

基于热质运动概念的普适导热定律

过增元[†] 曹炳阳

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

(2007 年 11 月 1 日收到, 2007 年 12 月 5 日收到修改稿)

根据爱因斯坦的质能等效关系式, 热能具有的等效质量称为热质, 从而在固态和气态介质中分别建立了声子气质量和热子气质量的概念. 应用牛顿定律建立了含有驱动力、阻力和惯性力的热质(声子气或热子气)运动的动量守恒方程. 由于热量在介质中的传递本质上就是热质(声子气和热子气)在介质中的运动, 所以热质动量守恒方程就是普适的导热定律, 能够统一描述各种条件下的导热规律. 当热流密度不是很大从而热质惯性力可以忽略时, 热质动量守恒方程就退化为傅里叶导热定律, 这表明傅里叶导热定律是特殊条件下的导热定律. 对于微纳尺度条件下的导热, 热流密度可以极高, 由速度空间变化引起的惯性力不能忽略, 在稳态导热情况下也将出现非傅里叶导热. 此时在计算或者实验中不能用热流密度除温度梯度求导热系数. 在超快速加热条件下, 必需考虑惯性力, 与基于 CV 导热模型的波动方程相比, 普适的导热定律增加了因速度空间变化引起的惯性力项, 所以在介质中热波叠加时不会出现产生负温度的非物理现象, 表明基于热质运动概念的普适导热定律更为合理.

关键词: 傅里叶导热定律, 普适导热定律, 热质运动, 非傅里叶导热

PACC: 4410, 6370, 0340G

1. 引言

19 世纪 20 年代傅里叶^[1]建立了介质中的热流通量与温度梯度成正比的方程式, 比例系数称介质的导热系数, 该方程称为傅里叶导热方程式或傅里叶导热定律^[2]. 傅里叶导热定律不仅是导热过程而且也是对流换热过程的最基本的定律, 已为大量的实验和工程实际所证实并获得广泛的应用. 此外, 傅里叶导热定律的建立对其他学科亦有影响, 在研究金属中的导电过程时, 欧姆正是受到了傅里叶导热定律的启发, 才建立了欧姆定律^[3].

然而, 傅里叶导热定律毕竟是唯象定律, 理论上的质疑时有发生, 例如, 基于傅里叶导热定律的瞬态热传导过程是抛物型方程, 因而出现了热扰动传播速度无穷大的非物理现象. 这种缺陷历史上曾吸引了大量学者进行研究, 试图从理论上改进傅里叶导热定律. 最早是由 Cattaneo^[4], 随后是 Vernotte^[5]提出的热波模型. 他们在引入弛豫时间概念后建立了新的热流定律,

$$q + \tau \frac{\partial q}{\partial t} = -K \nabla T, \quad (1)$$

(1) 式称为 CV 方程, 其中 q 为热流密度, ∇T 为温度梯度, K 为导热系数, t 为时间, τ 为弛豫时间. 从 (1) 式可以看到, 温度梯度不仅与热流, 而且还与热流随时间的变化率有关. 基于此新的热流定律的导热方程为

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{c_t} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \nabla^2 T, \quad (2)$$

其中 $\alpha = K / (\rho c_p)$ 为热扩散系数, $c_t = \sqrt{\alpha / \tau}$ 为热波速. 由于此方程是双曲型方程, 所以热扰动的传播速度不是无穷大而是有限值, 即热量是以波动方式传递的. 而后, Gurtin 和 Pipkin^[6], Coleman^[7]等人基于热力学理论提出了类似于 CV 方程但更为普适化的导热本构方程. Tavernier^[8], Guyer 和 Krumhansl^[9]和 Maurer^[10]等人从 Boltzmann 方程出发, 经过不同的处理和简化得到了类似于 CV 方程的热波模型. 然而, Bai 和 Lavine^[11]以及 Körner 和 Bergmann^[12]指出基于 CV 模型的导热波动方程会产生负温度的非物理现象. Tzou^[13, 14]不采用温度梯度是因, 热流是果的假定, 引入了热流矢量和温度梯度矢量的 τ_q 和 τ_T 两个相延迟时间, 给出

$$q + \frac{1}{\tau_q} \frac{\partial q}{\partial t} = -K \nabla T - K \tau_T \frac{\partial}{\partial t} (\nabla T), \quad (3)$$

[†] E-mail: demgy@tsinghua.edu.cn

代入能量守恒方程得到的导热方程为

$$\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\tau_q}{\alpha} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \nabla^2 T + \tau_T \frac{\alpha (\nabla^2 T)}{\partial t} \quad (4)$$

称双相延迟模型。

由于介质的弛豫时间很小(一般小于 10^{-11} s),对于大多数的传热问题(4)式中含弛豫时间的附加项可以略去,所以傅里叶导热定律仍然适用,只有在超快速加热或极低温的情况下,才必需考虑热量以波动方式传递的非傅里叶导热现象。然而随着高科技的发展,如飞秒/皮秒的激光加热、超高频计算机芯片的冷却都需要考虑非傅里叶导热效应,从而促进了很多学者对快速瞬态导热的非傅里叶效应进行理论分析和数值模拟,进行这方面工作的有 Xu 和 Guo^[15], Masuda 等^[16], Antaki^[17], Cho 和 Juhng^[18], Fan 和 Lu^[19]以及 Zhang 等^[20]。有关非傅里叶导热的实验研究则由于难度大而不多见,如 Brorson 等^[21]测量了热脉冲穿过金属薄膜所需的时间, Tang 和 Araki^[22]提出了测量弛豫时间的方法等。

