

弹道扩散导热的热质模型

华钰超, 曹炳阳*, 过增元

清华大学工程力学系, 热科学与动力工程教育部重点实验室, 北京 100084

* 联系人, E-mail: caoby@tsinghua.edu.cn

2014-11-17 收稿, 2015-01-06 接受, 2015-03-08 网络版发表

国家自然科学基金(51136001, 51321002, 51322603)、新世纪优秀人才支持计划和清华大学自主科研计划资助

摘要 经典的傅里叶导热定律只适用于扩散导热. 在瞬态导热过程中, 为了描述热量的波动输运, 基于热质理论建立了普适导热定律. 对于微纳尺度的器件, 由于弹道输运的作用, 傅里叶导热定律也将失效. 然而现有普适导热定律尚不能描述由弹道输运引起的非傅里叶导热现象. 本文通过边界条件修正的方法将普适导热定律扩展到了弹道扩散导热区域. 首先用热质理论的观点分析了弹道扩散导热机理; 然后从声子玻尔兹曼方程出发推导了修正边界条件模型; 最后数值求解了修正的普适导热定律并与蒙特卡罗模拟进行对比, 验证了本文模型的正确性.

关键词

热质理论
普适导热定律
弹道扩散导热
玻尔兹曼方程

近十几年来, 微纳尺度导热一直是传热学界研究的热点. 在微纳结构中, 由于特征尺度与热载子平均自由程相当, 一部分热载子将不经历散射过程, 直接从一个边界到达其他边界, 这样导热过程被称为弹道输运^[1]. 此时导热将不再服从经典的傅里叶导热定律. 在半导体和介电材料中, 声子是主要的热载子^[2]. 微纳尺度下的声子弹道扩散导热可以用声子玻尔兹曼方程来进行描述^[1].

热导率的尺寸效应是弹道扩散导热研究中的热点. 理论分析^[3]和实验研究^[4-6]都发现微纳尺度材料的等效热导率会随着特征尺度的增大而增加. 这一现象也被视为微纳尺度下经典傅里叶定律失效的直接证据. 微纳结构中的温度分布也是弹道扩散导热研究中的一个重点. 通过求解声子玻尔兹曼方程^[7], 分子动力学^[8]以及蒙特卡罗模拟^[9], 人们都发现在弹道扩散导热区域, 边界上会出现温度跳跃的现象. Jiang等人^[8]通过分子动力学的研究, 认为声子边界模式是导致温度跳跃的原因. Alvarez和Jou^[10]提出一个边界热阻模型来描述边界温度跳跃的现象. 然而, 目前边界温度跳跃的机理仍需要进一步的研究; 同时也缺

乏一个能够很好地描述这一现象的模型.

为了研究快速导热以及大热流密度条件下的非傅里叶导热现象, Cuo等人^[11-13]基于爱因斯坦的质能关系式, 提出了热质理论. 在热质理论中热量被等效成质量, 即为热质, 热量的传递过程等效为热质在介质中的流动, 根据热质的质量以及动量守恒方程得到了普适导热定律. 然而现有普适导热定律基于连续性介质假设的成立, 尚不能描述由弹道输运引起的非傅里叶导热现象.

本文通过边界修正的方法将热质模型扩展到弹道扩散导热区域, 这样就可以使用热质理论来研究弹道扩散导热. 该修正边界条件模型基于声子玻尔兹曼方程. 本文模型的数值求解结果与蒙特卡罗模拟进行了对比, 验证了模型的正确性.

1 热质模型

在介电和半导体晶体中, 声子气的当量质量就是热质. 可以定义热质密度^[11]:

$$\rho_h = \frac{\rho C_v T}{c^2}, \quad (1)$$

引用格式: 华钰超, 曹炳阳, 过增元. 弹道扩散导热的热质模型. 科学通报, 2015, 60: 2344-2348

Hua Y C, Cao B Y, Guo Z Y. Ballistic-diffusive heat conduction by thermomass theory (in Chinese). Chin Sci Bull, 2015, 60: 2344-2348, doi: 10.1360/N972014-01217

其中 ρ 为密度, C_V 为晶格比热, c 为光速, T 表示温度. 更进一步热质的漂移速度被定义为

$$\mathbf{u}_h = \frac{\mathbf{q}}{\rho C_V T}, \quad (2)$$

其中 $\mathbf{q}$ 为热流密度. 这样可以得到热质输运过程中的守恒方程

$$\frac{\partial \rho_h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_h \mathbf{u}_h) = 0, \quad (3)$$

$$\rho_h \frac{\partial \mathbf{u}_h}{\partial t} + (\rho_h \mathbf{u}_h \cdot \nabla) \mathbf{u}_h + \nabla \rho_h = \mathbf{f}_h. \quad (4)$$

