

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

热传导及其相关交叉领域研究编者按DOI: [10.7498/aps.73.030101](https://doi.org/10.7498/aps.73.030101)

从燧人氏钻木取火开始,人类文明的发展就和“热能”息息相关,对热现象的认识贯穿整个人类社会发展的历程。全球约 60% 的能源都以废热的形式白白浪费。热物理的进展对于我国最近强调的“碳达峰、碳中和”至关重要。我国力争于 2030 年前二氧化碳排放达到峰值,2060 年前实现碳中和。而在利用的和废弃的能源中,占比最大的都是热能。关于热能的研究涉及材料、电子器件、生物、能源等诸多学科,纳米工程的引入为热物理的进展注入了新的活力。微纳米电子器件、电池中的过热问题会直接影响其性能和使用寿命,成为 5G、量子计算、芯片、电动汽车等国家战略技术领域目前的研究热点。人类对于纳米尺度和跨尺度中热物理的认知还是远远不够的。因此,物理、工程、材料、电子等多学科的交叉研究将在上述新兴领域大有用武之地。

鉴于热传导问题研究的挑战性与紧迫性,受编辑部委托特组织本专题,报道热传导领域最新进展和前沿态势。陈亮、冯芒老师综述了基于离子阱中离子晶体的热传导的研究进展,包括一维、二维和三维模型中温度分布和稳态热流的计算方法,还讨论了无序度对离子晶体热导性的影响;鲍华老师回顾了金属导热研究的历史,并对最近十几年来金属导热的研究进行了总结,特别是对基于第一原理电子-声子耦合模式分析的金属导热机理的研究进行了综述;唐桂华老师基于宏观热流调控的思想,提出了非封闭式热斗篷,并用于高超声速飞行器头锥热防护。希望本专题对读者了解此前沿领域有所帮助,为热传导及其相关交叉领域领域的学术交流做一点贡献。

(客座编辑: 李保文 南方科技大学; 唐桂华 西安交通大学; 杨诺 华中科技大学)

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Preface to the special topic: Heat conduction and its related interdisciplinary areas

DOI: [10.7498/aps.73.030101](https://doi.org/10.7498/aps.73.030101)

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

基于离子阱中离子晶体的热传导的研究进展*

李冀¹⁾ 陈亮^{2)†} 冯芒^{1)2)‡}

1) (广州工业大学技术研究院, 广州 511458)

2) (中国科学院精密测量科学与技术创新研究院, 武汉 430071)

(2023年10月28日收到; 2023年11月23日收到修改稿)

热传导现象是物理学中最重要的研究课题之一, 特别是近年来, 随着对单分子器件研究的不断深入, 人们越来越关注低维(一维和二维)微观系统的热传导问题。离子阱中的离子晶体处于真空环境中, 没有与外部环境进行能量交换, 其晶体结构和温度可以通过电场和光场精确操控, 为研究低维晶体在经典或量子状态下的热传导提供了理想的实验平台。本文综述了近年来离子晶体中热传导的理论研究, 包括一维、二维和三维模型中温度分布和稳态热流的计算方法, 以及在不同维度离子晶体构型下热流与温度分布的特性。此外, 还讨论了无序度对离子晶体热导性的影响。

关键词: 离子阱, 离子晶体, 热传导, 结构相变

PACS: 37.10.Ty, 05.60.-k, 05.70.Fh

DOI: [10.7498/aps.73.20231719](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231719)

1 引言

热传导是物理学中的一个基本现象, 它描述了当物质受到加热或冷却时, 热量在物质内部以及物质之间传递的机制。对热传导的研究有助于深入了解宏观现象和微观力学之间的联系。例如, 一维模型中的热传导作为一个典型的研究对象, 可以帮助我们理解热量传输过程中的非线性和混沌等复杂现象^[1]。对热传导的深入研究可以揭示热量传输的内在机理和数学模型, 为实际应用提供理论依据和指导。

在经典系统中, 热传导遵循傅里叶定律, 该定律阐述了热流密度与空间中温度场之间的相互关系。假设在三维空间中存在一个宏观系统, 在某一特定时刻 t , 系统空间的温度分布可用 $T(\mathbf{q}, t)$ 来描述。其中, 向量 $\mathbf{q}(x, y, z)$ 表示系统内的某个空间位

置, x , y 和 z 分别表示三维坐标轴上的坐标。根据傅里叶定律, 在此情况下, 热流密度 $\mathbf{J}(\mathbf{q}, t)$ 可以表示为^[2]

$$\mathbf{J}(\mathbf{q}, t) = -\kappa \nabla T(\mathbf{q}, t), \quad (1)$$

其中 κ 为系统的导热系数。为了理解温度场在时间维度上的变化规律, 这里定义系统在三维空间内的能量分布为 $u(\mathbf{q}, t)$ 。将方程 (1) 代入连续性方程 $\partial u / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ ^[3] 得

$$\frac{\partial T(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{\nabla[\kappa \nabla T(\mathbf{q}, t)]}{c}, \quad (2)$$

其中 $c = \partial u / \partial T$ 是系统的比热容。方程 (2) 也被称为热扩散方程, 它描述了宏观系统中能量转移的规律。傅里叶定律是从大量宏观系统实验中总结出的经验定律, 其基本假设是系统中的粒子在进行热量交换时主要依靠的输运过程是扩散。也就是说, 粒子通过与周围粒子的随机碰撞来进行能量的交换。从声子的角度来看, 这可以理解为数量多的声子向

* 国家自然科学基金(批准号: U21A20434)、广州市重点实验室(批准号: 202201000010)和广州市科技计划(批准号: 202201011727)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: liangchen@wipm.ac.cn

‡ 通信作者。E-mail: mangfeng@wipm.ac.cn

数量少的声子的方向扩散。然而，当系统的尺寸和维度减小到一定程度后，粒子之间的热交换过程可能不再符合扩散输运的规律。例如，热交换过程可能会变为弹道输运^[4]，此时粒子在进行能量交换时没有发生碰撞，并且可以忽略声子之间的相互作用。在这种情况下，热传导不再符合傅里叶定律。

为了深入了解低维系统中热传导的特性，科学家们针对两种简单模型进行了研究。其中一种模型是谐波晶体，另一种则是 FPU (Fermi-Pasta-Ulam) 晶体。在这两种模型中，假定晶体包含有限颗粒子，并且晶体两端与两个不同温度且温度恒定的热库相接触。这些粒子在空间中以固定点为中心进行简谐振动，同时它们仅仅与相邻的粒子进行相互作用。当两个粒子之间的相互作用势表示为 $U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l) = \frac{1}{2}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)^2 + \frac{\beta}{4}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)^4$ 时，其为 FPU 晶体，其中 β 为非谐参数； i, l 表示两个粒子的编号； $\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_l$ 表示粒子在空间上的位置。而当 $U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l) = \frac{1}{2}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)^2$ 时，称为谐波晶体。综述文献 [3,5] 详尽地介绍了相关研究，展示了当前的研究现状和未来的发展趋势。人们通常以系统的稳态热流 $J \sim N^a$ 作为评判热传导特性的重要标准。其中， N 代表模型中的粒子数，而 a 是一个常数。在傅里叶定律的适用范围内，系统的热流应满足 $a = -1$ ^[6,7]。对于这两种晶体，当系统处于三维状态时，其稳态热流遵循傅里叶定律。然而，当系统维度降低至二维或一维时，参数 a 不再等于 1，这表明热传导特性发生了变化。对于一维谐波晶体，当系统处于有序状态，即所有粒子的质量或粒子之间相互作用力等参数均相同时，其稳态热流与系统大小 N 无关，此时 $a = 0$ ^[4,8]。给系统中的粒子的质量引入无序因素后，例如系统中粒子质量并不全相等， a 的值可能为 $-3/2$ ^[9,10] 或者为 $-1/2$ ^[11,12]。针对 FPU 晶体，人们发现了一个有趣的特性：当 FPU 晶体的温度低于某个阈值时，其热传导特性会与谐波晶体极为相似^[13]。

离子晶体是由囚禁在离子阱中的多个离子组成的晶体，本综述主要探讨离子晶体中的热传导特性。这类晶体因其独特的性质而备受关注：在真空环境中，囚禁的离子晶体与外部环境没有能量交换，其晶体结构和温度可以通过电场和光场进行精确操控^[14–16]。这为研究低维晶体在经典或量子状态下的热传导提供了理想的实验平台。在离子晶体

中，离子之间的距离相对于其他晶体材料要大得多，这使得离子间的相互作用主要是库仑力。这种情况下，离子会与晶体中所有其他离子进行能量交换。通过调节系统的参数，可以使离子晶体呈现出不同维度的构型，例如直线构型（一维）、之字构型（二维）或螺旋构型（三维）^[17]，这些不同维度构型的离子晶体为研究热传导提供了丰富的模型。

本综述的结构安排如下：第 2 节详细阐述热传导研究中常用的一些基本原理和方法；第 3 节分别采用一维、二维和三维模型来计算离子晶体中的热传导，并展示离子晶体的结构相变与温度分布以及与热流的关系；第 4 节在三维离子晶体热传导模型中加入无序度的情况下，探讨离子晶体中热传导的特殊表现和规律；第 5 节介绍一些离子晶体中与热传导相关的实验，并总结目前在离子晶体中对热传导研究的主要成果。

2 离子晶体热传导模型

本文的研究对象是两端与不同温度的热库接触的离子晶体模型，期望获得该系统在稳态情况下的热流密度以及温度分布。离子晶体中的热传导研究通常借助朗之万方程来描述系统中每个离子的运动。此方程原用于描述布朗运动，其中摩擦力和随机噪声项在热传导情境中可对应于热库对离子的作用，可以证明，此系统的稳态是唯一的^[18]。通过对稳态下离子晶体的深入分析，可以得到热流密度、温度分布等关键信息。

该模型涉及两类离子，其中一类离子与热库接触，而另一类离子则不与热库接触。为了计算模型的稳态，有两种常用的方法可供选择：RLL (Rieder Lebowitz Lieb) 法和 LEGF (Langevin equations and Green's function) 法。RLL 法是由 Rieder, Lebowitz 和 Lieb 三人首次提出的^[4]，LEGF 法是由 Ford, Kac 和 Mazur 三人首次提出^[19]，并且在后续工作^[2,20–23] 中得到了发展。这两种方法的主要区别在于如何处理这两类离子。LEGF 法通过哈密顿量进行区分，将总哈密顿量分别按照这两类离子写出各自独立的哈密顿量。相对而言，RLL 法是在运动方程的层面对两者进行区分，即根据不同的离子采用不同的运动方程。

下面基于 RLL 方法介绍一些基本原理。首先定义模型中离子的数量为 N ，离子的质量为 m ，那

么离子晶体的哈密顿量可以写为

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N V(\mathbf{q}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l), \quad (3)$$

其中 \mathbf{p}_i 表示第 i 个离子的动量, $V(\mathbf{q}_i)$ 表示离子在阱势场中的势能, 而 $U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l)$ 则表示离子 i 与离子 l 之间的相互作用势能. 此时, 可以将离子受到的来自阱势场和其他离子的力表示为 $\mathbf{f}_i = -\partial H / \partial \mathbf{q}_i$. 假设第 1 个离子与高温热库 L 接触, 第 N 个离子与低温热库 R 相接触. 那么系统的运动方程为

$$\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} = \begin{cases} \mathbf{f}_i - \frac{\gamma_L \mathbf{p}_i}{m} + \boldsymbol{\eta}_L(t), & i = 1, \\ \mathbf{f}_i, & i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \mathbf{f}_i - \frac{\gamma_R \mathbf{p}_i}{m} + \boldsymbol{\eta}_R(t), & i = N, \end{cases} \quad (4)$$

其中, $\gamma_{L,R}$ 表示热库 L 或 R 对离子的摩擦系数, $\boldsymbol{\eta}_{L,R}(t)$ 表示热库 L 或 R 对离子的随机力. 接下来, 需要用离散形式定义热流, 首先定义由第 i 个离子流向第 l 个离子的瞬态的热流密度为 $j_{i \rightarrow l}$, 其内涵是第 i 个离子向第 l 个离子做功的功率, 即:

$$j_{i \rightarrow l} = \frac{\partial U(\mathbf{q}_l - \mathbf{q}_i)}{\partial \mathbf{q}_i} \frac{\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_l}{2m}. \quad (5)$$

定义热库 L, R 对第 1, N 个离子的作用力为 $\mathbf{f}_L, \mathbf{f}_R$, 那么热库流向离子的热流可以表示为

$$j_L = \mathbf{f}_L \frac{\mathbf{p}_1}{m}, \quad j_R = \mathbf{f}_R \frac{\mathbf{p}_N}{m},$$

为了利用连续性方程, 定义第 i 个离子上的能量密度为 [3,24]

$$\varepsilon(\mathbf{q}_i) = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l), \quad (6)$$

于是, 连续性方程的离散形式可以表示为 [3,24]

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q}_i)}{\partial t} = \begin{cases} \sum_{l \neq i}^N j_{i \rightarrow l} + j_L, & i = 1, \\ \sum_{l \neq i}^N j_{i \rightarrow l}, & i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \sum_{l \neq i}^N j_{i \rightarrow l} + j_R, & i = N. \end{cases} \quad (7)$$

当处于稳态的时候离子晶体的热流不再变化, 即 $\partial \varepsilon(\mathbf{q}_i) / \partial t = 0$, 使用 $\langle \cdots \rangle$ 表示物理量的平均值, 可得

$$\begin{cases} \sum_{l \neq i}^N \langle j_{i \rightarrow l} \rangle + \langle j_L \rangle = 0, & i = 1, \\ \sum_{l \neq i}^N \langle j_{i \rightarrow l} \rangle = 0, & i = 2, 3, \dots, N-1, \\ \sum_{l \neq i}^N \langle j_{i \rightarrow l} \rangle + \langle j_R \rangle = 0, & i = N. \end{cases} \quad (8)$$

此时的总热流就是离子晶体与热库之间的热流, 使用 $\langle \mathbf{J} \rangle$ 代表系统稳态下的总热流, 可得

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \langle j_L \rangle = -\langle j_R \rangle = \sum_{l \neq 1}^N \langle j_{1 \rightarrow l} \rangle = -\sum_{l \neq N}^N \langle j_{N \rightarrow l} \rangle. \quad (9)$$

根据温度与能量的关系 $E = \frac{3}{2} k_B T$, 稳态下离子晶体的温度分布的离散形式可以表示为

$$T_i = \frac{1}{2mk_B} \langle \mathbf{p}_i^2 \rangle. \quad (10)$$

3 离子晶体中的热传导

离子阱系统中, 产生与离子晶体接触的热库有两种方式. 离子晶体被离子阱势场囚禁在真空中, 其与外界交换能量的方式通常有两种: 离子阱势场的作用和激光的作用. 在与离子阱势场的作用中, 通过调整阱势场的频率、幅度以及离子在势场中的位置, 可以对离子晶体产生不同程度的加热作用. 在与激光的相互作用中, 通过调整激光的功率和频率, 可以对离子晶体产生不同程度的加热和冷却效果. 因此, 在实验中可以通过这两种方式在离子晶体的两边产生不同温度的热库: 1) 改变离子晶体两端最边缘的若干个离子所处的囚禁势场, 这样会使这两类离子受到来自阱的不同的加热作用, 此时的囚禁势场相当于两个不同温度的热库; 2) 让两端最边缘的若干个离子分别受到两束不同参数的激光照射, 此时激光就能被视作一个等效的热库. 因为使用激光产生热库的方案更容易实现, 在接下来的章节中, 讨论的模型都以激光作为热库. 本节将详细介绍并探讨文献 [25–28] 针对不同维度模型中的离子晶体热流的研究成果.

3.1 一维模型

考虑一维模型, N 个离子沿 x 轴线性排列, 由于离子阱势场的限制, 每个离子均以固定位置为

中心做简谐振动, 用 ω_x 表示离子的宏运动频率. 设 x_i^0 表示第 i 个离子简谐振动的中心坐标, 而 \mathbf{x}_i 和 \mathbf{p}_i 表示其相对于运动中心 x_i^0 的相对位移和动量. 根据海森伯-郎之万方程 (Heisenberg-Langevin equation)^[29,30], 系统的运动方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{x}_i}{\partial t} = \mathbf{p}_i, \\ \frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial t} = -\sum_{l=1}^N \mathbf{A}_{il} \mathbf{x}_l - \rho_i \mathbf{p}_i + \sqrt{2\rho_i} \zeta_i(t), \end{cases} \quad (11)$$

其中 ρ_i 表示热库对离子的摩擦系数, $\zeta_i(t)$ 表示热库对离子的随机力. \mathbf{A}_{il} 表示离子之间相互作用力的耦合矩阵, 其表达式为^[25]

$$A_{ii} = \omega_x^2 - \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{|x_l^0 - x_i^0|^3}, \quad A_{il} = \frac{1}{|x_l^0 - x_i^0|^3}, \quad l \neq i.$$

假设离子晶体两端的热库为 Markovian 型热库, 那么 $\zeta_i(t)$ 满足以下条件 ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} \zeta_i(t) &= -i\sqrt{\frac{\omega_x}{2}}(b_i(t) - b_i^\dagger(t)), \\ \langle b_i^\dagger(t_1)b_l(t_2) \rangle &= T_i^B \delta_{il} \delta(t_1 - t_2), \end{aligned} \quad (12)$$

其中 δ 表示德尔塔函数, 并且假设所有离子的振动频率都为 ω_x ; T_i^B 表示热库的平均声子数; b_i 表示玻色场算子. 将 $\langle b_i^\dagger(t_1)b_l^\dagger(t_2) \rangle = 0$ 和 $\langle b_i(t_1)b_l(t_2) \rangle = 0$ 代入 (12) 式, 可得^[25]

$$\langle \zeta_i(t_1)\zeta_l(t_2) \rangle = \omega_x \left(T_i^B + \frac{1}{2} \right) \delta_{il} \delta(t_1 - t_2). \quad (13)$$

通过对角化, 方程 (11) 的解具有以下矩阵形式:

$$\mathbf{q}(t) = e^{-\Omega t} \mathbf{q}(0) + \int_0^t d\tau e^{\Omega(\tau-t)} \boldsymbol{\eta}(\tau), \quad (14)$$

其中,

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(t) &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1(t) \\ \mathbf{x}_2(t) \\ \vdots \\ \mathbf{x}_N(t) \\ \mathbf{p}_1(t) \\ \mathbf{p}_2(t) \\ \vdots \\ \mathbf{p}_N(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \{\mathbf{x}_i(t)\} \\ \{\mathbf{p}_i(t)\} \end{bmatrix}, \\ \boldsymbol{\eta}(t) &= \begin{bmatrix} \{0\} \\ \{\sqrt{2\rho_i}\zeta_i(t)\} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

$$\Omega = \begin{bmatrix} \{0\} & -\mathbf{I} \\ \{A_{il}\} & \{\rho_i \delta_{il}\} \end{bmatrix},$$

$\mathbf{x}_i(t)$ 和 $\mathbf{p}_i(t)$ 为第 i 个离子在 t 时刻的位移和动量, \mathbf{I} 为单位矩阵, Ω 为一个大小为 $2N \times 2N$ 的矩阵.

在时刻 t , 第 i 个离子的温度可以表示为 $T_i(t) = \frac{1}{2}(\omega_x \langle \mathbf{x}_i^2(t) \rangle + \langle \mathbf{p}_i^2(t) \rangle) / \omega_x - 1$, 当时间 $t \rightarrow \infty$ 时, 可以得到离子的稳态温度 $T_i^s = T_i(t \rightarrow \infty)$.

在文献 [25] 中, 采用了上述方法对包含 100 个离子的模型在不同 ρ 的取值下的温度分布进行了计算. 当两个热库位于离子晶体边缘时, 离子晶体中的温度分布如图 1 所示. 显然, 图中的温度分布不符合傅里叶定律. 对于符合傅里叶定律的系统, 其温度分布应该呈现从高温点逐渐下降到低温点的线性分布, 然而在图 1 的分布中, 与热库接触的离子和未与热库接触的离子间的温度存在显著的跃变现象, 且所有未与热库接触的离子的温度分布几乎完全一致. 这种温度分布的出现, 可以归因于热库将热量传递到离子晶体的速率远低于离子晶体内部热传导的速度.

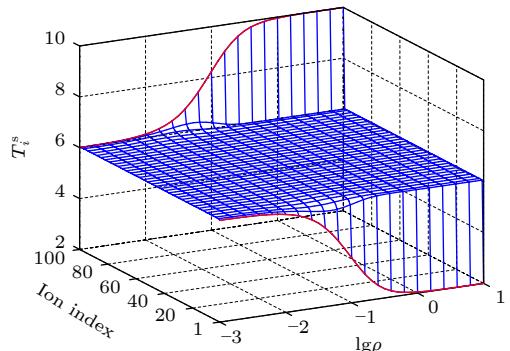


图 1 ρ 值不同时, 由 100 个离子组成的离子晶体在稳态下的温度分布^[25], 其中离子的温度 T_i^s 由平均声子数来表示. 第 1 个离子和第 100 个离子与热库相接触, 由图中的红线表示, 其他的离子由蓝线表示

Fig. 1. Temperature distribution of an ion crystal composed of 100 ions under different ρ in stable state, where temperature distribution T_i^s measured by the mean thermal phonon number. The 1st and the 100th ions are in contact with the thermal bath, indicated by the red line in the figure, while other ions are indicated by the blue line. The figure is taken from Ref. [25].

在另一种情况下, 如图 2 所示, 将高温热库移到离子阱晶体的中央, 此时的温度分布将会分为两部分. 位于两个热库之间的部分将维持在一个相对较低的温度, 而位于高温热库另一侧的部分则展现出较高的温度. 值得注意的是, 这两个温度之间的

差距会随着热导率的降低而逐渐减小并最终趋于一致。从上述计算结果可以看出，相较于符合傅里叶分布的宏观系统，一维离子晶体的温度稳态分布具有多种不同寻常的模式。

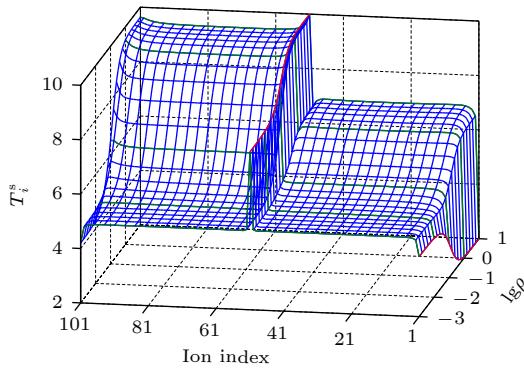


图 2 由 101 个离子组成的离子晶体在稳态下的温度分布^[25], 其中离子的温度 T_i^s 由平均声子数来表示. 第 1 个离子和第 51 个离子与热库相接触. 与热库相接触的离子由图中的红线表示, 其他的离子由蓝线表示

Fig. 2. Temperature distribution of an ion crystal composed of 101 ions under different ρ in stable state, where temperature distribution T_i^s measured by the mean thermal phonon number. The first ion and the 51st ion are in contact with the thermal bath. Ions in contact with the thermal bath are indicated by the red line in the figure, while other ions are indicated by the blue line. The figure is taken from Ref. [25].

