}_-(0)$, которая удовлетворяет условию нормировки. Однако так как обе части решения ограничены и ведут себя одинаково при $t \rightarrow \infty$, то устранить по физическим соображениям из рассмотрения решение $\hat{T}_+(0) \exp(-t/\tau)$, которое приводит к потере закона сохранения, не представляется возможным.

Отсутствие закона сохранения приводит к тому, что предельный переход к классическому случаю при $\tau \rightarrow 0$ отсутствует. Действительно, ур-е (7) допускает факторизацию, то есть представление оператора \hat{L} в виде произведения двух дифференциальных выражений

$$\hat{L} = \left[\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_- \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \left[\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_+ \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \right], \quad (9)$$

где $\hat{L}_\mp (\partial/\partial x) = -\Gamma \left[\mathbf{I} \mp \sqrt{\mathbf{I} + (h\partial/\partial x)^2} \right]$; $h = 2\sqrt{a\tau}$; $\Gamma = 1/2\tau$; \mathbf{I} — единичный оператор.

Предельный переход при $\tau \rightarrow 0$ к классическому случаю, то есть к описанию теплового процесса на крупномасштабной шкале с конечной скоростью переноса $V_0 = \sqrt{a/\tau}$, возможен только в уравнении для $T_-(t, x)$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \hat{L}_- \left(\frac{\partial}{\partial x} \right) \right] T_- = 0. \quad (10)$$

Решение этого уравнения, записанное через функцию Бесселя, приводится в большинстве работ. Однако, как видно из асимптотики решения

$T_-(t, x) \propto \sqrt{2/\pi r} \exp(-r)$, $r = \sqrt{(\Gamma t)^2 - (x/h)^2}$, оно описывает тепловой процесс на нехарактерных для гидродинамической шкалы прямолинейных траекториях $x=Vt$, $V \in]0, V_0[$, поэтому для нахождения наблюдаемого экспериментально отклонения от закона Фурье, то есть от траекторий $x = o(\sqrt{t})$, его удобнее представить в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - a \frac{\partial^2}{\partial x^2} + a^2 \tau \frac{\partial^4}{\partial x^4} + \dots \right) T_- = 0. \quad (11)$$

Тогда влияние инерции среды будет определяться количеством членов ряда, использованных в разложении оператора $\hat{L}_- (\partial/\partial x)$.

Из второго уравнения для $T_+(t, x)$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\tau} + a \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \dots \right) T_+ = 0 \quad (12)$$

видно, что оно описывает быстрый релаксационный процесс с характерным временем τ , протекающий на мелкомасштабной временной шкале. Отметим, что релаксационное выражение для теплового потока и уравнение непрерывности представляют собой систему

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} q \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\tau & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\lambda/\tau \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} q \\ T \end{pmatrix}, \\ du = C_p \rho dT \end{cases} \quad (13)$$

компоненты решения которой имеют вид $T = T_-(t, x)$ и $q \propto T_+(t, x)$ (с точностью до размерного множителя). Таким образом, в системе закон сохранения тепла выполняется, однако определенный с помощью выражения (6) поток q на гидродинамической шкале

$t \gg \tau$ становится равным нулю независимо от интенсивности внешнего теплового источника. Дефект уравнений (6), (7) и системы (13) связан с невозможностью одновременного использования для описания теплового процесса крупномасштабной и мелкомасштабной временных шкал. Само уравнение непрерывности, как закон сохранения, выдерживает отнюдь не любую зависимость потока от времени.

Известный способ устранения этих трудностей состоит в переходе от уравнения второго порядка к кинетическому уравнению первого порядка с матричными коэффициентами для двухкомпонентной вектор-функции \mathbf{n}

$$\frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} + \mathbf{V} \frac{\partial}{\partial x} = \mathbf{\Gamma} \mathbf{n}, \quad (14)$$

где $\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{V} = V_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_1(t, x) \\ n_2(t, x) \end{pmatrix}$, $t \geq 0$.

