

介孔复合材料声子运输的格子玻尔兹曼模拟

冯黛丽 冯妍卉 石珺

Lattice Boltzmann model of phonon heat conduction in mesoporous composite material

Feng Dai-Li Feng Yan-Hui Shi Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 244401 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.244401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.244401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I24>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

三维有序排列多孔介质对流换热的数值研究

Numerical study of convection heat transfer in ordered three-dimensional porous media

物理学报.2014, 63(21): 214401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.214401>

α -Al₂O₃ 介孔材料导热特性的模拟

Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of mesoporous α -Al₂O₃

物理学报.2014, 63(1): 014402 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.014402>

介孔二氧化硅基导电聚合物复合材料热导率的实验研究

Thermal conductivity measurements on PANI/SBA-15 and PPy/SBA-15

物理学报.2012, 61(15): 154402 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.154402>

介孔复合材料声子运输的格子玻尔兹曼模拟

Lattice Boltzmann model of phonon heat conduction in mesoporous composite material

物理学报.2016, 65(24): 244401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.244401>

介孔复合材料声子运输的格子玻尔兹曼模拟*

冯黛丽 冯妍卉† 石琚

(北京科技大学能源与环境工程学院, 北京 100083)

(2016年5月3日收到; 2016年6月24日收到修改稿)

采用格子玻尔兹曼方法对 NaCl@Al₂O₃ 介孔复合材料内的声子热运输进行了模拟分析. 基于德拜物理模型, 提出了温度耦合的复合材料界面处理方法, 有效实现了复合材料声子运输的格子玻尔兹曼模拟, 获得了不同孔径、孔隙率、孔形状、孔排列、界面条件系数下介孔复合材料的热导率, 并进行影响因素分析. 结果表明: 该介孔复合材料热导率, 在孔隙率一定时, 随着孔径增大而增大, 呈现显著的尺度效应; 在孔径一定时, 热导率随孔隙率增大而减小; 孔径和孔隙率一定时, 热导率随界面条件系数的增大而减小; 孔形状和孔排列均会影响介孔复合材料的热导率, 且这种影响会随着界面条件系数的增大而增大.

关键词: 介孔复合材料, 格子玻尔兹曼方法, 声子运输, 热导率

PACS: 44.30.+v, 63.20.-e, 65.80.-g

DOI: 10.7498/aps.65.244401

1 引言

介孔复合材料是指通过一定的物理化学手段, 将异质纳米颗粒团簇组装到孔隙率大于 50% 的介孔材料中^[1], 这是近年来纳米材料领域的一种全新的研究对象. 由于介孔复合材料具有特殊的微/纳结构, 展示出许多光、电、磁、敏感等方面的奇妙性能, 其热学性能受如体积效应、量子尺寸效应、表面效应、量子隧道效应、介电限域效应、光子隧道效应等的影响较大, 因此必然会表现出非同寻常的热学特性^[2-4].

介孔氧化铝 (Al₂O₃) 作为介孔复合材料的重要基材, 价廉易得, 具有良好的物理化学性质. 其孔径分布较窄, 比表面积大, 在吸附、催化和生物医药等领域都具有非常重要的应用价值^[5], 引起了人们的广泛关注^[6]. 近年来, 人们先后采用水热合成法、溶胶凝胶法、沉淀法、微乳液法、离子液法、硬模板法等方法制备出不同孔径及孔隙密度的 Al₂O₃ 介孔材料. 有关研究主要集中在该材料吸附、催化等特性方面^[7]. Dam 等^[8] 采用负载铂的酸改性介孔

氧化铝作为催化剂, 与丙二醇进行催化反应得到甘油, 研究表明合成出的负载铂的介孔 Al₂O₃ 具有高的催化性能; Sarda 等^[9] 采用负载镍的介孔 Al₂O₃ 作为吸附剂, 用于柴油的吸附脱硫, 发现其具有很强的选择性离子吸附特性. 随着介孔 Al₂O₃ 复合材料的发展, 除了吸附、催化性能, 同样对其热特性的研究提出了要求, 如以介孔 Al₂O₃ 为基材的介孔复合相变储能材料^[10], 其传热特性是考评相变性能的关键因素之一, 然而现有的文献少见相关报道. 本课题组曾尝试采用分子动力学方法探讨介孔 Al₂O₃ 的热导率^[7], 考虑到该方法计算尺度的局限性, 只研究了孔道直径为 2—3 nm 的材料, 而实际制备出的介孔 Al₂O₃ 孔径范围从几十到几百纳米. 因此, 有必要借助介观尺度的模拟方法——格子玻尔兹曼方法 (LBM) 针对大孔径介孔材料开展进一步的研究.