3.2 二维模型

接下来, 我们将探讨更为复杂的二维模型. 在二维模型中, 离子晶体能够发生结构相变, 从一维的直线构型转变为二维的之字构型. 将模型的两个维度分别定义为 x 轴和 y 轴, 离子在这两个轴向上的宏运动频率分别为 ω_x 和 ω_y . 定义该模型中的离子数量为 N , 离子的质量为 m , 所带电荷为 Q . 另外定义 \mathbf{q}_i 和 \mathbf{p}_i 为离子相对坐标零点的位移和动量, $q_{x,i}$, $q_{y,i}$ 和 $p_{x,i}$, $p_{y,i}$ 分别为它们在两个坐标轴上的投影. 于是系统的哈密顿量可以写为^[26]

$$H = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N (p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2) + \mathcal{V}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = & \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N (\omega_x^2 q_{x,i}^2 + \omega_y^2 q_{y,i}^2) \\ & + \frac{Q^2}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|}. \end{aligned} \quad (16)$$

可以看出, 该模型中的离子振动中心位置并不固定, 因此当选取不同的离子阱参数时, 离子晶体

将呈现出不同的构型. 在二维模型中, 离子的运动方程可以写为^[26]

$$\begin{cases} \frac{dq_{\mu,i}}{dt} = \frac{p_{\mu,i}}{m}, \\ \frac{dp_{\mu,i}}{dt} = -\left(\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_{\mu,i}} + \frac{\eta_{\mu,i}}{m} p_{\mu,i}\right) + \sqrt{2D_{\mu,i}} \frac{dW_{\mu,i}}{dt}, \end{cases} \quad (17)$$

其中 μ 表示 x 或 y ; $\eta_{\mu,i}$ 和 $D_{\mu,i}$ 表示来自热库的摩擦系数和扩散系数; $W_{\mu,i}$ 与热库对离子的随机力 $\varepsilon_{\mu,i}(t)$ 有关, 并且随机力满足条件 $\langle \varepsilon_{\mu,i}(t) \rangle = 0$ 和 $\langle \varepsilon_{\mu,i}(t) \varepsilon_{\mu,i}(t') \rangle = 2D_{\mu,i}\delta(t - t')$. 热库是由激光对离子的作用产生的, 在弱光强的条件下可得^[26]

$$\begin{cases} \eta_{\mu,i} = -4\hbar k_{\mu,i}^2 I_{\mu,i} \frac{(2\Delta_{\mu,i}/\Gamma)}{(1 + 4\Delta_{\mu,i}^2/\Gamma^2)^2}, \\ D_{\mu,i} = \hbar^2 k_{\mu,i}^2 I_{\mu,i} \frac{\Gamma}{(1 + 4\Delta_{\mu,i}^2/\Gamma^2)}, \end{cases} \quad (18)$$

式中 $I_{\mu,i}$ 是个无量纲的量, 它表示作用在第 i 个离子上的相对光强; $k_{\mu,i}$ 表示激光的波数; $\Delta_{\mu,i} = \omega_{\mu,i}^{\text{laser}} - \omega_0^{\text{laser}}$ 表示激光的失谐, 其中激光的频率为 $\omega_{\mu,i}^{\text{laser}}$, 激光对应离子的两个能级 (基态和激发态) 之间的跃迁频率为 ω_0^{laser} ; Γ 为这两个能级中的激发态的自然线宽.

假设激光只与 x 轴上投影坐标最大和最小的几个离子相互作用, 分别产生两个不同温度的热库, 而其他离子则不与激光发生相互作用. 用 $U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)$ 代表离子之间的相互作用势, $V(\mathbf{q}_i)$ 代表离子阱的势场, 离子的能量密度可以表示为^[3,24]

$$\varepsilon_i = \frac{1}{2m} (p_{x,i}^2 + p_{y,i}^2) + V(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|), \quad (19)$$

$$V(\mathbf{q}_i) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 q_{x,i}^2 + \omega_y^2 q_{y,i}^2), \quad (20)$$

$$U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|) = \frac{Q^2}{8\pi\varepsilon_0 (|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)}. \quad (21)$$

定义从第 i 个离子流向第 l 个离子的热流密度为

$$j_{i \rightarrow l} = \frac{1}{2m} \sum_{\mu=\{x,y\}} \frac{\partial U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)}{\partial q_{\mu,i}} (p_{\mu,i} + p_{\mu,l}). \quad (22)$$

激光与第 i 个离子作用, 使这个离子与热库产生了接触, 热库流向第 i 个离子的热流密度为

$$j_{B \rightarrow i} = \sum_{\mu=\{x,y\}} \frac{p_{\mu,i}}{m} \left(-\frac{\eta_{\mu,i}}{m} p_{\mu,i} + \varepsilon_{\mu,i} \right). \quad (23)$$

定义热流的方向是由编号较小的离子流向编号较

大的离子。对于单个离子来说，其自身的能量变化等于流向离子的能量密度减去流出离子的能量密度。因此，第 i 个离子的连续性方程的离散形式可以写成：

$$\frac{d\varepsilon_i}{dt} = \sum_{l < i}^N j_{l \rightarrow i} - \sum_{l > i}^N j_{i \rightarrow l} + j_{B \rightarrow i}. \quad (24)$$

在稳态情况下，流入离子的能量与流出离子的能量相等，因此由 (24) 式，稳态下的连续性方程可以改写成：

$$\sum_{l < i}^N \langle j_{l \rightarrow i} \rangle + \langle j_{B \rightarrow i} \rangle = \sum_{l > i}^N \langle j_{i \rightarrow l} \rangle, \quad (25)$$

式中的 $\langle j_{B \rightarrow i} \rangle$ 可以由 Novikov 定律 [31] 得到

$$\langle j_{B \rightarrow i} \rangle = \frac{1}{m^2} \sum_{\mu=\{x,y\}} (-\eta_{\mu,i} \langle p_{\mu,i}^2 \rangle + m D_{\mu,i}). \quad (26)$$

为了得到通过离子晶体的总热流 $\mathbf{J}(t)$ ，需要把单个离子的连续性方程扩展成整个离子晶体的连续性方程 [3,24]：

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N j_{B \rightarrow i}(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i), \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{q}, t) &= \sum_{i=1}^N \varepsilon_i(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i), \\ \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) &= \sum_{i=1}^N \mathbf{j}_i(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i), \end{aligned} \quad (28)$$

其中 $\varepsilon(\mathbf{q}, t)$ 代表离子晶体的能量密度； $\mathbf{j}(\mathbf{q}, t)$ 代表离子晶体的热流密度； $\mathbf{j}_i(t)$ 代表经过第 i 个离子的热流密度，其表达式可以通过傅里叶分析得到 [26]

$$\mathbf{j}_i(t) = \mathbf{q}_i \left(\frac{d\varepsilon_i}{dt} - j_{B \rightarrow i} \right) + \varepsilon_i \frac{d\mathbf{q}_i}{dt}. \quad (29)$$

将热流密度 $\mathbf{j}(\mathbf{q}, t)$ 在整个离子晶体范围内进行积分，得到通过离子晶体的总热流 $\mathbf{J}(t)$ ：

$$\mathbf{J}(t) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \mathbf{p}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{l=1}^i (\mathbf{q}_{i+1} - \mathbf{q}_l) j_{l \rightarrow i+1}. \quad (30)$$

利用 Novikov 定理写出稳态下离子晶体总热流的表达式 [31]：

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle &= - \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{q}_i j_{B \rightarrow i} \rangle \\ &= \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^N \sum_{\mu=\{x,y\}} (\eta_{\mu,i} \langle p_{\mu,i}^2 \rangle - m D_{\mu,i} \langle \mathbf{q}_i \rangle). \end{aligned} \quad (31)$$

稳态时离子晶体中的温度分布可以表示为

$$T_i = \frac{1}{2mk_B} \sum_{\mu=\{x,y\}} \langle p_{\mu,i}^2 \rangle. \quad (32)$$

文献 [26] 采用数值模拟方法计算了包含 $N = 30$ 个离子的离子晶体在不同构型下的稳态热流和温度分布，其中编号为 $i = 1, 2, 3$ 和 $i = N - 2, N - 1, N$ 的离子分别受到相同功率不同失谐量的两束激光照射，而其他离子不与激光相互作用。离子晶体的结构相变过程用序参量 α 来表示，其定义见文献 [26]。在文献 [26] 采用的数值模拟条件下， $\alpha = 13$ 时，离子晶体为直线构型，随着 α 逐渐减小，离子晶体相变之字构型。在离子晶体为直线构型时，离子沿着 x 轴排列。在直线构型到之字构型的结构相变过程中，离子晶体的温度分布如图 3 所示，其中温度分布梯度逐渐增大。在直线构型中，离子晶体温度分布规律与一维模型计算结果一致，数值模拟结果显示离子晶体中间部分的温度为两个热库的平均值。在之字构型中，离子晶体内部温度分布更接近符合傅里叶定律的宏观系统。

在二维模型中，离子的振动模式从一维 (x 方向) 拓展到了二维 (x 和 y 方向)。这两个方向的宏观运动频率越接近，离子晶体的构型就越接近之字构型，反之，则更接近直线构型。图 4 给出了离子晶体在两种构型之间的相变过程中热流的变化趋势。随着 α 值的不断增大，离子晶体从之字构型相变到直线构型。在这个过程中，热流逐渐增加。当 $\alpha = 13$ 时，离子晶体完成了从之字构型到直线构型的完全转变，热流达到最大值。然而，随着 α 值的继续增大，热流量开始逐渐下降，但是下降速度较为缓慢。这种现象出现的原因在于离子晶体从之字构型向直线构型相变的过程中，离子之间的距离减小，导致离子之间的相互作用力增强，这使得离子晶体中的热流增大。另外，在相变点附近，离子热运动产生的噪声增大，这种噪声能够减小离子晶体中的非平衡性影响 [32]，也使得热流增强。

3.3 三维模型

在三维模型中，将研究对象扩展到螺旋构型，为此，需要首先计算出在三维情况下离子晶体内的稳态热流和温度分布的表达式。定义离子晶体中一共有 N 个离子，且质量都为 m ，则系统的哈密顿量可以写为

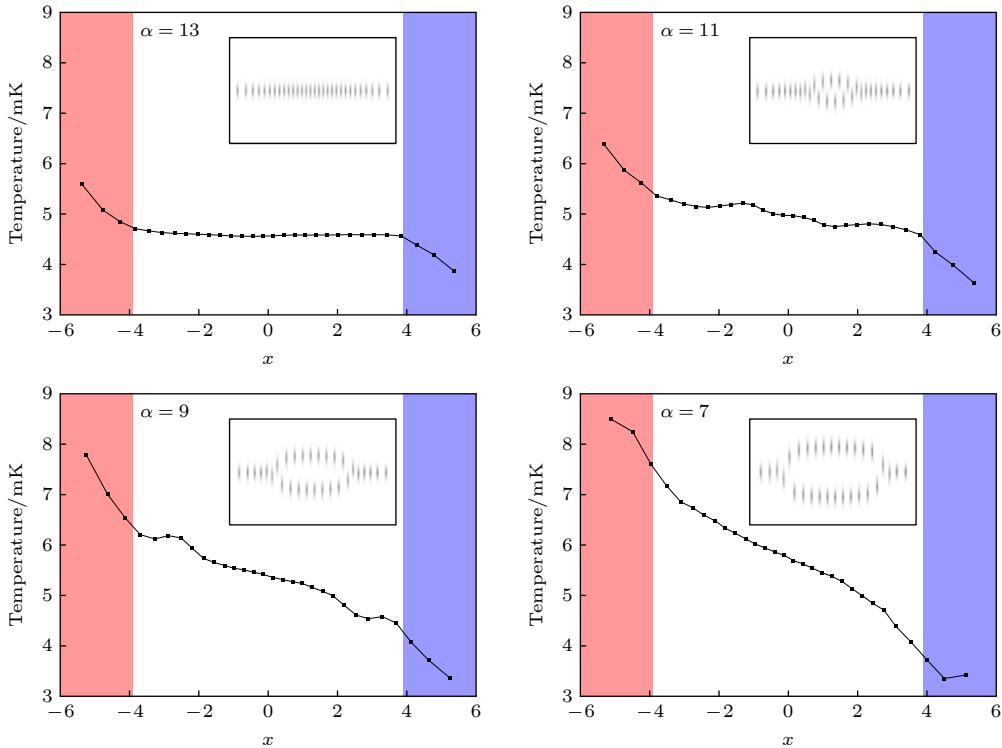


图 3 处于不同构型下的离子晶体在 x 方向上的温度分布 [26], 其中 α 表示结构相变的序参量. 两个颜色不同的区域中的离子和不同参数的激光相互作用. 插图表示离子晶体的构型

Fig. 3. Temperature distribution of ion crystals vs. the distance x in different configurations, where α represents the order parameter of structural phase transition, and the two regions with different colors represent ions interacting with the laser. The figure is taken from Ref. [26].

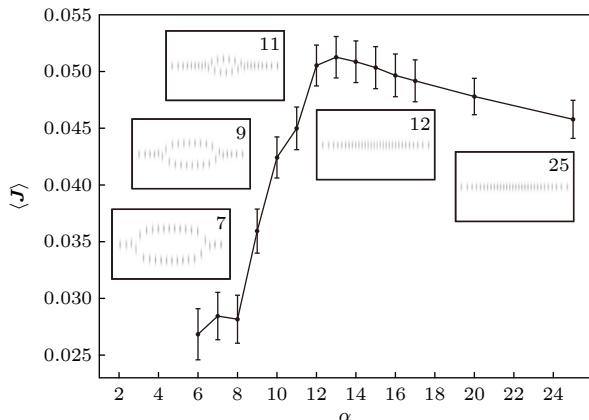


图 4 处于不同构型下的离子晶体的稳态热流 [26], 其中 α 表示结构相变的序参量. 插图表示离子晶体的构型

Fig. 4. Heat flux of ion crystals in different configurations, where α represents the order parameter of structural phase transition. The insets show the configurations of ion crystals. The figure is taken from Ref. [26].

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|) + V(\mathbf{q}_i) \right], \quad (33)$$

其中 $\mathbf{q} = (q_{x,i}, q_{y,i}, q_{z,i})$ 是三维空间中的坐标, $\mathbf{p} = (p_{x,i}, p_{y,i}, p_{z,i})$ 是三维空间中的动量. 定义 $\mu = (x,$

$y, z)$ 代表坐标轴上的 3 个方向. 两束激光分别与离子晶体两端的离子相互作用, 使离子晶体与两个温度不同的热库 L 和 R 相接触. 定义离子晶体中的第 1 个到第 N_L 个离子与热库 L 相接触, 第 N_R 个到第 N 个离子与热库 R 相接触, 其他的离子不与热库接触. 此时, 离子的运动方程可以写为

$$\begin{cases} \frac{dq_{\mu,i}}{dt} = \frac{dp_{\mu,i}}{m}, & i = 1, \dots, N, \\ \frac{dp_{\mu,i}}{dt} = A_L + \sqrt{2D_{\mu,i}^L} \frac{dW_{\mu,i}^L}{dt}, & i = 1, \dots, N_L, \\ \frac{dp_{\mu,i}}{dt} = g_{\mu,i} + \sum_{l \neq i}^N f_{\mu,i}^{il}, & i = N_L + 1, \dots, N_R - 1, \\ \frac{dp_{\mu,i}}{dt} = A_R + \sqrt{2D_{\mu,i}^R} \frac{dW_{\mu,i}^R}{dt}, & i = N_R, \dots, N, \end{cases} \quad (34)$$

$$A_L = g_{\mu,i} + \sum_{l \neq i}^N f_{\mu,i}^{il} - \frac{\eta_{\mu,i}^L}{m} p_{\mu,i}, \quad (35)$$

$$A_R = g_{\mu,i} + \sum_{l \neq i}^N f_{\mu,i}^{il} - \frac{\eta_{\mu,i}^R}{m} p_{\mu,i}, \quad (36)$$

其中, $g_{\mu,i} = -\partial V(\mathbf{q}_i)/\partial q_{\mu,i}$ 表示离子受到 μ 方向的囚禁势场力, $f_{\mu}^{il} = -f_{\mu}^{li} = -\partial U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|)/\partial q_{\mu,i}$ 表示第 l 个离子施加在第 i 个离子上的力在 μ 方向上的投影, $\eta_{\mu,i}^{\text{L,R}}$ 表示热库 L, R 的摩擦系数, $D_{\mu,i}^{\text{L,R}}$ 表示热库的扩散系数. 假设热库的随机力 $\varepsilon_{\mu,i}^{\text{L,R}}$ 满足高斯噪声, 即 $\langle \varepsilon_{\mu,i}^{\text{L,R}}(t) \rangle = 0$, 那么 $D_{\mu,i}^{\text{L,R}}$ 与 $\varepsilon_{\mu,i}^{\text{L,R}}$ 的关系可以写为

$$\langle \varepsilon_{\mu,i}^{\text{L,R}}(t) \varepsilon_{\beta,l}^{\text{L,R}}(t') \rangle = 2D_{\mu,i}^{\text{L,R}} \delta_{\mu,\beta} \delta_{i,l} \delta(t - t'). \quad (37)$$

利用涨落耗散定理^[33], $D_{\mu,i}^{\text{L,R}}$ 与 $\eta_{\mu,i}^{\text{L,R}}$ 的关系可以写为

$$\eta_{\mu,i}^{\text{L,R}} = \frac{1}{2k_B T^{\text{L,R}}} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \varepsilon_{\mu,i}^{\text{L,R}}(t) \varepsilon_{\mu,i}^{\text{L,R}}(t + \tau) \rangle d\tau = \frac{D_{\mu,i}^{\text{L,R}}}{k_B T^{\text{L,R}}}. \quad (38)$$

接下来计算系统的稳态热流, 首先定义系统的能量密度为

$$\varepsilon(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i), \quad (39)$$

$$\varepsilon_i = \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{q}_i) + \frac{1}{2} \sum_{l \neq i}^N U(|\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_l|). \quad (40)$$

根据 (34) 式和 (39) 式, 可以推出系统的热流密度 $j(\mathbf{q}, t)$ 和热库流向离子的热流密度 $j_{B \rightarrow i}$ 分别为^[28]

$$\begin{aligned} j(\mathbf{q}, t) &= \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m} \varepsilon_i \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{m} (\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_l) \mathbf{f}^{il} \\ &\times \int_0^1 d\lambda \frac{d\mathbf{G}(\lambda)}{d\lambda} \delta[\mathbf{q} - \mathbf{G}(\lambda)], \end{aligned} \quad (41)$$

$$j_{B \rightarrow i} = \begin{cases} \sum_{\mu} \frac{p_{\mu,i}}{m} \left(-\frac{\eta_{\mu,i}^{\text{L}}}{m} p_{\mu,i} + \varepsilon_{\mu,i}^{\text{L}}(t) \right), & i = 1, \dots, N_{\text{L}}, \\ 0, & i = N_{\text{L}} + 1, \dots, N_{\text{R}} - 1, \\ \sum_{\mu} \frac{p_{\mu,i}}{m} \left(-\frac{\eta_{\mu,i}^{\text{R}}}{m} p_{\mu,i} + \varepsilon_{\mu,i}^{\text{R}}(t) \right), & i = N_{\text{R}}, \dots, N, \end{cases} \quad (42)$$

其中 $\mathbf{G}(\lambda)$ 为满足以下条件的任意函数^[34]:

$$\delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_l) - \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i) = \nabla \int_0^1 \frac{d\mathbf{G}(\lambda)}{d\lambda} \delta[\mathbf{q} - \mathbf{G}(\lambda)] d\lambda,$$

$$\mathbf{G}(1) = \mathbf{q}_i, \quad \mathbf{G}(0) = \mathbf{q}_l.$$

利用 (39) 式、(41) 式和 (42) 式, 可以写出连续性方程:

$$\frac{\partial \varepsilon(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \nabla j(\mathbf{q}, t) = \sum_{i=1}^N j_{B \rightarrow i}(t) \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}_i). \quad (43)$$

通过对 $j(\mathbf{q}, t)$ 积分, 可得系统的热流:

$$\mathbf{J}(t) = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i}{m} \varepsilon_i + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{l \neq i}^N \frac{1}{m} (\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_l) \mathbf{f}^{il}(\mathbf{q}_i + \mathbf{q}_l). \quad (44)$$

在稳态下, 系统的平均热流与热库流向系统的热流相等, 于是稳态热流可以写为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle &= - \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{q}_i j_{B \rightarrow i} \rangle = \frac{1}{m^2} \sum_k \sum_{\mu} \eta_{\mu,k}^{B_k} \langle \mathbf{q}_k p_{\mu,k}^2 \rangle \\ &- \frac{1}{m} \sum_k \sum_{\mu} \langle \mathbf{q} p_{\mu,k} \varepsilon_{\mu,k}^{B_k}(t) \rangle, \end{aligned} \quad (45)$$

其中 k 代表所有与热库接触的离子的编号, B_k 代

表与编号为 k 的离子接触的热库. 考虑 Novikov 定律^[31], 利用 (34) 式和 (37) 式, 稳态热流的表达式可化为

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \frac{1}{m^2} \sum_k \sum_{\mu} \left[\eta_{\mu,k}^{B_k} \langle \mathbf{q}_k p_{\mu,k}^2 \rangle - m D_{\mu,k}^{B_k} \langle \mathbf{q}_k \rangle \right]. \quad (46)$$

文献 [28] 用上述方法计算了不同构型下离子晶体的热流. 在三维模型中, 由于运动模式增加了一维, 离子晶体的构型需要用另一种方式表达. 假设离子晶体处于直线构型时沿着 x 方向, 用 $\omega_{x,y,z}$ 表示离子在 3 个方向的宏运动频率, 并定义 $\omega_y = n_y \omega_x$, $\omega_z = n_z \omega_x$, 那么可以用 (n_y, n_z) 表示离子的构型. 图 5 显示了在文献 [28] 的计算参数下, n_y 和 n_z 取值不同时离子晶体结构相变的相图.

