La Matematica nella Società e nella Cultura

RIVISTA DELL'UNIONE MATEMATICA ITALIANA

ANTONIO SELLITTO

Temperatura del non equilibrio ed equazioni per il trasporto del calore nei nanosistemi

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. **5** (2012), n.1 (Fascicolo tesi di Dottorato), p. 91–94.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2012_1_5_1_91_0>

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2012.

La Matematica nella Società e nella Cultura
Rivista dell'Unione Matematica Italiana
Serie I, Vol. V, Aprile 2012, 91-94

Temperatura del non equilibrio ed equazioni per il trasporto del calore nei nanosistemi

ANTONIO SELLITTO

1. – Premessa

I rapidi e continui progressi nella sintesi di materiali di dimensioni dell'ordine dei nanometri hanno generato la necessità studiare più in dettaglio il comportamento dei nanosistemi come, ad esempio, semiconduttori con punti quantici (anche conosciuti come strutture zero-dimensionali), nanopolimeri, dispositivi optoelettronici, micro (nano) sensori elettromeccanici, ecc.

La continua riduzione delle dimensioni caratteristiche di questi dispositivi apre sempre nuovi interrogativi, soprattutto in relazione alla trasmissione del calore. Esperimenti fatti in microelettronica hanno dimostrato che il volume estremamente ridotto e la elevata intensità di calore modificano fortemente il trasporto termico, aggravando così i problemi di gestione termica. Inoltre, si deve tener conto che nei nanosistemi il calore viene trasportato da fononi che possono avere una grande variabilità nella frequenza, e una variazione ancora più grande nel loro cammino libero medio, il quale può essere anche più grande delle dimensioni del sistema stesso.

Le caratteristiche peculiari della propagazione del calore nei nanosistemi sono dovute anche ad altri fattori quali, ad esempio, il fenomeno dello scattering, gli effetti non locali, non lineari e di memoria, i fenomeni di quantizzazione, e così via. Pertanto una maggiore e sempre più approfondita conoscenza delle proprietà termiche di tali dispositivi può avere sia conseguenze da un punto di vista pratico (ad esempio nella progettazione di nuovi dispositivi), oltre che contribuire in maniera sostanziale alla chiarificazione di alcuni importanti concetti di termodinamica del non equilibrio come, ad esempio, la corretta definizione di temperatura del non equilibrio.

2. – Idrodinamica dei fononi e conducibilità termica effettiva

In ambito macroscopico, per una descrizione delle proprietà termiche dei nanosistemi, è possibile usare i metodi della termodinamica del non equilibrio, basati su equazioni generalizzate per il trasporto del calore che vanno oltre la legge di Fourier. L'idrodinamica dei fononi rappresenta un terreno molto fertile sul quale sviluppare tali equazioni. La più nota tra le equazioni di evoluzione per il flusso termico, tra quelle che possono ottenersi usando l'idrodinamica dei fononi, è l'equazione di Guyer-Krumhansl, ovvero

$$\tau_R \dot{\boldsymbol{q}} + \boldsymbol{q} = -\lambda_0 \nabla T + \ell^2 \left(\nabla^2 \boldsymbol{q} + 2 \nabla \nabla \cdot \boldsymbol{q} \right), \tag{1}$$

dove τ_R è il tempo di rilassamento legato alle interazioni di tipo resistivo tra i fononi, T la temperatura, $\boldsymbol{q}$ il flusso locale di calore, λ_0 la conducibilità termica ed ℓ il cammino libero medio dei fononi. Da una comparazione con la teoria cinetica, si ricava facilmente che $\ell^2 = \dfrac{9\lambda_0\tau_N}{5c_v}$, con τ_N tempo di rilassamento delle interazioni di tipo non resistivo tra i fononi, mentre c_v denota il calore specifico a volume costante.

