

Аналитическое решение уравнения теплопроводности для расчета изменения температуры тела, обусловленного электрокалорическим эффектом

Канд. техн. наук А.С. СТАРКОВ, канд. техн. наук О.В. ПАХОМОВ
СПбГУНиПТ

An analytical solution to the problem of heat conductivity for a medium with electric and caloric effect has been obtained for the first time. It is shown that electrical field, changing according to harmonic law, leads to steady-state temperature gradient along a solid body, which can be used as a new principle for creating solid-state coolers on electrocaloric effect.

В последние годы электрокалорический (ЭК) эффект в сегнетоэлектрических материалах активно исследуется в ряде лабораторий в связи с работами по созданию твердотельных охлаждающих устройств на основе сегнетоэлектрических материалов. Следует отметить, что работы по созданию теплового преобразователя энергии на сегнетоэлектрических материалах ведутся еще с середины прошлого века. Термодинамический цикл сегнетоэлектрического преобразователя и анализ его эффективности впервые были подробно рассмотрены в широко известной монографии В. В. Сычева [4]. Современный уровень технологии позволяет создавать пленочные структуры для данных задач энергетики, что значительно упрощает целый ряд инженерных проблем, в частности необходимость использования конструкций с большой электрической емкостью.

Проведенные теоретические исследования, физические и вычислительные эксперименты по определению ЭК температурного отклика в сегнетоэлектрических соединениях показали, что на основе пленок перовскитовых и других соединений принципиально возможно создание высокоеффективных тепловых преобразователей и охлаждающих устройств.

В настоящей работе рассматриваются теоретические основы работы одиночного сегнетоэлектрического конденсатора, проявляющего ЭК-эффект, при периодическом воздействии импульсов электрического поля.

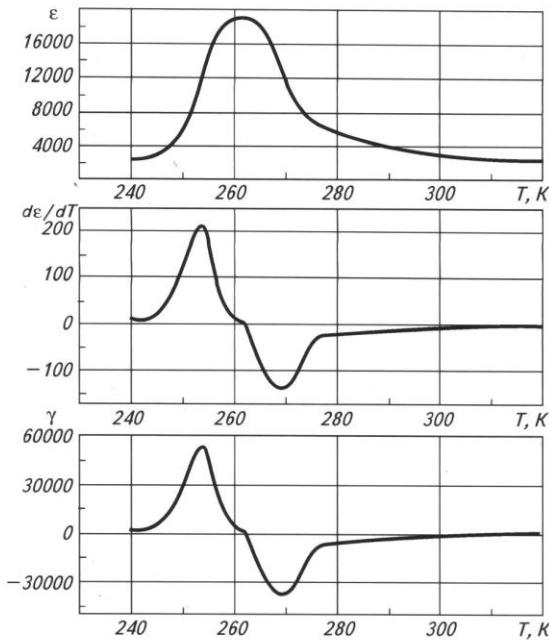
Нестационарное уравнение теплопроводности для ЭК-эффекта в диэлектриках

Проявление ЭК-эффекта во взаимосвязи с остаточной и индуцированной поляризацией диэлектрика исследовалось в работе [7], где приводится решение упрощенной линеаризованной задачи теплопроводности. Таким образом, в данном случае задача определения ЭК-коэффициента рассматривается с кинетических позиций, и

ЭК-эффект анализируется как дополнительный источник диэлектрических потерь на высоких частотах. Авторы приходят к выводу, что периодическое изменение температуры, обусловленное электрокалорическим эффектом при гармоническом воздействии поля, вызывает появление динамической поляризации и, как следствие, приводит к дополнительным диэлектрическим потерям.

Результат получен для случая малых вариаций температуры, когда изменением ЭК-коэффициента при воздействии электрического поля можно пренебречь. Такое приближение представляется недостаточно обоснованным, когда в эксперименте наблюдается существенное изменение температуры (несколько градусов). Следует учитывать, что ЭК-коэффициент пропорционален и производной $(\partial P / \partial T)_E$, которая для сегнетоэлектрика имеет нелинейную зависимость от температуры и от напряженности электрического поля. На рисунке приведена температурная зависимость диэлектрической проницаемости ϵ , ее производной и ЭК-коэффициента γ , который рассматривается далее.