离子晶体在不同构型下的温度分布如图 6(a) 所示, 其中直线构型和之字构型的温度分布规律与二维模型的计算结果相似. 螺旋构型的温度分布相比之字构型更接近宏观状态下符合傅里叶定律的温度分布. 从图 6(b) 可以看出, 螺旋构型的离子晶体中温度梯度基本保持不变, 而不像之字构型中的温度梯度不断变化.

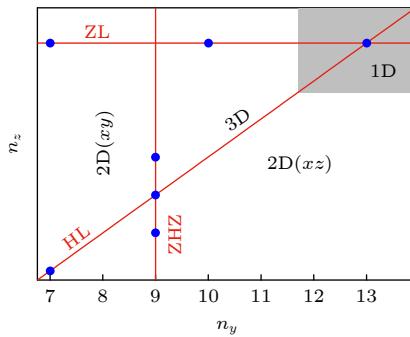


图 5 在不同 n_y 和 n_z 的取值下, 离子晶体结构相变的相图 [28]. 用 L (linear), Z (zigzag) 和 H (helical) 这三个字母代表离子晶体的直线构型、之字构型和螺旋构型. 沿 HL 线, (n_y, n_z) 值的变化会产生直线构型和螺旋构型之间的结构相变. 沿 ZL 线, (n_y, n_z) 值的变化会产生直线构型与之字构型之间的结构相变. 沿 ZHZ 线, (n_y, n_z) 值的变化会产生从之字构型到螺旋构型再到之字构型的结构相变. 图中的灰色区域代表直线构型. 在灰色区域之外, HL 线之上的区域代表处于 $x-y$ 平面上的之字构型, 在 HL 线之下的区域代表处于 $x-z$ 平面上的之字构型, HL 线上为螺旋构型

Fig. 5. Phase diagram of ion crystal structural phase transitions under different values of n_y and n_z . L (linear), Z (zigzag), and H (helical) represent the linear, zigzag, and helical configurations of ion crystal. ZL line, HL line and ZHZ line represent the zigzag-linear transition, helical-linear transition and zigzag-helical-zigzag transition. The gray region in the figure represents the linear configuration. Outside of the gray region, the region above the HL line represents the zigzag configuration lying in the $x-y$ plane, while the region below the HL line represents the zigzag configuration lying in the $x-z$ plane. The region on the HL line represents the helical configuration. The figure is taken from Ref. [28].

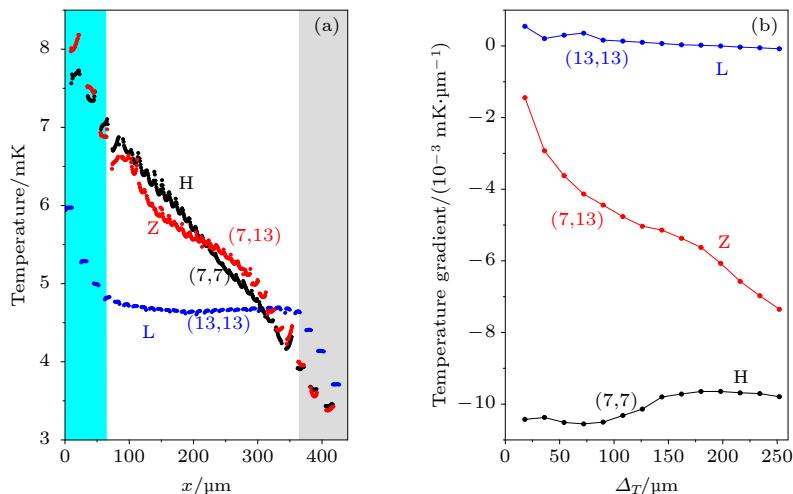


图 6 在离子数 $N = 30$ 的离子晶体中, 不同构型的离子晶体的稳态温度分布 [28], 图中 L 代表直线构型、Z 代表之字构型、H 代表螺旋构型, 图中的参数为 (n_y, n_z) (a) 3 种不同构型的离子晶体在稳态下的温度分布, 两个颜色不同的区域中的离子和不同参数的激光相互作用; (b) 在稳态下, 3 种不同构型的离子晶体不与激光接触的部分的温度梯度分布, 其中 Δ_T 代表与系统中心的距离

Fig. 6. Temperature distribution of ion crystals with 30 ions with different configurations in stable state, where L represents linear configuration, Z represents zigzag configuration, and H represents helical configuration. The labels indicate the values of (n_y, n_z) : (a) Temperature distribution of three different configurations of ion crystals in stable state, where two different colors represent ions interacting with the laser; (b) distribution of temperature gradients in the parts of ion crystals with three different configurations that are not in contact with the laser in stable state, where Δ_T represents the distance from the center of the system. The figure is taken from Ref. [28].

在保持 $n_y = n_z$ 的前提下, 离子晶体可以直接从直线构型相变到螺旋构型, 而这两个构型之间的相变过程中的温度分布和热流与直线构型和之字构型之间的相变相似. 图 7 给出了当 (n_y, n_z) 的值沿着图 5 中的 ZHZ 线变化时离子晶体的温度分布和热流的变化情况. 从图 7 可以看出, 离子晶体无

论是处于 $x-z$ 平面的之字构型还是处于 $x-y$ 平面的之字构型, 其热流均小于处于螺旋构型时的热流. 此外, 还发现 n_y 和 n_z 的差值越大, 热流越小. 这是由于 y 和 z 两个维度之间的不平衡导致的非线性效应阻碍了热流的传导 [28].

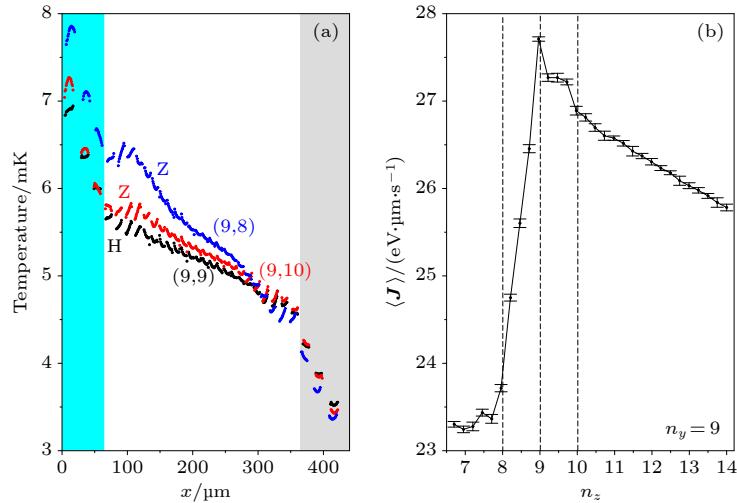


图 7 在离子数 \$N = 30\$ 的离子晶体中, 离子晶体从处于 \$x\$-\$z\$ 平面的之字构型相变到螺旋构型再相变到处于 \$x\$-\$y\$ 平面的之字构型的过程中的温度分布和热流变化^[28] (a) 离子晶体在结构相变过程中的 3 种典型的温度分布, 两个颜色不同的区域中的离子和不同参数的激光相互作用, 图中 Z 代表之字构型, H 代表螺旋构型, 图中的参数为 \$(n_y, n_z)\$; (b) 在 \$n_y\$ 保存不变时, \$n_z\$ 不断增大的过程中的热流变化

Fig. 7. Temperature distribution and heat flux changes in an ion crystal with 30 ions during the process of zigzag-helical-zigzag transition where Z represents zigzag configuration and H represents helical configuration: (a) Three typical temperature distributions of the ion crystal during the structural phase transition process, where two different colors represent ions interacting with the laser; the labels indicate the values of \$(n_y, n_z)\$; (b) changes in heat flux during the process of increasing \$n_z\$ while keeping \$n_y\$ constant. The figure is taken from Ref. [28].

4 热流与无序度之间的关系

在研究谐波晶体的热流中, 无序度是一个重要的因素, 通常无序度的变化会导致热流的变化. 本节将讨论一种能够解析计算离子晶体稳态热流的方法, 并使用该方法在离子晶体中引入无序度. 同时, 分析无序度对离子晶体中热流的影响.

首先, 需要写出系统的哈密顿量 \$H\$, 其表达式为 \$H = H_S + H_E + H_{\text{int}}\$, 由 3 个部分组成. 其中, 结构哈密顿量 \$H_S\$ 和环境哈密顿量 \$H_E\$ 分别表示不与热库接触和与热库接触的两类离子的哈密顿量, 相互作用哈密顿量 \$H_{\text{int}}\$ 表示前面这两类离子之间相互作用的哈密顿量^[27,35]. 定义系统中有 \$N\$ 个不与热库接触的离子, \$\mathbf{X} = (q_1, \dots, q_{3N})^T\$ 表示这些离子在 \$x, y, z\$ 这 3 个方向上的坐标, 其中 T 表示矩阵转置. \$\mathbf{P} = (p_1, \dots, p_{3N})^T\$ 表示离子在 3 个方向的动量, 用 \$\mathbf{V}\$ 表示离子之间的耦合矩阵. 于是系统的结构哈密顿量可以写为

$$H_S = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^T \mathbf{P} + \frac{1}{2} \mathbf{X}^T \mathbf{V} \mathbf{X}. \quad (47)$$

另一方面, 用 \$(e)\$ 表示与离子接触的热库, 每个热库与 \$N^{(e)}\$ 个离子接触. 假设离子晶体的两边

分别与热库 L 和 R 接触, 那么 \$(e) = (L)\$ 或 \$(R)\$. 于是系统的环境哈密顿量可以写为

$$H_E = \sum_e H_E^{(e)}, \quad (48)$$

$$H_E^{(e)} = \sum_{k=1}^{N^{(e)}} \left(\frac{p_k^{(e)2}}{2m_k^{(e)}} + \frac{m_k^{(e)} \omega_k^{(e)2} q_k^{(e)2}}{2} \right), \quad (49)$$

其中下标 \$k\$ 表示受到热库影响的离子, \$q_k^{(e)}\$ 和 \$p_k^{(e)}\$ 表示在热库 \$(e)\$ 的影响下离子的坐标和动量, \$m_k^{(e)}\$ 和 \$\omega_k^{(e)}\$ 表示离子的质量和振动频率. 用 \$C_{ik}^{(e)}\$ 表示与热库 \$(e)\$ 接触的离子和未接触热库的离子之间的耦合系数, 于是系统的相互作用哈密顿量可以写为

$$H_{\text{int}} = \sum_e \sum_{i,k} C_{ik}^{(e)} q_i q_k^{(e)}. \quad (50)$$

根据文献 [35], 热库的性质由 \$\xi\$ 和 \$\nu\$ 决定, 表达式分别为

$$\xi(\tau) = \int_0^\infty \frac{\sum_e I^{(e)}(\omega) \cos(\omega\tau)}{\omega} d\omega, \quad (51)$$

$$\nu(\tau) = \hbar \int_0^\infty \sum_e I^{(e)}(\omega) \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T^{(e)}}\right) \cos(\omega\tau) d\omega. \quad (52)$$

假设热库的类型为 Ohmic 热库, 此时

$$I^{(e)}(\omega) = \frac{2}{\pi} \xi_0 P^{(e)} \frac{\omega A^2}{A^2 + \omega^2}, \quad (53)$$

其中 A 表示高频截止频率, ξ_0 表示弛豫率, $P^{(e)}$ 表示与热库 (e) 接触的离子在坐标轴上的投影. $\hat{G}(s)$ 是系统格林函数 (Green's function) 的拉普拉斯变换 (Laplace transform), 其表达式为

$$\begin{aligned} \hat{G}(s) &= \frac{1}{s^2 m \mathbf{I} + V_R + 2s \hat{\xi}(s)}, \\ \hat{\xi}(s) &= \frac{\xi_0 (P^{(L)} + P^{(R)}) A}{s + A}, \quad V_R = V - 2\xi(0), \end{aligned}$$

其中 \mathbf{I} 是单位矩阵. 系统稳态下的各种物理量都可通过 $\hat{G}(s)$ 来表示, 令 $\sigma^{(0,0)} = \langle \mathbf{X} \mathbf{X}^T \rangle$, $\sigma^{(1,1)} = \langle \mathbf{P} \mathbf{P}^T \rangle$, $\sigma^{(0,1)} = \text{Re} [\langle \mathbf{X} \mathbf{P}^T \rangle]$, 均可以表示为 [6,35]

$$\sigma^{n,l} = \int_0^\infty i^{l-n} (m\omega)^{n+l} \hat{G}(i\omega) \hat{\nu}(\omega) \hat{G}(-i\omega) d\omega, \quad (54)$$

其中 $\hat{\nu}(\omega)$ 是 $\nu(\omega)$ 的傅里叶变换, m 表示离子质量, 由 (54) 式可以推导出稳态热流的表达式 [35]:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle &= \pi \int_0^\infty d\omega \text{tr} \left(\mathbf{I}^{(L)}(\omega) \hat{G}(i\omega) \mathbf{I}^{(R)}(\omega) \hat{G}(-i\omega) \right) \\ &\times \hbar \omega \left[\coth \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T^{(L)}} \right) - \coth \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T^{(R)}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (55)$$

通过对 (54) 式和 (55) 式进行积分, 就可以得到稳态下的热流等物理量. 文献 [27,36,37] 提供了一种方法, 能够解析地计算积分. 首先计算 $\hat{G}(s)$ 的 $6N$ 个特征值 $\{s_\varphi\}$ 和对应的特征向量 $\{r_\varphi\}$. 根据文献 [38], $\hat{G}(s)$ 可以被写成:

$$\hat{G}(s) = \sum_{\varphi=1}^{6N} \frac{s_\varphi}{s - s_\varphi} r_\varphi r_\varphi^T, \quad (56)$$

并且满足以下条件:

$$\hat{G}^{-1}(s_\varphi) r_\varphi = 0. \quad (57)$$

于是 (54) 式的积分可以被写为 [27]

$$\sigma^{n,l} = 2\xi_0 \text{Re} \left[\frac{m^{n+l}}{i^{l-n+1}} \sum_{\varphi,\beta=1}^{6N} \omega_\varphi^{n+l+1} \omega_\beta \frac{r_\varphi^T A \xi_\beta}{\omega_\varphi + \omega_\beta} r_\beta r_\beta^T \right], \quad (58)$$

其中 $A = 2k_B(T^{(L)}P^{(L)} + T^{(R)}P^{(R)})$, 并且 $\omega_\varphi = -is_\varphi$.

(55) 式的积分可以被写为 [27]

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J} \rangle &= 4\xi_0^2 \Delta \sum_{\varphi,\beta=1}^{6N} \frac{\omega_\varphi^3 \omega_\beta}{\omega_\varphi + \omega_\beta} \\ &\times \left(r_\varphi^T P^{(L)} \xi_\beta \right) \left(r_\beta^T P^{(R)} \xi_\varphi \right), \end{aligned} \quad (59)$$

其中 $\Delta = -2ik_B(T^{(L)} - T^{(R)})$.

文献 [27] 采用上述方法计算了离子晶体在不同构型下的热导率 κ_L 与无序度间的关系, 其中 κ_L 的定义为 $\langle \mathbf{J} \rangle = \kappa_L(T^{(L)} - T^{(R)})/L$, L 为离子晶体的长度. 上述模型虽然是三维, 但是也能计算出一维 (直线构型) 和二维 (之字构型) 情况下离子晶体受到无序度的影响. 研究者们在耦合矩阵 \mathbf{V} 中引入无序度, 具体操作如下: 随机选取离子晶体中的一半离子, 将其耦合矩阵对应值进行改变 $V_{ii} \rightarrow (1 \pm d)V_{ii}$, 其中 d 为表示无序度的参数. 在文献 [27] 中, 根据数值计算得到了以下结论: 无序度和离子晶体的长度均会对离子晶体的热导率产生影响. 对于一维情况 (直线构型), 当无序度 $d = 0.005$ 且离子晶体长度较小时, 热导率基本不受无序度的影响. 然而, 当晶体长度继续增加, 热导率出现了明显的下降. 对于无序度 $d = 0.02$ 的情况, 热导率受到无序度影响的离子晶体的长度的阈值相对于 $d = 0.005$ 减小了约一半, 并且当晶体长度足够大时, 热导率下降到了接近 0. 对于二维情况 (之字构型), 当 $d = 0.001$ 时, 热导率就明显受到了无序度的影响, 随着离子晶体长度的增加, 热导率会下降到接近 0. 当 d 的值提高到 0.02 时, 热导率会在更小的晶体长度处下降到接近 0. 对于三维情况 (螺旋构型), 热导率受到无序度的影响也很明显, 但是热导率没有出现下降到 0 的趋势.

除了离子晶体, 研究者也在其他低维系统中对无序度进行了研究. 文献 [39] 在一维 FPU 晶体中探讨了无序度与热流之间的关系, 他们通过给晶体中的粒子引入不同质量来产生无序度. 数值模拟结果显示, 在高温或大尺寸的 FPU 晶体中, 无序度对热流的影响较弱. 只有在晶体尺寸较小且温度较低的情况下, 无序度才会对热流产生显著影响, 此时无序度越高, 热流越小. 文献 [6] 在二维和三维的谐波晶体中考察了无序度与热流的关系, 他们同样通过给粒子赋予不同的质量来产生无序度. 对于二维谐波晶体, 热流受到无序度和晶体尺寸的共同影响. 无序度或晶体尺寸越大, 热流越小. 当无序度和晶体尺寸达到一定值时, 热流会降低至接近零. 然而, 对于三维谐波晶体, 热流受无序度和晶体尺寸的影响较小. 尽管无序度和晶体尺寸的增加会使热流减小, 但热流并未呈现出趋于零的趋势.

5 总 结

本文简要介绍了离子晶体中热传导的研究进

展, 包括一维、二维和三维模型中温度分布和稳态热流的计算方法, 以及在不同维度的离子晶体构型下热流与温度分布的特性。此外, 还介绍了无序度对离子晶体热导性的影响。在没有引入无序的情况下, 直线构型的离子晶体具有最高的导热性, 其次是螺旋构型, 最后是之字构型。产生这一现象的原因是: 在离子晶体中运动模式不平衡导致的非线性效应会阻碍热流的传导。直线构型具有最少的运动模式(仅为一维), 因此其导热性最佳。之字构型和螺旋构型都包含3个运动模式, 它们之间的区别在于之字构型的3个运动模式均不相等, 而螺旋构型中有两个维度的运动模式是相等的。因此, 之字构型的导热性要小于螺旋构型。

在引入无序的情况下, 无序会导致离子晶体的热导性下降, 其中之字构型受到的影响最大。当离子晶体中的离子数量较少时(25个以下), 直线构型受到影响最小; 而当离子数量较多时(120个以上), 螺旋构型受到的影响最小。如果将离子晶体中轴向运动的不平衡也视为一种无序, 那么这也能够解释离子晶体中之字构型的导热率最低。

实验上已经成功构造出了离子晶体的多种构型, 比如直线构型、之字构型^[40]、螺旋构型^[41]和带拓扑结的之字构型^[42]。实验上也实现了离子晶体在不同构型之间的结构相变^[43], 而且观察到温度对离子晶体构型的影响^[44,45]。但是到目前为止, 还没有实验对上述理论描述的稳态下离子晶体的热传导进行直接验证, 主要原因在于: 目前在离子阱系统中, 用于测量离子温度的方法(扫描离子荧光线型或测量离子边带谱线等)都不适用于稳态下的离子晶体。比如, 在使用扫描离子荧光线型的方法时, 需要使用一束不断改变失谐的激光持续照射离子, 这相当于离子晶体与一个额外的热库相接触并且破坏了稳态。而扫描离子边带谱线的方法虽然不会破坏稳态, 但是只能准确测量运动能量低于20个声子数的离子体系, 相对来说, 稳态下离子体系至少会有几百个声子数。目前最有希望对稳态进行无破坏测量的技术是通过使用CCD拍摄离子照片来识别离子的温度^[46]。在离子阱系统中已经有研究者在热传导方向进行了相关的实验, 比如在文献^[47,48]中, 用脉冲激光加热离子晶体中的一个离子, 然后测量了热量在离子晶体中的传播(扩散、反射等)规律。

目前对有关低维系统热传导的理论已经在实验

室中有所应用, 比如在离子阱中的协同冷却技术, 这种技术能够在只对离子晶体中的一个离子进行冷却的情况下, 降低离子晶体中所有离子的温度^[49,50]。对于离子晶体, 存在两种非常有效的冷却方法, 分别是EIT(electromagnetically-induced-transparency)冷却^[51]和偏振梯度冷却^[52]。对离子晶体热传导的深入研究有助于更好地理解这几种冷却方法的冷却过程以及所能达到的极限冷却温度。在离子晶体以外的低维系统中, 为了测量热流, 研究者们发展出了多种实验技术。文献^[53]新发展出一种加工技术, 能够制造尺寸小于100 nm的独立三维结构, 通过应用这个技术, 制造了绝缘热导体和热传感器, 并测量了纳米线的热导率。文献^[54]发明了一种悬挂装置, 这种装置能够用于探测无基底接触的纳米管中的热流。

在宏观系统中, 根据变换热学的理论, 科学家们已经成功研发出能够控制热量流动方向的超构材料, 例如热二极管。同样地, 在低维系统中也能够制造出类似功能的微观热二极管。文献^[55]在实验中成功使用纳米管制造出了微米级别的热二极管, 整流参数约为7%。而文献^[56]在理论上模拟了由15个离子构成的离子晶体组成的热二极管, 他们让离子晶体处于直线构型, 并调整每个离子所在的势阱, 使势阱的频率依次递增。将处于此状态的离子晶体的左右两端与热库接触, 理论计算结果显示, 当左边的热库温度高于右边的热库时的热流与左边的热库温度低于右边热库时的热流存在明显的差异。理论上, 这种热二极管的整流参数最高可达80%。