近年来随着微纳技术和低维材料的发展,对稳态导热情况下傅里叶导热定律是否适用也提出了挑战,例如 Lepri 等^[23]用数值方法研究一维非线性谐振子链中的热传递,如按傅里叶导热定律,则其中的导热系数与粒子数(即链长度)的平方根近似成正比, Narayan^[24]基于动量守恒分析计算了一维流体的导热系数,它与系统尺度的立方根成正比。Maruyama^[25]用分子动力学模拟方法计算单壁碳纳米管的导热系数,也发现了导热系数随管长的增加而增加。Livi 等^[26]分析和总结了上述奇异现象,并将其归结为空间维数的影响。

2. 热 质

与以往的研究不同,我们将在重新审视热量本质的基础上讨论导热的一般规律。历史上对于热的本质的认识有过激烈的争论,热的物质说在 18 世纪和 19 世纪初处于统治地位,而到了 19 世纪 40 年代以后,随着能量原理的确立,热的运动说得到了普遍承认,从而结束了关于热量本质的争论^[27]。正是由于热是能量而不是某种物质,热学的研究方法与力学有很大的不同,正如傅里叶^[1]在他的著作中指出“……无论力学理论的研究范围如何,它们都不能应用于热效应,这些热效应构成一个特殊的现象类,它们不能用运动和平衡的原理来解释。”所以,傅里叶导热定律只是描述了热流密度与温度梯度的关系,

其中没有速度、力和加速度的概念。

现在我们从另一角度审视热量的本质。爱因斯坦^[28]在他的狭义相对论中指出,能量与质量的概念是统一的,并给出了质能关系式

$$E = Mc^2 = \frac{M_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} c^2 = \frac{E_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (5)$$

其中, M 是运动物体的质量,称动质量, M_0 是物体静止时的质量,称静质量, c 是真空中光速, v 是物体宏观运动速度, E 是运动物体的能量, E_0 是静止物体的能量。从(5)式中可以看到,物体的质量和能量都随其运动速度的增加而增加,而且物体的质量和能量是统一的。

当物体宏观运动速度远小于光速时(不涉及原子结构和量子效应),由于运动而引起物体能量和质量的增量可通过(5)式级数展开分别得到近似式

$$E_k = E - E_0 \cong \frac{1}{2} M_0 v^2, \quad (6a)$$

$$M_k = M - M_0 \cong \frac{1}{2} \frac{M_0 v^2}{c^2}, \quad (6b)$$

其中 $E_k = \frac{1}{2} M_0 v^2$ 是牛顿力学框架中物体的动能,因此 M_k 就是物体动能的等效质量。可以看到,当 $v \ll c$ 时物体的动质量 M 等于其静止质量 M_0 与动能等效质量 M_k 的代数和。

现在我们把爱因斯坦对于机械运动的质能关系推广至热运动。介质中分子的热运动或晶格的热振动本质上也是机械运动,只不过是规则的机械运动而已,因此,处于宏观静止状态但具有一定温度的物体的质量也是由物体静质量和物体的分子热运动引起的质量增加两部分组成,即

$$M = M_0 + M_h, \quad (7a)$$

$$M_h = \frac{E_h}{c^2} = V\rho_h, \quad (7b)$$

其中 M_0 是物体的静质量, E_h 是物体的热能,对于理想气体,它就是内能,对于固体,它是晶格热振动能量, M_h 是物体中热能所等效的质量,故称其为热质量或热质, ρ_h 是单位体积中的热质,称热质密度。

3. 热子与热子气

过增元^[29]基于质能关系(5)(6)建立了理想气体中热子和热子气的概念。对于处在热力学平衡态,而且无宏观运动的气体,分子的质量由两部分组成,

即分子的静质量和分子热运动能量的等效质量,

$$m = m_0 + m_h, \bar{m} = m_0 + \bar{m}_h, \quad (8)$$

$$m_h = \frac{1}{2} \frac{m_0 v_*^2}{c^2}, \bar{m}_h = \frac{1}{2} \frac{m_0 \overline{v_*^2}}{c^2}, \quad (9)$$

其中 m_0 是分子的静质量, m_h 是分子的热质量, \bar{m} 是分子的时均动质量, $\overline{v_*^2}$ 是分子的时均平方速度,

$\frac{1}{2} m_0 \overline{v_*^2}$ 是分子的时均热能, 所以 \bar{m}_h 就是分子的时均热质量. 我们可以把一个分子的时均热运动能量定义为一个热子, 它具有以下特征: 1) 热子总是附着在分子之上, 它们具有相同的运动速度和数密度. 所以热子的瞬时速度也是 v_* , 热子的时均平方速度也是 $\overline{v_*^2}$. 与光子、声子一样, 热子是能量子而无静止质量. 然而, 热子与光子、声子不同之处在于热子的质量可以连续变化, 是一种非量子化的准粒子. 大量无规运动的热子组成了热子气. 2) 处在热力学平衡态时的气体分子间相互碰撞时, 分子的静质量不变, 分子的瞬时动能会发生变化, 但是, 分子的时均动能保持不变, 即热子的时均热质量保持不变.