方程(3)实际是对应能量守恒. 方程(4)则表示热质动量的守恒, 是热量输运过程的本构关系. 其中对于介电体, 热质压力 p_h 表示为^[11]

$$p_h = \gamma \rho_h C_V T = \frac{\gamma \rho (C_V T)^2}{c^2}, \quad (5)$$

其中 γ 是格留乃森常数. 当惯性效应和时间弛豫效应被忽略时, 方程(4)就可以退化为经典的傅里叶导热定律. 基于热质理论, 可以得到普适导热定律

$$\tau_{TM} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + 2\mathbf{l} \cdot \nabla \mathbf{q} - b \kappa \nabla T + \kappa \nabla T + \mathbf{q} = 0. \quad (7)$$

各个参数定义为

$$\begin{aligned} \tau_{TM} &= \frac{\kappa}{2\gamma \rho C_V^2 T}, \\ l &= \frac{q \kappa}{2\gamma C_V (\rho C_V T)^2} = u_h \tau_{TM}, \\ b &= \frac{q^2}{2\gamma \rho^2 C_V^3 T^3} = Ma_h^2, \end{aligned} \quad (8)$$

其中 τ_{TM} 是弛豫时间, l 是热量传递的特征长度. 当特征长度 l 与物体的特征尺寸相当的时候, 弹道输运的影响就会出现. Ma_h 是热质马赫数表示了声子气压缩性, $Ma_h = u_h/v_s$, v_s 表示平均群速度. 可以定义 $D/Dt = \partial/\partial t + 2(\mathbf{u}_h \cdot \nabla)$, 方程(7)被表示为

$$\tau_{TM} \frac{D\mathbf{q}}{Dt} + \mathbf{q} = -\kappa(1-b)\nabla T. \quad (9)$$

基于热质的质量和动量守恒方程, 得到了普适导热定律. 其可以被认为是Cattaneo-Vernotte(CV)方程的扩展. 两者不同之处在于, 热质模型中用 D/Dt 替代了CV模型中的偏导数, 同时热质模型通过参数 b 引入了一个考虑声子气压缩性的等效热导率. 需要指出的是与CV方程一样, 热质模型也可以从声子玻尔兹

曼方程导出^[12].

在热质理论中, 扩散导热被视作热质在传递过程中受到来自内部的阻力, 其与流体在多孔介质中的流动相似, 该阻力与热质的漂移速度成正比. 随着系统尺寸的减小, 当特征尺度与平均自由程相当时, 连续性介质假设失效, 热质流体发生稀薄效应, 这也就对应了弹道扩散导热的发生. 在一个完全弹道导热过程中, 热质不受到来自内部的阻力, 热阻直接来源于边界. 由于弹道输运的影响在边界附近体现最为明显, 现有的普适导热定律可以通过边界修正的方法扩展到弹道扩散区域.

2 修正边界条件模型

从声子玻尔兹曼方程出发推导修正边界条件. 以一维系统为例进行推导, 其思路可以直接推广到高维问题. 弛豫时间近似下的声子玻尔兹曼方程可以被表示为^[1]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \cos(\theta) v_s \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f_0 - f}{\tau}, \quad (10)$$

其中 f 是声子的分布函数, f_0 是平衡分布函数(玻色爱因斯坦分布), θ 是极角, τ 是声子弛豫时间. 可以定义声子能量强度为

$$e = \int v_s \hbar \omega D(\omega) f d\omega, \quad (11)$$

其中 ω 是声子角频率, $D(\omega)$ 是声子态密度. 热流密度可以被计算为

$$q = \int e \cos(\theta) d\Omega, \quad (12)$$

其中 Ω 是立体角 $d\Omega = 2\pi \sin(\theta) d\theta$. 将公式(11)带入(10)式中, 可以得到声子强度输运方程

$$\tau \frac{\partial e}{\partial t} + \cos(\theta) Kn \frac{\partial e}{\partial x/L} = -e + \phi(T), \quad (13)$$