В работе [5], посвященной теоретическому описанию термополяризационного эффекта — появлению поляризации, пропорциональной градиенту температуры, высказывается предположение о существовании обратного эффекта, то есть появления в диэлектрике теплового потока, который пропорционален скорости изменения поляризации. Данная гипотеза вытекает из условия выполнения принципа симметрии для кинетических коэффициентов в феноменологических соотношениях Онзагера, которые описывают термополяризационный эффект. По мнению А.К. Таганцева [5], одним из проявлений обратного эффекта является возникновение осцилирующей во времени разности температур на противоположных гранях кристалла под действием приложенного периодического поля. Однако это предположение не



Температурные зависимости диэлектрической проницаемости ϵ , производной $(d\epsilon/dT)$ и коэффициента $\gamma = T_0\epsilon'(T_0)$ для титаната бария

исследуется, поэтому полностью обоснованного его подтверждения нет.

В данной работе представлены аналитическое решение уравнения теплопроводности с учетом ЭК-эффекта при воздействии периодически меняющегося электрического поля и анализ полученных результатов с точки зрения температурного эффекта.

Для исследования процессов в диэлектриках, связывающих тепловые и электрические явления, в качестве независимых переменных естественно выбрать температуру T и напряженность E . Тогда согласно второму началу термодинамики можем записать

$$dQ = T(\partial S/\partial T)_E dT + T(\partial S/\partial E)_T dE, \quad (1)$$

где dQ – малое изменение количества тепла;

S – энтропия рассматриваемой единицы объема диэлектрика.

Коэффициент при dT в правой части (1) есть, по определению, ρc_E , где ρ – плотность, а c_E – теплоемкость при постоянной напряженности. Для преобразования коэффициента во втором слагаемом правой части уравнения (1) введем в рассмотрение понятие свободной энергии F . При вычислении изменения свободной энергии dF можно пренебречь изменением объема диэлектрика [1] и, полагая поляризацию диэлектрика P известной из эксперимента функцией напряженности E и температуры T , можно записать выражение для dF в следующем виде [2]:

$$dF = -SdT - PdE. \quad (2)$$

Из условия существования полного дифференциала (2) следует равенство Максвелла:

$$(\partial S/\partial E)_T = (\partial P/\partial T)_E. \quad (3)$$

С учетом равенства (3) выражение (1) можно записать в виде

$$dQ = \rho c_E dT + T(\partial P/\partial T)_E dE. \quad (4)$$

Поскольку напряженность электрического поля E , прикладываемого к ЭК-элементу, периодически изменяется, E является функцией времени t . Для вывода уравнения, описывающего зависимость тепловой мощности dQ/dt от времени и температуры, выпишем соотношения, связывающие dQ/dt , тепловой поток J и температуру T :

$$dQ/dt = -\text{div}J, \quad (5)$$

$$J = -\lambda \text{grad} T,$$

где λ – коэффициент теплопроводности.

Подставляя (5) в (4), получим искомое уравнение:

$$\rho c_E dT/dt = \text{div}(\lambda \text{grad} T) - T(\partial P/\partial T)_E dE/dt. \quad (6)$$

Уравнение (6) отличается от обычного уравнения теплопроводности вторым слагаемым в правой части, которое будем рассматривать как тепловой источник, зависящий от времени и температуры. Подобное уравнение ранее использовалось в [6] и в [7] при расчете вклада электрокалорического эффекта в диэлектрические потери. Однако вывод указанного уравнения приводится в настоящей работе впервые. Аналитическое решение уравнения теплопроводности с ЭК-тепловым источником представляет не только теоретический, но и практический интерес.

Для малых значений напряженности поля $E \leq 10$ В/мкм зависимость $P(E)$ является линейной:

$$P = [\epsilon(T) - 1]E/(4\pi).$$

При малых изменениях температуры относительно начальной T_0 зависимость $\epsilon(T)$ также можно считать линейной:

$$T(\partial P/\partial T)_E = [\gamma_0 + \gamma_1(T - T_0)]E$$

с коэффициентами

$$\gamma_0 = [T_0\epsilon'(T_0)]/(4\pi), \quad \gamma_1 = [\epsilon'(T_0) + T_0\epsilon''(T_0)]/(4\pi).$$

Коэффициент γ_1 может принимать положительные и отрицательные значения. Знак γ_1 обусловлен выбором начальной температуры, поскольку этим определяются величина $\epsilon(T_0)$, а также величина и знак производной $\epsilon'(T_0)$.