文献 [29] 中还给出了热子气的压强公式和热子气的状态方程. 我们把只考虑分子静质量的气体称静质气体, 而把具有动质量分子组成的气体称动质气体. 采用气体分子动力论的分析, 可知动质气体的压力为

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{3} n \overline{mv_* \cdot v_*} \\ &= \frac{1}{3} n \overline{m_0 v_*^2} + \frac{1}{3} n \overline{m_h v_*^2} \\ &= p_0 + p_h, \end{aligned} \quad (10)$$

其中 p_0 是静质气体的压力, p_h 是热子气的压力, p 是动质气的压力. 把 (8) 式中热子的瞬态质量关系式代入 (10) 式可求得热子气的压力

$$p_h = \frac{5}{18} \frac{nm_0}{c^2} (\overline{v_*^2})^2. \quad (11)$$

热子气的状态方程

$$p_h = \frac{5}{3} \rho_h RT, \quad (12)$$

其中 $\rho_h = \rho C_v T / c^2$.

动质气体的状态方程

$$p = p_0 + p_h = \left(\rho_0 + \frac{5}{3} \rho_h \right) RT. \quad (13)$$

由于 $p_h \ll p_0$,

$$p \approx p_0 = \rho_0 RT. \quad (14)$$

众所周知, 气态介质中的压力梯度是气体流动

的驱动力, 由于 $p_h \ll p_0$, 所以此时不需要考虑热质压力的影响. 然而对于压力均匀而温度不均匀的气态介质, 其中没有静质气体的流动. 而此时热质压力梯度虽小, 但却不能忽略, 因为热质压力梯度将推动热质运动(流动), 也就是说热质压力梯度是热量(热质)传递的驱动力. 关于热质的运动方程将在后面章节中评述.

4. 声子和声子气

由热力学分析可得到固体的德拜状态方程^[30]

$$p = - \frac{\partial E_{D0}}{\partial V} + \frac{\gamma E_{D0}}{V}, \quad (15)$$

其中 p 和 V 分别是固体的压力和体积, E_{D0} 是晶格热振动能量, 即储存在固体中的热能, γ 是格留乃森常数. 等式右边第一项是原子间作用力的贡献, 称静压力, 第二项是晶格热振动的贡献, 称热压力^[31]. 过增元等^[32]把方程 (15) 中的热压力分离出来,

$$p_0 = \frac{\gamma E_{D0}}{V}. \quad (16)$$

当固体温度比德拜温度高很多时, 比热容满足 Dulong-Pefit 定律, 这样固体的热能可以表示

$$E_{D0} = M_0 CT = 3R_{\text{mol}} T = 3M_0 RT, \quad (17)$$

其中 M_0 是物体的静止质量, R 是气体常数. 从 (17) 式看到, 质量为 M_0 的物体在热(温度)场中具有的热振动能量为 E_{D0} , CT 是单位质量具有的热能, 它就是热势(就如物体在重力场中的势为高度与重力加速度的乘积, 其物理意义为单位质量具有的重力势能). 把 (17) 式代入 (16) 式就得到了晶格热振动的状态方程

$$p_0 = 3\gamma\rho_0 RT = \gamma\rho_0 CT, \quad (18)$$

其中 C 是比热容, ρ_0 是固体的密度, 对于不同物体, 格留乃森常数 γ 的值在 0.8—2.0 范围之内. 从 (18) 式可以看到, 高温条件下的固体热振动的状态方程与理想气体状态方程很类似. 由于固体膨胀系数很小, 晶格振动的热压力只与温度有关.

固体晶格热振动的能量是量子化的, 把能量量子化的格波称为声子, 声子气是由大量声子所组成. 声子气的能量就代表了固体的热振动能量. 按爱因斯坦的质能统一的概念, 声子气的等效质量为

$$M_h = \frac{E_{D0}}{c^2} = \frac{M_0 CT}{c^2}. \quad (19)$$

热质与晶格静质具有同样的热势, 即 CT , 所以

热质在热场中具有的能量称热质势能，

$$dE_h = M_h d(CT) = \frac{M_0 C^2}{c^2} T dT, \quad (20a)$$

$$E_h = \int_0^T dE_h = \frac{1}{2} M_h (CT). \quad (20b)$$

类似于(18)式,可求得声子气(热质)的状态方程

$$p_h = \frac{\gamma E_h}{V} = \frac{3}{2} \gamma \rho_h RT = \frac{\gamma \rho_0}{2c^2} (CT)^2, \quad (21)$$

其中 $\rho_h = \rho CT/c^2$ 是声子气的等效质量密度,即固体中的热质密度.

因此,固体中的压力也是由静质压力和热质压力组成,即

$$p = p_0 + p_h, \quad p_h \ll p_0. \quad (22)$$

固体中如存在压力梯度将产生变形,并与应力相平衡,而当存在热质压力梯度时,就会出现热质的运动,即热量的传递.

5. 普适导热定律

5.1. 热质运动速度和热质守恒方程

当介质具有非均匀的温度场时,介质中就存在热质压力梯度,它推动热质的运动.我们可以从传热学中常用的物理量热流量或热流密度导出热质(热量)的运动速度这个物理量

$$q = \rho_0 CT u_h, \quad (23)$$

其中 q 是热流密度, $\rho_0 CT$ 是介质单位体积的热能, u_h 是热量运动的速度.这个表达式的建立为牛顿力学描述热量传递奠定了基础,而两边除以光速平方得

$$q_h = \frac{q}{c^2} = \frac{\rho_0 CT}{c^2} u_h = \rho_h u_h, \quad (24)$$

其中 q_h 是热质流密度, u_h 是热质流速.对于气体,它等于热子的漂移速度或热子气的宏观运动速度,对于固体,它就是声子的漂移速度或声子气的宏观运动速度.

