纳米“热点”系统中的梯度热导率

吴志鹏[1)] 张创[2)] 胡世谦[3)] 马登科[4)†] 杨诺[1)‡]

1)（华中科技大学能源与动力工程学院，武汉 430074）

2)（杭州电子科技大学物理系，杭州 310018）

3)（云南大学物理与天文学院，昆明 650091）

4)（南京师范大学物理科学与技术学院，南京 210000）

† 通信作者.E-mail: dkma@njnu.edu.cn

‡ 通信作者.E-mail: nuo@hust.edu.cn

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

S1 准二维纳米“热点”系统的有效热导率推导

传统二维平面沿半径方向的一维导热问题的热流量$\varPhi$的表达式为

$$\varPhi=\frac{2\pi d\kappa_{\text{eff}}\left(T_{\text{h}}-T_{\text{c}}\right)}{\ln\left(L/l\right)}, \tag{S1}$$

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

因此，有效热导率κ_{eff}的表达式为

$$\kappa_{\text{eff}}=\frac{\varPhi\ln\left(L/l\right)}{2\pi d\left(T_{\text{h}}-T_{\text{c}}\right)}, \tag{S2}$$

从(S2)式可知，需求出热流量$\varPhi$表达式后就能得到κ_{eff}。

对于呈现梯度热导率的准二维“热点”系统而言：

$$\varPhi=-2\pi rd\kappa\left(r\right)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}, \tag{S3}$$

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

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

从(S3)式可知，需要求出$\dfrac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}$表达式，就能够得到热流量$\varPhi$。

Zhang 等[S1]的研究得到

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\left(R_{\text{2D}}^*\right)^{1-\alpha}}=c_1,\ \alpha\neq1\\[2ex]\dfrac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\left(\ln\left(R_{\text{2D}}^*\right)\right)}=c_3,\ \alpha=1\end{cases}, \tag{S5}$$

通过积分可得系统的温度分布：

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

对于高温热源边界，$r=l$，即 $R_{2\mathrm{D}}^*=\dfrac{1}{1-\ln(l/L)}$，$T=T_{\mathrm{h}}$；对于低温热源边界，$r=L$，即 $R_{2\mathrm{D}}^*=1$ ，$T=T_{\mathrm{c}}$。则，可以得到 c_1，c_2，c_3，c_4：

$$\begin{cases}c_1=\dfrac{T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}}}{\left(1-\ln(l/L)\right)^{\alpha-1}-1}\\ c_2=T_{\mathrm{c}}-\dfrac{T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}}}{\left(1-\ln(l/L)\right)^{\alpha-1}-1}\\ c_3=\dfrac{T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}}}{-\ln\left(1-\ln(l/L)\right)}\\ c_4=T_{\mathrm{c}}\end{cases}. \tag{S7}$$

因此，温度分布为

$$T(r)=\begin{cases}T_{\mathrm{c}}+(T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}})\dfrac{\left(R_{2\mathrm{D}}^*\right)^{1-\alpha}-1}{\left(1-\ln(l/L)\right)^{\alpha-1}-1},\ \alpha\neq 1\\ T_{\mathrm{c}}+(T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}})\dfrac{-\ln\left(R_{2\mathrm{D}}^*\right)}{\ln\left(1-\ln(l/L)\right)},\ \alpha=1\end{cases}. \tag{S8}$$

对于α的不同取值情况分别为

1) 当 $\alpha\neq 1$时：

$$\begin{gathered}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}R_{2\mathrm{D}}^*}\frac{\mathrm{d}R_{2\mathrm{D}}^*}{\mathrm{d}r},\\ \Rightarrow\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}=c_1(\alpha-1)\left(R_{2\mathrm{D}}^*\right)^{-\alpha}\frac{1}{(\ln l-\ln L-1)r}.\end{gathered} \tag{S9}$$

由(S3)和(S4)式可知

$$\begin{gathered}\varPhi=-2\pi r d\kappa_0\left(R_{2\mathrm{D}}^*\right)^{\alpha}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r},\\ \Rightarrow\varPhi=2\pi d\kappa_0 c_1(\alpha-1)\frac{1}{\left(1-\ln(l/L)\right)},\\ \Rightarrow\varPhi=2\pi d\kappa_0(\alpha-1)\frac{T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}}}{\left[\left(1-\ln(l/L)\right)^{\alpha-1}-1\right]\left(1-\ln(l/L)\right)}.\end{gathered} \tag{S10}$$

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

率公式为

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

2) 当 $\alpha=1$ 时：

$$\begin{gathered}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}R_{2D}^{*}}\frac{\mathrm{d}R_{2\mathrm{D}}^{*}}{\mathrm{d}r},\\ \Rightarrow\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}=-c_3\frac{1}{R_{2\mathrm{D}}^{*}}\frac{1}{(\ln l-\ln L-1)r}.\end{gathered} \tag{S12}$$

由(S3)和(S4)式可知

$$\begin{gathered}\varPhi=-2\pi rd\kappa_0R_{2\mathrm{D}}^{*}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r},\\ \Rightarrow\varPhi=2\pi d\kappa_0c_3\frac{1}{(\ln l-\ln L-1)},\\ \Rightarrow\varPhi=2\pi d\kappa_0\frac{T_{\mathrm{h}}-T_{\mathrm{c}}}{\ln(1-\ln(l/L))(1-\ln(l/L))}.\end{gathered} \tag{S13}$$