参考文献

- [1] Li B, Wang L, Hu B 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 223901
- [2] Dhar A, Roy D 2006 *J. Stat. Phys.* **125** 801
- [3] Dhar A 2008 *Adv. Phys.* **57** 457
- [4] Rieder Z, Lebowitz J L, Lieb E 1967 *J. Math. Phys.* **8** 1073
- [5] Dhar A, Dandekar R 2015 *Physica A* **418** 49
- [6] Chaudhuri A, Kundu A, Roy D, Dhar A, Lebowitz J L, Spohn H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 064301
- [7] Saito K, Dhar A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 040601
- [8] Dhar A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 5882
- [9] Casher A, Lebowitz J L 1971 *J. Math. Phys.* **12** 1701
- [10] Rich M, Visscher W M 1975 *Phys. Rev. B* **11** 2164
- [11] Rubin R J, Greer W L 1971 *J. Math. Phys.* **12** 1686
- [12] Verheggen T 1979 *Commun. Math. Phys.* **68** 69
- [13] Hu B, Li B, Zhao H 2000 *Phys. Rev. E* **61** 3828
- [14] Wang P, Luan C Y, Qiao M, Um M, Zhang J, Wang Y, Yuan X, Gu M, Zhang J, Kim K 2021 *Nat. Commun.* **12** 233

- [15] Kielpinski D, Monroe C, Wineland D J 2002 *Nature* **417** 709
- [16] Leibfried D, Blatt R, Monroe C, Wineland D 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 281
- [17] Schiffer J P 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 818
- [18] Eckmann J P, Pillet C A, Rey-Bellet L 1999 *Commun. Math. Phys.* **201** 657
- [19] Ford G W, Kac M, Mazur P 1965 *J. Math. Phys.* **6** 504
- [20] Zürcher U, Talkner P 1990 *Phys. Rev. A* **42** 3278
- [21] Saito K, Takesue S, Miyashita S 2000 *Phys. Rev. E* **61** 2397
- [22] Dhar A, Shastry B S 2003 *Phys. Rev. B* **67** 195405
- [23] Segal D, Nitzan A, Hänggi P 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 6840
- [24] Lepri S, Livi R, Politi A 2003 *Phys. Rep.* **377** 1
- [25] Lin G D, Duan L M 2011 *New J. Phys.* **13** 075015
- [26] Ruiz A, Alonso D, Plenio M B, del Campo A 2014 *Phys. Rev. B* **89** 214305
- [27] Freitas N, Martinez E A, Paz J P 2016 *Phys. Scr.* **91** 013007
- [28] Ruiz-García A, Fernández J J, Alonso D 2019 *Phys. Rev. E* **99** 062105
- [29] Gardiner C, Zoller P 2010 *Quantum Noise: A Handbook and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics* (3rd Ed.) (Berlin: Springer) pp42–89
- [30] Walls D F, Milburn G J 2010 *Quantum Optics* (2nd Ed.) (Berlin: Springer) pp112–117
- [31] Novikov E A 1965 *Sov. Phys. JETP* **20** 1290
- [32] Plenio M B, Huelga S F 2008 *New J. Phys.* **10** 113019
- [33] Kubo R 1966 *Rep. Prog. Phys.* **29** 255
- [34] Piccirelli R A 1968 *Phys. Rev.* **175** 77
- [35] Martinez E A, Paz J P 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 130406
- [36] Freitas N, Paz J P 2014 *Phys. Rev. E* **90** 042128
- [37] Freitas N, Paz J P 2014 *Phys. Rev. E* **90** 069903
- [38] Tisseur F, Meerbergen K 2001 *SIAM Rev.* **43** 235
- [39] Li B, Zhao H, Hu B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 63
- [40] Birk G, Kassner S, Walther H 1992 *Nature* **357** 310
- [41] Dubin D H E, O’Neil T M 1999 *Rev. Mod. Phys.* **71** 87
- [42] Pyka K, Keller J, Partner H L, Nigmatullin R, Burgermeister T, Meier D M, Kuhlmann K, Retzker A, Plenio M B, Zurek W H, del Campo A, Mehlstäubler T E 2013 *Nat. Commun.* **4** 2291
- [43] Yan L L, Wan W, Chen L, Zhou F, Gong S J, Tong X, Feng M 2016 *Sci. Rep.* **6** 21547
- [44] Li J, Yan L L, Chen L, Liu Z C, Zhou F, Zhang J Q, Yang W L, Feng M 2019 *Phys. Rev. A* **99** 063402
- [45] Liu Z C, Chen L, Li J, Zhang H, Li C B, Zhou F, Su S L, Yan L L, Feng M 2020 *Phys. Rev. A* **102** 033116
- [46] Srivathsan B, Fischer M, Alber L, Weber M, Sondermann M, Leuchs G 2019 *New J. Phys.* **21** 113014
- [47] Ramm M, Pruttivarasin T, Häffner H 2014 *New J. Phys.* **16** 063062
- [48] Mao Z C, Xu Y Z, Mei Q X, Zhao W D, Jiang Y, Cheng Z J, Chang X Y, He L, Yao L, Zhou Z C, Wu Y K, Duan L M 2022 *Phys. Rev. A* **105** 033107
- [49] Zuo Y N, Han J Z, Zhang J W, Wang L J 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 061103
- [50] Li M, Zhang Y, Zhang Q Y, Bai W L, He S G, Peng W C, Tong X 2023 *Chin. Phys. B* **32** 036402
- [51] Qiao M, Wang Y, Cai Z, Du B, Wang P, Luan C, Chen W, Noh H R, Kim K 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 023604
- [52] Joshi M K, Fabre A, Maier C, Brydges T, Kiesenhofer D, Hainzer H, Blatt R, Roos C F 2020 *New J. Phys.* **22** 103013
- [53] Tighe T S, Worlock J M, Roukes M L 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 2687
- [54] Kim P, Shi L, Majumdar A, McEuen P L 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 215502
- [55] Chang C W, Okawa D, Majumdar A, Zettl A 2006 *Science* **314** 1121
- [56] Simón M A, Martínez-Garaot S, Pons M, Muga J G 2019 *Phys. Rev. E* **100** 032109

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Research progress of heat transport in trapped-ion crystals^{*}Li Ji¹⁾ Chen Liang^{2)†} Feng Mang^{1)2)‡}1) (*Guangzhou Institute of Industrial Technology, Guangzhou 511458, China*)2) (*Innovation Academy for Precision Measurement Science and Technology, CAS, Wuhan 430071, China*)

(Received 28 October 2023; revised manuscript received 23 November 2023)

Abstract

Heat transport is one of the most important research topics in physics. Especially in recent years, with the in-depth study on single-molecule devices, heat transport in low-dimensional (i.e. one- and two-dimensional) microsystems has received more and more attention. In the research of Fermi-Pasta-Ulam crystals and harmonic crystals, it is widely accepted that heat conduction in low-dimensional system does not follow Fourier's law. Due to the lack of the equipment that can directly measure heat current, it has been proven to be a challenging task to carry out relevant experiments. Ion crystal in ion trap is located in vacuum and does not exchange energy with the external environment. The crystal structure and temperature can be accurately controlled by electric field and optical field, providing an ideal experimental platform for studying thermal conduction in low-dimensional crystals in classical state or quantum state. Herein we summarize the recent theoretical research on thermal conduction in ion crystals, including the methods of calculating temperature distribution and steady-state heat current in one-dimensional, two-dimensional, and three-dimensional models, as well as the characteristics of heat current and temperature distribution under different ion crystal configurations. Because the nonlinear effect caused by the imbalance among three dimensions hinders the heat transport, the heat current in ion crystal is largest in the linear configuration while smallest in the zig-zag configuration. In addition, we also introduce the influence of disorder on the thermal conductivity of ion crystal, including the influence on the heat current across various ion crystal configurations such as the linear, the zig-zag and the helical configuration. Notably, the susceptibility of ion crystal to disorder increases with crystal size increasing. Specifically, the zig-zag ion crystal configuration exhibits the largest susceptibility to disorder, whereas the linear configuration is least affected. Finally, we provide a concise overview of experimental studies of the heat conduction in low-dimensional systems. Examination of the heat conduction in ion crystal offers a valuable insight into various cooling techniques employed in ion trap systems, including sympathetic cooling, electromagnetically induced transparency cooling, and polarization gradient cooling. Just like macroscopic thermal diodes made by thermal metamaterials, it is possible that the microscopic thermal diodes can also be made in low-dimensional systems.

Keywords: ion trap, ion crystals, heat transport, structural phase transition

PACS: 37.10.Ty, 05.60.-k, 05.70.Fh

DOI: [10.7498/aps.73.20231719](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231719)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U21A20434), the Key Laboratory of Guangzhou, China (Grant No. 202201000010), and the Science and Technology Project of Guangzhou, China (Grant No. 202201011727).

† Corresponding author. E-mail: liangchen@wipm.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: mangfeng@wipm.ac.cn

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

金属导热理论的研究进展与前沿问题^{*}

王奥¹⁾²⁾ 盛宇飞¹⁾²⁾ 鲍华^{1)2)[†]}

1) (上海交通大学溥渊未来技术学院, 上海 200240)

2) (上海交通大学密西根学院, 上海 200240)

(2023年7月17日收到; 2023年9月19日收到修改稿)

金属是人类使用最广泛的材料之一。相对于对金属力学性能的研究, 金属导热性能的相关研究较为匮乏。对金属导热机制的理解往往还依赖于一百多年前建立的威德曼-弗朗兹定律。金属导热和电子输运有密切联系, 同时又与晶格振动有关。深入理解金属导热机制, 不但对材料应用意义重大, 而且有利于提高对导热基本理论的认知。本文回顾了金属导热研究的历史, 并对最近十几年来金属导热的研究进行了总结, 特别是对基于第一原理电子-声子耦合模式分析的金属导热机理的研究进行了综述。此外, 本文也对金属导热理论的未来发展方向进行了探讨。

关键词: 热导率, 电子导热, 声子导热, 洛伦兹数

PACS: 72.15.Eb, 74.25.fc, 63.20.kd, 73.63.-b

DOI: [10.7498/aps.73.20231151](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231151)

1 引言

金属材料是人类使用的最广泛的材料之一。在诸多应用场景下, 例如换热器^[1,2]、电子封装等^[3]、金属的导热性能至关重要。另一方面, 从基本的固体理论的角度来说, 金属的导热理论也是固体物理学的重要分支^[4]。因此, 对金属的导热性能研究在工程和理论方面都具有重要意义。目前, 对金属导热机理的理解仍主要基于一百多年前的威德曼-弗朗兹定律^[5,6](Wiedemann-Franz law)。该定律指出, 金属的热导率 κ 与电导率 σ 之间成正比关系, 即 $\kappa/\sigma = LT$, 其中 L 为洛伦兹常数, 而 T 为温度^[5,6]。金属电导率和热导率的正比关系最早在 1853 年被威德曼和弗朗兹通过实验发现^[7]。1881 年, Lorenz^[8]优化了该实验定律, 并提出金属热导率与电导率和温度的乘积成正比。1900 年, Drude^[9]基于自由电子气模型推导出了这一比例系数, 得到的数值为

$1.11 \times 10^{-8} \text{ W}\cdot\Omega\cdot\text{K}^{-2}$, 这一结果远低于实验测量值。1928 年 Sommerfeld^[10]基于量子力学模型重新推导, 得到了与实验吻合良好的比例系数, 即理论标准洛伦兹数 $L_0 = 2.44 \times 10^{-8} \text{ W}\cdot\Omega\cdot\text{K}^{-2}$ (Sommerfeld value)^[10]。该理论获得了极大的成功, 可以解释多数常见金属的实验测量结果。例如铜的洛伦兹数为 $2.31 \times 10^{-8} \text{ W}\cdot\Omega\cdot\text{K}^{-2}$ ^[6], 铝的洛伦兹数为 $2.10 \times 10^{-8} \text{ W}\cdot\Omega\cdot\text{K}^{-2}$ ^[6]。然而, 推导出上述标准洛伦兹数需要一些基本假设, 包括: 电子必须为完全的自由电子; 电子在导电和导热过程的散射机制必须完全一致; 晶格导热贡献必须远小于电子导热。上述条件在绝大多数金属中都不是严格成立的。事实上, 实验上也发现了部分金属的洛伦兹数与标准值存在显著偏差, 如钨的洛伦兹数为 $3.27 \times 10^{-8} \text{ W}\cdot\Omega\cdot\text{K}^{-2}$ ^[6], 远大于 L_0 。更多的实验结果表明, 不同材料室温下的实测洛伦兹数在 L_0 的 0.81 倍到 1.76 倍之间^[6]。

从金属电子导热理论的建立到近年来, 对金属导热的研究相对较少。在 20 世纪 80 年代前后, 部

* 国家自然科学基金(批准号: 52122606)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: hua.bao@sjtu.edu.cn

分工作对金属热导率进行了实验测量，并试图从实验上分离金属中的电子和声子的导热贡献^[11–15]。理论方面在1958和1979年发展的Klemens模型^[16]和Slack方程^[17]，均只考虑了声子-声子非简谐相互作用而忽略了声子和电子的相互作用，因而不适用于计算金属体系的声子热导率。1986年Klemens和Williams^[18]基于长波声子近似和自由电子气模型，通过引入电声耦合常数项改进了原本用于半导体和绝缘体的声子导热解析模型，并估算了多种单质金属的声子热导率。然而，金属导热中仍有一些基本问题没有得到很好的解决，其中一个是声子导热在不同金属中的贡献大小问题，另一个是威德曼-弗朗兹定律的成立条件。文献[6,11,19]认为金属中的声子导热贡献不超过10%。对于威德曼-弗朗兹定律的成立条件，一般认为在室温区是成立的，而在中低温区的结果表明洛伦兹数会明显的偏离 L_0 ^[6,20,21]。因为这些导热的基础理论问题未能得到完整的解决，因此难以基于理论开展相关领域的工程问题，如基于金属导热特性设计金属制备工艺。

由于实验手段的限制，特别是分离电子和声子导热具有现实上的困难，上述问题很难通过实验手段回答。近年来，随着第一性原理计算方法的发展，

特别是基于EPW^[22]的电子声子耦合计算理论工具的发展，使得从量子力学基本原理出发计算热载流子的散射过程并结合玻尔兹曼输运方程计算电子和声子的热导率成为了可能。过去十余年，金属热导率的计算研究获得了显著的进展。在各种理论方法中，基于模态分析的方法成为了研究主流。这一方法计算各个电子/声子模态的比热容、群速度和弛豫时间，进而获得热导率^[23–27]。此方法不仅可以对热导率进行准确预测，与此同时还包含了大量热载流子的微观信息，为发掘深层次金属导热机制提供了工具。金属导热的计算过程中最为关键的是量化金属中电子以及声子的散射过程。多种散射源可以引起声子的散射，例如声子-声子散射^[28]，声子-电子散射（声电散射）^[29]，声子-缺陷散射等。电子热输运中同样存在多种类型的散射，例如电子-声子散射（电声散射）^[30]、电子-电子散射^[31]、电子-缺陷散射^[32]等。本文将主要关注三声子散射与电声和声电散射作用。一方面已有大量的理论研究表明考虑这两种类型的散射作用可以得到与实验吻合良好的室温附近的热导率^[25,33,34]。另一方面针对其余的散射过程诸如电子-缺陷散射等，现有的研究较少，计算框架还不成熟，有待未来进一步探索。如图1(a)所示，本文考虑了三声子散射与电声

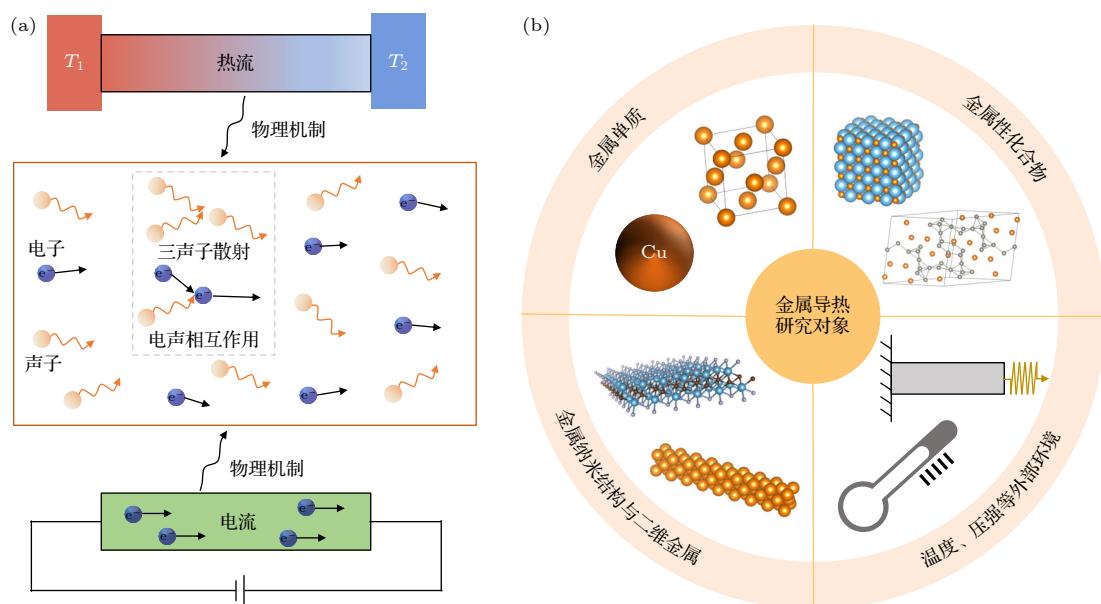


图1 (a) 金属导热与导电的微物理观过程示意图，包括三声子散射和电声相互作用；(b) 金属导热主要研究对象，包括金属单质、金属性化合物、金属纳米结构与二维金属的导热，以及金属导热受到不同外界因素诸如温度、压强等的影响

Fig. 1. (a) Microscopic physical process of electron thermal transport and electrical transport, including three-phonon scattering and electron-phonon interaction; (b) the main research objects for thermal transport in metals, including the thermal transport in elemental metals, metallic compounds, metallic nanostructure, and two-dimensional metals; as well as the effect of external environments, such as temperature and pressure on thermal conductivity.

和声电散射机制。金属导热的具体研究对象亦本文的整体结构如图 1(b) 所示。本文将介绍最近十几年来, 针对这些研究内容和对象, 金属导热理论的研究进展和最新成果, 并探讨相关领域未来的研究方向和发展趋势。

2 金属导热特性以及电子和声子对导热的贡献

2.1 金属单质的导热

金属单质结构简单且应用场景广泛, 因而首先得到了大量的理论研究。2016 年 Jain 与 McGaughey^[25] 对金、银、铝三种金属中的热导率进行了理论计算, 采用晶格动力学方法获得了三声子散射率, 密度泛函微扰理论获得声电散射率。计算得到金、银、铝的热导率分别为 278, 374, 252 W/(m·K), 和实验结果偏差均小于 13%, 证明了本方法的合理性。此外, 这一工作也讨论了声子导热的贡献, 并发现金、银、铝的室温声子热导率分别为 2, 4, 6 W/(m·K)。这与半导体硅中 140 W/(m·K) 的声子热导率相比明显偏低, 这是因为相对硅而言, 金、银、铝中的声子散射通道较多, 化学键的非简谐性相对较强。另一方面, 金、银、铝在室温下声子导热对热导率的贡献占比均小于 3%, 相对电子导热贡献而言较低。同年 Wang 等^[35] 针对金属中的

声子导热问题, 继续对 6 种金属——金、银、铜、铝、铂、镍进行了理论计算。通过对比分析, 他们发现金、银、铜、铝的声子热导率基本不受电子散射的影响, 而铂和镍的声子热导率则因声电散射的作用分别下降约 20% 和 30%。这是因为声电散射强度与费米能处的电子态密度直接相关, 声电散射中需要两个电子态参与, 且二者的动量差要等于参与散射声子的动量以满足守恒定律, 因此费米能处电子态密度高的金属中有更多的电子态满足散射动量关系, 增加声子的散射通道。铂和镍在费米能处的电子态密度相对金、银、铜、铝而言较大, 因此声电散射较强。2019 年, Tong 等^[34] 进一步探究了金属中的声子导热, 对 11 种典型单质金属进行了计算。研究发现只考虑三声子散射时, 声子热导率为 3—30 W/(m·K), 考虑声电散射后, 数值范围下降至 3—18 W/(m·K)。整体上过渡金属中的声电散射对声子导热的抑制作用强于贵金属, 这是因为过渡金属中费米能处的电子态密度较大且声子频率较高。电子导热方面, 锰与钛的电子热导率为 5 W/(m·K) 和 25 W/(m·K), 其余金属单质的电子热导率普遍高于 70 W/(m·K), 金、银、铜的电子热导率则是达到了 273—451 W/(m·K)。基于计算获得的电子和声子的热导率, 如图 2(a) 所示, 该研究进一步发现, 这些单质金属中的声子导热占总热导率的 1%—40%。此外, 这一工作也计算了电导率并

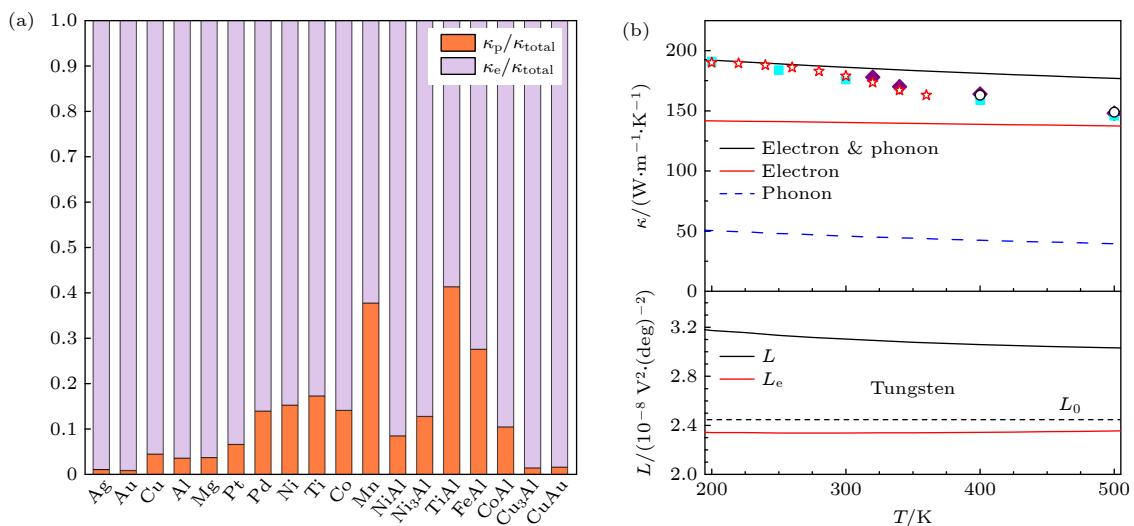


图 2 (a) 300 K 下部分金属中电子与声子导热对总热导率的贡献占比^[34]; (b) 200—500 K 下钨的声子热导率、电子热导率及总热导率与实验的对比(上图), 考虑总热导率与只考虑电子热导率下钨的洛伦兹数(下图)^[24], 虚线所示 L_0 为标准洛伦兹数

Fig. 2. (a) Percentage of electron and phonon thermal conductivity contributing to total thermal conductivity for several metals^[34]. (b) The phonon, electron, and total thermal conductivity of tungsten compared with experiments from 200 to 500 K (upper panel); the Lorenz number of tungsten considering total thermal conductivity versus considering electronic thermal conductivity (lower panel)^[24], the dashed line is the standard Lorenz number L_0 .