其中可以将 $\int v_s \hbar \omega f_0(T) D(\omega) d\omega$ 记为 $\phi(T)$. 已知声子平均自由程 $l = v_s \tau$, 定义努森数 $Kn = l/L$, L 是物体的特征尺度. 推导稳态情况下的边界修正公式, 稳态声子输运方程表示为

$$\cos(\theta) Kn \frac{\partial e}{\partial x/L} = -e + \phi(T). \quad (14)$$

声子强度可以用泰勒级数关于努森数展开,

$$e = e^{(0)} + Kn e^{(1)} + O(Kn^2), \quad (15)$$

将(15)式带入到(14)式中则有

$$\begin{aligned} e^{(0)} &= \phi(T), \\ \cos(\theta) \frac{\partial e^{(0)}}{\partial x/L} &= -e^{(1)}. \end{aligned} \quad (16)$$

这样可以得到

$$e = \phi(T) - Kn \cos(\theta) \frac{\partial \phi(T)}{\partial x/L}. \quad (17)$$

考虑边界与处于平衡态的恒温热源接触, 热源温度为 T_w . 假设边界的声子发生率为1.0, 则从该等温边界发射出的声子能量流密度可以表示为

$$E(T_w) = \int_0^{\pi/2} \int v_s \hbar \omega f_0 \cos(\theta) D(\omega) d\omega d\Omega. \quad (18)$$

同时从内部进入边界的声子能量流密度可以表示为

$$q_- = 2\pi \int_{\pi/2}^{\pi} e \cos(\theta) d\cos(\theta). \quad (19)$$

将(17)式带入到上式中则有

$$q_- = \pi \phi(T) + \frac{2Kn}{3} \frac{\partial \pi \phi(T)}{\partial x/L}. \quad (20)$$

已知边界通过的净热流密度表示为 $q = E(T_w) - q_-$, 则有

$$E(T_w) - \pi \phi(T) = \frac{2Kn}{3} \frac{\partial \pi \phi(T)}{\partial x/L} + q. \quad (21)$$

根据 $\phi(T)$ 和 $E(T)$ 的表达式, 可以得到

$$E(T_w) - E(T) = \frac{2Kn}{3} \frac{\partial E(T)}{\partial x/L}. \quad (22)$$

边界的净热流密度 q 可以根据(12)式以及(17)式计算得到

$$q = -\frac{4Kn}{3} \frac{\partial E(T)}{\partial x/L}. \quad (23)$$

将上式带入到(22)式中,

$$E(T_w) - E(T) = -\frac{2Kn}{3} \frac{\partial E(T)}{\partial x/L}. \quad (24)$$

为了与热质模型结合, 需要将(24)式直接转换成温度的控制方程. 可以有 $E(T) = (\partial E / \partial T) T$, 同时当温度变化范围不大时, $\partial E(T_w) / \partial T \approx \partial E(T) / \partial T$, (24)式最终可以化简为

$$T_w - T = \frac{2Kn}{3} \frac{\partial T}{\partial x/L}. \quad (25)$$

上述的修正边界条件模型可以与普适导热定律结合用于描述弹道扩散导热.

该修正边界条件模型可以在努森数较小时很好地预测边界温度跳跃; 然而随着努森数的增大, 其预测值逐渐与声子玻尔兹曼方程预测结果偏离. Hua和

Cao^[14]从声子玻尔兹曼方程出发, 得到了大努森数时的边界温度跳跃模型, 可以作为本文模型在大努森数时的进一步修正.

3 数值求解结果及讨论

通过计算单晶硅薄膜中的法向一维导热问题并与蒙特卡罗(MC)模拟相比较, 来验证本文模型的正确性. 室温下单晶硅的物性如下^[1]: 比热696 J/kg, 热导率150 W/mK, 密度2330 kg/m³, 平均群速度6400 m/s, 平均自由程43.7 nm. 模拟系统如图1所示, 薄膜厚度为 L , 左边界温度为 T_h (305 K), 右边界温度为 T_c (295 K). 控制方程及边界条件为

$$2l \frac{\partial q}{\partial x} + q = -(1-b)\kappa \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (26)$$

$$\frac{\partial q}{\partial x} = 0, \quad (27)$$

$$T_h - T(0) = -\frac{2Kn}{3} \frac{\partial T}{\partial x/L} \Big|_0, \quad T_c - T(L) = \frac{2Kn}{3} \frac{\partial T}{\partial x/L} \Big|_L. \quad (28)$$

其中(26)式为热质理论得到的热流与温度之间的本构关系, (27)式是能量守恒方程, (28)式则是修正的边界条件. 通过求解上述方程组可以得到温度分布, 同时可以定义等效热导率

$$\kappa_e = Lq / (T_h - T_c).$$

薄膜内无量纲温度分布如图2所示. 修正边界条件的普适导热定律能够预测边界的温度跳跃. 同时本文模型的预测值可以与蒙特卡罗模拟有很好的符合. 同时边界温度跳跃随着努森数的增大而增加, 这表明弹道运输的增强使边界温度跳跃增大. 还可以发现随着努森数的减小, 弹道运输的影响减弱, 无量纲温度分布不断接近经典的傅里叶定律的预测结果.

