

基于双相弛豫理论的石墨烯中热波传播

郭旭才 陈美多 谢雨珊 王鹏飞 徐松林[†]

(中国科学技术大学, 中国科学院材料力学行为和设计重点实验室, 合肥 230027)

(2025 年 9 月 28 日收到; 2025 年 10 月 29 日收到修改稿)

为研究石墨烯中的非稳态热波和热扩散的相互作用机制, 引入热流矢量弛豫时间 τ_q 和温度梯度弛豫时间 τ_T , 建立了双相弛豫理论模型. 分别基于 Bromwich 积分方法和有限差分方法讨论此模型的解析解和数值解, 研究了双相弛豫时间参数 B 对热波与热扩散相互作用和热输运模式调控机制的影响规律, 揭示了三阶偏导项对局部热波扰动的独特贡献. 建立锯齿形石墨烯短脉冲热冲击分子动力学模型以揭示热波与热扩散相互作用特征, 并校核模型计算参数. 研究结果表明: 纵波、面内横波、面外横波三种模式中均存在弹性波、热波、热扩散三种热能传递方式; 除面外热波波速高于面外横向弹性波波速外, 其他两种热波传播速度均低于对应的弹性波波速. 分子动力学模拟校核了双相弛豫理论模型计算参数的可靠性, 进一步揭示了热波辐射与热扩散的相互耦合作用. 本研究表明双相弛豫模型可精确描述微纳器件的非平衡热行为, 可为集成电路微器件的热辐射和热扩散防护提供理论参考.

关键词: 双相弛豫模型, 热波, 热扩散, 分子动力学模拟**DOI:** 10.7498/aps.75.20251335**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251335

1 引言

石墨烯作为典型二维量子材料, 其单原子层蜂窝状晶格结构^[1]不仅构成了碳纳米管等低维碳材料的基本单元, 更赋予其突破常规材料的良好物性. 石墨烯因卓越而独特的电子特性受到了广泛关注^[2-5]. 在电子器件领域, 石墨烯展现出创纪录的高室温载流子迁移率及弹道输运特性^[6], 同时通过纳米限域效应可调控其狄拉克锥能带结构, 这为构建超高速低功耗电子器件提供了全新物理载体. 2010 年, Lin^[7]基于外延石墨烯成功制备出截止频率达 300 GHz 的场效应晶体管 (GFET), 标志着该材料在射频电路应用的巨大突破. 然而, 石墨烯固有的零带隙特性导致器件开关比不足 (<100), 目前通过纳米带工程^[8]和 h-BN 异质集成等能带结构工程策略, 已实现亚阈值摆幅的显著优化. 值得关注的是, 当器件特征尺寸进入亚 10 nm 节点

时, 瞬态热载荷引发的非平衡热输运效应将主导器件失效机制, 这使得石墨烯中热波传播研究成为微电子器件可靠性设计的核心挑战.

在石墨烯的高频瞬时热加载工况下, 其热输运行为呈现明显的非傅里叶特性. 事实上, 非均质材料在瞬时热冲击下, 傅里叶定理的预测结果和实验结果存在较大偏差: 实验测得的瞬时热冲击靶板的表面温升比理论预测值高 300 K^[9]; 多孔材料的微秒激光脉冲实验结果表明局部区域呈现明显的非傅里叶传热^[10]等. 此时, 热流和温度间存在显著的热弛豫效应. 为了描述瞬态热传导过程, Cattaneo^[11]和 Vernotte^[12]在传统傅里叶热传导模型中引入了弛豫时间, 提出了双曲型热传导方程 (C-V 热波模型), 即: $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t + \tau) = -k \nabla T(\mathbf{r}, t)$. 其中, $\mathbf{q}$ 为热流矢量, k 为热传导系数, ∇T 为材料的温度梯度, τ 为弛豫时间表征温度场对扰动的响应. 与抛物型热传导方程不同, 双曲型热传导方程描述的温度扰动具有有限的传播速度, 可引入“温度波”的概念. 但是

[†] 通信作者. E-mail: slxu99@ustc.edu.cn

在石墨烯的微尺度瞬时热加载工况下, 存在局部热扩散现象, Tzou 和 Guo^[13] 提出了双相弛豫模型, 引入两个弛豫参数来描述微观上热波和热扩散的相互作用, 即: $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t + \tau_q) = -k\nabla T(\mathbf{r}, t + \tau_T)$. 其中, τ_q 为热流矢量的弛豫时间, τ_T 为温度梯度的弛豫时间. 由此建立了可以描述微尺度热波和热扩散行为的广义方程.

目前大部分研究是采用分子动力学方法来计算石墨烯中的热流响应. Yao 和 Cao^[14] 对 100 nm 长的石墨烯条带在瞬时热加载条件下的热传导过程进行计算分析, 发现热输运存在热波和热扩散两种形式. Shiomi 和 Maruyama^[15] 在单壁碳纳米管中的瞬态热流计算过程中发现不同声子模式的热传导过程. 叶振强等^[16] 通过平衡分子动力学模拟得到单个声子的能量自相关函数衰减曲线, 发现了低频声子对热输运的贡献占主导地位. 研究结果表明, 瞬时热加载条件下石墨烯材料内部热流响应的复杂性.

上述研究工作主要集中于石墨烯介观和微观尺度的热弛豫行为, 对于其在电子器件中的应用存在较大的局限性. 本文将引入两种弛豫机制从理论模型求解入手, 研究石墨烯中瞬态热流作用规律, 以期对电子器件中石墨烯材料和结构的热流防护设计提供理论依据. 基于此, 讨论了双相弛豫模型的热波辐射和传导的耦合导热过程, 给出相应的数值分析结果; 然后应用分子动力学方法分析石墨烯中的热波传导过程, 校核双相弛豫模型计算参数, 对比研究微尺度瞬态热加载的响应规律, 阐明热波与热扩散的相互作用规律.

2 双相弛豫理论及其求解

瞬态加热是传热学中迅速崛起的新领域, 其中非平衡热力学转换和能量交换中的微观效应是需要解决的重要问题.

2.1 双相弛豫理论模型的建立

2.1.1 微纳尺度瞬态热流传输

1) 金属晶格瞬态微热流传输. 考虑电子气体的激发以及电子气体与声子的相互作用对金属晶格的快速加热, 其表达式为

$$C_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla \cdot (K \nabla T_e) - G(T_e - T_l), \quad (1)$$

$$C_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = G(T_e - T_l), \quad (2)$$

其中 C 为体积热容, K 为电子气体的导热率, 下标 e 和 l 分别表示电子和金属晶格. 消除电子气体温度 T_e , 可以得到金属晶格温度分布方程为

$$\nabla^2 T_l + \frac{\alpha_e}{C_E^2} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla^2 T_l) = \frac{1}{\alpha_E} \frac{\partial T_l}{\partial t} + \frac{1}{C_E^2} \frac{\partial^2 T_l}{\partial t^2}, \quad (3)$$

其中 $\alpha_E = \frac{K}{C_e + C_l}$, $C_E = \sqrt{\frac{KG}{C_e C_l}}$, $\alpha_e = \frac{K}{C_e}$. 外部能量首先加热电子气体, 然后再通过相互作用加热金属晶格. 声子-电子之间的能量交换由声子-电子耦合因子 G 来表征, 即: $G = \pi^4 (n_e v_s k)^2 / K$. 耦合系数取决于单位体积内自由电子的数量密度 n_e 和声速 v_s . 其中 v_s 满足关系式: $v_s = \frac{k}{2\pi\hbar} (6\pi^2 n_a)^{-1/3} T_D$, 声子-电子耦合因子通过声速进一步取决于单位体积原子数密度 n_a 和德拜温度 T_D .

2) 介电晶体瞬态微热流. 忽略电子传导以及其他导致声子系统中动量损失的相互作用, Guyer 和 Krumhansl^[17] 提出了热流矢量与温度梯度之间的本构关系:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{c^2 C_p}{3} \nabla T + \frac{1}{\tau_R} \mathbf{q} = \frac{\tau_N c^2}{5} [\nabla^2 \mathbf{q} + 2\nabla(\nabla \cdot \mathbf{q})], \quad (4)$$

其中 c 为声子的平均速度, τ_R 为描述声子系统碰撞过程中动量损失的弛豫时间, τ_N 为声子系统中正常碰撞过程动量守恒的弛豫时间, $\mathbf{q}$ 为热流矢量, C_p 为材料比热容.

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{r}, t) = C_p \frac{\partial T}{\partial t}(\mathbf{r}, t). \quad (5)$$

结合 (4) 式与能量守恒方程式 (5), 消去热流向量, 可得到:

$$\nabla^2 T + \frac{9\tau_N}{5} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla^2 T) = \frac{3}{\tau_R c^2} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{3}{c^2} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}. \quad (6)$$

(3) 式与 (6) 式反映了快速瞬变和微结构相互作用的综合效应.