确定了洛伦兹数。除了钯、镍、锰的室温洛伦兹数偏离标准值 28%, 24%, 14%, 其余单质金属的洛伦兹数相对标准值的偏离均不超过 9%。2019 年, Chen 等^[24]则在计算中发现过渡金属钨的洛伦兹数要高于标准值 30%。如图 2(b) 所示, 这是因为其声子热导率为 $46 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 占总热导率的 25%。去除声子导热后的洛伦兹数则接近标准值。他们同时发现, 与常规的声子热导率随温度呈反比例下降这一规律不同, 图 2(b) 中可见钨的声子热导率基本不随温度变化。这是因为钨中的三声子散射弱于声电散射, 因此基本不随温度变化的声电散射主导了声子的导热。2020 年 Wen 等^[36]在过渡金属钼中发现了相似的现象并得出相同的结论。为了分析不同晶相对导热的影响, 2022 年 Li 等^[37]选取了六方相贵金属金、银、铜进行了计算。该研究发现六方相金、银、铜的热导率接近于常见立方相, 约为 $200\text{--}280 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 且声子对导热的贡献小于 5%。综上所述, 在金属单质导热的研究中发现, 金、银、铜、铝中电子是主要的热载流子, 声子导热的贡献低于 5%。部分过渡金属如钨中声子导热对总热导率的贡献可达 25%, 并导致洛伦兹数偏离标准值 30% 左右。此外, 单质金属中费米面上的电子密度在一定程度上可反映声电散射对声子导热的作用强度。

2.2 金属性化合物的导热

金属性化合物为两种及以上元素构成的金属材料。金属性化合物种类繁杂, 应用广泛, 但也正因其元素和结构种类多样, 其导热的物理机制更为复杂。本节将介绍两种典型的金属性化合物导热

的研究进展。首先对金属间化合物的导热研究进行介绍。金属间化合物是由多种金属元素组成的晶体, 它作为第 2 相普遍存在于合金中, 对合金的改性和导热起到重要作用^[38]。2018 年 Tong 等^[39]计算发现, NiAl 和 Ni_3Al 的导热机制类似。图 3(a) 以 NiAl 为例, 展示了其 100—1000 K 下电子和声子热导率。 NiAl 在 300 K 下声子导热对热导率贡献占比约 17%, 且这一比例随温度上升而下降。此外, 该研究发现声电散射在声子导热中起到了重要作用。在 100 K 下, 声电散射使得 NiAl 和 Ni_3Al 的声子热导率分别下降 55% 和 75%, 但高于 600 K 时, 声电散射对声子导热的作用则不明显。2020 年 Giri 等^[33]计算了 CuAu, Cu_3Au 和 CuAu_3 的电子热导率, 并发现它们的数值低于单质 Cu 和 Au, 且这 3 种 Cu-Au 金属间化合物的电声相互作用强度强于单质 Cu 和 Au。此外, 部分金属间化合物导热还呈现出了各向异性。例如, 2020 年 Liu 等^[40]发现 Cu-Al 金属间化合物的声子导热受各向异性的杨氏模量影响而呈现了各向异性; 2022 年 Daeumer 等^[41]则发现 Cu-Sn 金属间化合物的电子导热因各向异性的电子能带而呈现各向异性。另一方面, 针对部分金属间化合物复杂原胞的情况, 2023 年 Wang 等^[42]对原胞内含超过十个原子的 Mg-Zn 金属间化合物 MgZn_2 和 Mg_4Zn_7 进行了计算。如图 3(b) 所示, 研究发现当金属间化合物的晶胞足够复杂时, 总热导率基本不随温度变化, 且 300 K 下声子对导热的贡献小于 4%。这一较低的声子导热贡献一方面是因为金属键相较共价键和离子键而言较弱, 另一方面因为与声子导热直接关联的声学德拜温度随元胞原子数增加而下降。综上所述,

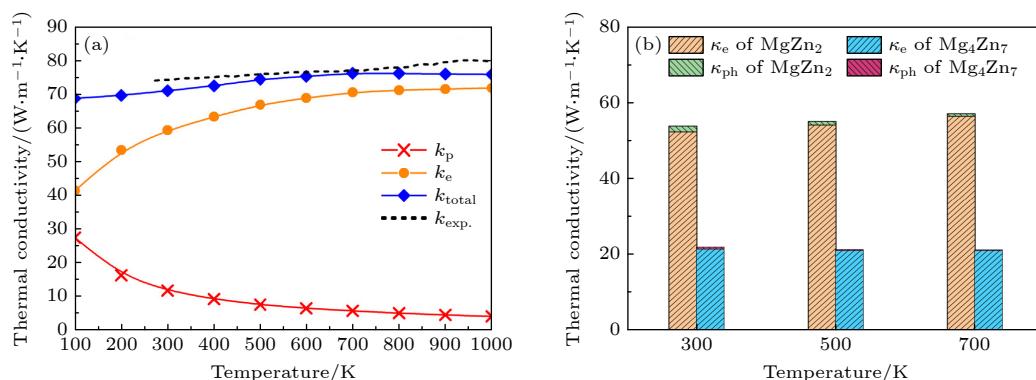


图 3 (a) NiAl ^[39], (b) MgZn_2 和 Mg_4Zn_7 ^[42] 中的声子热导率、电子热导率和总热导率随温度的变化

Fig. 3. Variation of phonon thermal conductivity, electron thermal conductivity, and total thermal conductivity with temperature for (a) NiAl ^[39], (b) MgZn_2 and Mg_4Zn_7 ^[42].

金属性化合物中的声子导热贡献占比与原胞的复杂度有关, 原胞相对简单的 Ni-Al 化合物在 300 K 下声子导热贡献为 17%, 而在原胞多于十个原子的 Mg-Zn 化合物中, 300 K 下声子的导热贡献则低于 4%. 此外, 部分金属性化合物中声子和电子导热存在各向异性.

金属性陶瓷(金属碳化物、氮化物和硼化物)是一种硬质耐高温材料, 适用于极端环境, 其导热性质对性能提升十分重要, 得到了学界广泛关注. 下面介绍金属性陶瓷的导热研究进展. 2018 年 Li 等^[43]发现 NbC 和 TiC 的声子热导率的温度依赖关系不同. 如图 4(a) 所示, TiC 的声子热导率随温度增加而下降, 遵循常规的反比例规律, 而 NbC 的声子热导率则基本不随温度变化. 相比 TiC, NbC 中特殊的声子温度依赖关系是因为其声电散射较强而三声子散射较弱, 弱温度依赖的声电散射主导了声子的热输运过程. 从图 4(a) 还可以看出, NbC 中三声子散射强度较弱, 体现在只考虑三声子散射和声子-同位素散射时, 其声子热导率为 3000 W/(m·K), 远高于 TiC 中 82 W/(m·K) 的数值. 该研究分析表明这是因为 Nb 与 C 的原子质量差异大于 Ti 和 C 的质量差异, 导致了 NbC 中声子带隙相对较大, 因此 NbC 的声子散射相空间低于 TiC. 另一方面, 声电散射对 NbC 声子热导率的影响明显强于 TiC. NbC 中较强的声电散射是因为其电子费米面为嵌套结构(nesting), 如

图 4(a) 所示, 因此其声电散射相空间高于 TiC. 这一工作进一步发现了 VC 和 TaC 中均存在类似于 NbC 的声子导热规律. 在随后 2020 年的一些研究中, 对于 WC, MoC^[44] 以及金属氮化物 TiN, HfN^[45] 和金属硼化物 ZrB₂, TiB₂^[46] 这几种金属性陶瓷材料, 均发现了类似于 NbC 的声子导热规律, 并有着相同的机理. 此外, 2020 年的部分工作中讨论了声子导热对总热导率的贡献占比. WC, NbC, TiN, HfN 的^[44,45] 计算数据表明, 电子和声子的室温热导率分别处于 43—69 W/(m·K) 和 20—131 W/(m·K) 的范围, 声子导热对热导率的贡献为 26%—74%. 为进一步分析金属陶瓷中的电子导热, 以 TiN 为例, 图 4(b), (c) 给出了其电子及声子热导率, 电导率和洛伦兹数的计算结果. 电子及总热导率基本不随温度变化. 使用总热导率计算洛伦兹数时, 室温数值将高于标准值 60% 左右. 而使用电子热导率计算洛伦兹数时, 室温洛伦兹数则高于标准值 10%, 并随温度升高而升高, 最终平稳在 1.3L₀ 附近^[45]. 基于以上对声子导热的物理理解, 2021 年 Kundu 等^[47]找到了一种具有高室温热导率(~ 1000 W/(m·K)) 的 θ 相 TaN. 其三声子散射规律与 NbC 等金属陶瓷相似, 但因 θ 相 TaN 费米能处电子态密度趋近于零, 降低了声电散射相空间, 因此由声电散射引起的声子热导率下降不超过 20%, 这也导致了 θ 相 TaN 具有较高的室温声子热导率. 2021 年 Liu 等^[48]发现六方 NbN 中室

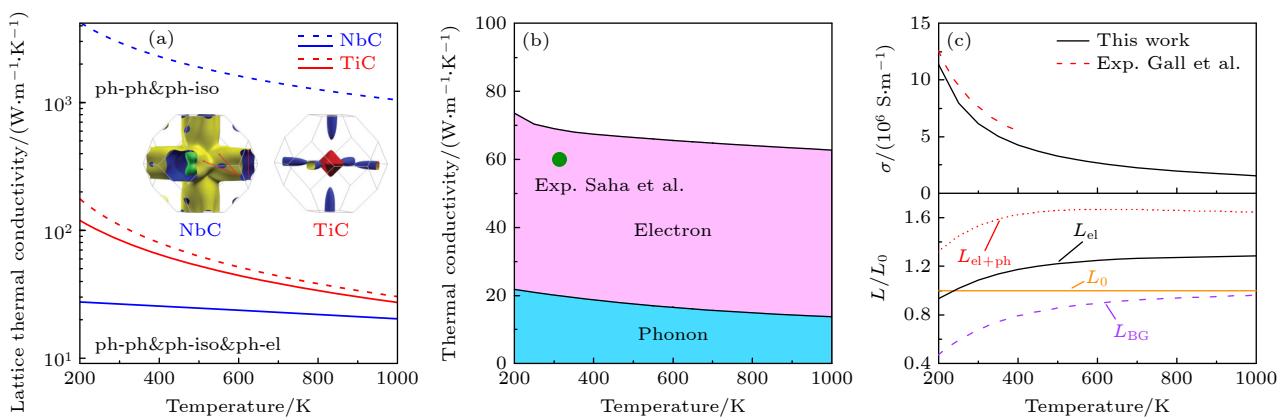


图 4 (a) 200—1000 K 下只考虑声子-声子和声子-同位素散射(虚线), 与同时考虑声子-声子、声子-同位素散射和声电散射(实线)下 NbC 和 TiN 的声子热导率^[43], 插图为二者的电子费米面; (b) 200—1000 K 下 TiN 的声子热导率、电子热导率、总热导率随温度的变化^[45]; (c) 200—1000 K 下 TiN 的电导率与洛伦兹数随温度的变化^[45].

Fig. 4. (a) Phonon thermal conductivity for NbC and TiC limited by phonon-phonon and phonon-isotope scattering (dashed curve), phonon-phonon, phonon-isotope, and phonon-electron scattering (solid curve) from 200 to 1000 K^[43]. Inset: The Fermi surfaces of NbC and TiC. (b) The phonon thermal conductivity, electron thermal conductivity, and total thermal conductivity of TiN from 200 to 1000 K^[45]. (c) The Lorenz number of TiN from 200 to 1000 K^[45].

温声子热导率小于 $5 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$. 这是因为虽然 Nb 和 N 的原子质量有数倍的差异, 六方 NbN 声子谱的带隙却远低于 NbC, 因此不同于 NbC, 六方 NbN 中的三声子散射没有受到明显抑制. 综上所述, 在部分金属性陶瓷中发现了相似的物理现象: 三声子散射受到抑制, 声电散射使声子热导率数值有数量级的降低, 导致声子热导率基本不随温度变化. 金属性陶瓷中声子热输运对热导率可贡献 26%—74%. 此外, 部分研究发现如果能减弱声电散射或增强三声子散射, 将会使声子热导率明显上升或下降.

表 1 列出了上述不同金属中的电子和声子热导率. 综合以上 2.1 和 2.2 节可见, 整体上金属的洛伦兹数偏离标准值的原因是高占比的声子导热. 而高占比声子导热的金属一般有两个特点, 即硬度较高和费米能处电子态密度较低. 同时满足这两个条件时, 三声子散射和声电散射同时受到抑制, 因此声子热导率数值和相对总热导率的占比高.

表 1 金属中的电子与声子热导率

Table 1. Electron and phonon thermal conductivity in metals.

金属	300 K下热导率/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)			声子导热占比/%
	总热导率	电子热导率	声子热导率	
Au	278 ^[25]	276 ^[25]	2 ^[25]	0.7
Ag	374 ^[25]	370 ^[25]	4 ^[25]	1.1
Al	252 ^[25]	246 ^[25]	6 ^[25]	2.4
Cu	378.7 ^[34]	361.3 ^[34]	17.4 ^[34]	4.6
Mn	8 ^[34]	5 ^[34]	3 ^[34]	37.5
Ti	30.6 ^[34]	25.3 ^[34]	5.3 ^[34]	17.3
W	186 ^[24]	140 ^[24]	46 ^[24]	24.7
Mo	162 ^[36]	125 ^[36]	37 ^[36]	22.8
hcp-Au (<i>a</i> -axis)	201.3 ^[37]	199 ^[37]	2.3 ^[37]	1.1
hcp-Ag (<i>a</i> -axis)	276.6 ^[37]	274 ^[37]	2.6 ^[37]	0.9
hcp-Cu (<i>a</i> -axis)	279.4 ^[37]	270 ^[37]	9.4 ^[37]	3.4
NiAl	71 ^[39]	59 ^[39]	12 ^[39]	16.9
Ni ₃ Al	28 ^[39]	22 ^[39]	6 ^[39]	21.4
MgZn ₂	53.9 ^[42]	52 ^[42]	1.9 ^[42]	3.5
Mg ₄ Zn ₇	21.9 ^[42]	21.4 ^[42]	0.5 ^[42]	2.3
WC (<i>a</i> -axis)	177 ^[44]	46 ^[44]	131 ^[44]	74.0
NbC	74 ^[44]	43 ^[44]	31 ^[44]	41.9
TiN	69 ^[45]	49 ^[45]	20 ^[45]	29.0
HfN	93 ^[45]	69 ^[45]	24 ^[45]	25.8
θ -TaN (<i>a</i> -axis)	1031 ^[47]	36 ^[47]	995 ^[47]	96.5
hcp-NbN	4.4 ^[48]	1.5 ^[48]	2.9 ^[48]	65.9

2.3 金属纳米结构的导热

近些年来金属纳米结构(纳米薄膜与纳米线)在芯片、微电子等领域得到广泛应用. 芯片散热对维持芯片性能与稳定性极为重要^[49], 因此金属纳米结构的导热成为研究重点. 虽然金属纳米薄膜与纳米线有着不同的工程应用, 但二者的导热都同样受晶界、边界等散射过程的影响, 有类似的物理规律, 因此本文重点以金属薄膜为例进行讨论和总结. 纳米尺度下, 金属的导热和导电现象会出现尺寸效应, 即金属热导率和电导率会随尺寸下降而下降. 理论上一般认为这是由于表面和晶界对电子和声子的散射^[50,51]. 1970 年 Mayadas 和 Shatzkes^[52]建立了金属纳米薄膜中电导率尺寸效应的模型(MS 模型), 这一模型后续也被用于理解金属纳米结构中热导率的尺寸效应. Nath 等^[53]和 Kelemen^[54]分别于 1974 和 1976 年测量了铜纳米薄膜的热导率, 发现了热导率的尺寸效应. 1994 年 Kumar 等^[55]通过求解玻尔兹曼方程发现, 室温下只存在边界散射效应时, 在薄膜厚度低于电子平均自由程 15 倍时出现尺寸效应; 当存在晶界散射时, 这一临界尺寸变为电子平均自由程的 50 倍. 21 世纪初, Feng 等^[56]通过统计方法计算了表面和晶界对电子的散射过程, 计算了 300 K 下铜纳米薄膜热导率随厚度的关系, 结果与 Nath 等^[53]、Kelemen^[54]的测量结果, 以及 Kumar 等^[55]的计算结果进行了对比, 如图 5(a) 所示计算和实验的规律一致且吻合良好. 最近 20 年金纳米结构热导率在实验上受到了更多的关注. 2006 年, Zhang 等^[57]采用直流电加热法测量了 21—37 nm 厚的金纳米薄膜热导率, 发现 300 K 下的热导率为 160—180 W/(m·K). 这一工作将测得的电导率和热导率分别拟合 MS 模型, 发现晶界散射系数在传热过程中为 0.25, 而在导电过程中则为 0.7. 2013 年 Lin 等^[58]测量了 6.4 nm 厚的金薄膜的热导率, 发现热导率为 61.9 W/(m·K), 相比体块结构下降了 80.5%. 2019 年 Sawtelle 和 Reed^[59]结合了自热法和自由电子模型, 通过实验测量的电导率估算了直径为 24, 40, 53 nm 的金纳米线的热导率, 发现 200 K 下热导率在 6—18 W/(m·K) 范围内. 2020 年 Mason 等^[60]测量了 19—372 nm 厚度的金薄膜热导率, 发现室温热导率范围约为 70—95 W/(m·K). 除上述热导率尺寸效应的研究外, 也有较多关于金属纳米结构中的洛伦兹数的研究.

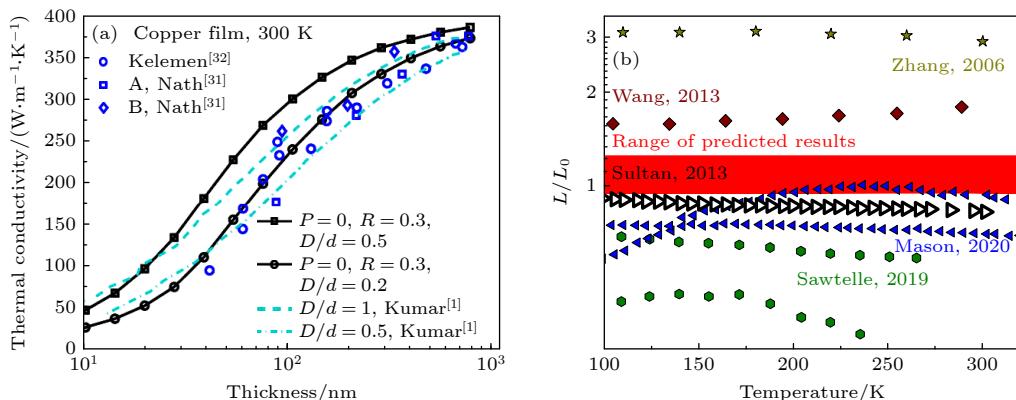


图 5 (a) 铜纳米薄膜理论计算与实验测量的热导率和薄膜厚度的关系^[56]; (b) 金纳米薄膜的理论计算与实验的归一化洛伦兹数随温度的变化^[67]

Fig. 5. (a) Calculated and experimental thermal conductivity with respect to thickness of copper nanofilm^[56]; (b) the calculated and experimental normalized Lorenz number for gold^[67].