Al₂O₃ 有多种结构形态, 以 α -Al₂O₃ 最为常见^[11], 其化学性质也最稳定, 因此选用介孔 α -Al₂O₃ 为基材. 氯化钠 (NaCl) 是一种常见的无机相变储能材料, 具有潜热值高、过冷度低、原材料广泛、价格低的优点, 将其填入耐酸碱腐蚀, 性质稳

* 国家自然科学基金 (批准号: 51422601) 和中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: FRF-TP-15-021A1) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yhfeng@me.ustb.edu.cn

定的介孔 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 中, 可形成稳定的介孔复合材料. 本文以介孔 Al_2O_3 负载 NaCl 形成的 $\text{NaCl}@\text{Al}_2\text{O}_3$ 介孔复合体为研究对象, 采用 LBM 对其内部的声子输运进行模拟, 研究了不同孔尺寸、孔隙率、孔形状、孔排列、界面条件系数对其导热性能的影响. 为材料热物性设计提供一定的理论依据. 本文提出界面温度耦合的方式, 将 LBM 运用到介孔复合材料声子输运的模拟中, 不仅为介孔复合材料热特性的研究提出了新方法, 同时也拓展了 LBM 在纳米材料热导率模拟计算中的应用.

2 物理数学模型

2.1 格子玻尔兹曼方程

声子为玻色子, 满足玻色-爱因斯坦分布:

$$f^{\text{eq}} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1}, \quad (1)$$

式中, \hbar 为普朗特常数除以 2π , ω 为声子频率, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度.

LBM 演化方程为

$$f_\alpha(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t + \Delta t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{\Delta t}{\tau}(f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - f_\alpha(\mathbf{x}, t)), \quad (2)$$

式中, \mathbf{x} 为空间位置; α 为离散的格子方向; f_α 为某一方向的声子分布函数; f_α^{eq} 为声子平衡分布函数; Δt 为计算的时间步长, 满足关系式 $\Delta\mathbf{x}_\alpha = \mathbf{v}_{g,\alpha}\Delta t$, $\mathbf{v}_{g,\alpha}$ 为 α 方向的群速度.

Gray LBM 是单一弛豫时间近似下的玻尔兹曼传输方程的一种发展形式, 遵循德拜模型假设^[12], 故 Gray 模型, 也称德拜模型. 在这个模型中, 认为声子传播的速度是相同的, 取平均速度, 即声子群速度, 与频率无关^[13].

每个格点有 m 个方向, 离散方向的平衡态声子密度为

$$f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_{\alpha=0}^{m-1} f_\alpha(\mathbf{x}, t)}{m}. \quad (3)$$

材料内部格点热流可通过下式计算:

$$q_n(\mathbf{x}, t) = (f^{\text{in}}(\mathbf{x}, t) - f^{\text{out}}(\mathbf{x}, t))\hbar\omega v_{\text{eff}} \times D_\omega \cos\theta\Delta\omega, \quad (4)$$

式中, θ 为声子传输方向与热流方向的夹角, v_{eff} 为有效声子群速度, D_ω 为声子态密度, $\Delta\omega$ 为频宽 (在 Gray 模型中等于 ω).

平均声子频率 ω 为

$$\omega = \frac{k_B T_D}{\hbar}, \quad (5)$$

式中 T_D 为德拜温度.

声子态密度计算式如下^[14]:

$$D_\omega = \frac{C_v}{k_B x^2 e^x (e^x - 1)^{-2} \Delta\omega}, \quad (6)$$

式中, C_v 为体积热容, x 为 $\hbar\omega/(k_B T_{\text{ave}})$.