2.1.2 宏观尺度瞬态热流传输

考虑温度梯度与热流矢量之间的滞后关系, 将热波阵面后的扩散作用优化为热波的局部扩散, Tzou^[18] 提出了双相弛豫模型来描述快速瞬变和微结构作用的综合效应, 其表达式为 $\mathbf{q}(\mathbf{r}, t + \tau_q) = -k\nabla T(\mathbf{r}, t + \tau_T)$. 其中, τ_q 为热流矢量弛豫时间, τ_T 为温度梯度弛豫时间. $\tau_T > \tau_q$ 表示在材料体积上建立的温度梯度是热流的结果; $\tau_q > \tau_T$ 表示热

流矢量是材料上建立的温度梯度的结果. 与刚体能量方程结合, 双相弛豫模型方程的一阶近似可以表示为

$$\nabla^2 T + \tau_T \frac{\partial}{\partial t} (\nabla^2 T) = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\tau_q}{\alpha} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, \quad (7)$$

其中 $\alpha = k/\rho c$ 为热扩散系数. 对比可以得到: 双相弛豫模型与声子和电子相互作用模型一致时, 需满足: $\alpha = \alpha_E$, $\tau_T = \alpha_E/C_E^2$, $\tau_q = \alpha_E/C_E^2$; 与介电晶体模型一致时, 需满足: $\alpha = \tau_R c^2/3$, $\tau_T = 9\tau_N/5$, $\tau_q = \tau_R$. 两个宏观唯象参数, 即: 热流矢量弛豫参数 τ_q (微尺度时间效应) 与温度梯度弛豫参数 τ_T (微尺度空间效应), 可反映瞬态热输运行为, 全面分析热输运过程.

2.2 双相弛豫理论模型的解析求解

对于单相弛豫理论模型, 即只考虑热流矢量弛豫时间 τ_q 时, 采用拉普拉斯变换等方法, 姜任秋^[19]揭示了非 Fourier 效应的短时、薄层特点; 苗春贺等^[20]研究了失效阵面的空间扩散特性; 谢雨珊等^[21]得到了幂律梯度介质中的两类解. 弛豫时间决定了非 Fourier 效应的强弱程度. 对于双相弛豫理论模型, 即考虑热流矢量弛豫时间 τ_q 和温度梯度弛豫时间 τ_T , 其一维形式为

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \tau_T \frac{\partial^3 T}{\partial x^2 \partial t} = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\tau_q}{\alpha} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}. \quad (8)$$

当介质的初始温度为 T_0 , 初始温度变化率为 0, 即: $T = T_0$, $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$ ($t = 0$). 在左边界施加热扰动 T_w , 远离热扰动边界处温度保持初始温度 T_0 , 即: $T = T_w$ ($x = 0$); $T = T_0$ ($x \rightarrow \infty$). 引入无量纲量: $\theta = \frac{T - T_0}{T_w - T_0}$, $\delta = \frac{x}{2\sqrt{\alpha\tau_q}}$, $\beta = \frac{t}{2\tau_q}$. 则方程 (8), 以及初始条件和边界条件可以表示为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \delta^2} + B \frac{\partial^3 \theta(\delta, \beta)}{\partial \delta^2 \partial \beta} = 2 \frac{\partial \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta} + \frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta^2}, \\ \theta = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial \beta} = 0 \quad (\beta = 0), \\ \theta = 1 \quad (\delta = 0), \quad \theta = 0 \quad (\delta \rightarrow \infty), \end{cases} \quad (9)$$

其中 $B = \tau_T/2\tau_q$. 对应的拉普拉斯变换形式为

$$\begin{cases} (1 + Bp) \frac{d^2 \tilde{\theta}(\delta, p)}{d\delta^2} - (p^2 + 2p) \tilde{\theta}(\delta, p) = 0, \\ \tilde{\theta}(\infty, p) = 0, \quad \tilde{\theta}(0, p) = \frac{1}{p}, \end{cases} \quad (10)$$

其中 $\tilde{\theta}$ 为 θ 的拉普拉斯变换. 此方程的拉普拉斯变换解为

$$\tilde{\theta}(\delta, p) = C_1 e^{\sqrt{\frac{p(p+2)}{1+Bp}} \delta} + C_2 e^{-\sqrt{\frac{p(p+2)}{1+Bp}} \delta}. \quad (11)$$

考虑边界条件, 则有

$$\tilde{\theta}(\delta, p) = \frac{1}{p} e^{-\sqrt{\frac{p(p+2)}{1+Bp}} \delta}. \quad (12)$$

(12) 式中存在三个分支点, 使用 Bromwich 积分可得到温度分布时域解为

$$\theta(\delta, \beta) = 1 - I_1(\delta, \beta) - I_2(\delta, \beta), \quad (13)$$

$$\text{其中 } I_1(\delta, \beta) = \frac{1}{\pi} \int_2^\infty \sin \left[\delta \sqrt{\frac{\rho(\rho-2)}{B\rho-1}} \right] e^{-\beta\rho} \frac{d\rho}{\rho},$$

$$I_2(\delta, \beta) = \frac{1}{\pi} \int_0^{1/B} \sin \left[\delta \sqrt{\frac{\rho(\rho-2)}{B\rho-1}} \right] e^{-\beta\rho} \frac{d\rho}{\rho}.$$

图 1(a) 所示为 $\beta = 1$ 时刻温度随位置的变化. 当 $B = 0$ 时, 即 $\tau_T = 0$, 模型退化为单相弛豫模型, 温度梯度的迅速传递促使存在陡峭的波前, 此时热波波速为 $\sqrt{\alpha/\tau_q}$. 随着 B 的增大, 即 $\tau_T > 0$ 时, 方程为双相弛豫模型, 温度梯度优先于热流传

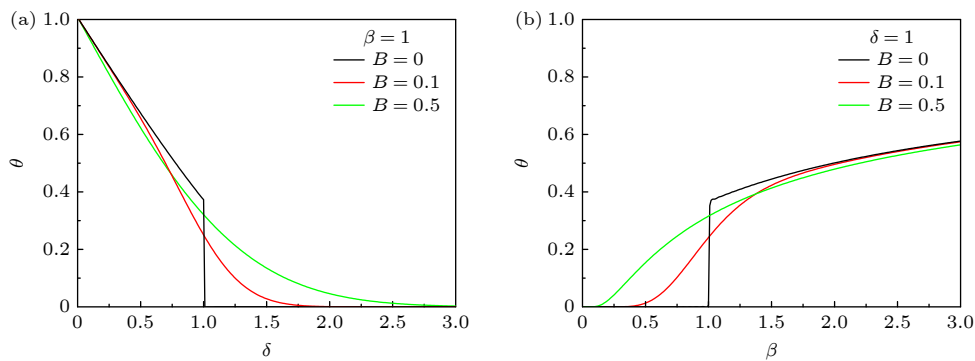


图 1 基于数值逆变换的温度分布 (a) $\beta = 1$; (b) $\delta = 1$

Fig. 1. Temperature distribution based on the numerical inverse transformation: (a) $\beta = 1$; (b) $\delta = 1$.

递, 热波阵面后的扩散作用转化为热波的局部扩散, 整个过程中的波动属性逐渐减弱; 随着 B 的继续增大, 此过程最终转变成热扩散. 例如, $B = 0.1$ 时, 热波的局部扩散作用使得整个过程中的热波阵面逐渐减弱; $B = 0.5$ 时, 热扩散主导热输运过程, 表现为傅里叶导热模型. 图 1(b) 所示为 $\delta = 1$ 位置时温度随时间的变化, 反映了相似的规律. 上述理论解主要基于无限大边界得到, 对于复杂的边界条件仍需要结合数值解进行分析.

2.3 双相弛豫理论模型的数值求解

傅里叶定律不考虑微观结构相互作用对热传导的影响, 始终满足局部热平衡. 瞬态加热始终伴随非平衡热力学转换和能量交换, 反映出热传导与波动双重属性, 为非傅里叶热传导. 单相弛豫模型 (例如 C-V 热波模型) 和双相弛豫模型都能够描述这种非平衡热力学转换. 下面将基于有限差分数值方法来研究热传导与波动双重导热特性.