Подробно исследуем простейшую одномерную модель, когда диэлектрик имеет длину l ; λ , c_E , ρ являются постоянными величинами, а функция $E(t)$ имеет период изменения A , т.е. $E(t+A) = E(t)$.

Зависимость температуры T от координаты x и времени t определяется уравнением

$$\rho c_E dT/dt = \lambda \partial^2 T / \partial x^2 - 0.5[\gamma_0 + \gamma_1(T - T_0)]dE^2/dt \quad (7)$$

со следующими начальными и граничными условиями:

$$T|_{t=0} = T_0; \quad (8)$$

$$\partial T / \partial x|_{x=0} = 0, \quad T|_{x=l} = T_0. \quad (9)$$

Таким образом, принимается, что граница $x = 0$ является теплоизолированной, а на границе $x = l$ поддерживается постоянная температура T_0 , совпадающая с начальной.

Можно показать, что уравнение, аналогичное (7), справедливо и для сегнетофазы.

Периодическое изменение напряженности ЭК-элемента

Решение уравнения (7) с граничными и начальными условиями (8), (9) может быть найдено в виде тригонометрического ряда Фурье по координате x :

$$T(x, t) = T_0 + \sum_{n=0}^{\infty} T_n(t) \cos \mu_n x, \\ \mu_n = \pi(n + 0,5)/l; n = 0, 1, 2, \dots \quad (10)$$

Граничные условия (9) при таком выборе базисных функций выполняются автоматически, а подстановка (10) в (7) и (8) приводит к серии обыкновенных дифференциальных уравнений для нахождения коэффициентов Фурье $T_n(t)$:

$$\rho c_E \partial T_n / \partial t = -(\lambda \mu_n^2 + 0,5 \gamma_1 dE^2 / dt) T_n - 0,5 c_n \gamma_0 dE^2 / dt \quad (11)$$

с начальными условиями

$$T_n(0) = 0, n = 0, 1, 2, \dots$$

В уравнении (11) коэффициенты c_n определяются следующим образом:

$$c_n = 2(-1)^n / [\pi(n + 0,5)].$$

Решение задачи Коши (11) имеет вид

$$T_n(t) = b_n e^{-\lambda_n^2 t - a(t)} \int_0^t \frac{\gamma_1}{2\rho c_E} \frac{dE^2}{dt} e^{\lambda_n^2 \tau + a(\tau)} d\tau, \quad (12)$$

где $a(t) = 0,5 \gamma_1 E^2(t) / (\rho c_E)$;

$$\lambda_n^2 = \lambda \mu_n^2 / (\rho c_E);$$

$$b_n = -c_n \gamma_0 / (2\rho c_E).$$

Проинтегрировав по частям интеграл в правой части уравнения (12), получим следующее выражение для коэффициентов Фурье:

$$T_n(t) = d_n \left(1 - e^{-\lambda_n^2 t - a(t)} - e^{-\lambda_n^2 t - a(t)} \int_0^t \lambda_n^2 e^{\lambda_n^2 \tau + a(\tau)} d\tau \right), \quad (13)$$

где $d_n = b_n (2\rho c_E) / \gamma_1 = -c_n \gamma_0 / \gamma_1$.

Для вычисления коэффициентов $T_n(t)$ разложим $e^{\pm a(t)}$ в ряд Фурье по времени:

$$e^{\pm a(t)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{i\omega k t} a_k^{\pm}, \quad \omega = 2\pi/A. \quad (14)$$

Подставив ряд (14) в уравнение (13) и вычислив получившиеся элементарные интегралы, получим коэффициент T_n в виде ряда:

$$T_n(t) = d_n \left\{ 1 - e^{-a(t)} \left[\sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{a_k^+ \lambda_n^2}{\lambda_n^2 + i\omega k} (e^{i\omega k t} - e^{-i\omega k t}) \right] + e^{-\lambda_n^2 t} \right\}. \quad (15)$$

Обозначим через T_l характерное время для тепловых процессов в рассматриваемом отрезке, $T_l = \rho c_E l^2 / \lambda$. Тогда при $T \gg T_l$ убывающими экспонентами в ряде (15) можно пренебречь и, воспользовавшись разложением (14), получить формулу для предельных значений T_n^{∞} коэффициентов T_n :

$$T_n^{\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} T_n(t) = d_n \left(1 - \sum_{k,m=-\infty}^{\infty} \frac{a_k^- a_m^+}{\lambda_n^2 + i\omega k} e^{i\omega m t} \right).$$