材料热导率

$$k = \frac{q_{\text{avg}}}{T_h - T_c}, \quad (7)$$

式中

$$q_{\text{avg}} = \int_1^{nx} q_n(x) dx, \quad (8)$$

其中 nx 为总共的格点数.

2.2 边界条件

为研究不同结构对介孔复合材料热导率的影响, 建立顺排圆孔 (aligned circle, AC)、错排圆孔 (staggered circle, SC)、顺排方孔 (aligned square, AS)、错排方孔 (staggered square, SS) 四种结构下的介孔复合材料的模型, 如图 1 所示, 其中 d 代表孔径, t 代表孔间距. 这里假设 $\text{NaCl}@\text{Al}_2\text{O}_3$ 介孔复合材料轴向无限长, 径向无限大, 模拟计算时, 取其最小重复单元建立模型, 下表面初始温度 $T_1 = 301$ K, 上表面初始温度 $T_2 = 300$ K, 上下给定周期边界, 左右为绝热边界, 即镜反射边界, 孔表面为界面条件系数为 p 的透射边界.

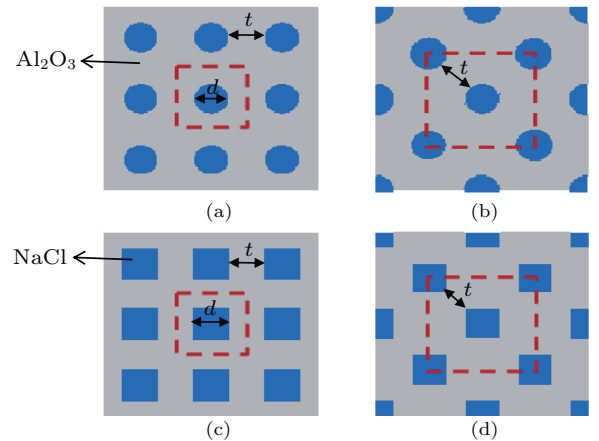


图 1 (a) AC, (b) SC, (c) AS, (d) SS 四种结构下的 $\text{NaCl}@\text{Al}_2\text{O}_3$ 介孔复合材料二维模型

Fig. 1. Two-dimensional models for $\text{NaCl}@\text{Al}_2\text{O}_3$ mesoporous composites: (a) AC; (b) SC; (c) AS; (d) SS.

以 AC 结构为例进行说明. 由于假设介孔氧化铝轴无限长, 径向无限大, 所以这里可选取最小重复单元模拟计算, 如图 2 所示.

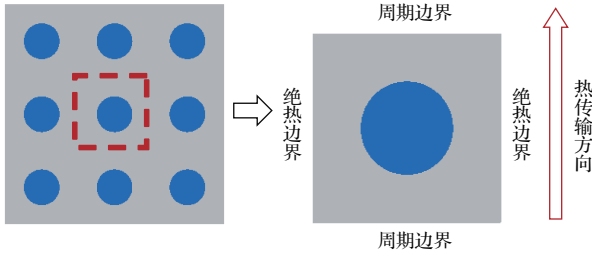


图 2 给定自下而上的热流方向后模拟单元的边界条件
Fig. 2. Boundary conditions of simulated units with heat flux from bottom to top.

对二维介孔复合材料内声子输运进行模拟, 这里采用格子玻尔兹曼方法 D2Q9 模型, 各边界处理如下:

1) 上下边界为周期性边界, 以底部 $y = 0$ 边界上的 $(i, 0)$ 节点为例,

$$f_{2,5,6}(i, 0) = f_{2,5,6}(i, ny) + (f_{2,5,6}^{eq}(i, 0) - f_{2,5,6}^{eq}(i, ny)); \quad (9)$$

2) 左右边界为绝热边界, 即镜反射边界, 以左侧 $x = 0$ 边界上的 $(0, j)$ 节点为例,

$$f_{1,5,8} = f_{3,6,7}. \quad (10)$$

复合材料界面如图 3 所示, A 和 B 分别表示两种不同的材料, 实心格点表示材料 A 的格点, 空心格点表示材料 B 的格点, $-$ 表示指向 A 的格子方向, $+$ 表示指向 B 的格子方向. 实际复合材料界面上, 能量的透过情况可分为三种: 全部透过、部分透过和全不透过. 因此引入界面条件系数 p , 当 $p = 0$ 时, 表示界面热阻为零, 能量可全部透过; 当 $0 < p < 1$ 时, 表示存在一定界面热阻, 能量部分透过; 当 $p = 1$ 时, 表示界面为绝热界面, 无能量透过.

