

可燃冰带来灵感！新策略可灵活调控分子晶体热导率

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/30554.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！

可燃冰带来灵感！新策略可灵活调控分子晶体热导率。

近日，大连理工大学宋永臣教授团队在晶体热物性调控研究方面取得进展，提出了通过主-客体耦合强度控制，灵活调控分子晶体热导率的创新策略，相关成果发表在《自然-通讯》。

低导热材料在热电转换、热防护等领域具有重要应用价值。目前，实现晶体材料低热导率的有效方法是在结构中引入静态/动态混乱度。例如，二维层状材料的混乱堆叠、三维晶格中迁移/扩散的原子/离子等均能显著抑制热传导。然而，上述方法通常依赖于特定的晶体结构或化学键，亟须探索更具普适性的晶体热物性调控方法，以指导超低导热材料的设计和开发。

团队从天然气水合物（可燃冰）独特的主-客体结构中获得灵感，提出了利用客体分子旋转增强晶格混乱度，并通过强化主-客体耦合以有效降低晶体热导率的方法。通过晶格压缩，团队实现了填充冰甲烷水合物中客体分子旋转动力学的灵活调控，并系统揭示了客体混乱旋转对晶体热输运的影响规律和物理本质。通过巧妙构建分子模型，研究发现了客体分子旋转与主体水晶格振动的强耦合，可以引发声子散射和声子局域化，实现近3倍的热导率抑制。同时，通过对比二维层状石墨烯-富勒烯异质结和sl型甲烷水合物等体系，系统验证了该机制在一维通道、二维层状以及三维笼型结构中的普适性。

上述研究为认识与调控复杂材料热输运特性提供了新的理论依据和方向。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-024-53698-0>

作者：宋永臣等 来源：《自然—通讯》

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