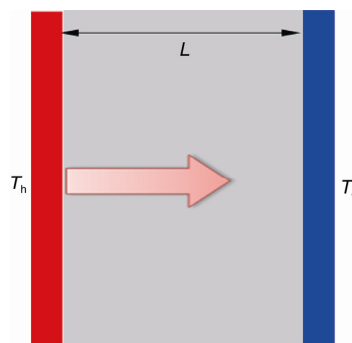


图1 (网络版彩色)硅纳米薄导热膜示意图

Figure 1 (Color online) Schematic graph of the heat conduction in the silicon nanofilm

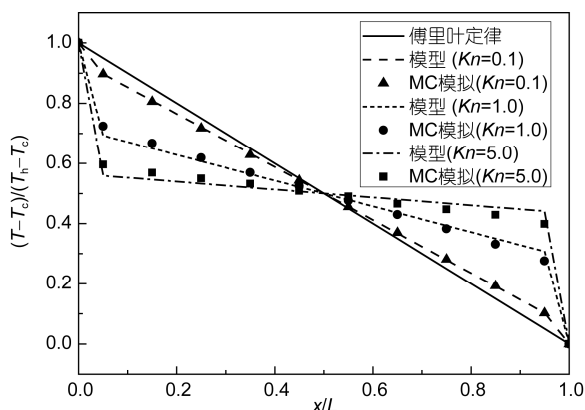


图2 无量纲温度分布

Figure 2 Temperature profiles within the nanofilms of different Knudsen numbers

图3所示为薄膜的等效热导率随着薄膜厚度的变化. 本文模型很好地预测了热导率的尺寸效应. 等效热导率随着厚度增大而增加, 同时增加的斜率在减小, 薄膜热导率最终可以回归到体材料的值. 本文模型与蒙特卡罗模拟有较好的符合, 其最大误差仅为15%.

上文对硅纳米薄膜中法向导热的温度分布和等效热导率进行计算, 结果与蒙特卡罗模拟有较好符合, 这说明通过修正边界条件的方法将普适导热定律扩展到弹道扩散导热区域是成功的.

4 结论

基于热质理论分析了弹道扩散导热. 扩散导热被视作热质在传递过程中受到来自内部的阻力, 该阻力与热质的漂移速度成正比; 随着系统尺寸的减

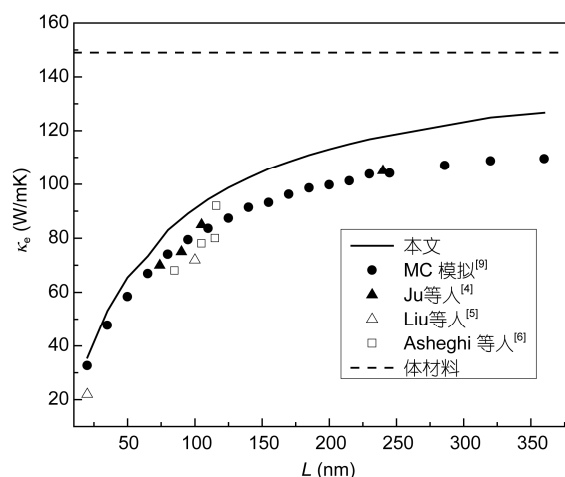


图3 等效热导率随着薄膜厚度的变化

Figure 3 Thermal conductivity vs. nanofilm thickness

小, 当特征尺度与平均自由程相当时, 连续性介质假设失效, 热质流体发生稀薄效应, 对应了弹道扩散导热的发生. 现有的热质普适导热定律基于连续性介质假设, 尚不能描述弹道运输的作用. 通过修正边界条件的方法将普适导热定律扩展到了弹道扩散区域.

基于声子玻尔兹曼方程推导了修正边界条件模型

$$T_w - T = -\frac{2Kn}{3} \frac{\partial T}{\partial x/L},$$

其反映了弹道运输对边界温度的影响.

修正边界条件的普适导热定律被应用于描述硅纳米薄膜中的弹道扩散导热. 成功预测了边界温度跳跃和随特征尺度增加的等效热导率, 计算结果与蒙特卡罗模拟符合很好.

