

纳米“热点”系统中的梯度热导率

吴志鹏¹⁾ 张创²⁾ 胡世谦³⁾ 马登科⁴⁾† 杨诺¹⁾‡

1) (华中科技大学能源与动力工程学院, 武汉 430074)

2) (杭州电子科技大学物理系, 杭州 310018)

3) (云南大学物理与天文学院, 昆明 650091)

4) (南京师范大学物理科学与技术学院, 南京 210000)

† 通信作者. E-mail: dkma@n.jnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: nuo@hust.edu.cn

* 国家重点研发计划政府间联合项目 (批准号: 2018YFE0127800) 资助的课题

S1 准二维纳米“热点”系统的有效热导率推导

传统二维平面沿半径方向的一维导热问题的热流量 Φ 的表达式为

$$\Phi = \frac{2\pi d \kappa_{\text{eff}} (T_h - T_c)}{\ln(L/l)}, \quad (\text{S1})$$

其中 l 和 L 分别为几何中心到高温和低温热源的距离； T_h 和 T_c 分别为高温和低温热源的温度； d 为材料的厚度，此处为石墨烯圆盘的厚度； κ_{eff} 为材料的有效热导率。

因此，有效热导率 κ_{eff} 的表达式为

$$\kappa_{\text{eff}} = \frac{\Phi \ln(L/l)}{2\pi d (T_h - T_c)}, \quad (\text{S2})$$

从(S2)式可知，需求出热流量 Φ 表达式后就能得到 κ_{eff} 。

对于呈现梯度热导率的准二维“热点”系统而言：

$$\Phi = -2\pi r d \kappa(r) \frac{dT}{dr}, \quad (\text{S3})$$

$$\kappa(r) = \kappa_0 [R_{2D}^*(r)]^\alpha, R_{2D}^*(r) = \frac{\ln(l) - \ln(r) - 1}{\ln(l) - \ln(L) - 1}, \quad (\text{S4})$$

其中 $\kappa(r)$ 为梯度热导率， κ_0 为具有热导率量纲的常数， α 为梯度指数， α 和 κ_0 值可通过模拟结果中 $\kappa(r)$ 与 $R_{2D}^*(r)$ 的依赖关系得到，在 $\lg \kappa(r)$ 与 $\lg R_{2D}^*(r)$ 的关系图中， α 表示斜率， $\lg \kappa_0$ 表示截距。为了方便读者的阅读，后续的 $R_{2D}^*(r)$ 用 R_{2D}^* 表示。

从(S3)式可知，需要求出 $\frac{dT}{dr}$ 表达式，就能够得到热流量 Φ 。

Zhang 等^[S1]的研究得到

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dT}{d(R_{2D}^*)^{1-\alpha}} = c_1, \alpha \neq 1 \\ \frac{dT}{d(\ln(R_{2D}^*))} = c_3, \alpha = 1 \end{array} \right., \quad (\text{S5})$$

通过积分可得系统的温度分布：

$$T(r) = \begin{cases} c_1 (R_{2D}^*)^{1-\alpha} + c_2, & \alpha \neq 1 \\ c_3 \ln(R_{2D}^*) + c_4, & \alpha = 1 \end{cases}. \quad (S6)$$

对于高温热源边界, $r=l$, 即 $R_{2D}^* = \frac{1}{1-\ln(l/L)}$, $T = T_h$; 对于低温热源边界, $r=L$,

即 $R_{2D}^* = 1$, $T = T_c$ 。则, 可以得到 c_1, c_2, c_3, c_4 :

$$\begin{cases} c_1 = \frac{T_h - T_c}{(1 - \ln(l/L))^{\alpha-1} - 1} \\ c_2 = T_c - \frac{T_h - T_c}{(1 - \ln(l/L))^{\alpha-1} - 1} \\ c_3 = \frac{T_h - T_c}{-\ln(1 - \ln(l/L))} \\ c_4 = T_c \end{cases}. \quad (S7)$$

因此, 温度分布为

$$T(r) = \begin{cases} T_c + (T_h - T_c) \frac{(R_{2D}^*)^{1-\alpha} - 1}{(1 - \ln(l/L))^{\alpha-1} - 1}, & \alpha \neq 1 \\ T_c + (T_h - T_c) \frac{-\ln(R_{2D}^*)}{\ln(1 - \ln(l/L))}, & \alpha = 1 \end{cases}. \quad (S8)$$