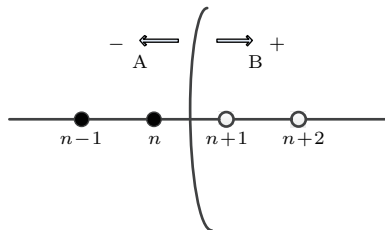


图 3 复合材料界面
Fig. 3. The interface of the composite.

众所周知, 固体中的热量传递通过晶格振动实现, 根据固体物理, 晶格振动的能量为

$$e = \sum_i^N \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_i, \quad (11)$$

式中, N 为晶格振动的振动模式数, ω 为声子振动频率.

在不考虑零点能的情况下, 晶格振动能量可表示为

$$e^{eq} = \int_{\Delta\omega} \hbar \omega f D(\omega), \quad (12)$$

并且, 能量与温度满足如下关系^[15]:

$$e^{eq} = \frac{CT}{4\pi}. \quad (13)$$

则格子玻尔兹曼方程可以转化为以温度分布表示的形式^[16]:

$$T_\alpha(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t + \Delta t) - T_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{\Delta t}{\tau} (T_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t) - T_\alpha(\mathbf{x}, t)), \quad (14)$$

式中, T_α 为某一方向的温度分布函数; T_α^{eq} 为温度平衡分布函数.

对于复合材料界面处的格点, 其声子密度分布需先转化为温度分布表示的各式:

$$T_\alpha(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t + \Delta t) - T_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{\Delta t}{\tau_A} (T_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t) - T_\alpha(\mathbf{x}, t)), \quad (15)$$

$$T_\alpha(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}, t + \Delta t) - T_\alpha(\mathbf{x}, t) = \frac{\Delta t}{\tau_B} (T_\alpha^{eq}(\mathbf{x}, t) - T_\alpha(\mathbf{x}, t)). \quad (16)$$

如图 3 所示, 以格点 n 为例进行说明.

$+$ 方向的温度分布可由 $n - 1$ 点迁移得到

$$T_+(n, t + \Delta t) = T_+(n - 1, t). \quad (17)$$

$-$ 方向的温度分布计算如下:

$$T_-(n, t + \delta t) = p \times T_+(n, t + \delta t) + (1 - p) \times T_-(n + 1, t + \delta t). \quad (18)$$

3 结果与讨论

3.1 模拟方法验证

为了验证本文提出的 LBM 模拟复合材料声子输运的可靠性, 分别对串联和并联放置的 Al_2O_3 块

材和NaCl块材构成的复合材料(结构如图4所示)的热导率进行模拟. 已知对于并联的块材, 复合后其热导率满足计算公式 $(k_1+k_2)/2$, 串联的块材, 复合后其热导率满足计算公式 $1/(1/2k_1+1/2k_2)$ ^[17]. 上下边界为定温边界, 温度分别为301和300 K. 左右边界绝热, 采用镜反射处理. α -Al₂O₃ 块材和NaCl 块材300 K下的相应参数见表1.

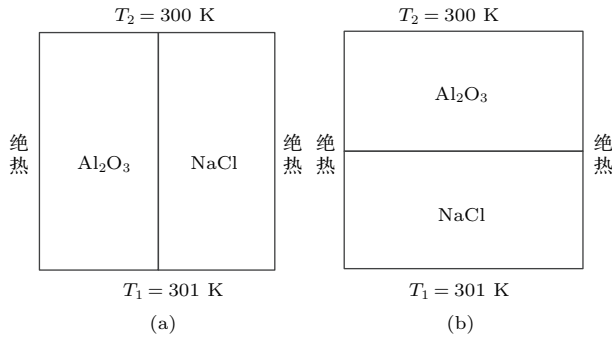


图4 复合块材结构 (a) 并联; (b) 串联

Fig. 4. The composite structure: (a) In parallel; (b) in series.