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

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

因此，准二维系统的有效热导率为

$$\kappa_{\mathrm{eff}}=\begin{cases}\kappa_0(\alpha-1)\dfrac{\ln(L/l)}{\left[(1-\ln(l/L))^{\alpha-1}-1\right](1-\ln(l/L))}, & \alpha\neq1\\ \kappa_0\dfrac{\ln(L/l)}{\ln(1-\ln(l/L))(1-\ln(l/L))}, & \alpha=1\end{cases}. \tag{S15}$$

当声子间耦合逐渐加强，梯度导热现象逐渐向扩散性输运靠近，$\alpha\to0$，κ_0 值趋于 κ_{bulk}，通过求极限可得 κ_{eff} 值为 κ_{bulk}。

S2 三维纳米“热点”系统的有效热导率推导

传统球壳的导热热流量公式为

$$\Phi = \frac{4\pi\kappa_{\text{eff}}\left(T_{\text{h}} - T_{\text{c}}\right)}{1/l - 1/L}. \tag{S16}$$

因此，有效热导率 κ_{eff} 的表达式为

$$\kappa_{\text{eff}} = \frac{\Phi\left(1/l - 1/L\right)}{4\pi\left(T_{\text{h}} - T_{\text{c}}\right)}. \tag{S17}$$

与准二维系统推导类似，只需要知道热流量 Φ 就能得到 κ_{eff} 。

对于呈现梯度热导率的三维“热点”系统而言：

$$\Phi = -4\pi r^2 \kappa(r)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}, \tag{S18}$$

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

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

从 Zhang 等[S1]的研究中可以知道：

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

对于高温热源边界，$r = l$，即 $R_{\text{3D}}^* = \dfrac{1}{1/l - 1/L + 1}$，$T = T_{\text{h}}$；对于低温热源边界，$r = L$，即 $R_{\text{3D}}^* = 1$ ，$T = T_{\text{c}}$ 。可以得到 c_5 和 c_6：

$$\begin{cases} c_5 = \dfrac{T_{\text{h}} - T_{\text{c}}}{\exp\left(-\dfrac{1}{1/l - 1/L + 1}\gamma\right) - \exp(-\gamma)} \\ c_6 = T_{\text{c}} - \exp(-\gamma)\dfrac{T_{\text{h}} - T_{\text{c}}}{\exp\left(-\dfrac{1}{1/l - 1/L + 1}\gamma\right) - \exp(-\gamma)} \end{cases}. \tag{S21}$$

因此，温度分布为

$$T\left(R_{3D}^{*}\right)=T_{c}+\left(T_{h}-T_{c}\right)\frac{\exp\left(-\gamma R_{3D}^{*}\right)-\exp\left(-\gamma\right)}{\exp\left(-\frac{1}{1/l-1/L+1}\gamma\right)-\exp\left(-\gamma\right)}. \tag{S22}$$

进而可以得到温度梯度 $\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}$ 的表达式：

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}=\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}R_{3D}^{*}}\frac{\mathrm{d}R_{3D}^{*}}{\mathrm{d}r},\\ \Rightarrow&\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r}=c_{5}\left(-\gamma\right)\exp\left(-\gamma R_{3D}^{*}\right)\frac{1}{r^{2}\left(1/l-1/L+1\right)}.\end{aligned} \tag{S23}$$

由(S18)和(S19)式可知，热流量：

$$\begin{aligned}&\varPhi=-4\pi r^{2}\kappa_{0}\exp\left(\gamma R_{3D}^{*}\right)\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}r},\\ \Rightarrow&\varPhi=4\pi c_{5}\kappa_{0}\gamma\frac{1}{1/l-1/L+1},\\ \Rightarrow&\varPhi=4\pi\kappa_{0}\gamma\frac{T_{h}-T_{c}}{\left[\exp\left(-\frac{1}{1/l-1/L+1}\gamma\right)-\exp\left(-\gamma\right)\right]\left(1/l-1/L+1\right)}.\end{aligned} \tag{S24}$$

比较(S16)和(S22)式可以得到系统的有效热导率公式：

$$\kappa_{\mathrm{eff}}=\frac{\gamma\kappa_{0}\left(1/l-1/L\right)}{\left[\exp\left(-\frac{1}{1/l-1/L+1}\gamma\right)-\exp\left(-\gamma\right)\right]\left(1/l-1/L+1\right)}. \tag{S25}$$

当声子间耦合逐渐加强，$\gamma\to 0$，κ_0 值为 κ_{bulk}，通过求极限化简可得 κ_{eff} 值为 κ_{bulk}。当体系外半径 $L\to\infty$ 时，

$$\kappa_{\mathrm{eff}}=\frac{\gamma\kappa_{0}}{\left[\exp\left(-\frac{\gamma}{1/l+1}\right)-\exp\left(-\gamma\right)\right]\left(1+l\right)}. \tag{S26}$$

参考文献

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