研究。2010 年 Stojanovic 等^[61]将 MS 模型扩展到方形金属纳米线上, 定量地研究了常见金属纳米线的热导率和洛伦兹数, 发现洛伦兹数偏离标准值是声子和非弹性声电散射共同导致的。例如, 室温下截面边长为 300 nm 的金纳米线的导热中声子贡献约为 2%, 其洛伦兹数接近标准值; 而同样尺寸的钨纳米线中声子导热贡献占比约为 30%, 其洛伦兹数高于标准值约 40%。近年来金属纳米结构中洛伦兹数的实验测量结果出现较大差异。以金纳米薄膜和银纳米线的洛伦兹数测量值为例, 2006—2020 年间大量的实验测量工作既发现了高于标准洛伦兹数的结果^[57,58,62,63], 也发现了低于标准值的结果^[21,59,60,64–66]。2021 年 Hu 等^[67]通过第一性原理计算得到了金和钨中电子和声子模态的导热物性, 结合玻尔兹曼方程, 对金和钨纳米结构的洛伦兹数进行了计算分析。研究发现室温下金纳米薄膜的声子导热贡献占比低于 3%, 洛伦兹数如图 5(b) 中红色区域所示, 相对标准值的偏离小于 40%。研究同时发现金和钨纳米结构中声子对热导率的贡献比例与体块中的数值差异很大, 且对温度、尺寸敏感。以上关于导热和洛伦兹数的研究结果均为悬空金属纳米结构的实验和理论结果, 然而很多实际应用中, 金属纳米结构需要在基底上使用。2013 年 Lin 等^[58]实验上发现基底可导致金纳米薄膜热导率下降 60%。2021 年 Dong 等^[68]发现在相同基底上厚度分别为 40.5, 66.3, 115.8 nm 的金纳米薄膜之间电导率的差异接近一个数量级, 而热导率间的差异相对较小, 室温下分别为 87, 90, 105 W/(m·K), 尺寸效应相对较弱。综上所述, 铜、金、银纳米结构中

热导率的尺寸效应得到了大量实验和理论的研究, 且现有理论可用来定量解释热导率随尺寸的变化。而金属纳米结构洛伦兹数的实验测量结果出现了较大差异。理论计算表明金属纳米结构的洛伦兹数与声子对导热的贡献占比和非弹性散射有关, 其中金纳米薄膜的结果表明其洛伦兹数相对标准值的偏离应在 40% 以内。此外, 基底可进一步降低金属纳米结构的热导率, 并可影响电导率和热导率的尺寸效应。

二维材料的成功制备使其应用成为了可能, 二维材料导热的研究也逐渐成为一个重要的方向。其中二维金属导热的研究仍在起步阶段。2019 年 Huang 等^[69]对二维金属性 Nb₂C 进行了计算并发现声电散射可使声子热导率下降数倍。研究表明其声电散射作用可以反映在声电散射相空间上。2022 年 Wang 等^[70]对 3 种金属性 MXene, 即 Ti₂CF₂, Ti₂CCl₂, 和 Ti₂C(OH)₂ 进行了计算分析。研究发现热导率范围为 54.3—104.7 W/(m·K)。电子和声子作为热载流子在导热中同等重要, 其中电子导热对总热导率的贡献范围为 37%—61%。另一方面, 二维金属性 MXene 在室温下的洛伦兹数要低于标准值 15% 左右。整体上看, 现有的二维金属导热的研究仍较为零散, 有待进一步的探究。

3 温度、压强与磁场对金属导热的影响

3.1 温度的影响

金属作为重要的结构材料, 在不同的温度环境下均有着广泛的应用。温度会改变电子和声子的分

布, 影响传热中的载流子的相互作用, 从而影响热导率。定性理论分析^[6,71]与大量定量计算^[24,33,36,42,44,45]均表明, 200—800 K下金属中的电子热导率趋于定值。这是因为随温度上升, 电子比热容的上升与弛豫时间的下降对电子导热的作用相互抵消。金属中声子导热随温度的变化则如上文讨论, 体现在三声子散射和声电散射的相对强弱上。近年来金属导热受温度影响的重要成果体现在威德曼-弗朗兹定律上。威德曼-弗朗兹定律在室温及以上区域是基本成立的, 且多数金属的洛伦兹数相对标准值的偏差低于 10%^[6,34]。然而在中低温区洛伦兹数随温度的变化规律则较为复杂。实验上发现金属铜的洛伦兹数在 0 K附近接近标准值, 而在 10—100 K附近则可低于标准值 60%^[20,72]。0 K附近因电子散射过程中电子与杂质的弹性散射占主导, 因而测得的洛伦兹数与标准值是一致的。为揭示洛伦兹数在中低温下偏离标准值的机理, 2019 年 Lavasani 等^[71]结合了德拜模型与理论推导, 考虑电子在导电和导

热过程中不同的散射机制, 对两种过程使用了不同的计算形式。结果表明, 在室温及以上的温度范围内, 导热和导电过程的电子散射率是相同的; 然而在低于这一温度时, 导热过程的电子散射率要高于导电过程的电子散射率。因此得到了中低温区洛伦兹数低于标准值的结论, 与实验相一致。但是, 上述结论为定性的推导和计算, 无法和实验结果进行直接定量对比。2020 年 Li 等^[26]通过第一性原理计算对洛伦兹数的温度变化规律进行了定量分析。该研究推导了散射率计算的公式, 并认为计算电导率时应使用动量弛豫时间 (MRTA), 而计算热导率时应使用能量弛豫时间 (ERTA)。通过对 ERTA, MRTA 以及 Allen 模型计算得到的铝和铜的电导率和热导率, 证实了上述弛豫时间的选取方法。其中铜的电导率和热导率如图 6(a), (b) 所示, 与实验值吻合良好。值得注意的是, 是中低温下铜的电子热导率和电导率均随温度降低迅速增大, 这是因为低温时, 电子的弛豫时间随温度下降而急剧

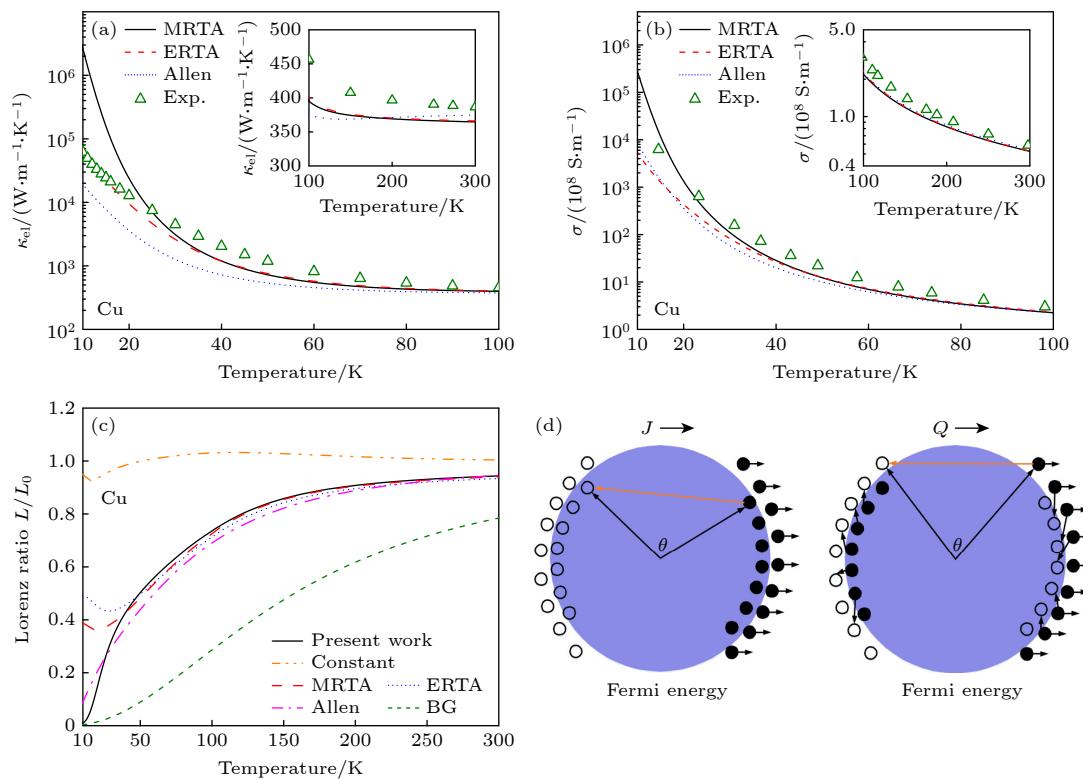


图 6 考虑 MRTA, ERTA 计算的铜的 (a) 电子热导率和 (b) 电导率^[26]与 Allen 模型结果的对比; (c) MRTA, ERTA, 常弛豫时间近似 (Constant), Allen 模型和布洛赫-格律乃森模型 (BG) 计算得到的铜的洛伦兹数的对比^[26]; (d) 外电场与温度梯度下电子的散射过程, 实心圆代表占据的电子态, 空心圆代表未占据的电子态^[26]

Fig. 6. Calculated (a) electron thermal conductivity and (b) electrical conductivity of copper considering MRTA and ERTA^[26], compared with the results from the Allen model; (c) the calculated Lorenz number by MRTA, ERTA, constant relaxation time approximation (Constant), Allen model, and the BG model for Cu^[26]; (d) the electron scattering in an electric field and under a temperature gradient^[26]. Note that the filled small spheres are occupied electron states and the open small spheres are unoccupied electron states.

上升。据此,该研究获得了如图 6(c) 所示的中低温下洛伦兹数随温度的变化关系,并对比了不同方法和模型的结果。进一步,该研究对电子的散射过程进行了分析。如图 6(d) 所示,大散射角度的弹性散射与小散射角度的非弹性散射均可对电子热输运产生影响,但只有大散射角度的弹性散射会对电输运产生明显影响。中低温下激发的声子多为低频长波声子,因此电声散射中非弹性散射的比例上升。电流输运相较于热流输运受到的抑制作用较小,导致洛伦兹数低于标准值。综上所述,在中低温区,金属中电输运与电子热输运过程中不同的散射机制导致了洛伦兹数相对标准值的偏离。这一结论在理论模型与单质金属的计算中得到了验证。

3.2 压强的影响

作为重要的结构材料,金属在很多工程中往往工作在应力条件下。此外,压强作为调控金属热导率的重要手段也受到了广泛的关注和研究。然而在实验上,维持高压强的同时进行热导率测量有一定的困难。金刚石砧腔测量法可在数百个 GPa 下进行实验,但实验复杂,实现难度大^[73]。理论研究方面,在 20 世纪 80 年代,Bohlin^[74] 考虑金属中的电子导热,通过结合布洛赫-格律奈森模型和自由电子气模型推导了金属热导率随压强的变化规律。研究发现增大压强会减弱电声相互作用,电子弛豫时间延长,导致热导率增大。2019 年 Giri 等^[75] 通过第一性原理计算电声相互作用及电子热导率,发现符合自由电子气模型的金属铝、金、银的热导率

随压强增大而增大,这和 Bohlin 模型的规律一致。2019 年 Gomi 和 Yoshino^[76] 基于柯林加-科恩-罗斯托克 (KKR) 格林函数方法结合相干势近似 (CPA),使用久保-格林伍德方法计算了大量不同温度与压强下金属铂的电子热导率,并发现了其热导率随压强增大而增大。虽然这种计算方法可以快速获得大量的数据,然而难以获得诸如电子弛豫时间等微观信息。2022 年 Giri 等^[77] 进一步研究了铝的热导率受压强的影响。如图 7(a) 所示,研究发现随压强增大,铝的热导率增大速度要快于高导热半导体材料。此外,铝在 200 GPa 的压强下热导率可达 2000 W/(m·K)。为了更好理解压强对导热的影响机制,2022 年 Zhang 等^[78] 通过第一性原理对 3 种典型金属铝、钨、铂的热导率-压强关系进行了对比分析。研究发现虽然铝、钨、铂的电子热导率均随压强增大而增大,但机制并不相同。如图 7(b) 所示,对于铝这种自由电子金属而言,电子热导率随压强增加的原因是电声相互作用强度下降。铂和钨是费米能上 d 轨道电子较多的过渡金属,图 7(c) 以钨为例进行分析。首先,钨的热导率随压强增大的增幅不如铝大。其次,钨电子热导率随压强上升的主要原因是电子群速度的上升;而电子弛豫时间随压强变化有限,表明电声相互作用不是主导因素。此外,这一工作发现铝、钨、铂的声子热导率同样随压强上升而上升。综上所述,自由电子金属的热导率随压强增加的增幅较大,原因是电声相互作用减弱;费米能包含 d 轨道电子的过渡金属的热导率随压强增大的增幅较小,上述机制与电子群速度

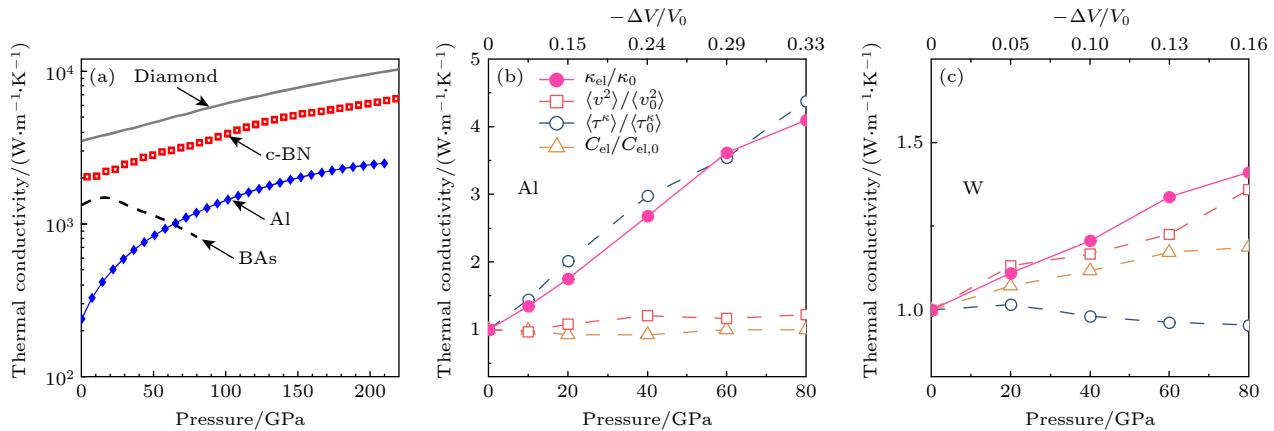


图 7 (a) 铝、金刚石、立方氮化硼和砷化硼的热导率随压强的变化^[77]; (b) 铝、(c) 钨的归一化电子热导率、平均速度、弛豫时间和总电子比热容随压强的变化^[78]

Fig. 7. (a) Variation of thermal conductivity with pressure for aluminum, diamond, cubic boron nitride, and boron arsenide^[77]; normalized electron thermal conductivity, averaged velocity, relaxation time, and total electron specific heat of (b) Al and (c) W as a function of pressure^[78].

有较大关联。非单质金属以及费米能包含更复杂轨道成分的金属中，热导率随压强的变化关系有待进一步的探索研究。

3.3 磁场的影响

磁场对金属热导率的影响在实验上有重要意义。一般认为在 2—60 K 附近的温区，施加数个特斯拉的磁场可显著抑制电子热导率，同时对声子的热导率影响可忽略。因此在实验上可以通过这种方式来分离出金属中的声子热导率^[12,72]。为研究磁场强度对电子热输运的影响，1996 年 Gregg 和 Haar^[19] 基于自由电子气模型进行了推导，并获得了金属中电子热导率随磁场强度变化的解析关系式，结果表明电子的热导率随磁场强度增大而下降，且磁场对电子导热的抑制效果与电子平均自由程正相关。在平均自由程 10—100 Å 的情况下，数个特斯拉的磁场强度对电子热导率的作用可忽略。2016 年 Yang 等^[79] 通过第一性原理计算定量研究了磁场对铝、镍和铌的电子弛豫时间和热输运性质的影响。研究发现铝、镍、铌在布里渊区中的电子分布存在差异，因此电子与磁场的耦合方式不同。此外，铌中出现了电子热导率随磁场强度增大而增大的现象，300 K 下，500 T 的磁场强度可使电子热导率上升 10%。以上研究表明如果通过磁场改变金属的热导率，磁场强度需达到数个特斯拉。这一强度接近实验极限，未来的研究中若能降低这一磁场强度将会带来重大的应用价值。

4 总结与展望

基于理论与计算的进步，现阶段对金属导热的定量研究进展迅速。本文梳理了近年来金属导热理论与计算领域的重要研究成果。金属中声子对导热的贡献比例一直是研究的重点，研究发现这与金属类型有一定的关联。金、银、铜、铝中声子对导热的贡献比例低于 5%，部分过渡金属中这一比例可超过 10%。金属间化合物的声子导热贡献比例与原胞的复杂度有关，而金属性陶瓷中声子导热贡献占比约为 26%—74%。声子导热的贡献使得部分金属如钨、氮化钛的洛伦兹数高于标准值。另一方面，金属的洛伦兹数在室温以上普遍趋于稳定，而在中低温区时则低于标准值，这是因为电输运与电子热输运过程中有不同的散射机制。纳米尺度下金属导热的情况十分复杂，涉及晶界、边界等多种散射机

制，仍处于探索与发掘阶段。压强与磁场对金属热导率的影响与具体的电子结构有较大关联，相关的理论计算近年来得到了一定程度的发展，为未来金属热导率调控设计等方面提供了支撑。在未来的金属导热研究中，实验上，更好地合成与表征金属纳米材料的导热性质仍是重点研究方向。理论上，除了上述的内容与方向，以下内容可能成为未来研究的重点。

金属导热中的物理问题。
 1) 金属中热载流子的多种散射机制。除了电声散射和三声子散射外，热载流子还会受到各种界面、边界、位错、原子空位等的散射作用。建立计算理论框架与探索相关机制一方面可以扩展现有的金属导热基础理论，另一方面也可揭示不同加工工艺对金属导热的影响机理。
 2) 非晶金属的导热机制。非晶金属又名金属玻璃，其硬度强度相较晶态金属更高。但因这种金属的原子为无序堆积，常规基于平面波展开的第一性原理计算难以施加周期性边界条件。另一方面，非晶半导体的导热理论已有很大发展，并建立了基于热传播子、局域子等的多种导热理论。然而这些机制均针对原子的振动，非晶金属中的电子如何传递，如何与原子振动相互作用而影响导热有待进一步探讨。
 3) 液态金属的导热机制。液态金属是重要的核电冷却剂，相较固态金属而言其原子间作用力更弱。在这种情况下，电子在输运中受到的散射机制、原子运动对导热的贡献，以及不同掺杂对液态金属导热的影响机制均有待进一步探索。

金属导热的设计与调控问题。
 1) 合金的导热设计。合金相较纯金属强度更高，是应用广泛的结构材料。但合金的热导率相较纯金属低，这是因为合金中有很多的析出低热导率第二相、且热载流子会受到固溶原子以及界面的散射。平衡设计高强度和高导热合金是有较大应用价值的学科交叉问题。
 2) 微纳结构的金属导热设计。微纳尺度热测量实验、芯片内传热等情况，需要考虑其中金属导热的尺寸效应。虽然已有大量实验理论工作开展，但是如何通过设计微观结构，调整金属内部成分等方式控制尺寸效应，按需求设计整体金属的导热研究现在仍开展较少，这一设计问题有待进一步研究。

参考文献

- [1] Shah R K, Sekulic D P 2003 *Fundamentals of Heat Exchanger Design* (John Wiley & Sons)
- [2] Rajagopal M C, Chang H C, Man T, Kuntumalla G, Meng Y,

