

热传导模拟计算

[1]实验目的:

- 1.1 了解热传导过程涉及的基本物理知识，熟悉计算热导率的不同算法。
- 1.2 掌握热传导过程分子动力学模拟的核心控制参数与模拟步骤。
- 1.3 分析影响热导的物理因素（声子平均自由程、温度效应、尺寸等）。

[2]模拟实验原理简介:

2.1 热传导的物理基础

物质中存在温差时热能会自发地由高温区域向低温区域转移，这种现象称为热运输，包括传导、对流和辐射等形式。如果热运输过程不伴随着宏观质量或辐射流动，则称为热传导。在凝聚态物质中，声子（原子振动）和电子是负责热量传递的基本粒子。本实验仅考虑固体中的热传导，并且仅考虑声子对热传导的贡献。就固体中的声子而言，热运输的微观过程是：在温度高的部分，晶体中原子振动较激烈，也即声子的个数和能量都较大。在低温部分，原子振动较缓，相应的声子数和能量都较低。由于声子数在高温端与低温端之间的差别，携带较高能量的声子就会向低温端扩散，从而形成热量的传输，也称为热扩散。固体中的热运输，就是能量的迁移，而原子本身只在平衡位置附近振动，因此没有所谓的对流，也没物质流。由于晶格振动非简谐效应的存在，声子之间会发生散射，所以热传导不是瞬时完成的。因此，有必要寻找一个物理量来描述不同物质热传导的能力，这个物理量就是所谓的“热导率”。

2.2 热导率

热传导的原因是温度不均匀，可用温度梯度 ∇T 描述，热传导的快慢可用热流密度 \vec{j} ，即单位时间里流过单位面积的热量来描述。实验表明热传导遵循傅里叶定律，它有如下的形式：

$$\vec{j} = -\kappa \nabla T \quad (1)$$

比例常数 κ 就是热导率（也称为导热系数）。该公式是计算热导率的基本依据。

2.3 分子动力学模拟热传导过程的基本原理

2.3.1 热导率的模拟计算

Muller-Plathe 方法^[1]是当前最常见^[2]的方法之一，也是该实验采用的方法。该方法中，在沿热传导方向相距较远的两处分别设立高温与低温区，如下图所示。其中 $Z=-L_z/4$ 和 $Z=L_z/4$ 处宽度为 δ 的两个区域为高温或低温区。采用这种对称的分布是考虑到周期性边界条件。为保持这两个区域的温度差，需要每隔一段时间，找出高温区域能量最低的粒子（其能量为 ϵ_1 ）和低温区域能量最高的粒子（其能量为 ϵ_2 ），交换他们的动量，从而体系能量和动量都不变，高温区增加能量 $\Delta\epsilon = \epsilon_2 - \epsilon_1$ ，低温区增加 $-\Delta\epsilon$ 。

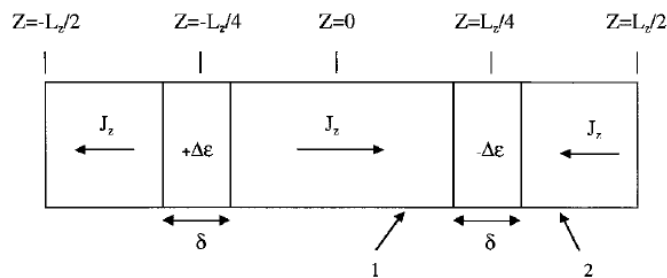


图 1 热源区域示意图

这相当于有一台热机持续得对两个区域做功，一定时间之后系统将达到稳态。这时系统有一个高温区和一个低温区，而在二者之间是一个温度缓变区，其温度分布如图所示。对单原子体系，温度可利用