(14) 式为 (9) 式的显式有限差分格式:

$$\begin{aligned} \theta_j^{n+1} = & \frac{d^2 \beta (\theta_{j+1}^n - 2\theta_j^n + \theta_{j-1}^n)}{d^2 \delta} \\ & + \frac{B d \beta (\theta_{j+1}^n - 2\theta_j^n + \theta_{j-1}^n - \theta_{j+1}^{n-1} + 2\theta_j^{n-1} - \theta_{j-1}^{n-1})}{d^2 \delta} \\ & + 2(1 - d\beta) \theta_j^n + (2d\beta - 1) \theta_j^{n-1}. \end{aligned} \quad (14)$$

图 2 给出了基于单相弛豫和双相弛豫两种模型计算的温度分布对比结果. 图 2(a) 和图 2(b) 为二者的温度分布等值线图. 图 2(a) 和图 2(b) 中蓝色为初始温度场, 当热冲击作用于左边界时, 热波波阵面迅速从左边界向右边界传播, 并在经过右端自由边界产生反射, 热波波速为 $\sqrt{\alpha/\tau_q}$. 热波波阵面之后, 温度场的传播呈现明显的扩散传播的特性; 随着波阵面的传播, 这种扩散传播的速度越来越慢. 事实上, 在右端自由边界反射波到来之前, 随着热波的传播, 波阵面紧后方的温度逐步降低, 一般呈指数衰减规律 [22], 因此扩散传播速度的变慢与波阵面紧后方温度的降低密切相关. 两种模型都反映出这种热波和热扩散过程的相互作用. 比较而言, 图 2(b) 所示的双相弛豫可以揭示物理意义更为丰富的热波作用过程.

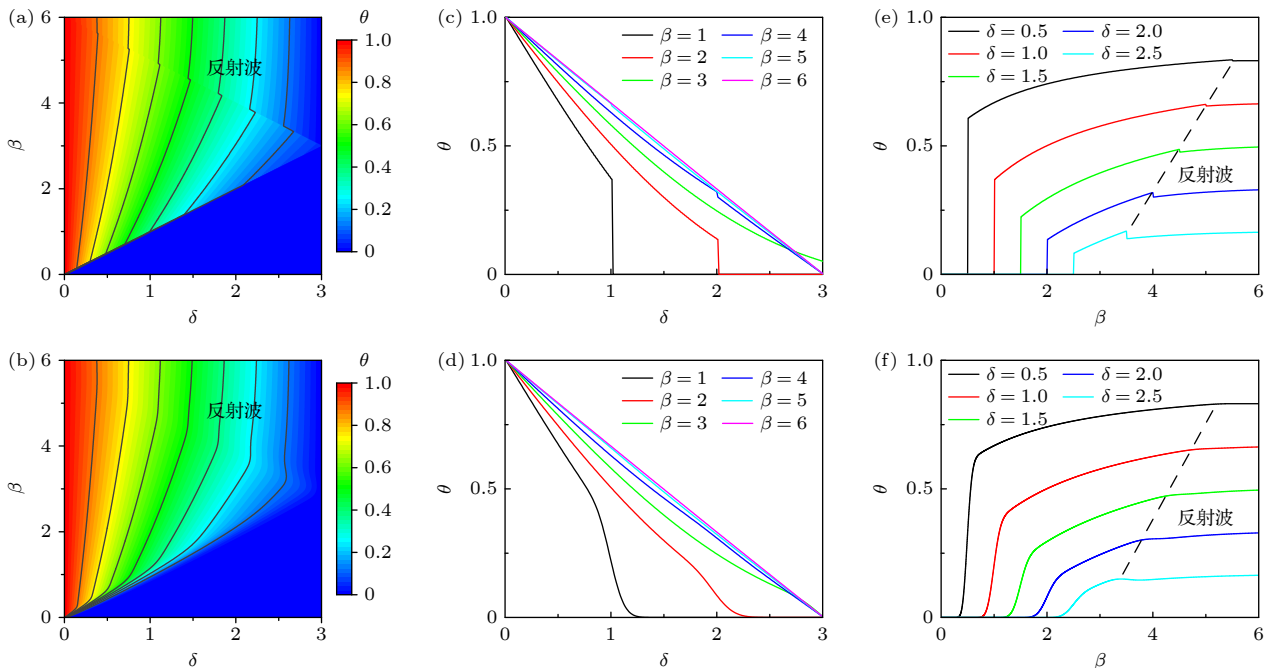


图 2 单相弛豫模型与双相弛豫模型计算结果的比较 (a) 单相弛豫模型计算的温度分布; (b) 双相弛豫模型计算的温度分布; (c) 单相弛豫模型计算的不同时刻温度; (d) 双相弛豫模型计算的不同时刻温度; (e) 单相弛豫模型计算的不同位置温度; (f) 双相弛豫模型计算的不同位置温度

Fig. 2. Comparison of the calculation results of the single-phase relaxation model and the two-phase relaxation model: (a) Temperature distribution calculated by the single-phase relaxation model; (b) temperature distribution calculated by the two-phase relaxation model; (c) temperatures at different times calculated by the single-phase relaxation model; (d) temperatures at different times calculated by the two-phase relaxation model; (e) temperatures at different locations calculated by the single-phase relaxation model; (f) temperatures at different locations calculated by the two-phase relaxation model.

为了更清楚地描述上述过程, 图 2(c) 和图 2(d) 以及图 2(e) 和图 2(f) 分别给出了两种模型计算得到的不同时刻的温度分布和不同位置的温度分布. 图 2(c) 和图 2(d) 表明: 随着时间的推移, 热波波阵面的强度 (图中陡峭的垂直段) 逐渐降低; 最终热波强度衰减为 0, 此时两种弛豫理论与傅里叶定律计算结果相同, 退化为热扩散过程. 图 2(e) 和图 2(f) 表明: 随着传播位移的增长, 热波波阵面的强度 (图中陡峭的垂直段) 逐渐降低; 随后的温升主要源于热扩散作用. 图 2(e) 和图 2(f) 中的虚线为右边自由边界处反射的热波, 由于右边界温度为零, 因此反射热波促使温度急剧下降. 总体上, 数值计算结果与前述解析解的结果基本一致, 表明有限差分分析过程是可靠的.

2.4 短脉冲热冲击

短脉冲热冲击由于其作用时间极短、峰值温度极高, 材料的微观相互作用将主导热量传导过程. 下面应用双弛豫模型研究短脉冲热冲击下的热波和热扩散传导过程. 计算的初始条件为: $t = 0$ 时, $T = T_0$, $\partial T / \partial t = 0$. 在左边界施加短脉冲温度扰动 $T = T_w$ ($0 < t < \tau_q$), $T = T_0$ ($\tau_q \leq T < 6\tau_q$); 远离热扰动边界 $x = 6\sqrt{\alpha\tau_q}$ 处温度保持初始温度 T_0 . 因此, 短脉冲热冲击的无量纲有限差分计算条件如下:

$$\begin{cases} \theta = 0, \frac{\partial \theta}{\partial \beta} = 0 & (\beta = 0), \\ \begin{cases} \theta = 1 & (0 < \beta < 0.5) \\ \theta = 0 & (0.5 \leq \beta < 3) \end{cases} & (\delta = 0), \\ \theta = 0 & (\delta = 3). \end{cases} \quad (15)$$

图 3 为应用双相弛豫理论模型计算的短脉冲热冲击下介质中热波传播规律. 随着特征参数 B 的变化, 介质中热波传播特性发生较大的变化. $B = 0$ 时呈现明显的热波传播规律; 后续的热扩散作用使温度曲线呈现抛物型变化. $B = 0.1$ 时双相弛豫理论模型考虑了温度梯度弛豫时间的影响, 表现为局部热扩散与热波的耦合作用, 总体上表现为热扩散特性. B 的增大将使热波传播特性逐步向热扩散转变, 而且热影响区域由于局部扩散作用的增大而增大. 当 $B = 0.5$ 时双相滞后模型退化为扩散模型, 剧烈的局部扩散导致热响应速度非常大, 在整体上表现为宏观扩散作用. 随着时间 (β) 和空

间 (δ) 的推移, 热波的幅值迅速降低, 表现出明显的衰减特性.

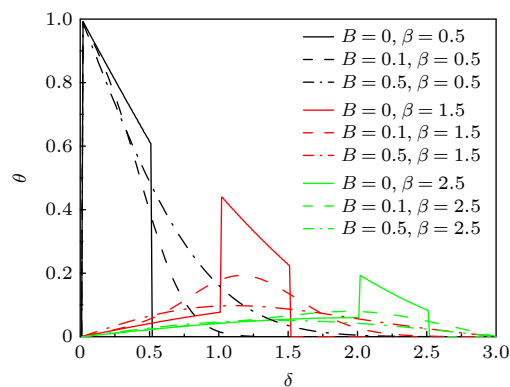


图 3 短脉冲热冲击下双相弛豫模型计算结果

Fig. 3. Calculation results of the two-phase relaxation model under short-pulse thermal shock.