由于热质在运动过程中是不会产生,也不会消失,其守恒方程为

$$\frac{\partial \rho_h}{\partial t} + \text{div}(\rho_h U_h) = 0. \quad (25)$$

方程(25)实际上就是热量守恒方程.在一维稳态条件下,例如对于图1所示的无穷大平板导热($T_1 > T_2$)(25)式可简化为

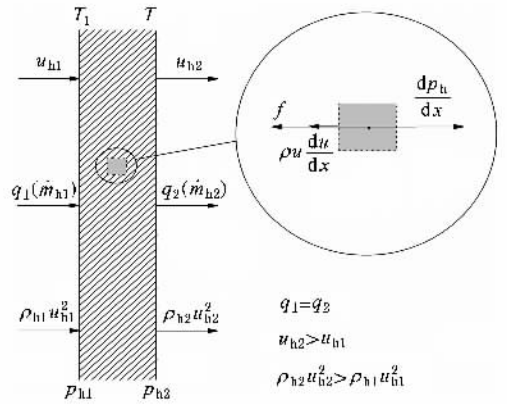


图1 平板一维导热示意图

$$\rho_h u_h = q_h = \text{const}, \quad (26)$$

这表明进入和流出平板的热质(热流密度)是相等的,但由于热质密度 ρ_h 是温度的函数,流出平板的热质速度总要大于流进平板的热质速度,

$$\frac{u_{h2}}{u_{h1}} = \frac{\rho_{h1}}{\rho_{h2}} = \frac{T_1}{T_2}, \quad (27)$$

$$u_{h2} > u_{h1},$$

这表明从高温流向低温的热质总是不断地被加速的.因此,其动量也是不断增加的.

5.2. 热质动量守恒方程(热质运动方程)

文献[32]基于牛顿力学的分析方法建立了热质运动方程

$$\rho_h \left(\frac{\partial U_h}{\partial t} + U_h \cdot \nabla U_h \right) + \nabla P_h + f_h = 0, \quad (28)$$

其中第一项是热质的惯性力,包括热质速度空间变化和时间变化引起的惯性力,第二项是热质压力梯度,第三项是热质运动的阻力.对于气态介质,热子气(热质)运动的阻力源自热子与热子的碰撞,对于固体,声子气运动的阻力源自于晶格振动的非简谐性和介质中的缺陷.

由方程(23)可得

$$\frac{\partial u_h}{\partial t} = \frac{1}{\rho_0 CT} \frac{\partial q}{\partial t} - \frac{q}{\rho_0 CT^2} \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (29a)$$

$$\frac{\partial u_h}{\partial x} = \frac{1}{\rho_0 CT} \frac{\partial q}{\partial x} - \frac{q}{\rho_0 CT^2} \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (29b)$$

固体中的热质压力梯度

$$\frac{\partial p_h}{\partial x} = \frac{\gamma \rho_0 C^2}{c^2} T \frac{\partial T}{\partial x} = \gamma \rho_h C \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (29c)$$

从此式可以看到温度梯度就代表了作用在单位热质上的压力梯度(驱动力).

当速度不是很大时,阻力通常与速度成正比,

$$f = \beta u_h, \quad (30)$$

其中, β 是阻力系数。

对于一维问题,把(29)(30)式代入方程(28)

后,两边再乘以因子 $\frac{K}{C\rho_h}$ 得

$$\begin{aligned} & \frac{K}{\rho_0 C^2 T} \frac{\partial q}{\partial t} - \frac{Kq}{\rho_0 C^2 T^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{Kq}{\rho_0^2 C^3 T^2} \frac{\partial q}{\partial x} \\ & - \frac{Kq^2}{\rho_0^2 C^3 T^3} \frac{\partial T}{\partial x} \\ & = \gamma K \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{Kc^2}{\rho_0^2 C^3 T^2} \beta q. \end{aligned} \quad (31a)$$

为了便于和 CV 模型比较,令

$$\frac{K}{\gamma \rho_0 C^2 T} = \frac{a}{\gamma CT} = \tau \quad (32)$$

是特征时间,则(31a)式可写为

$$\begin{aligned} & \tau_t \left[\frac{\partial q}{\partial t} - u_h \frac{\partial (\rho_0 CT)}{\partial t} \right] + \tau_t u_h \left[\frac{\partial q}{\partial x} - u_h \frac{\partial (\rho_0 CT)}{\partial x} \right] \\ & = -K \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{Kc^2}{\gamma \rho_0^2 C^3 T^2} \beta q, \end{aligned} \quad (31b)$$

等式左边的第一项来自于热质动量的时间变化率,左边的第二项来自于热质动量的空间变化率,等式右边第一项则代表热质的压力梯度,而最后一项反映了热质运动所遇到的阻力。(31b)式是含有特征时间的热质动量守恒方程。由于导热过程本质上就是热量(热质)运动(传递)过程,所以方程(31)是热量(热质)运动定律,也就是普适导热定律。