对于 α 的不同取值情况分别为

1) 当 $\alpha \neq 1$ 时:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dr} &= \frac{dT}{dR_{2D}^*} \frac{dR_{2D}^*}{dr}, \\ \Rightarrow \frac{dT}{dr} &= c_1 (\alpha - 1) (R_{2D}^*)^{-\alpha} \frac{1}{(\ln l - \ln L - 1)r}. \end{aligned} \quad (S9)$$

由(S3)和(S4)式可知

$$\begin{aligned} \Phi &= -2\pi r d\kappa_0 (R_{2D}^*)^\alpha \frac{dT}{dr}, \\ \Rightarrow \Phi &= 2\pi d\kappa_0 c_1 (\alpha - 1) \frac{1}{(1 - \ln(l/L))}, \\ \Rightarrow \Phi &= 2\pi d\kappa_0 (\alpha - 1) \frac{T_h - T_c}{\left[(1 - \ln(l/L))^{\alpha-1} - 1 \right] (1 - \ln(l/L))}. \end{aligned} \quad (S10)$$

将热流量 Φ 的表达式代入(S2)式, 可求得在 $r \in (l, L)$ 范围内系统的有效热导

率公式为

$$\kappa_{\text{eff}} = \kappa_0 (\alpha - 1) \frac{\ln(L/l)}{\left[(1 - \ln(l/L))^{\alpha-1} - 1 \right] (1 - \ln(l/L))}. \quad (\text{S11})$$

2) 当 $\alpha = 1$ 时:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dr} &= \frac{dT}{dR_{2D}^*} \frac{dR_{2D}^*}{dr}, \\ \Rightarrow \frac{dT}{dr} &= -c_3 \frac{1}{R_{2D}^*} \frac{1}{(\ln l - \ln L - 1)r}. \end{aligned} \quad (\text{S12})$$

由(S3)和(S4)式可知

$$\begin{aligned} \Phi &= -2\pi r d \kappa_0 R_{2D}^* \frac{dT}{dr}, \\ \Rightarrow \Phi &= 2\pi d \kappa_0 c_3 \frac{1}{(\ln l - \ln L - 1)}, \\ \Rightarrow \Phi &= 2\pi d \kappa_0 \frac{T_h - T_c}{\ln(1 - \ln(l/L))(1 - \ln(l/L))}. \end{aligned} \quad (\text{S13})$$

将热流量 Φ 的表达式代入(S2)式, 可求得在 $r \in (l, L)$ 范围内系统的有效热导率公式:

$$\kappa_{\text{eff}} = \kappa_0 \frac{\ln(L/l)}{\ln(1 - \ln(l/L))(1 - \ln(l/L))}. \quad (\text{S14})$$

因此, 准二维系统的有效热导率为

$$\kappa_{\text{eff}} = \begin{cases} \kappa_0 (\alpha - 1) \frac{\ln(L/l)}{\left[(1 - \ln(l/L))^{\alpha-1} - 1 \right] (1 - \ln(l/L))}, & \alpha \neq 1 \\ \kappa_0 \frac{\ln(L/l)}{\ln(1 - \ln(l/L))(1 - \ln(l/L))}, & \alpha = 1 \end{cases}. \quad (\text{S15})$$

当声子间耦合逐渐加强, 梯度导热现象逐渐向扩散性输运靠近, $\alpha \rightarrow 0$, κ_0 值趋于 κ_{bulk} , 通过求极限可得 κ_{eff} 值为 κ_{bulk} 。

S2 三维纳米“热点”系统的有效热导率推导

传统球壳的导热热流量公式为

$$\Phi = \frac{4\pi\kappa_{\text{eff}}(T_h - T_c)}{1/l - 1/L}. \quad (\text{S16})$$

因此，有效热导率 κ_{eff} 的表达式为

$$\kappa_{\text{eff}} = \frac{\Phi(1/l - 1/L)}{4\pi(T_h - T_c)}. \quad (\text{S17})$$