3 热波与热扩散的相互作用

如图 2(a) 和图 2(b) 所示, 热传播一般包含热波、热扩散以及混合作用等三种. 热波在传导过程中不断衰减, 混合作用中热扩散和热波相互作用共同传热, 最终热波完全衰减转换为热扩散主导. 下面将对弛豫理论模型进行近似处理, 以分别研究扩散项对热波传播的影响, 以及三阶导数项对热波传播的影响. 采用 (8) 式和 (9) 式所示的初始条件和边界条件.

3.1 扩散项对热波传播的影响

采用如下计算步骤近似评估扩散项对热波传播的影响:

1) 基于波动方程 $\frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \delta^2} = \frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta^2}$ 计算热波传播, 得到温度场 $\theta_0(\delta, \beta)$.

2) 令 $A = 2 \frac{\partial \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta}$, 由温度场 $\theta_0(\delta, \beta)$ 计算 A ; 将其代入方程: $\frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \delta^2} = \frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta^2} + A$, 求解初始热扩散影响下的新的温度场 $\theta_1(\delta, \beta)$. 进一步, 重复此过程, 可得到 i 次热扩散影响下的温度场 $\theta_i(\delta, \beta)$.

计算结果如图 4 所示. 图 4(a) 和图 4(b) 为热波传播的计算结果, 热波在传播过程中没有出现衰减. 图 4(c) 和图 4(d) 为热扩散对热波传播的初始影响. 在前期热波已经出现衰减, 介质中热扩散作用已经比较明显, 不过热扩散的传播速度比较慢,

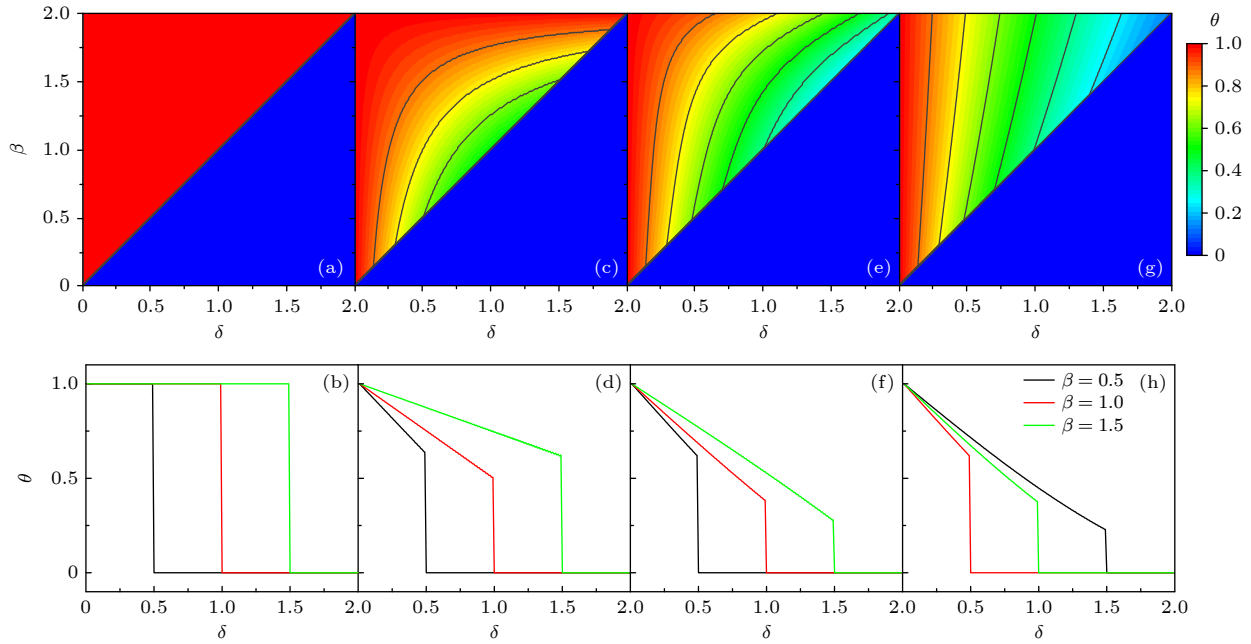


图 4 扩散项对热波传播的影响分析 (a) 热波传播; (b) 热波传播的不同时刻温度; (c) 扩散项对热波传播的初始影响; (d) 初始影响的不同时刻温度; (e) 扩散项对热波传播的进一步影响; (f) 进一步影响的不同时刻温度; (g) 扩散项对热波传播的最终影响; (h) 最终影响的不同时刻温度

Fig. 4. Analysis of the effect of the diffusion term on thermal wave propagation: (a) Thermal wave propagation; (b) temperature at different moments of thermal wave propagation; (c) initial effect of the diffusion term on thermal wave propagation; (d) temperatures at different moments of the initial effect; (e) further effect of the diffusion term on thermal wave propagation; (f) temperature at different moments of the further effect; (g) final effect of the diffusion term on thermal wave propagation; (h) temperature at different moments of the final effect.

而且幅值较低. 图 4(e) 和图 4(f) 为热扩散对热波传播的进一步影响. 此时热波幅值随着传播出现明显的衰减; 介质中热扩散的传播速度明显增加, 而且幅值也有所增强. 图 4(g) 和图 4(h) 为热扩散对热波传播的最终影响. 介质中热扩散的传播速度达到最快, 幅值达到最高. 由此可见: 扩散作用使得热波的幅值发生衰减; 热波对热扩散具有促进作用; 当热波幅值衰减为 0 时, 整个过程变为热扩散作用.

3.2 三阶偏导项对热波传播的影响

采用如下计算步骤近似评估三阶偏导项对热波传播的影响:

$$1) \text{ 基于方程 } \frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \delta^2} = \frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta^2} + 2 \frac{\partial \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta}$$

计算热波和热扩散传播, 得到温度场 $\theta_0(\delta, \beta)$.

$$2) \text{ 令 } A = -B \frac{\partial^3 \theta(\delta, \beta)}{\partial \delta^2 \partial \beta}, \text{ 由温度场 } \theta_0(\delta, \beta) \text{ 计}$$

算 A ; 将其代入方程: $\frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \delta^2} = \frac{\partial^2 \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta^2} + 2 \frac{\partial \theta(\delta, \beta)}{\partial \beta} + A$, 求解三阶偏导项初始影响下的新的温度场 $\theta_1(\delta, \beta)$. 进一步, 重复此过程, 可得到

i 次三阶偏导项影响下的温度场 $\theta_i(\delta, \beta)$.

计算结果如图 5 所示. 图 5(a) 和图 5(b) 为三阶偏导项对热波传播的初始影响. 出现了所谓的伴生热波 (局部波动), 其波速显著低于主热波的波速, 且与 B 值相关; 介质中热扩散作用明显. 图 5(c) 和图 5(d) 为三阶偏导项对热波传播的进一步影响. 此时伴生热波幅值和波速均略有增加, 反映出前期热扩散的促进作用. 图 5(e) 和图 5(f) 为三阶偏导项对热波传播的最终影响. 伴生热波幅值和波速均略有增加. 由此可见: 三阶偏导项导致伴生热波的产生, 其幅值和波速均略有增加; 热扩散对伴生热波的产生具有促进作用.

类似地, 也可以从扩散方程出发, 依次研究波动项和三阶偏导项对热扩散过程的影响, 结论与上述分析过程基本一致.