Таким образом, предельные значения $T_n(t)$ являются периодическими функциями t , т.е. установившийся режим является периодическим по времени с периодом A . В частности, не зависящая от времени часть коэффициента $T_n^{\infty}(t)$, которую обозначим через $T_{n0}^{\infty}(t)$, имеет вид

$$T_{n0}^{\infty} = d_n \left(1 - \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{a_k^+ a_k^- \lambda_n^2}{\lambda_n^2 + i\omega k} \right). \quad (16)$$

Соответствующий ряд Фурье для распределения стационарной температуры $T_0^{\infty}(x)$ по координате выражается следующим образом:

$$T_0^{\infty}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} d_n \left(1 - \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k^- a_k^+ \right) \cos \mu_n x. \quad (17)$$

Выражение (17) описывает стационарную часть предельного решения, относительно которой осуществляются колебания температуры в каждой точке диэлектрика.

Для гармонического закона изменения напряженности электрического поля $E(t) = E_0 \sin \omega t$, где E_0 – постоянная амплитуда напряженности, коэффициенты a_k^{\pm} могут быть найдены при помощи следующего разложения [3]:

$$e^{\pm z \cos y} = I_0(z) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (\pm 1)^k \cos(ky) I_k(z). \quad (18)$$

В разложении (18) используются модифицированные функции Бесселя $I_k(z)$. В результате простых вычислений находим для коэффициентов a_k^{\pm} следующие выражения:

$$a_{2k}^{\pm} = (-1)^k I_k(z); \quad a_{2k}^- = I_k(z); \quad a_{2k-1}^{\pm} = 0,$$

где $z = \gamma_1 E_0^2 / (2\rho c_E)$.

При изменении напряженности поля по гармоническому закону выражение (16) с учетом равенства $I_{-k}(z) = I_k(z)$ может быть переписано в виде

$$T_{n0}^{\infty} = d_n \left(1 - I_0^2(z) - 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{I_k^2(z) \lambda_n^4}{\lambda_n^4 + 4\omega^2 k^2} \right). \quad (19)$$

Сумма ряда в правой части равенства (19) находится при помощи аналитического продолжения формулы 5.8.6.2 [3]. В результате получаем окончательную формулу для стационарной части предельного разложения температуры по координате:

$$T_0^{\infty}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} d_n \left(1 - \frac{\pi b}{\sinh \pi b} I_{ib}(z) I_{-ib}(z) \right) \cos \mu_n x, \quad (20)$$

где введено обозначение $b = \lambda_n^2 / (2\omega)$.

Из формулы (20) с учетом асимптотики функций $I_{ib}(z)$, ($z \rightarrow \infty$) вытекает, что $T_0^{\infty}(x)$ при больших значениях параметра z экспоненциально растет с увеличением z . Однако параметр z , вычисленный по имеющимся экспериментальным данным, является малой величиной

($z \approx 0,1 \dots 0,2$). Поэтому исследуем асимптотику $T_0^\infty(x)$ при малых z . Для этого воспользуемся разложением

$$I_\nu(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(0,5z)^{2m+\nu}}{m! \Gamma(m+\nu+1)}$$

и следующими свойствами Г-функции:

$$\Gamma(x+1) = x \Gamma(x+1); \quad \Gamma(1+ix)\Gamma(1-ix) = \pi x / \sinh \pi x.$$

В результате простых вычислений получаем

$$T_0^\infty(x) = - \sum_{n=0}^{\infty} d_n \frac{z^2}{1+b^2} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4d_n \omega^2 z^2}{\lambda_n^4 + 4\omega^2};$$

$$T_0^\infty(x) = \frac{z^2 \gamma_0}{\gamma_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4\omega^2 c_n}{\lambda_n^4 + 4\omega^2} [1 + o(z^2)] \cos \mu_n x. \quad (21)$$