5.3. 傅里叶导热定律

在通常情况下,当热质流密度不是很大时,热质速度的空间变化引起的惯性力可以忽略,当加热或冷却速率不是很高时,则可以忽略热质速度的时间变化引起的惯性力。这样,热质动量守恒方程(28)可简化为

$$\nabla p_h + f_h = 0, \quad (33a)$$

其物理意义是热质压力梯度和阻力的平衡关系式。

由(30)和(31)式(33a)式可表示为

$$\gamma K \frac{dT}{dx} + \frac{K}{\rho_h^2 C^2} \beta q = 0. \quad (33b)$$

由于在常规条件下,傅里叶导热定律总是适用,代入上式后从而可求得阻力系数

$$\beta = \frac{\gamma c^2 C \rho_h^2}{K}, \quad (34)$$

代入(31b)式可得以热流(或热质流速)和温度表示

的热质动量守恒方程

$$\begin{aligned} & \tau_t \left[\frac{\partial q}{\partial t} - u_h \frac{\partial (\rho_0 CT)}{\partial t} \right] + \tau_t u_h \left[\frac{\partial q}{\partial x} - u_h \frac{\partial (\rho_0 CT)}{\partial x} \right] \\ & = K \frac{\partial T}{\partial x} - q. \end{aligned} \quad (31c)$$

当热质的惯性力可以忽略时,热质动量守恒方程(31c)就退化为傅里叶导热方程

$$q = -K \frac{dT}{dx} \text{ 或 } -\frac{q}{K} = \frac{dT}{dx}. \quad (35)$$

傅里叶导热定律的物理意义通常的理解是:温度梯度是热流的驱动力且它们之间具有正比关系。然而,从上面的推导可以看到,当热质的惯性力与压力梯度和阻力相比很小而可以忽略时,热质运动方程(动量守恒方程)(28)就退化为傅里叶导热定律(对于气体介质中的热质运动,分析可以得到同样的结论,但压力梯度和阻力系数的表达式有所不同)。因此,傅里叶导热定律的物理实质是忽略惯性力条件下热质压力梯度(驱动力)与阻力的平衡式(参看图1),傅里叶导热定律中的温度梯度代表了作用在单位热质上的热质压力梯度,而热流除以导热系数反映的是单位热质运动的阻力。

5.4. 极高热流密度条件下的稳态非傅里叶导热

现有绝大多数文献所报道的都是关于在快速瞬态条件下的非傅里叶导热的研究。这是因为在稳态条件下 CV 方程以及与其类似的非傅里叶导热方程就退化为傅里叶导热定律,即非傅里叶导热只是在瞬态情况下出现,然而从方程(31c)可以看到,即使时间项消失后,仍然与傅里叶导热定律不同,热流密度不但与温度梯度有关,还与热质速度的空间变化率有关。

此时的导热定律为

$$\frac{\tau}{\gamma C u_h} \frac{du_h}{dx} = -K \frac{dT}{dx} - q, \quad (36a)$$

与连续性方程联立,可得到

$$K \frac{dT}{dx} + q = \frac{Kq^2}{\gamma \rho_0^2 C^3 T^3} \frac{dT}{dx}, \quad (36b)$$

或

$$q = - \left(1 - \frac{q^2}{\gamma \rho_0^2 C^3 T^3} \right) K \frac{dT}{dx}. \quad (36c)$$

从上式可以看到,热流密度与温度梯度不再成线性关系。令 $K_a = \left(1 - \frac{q^2}{\gamma \rho_0^2 C^3 T^3} \right) K$ 为表观导热系数,则

$$q = -K_a \frac{dT}{dx}, \quad (36d)$$

其中因子 $\frac{q^2}{\gamma\rho_0^2 C^3 T^3}$ 反映了热质惯性力的影响. 在通常情况惯性力可以被忽略, 以硅平板为例, $T_1 = 400$ K, $T_2 = 300$ K, 热流密度 $q = 10^6$ W/m², 因子 $\frac{q^2}{\rho_0^2 C^3 T^3} \approx 10^{-14} \ll 1$, 意味着惯性力与驱动力或阻力相比可以被忽略, 因此傅里叶导热定律适用.

然而, 在某些极端条件下, 例如在碳纳米管导热系数的数值计算或实验测量时, 由于纳米碳管的长度很短, 所以温度梯度很大而可以导致极高的热流密度, 此时, 不能用傅里叶导热定律, 而必须用方程 (36d) 来确定纳米碳管的导热系数. 例如, 对于两端温差为 20 K, 平均温度为 70 K 的纳米碳管, 设导热系数 $K = 5000$ W/mK, 管长变化范围 20—300 μm. 此时, 热流密度可达 10¹² W/m² 以上, 此时傅里叶导热定律不再适用, 如应用傅里叶导热定律, 即用热流密度除以温度梯度所得到的碳管的表观导热系数, 而不是真实导热系数. 求解导热方程 (36c) 可求得表观导热系数与管长变化的曲线示于图 2. 从图中可以看到, 表观导热系数随管长而增加, 管长愈短, 惯性力影响愈大, 用傅里叶导热定律确定的表观导热系数偏离真实的导热系数值愈多.