参考文献

- 1 Chen G. Nanoscale Energy Transport and Conversion. Oxford: Oxford University Press, 2005
- 2 Ziman J M. Electrons and Phonons. Oxford: Oxford University Press, 1965
- 3 Majumdar A. Micro-scale heat conduction in dielectric thin film. J Heat Trans-T ASME, 1993, 115: 7-16
- 4 Ju Y S, Goodson K E. Phonon scattering in silicon films with thickness of order 100 nm. Appl Phys Lett, 1997, 74: 3005-3007
- 5 Liu W, Asheghi M. Phonon boundary scattering in ultra thin single crystal silicon layers. Appl Phys Lett, 2004, 84: 3819-3821
- 6 Asheghi M, Leung Y K, Wong S S, et al. Phonon-boundary scattering in thin silicon layers. Appl Phys Lett, 1997, 71: 1798-1800
- 7 Nabovati A, Sellan D P, Amon C H. On the lattice Boltzmann method for phonon transport. J Comput Phys, 2011, 230: 5864-5876
- 8 Jiang J W, Chen J, Wang J S, et al. Edge states induce boundary temperature jump in molecular dynamics simulation of heat conduction. Phys Rev B, 2009, 80: 052301
- 9 Hua Y C, Dong Y, Cao B Y. Monte Carlo simulation of phonon ballistic diffusive heat conduction in silicon nanofilm (in Chinese). Acta Phys Sin, 2013, 62: 244401 [华钰超, 董源, 曹炳阳. 硅纳米薄膜中声子弹道扩散导热的蒙特卡罗模拟. 物理学报, 2013, 62: 244401]
- 10 Alvarez F X, Jou D. Memory and nonlocal effects in heat transport: From diffusive to ballistic regimes. Appl Phys Lett, 2007, 90: 083109

- 11 Cao B Y, Guo Z Y. Equation of motion of a phonon gas and non-Fourier heat conduction. *J Appl Phys*, 2007, 102: 053503
- 12 Dong Y, Cao B Y, Guo Z Y. Generalized heat conduction laws based on thermomass theory and phonon hydrodynamics. *J Appl Phys*, 2011, 110: 063504
- 13 Sellitto A, Cimmelli V A. A continuum approach to thermomass theory. *J Heat Transf*, 2012, 134: 112402
- 14 Hua Y C, Cao B Y. Phonon ballistic-diffusive heat conduction in silicon nanofilms by Monte Carlo simulations. *Int J Heat Mass Tran*, 2014, 78: 755–759

Ballistic-diffusive heat conduction by thermomass theory

HUA YuChao, CAO BingYang & GUO ZengYuan

Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China

The classical Fourier heat conduction law only works well for diffusive transport under normal conditions. Several typical non-Fourier models, such as the Cattaneo-Vernotte, dual-phase-lagging, and thermomass models, have been developed for thermal wave transport under transient conditions in recent decades. In addition, some recent studies have shown that the thermal conductivity of low-dimensional systems increases with increasing characteristic length because heat is transported in a ballistic-diffusive manner in nanostructures, in which the phonon mean free path (MFP) is comparable to the characteristic length. However, few models have become available for such thermal transport processes to date. In this work, we show that the general heat conduction law can be extended to phonon ballistic-diffusive transport by modification of the boundary conditions. First, we analyze the diffusive and ballistic transport processes from a thermomass theory viewpoint. Diffusive transport is transport in which thermal mass drifts in a body with a resistance proportional to the drift velocity, similar to fluid flows in porous media, and the current general heat conduction law can be derived from the thermomass balance equations, in which the heat inertia is considered. However, when the MFP is comparable with the characteristic length, the rarefied effect of the thermomass occurs, which corresponds to ballistic heat transport. In this regime, temperature jumps occur at the boundaries. It is noted here that the effects of ballistic heat transport are not covered in the current general heat conduction law. Therefore, modified boundary conditions that consider ballistic transport are applied to extend the general heat conduction law. We derive these modified boundary conditions from the phonon Boltzmann transport equation. The phonon distribution function is expanded with respect to the Knudsen number (Kn), and the continuous heat flux condition is used to obtain the modified boundary conditions. In addition, heat conduction in silicon nanofilms at room temperature is studied numerically, and comparisons with Monte Carlo simulations are also conducted to confirm the proposed theoretical models. It is found that our model can predict the temperature distributions well within silicon nanofilms with different Knudsen numbers. The size-dependent thermal conductivity can also be obtained using our model.

thermomass theory, general heat conduction law, ballistic-diffusive heat conduction, Boltzmann transport equation

doi: 10.1360/N972014-01217