- Sundar S, Zhao H, Salapaka S, Shao C, Ferreira P, Miljkovic N, Sinha S 2019 *Int. J. Heat Mass Transf.* **143** 118497
- [3] Lu D, Wong C 2009 *Materials for Advanced Packaging* (Vol. 181) (Springer)
- [4] Kittel C 2005 *Introduction to Solid State Physics* (New York: John Wiley & Sons, inc)
- [5] Jones W, March N H 1985 *Theoretical Solid State Physics* (Vol. 35) (Courier Corporation)
- [6] Tritt T M ed 2005 *Thermal Conductivity: Theory, Properties, and Applications* (New York: Springer)
- [7] Franz R, Wiedemann G 1853 *Ann. Phys.* **165** 497
- [8] Lorenz L 1881 *Ann. Phys.* **249** 422
- [9] Drude P 1900 *Ann. Phys.* **306** 566
- [10] Sommerfeld A 1928 *Z. Phys.* **47** 43
- [11] Butler W H, Williams R K 1978 *Phys. Rev. B* **18** 6483
- [12] Lang H N D, Kempen H V, Wyder P 1978 *J. Phys. F* **8** L39
- [13] Williams R K, Yarbrough D W, Masey J W, Holder T K, Graves R S 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 5167
- [14] Williams R K, Graves R S, Hebble T L, McElroy D L, Moore J P 1982 *Phys. Rev. B* **26** 2932
- [15] Williams R K, Butler W H, Graves R S, Moore J P 1983 *Phys. Rev. B* **28** 6316
- [16] Klemens P G (Seitz F, Turnbull D ed) 1958 *Solid State Physics* (Academic Press) pp1–98
- [17] Slack G A (Ehrenreich H, et al. ed) 1979 *Solid State Physics* (Academic Press) pp1–71
- [18] Klemens P G, Williams R K 1986 *Int. Metals Rev.* **31** 197
- [19] Gregg J F, Haar D t 1996 *Eur. J. Phys.* **17** 303
- [20] White G K, Tainsh R J 1960 *Phys. Rev.* **119** 1869
- [21] Wang J L, Wu Z Z, Mao C K, Zhao Y F, Yang J K, Chen Y F 2018 *Sci. Rep.* **8** 4862
- [22] Poncé S, Margine E R, Verdi C, Giustino F 2016 *Comput. Phys. Commun.* **209** 116
- [23] Liu T H, Zhou J, Li M, Ding Z, Song Q, Liao B, Fu L, Chen G 2018 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **115** 879
- [24] Chen Y, Ma J, Li W 2019 *Phys. Rev. B* **99** 020305
- [25] Jain A, McGaughey A J H 2016 *Phys. Rev. B* **93** 081206
- [26] Li S, Tong Z, Zhang X, Bao H 2020 *Phys. Rev. B* **102** 174306
- [27] Bao H, Chen J, Gu X, Cao B 2018 *ES Energy Environ.* **1** 16
- [28] Broido D A, Malorny M, Birner G, Mingo N, Stewart D A 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 231922
- [29] Walker C T, Pohl R O 1963 *Phys. Rev.* **131** 1433
- [30] Bardeen J, Pines D 1955 *Phys. Rev.* **99** 1140
- [31] Rice T M 1965 *Ann. Phys.* **31** 100
- [32] Langer J S 1960 *Phys. Rev.* **120** 714
- [33] Giri A, Tokina M V, Prezhdo O V, Hopkins P E 2020 *Mater. Today Phys.* **12** 100175
- [34] Tong Z, Li S, Ruan X, Bao H 2019 *Phys. Rev. B* **100** 144306
- [35] Wang Y, Lu Z, Ruan X 2016 *J. Appl. Phys.* **119** 225109
- [36] Wen S, Ma J, Kundu A, Li W 2020 *Phys. Rev. B* **102** 064303
- [37] Li S, Tong Z, Shao C, Bao H, Frauenheim T, Liu X 2022 *The J. Phys. Chem. Lett.* **13** 4289
- [38] Su C, Li D, Luo A A, Ying T, Zeng X 2018 *J. Alloys Compd.* **747** 431
- [39] Tong Z, Bao H 2018 *Int. J. Heat Mass Transf.* **117** 972
- [40] Liu Y Z, Zheng B C, Jian Y X, Zhang L, Yi Y L, Li W 2020 *Intermetallics* **124** 106880
- [41] Daeumer M, Sandoval E D, Azizi A, Bagheri M H, Bae I T, Panta S, Koulakova E A, Cotts E, Arvin C L, Kolmogorov A N, Schiffres S N 2022 *Acta Mater.* **227** 117671
- [42] Wang A, Li S, Ying T, Zeng X, Bao H 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 015101
- [43] Li C, Ravichandran N K, Lindsay L, Broido D 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 175901
- [44] Kundu A, Ma J, Carrete J, Madsen G K H, Li W 2020 *Mater. Today Phys.* **13** 100214
- [45] Li S, Wang A, Hu Y, Gu X, Tong Z, Bao H 2020 *Mater. Today Phys.* **15** 100256
- [46] Yang J Y, Zhang W, Xu C, Liu J, Liu L, Hu M 2020 *Int. J. Heat Mass Transf.* **152** 119481
- [47] Kundu A, Yang X, Ma J, Feng T, Carrete J, Ruan X, Madsen G K H, Li W 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 115901
- [48] Liu Z, Luo T 2021 *Appl. Phys. Lett.* **118** 043102
- [49] Moore A L, Shi L 2014 *Mater. Today* **17** 163
- [50] Cahill D G, Braun P V, Chen G, Clarke D R, Fan S, Goodson K E, Keblinski P, King W P, Mahan G D, Majumdar A, Maris H J, Phillpot S R, Pop E, Shi L 2014 *Appl. Phys. Rev.* **1** 011305
- [51] Chen G 2005 *Nanoscale Energy Transport and Conversion: A Parallel Treatment of Electrons, Molecules, Phonons, and Photons* (Oxford: Oxford University Press)
- [52] Mayadas A F, Shatzkes M 1970 *Phys. Rev. B* **1** 1382
- [53] Nath P, Chopra K L 1974 *Thin Solid Films* **20** 53
- [54] Kelemen F 1976 *Thin Solid Films* **36** 199
- [55] Kumar S, Vratis G C 1994 *J. Heat Transfer* **116** 28
- [56] Feng B, Li Z, Zhang X 2009 *Thin Solid Films* **517** 2803
- [57] Zhang Q G, Cao B Y, Zhang X, Fujii M, Takahashi K 2006 *Phys. Rev. B* **74** 134109
- [58] Lin H, Xu S, Li C, Dong H, Wang X 2013 *Nanoscale* **5** 4652
- [59] Sawtelle S D, Reed M A 2019 *Phys. Rev. B* **99** 054304
- [60] Mason S J, Wesenberg D J, Hojem A, Manno M, Leighton C, Zink B L 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 065003
- [61] Stojanovic N, Maithripala D H S, Berg J M, Holtz M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 075418
- [62] Wang H, Liu J, Zhang X, Takahashi K 2013 *Int. J. Heat Mass Transf.* **66** 585
- [63] Cheng Z, Liu L, Xu S, Lu M, Wang X 2015 *Sci. Rep.* **5** 10718
- [64] Kojda D, Mitdank R, Handweg M, Mogilatenko A, Albrecht M, Wang Z, Ruhhammer J, Kroener M, Woias P, Fischer S F 2015 *Phys. Rev. B* **91** 024302
- [65] Zhao Y, Fitzgerald M L, Tao Y, Pan Z, Sauti G, Xu D, Xu Y-Q, Li D 2020 *Nano Lett.* **20** 7389
- [66] Avery A D, Mason S J, Bassett D, Wesenberg D, Zink B L 2015 *Phys. Rev. B* **92** 214410
- [67] Hu Y, Li S, Bao H 2021 *Phys. Rev. B* **103** 104301
- [68] Dong L, Wu X, Hu Y, Xu X, Bao H 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 027202
- [69] Huang Y, Zhou J, Wang G, Sun Z 2019 *J. Am. Chem. Soc.* **141** 8503
- [70] Wang A, Li S, Zhang X, Bao H 2022 *Phys. Rev. Mater.* **6** 014009
- [71] Lavasani A, Bulmash D, Das Sarma S 2019 *Phys. Rev. B* **99** 085104
- [72] Yao M, Zebarjadi M, Opeil C P 2017 *J. Appl. Phys.* **122** 135111
- [73] Mao H K, Chen X J, Ding Y, Li B, Wang L 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 015007
- [74] Bohlin L 1976 *Solid State Commun.* **19** 389
- [75] Giri A, Gaskins J T, Li L, Wang Y S, Prezhdo O V, Hopkins P E 2019 *Phys. Rev. B* **99** 165139
- [76] Gomi H, Yoshino T 2019 *Phys. Rev. B* **100** 214302
- [77] Giri A, Karna P, Hopkins P E 2022 *J. Phys. Chem. Lett.* **13** 10918
- [78] Zhang X, Li S, Wang A, Bao H 2022 *Phys. Rev. B* **106** 094313
- [79] Yang J, Yue S, Hu M 2016 *Phys. Rev. B* **94** 235153

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Recent advances in thermal transport theory of metals^{*}

Wang Ao¹⁾²⁾ Sheng Yu-Fei¹⁾²⁾ Bao Hua^{1)2)†}

1) (*Global Institute of Future Technology, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China*)

2) (*University of Michigan-Shanghai Jiao Tong University Joint Institute, Shanghai 200240, China*)

(Received 17 July 2023; revised manuscript received 19 September 2023)

Abstract

Metal is one of the most widely used engineering materials. In contrast to the extensive research dedicated to their mechanical properties, studies on the thermal conductivity of metals remain relatively rare. The understanding of thermal transport mechanisms in metals is mainly through the Wiedemann-Franz Law established more than a century ago. The thermal conductivity of metal is related to both the electron transport and the lattice vibration. An in-depth understanding of the thermal transport mechanism in metal is imperative for optimizing their practical applications. This review first discusses the history of the thermal transport theory in metals, including the Wiedemann-Franz law and models for calculating phonon thermal conductivity in metal. The recently developed first-principles based mode-level electron-phonon interaction method for determining the thermal transport properties of metals is briefly introduced. Then we summarize recent theoretical studies on the thermal conductivities of elemental metals, intermetallics, and metallic ceramics. The value of thermal conductivity, phonon contribution to total thermal conductivity, the influence of electron-phonon interaction on thermal transport, and the deviation of the Lorenz number are comprehensively discussed. Moreover, the thermal transport properties of metallic nanostructures are summarized. The size effect of thermal transport and the Lorenz number obtained from experiments and calculations are compared. Thermal transport properties including the phonon contribution to total thermal conductivity and the Lorenz number in two-dimensional metals are also mentioned. Finally, the influence of temperature, pressure, and magnetic field on thermal transport in metal are also discussed. The deviation of the Lorenz number at low temperatures is due to the different electron-phonon scattering mechanisms for thermal and electrical transport. The mechanism for the increase of thermal conductivity in metals induced by pressure varies in different kinds of metals and is related to the electron state at the Fermi level. The effect of magnetic field on thermal transport is related to the coupling between the electron and the magnetic field, therefore the electron distribution in the Brillouin zone is an important factor. In addition, this review also looks forward to the future research directions of metal thermal transport theory.

Keywords: thermal conductivity, electron thermal conductivity, phonon thermal conductivity, Lorenz number

PACS: 72.15.Eb, 74.25.fc, 63.20.kd, 73.63.-b

DOI: [10.7498/aps.73.20231151](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231151)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52122606).

† Corresponding author. E-mail: hua.bao@sjtu.edu.cn

专题: 热传导及其相关交叉领域研究 • 封面文章

非封闭式热斗篷热防护特性^{*}

苗钰钊 唐桂华[†]

(西安交通大学能源与动力工程学院, 热流科学与工程教育部重点实验室, 西安 710049)

(2023年8月2日收到; 2023年9月13日收到修改稿)

高超声速飞行器在飞行过程中产生大量气动热, 高效的热防护技术对保证其正常工作具有重要意义。本文基于热超材料调控热流传播路径思想, 针对高超声速飞行器头锥, 采用坐标变换法设计非封闭式点变换热斗篷及简化近似的多层结构。COMSOL 数值模拟研究表明, 两种结构均有效实现导热和辐射热流的热绕流, 使部分热量沿头锥表面传播, 头锥前端温度显著降低, 机体升温速率减缓。但其热防护性能的提升要求材料固相和辐射热导率低于原隔热材料。进一步设计了非封闭式域变换热斗篷, 材料固相和辐射热导率均可高于原隔热材料。模拟结果表明, 热绕流显著提升了域变换热斗篷的热防护能力, 相比于纯隔热材料, 头锥前端温度降低达 100 K, 机体降温达 10 K, 展现出重要的热防护应用潜力。

关键词: 热超材料, 坐标变换, COMSOL, 热防护

PACS: 44.10.+i, 44.40.+a, 81.05.Xj

DOI: [10.7498/aps.73.20231262](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231262)

1 引言

当高超声速飞行器以高超声速长航时飞行时, 飞行器表面与周围空气发生剧烈摩擦, 头锥和前缘等尖锐部件气动热高达几十 MW/m² 量级, 给飞行器的安全设计带来巨大挑战^[1,2]。发展先进的热防护系统, 满足飞行器外层防热、内层隔热的基本需求, 对于飞行器结构稳定及内部仪器设备的安全运行至关重要^[3]。根据防热原理不同, 热防护系统可分为被动防热、半被动防热和主动防热三类。发汗冷却^[4-6]、热管冷却^[7,8]等主动/半主动防热技术具有优越的热防护性能, 但其结构和技术复杂, 仍处于探索阶段。以隔热材料为代表的被动防热技术可靠, 结构简单, 在热防护系统中使用最为广泛。面对严酷的热力学环境, 高速飞行器所用的隔热材料必须具有轻质、高效及耐高温等特点^[9]。王飞等^[10]设计了“耐高温层+隔热缓冲层+核心隔热层”的多功能多层次一体化热防护结构。由外至内, 耐高温

层抵御高温冲击, 维持气动外形, 隔热缓冲层进一步降低温度, 核心隔热层具有极佳的隔热性能。气凝胶是目前隔热性能最好的固体材料^[11], 且满足高超声速飞行器的轻质化要求^[12], 可用作核心隔热层材料。然而, 高温辐射传热使气凝胶等效热导率显著增大^[13]。面对高超声速飞行器的极端气动加热环境, 同时抑制向机体的导热及辐射传热是提升热防护性能的有效方法, 这对隔热材料提出了新的要求与挑战。

近年来, 热超材料以其卓越的热流调控能力, 得到了快速发展^[14-18]。基于变换热学设计的热隐身斗篷, 可以使热流沿斗篷绕过内部区域后恢复原来的传播路径, 理论上既可以阻止热量向内部传递, 又可以避免对外部温度场的扰动, 展现重要热防护应用潜力。针对热传导, Narayana 等^[19]构建了环形多层结构热隐身斗篷, 数值和实验研究发现其隔热性能优于组成材料聚酰亚胺。2020 年, Xu 等^[20]提出同时控制导热及辐射传热的热变换理论, 为设计热隐身斗篷同时控制导热和辐射传热进而

* 国家自然科学基金(批准号: 52130604, 51825604)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: gltang@mail.xjtu.edu.cn

提升热防护性能提供了理论基础.

然而, 热隐身斗篷的研究多局限于简单几何结构^[21,22], 且要求完全包裹被保护区域. 对于高超声速飞行器, 其复杂外形增大了设计难度, 难以采用整体包裹式的热隐身斗篷实现热防护. 因此, 以高超声速飞行器头锥为研究对象, 本文提出非封闭式热斗篷, 作为核心隔热层的防护材料, 利用导热及辐射的高温热流特性, 实现复杂几何区域热防护, 通过有限元软件 COMSOL Multiphysics 进行数值仿真验证, 为高超声速飞行器的热防护提出了新的途径.

2 模型与设计方法

在不改变飞行器气动外形的前提下, 为提升头锥热防护性能, 本文围绕气凝胶构成的核心隔热层进行坐标变换设计非封闭式热斗篷. 气凝胶作为参与性辐射介质, 热辐射在气凝胶骨架结构上会发生吸收、发射和散射等过程^[13]. 由于满足光学厚介质假设, 气凝胶内部的辐射传热可用 Rosseland 模型描述^[23]. 基于傅里叶导热模型与 Rosseland 辐射模型, Xu 等^[20]通过坐标变换实现对导热和辐射热流的同时控制, 变换参数为

$$\begin{aligned} (\rho C)' &= \rho_0 C_0 / \det \mathbf{A}, \quad n' = n_0, \\ \beta' &= \mathbf{A}^{-\tau} \beta_0 \mathbf{A}^{-1} \det \mathbf{A}, \quad \kappa' = \mathbf{A} \kappa_0 \mathbf{A}^{\tau} / \det \mathbf{A}, \end{aligned} \quad (1)$$

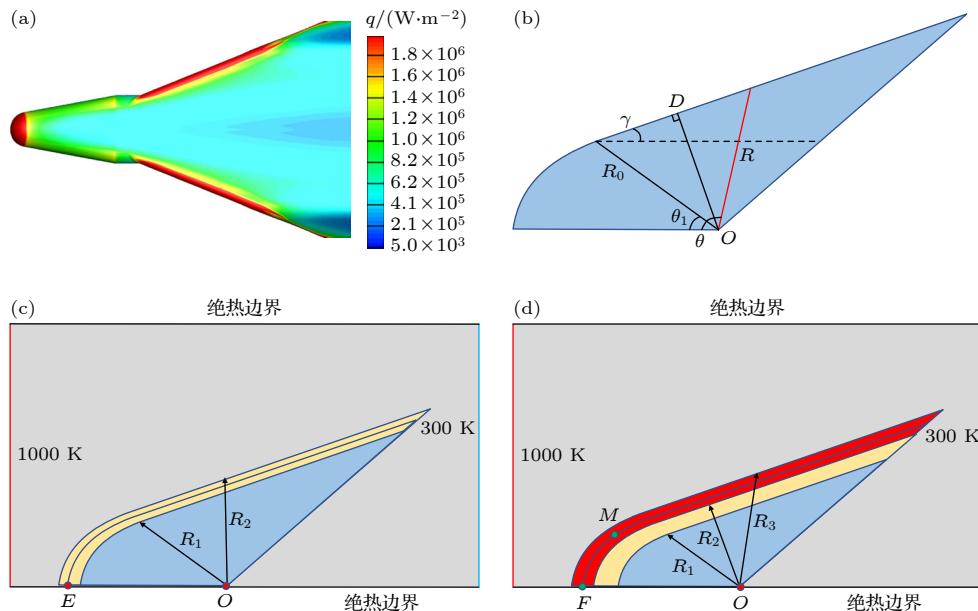


图 1 几何变换与计算模型 (a) 高超声速飞行器壁面热流分布; (b) 头锥二维简化模型; (c) 点变换热斗篷; (d) 域变换热斗篷

Fig. 1. Schematic of thermal cloak and computational model: (a) Heat flux of hypersonic vehicle surface; (b) simplified geometry of nose cone; (c) point transformation thermal cloak; (d) region transformation thermal cloak.

其中, κ 是热导率, β 是 Rosseland 平均消光系数, n 是相对折射率, ρ 和 C 分别是密度和热容, 下标 0 表示变换前的均质材料, \mathbf{A} 为雅克比变换矩阵^[24], \mathbf{A}^{τ} 表示矩阵 \mathbf{A} 的转置.

高超声速飞行器飞行时的壁面热流分布情况如图 1(a) 所示, 头锥和机翼前缘的壁面热流密度最大^[25]. 以头锥热防护为研究目标, 本文设计了如图 1(b) 所示的二维简化模型. 头锥外形可视为由椭圆曲线与倾斜直线相连而成, 因此, 以 θ_1 为分界, 在极坐标系中对头锥外形曲线作分段描述. 对于倾斜直线段, 分别以分界处椭圆极径长度 R_0 与倾斜直线的极径长度 R 表示辅助线 OD 的长度, 根据几何关系, 得到如下等式:

$$R_0 \sin(\gamma + \theta_1) = R \cos[\theta - (\pi/2 - \gamma)]. \quad (2)$$

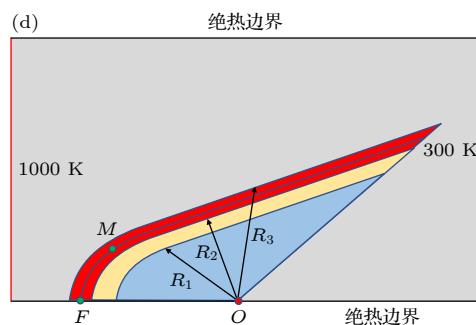
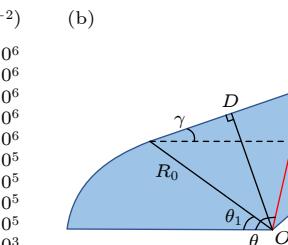
于是, 头锥曲线在极坐标系中可表示为

$$R = \begin{cases} \frac{ab}{\sqrt{a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta}}, & 0 \leq \theta \leq \theta_1, \\ \frac{R_0 \sin(\gamma + \theta_1)}{\cos[\theta - (\pi/2 - \gamma)]}, & \theta_1 < \theta \leq \theta_2, \end{cases} \quad (3)$$

式中, a, b 分别是椭圆的长短轴, R_0 表示椭圆段末端的极径长度, θ_1 和 θ_2 分别为倾斜段起点和末端的极角, γ 为倾斜段与水平方向的夹角.

基于宏观热流调控思想, 作如下点变换:

$$r' = \frac{R_2 - R_1}{R_2} r + R_1, \quad \theta' = \theta, \quad (4)$$



其中, 头锥曲线 R_2 由(3)式表达, $a = 0.2 \text{ m}$, $b = 0.1 \text{ m}$, $\gamma = 15^\circ$, $\theta_1 = 40^\circ$, $\theta_2 = 144^\circ$, $R_1 = 0.8R_2$. 如图1(c)所示, 区域 Ω_2 ($R_1 < r < R_2$) 表示由气凝胶隔热材料构成的核心隔热层, 经过坐标变换, 将头锥区域 Ω_1 ($0 < r < R_2$) 压缩为区域 Ω_2 ($R_1 < r < R_2$), 替代气凝胶材料形成非封闭热斗篷, 其理论热导率和消光系数由(1)式计算得到. 理论上, 导热及辐射热流将绕过机体, 在热斗篷层内传递, 形成热绕流, 起到热防护效果.

由于点变换热斗篷内边界的理论参数具有奇异性, 本文进一步提出如图1(d)所示的域变换, 变换关系如下:

$$r' = \frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} r + \frac{R_2 - R_1}{R_3 - R_1} R_3, \quad \theta' = \theta, \quad (5)$$

其中, R_3 由(3)式表示, $a = 0.2 \text{ m}$, $b = 0.1 \text{ m}$, $\gamma = 15^\circ$, $\theta_1 = 40^\circ$, $\theta_2 = 144^\circ$, $R_2 = 0.9R_3$, $R_1 = 0.7R_3$. 经坐标变换, 原核心隔热层 Ω_3 ($R_1 < r < R_3$) 被压缩形成热斗篷 Ω_4 ($R_2 < r < R_3$), 以“热斗篷 Ω_4 ($R_2 < r < R_3$) + 气凝胶 Ω_5 ($R_1 < r < R_2$)”构成新的核心隔热层, 热流在斗篷内部传递, 无奇异参数.

以上两种变换, 结合头锥热防护的具体目标, 将传统环形热斗篷变换(4)与(5)所用的封闭环形曲线 r 改为(3)式所示的非封闭分段曲线 R . 此外, 针对变换(5), 将环形斗篷中为去除参数奇异性所引入的虚拟内边界 R_1 扩大, 以隔热层内边界作为 R_1 , 赋予其实际物理意义.

3 结果与讨论

3.1 非封闭式点变换热斗篷

头锥热流密度在驻点区最大, 沿着头锥表面热流密度逐渐下降^[26]. 对于核心隔热层, 其温度分布应与头锥外表面一致. 为对比纯隔热材料与非封闭式热斗篷的热防护性能, 对边界条件作简化处理, 近似实现头锥前端温度最高, 沿表面温度逐渐降低的温度分布. 如图1(c)所示, 将飞行器头锥置于长前端 0.8 m、宽 0.4 m 的矩形背景内, 设左边界温度为 1000 K, 右边界温度为 300 K, 上下边界绝热, 初始温度为 300 K. 在图1(c)所示结构中, 原核心隔热层为气凝胶隔热材料, 现以热斗篷代替气凝胶, 进行对比研究. 基于数值模拟验证热斗篷防热机理, 对材料参数并无严格要求, 以 κ_b , β_b 和 κ_i , β_i 分别表示背景和隔热材料的热导率、消光系数,

参考 Xu 等^[20] 关于热隐身的模拟研究, 取 $\kappa_b = 1 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, $\beta_b = 100 \text{ m}^{-1}$, $\kappa_i = 0.05 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, $\beta_i = 800 \text{ m}^{-1}$. 为了控制变量, 所有材料相对折射率设为 1, 密度与热容之积均设为 $1.0 \times 10^6 \text{ J}/(\text{m}^3\cdot\text{K})$, 分别取不同的 κ_0 和 β_0 , 通过 COMSOL 进行数值模拟, 探究非封闭式热斗篷的热绕流特性及热防护性能.

图2(a)为热斗篷内部点 O 的升温曲线. 从图2(a)可看出, 当 $\kappa_0 = \kappa_i = 0.05 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, $\beta_0 = \beta_i =$

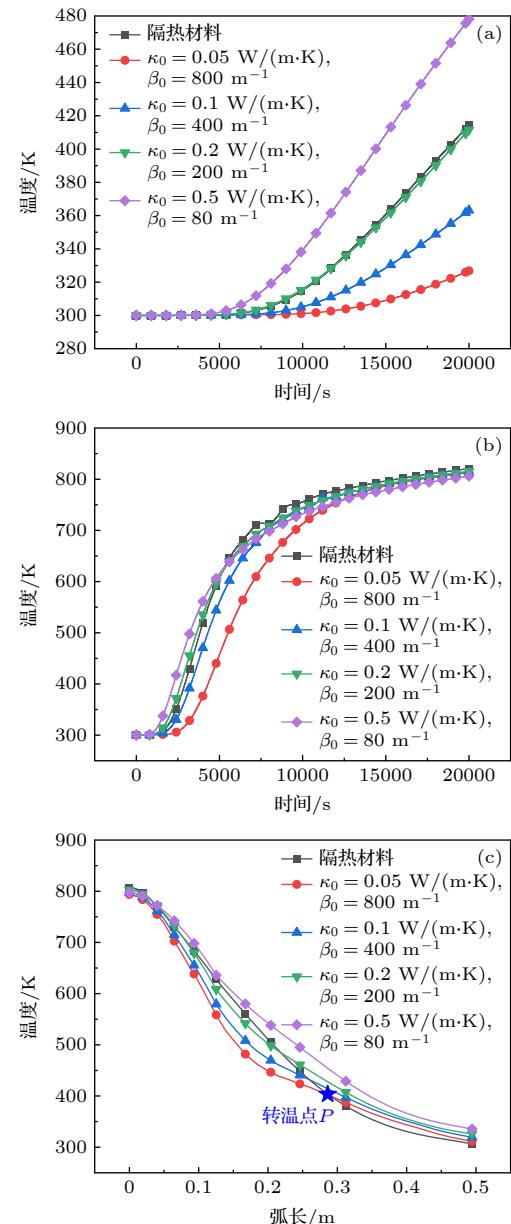


图 2 点变换热斗篷的热防护特性 (a) O 点升温曲线; (b) E 点升温曲线; (c) 曲线 $R = 0.9R_2$ 的温度分布

Fig. 2. Thermal protection characteristics of point transformation thermal cloak: (a) Temperature variation at point O against time; (b) temperature variation at point E against time; (c) temperature profile on the curve $R = 0.9R_2$.