$$T = \frac{\langle E_k \rangle}{\frac{3}{2} k_B} \quad (2)$$

来计算，其中 $\langle E_k \rangle$ 为平均动能， k_B 为玻尔兹曼常数。

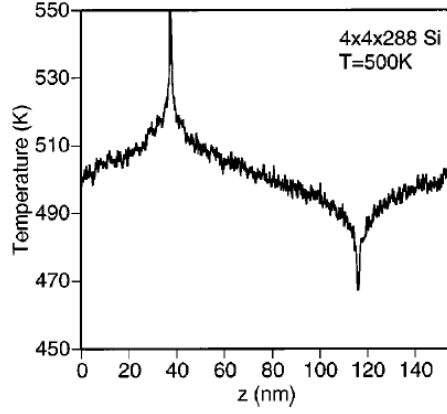


图 2 达到稳态时的温度分布

通过计算其中线性部分的斜率，我们便可求得温度梯度 $\nabla T = \frac{dT}{dz}$ 。

如图一中 $z=-Lz/4$ 的区域所示，输入功率将通过两边的界面以热流的形式流出，利用连续性方程

$$-\oint \vec{j} \cdot d\vec{S} + P = 0 \quad (3)$$

由于对称性，可以只考虑 z 方向的两个平面，我们可得热流

$$\vec{j} = \frac{P}{2S} \quad (4)$$

其中 $P = \frac{\Delta \epsilon}{\Delta t}$ 为热源做功的平均功率。其中的 S 为横截面积， 2 表示两个方向。

从而由式 (1) 得到热导率 $\kappa = \left| \frac{\vec{j}}{\nabla T} \right|$ 。

2.3.2 验证连续性方程

Muller-Plathe 方法的标准流程是利用 (4) 式计算热流，那么这么做有道理吗？(3) 式正确吗？我们在模拟实验中验证 (3) 式能更加印证所得热导率的正确性。

类似于计算温度分布，我们可以利用以下公式计算出热流密度分布^[2]

$$\vec{j} = \frac{d}{dt} \sum_i \vec{r}_i e_i \quad (5)$$

其中 \vec{r}_i 为原子位置， e_i 为原子总能量。通过比较两种方式计算出的热流，我们可以验证连续性方程。

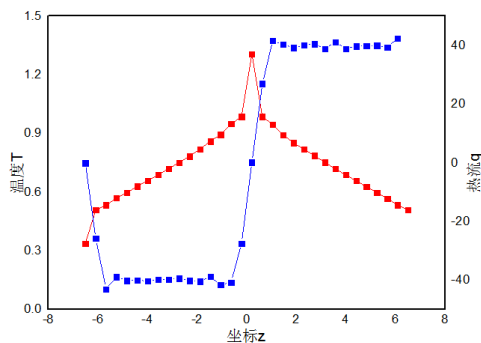


图 3 Ar 的温度和热流分布

2.3.3 体系大小对热导率的影响

通常由于模拟体系太小，小于声子的平均自由程，声子在边界散射，热导率偏小，通常有^[2]

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{1}{\kappa_{\infty}} + \frac{a}{Lz} \quad (6)$$

其中 a 为斜率， κ_{∞} 为体系无穷大时的热导率。通过此式可以拟合得出更加准确的热导率。

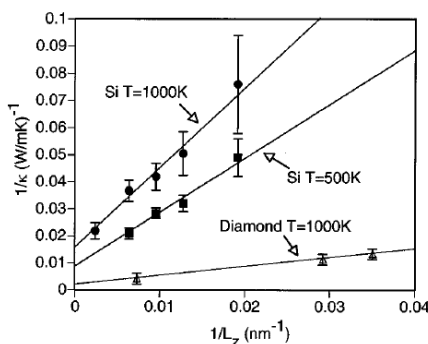


图 4 体系的长度对热导率的影响

[3]模拟条件

3.1 具有 Fortran 或 C++编译运行环境的计算机。

3.2 分子动力学源程序一套，以及若干用于结果分析的计算程序。

3.3 一种数学作图软件。

[4]模拟步骤

4.1 建立模型：以 Ar 的晶体研究对象，体系采用 Lennard-Jones 势所描述。产生一个长宽高分别为 (xyz) 的面心立方模拟体系。

4.2 建立初始平衡体系：首先将系统加热到指定的温度，即采用 NVT 系综 (nose-hoover 热浴)^[3] 使体系保持在 85K(此时实验得出热导率为 0.132W/mK)。然后去掉热浴，使系统处于 NVE 系综。体系经过一段时间的演化，将趋于平衡。

4.3 建立稳态过程：在上面平衡态的基础上，利用上文提到的粒子交换法，对体系继续模拟，并持续测量温度分布，直到到达稳态。

4.4 计算出热导率：由温度分布获得温度梯度，利用(4)(5)式，分别计算出热流，进而利用傅里叶定律计算热导率，验证连续性方程。

4.5 (选做) 影响热导率的因素：

- 测量不同长度 Lz ，不同宽度 Lx 时的热导率，并拟合得出无穷大体系的热导率。
- 研究热导率与温度的关系
- 研究热导率与晶格常数的关系(加压)

[5]分析讨论

- 1、分析热导率计算误差的主要来源。
- 2、如何更准确统计温度分布？
- 3、交换间隔 Δt 的不同对结果有何影响？对温度分布有何影响？热源宽度 δ 对结果有何影响？
- 4、体会计算机‘实验’与真实物理实验的异同。

[6]撰写实验报告

[7]参考文献:

1. Müller-Plathe F. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity[J]. The Journal of chemical physics, 1997, 106(14): 6082-6085.
2. Schelling P K, Phillpot S R, Keblinski P. Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity[J]. Physical Review B, 2002, 65(14): 144306.
3. Hoover W G. Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions[J]. Physical Review A, 1985, 31(3): 1695.