与准二维系统推导类似，只需要知道热流量 Φ 就能得到 κ_{eff} 。

对于呈现梯度热导率的三维“热点”系统而言：

$$\Phi = -4\pi r^2 \kappa(r) \frac{dT}{dr}, \quad (\text{S18})$$

$$\kappa(r) = \kappa_0 \exp(\gamma R_{3D}^*(r)), \quad R_{3D}^*(r) = \frac{1/l - 1/r + 1}{1/l - 1/L + 1}, \quad (\text{S19})$$

其中， κ_0 为具有热导率量纲的常数， γ 为与体系尺寸有关的常数。 γ 和 κ_0 值可通过模拟结果中 $\kappa(r)$ 与 $R_{3D}^*(r)$ 的依赖关系得到，在 $\lg \kappa(r)$ 与 $R_{3D}^*(r)$ 的关系图中， γ 表示斜率， $\lg \kappa_0$ 表示截距。为了方便读者的阅读，后续的 $R_{3D}^*(r)$ 用 R_{3D}^* 表示。从 (S17) 式可知，只要求出 $\frac{dT}{dr}$ 就能够得到热流量 Φ 。

从 Zhang 等^[S1]的研究中可以知道：

$$T(R_{3D}^*) = c_5 \exp(-\gamma R_{3D}^*) + c_6. \quad (\text{S20})$$

对于高温热源边界， $r = l$ ，即 $R_{3D}^* = \frac{1}{1/l - 1/L + 1}$ ， $T = T_h$ ；对于低温热源边界， $r = L$ ，

即 $R_{3D}^* = 1$ ， $T = T_c$ 。可以得到 c_5 和 c_6 ：

$$\begin{cases} c_5 = \frac{T_h - T_c}{\exp\left(-\frac{1}{1/l - 1/L + 1}\gamma\right) - \exp(-\gamma)} \\ c_6 = T_c - \exp(-\gamma) \frac{T_h - T_c}{\exp\left(-\frac{1}{1/l - 1/L + 1}\gamma\right) - \exp(-\gamma)} \end{cases}. \quad (\text{S21})$$

因此, 温度分布为

$$T(R_{3D}^*) = T_c + (T_h - T_c) \frac{\exp(-\gamma R_{3D}^*) - \exp(-\gamma)}{\exp\left(-\frac{1}{1/l-1/L+1}\gamma\right) - \exp(-\gamma)}. \quad (\text{S22})$$

进而可以得到温度梯度 $\frac{dT}{dr}$ 的表达式:

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dr} &= \frac{dT}{dR_{3D}^*} \frac{dR_{3D}^*}{dr}, \\ \Rightarrow \frac{dT}{dr} &= c_s (-\gamma) \exp(-\gamma R_{3D}^*) \frac{1}{r^2 (1/l-1/L+1)}. \end{aligned} \quad (\text{S23})$$

由(S18)和(S19)式可知, 热流量:

$$\begin{aligned} \Phi &= -4\pi r^2 \kappa_0 \exp(\gamma R_{3D}^*) \frac{dT}{dr}, \\ \Rightarrow \Phi &= 4\pi c_s \kappa_0 \gamma \frac{1}{1/l-1/L+1}, \\ \Rightarrow \Phi &= 4\pi \kappa_0 \gamma \frac{T_h - T_c}{\left[\exp\left(-\frac{1}{1/l-1/L+1}\gamma\right) - \exp(-\gamma)\right] (1/l-1/L+1)}. \end{aligned} \quad (\text{S24})$$

比较(S16)和(S22)式可以得到系统的有效热导率公式:

$$\kappa_{\text{eff}} = \frac{\gamma \kappa_0 (1/l-1/L)}{\left[\exp\left(-\frac{1}{1/l-1/L+1}\gamma\right) - \exp(-\gamma)\right] (1/l-1/L+1)}. \quad (\text{S25})$$

当声子间耦合逐渐加强, $\gamma \rightarrow 0$, κ_0 值为 κ_{bulk} , 通过求极限化简可得 κ_{eff} 值为 κ_{bulk} 。

当体系外半径 $L \rightarrow \infty$ 时,

$$\kappa_{\text{eff}} = \frac{\gamma \kappa_0}{\left[\exp\left(-\frac{\gamma}{1/l+1}\right) - \exp(-\gamma)\right] (1+l)}. \quad (\text{S26})$$

参考文献

- [S1] Zhang C, Ma D, Shang M, Wan X, Lü J, Guo Z, Li B, Yang N 2022 *Mater. Today Phys.* **22** 100605