Отбросим поправочный член в (21) и для нахождения оставшейся суммы, которую обозначим через $T_s(x)$, заметим, что $T_s(x)$ есть решение следующей задачи:

$$T_s^{(IV)} x^2 / (\rho c_E) + 4\omega^2 T_s = 4\omega^2 z^2 \gamma_0 / \gamma_1; \quad (22)$$

$$T(l) = T''(l) = 0; \quad T'(0) = T'''(0) = 0. \quad (23)$$

Решение задачи (22), (23) имеет вид

$$T_s(x) = \frac{z^2 \gamma_0}{\gamma_1} \left(1 - \frac{\operatorname{ch} \sqrt{\frac{2\omega\rho c_E}{\lambda}} x + \cos \sqrt{\frac{2\omega\rho c_E}{\lambda}} x}{\operatorname{ch} \sqrt{\frac{2\omega\rho c_E}{\lambda}} l + \cos \sqrt{\frac{2\omega\rho c_E}{\lambda}} l} \right). \quad (24)$$

Формула (24) описывает при малых z главную часть не зависящей от времени составляющей температуры при больших значениях времени. Отметим, что если пироэлектрический коэффициент не зависит от температуры ($\gamma_1 = 0$), то эффект изменения температуры отсутствует.

Анализ полученных результатов

Параметр z имеет следующий физический смысл. Пусть $E_{eff}^2 = E_0^2/2$ – квадратичная средняя напряженность электрического поля, изменяющаяся по гармоническому закону. Обозначим через ΔT изменение температуры образца в адиабатических условиях, вызванное изменением напряженности электрического поля до E_{eff} . Эта функция зависит от температуры:

$$\Delta T = \Delta T(T) = -[T/(\rho c_E)] (\partial P/\partial T) E_{eff}^2.$$

Тогда параметр

$$z = (\partial \Delta T / \partial T)|_E = -[\gamma_0 + \gamma_1 (T - T_0)]/(\rho c_E) E_{eff}^2$$

может быть интерпретирован как крутизна температурной зависимости электрокалорического эффекта в адиабатических условиях. Данная величина может быть получена из экспериментальных измерений образцов.

Анализ выражений (18), (20), (22) позволяет сделать следующие выводы. Изменение внутренней энергии диэлектрика вследствие ЭК-эффекта одинаково как для увеличения, так и для уменьшения напряженности элек-

трического поля при переключении электрического поля в адиабатных или изотермических условиях. Если условия изотермичности или адиабатности не выполняются, то изменение энергии будет зависеть от крутизны температурной зависимости электрокалорического коэффициента, и, следовательно, изменение температуры при включении поля будет отличаться от изменения температуры при выключении. Это приводит к тому, что происходит смещение начальной температуры для последующего включения поля и далее процесс повторяется. При установившемся режиме в каждой точке диэлектрика температура осциллирует относительно среднего значения новой температуры $T_0^\infty(x)$, которая отличается от начальной температуры T_0 и легко может быть вычислена по формуле (24).

Из выражения (24) также следует, что имеет место постоянный градиент температуры, т.е. гармоническое электрическое поле, приложенное к сегнетоэлектрику, вызывает постоянный тепловой поток, направленный к холодному концу. В установившемся состоянии количество тепла, поступающего благодаря теплопроводности, равно энергии, отводимой из системы в результате электрокалорического эффекта под действием поля.

Краевая задача (7), (8), (9) может быть решена численно методом конечных элементов. Преимущество численного решения заключается в том, что описанный ранее результат может быть легко получен даже в том случае, когда имеет место нелинейная зависимость диэлектрической проницаемости от напряженности электрического поля и температуры $\epsilon(T, E)$, что расширяет возможности моделирования температурного эффекта в ЭК-элементе.

Авторы выражают глубокую признательность вице-президенту МАХ, д-ру техн. наук, проф. О.Б. Цветкову за постоянное внимание и поддержку работы в данном научном направлении.

Список литературы

- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. – М.: Физматлит, 2001.
- Леонович М.А. Введение в термодинамику. Статистическая физика. – М.: Наука, 1982.
- Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Специальные функции. – М.: Наука, 1983.
- Сычев В.В. Сложные термодинамические системы. – М.: Энергоатомиздат, 1986.
- Таганцев А.К. УФН, 1987. 152.
- Fally M., Schranz W. and Havlik D. Phys. Rev. 1996. B 53.
- Marvan M., Jonscher A.K., Fahnrich J. // Journal of the European Ceramic Society. 2007. 21.