В этом уравнении матричный оператор скорости \mathbf{V} имеет собственные значения $V_0 = \pm(a/\tau)^{1/2}$. В силу инвариантности ур-я (14) относительно группы линейных ортогональных преобразований, это предельная скорость изменения пространственных неоднородностей в системе. Матрица $\mathbf{\Gamma}$ источника $\mathbf{\Gamma} \mathbf{n}$ обеспечивает выполнение закона сохранения в уравнении

$$\int_{-\infty}^{\infty} [n_1(t, x) + n_2(t, x)] dx = 1.$$

Из уравнения первого порядка для вектор-функции \mathbf{n} следует уравнение второго порядка для ее компонент n_1 и n_2

$$\hat{L} n_{1,2} = 0,$$

где оператор $\hat{L} = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \text{Sp} \mathbf{\Gamma} \frac{\partial}{\partial t} - \text{Det} \mathbf{V} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Из его сравнения с (7) следует, что

$$\tau = -(\text{Sp} \mathbf{\Gamma})^{-1},$$

$$a = \frac{\text{Det} \mathbf{V}}{\text{Sp} \mathbf{\Gamma}}.$$

Уравнение (14) описывает быструю кинетику установления равновесия на мелкомасштабной временной шкале с характерным временем τ . Для перехода к описанию теплового процесса на крупномасштабной временной шкале его следует записать в виде системы уравнений первого порядка с двумя базисными состояниями

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial t} &= \mathbf{H} \mathbf{n}, \\ \mathbf{H} &= \mathbf{\Gamma} - \mathbf{V} \frac{\partial}{\partial x}. \end{aligned} \quad (15)$$

Согласно [28], это уравнение описывает тепловой процесс в суперпозиционном (виртуальном) состоянии $\langle \mathbf{n} | = n_1 \langle 1 | + n_2 \langle 2 |$, где $n_{1,2}(t, x)$ имеют смысл плотности вероятности нахождения системы в различных состояниях. Недиagonальные элементы матричного оператора \mathbf{H} описывают перенос тепла между состояниями.

Для перехода к наблюдаемым (стационарным) состояниям необходимо выполнить каноническое преобразование оператора $\hat{\mathbf{H}} = \mathbf{U} \hat{\mathbf{L}} \mathbf{U}^{-1}$, где $\hat{\mathbf{H}} = \mathbf{\Gamma} - \mathbf{V} \partial / \partial x$, \mathbf{U} — унитарная матрица. В результате, для стационарных состояний $\langle \mathbf{n} |_{st} = n_- \langle I | + n_+ \langle II |$ можно записать

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{n}_{st}}{\partial t} &= \hat{\mathbf{L}} \mathbf{n}_{st}, \\ \mathbf{n}_{st} &= \begin{pmatrix} n_-(t, x) \\ n_+(t, x) \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathbf{L}} &= \begin{pmatrix} \hat{L}_- & 0 \\ 0 & \hat{L}_+ \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (15)$$

где $\mathbf{n}_{st} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{n}$, а операторы \hat{L}_{\mp} заданы равенством (9). Связь компонент вектор-функции \mathbf{n}_{st} с температурой определяется равенством $T_{\mp}(t, x) = [Q / C_p \rho] n_{\mp}$.

В ур-и (15) части решения $T_{\mp}(t, x)$ относятся к разным стационарным состояниям, вследствие чего решение $T_{\mp}(t, x)$ не входит в закон сохранения. Действительно, Фурье-образ решения $\mathbf{n}(t, \zeta)$ при $\zeta=0$ имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{n}}(t, 0) &= \exp(\mathbf{\Gamma} t) \hat{\mathbf{n}}_0 = \\ &= \mathbf{Q} (\exp \mathbf{R} t) (\mathbf{Q}^{-1} \hat{\mathbf{n}}_0) = \mathbf{Q} (\exp \mathbf{R} t) \hat{\mathbf{n}}_{st}^0, \end{aligned}$$

где $\hat{\mathbf{n}}_0$ — значение вектор-функции $\hat{\mathbf{n}}(t, 0)$ при $t=0$; $\hat{\mathbf{n}}_{st} = \mathbf{Q}^{-1} \hat{\mathbf{n}}_0$ — Фурье-образ начальных условий для стационарных состояний; \mathbf{Q} и \mathbf{Q}^{-1} — прямая и обратная матрица собственных векторов соответственно; \mathbf{R} — диагональная форма матрицы $\mathbf{\Gamma}$.

Отсюда можно выразить вектор-функцию $\hat{\mathbf{n}}(t, 0)$ через вероятности n_{\mp} нахождения системы в стационарных базисных состояниях $\langle I |$ и $\langle II |$

$$\hat{\mathbf{n}}(t, 0) = \begin{pmatrix} \hat{n}_1(t, 0) \\ \hat{n}_2(t, 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{n}_-^0 / 2 + \hat{n}_+^0 \exp(-t/\tau) \\ \hat{n}_-^0 / 2 - \hat{n}_+^0 \exp(-t/\tau) \end{pmatrix}$$