表1 α -Al₂O₃ 块材和NaCl 块材300 K下的相应热物性参数

Table 1. The thermal properties of α -Al₂O₃ and NaCl bulk at 300 K.

| 参数 | α -Al ₂ O ₃ | NaCl |
|-------------------------------------|--|---------------------|
| 热导率 $k/W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ | 33 ^[18] | 6.237 |
| 比热容 $C/J \cdot m^{-3} \cdot K^{-1}$ | 3.008×10^6 ^[18] | 1.865×10^6 |
| 声子群速度 $v/m \cdot s^{-1}$ | 7211 ^[18] | 3800 |
| 声子平均自由程 Λ/nm | 4.56 ^[18] | 2.64 |
| 德拜温度 T_D/K | 1030 ^[18] | 308 |

模拟结果、理论值及误差见表2. 模拟结果与理论值相差较小, 可以证明本文所提出的复合材料界面处理方法是合理的, 能够一定程度上有效预测复合材料的热导率, 在此基础上我们开展介孔复合体的模拟.

表2 复合材料热导率理论及其模拟结果比较

Table 2. The comparison between theoretical calculation results and simulation ones for thermal conductivity of the composite.

| | 平行 | 垂直 |
|--------------------------------------|-------|-------|
| 理论热导率/ $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ | 19.62 | 10.50 |
| 模拟热导率/ $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ | 19.96 | 10.05 |
| 误差/% | 1.70 | 4.29 |

3.2 介孔复合材料热导率

3.2.1 孔径变化

首先选取孔隙率为40%、孔径在5—1000 nm的NaCl@Al₂O₃介孔复合材料进行模拟研究, 得到 $p = 0$ 和 $p = 1$ 时不同结构下的热导率随孔径的变化, 如图5所示.

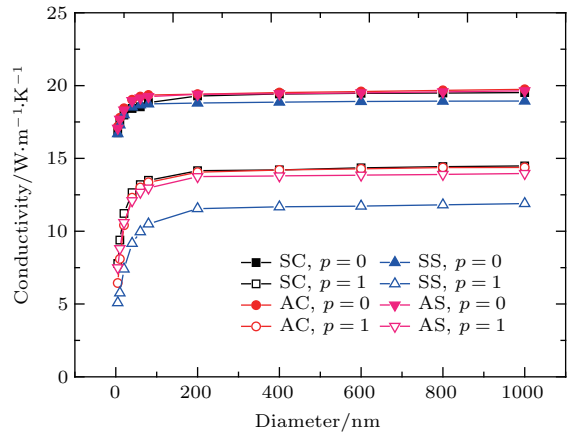


图5 (网刊彩色) $p = 0, 1$ 时NaCl@Al₂O₃介孔复合材料热导率随孔径的变化

Fig. 5. (color online) The thermal conductivity of NaCl@Al₂O₃ changes with the pore diameter when $p = 0, 1$.

1) 尺度效应

由图5可以看出, 孔隙率一定时, 介孔复合材料的热导率随孔径的减小而减小, 并且孔径越小, 下降的幅度越大, 显现出明显的尺度效应. 纳米材料的热导率受散射面积的影响较大, 散射面积越大, 热导率越低. 四种结构下的介孔材料的比表面积见表3. 可以看出孔隙率相同时, 孔径越小, 介孔材料比表面积越高, 界面抑制作用增强, 材料热导率下降. 并且孔径越小, 比表面积随孔径减小的趋势越明显, 在孔径小至100 nm左右时, 可以看到热导率会出现急剧下降的趋势, 从而显现尺度效应.