4 石墨烯热冲击的分子动力学模拟

4.1 模型和参数

纯净的石墨烯具有二维六边形晶格结构, 其声子平均自由路径较长. 石墨烯纳米带的手性一般根

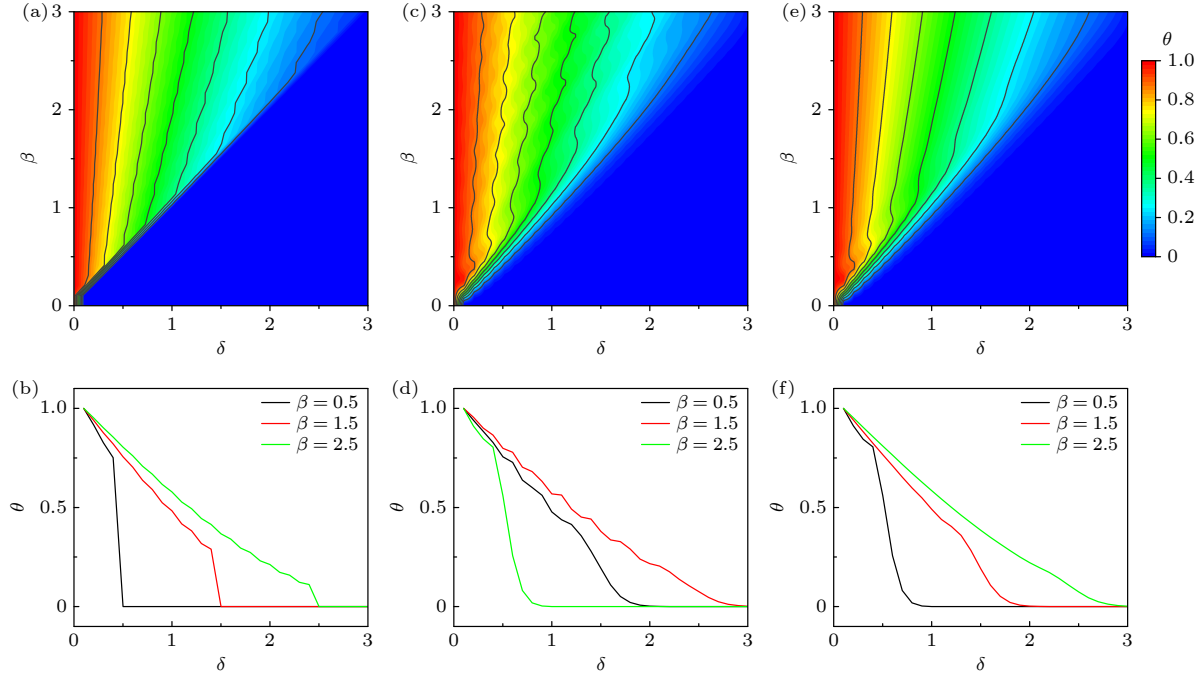


图 5 三阶偏导项对热波传播的影响分析 (a) 三阶偏导项的初始影响; (b) 初始影响的不同时刻温度; (c) 三阶偏导项的进一步影响; (d) 进一步影响的不同时刻温度; (e) 三阶偏导项的最终影响; (f) 最终影响的不同时刻温度

Fig. 5. Analysis of the effect of the third derivative term on heat wave propagation: (a) Initial effect of the third derivative term; (b) temperature at different moments of initial effect; (c) further effect of the third derivative term; (d) temperature at different moments of further effect; (e) final effect of the third derivative term; (f) temperature at different moments of final effect.

据条带长方向的平行边缘定义, 可分为扶手型和锯齿型. Hu^[23] 等基于分子动力学模拟得到: 锯齿形石墨烯比扶手椅形石墨烯的热导率高出 20%. 本文将采用非平衡分子动力学方法研究锯齿形石墨烯的瞬态传热特性, 计算模型如图 6 所示. 石墨烯条带长为 123.00 nm, 宽为 2.13 nm, 包含 10000 个碳原子, 键长为 1.42 Å. 模拟盒子 x, y, z 方向采用周期性边界条件. 碳 (C) 原子的相互作用采用 AIREBO 势函数来表示^[24,25], 即为

$$E_b = \sum_i \sum_{j(j>i)} [V_R(r_{ij}) - b_{ij}V_A(r_{ij})], \quad (16)$$

式中, E_b 为总势能, V_R 为排斥项, V_A 为引力项, b_{ij} 表示多体耦合. 利用此势函数可以成功再现石墨烯的色散关系^[26]. 超快脉冲激光在纳米材料中产生的热冲击为亚皮秒量级^[27]. 模拟中采用蛙跳方案对原子运动进行积分, 固定时间步长为 0.5 fs. 系统在 x 方向划分为 200 个板块, 定义图 6 所示中间方框部分为热冲击加热区域. 根据能量均分原理, 通过平均动能来定义每块板的局部瞬时温度, 即:

$$T_{MD}(t) = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N [v_x^i(t)^2 + v_y^i(t)^2 + v_z^i(t)^2], \quad (17)$$

其中 m 为碳原子的相对原子质量; N 为每个板中的碳原子数; k_B 为玻尔兹曼常数; v_x^i, v_y^i, v_z^i 分别为板中原子 i 的 x, y, z 方向的速度. 如果系统处于非平衡状态或者具有宏观动量则 T_{MD} 为平均动能温度 (即包含碳原子的集体运动). 每个方向的平均动能温度表示为

$$\begin{cases} T_x(t) = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N [v_x^i(t)^2], \\ T_y(t) = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N [v_y^i(t)^2], \\ T_z(t) = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N [v_z^i(t)^2]. \end{cases} \quad (18)$$

基于这些速度分量可以计算出每个方向上的动能温度分布.

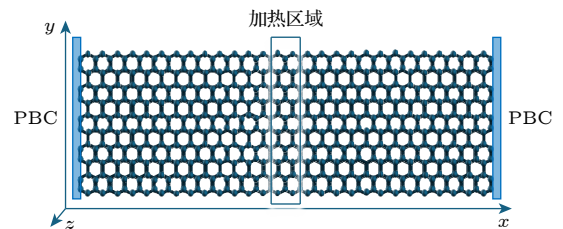


图 6 锯齿形石墨烯原子结构图

Fig. 6. Atomic structure of zigzag graphene.

系统的真实温度是 C 原子无规律运动的结果, 将每个 C 原子的速度去除质心速度后即可得到. 对比真实温度与动能温度可以得到 C 原子集体运动规律, 即弹性波的传播过程. 不同方向的真实温度表达式为

$$\begin{cases} T_x^R(t) = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \left\{ \left[v_x^i(t) - \frac{1}{N} \sum_i v_x^i(t) \right]^2 \right\}, \\ T_y^R(t) = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \left\{ \left[v_y^i(t) - \frac{1}{N} \sum_i v_y^i(t) \right]^2 \right\}, \\ T_z^R(t) = \frac{m}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \left\{ \left[v_z^i(t) - \frac{1}{N} \sum_i v_z^i(t) \right]^2 \right\}. \end{cases} \quad (19)$$

计算前, 将石墨烯系统温度保持在 50 K, 进行能量最小化处理, 确保计算系统的合理性; 然后在如图 6 所示的中间区域施加热冲击. 采用速度标度法施加热冲击, 使局部温度由 50 K 迅速升至 1000 K, 保持 0.5 ps, 然后进行变温. 采用如图 7 所示的两种变温模式, 无量纲处理后如 (20) 式所描述的自然变温和如 (21) 式所描述的控制变温.

$$\begin{cases} \theta = 1 & (0 \leq \beta \leq 0.016), \\ \theta = e^{(0.27295 - 19.52067\beta + 59.30383\beta^2)} & (0.016 \leq \beta \leq 0.176), \end{cases} \quad (20)$$

$$\begin{cases} \theta = 1 & (0 \leq \beta \leq 0.016), \\ \theta = 0 & (0.016 \leq \beta \leq 0.176). \end{cases} \quad (21)$$

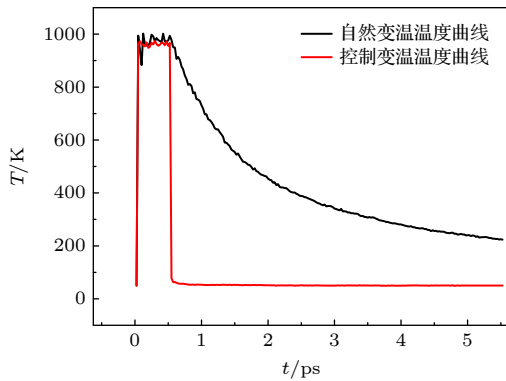


图 7 两种变温模式

Fig. 7. Two temperature-changing modes.

计算中, 在持续 0.5 fs 的热冲击结束后, 系统设定为绝热状态. 由于热冲击的持续时间 (0.5 ps) 远小于石墨烯的弛豫时间 (20 ps), 因此, 可以清楚

地观察到热波现象. 考虑到系统在 x 方向的对称性, 分析和讨论的时候只取一半区域. 分子动力学模型计算参数如表 1 所列.

表 1 石墨烯分子动力学模拟参数
Table 1. Graphene parameters of MD simulation.

