

类波传播主导晶体结构超低热导率研究获进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/24729.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

类波传播主导晶体结构超低热导率研究获进展。

近日，中山大学先进能源学院助理教授童贞课题组联合美国明尼苏达大学教授Traian Dumitric²、德国不来梅大学教授Thomas Frauenheim³，探究了Bi₄O₄SeCl₂中晶格导热与其模块化晶体结构的关系，揭示了该晶体结构中类波传输主导的超低热导率机理，并发现其晶格热导率室温下为0.1 W/mK（仅为空气的~4倍）。相关成果发表于《纳米快报》。

超低导热固体晶体材料对能源相关应用具有重要意义。为了获得低热导率，当前主要的研究思路是通过调节固体晶体材料中的声子的类粒子传播，包括晶格畸变、晶格强非简谐性、缺陷工程、纳米工程等实现声子强散射降低热导率，然而忽略了低导热晶体中声子的类波传播对热传导贡献以及影响机理的研究。

研究人员通过结合密度泛函计算和Wigner输运理论模型，计算了晶体Bi₄O₄SeCl₂晶格热导率 κ_L 中类粒子（ κ_p ）和类波输运（ κ_c ）贡献成分（ $\kappa_L = \kappa_p + \kappa_c$ ）。研究发现， κ_L 并没有随温度单调增长并与实验结果吻合良好，但通过描述类粒子传播的Debye-Callaway模型在仅仅考虑外在缺陷散射的情况下预测到了 κ_L 对温度的单调依赖性且偏离实验结果。显然，基于该模型的解释掩盖了第一原理晶格动力学计算中所揭示的内在非谐波散射以及类波热传导的重要性。

论文第一作者兼第一共同通讯作者童贞表示，通过对模块化Bi₄O₄SeCl₂晶格中的类粒子和类波输运热传导的研究，揭示了该晶体结构中类波传输主导的超低热导率机理，阐明了其晶格导热与其模块化晶体结构的关系，发现仅需通过调控晶体结构本身的固有特性而无需更为复杂的缺陷、纳米工程，就能实现固体晶体材料的超低 κ_L 水平，从而为实验发现和合成超低热导率新能源材料提供了有力的理论指导和数据支撑。（来源：中国科学报 朱汉斌）

该研究为设计超低热导率晶体材料提供了新思路。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c02957>

作者：童贞等 来源：《纳米快报》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发