表3 不同结构的比表面积

Table 3. The specific surface areas under different structures.

| | 圆孔 | 方孔 |
|----|-------------------|-------------------|
| 顺排 | $\frac{2\phi}{d}$ | $\frac{4\phi}{d}$ |
| 错排 | $\frac{2\phi}{d}$ | $\frac{4\phi}{d}$ |

2) 孔径和孔隙率相同, 孔界面条件系数 $p = 1$ 时

从图5我们还发现, 孔径和孔隙率相同, 孔界面条件系数 $p = 1$ 时, 圆孔结构下的热导率要明显

高于方孔的热导率. 这一现象同样和介孔材料的比表面积有关, 对于相同孔径和孔隙率的介孔材料, 方孔材料的比表面积要大于圆孔材料的比表面积, 界面的抑制作用就更大, 因此热导率更低. 对于相同孔形状, 可以发现, 圆孔的顺、错排结构下热导率几乎相同, 不受孔排列的限制. 而方孔的顺、错排结构下的热导率却有较大差别, 错排下的热导率要明显低于顺排的热导率. 为分析这一现象, 对同一孔隙率和孔径下的孔间距进行计算比较, 结果见表 4. 可以看到同一孔隙率和孔径下, 圆孔顺排和错排的孔间距是不变的, 并且单位体积的散射面积相同, 因此热导率近似; 而方孔的孔间距会随孔排列的不同而变化, 顺排的孔间距要大于错排的孔间距. 在单位体积散射面积相同的情况下, 孔间距越小, 界面间的相互作用越强烈, 界面的抑制作用越大, 热导率会越低, 因此, 错排方孔下的热导率要小于顺排方孔下的热导率.

表 4 不同结构的孔间距
Table 4. Pore spacing of different structures.

| | 圆孔 | 方孔 |
|----|--|--|
| 顺排 | $d\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\phi}} - 1\right)$ | $d\left(\sqrt{\frac{1}{\phi}} - 1\right)$ |
| 错排 | $d\left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\phi}} - 1\right)$ | $d\left(\sqrt{\frac{1}{\phi}} - \sqrt{2}\right)$ |

3) 孔隙率和孔密度相同, 孔界面条件系数 $p = 0$ 时

当孔界面的条件系数 $p = 0$ 时, 热导率要大于 $p = 1$ 下的热导率, 并可以看出不同形状、不同排列的介孔复合材料的热导率几乎相同, 但仍然保留着尺度效应. 虽然 $p = 0$ 时, 界面热阻为零, 声子在界面不发生反射, 但是由于两种材料的性质不同, 参数不同, 当热量通过界面时, 会发生错位散射, 对声子的输运产生抑制作用, Chen^[19] 在描述超晶格界面时对此现象有过相应阐述. 当孔径减小时, 材料比表面积越大, 声子错位散射越显著, 复合材料的热导率也相应降低.

3.2.2 孔隙率变化

为了研究孔隙率对 NaCl@Al₂O₃ 介孔复合材料热导率的影响, 模拟计算孔径为 200 nm, 孔隙率为 20%—40% 的 AC, SC, AS, SS 介孔氧化铝的声子输运, 其热导率随孔隙率的变化见图 6.

由图 6 可以看出, 介孔复合材料的热导率随着孔隙率的增加而减小, 并且近似呈线性变化的趋势. 当孔径一定时, 孔隙率越大, 介孔材料的比表面积越大, 并且高热导率的介孔基材体积占比越小, 材料内声子数量越少, 则热导率越小.

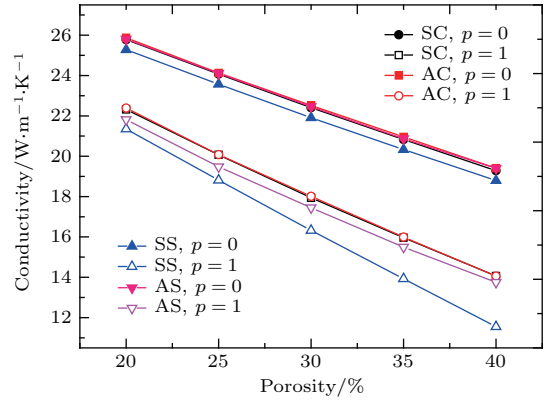


图 6 (网刊彩色) AC, SC, AS, SS 四种结构下的 NaCl@Al₂O₃ 介孔复合材料热导率随孔隙率的变化 (孔径 200 nm)

Fig. 6. (color online) The thermal conductivity of NaCl@Al₂O₃ changes with porosity in AC, SC, AS and SS.