参数		取值
初始模型	x 方向/nm	123.00
	y 方向/nm	2.13
	z 方向	单层C原子
	碳原子数	10000
	键长/Å	1.42
	初始温度/K	50
自然变温	加热区域/nm	x 方向中6.15
	计算时间步长/fs	0.5
	加热时间/ps	0.5
	加热温度/K	1000
	计算步数	11000
控制变温	加热区域/nm	x 方向中2.46
	计算时间步长/fs	0.5
	加热时间/ps	0.5
	加热温度/K	1000
	计算步数	10000

4.2 两种变温模式的温度场

根据 (18) 式和 (19) 式分别计算得到两种变温模式的整体动能温度分布和整体真实温度分布, 如图 8 所示. 图 8(a) 和图 8(c) 对比了自然变温模式下两种温度分布. 由于碳原子的集体运动导致能量传播过程中依次存在 3 个弹性波, 即: 纵向弹性波 (黑色实线)、横向弹性波 (红色实线)、面外横向弹性波 (黄色实线). 弹性波在传播过程中不会衰减, 与热波显著不同. 其中纵向弹性波速为 21 km/s; 面内横向弹性波速为 13 km/s, 面外横向弹性波速为 3 km/s. 这与晶格动力学理论计算基本一致. 需要注意的是: 纵向弹性波和面内横向弹性波波速均大于对应的热波波速, 而面外横向弹性波波速则小于面外热波波速. 图 8(b) 和图 8(d) 对比了控制变温模式的两种温度分布具有相同的规律.

对上述温度基于其贡献进行纵向、横向, 以及面外横向分解, 图 9 所示为两种降温模式下三种分解温度的对比. 图 9(a)—(c) 为自然降温模式下分解的三种振动模式的温度分布. 纵向与横向振动模式中热波的衰减极为迅速, 基本表现为扩散, 热影

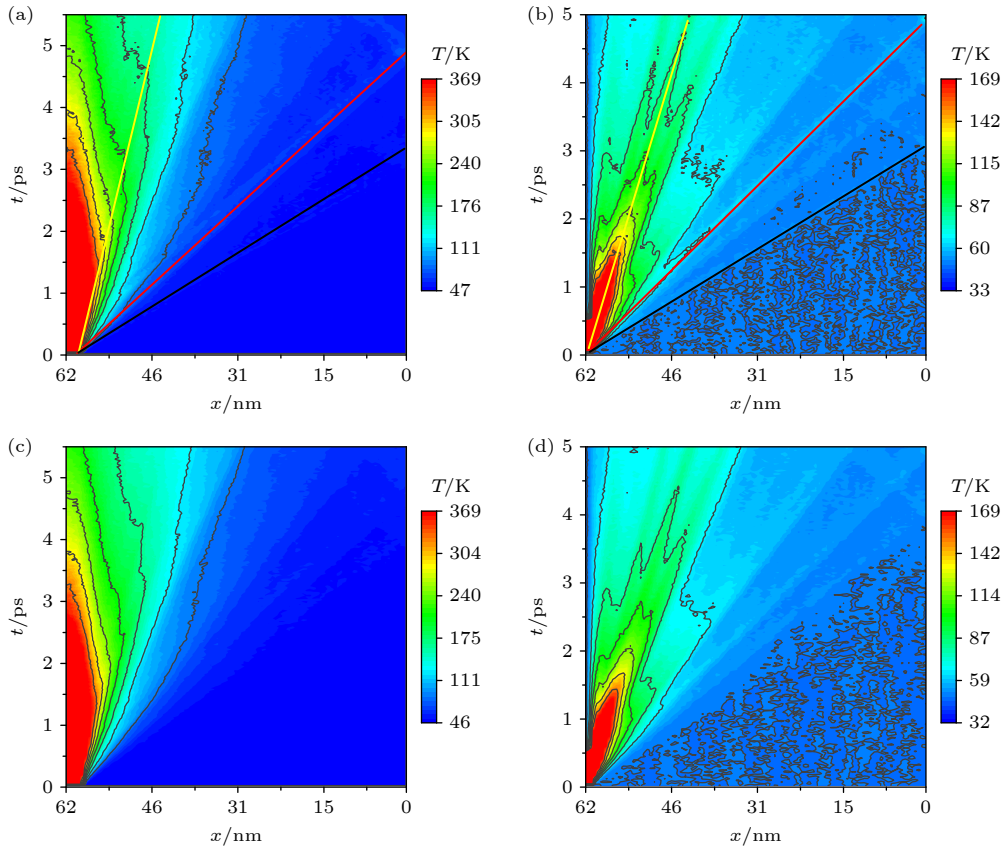


图 8 两种变温模式下的整体温度分布 (a) 自然变温整体动能温度; (b) 控制变温整体动能温度; (c) 自然变温整体真实温度; (d) 控制变温整体真实温度

Fig. 8. Overall temperature distributions under two temperature-changing modes: (a) Overall kinetic temperature under natural temperature change; (b) overall kinetic temperature under controlled temperature change; (c) overall real temperature under natural temperature change; (d) overall real temperature under controlled temperature change.

响区域最大; 面外振动模式波的衰减相对较小, 热传导具有明显波动属性, 影响区域较小, 温度较高. 对应的波形传播参见图 9(d)—(f). 纵向振动与横向振动温度曲线具有扩散属性, 面外振动温度曲线具有波动性质.

为分析不同振动模式的热波效应, 图 9(g)—(i) 给出控制变温模式下温度分布. 该种模式使加热区域温度迅速降低至初始温度, 去除了后续的热扩散, 突出了横向振动以及纵向振动的热波传导. 模拟结果中出现了热波衰减产生扩散的混合区, 与第 3 节中双相弛豫理论模型的热波与热扩散的相互作用相符合, 当所有热波衰减为 0 时热传导表现为扩散. 对应的波形传播图 9(j)—(l), 与图 9(d)—(f) 相比, 具有较明显的差别.

与前面的数值计算不同的是: 分子动力学计算中在石墨烯中形成面内纵波, 面内横波以及面外横波和第二声热波. 与前面的数值计算相似的是: 计算得到的热波在传递过程中会不断衰减产生热扩

散; 当热波衰减为 0 时热量传递将完全变为扩散, 即热波辐射与扩散作用是相互耦合的, 热波的传播过程会伴随着扩散, 而扩散也会产生新的热波. 另外, 面内纵向振动与面内横向振动热波衰减明显趋于扩散, 面外横向振动热传导的波动效应明显.

4.3 双相弛豫理论模型石墨烯参数讨论

1) 参数 α 的影响. 郑伯昱等^[28]通过 Boltzmann 声子散射理论对不同宽度和不同手性的石墨烯条带进行了热导率的精确计算, 给出了石墨烯的热导率 k 为 200—550 W/(m·K). Kumar 等^[29]给出零应变下石墨烯的热导率 k 约为 700 W/(m·K). 结合分子动力学计算, 热扩散系数 $\alpha = k/\rho c$, 取值为 2.5×10^{-4} m²/s.

2) 参数 τ_q 的影响. Jiang 等^[30]基于第一性原理计算, 得到 γ -石墨烯的电子与声子尺度作用的热弛豫系数为 $\tau_q = 1.6 \times 10^{-13}$ s. Kumar 等^[29]基于平衡分子动力学模拟和 Green-Kubo 方法, 得到没有