Переходя к размерным величинам $\hat{\mathbf{T}}(t, 0) = [\mathcal{Q}/(C_p \rho)] \hat{\mathbf{n}}(t, 0)$ и используя равенство $\hat{\mathbf{T}}(t, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{T}(t, x) dx$, получаем

$$\frac{\mathcal{Q}}{C_p \rho} = \int_{-\infty}^{\infty} [T_1(t, x) + T_2(t, x)] dx = \int_{-\infty}^{\infty} T_-(t, x) dx, \quad (16)$$

$$\dot{Q} = 0.$$

Зависимость скорости переноса тепла V от градиента температуры определяется через термодинамическое представление (14). Как и в классическом случае, оно может быть получено заменой $d\mathbf{n} = T ds$ и переходом к уравнению непрерывности для вектор-функции $\mathbf{s}(t, x)$

$$s'_t + (T^{-1} \mathbf{V} T \mathbf{s})'_x = \sigma \mathbf{s},$$

где $T \sigma = (\mathbf{\Gamma} + X_x \mathbf{V})$, $X_x = (\ln T^{-1})'_x$ — термодинамическая (тепловая) сила.

Преобразование Фурье по переменной x дает уравнение с двумя базисными состояниями для интегрального изменения вектор-функции $\mathbf{s}(t, x)$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}} &= \sigma \mathbf{S}, \\ T \sigma &= \begin{pmatrix} -\Gamma - X_x V_0 & \Gamma \\ \Gamma & -\Gamma + X_x V_0 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{S} &= \begin{pmatrix} S_1(t) \\ S_2(t) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\text{где } S(t) = \hat{s}(t, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} s(t, x) \exp(ix\zeta) dx \Big|_{\zeta=0}.$$

Как видно, оператор σ с точностью до размерного множителя можно рассматривать как энтропийный источник системы, находящейся в суперпозиционном состоянии $\langle \mathbf{S} | = S_1 \langle 1 | + S_2 \langle 2 |$. Для перехода к стационарным состояниям $\langle \mathbf{S} |_{st} = S_- \langle 1 | + S_+ \langle 2 |$ необходимо выполнить каноническое преобразование оператора $\sigma = \mathbf{U} \Omega \mathbf{U}^{-1}$, где \mathbf{U} — унитарная матрица:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}_{st} &= \Omega \mathbf{S}_{st}, \\ T \Omega(X_x) &= \begin{pmatrix} \Omega_+(X_x) & 0 \\ 0 & \Omega_-(X_x) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{S}_{st} &= \begin{pmatrix} S_+(t) \\ S_-(t) \end{pmatrix} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{S}, \end{aligned}$$

где $\Omega_{\pm} = \Gamma \left[-1 \pm \sqrt{1 + (hX_x)^2} \right]$ — собственные значения оператора $T \sigma$.

В силу закона сохранения (16), наблюдаемым является только состояние $\langle 1 |$, для которого величина источника $\Omega_+(X_x)$ принимает неотрицательные значения. Используя соотношение $V = d\Omega_+/dX_x$, скорость переноса тепла на прямолинейных траекториях можно выразить через тепловую силу (градиент температуры)

$$V = V_0 \left[\frac{hX_x}{\sqrt{1 + (hX_x)^2}} \right]. \quad (17)$$

Отсюда следует, что при $X_x \rightarrow \infty$ (больших градиентах температуры) скорость переноса тепла ограничена и стремится к предельному значению $V = V_0$. Оценить отклонение величины теплового потока $q = uV$ ($u = C_p \rho T$ — плотность тепловой энергии) от значения, полученного в гидродинамическом приближении, можно по соотношению

$$q = q_g \left[1 - 0,5(hX_x)^2 + \dots \right], \quad (18)$$

которое при $X_x \rightarrow 0$ (малых градиентах температуры) совпадает с величиной теплового потока q_g для классического случая. Соотношения (11), (18) описывают процесс теплопроводности с учетом поправок, возникающих за счет инерции среды. Так как предельная скорость переноса тепла в кристаллах не может превышать скорость звука, из оценки приближения к классическому описанию можно получить значения теплового потока $q \approx 10^9$ Вт/см² и длительности импульса $t_{\text{и}} \approx 10^{-10}$ с, при которых уже необходимо учитывать эффект инерции среды.

Выводы

1. Учет времени релаксации термически активируемых дефектов τ_d вводит в описание процесса переноса тепла комплексный, коэффициент теплопроводности, зависящий от τ_d . Влияние процесса релаксации на теплопроводность наиболее сильно проявляется в области частот колебаний температуры $\omega \tau_d \approx 1$.

2. Предложено уравнению теплопроводности первого порядка, удовлетворяющее закону сохранения тепла при учете релаксационных свойств кристалла (инерции среды). Существование предельной скорости переноса тепла V_0 обусловлено инвариантностью уравнения относительно группы линейных ортогональных преобразований. Найдены

поправки, позволяющие рассчитать влияние инерции среды на тепловые процессы.