3.2.3 界面条件变化

为了进一步分析界面条件系数 p 对介孔复合材料热导率的影响, 这里选用孔隙率为 40%, 孔径为 5, 20, 60, 200, 800 nm 的 AC 介孔复合材料为研究对象, 模拟计算界面条件系数从 0 到 1 时的热导率, 模拟结果如图 7 所示.

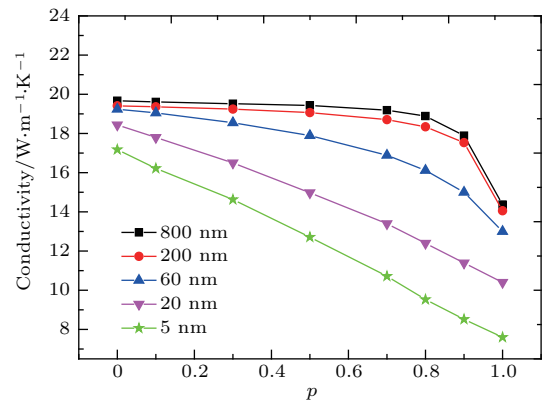


图 7 孔隙率为 40%, 孔径为 5, 20, 200, 600 nm 时 AC 结构 NaCl@Al₂O₃ 介孔复合材料热导率随界面条件系数的变化

Fig. 7. The thermal conductivity of NaCl@Al₂O₃ changes with interface condition coefficient at different pore diameters (when porosity is 40%).

可以看出, 介孔复合材料的热导率随着界面条件系数的增大而减小, 当 $0 < p < 1$ 时, 界面为部分

透射界面, 部分热量可通过界面传递给内部的填充材料, 相对于 $p = 1$ 的绝热边界, 热导率会有所提升, 随着 p 的减小, 界面热阻也相应减小, 使得热导率增大.

对于孔径为 200 和 800 nm 的 $\text{NaCl}@Al_2O_3$ 介孔复合材料, 当 $p < 0.8$ 时, 减小较缓慢, 当 $p > 0.8$ 时, 热导率随之显著降低. 而对于孔径为 5 和 20 nm 的介孔复合体, 热导率随界面条件系数的变化比较均匀, 近乎呈线性关系. 可见孔径越大, 材料的比表面积越小, 界面条件系数的影响越不明显, 孔径越小, 材料的比表面积越大, 界面条件系数的影响越显著.

4 结 论

本文基于 LBM 方法对 $\text{NaCl}@Al_2O_3$ 介孔复合材料的热导率开展了模拟研究, 考察了在 AC, SC, AS 和 SS 四种结构下, 不同孔径、孔隙率、界面条件系数对介孔复合材料热导率的影响, 并尝试性地进行分析解释, 得到结论如下.

1) 孔隙率一定时, $\text{NaCl}@Al_2O_3$ 介孔复合材料热导率随孔径的减小而减小, 呈现出尺度效应, 且在孔径小于 100 nm 时, 尺度效应极为显著, 归因于小孔径下迅速攀升的比表面积.

2) 孔径一定时, $\text{NaCl}@Al_2O_3$ 介孔复合材料的热导率随孔隙率的增加而减小, 近似呈线性变化的趋势.

3) $p = 1$ 时, 圆孔结构的热导率要高于方孔结构的热导率. 对于圆孔结构, 顺、错排对热导率影响不大, 但对于方孔, 顺排结构的热导率要高于错排的热导率; $p = 0$ 时, $\text{NaCl}@Al_2O_3$ 介孔复合材料的孔结构对热导率的影响较弱.

4) 孔隙率和孔径一定时, $\text{NaCl}@Al_2O_3$ 介孔复

合材料的热导率随着界面条件系数的增大而减小, 且孔径越小, 界面条件系数的影响越显著.