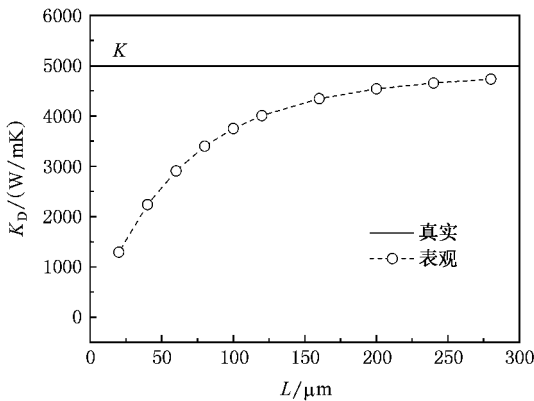


图 2 表观导热系数随长度的变化曲线

5.5. 超快速加热条件下的非傅里叶导热

描述快速瞬态导热非傅里叶效应最常用的模型是 CV 方程, 即 (1) 式, 联立热量守恒方程可得到双曲型导热方程, 即 (2) 式 (2) 式中 τ 称之为弛豫时间, 它的物理意义是从非平衡态到建立局域平衡态所需的时间, 在室温条件下, 对于大多数材料而言, 弛豫时间 τ 的数量级为 10⁻¹⁰—10⁻¹⁴ s, 有时则把弛豫时间理解为温度梯度驱动下建立相应的热流所需

的时间. 这意味着热流具有某种惯性. Onsager^[33]曾指出傅里叶导热定律忽略了热流加速所需时间, Kaliski 给出了一种热惯性理论, 经简化后可得到 CV 模型^[34].

本文引入了热量具有等效质量, 即热质的概念, 这不是假定, 而是实实在在的热质惯性, 从而能建立热质运动 (热量传递) 方程, 即普适导热定律 (31c 式), 它由时间变化引起的和由空间变化引起的惯性力两部分所组成, 方程 (31c) 中等式左边两项都是惯性力项, 这是由于热质速度是热流 q 和温度 T 的函数, 所以每项又可分为两部分. 从 (1) 和 (31c) 式的对比中可以看到 CV 模型只考虑了时间变化引起的惯性效应, 而没有考虑空间变化引起的惯性效应, 而且只考虑了热流变化 (第一项的第一部分) 而没有考虑温度变化 (第一项的第二部分) 引起的惯性效应.

普适导热定律 (31c) 再联立能量守恒方程并适当简化可以得到基于热质运动概念的导热微分方程

$$\frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{1}{\tau_i} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{2qK}{\tau_i \gamma \rho_0^2 C^3 T^2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \left(1 - \frac{q^2}{\gamma \rho_0^2 C^3 T^3}\right) \frac{K}{\rho_0 C \tau_i} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (37)$$

和基于 CV 模型的导热方程式 (2) 相比, 它也是具有阻尼的波动方程, 但是增加了因速度空间变化引起的惯性力的影响.

为了讨论基于热质概念的普适导热定律与 CV 模型在描述热波传递现象时的区别, 考虑一个一维的热扰动传播问题, 如图 3 所示, y 和 z 方向为无限大, x 方向的长度为 L , 物体在初始时刻的温度 T_0 是均匀分布, 初始时刻后两边界温度同时降到 T_w 并保持不变. 在计算中所有量都进行无量纲化, 无量纲的物理量: 坐标为 $x^* = x/L$, 温度为 $T^* = T/T_0$, 时间为 $t^* = t/\tau$.

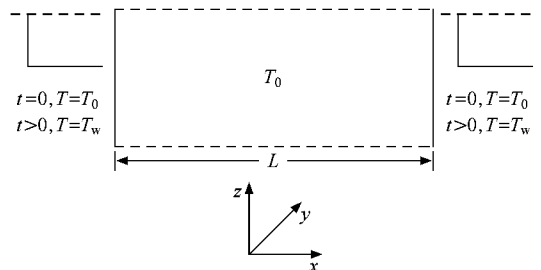


图 3 一维热扰动传播示意图

当两边界温度热扰动为 $T_w^* = 0.3$ 时, 由普适

导热定律和 CV 模型解得导体内温度场随时间的变化如图 4 所示,其中图 4(a)(b)(c)和(d)分别是无量纲时间为 0.3、0.6、0.9 和 1.2 时刻的温度分布。从图 4(a)可以看到,基于热质理论的普适导热定律和 CV 模型获得的温度扰动的波峰前沿前进的无量纲速度差别不大,但是, CV 模型得到的波峰后沿温度分布较之普适导热定律得到的要陡,也就是说,普适导热定律获得物体在扰动初期的温度下降要慢一些,这正是由于热质理论方程中热流在空间传播时由于加速需克服惯性力所导致的。随着时间的进展,物体两侧的两个波峰继续前进直至相互叠加,如图

4(b)所示,热波传递过程中到达固体边界还会产生反射并向回传递,如图 4(c)和(d)所示。但是,从图中可以看到 CV 模型的结果在两个温度波峰叠加时温度分布会出现负值,这在物理上是不可能的非物理现象,也与文献 [11, 12] 所报道的现象相一致,反映了 CV 模型的缺陷,而基于热质理论的普适导热定律波动方程在温度波峰叠加时则不会出现负温度,因为热质理论模型中较大的热流加速和温度急剧变化都具有惯性,导致温度分布变化较之 CV 模型平缓,从而能克服 CV 模型出现负温度非物理现象的缺陷。