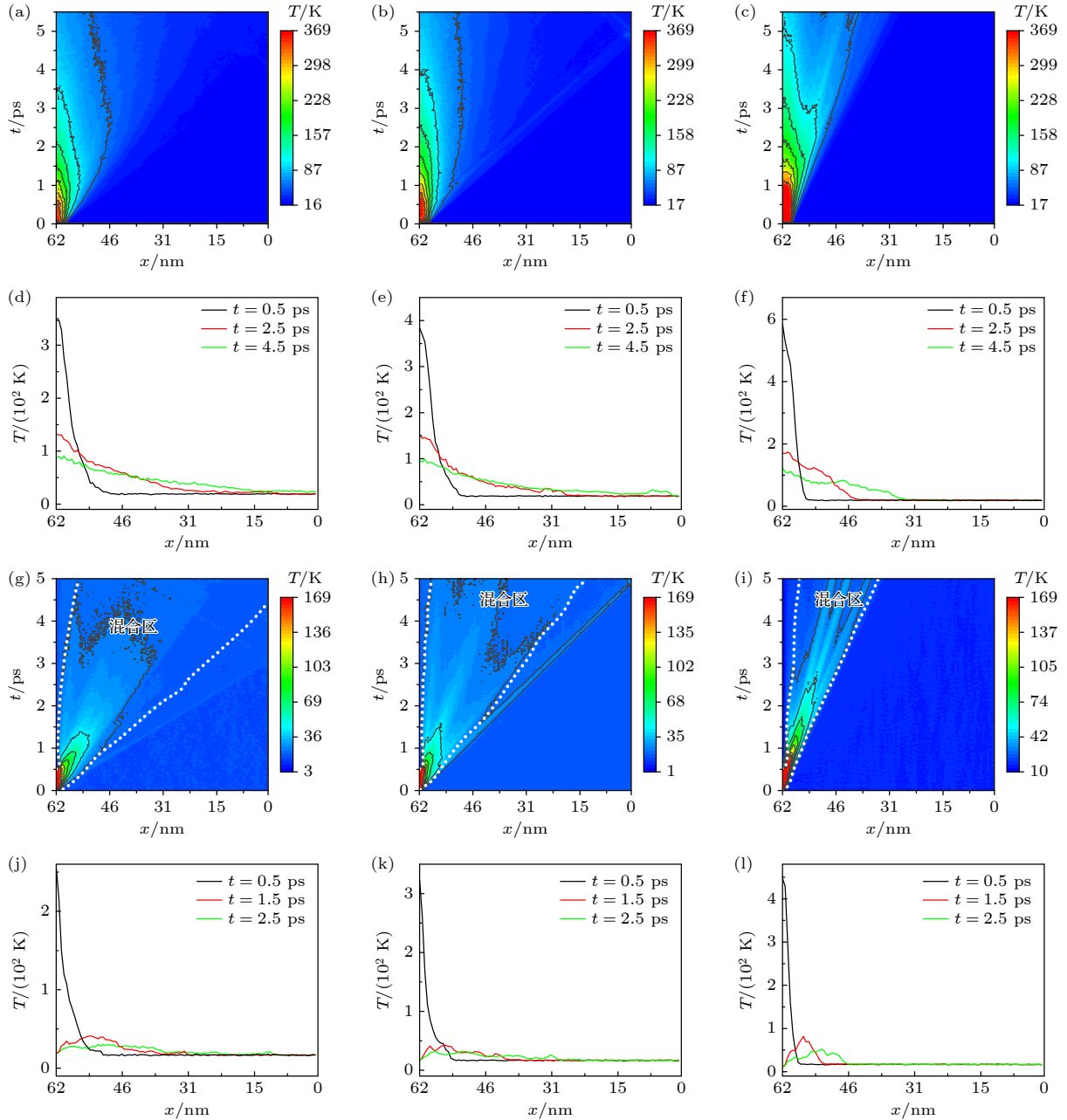


图9 自然变温(a)–(f)和控制变温(g)–(l)两种模式的温度场分解 (a), (g)纵向振动温度分布; (b), (h)横向振动温度分布; (c), (i)面外振动温度分布; (d), (j)纵向振动温度曲线; (e), (k)横向振动温度曲线; (f), (l)面外振动温度曲线

Fig. 9. Decomposition of the temperature fields of two temperature-changing modes of (a)–(f) natural temperature change and (g)–(l) controlled temperature change: (a), (g) Temperature distribution of longitudinal vibration; (b), (h) temperature distribution of transverse vibration; (c), (i) temperature distribution of out-of-plane vibration; (d), (j) temperature curves of longitudinal vibration; (e), (k) temperature curves of transverse vibration; (f), (l) temperature curves of out-of-plane vibration.

波纹的尺寸为 $31 \times 26 \text{ \AA}^2$ 的小样本石墨烯的热弛豫系数 τ_q 约为 $1.0 \times 10^{-11} \text{ s}$. 系数具有较大的差异, 反映出分子动力学计算与第一性原理计算所研究材料尺度的差异. 参数 τ_q 的影响相对比较明显. 本文结合分子动力学计算进行校核, 发现: 热弛豫系数 τ_q 为 10^{-11} s 比较适合模型计算. 因此, 计算取值 $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$.

3) 参数 τ_T 的影响. 图 10(a) 为控制变温模式计算参数为: $\alpha = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 8.4 \times 10^{-13} \text{ s}$ 的温度场预测; 图 10(b) 计算参数为: $\alpha = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 9.4 \times 10^{-13} \text{ s}$. 对比两种参数下的温度场计算结果, 当特征参数 B 的差值不大时, 计算温度的整体趋势基本一致. 参数 τ_T 的影响相对不是很显著.

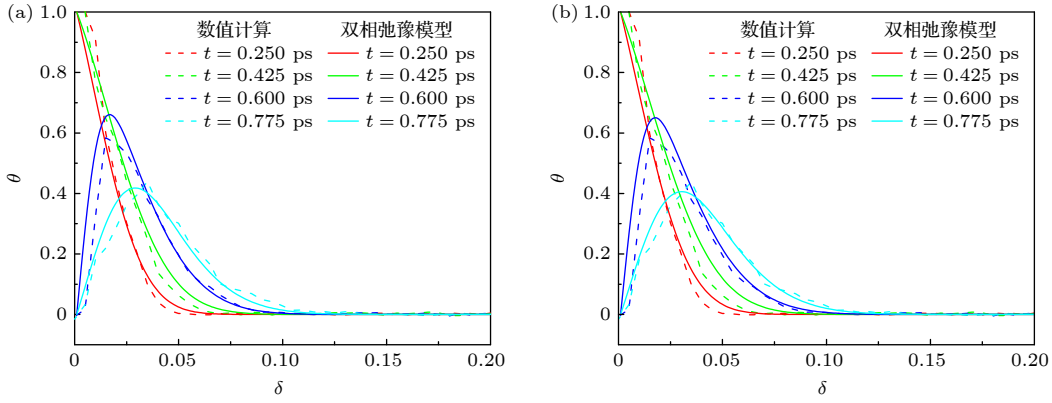


图 10 不同参数的控制变温模式温度场预测 (a) $\alpha = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 8.4 \times 10^{-13} \text{ s}$; (b) $\alpha = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 9.4 \times 10^{-13} \text{ s}$

Fig. 10. Temperature field prediction of the controlled temperature-changing mode with different parameters: (a) $\alpha = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 8.4 \times 10^{-13} \text{ s}$; (b) $\alpha = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 9.4 \times 10^{-13} \text{ s}$.

对比多组计算结果, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 8.4 \times 10^{-13} \text{ s}$ 温度场计算与分子动力学计算结果更为一致。

值得注意的是: 实际石墨烯材料中的缺陷, 如空位、S-W 缺陷、晶界等, 对热波与热扩散在能量传播中具有显著的影响. 在第一性原理 (如 DFPT 方法) 计算中, 热输运参数直接源于石墨烯的电子-声子耦合强度和晶格动力学响应, 同时, 声子寿命可通过声子谱散射率严格导出, 热扩散系数则由电子-声子散射主导的比热和热导率计算获得. 分子动力学模拟中可直接将这些缺陷置于材料结构中进行计算. 这些缺陷的影响均可通过计算过程进行揭示. 本文的双相弛豫模型通过两个弛豫参数 τ_q 与 τ_T 进行表征, 简化了热波传播的微观动力学细节; 其本质是宏观唯象参数, 依赖于经典力场 (如 AIREBO 势函数) 下的统计平均得到, 也可以统计关联到量子力学的微观机制. 同时, 考虑石墨烯与基底之间的范德瓦耳斯力, 可将其等效为界面热阻或声子平均自由时间的变化, 则需要将这两个参数关联到细微观的物理力学特性. 因此, 进行双相弛豫模型两个弛豫参数的量子化表征和细微观表征是下一步工作的重点。

图 11 为双相弛豫理论采用 $\alpha = 2.5 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $\tau_q = 1.56 \times 10^{-11} \text{ s}$, $\tau_T = 8.4 \times 10^{-13} \text{ s}$ 在自然变温模式下的温度预测. 此过程中, 热扩散系数 α 决定热波的幅值, α 与热流弛豫时间 τ_q 共同确定热影响区域的位置, 温度梯度弛豫时间 τ_T 决定热影响区域的大小. 控制变温模式基本消除了传热后期的热扩散作用, 使绝大部分能量通过热波和热扩散的共

同作用的方式传导. 证明了双相弛豫理论在不同边界条件中的适用性。

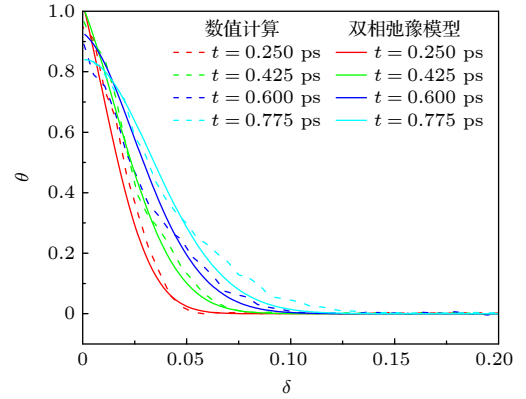


图 11 自然变温温度场预测

Fig. 11. Temperature field prediction for natural variable temperature mode.

5 结 论

通过双相弛豫理论解释了微尺度瞬态热输运的波与扩散的相互作用, 得到了表征双相弛豫时间特征的参数 B 的影响规律; 应用分子动力学模拟, 校核了石墨烯的双相弛豫理论模型参数, 研究了石墨烯在短脉冲冲击下的温度演化过程. 主要结论如下:

1) 揭示了无量纲弛豫时间比值参数 B 对热输运模式的调控机制: 当 B 接近 0 时热波效应主导热传输; 当 B 接近 0.5 时热扩散特征显著; B 为中间值时两者共同主导热传输, 着重分析了两者的共同主导热传导时的相互作用。

2) 分子动力学模拟校核了双相弛豫理论模型参数, 二者的计算结果表明: 热波辐射与热扩散的耦合和较强的相互作用特性.