In regime stazionario ($\dot{\boldsymbol{q}} \equiv 0$ e $\dot{u} = -\nabla \cdot \boldsymbol{q} \equiv 0$, con u energia interna specifica) e quando $\boldsymbol{q} \ll \ell^2\nabla^2\boldsymbol{q}$, la Eq. (1) si riduce a

$$\nabla^2\boldsymbol{q} = \frac{\lambda_0}{\ell^2}\nabla T. \tag{2}$$

Tale equazione è molto simile all'equazione di Navier-Stokes, $\nabla^2\boldsymbol{v} = \dfrac{1}{\eta}\nabla p$, che descrive il regime di moto stazionario in un condotto cilindrico quando i termini convettivi sono nulli oppure trascurabili, ovvero il cosiddetto regime di moto alla Poiseuille. Tale osservazione di carattere puramente matematico, unita a quella puramente fisica che il flusso di un fluido è un moto *ordinato* di particelle esattamente come il flusso di calore è un moto *ordinato* di fononi, ci permette di utilizzare i risultati dell'idrodinamica classica per analizzare il problema del trasporto di calore [1]. Nell'analogia tra idrodinamica classica e idrodinamica dei fononi, si ha che le coppie $(\boldsymbol{v};\boldsymbol{q})$, $(p;T)$ e $\left(\dfrac{\ell^2}{\lambda_0};\eta\right)$ hanno lo stesso ruolo.

Pertanto, supponendo, così come avviene nel caso dei gas rarefatti, che la velocità alle pareti sia diversa da zero, è possibile assumere il seguente valore per il flusso di calore alle pareti:

$$q_w = C\ell\left(\frac{\partial q_b}{\partial r}\right)_{r=R} - \alpha\ell^2\left(\frac{\partial^2 q_b}{\partial r^2}\right)_{r=R}, \tag{3}$$

dove q_b è il profilo del flusso di calore nella sezione trasversale, ottenuto dall'integrazione della Eq. (2), mentre C ed α sono due parametri che permetto di descrivere, rispettivamente, le riflessioni speculari-diffusive e il fenomeno del backscattering. Definendo il flusso locale di calore come la somma della sua parte volumetrica e della sua parte superficiale, ovvero $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{q}_b + \boldsymbol{q}_w$, tramite semplici calcoli è possibile ottenere la seguente espressione per la conducibilità termica effettiva:

$$\lambda_{\text{eff}}(\,\text{Kn}) = \frac{\lambda_0}{8\,\text{Kn}^2}\left(1 + 4C\,\text{Kn} - 4\alpha\,\text{Kn}^2\right), \tag{4}$$

in cui $\text{Kn} = \dfrac{\ell}{\text{R}}$ indica il numero di Knudsen [2]. Questa espressione permette di ottenere valori di λ_{eff} che ben si adattano ai risultati sperimentali [2]. Inoltre, essa permette di descrivere anche il passaggio di fase conduttore-isolante di Anderson.

3. – Temperatura del non equilibrio e propagazione di onde termiche

Il significato della temperatura del non equilibrio è un problema fondamentale e ancora aperto nella termodinamica del non equilibrio e nella fisica statistica. Questo problema diventa ancora più importante nei nanosistemi che funzionano ad elevate frequenze (come, ad esempio, i chip per i moderni processori). In tali sistemi, il problema del corretto significato della temperatura può avere rilevanza pratica nell' interpretazione dei risultati sperimentali.

Un possibile approccio al problema della definizione della temperatura fuori dall'equilibrio consiste nel considerare quest'ultima come una variabile interna (β) [3], definita dall'equazione differenziale

$$\tau_R \dot{\beta} + \beta = T, \tag{5}$$

e collegata al flusso di calore tramite la relazione costitutiva

$$\boldsymbol{q} = -\lambda_0 \nabla \beta. \tag{6}$$

Semplici calcoli permettono di ricavare dalla combinazione delle Eqs. 5 e 6 la ben nota equazione di Maxwell-Cattaneo

$$\tau_R \dot{\boldsymbol{q}} + \boldsymbol{q} = -\lambda_0 \nabla T. \tag{7}$$

I metodi della termodinamica dei processi irreversibili permettono di proporre nuovi esperimenti atti ad evidenziare e misurare la differenza tra la definizione classica di temperatura di non equilibrio e quella data tramite le Eqs. 5 e 6. Infatti, considerando un nanotubo non isolato lateralmente, usando la definizione classica di temperatura del non equilibrio, l'equazione del bilancio locale di energia interna fornisce la seguente equazione di evoluzione per la temperatura

$$c_v \dot{T} = -\nabla \cdot \boldsymbol{q} - \frac{2\sigma}{r}(T - T_e). \tag{8}$$