参考文献

- [1] Huang C L, Feng Y H, Zhang X X, Wang G, Li J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 114401 (in Chinese) [黄丛亮, 冯妍卉, 张欣欣, 王戈, 李静 2011 物理学报 **60** 114401]
- [2] Yao S S, Karaguleff C, Gabel A, Fortenberry R, Seaton C Y, Stegeman G I 1985 *Appl. Phys. Lett.* **46** 801
- [3] Coffey J L, Beauchamp G, Zerda T W 1992 *J. Non-Cryst. Solids* **142** 208
- [4] Tohge N, Asuka M, Minam T 1992 *J. Non-Cryst. Solids* **147-148** 652
- [5] Wan H R, Hu R C, Yin P 2012 *J. Ludong Univ. (Nat. Sci. Ed.)* **28** 139 (in Chinese) [万红日, 胡玉才, 殷平 2012 鲁东大学学报 (自然科学版) **28** 139]
- [6] Yang L, Feng X, Liu Y L 2010 *Process. Chem.* **22** 32 (in Chinese) [杨冷, 冯炫, 刘应亮 2010 化学进展 **22** 32]
- [7] Yuan S W, Feng Y H, Wang X, Zhang X X 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 014402 (in Chinese) [袁思伟, 冯妍卉, 王鑫, 张欣欣 2014 物理学报 **63** 014402]
- [8] Dam J, Djanashvili K, Kapteijn F, Hanefeld U 2013 *Chem. Cat. Chem.* **54** 97
- [9] Sarda K K, Bhandari A, Pant K K, Sapna J 2012 *Fuel* **93** 86
- [10] Zhao L, Ma R Y, Meng X L, Wang G, Fang X C 2012 *Adv. Mater. Res.* **450-451** 1419
- [11] Ching W Y, Ouyang L Z, Rulis P, Yao H Z 2008 *Phys. Rev. B* **78** 014106
- [12] Majumdar A 1993 *J. Heat Transfer* **115** 7
- [13] Tien C, Majumdar A, Gerner F 2004 *ASME Heat Transfer* **4** 449
- [14] Nabovati A, Sellan D P, Amon C H 2011 *J. Comput. Phys.* **230** 5864
- [15] Chattopadhyay A, Pattamatta A 2014 *Int. J. Heat Mass Transfer* **72** 479
- [16] Guo Z, Shi B, Zheng C 2002 *Int. J. Numer. Meth. Fl.* **39** 325
- [17] Wang M R, Wang J K, Pan N, Chen S Y 2007 *Phys. Rev. E* **75** 036702
- [18] Munro R G 1997 *J. Am. Chem. Soc.* **80** 1919
- [19] Chen G 1998 *Phys. Rev. B* **57** 14958

Lattice Boltzmann model of phonon heat conduction in mesoporous composite material*

Feng Dai-Li Feng Yan-Hui[†] Shi Jun

(School of Energy and Environmental Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(Received 3 May 2016; revised manuscript received 24 June 2016)

Abstract

In this paper, lattice Boltzmann method is used to simulate the phonon heat transport in NaCl@Al₂O₃ mesoporous composite material. Based on the Debye model, temperature coupling method is first proposed in the thermal simulation of mesoporous composite material, to calculate the effective thermal conductivity of mesoporous composite material with pores of various interface condition coefficient value, pore size, porosity, shape and arrangement. Studies show that for the same porosity, the estimated thermal conductivity increases with increasing the value of diameter, showing the scale effect; for the same diameter, the estimated thermal conductivity decreases with increasing the value of porosity; for the same porosity and diameter, the estimated thermal conductivity decreases with increasing the value of interface condition coefficient p ; porous shape and arrangement will affect thermal conductivity value, and the influences greatly increase with increasing the value of p .

Keywords: mesoporous composite material, lattice Boltzmann method, phonon heat transport, thermal conductivity

PACS: 44.30.+v, 63.20.-e, 65.80.-g

DOI: [10.7498/aps.65.244401](https://doi.org/10.7498/aps.65.244401)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51422601) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. FRF-TP-15-021A1).

[†] Corresponding author. E-mail: yhfeng@me.ustb.edu.cn