800 m^{-1} , 热斗篷的 O 点温度显著低于隔热材料, 具有更优异的热防护性能. 然而, 随着热导率 κ_0 增大, 消光系数 β_0 减小, 热斗篷 O 点的升温速率逐渐增大, 其热防护性能最终低于隔热材料. 图 2(b) 表示热斗篷前端 E 点随时间的升温曲线. 可以看出, 当 $\kappa_0 = \kappa_i = 0.05 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, $\beta_0 = \beta_i = 800 \text{ m}^{-1}$, 热斗篷前端温度显著低于隔热材料, 随着传热过程的进行, 两者温差逐渐减小并趋于稳定. 为进一步分析热斗篷的热绕流特性, 对 20000 s 时隔热材料与热斗篷同一曲线 $R = 0.9R_2$ 上的温度分布进行测试, 如图 2(c) 所示. 可以看出, 当 $\kappa_0 = \kappa_i = 0.05 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, $\beta_0 = \beta_i = 800 \text{ m}^{-1}$, 与理论设计相一致, 热斗篷内部存在热绕流现象, 部分热流沿斗篷向后传递, 导致 P 点左侧热斗篷温度低于隔热材料, P 点右侧热斗篷温度高于隔热材料. 定义 P 点所在位置为转温点, 转温点的存在表明热斗篷具有热绕流特性, 其越接近热斗篷前端, 热绕流特性越显著. 随着热导率 κ_0 增大, 消光系数 β_0 减小, 热斗篷的转温点前移, 热绕流特性增强.

上述分析表明, 非封闭式点变换热斗篷可以实现导热及辐射的热绕流, 当 κ_0 , β_0 分别与隔热材料的热导率、消光系数相等时, 其具有更优异的热防护性能, 可应用于高超声速飞行器等复杂目标区域的高温热防护.

3.2 简化多层结构热斗篷

由坐标变换设计得到的点变换热斗篷参数具有各向异性与非均质性, 天然材料难以实现^[27]. 根据等效介质理论^[28], 两种各向同性材料交替堆叠并形成一定倾角的多层结构能够呈现各向异性. 因此, 采用多层结构作为点变换热斗篷的简化近似, 以隔热层作为最内层, 与导热层交替排布, 每层厚度为 2 mm, 共 10 层, 设置两组参数进行模拟研究, 模拟条件与热斗篷相同. 其中, 两组结构的隔热层的热导率与消光系数依次分别为 $0.05 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 800 m^{-1} ; $0.025 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 1600 m^{-1} . 两组结构的导热层的热导率与消光系数依次分别为 $20 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 12.5 m^{-1} ; $40 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 6.25 m^{-1} .

对比隔热材料与点变换热斗篷 ($\kappa_0 = \kappa_i = 0.05 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, $\beta_0 = \beta_i = 800 \text{ m}^{-1}$), 分析多层结构的热绕流特性与热防护性能. 图 3(a) 为 O 点升温曲线, 多层结构 1 的隔热层参数与隔热材料相

同, 其等效径向热导率大于隔热材料, 因此 O 点升温速率大于隔热材料. 随着传热过程的进行, 多层结构 2 的 O 点温度逐渐低于隔热材料, 表现出更好的热防护性能, 但与点变换热斗篷仍存在较大差距. 如图 3(b) 和图 3(c) 所示, 进一步测试前端 E 点的升温曲线和 20000 s 时曲线 $R = 0.9R_2$ 上的温度分布. 可以看出, 与点变换热斗篷相比, 多层结构前端 E 点的升温速率显著减缓, 转温点 Q 前移, 热绕流特性更加显著.

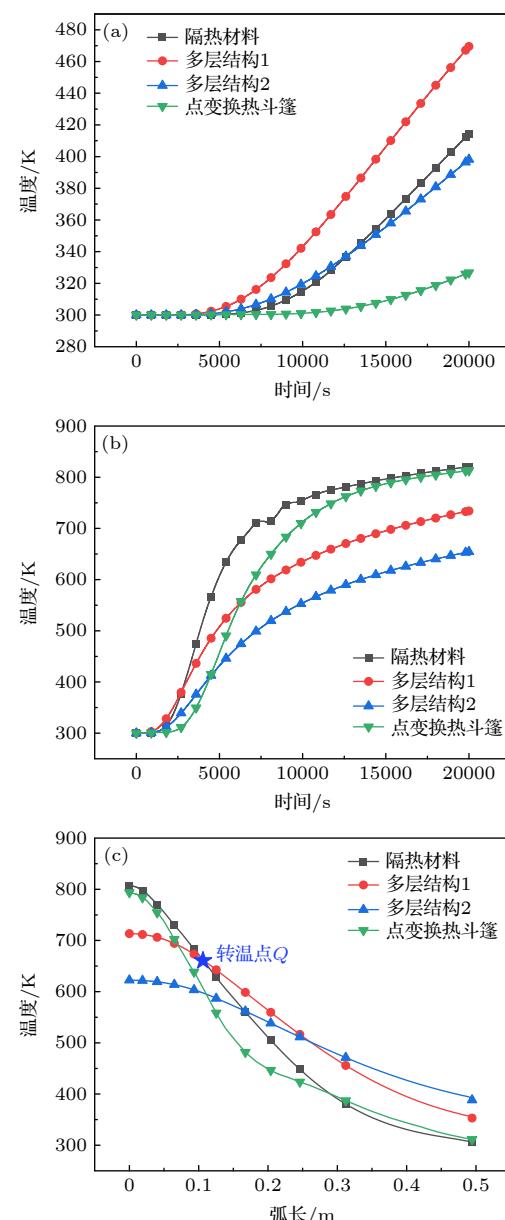


图 3 多层结构热防护特性 (a) O 点升温曲线; (b) E 点升温曲线; (c) 曲线 $R = 0.9R_2$ 温度分布

Fig. 3. Thermal protection characteristics of multilayers cloak: (a) Temperature variation at point O against time; (b) temperature variation at point E against time; (c) temperature profile on the curve $R = 0.9R_2$.

导热层的存在使得沿头锥表面的热流传递更加迅速, 从而提升热绕流效果, 但为了实现热防护, 需增强多层结构隔热层的隔热能力.

3.3 非封闭式域变换热斗篷

如图 1(d) 所示, 以“域变换热斗篷 + 隔热材料”代替原核心隔热层, 域变换消除了热斗篷理论参数的奇异性, 其内边界径向等效热导率最小. 以 κ_{eff} 表示原隔热材料的等效热导率, 当 $\kappa_0 = \kappa_i$, $\beta_0 = \beta_i$, 由计算可知, 域变换热斗篷内部最小径向等效热导率等于 $0.2593\kappa_{\text{eff}}$. 为使斗篷各处热导率均不小于原隔热材料, 增大 κ_0 , 减小 β_0 使热斗篷最小径向等效热导率等于 κ_{eff} . 于是得到域变换斗篷 1 和域变换斗篷 2, 其 κ_0 , β_0 分别为 $0.05, 0.19 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 和 $800, 207 \text{ m}^{-1}$.

图 4(a) 为点 O 的升温曲线. 可以看出, 两组域变换斗篷的 O 点升温速率均慢于隔热材料, 热防护性能更加优异. 为探究域变换斗篷热防护性能提升的原因, 分别测试隔热材料、域变换斗篷前端

点 F 的升温曲线与 20000 s 时曲线 $R = 0.96R_3$ 上的温度分布, 如图 4(b) 和图 4(c) 所示. 可以看出, 两组域变换斗篷的 F 点温度均低于隔热材料, 转温点 S 接近曲线 $R = 0.96R_3$ 的末端. 可见, 域变换斗篷内部同样存在热绕流, 但相比于多层结构, 其热绕流现象较为微弱.

$$\begin{bmatrix} q_x \\ q_y \end{bmatrix} = -\kappa \cdot \nabla T = -\begin{bmatrix} \kappa_{xx} & \kappa_{xy} \\ \kappa_{yx} & \kappa_{yy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \frac{\partial T}{\partial y} \end{bmatrix}. \quad (6)$$

(6) 式为热流密度的计算式, 定义向头锥内侧机体的热流 (水平向右, 坚直向下) 为正. 分析域变换热斗篷的热导率值, 发现热导率张量主对角元素值恒为正, 副对角元素存在负值, 由此计算出的局部热流可能为负. 因此, 选取域变换斗篷 2 内一点 M 进行测试, 得到图 4(d) 所示的热流密度变化曲线. 可以看到, 随着传热过程的进行, 纵向热流首先增大, 随后逐渐减小直至为负, 发生热流反转. 当横向热流为正, 纵向热流为负, 总热流将沿着头锥表面方向传播, 充分证明域变换热斗篷内部存在

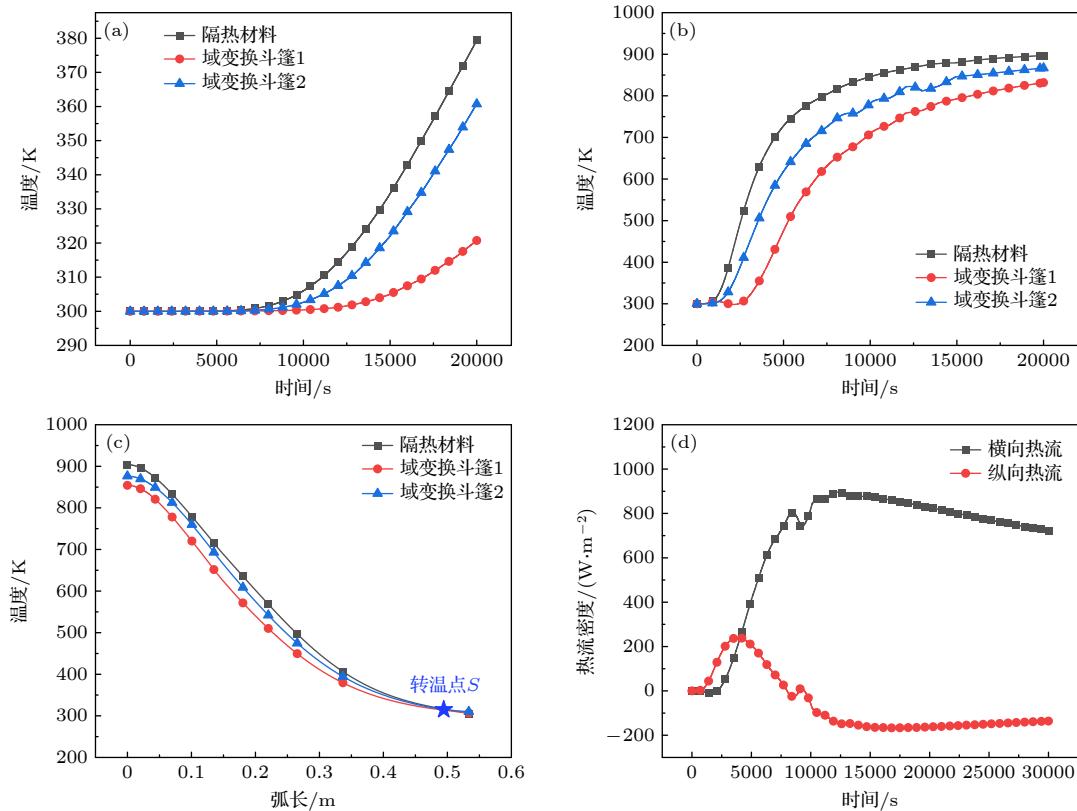


图 4 域变换热斗篷热防护特性 (a) O 点升温曲线; (b) F 点升温曲线; (c) 曲线 $R = 0.96R_3$ 温度分布; (d) M 点热流密度变化曲线

Fig. 4. Thermal protection characteristics of region transformation thermal cloak: (a) Temperature variation at point O against time; (b) temperature variation at point F against time; (c) temperature profile on the curve $R = 0.96R_3$; (d) heat flux at point M against time.

热绕流现象。考虑实际高超声速飞行器的极端热环境，另外对 3000 K 高温边界条件下的域变换热斗篷进行了模拟研究，发现同样存在热绕流现象，且热防护性能优于纯隔热材料。

特别注意的是，相比于点变换热斗篷与多层结构，域变换热斗篷 2 内各点的径向等效热导率均高于原隔热材料，然而利用宏观热绕流特性成功实现了热防护性能的提升，其内部点 O 降温达 10 K，头锥前端降温达 100 K。

对于各向同性的隔热材料，其热导率和消光系数值决定了其热防护能力的极限。基于坐标变换理论设计的域变换热斗篷，通过选取合适的 κ_0 , β_0 ，使斗篷内部各点的热导率大于原隔热材料，消光系数小于原隔热材料，由于具备热绕流特性，其热防护能力反而优于原隔热材料，成功突破了现有隔热材料热防护能力的极限。域变换热斗篷的热防护特性可以通过机器学习^[29]等智能算法进一步优化，在热防护领域中展现重要应用潜力。

4 结 论

本文基于坐标变换理论，针对飞行器头锥分别设计了非封闭式点变换及无奇异值的域变换热斗篷，采用 COMSOL 有限元法模拟验证了导热及辐射热绕流特性并将隔热材料和多层结构进行对比，得到如下结论：

1) 对于非封闭式热防护层，点变换热斗篷、多层结构和域变换热斗篷均具有导热和辐射的热绕流特性；

2) 点变换热斗篷层内各点的径向热导率均小于 κ_0 ，径向消光系数均大于 β_0 ，当 κ_0 和 β_0 分别与隔热材料的热导率和消光系数相等时，点变换热斗篷的热防护性能显著优于隔热材料；

3) 多层结构导热层的存在使得其热绕流特性十分显著，但只有当隔热层的热导率足够小，消光系数足够大，整体径向等效热导率低于隔热材料径向热导率时才具有更优异的热防护性能；

4) 域变换消除了热斗篷的参数奇异性。合理改变 κ_0 和 β_0 ，即使采用热导率更大、消光系数更小的各向异性材料，基于热绕流效应也可以有效提升热防护性能，从宏观热流调控的角度突破了隔热材料热防护能力的极限。

参考文献

- [1] Du C H 2023 *Equip. Environ. Eng.* **20** 43 (in Chinese) [杜晨慧 2023 装备环境工程 **20** 43]
- [2] Gui Y W, Liu L, Wei D 2020 *Acta Aerod. Sin.* **38** 641 (in Chinese) [桂业伟, 刘磊, 魏东 2020 空气动力学报 **38** 641]
- [3] Xie Y W, Xia Y, Xu X W, Li Z, Lu H, Xu K L 2022 *Aerosp. Technol.* **4** 73 (in Chinese) [谢永旺, 夏雨, 许学伟, 李峰, 陆浩, 许孔力 2022 空天技术 **4** 73]
- [4] Su H, Wang J H, He F, Chen L, Ai B C 2019 *Int. J. Heat Mass Transfer* **129** 480
- [5] Bohr H 2015 *J. Spacecr. Rockets* **52** 674
- [6] Luan Y, He F, Wang J H 2023 *J. Propul. Technol.* **44** 22010020 (in Chinese) [栾芸, 贺菲, 王建华 2023 推进技术 **44** 22010020]
- [7] Liu H P, Liu W Q 2016 *Acta Astronaut.* **118** 210
- [8] Chen L Z, Ou D B 2010 *J. Exp. Fluid Mech.* **24** 51 (in Chinese) [陈连忠, 欧东斌 2010 实验流体力学 **24** 51]
- [9] Li J, Zhang F, Zhang L J, Li W J, Zhao Y M 2019 *Trans. Beijing Inst. Technol.* **39** 1051 (in Chinese) [李健, 张凡, 张丽娟, 李文静, 赵英民 2019 北京理工大学学报 **39** 1051]
- [10] Wang F, Wang Q Y, Sun C, Kang H L 2023 *J. Aerosp. Power* **38** 1075 (in Chinese) [王飞, 王秦阳, 孙创, 康宏琳 2023 航空动力学报 **38** 1075]
- [11] Hu P, Jiang Y G, Zhang Z M, Feng J Z, Li L J, Feng J 2020 *Mater. Rep.* **34** 07082 (in Chinese) [瑚佩, 姜勇刚, 张忠明, 冯军宗, 李良军, 冯坚 2020 材料导报 **34** 07082]
- [12] Gou J Z, Xiao S, Hu J X, Gao G, Gong C L 2022 *J. Astronaut.* **43** 983 (in Chinese) [苟建军, 肖爽, 胡嘉欣, 高戈, 龚春林 2022 宇航学报 **43** 983]
- [13] Zhao Y 2015 *Ph. D. Dissertation* (Xi'an: Xi'an Jiaotong University) (in Chinese) [赵越 2015 博士学位论文 (西安: 西安交通大学)]
- [14] Fan C Z, Gao Y, Huang J P 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 251907
- [15] Guenneau S, Amra C, Veynante D 2012 *Opt. Express* **20** 8207
- [16] Narayana S, Sato Y 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 214303
- [17] Lou Q, Xia M G 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 094401
- [18] Zhang J, Zhang H C, Huang Z L, Sun W B, Li Y Y 2022 *Chin. Phys. B* **31** 014402
- [19] Narayana S, Savo S, Sato Y 2013 *Appl. Phys. Lett.* **102** 201904
- [20] Xu L J, Dai G L, Huang J P 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 024063
- [21] Yang S, Wang J, Dai G L, Yang F B, Huang J P 2021 *Phys. Rep.* **908** 1
- [22] He B, Yang W, Liu F H 2019 *Appl. Math. Lett.* **94** 99
- [23] Maleki H 2016 *Chem. Eng. J.* **300** 98
- [24] Huang S Y 2021 *M. S. Thesis* (Wuhan: Huazhong University of Science and Technology) (in Chinese) [黄诗瑶 2021 硕士学位论文 (武汉: 华中科技大学)]
- [25] Nie C S, Huang J D, Wang X, Li Y 2017 *Acta Aerod. Sin.* **35** 760 (in Chinese) [聂春生, 黄建栋, 王迅, 李宇 2017 空气动力学报 **35** 760]
- [26] Jiang Z J 2008 *M. S. Thesis* (Changsha: National University of Defense Technology) (in Chinese) [姜志杰 2008 硕士学位论文 (长沙: 国防科技大学)]
- [27] Sha W, Xiao M, Zhang J H, Ren X C, Zhu Z, Zhang Y, Xu G Q, Li H G, Liu X L, Chen X, Gao L, Qiu C W, Hu R 2021 *Nat. Commun.* **12** 7228
- [28] Vemuri K P, Bandaru P R 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 133111
- [29] Ji Q X, Qi Y C, Liu C W, Meng S H, Liang J, Kadic M, Fang G D 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **189** 122716

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas • COVER ARTICLE

Thermal protection characteristics of non-enclosed thermal cloak*

Miao Yu-Zhao Tang Gui-Hua †

(MOE Key Laboratory of Thermo-Fluid Science and Engineering, School of Energy and Power Engineering,
Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(Received 2 August 2023; revised manuscript received 13 September 2023)

Abstract

The aerodynamic heat of hypersonic vehicle nose cone can reach tens of MW/m² during flight, which could be transferred to the interior of hypersonic vehicle in the form of conduction and radiation. High efficient thermal insulation technology is of significance in keeping internal electronic components working safely. Thermal metamaterials can regulate the macroscopic heat flow path, and they are developing rapidly and have a wide application prospect in the field of thermal protection. In this work, a non-enclosed point transformation thermal cloak is designed to guide heat flow around hypersonic vehicle nose cone by using the transformation multithermotics, which can control thermal conduction and radiation simultaneously. A multi-layer structure is designed as cloak's simplified approximation due to the anisotropic parameters. Based on the software COMSOL, the thermal protection characteristics and heat transfer mechanism of the point transformation cloak and multi-layer structure are studied numerically. The results show that heat can flow around the object in the form of conduction and radiation in both point transformation thermal cloak and multi-layer structure, so the heat transferred to the inner area decreases. Comparing with the thermal insulation material, the heating rate of the protected area slows down, and the temperature in the front of the hypersonic vehicle nose cone is significantly reduced. However, the improvement of the thermal protection performance of point transformation cloak and multi-layer structures requires that the solid thermal conductivity and radiative thermal conductivity of the material are lower than those of the original thermal insulation material. To solve this problem, a non-enclosed region transformation thermal cloak is further proposed. The solid thermal conductivity and radiative thermal conductivity of region transformation thermal cloak are non-singular, which could be higher than those of the original thermal insulation material. Numerical simulation results show that the region transformation thermal cloak can guide heat flow around object, so the thermal protection capability is improved significantly. Comparing with the thermal insulation materials, the temperature of the front of the hypersonic vehicle nose cone is reduced by 100 K, and the temperature of the inner central zone of the hypersonic vehicle nose cone is reduced by 10 K. The non-enclosed region transformation thermal cloak provides a new approach to realizing thermal protection and is suitable for complex target areas, showing great application potential in thermal protection.

Keywords: thermal metamaterial, coordinate transformation, COMSOL, thermal protection

PACS: 44.10.+i, 44.40.+a, 81.05.Xj

DOI: [10.7498/aps.73.20231262](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231262)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 52130604, 51825604).

† Corresponding author. E-mail: gltang@mail.xjtu.edu.cn