In essa, r indica il raggio della sezione trasversale del tubo, σ è un coefficiente che regola lo scambio di calore attraverso le superfici laterali, mentre T_e è la temperatura dell'ambiente esterno. Se invece di T si utilizza la temperatura dinamica β, l' Eq. (8) si modifica in

$$c_v \dot{T} = -\nabla \cdot \boldsymbol{q} - \frac{2\sigma}{r}(\beta - T_e). \tag{9}$$

Riducendosi al caso monodimensionale, combinando la Eq. (7) con il seguente profilo di temperatura

$$T(x;t) = T_{ss}(x) + \overline{T}_0 \exp[i(\omega t - \kappa x)], \tag{10}$$

realizzato imponendo un impulso di temperatura sinusoidale ad un estremo del nostro sistema e misurando poi la temperatura nei vari punti dello stesso, e poi con le Eqs. (8) e (9), rispettivamente, si ottengono le seguenti espressioni per la velocità di propagazione delle onde termiche

$$U_T = \frac{\omega}{\Gamma_T}\sqrt{\frac{2}{1+\phi_T}}, \tag{11a}$$

$$U_\beta = \frac{\omega}{\Gamma_\beta}\sqrt{\frac{2}{1+\phi_\beta}}, \tag{11b}$$

dove

$$\begin{cases} \varGamma_T = \dfrac{1}{U_0}\sqrt[4]{\left(\omega^2 - \dfrac{1}{\tau_R\tau}\right)^2 + \dfrac{\omega^2}{\tau_R^2}\left(1+\dfrac{\tau_R}{\tau}\right)^2} & \varGamma_\beta = \dfrac{1}{U_0}\sqrt[4]{\left(\omega^2 - \dfrac{1}{\tau_R\tau}\right)^2 + \dfrac{\omega^2}{\tau_R^2}} \\ \phi_T = \dfrac{\omega^2\tau_R\tau - 1}{\sqrt{\left(1+\omega^2\tau_R^2\right)\left(1+\omega^2\tau^2\right)}} & \phi_\beta = \dfrac{\omega^2\tau_R\tau - 1}{\sqrt{\left(\omega^2\tau_R\tau - 1\right)^2 + \omega^2\tau^2}} \end{cases}. \tag{12}$$

con $U_0 = \sqrt{\dfrac{\lambda}{c_v\tau_R}}$ velocità di propagazione delle onde termiche nel limite delle elevate frequenze, e $\tau = \dfrac{rc}{2\sigma}$ tempo di rilassamento legato alla dispersione laterale del calore.

Semplici calcoli mostrano che nel limite delle elevate frequenze $U_T \equiv U_\beta \equiv U_0$, mentre nel limite delle basse frequenze si ha

$$\frac{U_\beta - U_T}{U_\beta} = \frac{\dfrac{\tau_R}{\tau}}{1+\dfrac{\tau_R}{\tau}}. \tag{13}$$

Pertanto il parametro fondamentale che riflette la differenza tra le velocità U_T ed U_β è proprio il rapporto $\dfrac{\tau_R}{\tau}$ che risulta praticamente trascurabile alle alte temperature, ma non alle basse temperature [3]. Dunque, in linea di principio, misurando la velocità di propagazione di onde termiche alle basse frequenze e a basse temperature sarebbe possibile ottenere maggiori informazioni sul concetto di temperatura del non equilibrio.

BIBLIOGRAFIA

[1] ALVAREZ F. X., JOU D. e SELLITTO A., *Phonon hydrodynamics and phonon-boundary scattering in nanosystems*, J. Appl. Phys., **105** (2009), 014317 (5 pages).

[2] SELLITTO A., ALVAREZ F. X. e JOU D., *Temperature dependence of boundary conditions in phonon hydrodynamics of smooth and rough nanowires*, J. Appl. Phys., **107** (2010), 114312 (7 pages).

[3] JOU D., CIMMELLI V. A. e SELLITTO A., *Nonequilibrium temperatures and second-sound propagation along nanowires and thin layers*, Phys. Lett. A, **373** (2009), 4386-4392.

Dipartimento di Matematica e Informatica, Campus di Macchia Romana
Università della Basilicata
e-mail: ant.sellitto@gmail.com
Dottorato in Metodi e Modelli Matematici per i Sistemi Dinamici
con sede presso l'Università della Basilicata – Ciclo XXII
Direttori di ricerca: Prof. Prof. David Jou e Prof. Vito Antonio Cimmelli