Литература

1. Месяц Г.А. Импульсная энергетика и электроника. М.: Наука, 2004, 704 с.
2. Pamela M., Andrew P., Robert J. Femtosecond pump-probe nondestructive examination of materials. Rev.Sci. Instrum., 2003, v.74, No.1, p.400-406.
3. Якункин М.М., Бондаренко Г.Г. Исследование взаимодействия модулированных лазерных и электронных пучков со слоистыми средами. Металлы, 1999, № 4, с. 82 – 87.
4. Allen P. Theory of thermal relaxation of electrons in metals. Phys.Rev.Lett., 1987, v.59, p.1460-1463.
5. Van den Spye J. On temperature relaxation in metals. Phys.Stat.Sol.(a), 1970, v.39, No.2, p.659-664.
6. Крафтмахер Я.А. Релаксационный эффект в высокотемпературной теплоемкости вольфрама. ФТТ, 1985, т.27, №1, с.235-237.
7. Якункин М.М. Исследование процессов релаксации в механизме высокотемпературной теплоемкости вольфрама. ФТТ, 2004, т.46, №2, с.218-223.
8. Artamonov A.V., Yakunkin M.M. The impact of relaxation on the damping of high-frequency temperature fluctuations arising in tungsten under periodic pulsed laser heating. High Temp., 2008, v.46, No.5, p.625-629.
9. Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых процессов. М.: Наука, 1978, 128 с.
10. Joseph D.D., Preziosi L. Heat waves. Rev.Mod.Phys., 1989, v.61, No.1, p.41-73.
11. Joseph D.D., Preziosi L. Addendum to the paper "Heat waves". Rev.Mod.Phys., 1990, v.62, No.2, p.375-391.
12. Соболев С.Л. Процессы переноса и бегущие волны в локально неравновесных системах. УФН, 1991, т.161, №3, с.5-29.
13. Соболев С.Л. Локально-неравновесные модели процессов переноса. УФН, 1997, т.167, №10, с.1095-1106.
14. Балеску Р. Равновесная и неравновесная статистическая механика. М.: Мир, 1978, т.2, 399 с.
15. Углов А.А., Смуров И.Ю., Лашин А.М., Гуськов А.Г. Моделирование теплофизических процессов импульсного лазерного воздействия на металлы. М.: Наука, 1991, 287 с.
16. Maxwell J. On the dynamical theory of gases. Philos. Trans.Roy.Soc., 1987, v.157, p.49-88.
17. Cattaneo C.A. Form of heat conduction which eliminates the paradox of instantaneous propagation. Compt.Rend., 1958, v.247, p.431-433.
18. Jou D., Casas-Vazquer J., Lebon G. Extended irreversible thermodynamics. Rep.Prog.Phys., 1988, v.51, No.8, p.1105-1179.
19. Vedavarz A., Mitra K., Kumar S. Hyperbolic temperature profiles for laser surface interactions. J.Appl.Phys., 1994, v.76, No.9, p.5014-5021.
20. Frankel J.I., Vick B., Ozisik M.N. Flux formulation of hyperbolic heat conduction. J.Appl.Phys., 1985, v.58, No.9, p.3340-3345.
21. Ozisik M.N., Tzou D.Y. On the wave theory in heat conduction. J.Heat Transfer, 1994, v.116, No.9, p.526-535.
22. Vedavarz A., Mitra K., Kumar S. Hyperbolic temperature profiles for laser surface interactions. J.Appl.Phys., 1994, v.76, No.9, p.5014-5021.
23. Dai W., Nassar R. A compact finite difference scheme for solving a one-dimensional heat transport equation at the microscale. J.Comp.Appl.Mathematics, 2001, v.132, p.431-441.
24. Синкевич О.А., Семенов А.М. Решение уравнения Больцмана методом разложения функции распределения в ряд Энскога в случае наличия нескольких масштабов зависимости функции распределения от времени и координат. ЖТФ, 2003, т.73, №10, с.1-5.
25. Chen T. Numerical solution of hyperbolic heat conduction in thin surface layers. Int.J.Heat Mass Transfer, 2007, v.50, p.4424-4429.
26. Rashidi-Huyeh M., Volz S., Palpant B. Non-Fourier heat transport in metal-dielectric core-shell nanoparticles under ultra fast laser pulse excitation. Phys.Rev.B, 2008, v.78, No.12, p.1-8.
27. Кац М. Несколько вероятностных задач физики и математики. М.: Наука, 1967, 167 с.
28. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. М.: Мир, 1966, т.8, 271 с.