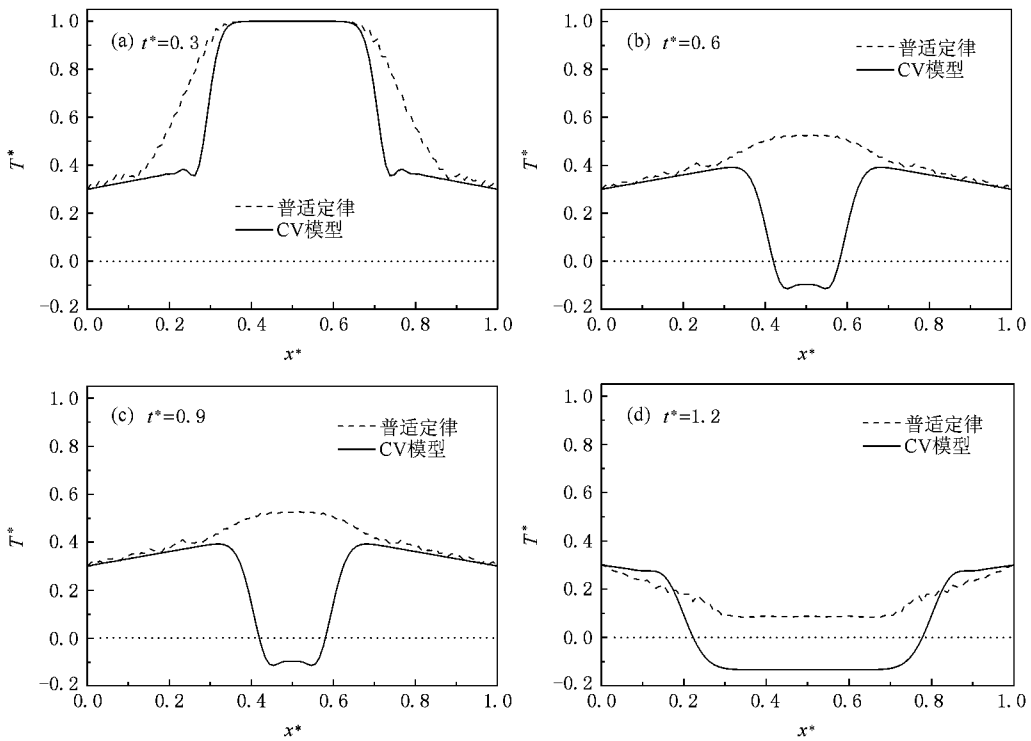


图 4 导体内温度分布随时间的变化

6. 结 论

1. 基于热质(热量的等效质量)的概念,用牛顿力学分析方法建立了由驱动力、阻力和惯性力所组成的热质动量守恒方程(对于气体它就是热子气在气体介质中的运动方程,对于固体它就是声子气在固体介质中的运动方程),因而导热方程是具有阻尼的波动方程。由于热量传递本质上是热质在介质中的运动,因此热质运动方程描述的是介质中热量传递的基本规律,能统一描述多种条件下的导热现象,因此它是普适导热定律。傅里叶导热定律是唯象定

律, CV 模型以及类似的非傅里叶导热模型都是以某些假定为基础的,而普适导热定律是基于第一性原理推导而得。

2. 在通常的热流密度条件下,热质惯性力可以被忽略时,普适导热定律可退化为傅里叶导热定律。温度梯度代表了作用在单位热质上的驱动力,而热流密度除以导热系数代表了单位热质运动时受到的阻力,所以傅里叶导热的物理本质是驱动力(压力梯度)与阻力的平衡式。

3. 对于微尺度条件下的导热,热流密度可以极高,此时速度空间变化引起的惯性力不能被忽略,在稳态条件下,也将出现非傅里叶效应,即热流密度与

温度梯度不再成线性关系,热流密度与温度梯度的比值是表观导热系数而非真实导热系数.数值模拟碳纳米管的导热系数表明,此时若仍然以热流与温度梯度之比值来计算碳纳米管导热系数,它将小于其实际值,温度愈低,热流密度愈大,偏差就愈大,并将出现某些文献中报道的导热系数随管长增加的假象.

4. 在超快速加热条件下必需应用基于普适导热定律的导热微分方程,热质惯性力都不能被忽略,它代表着部分热量是以波的形式运输的.与 CV 模型不同,普适导热定律既解决了热扰动传播速度无穷大的非物理现象,在低温下也不会出现负温度的不合理的结果.