3) 短脉冲热冲击下石墨烯中能量传递有弹性波、热波、热扩散三种方式. 除了面外横向弹性波波速低于面外热波波速外, 其他两种弹性波波速均大于热波波速.

本研究为微小器件中热流控制和热辐射防护提供了理论参考.

参考文献

- [1] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [3] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [4] Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201
- [5] Castro Neto A H, Guinea F, Peres N M R, Novoselov K S, Geim A K 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 109
- [6] Lu Q, Lü H M, Wu X M, Wu H Q, Qian H 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 218502 (in Chinese) [卢琪, 吕宏鸣, 伍晓明, 吴华强, 钱鹤 2017 物理学报 **66** 218502]
- [7] Lin Y M 2010 *Science* **327** 662
- [8] Schwier F 2013 *Proc. IEEE* **101** 1567
- [9] Babaei M H, Chen Z T 2008 *Int. J. Thermophys.* **29** 1457
- [10] Jiang F M 2003 *Microscale Thermophys. Eng.* **6** 331
- [11] Cattaneo C 1958 *Comp. Rend. Hebd. Séances Acad. Sci.* **247** 431 (in French)
- [12] Vernotte P 1958 *Comp. Rend. Hebd. Séances Acad. Sci.* **246** 3154 (in French)
- [13] Tzou D Y, Guo Z Y 2010 *Int. J. Therm. Sci.* **49** 1133
- [14] Yao W J, Cao B Y 2014 *Sci. Bull.* **59** 3495
- [15] Shiomi J, Maruyama S 2006 *Phys. Rev. B* **73** 205420
- [16] Ye Z Q, Cao B Y, Guo Z Y 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 154704 (in Chinese) [叶振强, 曹炳阳, 过增元 2014 物理学报 **63** 154704]
- [17] Guyer R A, Krumhansl J A 1966 *Phys. Rev.* **148** 778
- [18] Tzou D Y 2014 *Macro-to Microscale Heat Transfer* (UK: John Wiley & Sons, Inc) p62
- [19] Jiang R Q 2002 *Ph. D. Dissertation* (Harbin: Harbin Engineering University) (in Chinese) [姜任秋 2002 博士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工程大学)]
- [20] Miao C H, Yuan L Z, Lu J H, Wang P F, Xu S L 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 216201 (in Chinese) [苗春贺, 袁良柱, 陆建华, 王鹏飞, 徐松林 2022 物理学报 **71** 216201]
- [21] Xie Y S, Xu S L, Yuan L Z, Chen M D, Wang P F 2024 *Explos. Shock Waves* **44** 081421 (in Chinese) [谢雨珊, 徐松林, 袁良柱, 陈美多, 王鹏飞 2024 爆炸与冲击 **44** 081421]
- [22] Xi D Y, Xu S L 2016 *Rock Physics and Constitutive Theory* (Hefei: University of Science and Technology of China Press) p338 (in Chinese) [席道瑛, 徐松林 2016 岩石物理与本构理论 (合肥: 中国科学技术大学出版社) 第 338 页]
- [23] Hu J N, Ruan X L, Chen Y P 2009 *Nano Lett.* **9** 2730
- [24] Brenner D W 1990 *Phys. Rev. B* **42** 9458
- [25] Yamaguchi Y, Maruyama S 1998 *Chem. Phys. Lett.* **286** 336
- [26] Lindsay L, Broido D A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 205441
- [27] Zelazny M, Richardson R, Ackland G J 2011 *Phys. Rev. B* **84** 144113
- [28] Zheng B Y, Dong H L, Chen F F 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 076501 (in Chinese) [郑伯昱, 董慧龙, 陈非凡 2014 物理学报 **63** 076501]
- [29] Kumar A, Abhisheern K, Singh A 2025 *J. Appl. Phys* **137** 134302
- [30] Jiang P H, Liu H J, Cheng L, Fan D D, Zhang J, Wei J, Liang J H, Shi J 2017 *Carbon* **113** 108

Thermal wave propagation in graphene based on two-phase relaxation theory

GUO Xucai CHEN Meiduo XIE Yushan WANG Pengfei XU Songlin[†]

(CAS Key Laboratory of Mechanics Behavior and Design of Materials, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

(Received 28 September 2025; revised manuscript received 29 October 2025)

Abstract

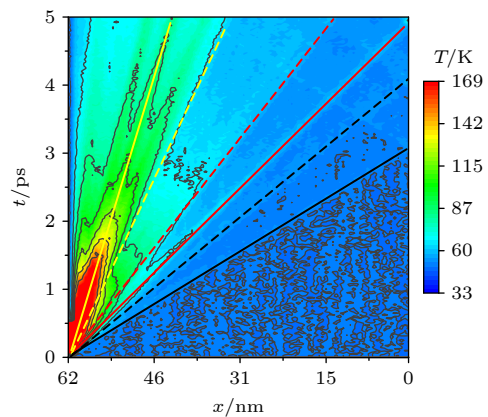
In order to distinguish the interaction responses between unsteady thermal waves and thermal diffusion in graphene, the relaxation time of the heat flux vector τ_q and the relaxation time of the temperature gradient τ_T are introduced based on the Fourier's law, and a two-phase relaxation theoretical model is established. Using parameter B , which describes the ratio of relaxation times between two phases, to reveal the influence of the interaction between thermal waves and thermal diffusion and to investigate the regulation mechanism of heat transport modes. When B approaches zero, the thermal wave effect dominates the heat transfer. When B approaches 0.5, the thermal diffusion characteristics are significant. When B is between zero and 0.5, both of them jointly dominate the heat transfer, and the interaction between the two is of great significance. The results uncover the rules of thermal diffusion induced wave attenuation and thermal wave promoted thermal diffusion. They exhibit strong coupling characteristics. The unique contribution of third-order partial derivatives to local thermal wave disturbances is also revealed.

A molecular dynamics model of short-pulse thermal shock for zigzag graphene is developed to reveal the coupling behaviors between thermal waves and thermal diffusion. The calculation parameters of the two-phase relaxation theoretical model are calibrated. The temperature field following the second sound is the outcome of the combined action of thermal waves and thermal diffusion. It is worth noting that except for the out-of-plane thermal wave, which has a higher speed than the out-of-plane transverse elastic wave, the speeds of the other two thermal waves are both lower than their corresponding elastic wave velocities.

The above results indicate that the two-phase relaxation model can accurately depict the non-equilibrium thermal behaviors of micro- and nano-scale devices and can provide a theoretical basis for protecting micro-components in integrated circuits against thermal radiation and thermal diffusion.

Keywords: the two-phase relaxation model, thermal wave, thermal diffusion, molecular dynamics simulation

DOI: [10.7498/aps.75.20251335](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251335)



CSTR: [32037.14.aps.75.20251335](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251335)

[†] Corresponding author. E-mail: slxu99@ustc.edu.cn

基于双相弛豫理论的石墨烯中热波传播

郭旭才 陈美多 谢雨珊 王鹏飞 徐松林

Thermal wave propagation in graphene based on two-phase relaxation theory

GUO Xucan CHEN Meiduo XIE Yushan WANG Pengfei XU Songlin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 030812 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251335

CSTR: 32037.14.aps.75.20251335

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251335>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

离散波导热扩散耦合机理及其应用

Thermal diffusion coupling mechanism and its application of discrete waveguide

物理学报. 2023, 72(24): 246601 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230204>

尺寸依赖的CoCrFeNiMn晶体/非晶双相高熵合金塑性变形机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of size dependent plastic deformation mechanism of CoCrFeNiMn crystalline/amorphous dual-phase high-entropy alloys

物理学报. 2022, 71(24): 243101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221368>

基于分子动力学模拟的石墨烯镁基复合材料力学行为

Mechanical behavior of graphene magnesium matrix composites based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(8): 086201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211753>

水基有机溶剂液膜冻结初期表层冰片生长机制

Growth mechanism of surface ice flakes at the initial stage of freezing of water-based organic solvent liquid film

物理学报. 2025, 74(22): 224701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250902>

石墨烯气凝胶复合相变材料的热物性研究

The study of thermophysical properties of graphene aerogel composite phase change materials

物理学报. 2021, 70(4): 040503 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201499>

氮掺杂对石墨烯摩擦学特性影响的分子动力学模拟

Effect of N-doping on tribological properties of graphene by molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(14): 146801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212309>