- [1] Fourier J 1955 *Analytical Theory of Heat* (New York : Dover Publications)
- [2] Eckert E R G , Drake R M ; Hang Q (Trans) 1983 *Heat and Mass Transfer* (Beijing : Science Press)(in Chinese)[埃克特, 德雷克; 航青 (译) 1983 传热与传质分析 (北京 : 科学出版社)]
- [3] Dampier W C 2001 *A History of Science and Its Relations with Philosophy and Religion* (Guilin : Guangxi Normal University Press) [丹皮尔著; 李珩译 2001 科学史及其与哲学和宗教的关系 (桂林 : 广西师范大学出版社)]
- [4] Cattaneo C 1948 *Atti . Sem . Mat . Fis . Univ . Modena* **3** 3
- [5] Vernotte P 1958 *C. R. Acad. Sci.* **246** 3154
- [6] Gurtin M E , Pipkin A C 1968 *Arch. Ration Mech. Anal.* **31** 113
- [7] Coleman B D , Fabrizio M , Owen D R 1982 *Arch. Ration Mech. Anal.* **80** 135
- [8] Tavernier J 1962 *C. R. Acad. Sci.* **254** 69
- [9] Guyer R A , Krumhansl JA 1966 *Phys. Rev.* **148** 766
- [10] Maurer M J 1969 *J. Appl. Phys.* **40** 5123
- [11] Bai C , Lavine A S 1995 *J. Heat Transfer* **117** 257
- [12] Körner C , Bergmann H W 1998 *Appl. Phys. A* **67** 397
- [13] Tzou D Y 1995 *ASME J. Heat Transfer* **117** 8
- [14] Tzou D Y 1997 *Macro to microscale heat transfer : the lagging behavior* (Washington : Taylor & Francis)
- [15] Xu Y S , Guo Z Y 1995 *Int. J. Heat Mass Transfer* **38** 2919
- [16] Masuda K , Okuma O , Nishizawa T , Kanaji M , Matsumura T , Tang D W , Araki N 1996 *Int. J. Heat Mass Transfer* **39** 1585
- [17] Antaki P J 1998 *Int. J. Heat Mass Transfer* **41** 2253
- [18] Cho C J , Juhng W N 2000 *J. Korean Phys. Soc.* **36** 209
- [19] Fan Q M , Lu W Q 2002 *Int. J. Heat Mass Transfer* **45** 2815
- [20] Zhang H W , Zhang S , Guo X , Bi J Y 2005 *Int. J. Solids Struct.* **42** 877
- [21] Brorson S D , Fujimoto J G , Ippen E P 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 1962
- [22] Tang D W , Araki N 1996 *Int. J. Heat Mass Transfer* **39** 1585
- [23] Lepri S , Livi R , Politi A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1896
- [24] Narayan O , Ramaswamy S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 200601
- [25] Maruyama S 2002 *Physica B* **323** 193
- [26] Livi R , Lepri S 2001 *Nature* **421** 327
- [27] Shen X J 1985 *Probe into the Essence of Heat* (Beijing : Beijing Publishing House)(in Chinese)[申先甲 1985 探索热的本质 (北京 : 北京出版社)]
- [28] Einstein A , Lorentz H A , Minkowski H , Weyl H 1952 *The principle of relativity* (New York : Dover Publications)
- [29] Guo Z Y 2006 *J. Eng. Thermophys.* **27** 631 (in Chinese)[过增元 2006 工程热物理学报 **27** 631]
- [30] Tien C L ; Gu Y Q (Trans) 1987 *Statistical thermodynamics* (Beijing : Tsinghua University Press)(in Chinese)[田长霖 ; 顾毓沁译 1987 统计热力学 (北京 : 清华大学出版社)]
- [31] Du L J , Xi T G ; Wang M H (Trans) 1987 *Introduction to solid thermophysical properties : theory and measurement* (Beijing : China Metrology Publishing House)(in Chinese)[杜洛金 , 奚同庚 ; 王梅华译 1987 固体热物理性质导论 理论和测量 (北京 : 中国计量出版社)]
- [32] Guo Z Y , Cao B Y , Zhu H Y , Zhang Q G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3306 (in Chinese)[过增元、曹炳阳、朱宏晔等 2007 物理学报 **56** 3306]
- [33] Onsager L 1931 *Phys. Rev.* **37** 405
- [34] Kaliski S 1965 *Bull. Acad. Pol. Sci.* **XIII** 211

A general heat conduction law based on the concept of motion of thermal mass

Guo Zeng-Yuan[†] Cao Bing-Yang

(Department of Engineering Mechanics , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

(Received 1 November 2007 ; revised manuscript received 5 December 2007)

Abstract

Based on the mass-energy relation in Einstein's relativity theory, thermal energy has equivalent mass, which is referred to as thermal mass. The concepts of phonon gas mass in solids and thermal gas mass in gases are then introduced. Based on these concepts, the momentum conservation equation, including driving force, resistance and inertial force, for the thermal mass motion is established using Newtonian mechanics. Since the heat conduction is just the motion of the thermal mass (phonon gas or thermal gas) in a medium, the momentum conservation equation for thermal mass is a general heat conduction law which can unify the description of heat conduction under various conditions. The momentum conservation equation reduces to Fourier's heat conduction law when the heat flux is not very high so that the inertial force of the thermal mass can be ignored. For micro-/nano-scale heat conduction, the heat flux may be very high and the inertial force due to the spatial velocity variation can not be ignored. Therefore, the heat conduction deviates from Fourier's law, i. e. non-Fourier phenomenon takes place even under steady state conditions. In such cases, the thermal conductivity can not be calculated by the ratio of the heat flux to the temperature gradient. Under ultra fast heat conduction conditions, the inertial force of the thermal mass must be taken into consideration and the momentum conservation equation for the thermal mass motion leads to a damped wave equation. Compared with the CV model, the general heat conduction law includes the inertial force due to the spatial velocity variation. Thus the physically impossible phenomenon of negative temperatures induced by the thermal wave superposition described by CV model, is eliminated, which demonstrates that the present general law of heat conduction based on thermal mass motion is more reasonable.

Keywords : Fourier heat conduction law , general heat conduction law , motion of thermal mass , non-Fourier heat conduction

PACC : 4410 , 6370 , 0340G

[†] E-mail : demgzy@tsinghua.edu.cn