



论文

体材料热整流模型中的界面热阻效应

朱玉鑫, 王珏, 罗爽, 王军*, 夏国栋

北京工业大学环境与能源工程学院, 传热强化与过程节能教育部重点实验室, 北京 100124

* E-mail: jwang@bjut.edu.cn

收稿日期: 2015-07-22; 接受日期: 2015-11-05; 网络出版日期: 2015-12-23

国家自然科学基金(批准号: 51306004)、教育部高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20131103120018)和北京工业大学“日新人才”培养计划(编号: 2015-RX-05)资助项目

摘要 基于傅里叶导热定律, 两种具有不同热导率温度依赖特性的材料组合而成的复合材料可以实现热整流。但是, 此前的研究者大多忽略了复合材料界面处的接触热阻。本文在此热整流模型中引入界面热阻, 并分析其对热整流效率的影响。计算结果表明, 在一定条件下, 较小的界面热阻有利于提高热整流效率; 但是界面热阻较大时, 其阻碍热流的特点起主导作用, 会降低热整流效率。

关键词 热整流, 热导率, 界面热阻

1 引言

类似于导电问题中的晶体二极管, 热整流现象是指热流量依赖于温度梯度方向的一种传热现象。能够实现明显热整流效应的器件称之为热二极管^[1~3]。考虑一个左右两段式的复合材料, 其左段与高温热源接触, 而右段与低温热源接触, 那么就会在此复合材料中通过一个从高温到低温方向的热流 Q_+ 。将高低温热源互换, 反方向的热流为 Q_- 。如果 $Q_+ \neq Q_-$, 就可以认为此复合材料能够实现热整流。假设 $|Q_+| > |Q_-|$, 可以用 $\gamma = |Q_+|/|Q_-|$ 的数值大小来表征热整流效应的强弱, 称之为热整流效率。从实际应用的角度来看, 较高的热整流效率使得控制热流的方向有了可能, 这在节能以及能源管理等领域都具有十分重要的潜在应用价值。

早期关于热整流现象的研究主要集中于宏观体

材料中的热整流效应。最早是 1935 年 Sattler^[4]在铜和氧化亚铜的复合材料中观察到的, 其实现热整流的机理是界面处电子-声子散射的不对称性。之后, 研究者们陆续在不同的复合材料中都观察到了类似的热整流现象, 并且揭示了几种能在宏观体材料中实现热整流的机理, 包括界面处热膨胀差异性^[5]、界面处热势垒差异^[6]等(详见参考文献[1])。但是, 实验中所测得的热整流效率值都比较低($\gamma=1\sim3$), 很难与电二极管(一个方向是电的良导体, 而另一方向几乎电绝缘)相提并论。其原因可能是电子输运和声子输运所服从的基本统计力学规律不同, 前者服从费米统计而后者服从玻色统计规律。在宏观体材料中, 较低的热整流效率制约了关于热二极管的进一步研究。

近十几年来, 关于热整流效应的研究又引起了国内外学者们的广泛关注^[7~26], 文献报道明显增多。一方面是因为在一个一维理想化分子链模型(Frenkel-

引用格式: 朱玉鑫, 王珏, 罗爽, 等. 体材料热整流模型中的界面热阻效应. 中国科学: 技术科学, 2016, 46: 175-183

Zhu Y X, Wang J, Luo S, et al. Interface thermal resistance effect on thermal rectification using bulk materials (in Chinese). Sci Sin Tech, 2016, 46: 175-183, doi: 10.1360/N092014-00447

Kontorova 晶格)中, Li 等人^[7]实现了非常高的热整流效率(正反两个方向热流比值达到 100 以上), 使人们相信高热整流效率也是有可能实现的. 另一方面是因为微纳米实验技术的发展使得纳米尺度下的热整流效应得以实现^[16]. 因此, 研究者们寄希望于在低维纳米材料中实现较高的热整流效率. 不过, 目前文献报道中(无论是分子动力学模拟还是实验结果), 真实纳米材料(非一维分子链模型)的热整流效率都不高(一般 $\gamma < 8$). 另外, 虽然在理想化的一维分子链中能够实现较高的热整流效率, 但是, 其热整流效率会随着系统尺寸的增加而降低, 甚至在热力学极限下完全消失^[11,26]. 因此, 考虑到热整流器的实际应用, 对宏观体材料热整流现象的研究仍然十分有必要.

基于傅里叶导热定律, 利用宏观体材料热导率的温度依赖特性实现热整流是一种比较有代表性并且热整流效率相对较高的方法, 其热整流效率可以达到 10 以上^[19-24]. 将热导率分别随温度升高而增大和减小的两种材料 A 和 B 连接在一起, 当材料 A(热导率随温度升高而增大)处于高温端, 同时材料 B(热导率随温度升高而减小)处于低温端时, 则两种材料的热导率均处于较高的状态, 因而整体复合材料具有较高的热导率. 如果交换热源, 则材料 A 和 B 的热导率均相对较低, 整体材料的导热性能较差, 由此即可实现热整流. 近年来, Hu 等人^[19]、Peyrard^[20]、Dames^[21]以及 Go 和 Sen^[22]分别深入地研究了如何利用热导率的温度依赖特性来实现热整流效应, 并在实验中得到了验证^[23,24]. 但是, 之前的研究都忽略了一个重要的因素: 两段式复合材料之间的界面热阻. 界面处的热输运问题比较复杂, 其影响因素也较多, 既与两种材料自身的特性有关, 也与界面处的接触状况有关, 温度也是影响界面热阻的重要因素之一^[27-29]. 本文中, 在此热整流模型中引入了复合材料界面处的界面热阻, 首先假定界面热阻为常量, 然后有针对性地研究界面热阻的大小会如何影响之前利用材料热导率的温度依赖特性所实现的热整流效应. 之后, 根据界面热阻随温度变化的一般形式, 分析其对热整流效应的影响.

2 导热理论模型

2.1 单一材料导热理论模型

先考虑单一材料的一维热传导过程. 根据傅里

叶导热定律, 对于无内热源的一维大平壁导热, 如果其两端分别与热源 T_L 和 T_R 接触的话, 沿平壁厚度方向(x 方向)上任意位置 x 处的局部热流量为

$$Q_x = -\lambda(T)A_0 \frac{dT}{dx}, \quad (1)$$

式中, A_0 为导热面积, $\lambda(T)$ 为材料的热导率, T 为物体内部的局部温度. 材料的热导率不但因物质的种类而异, 而且还和材料的温度、压力等很多因素有关^[30]. 热传导既然是在温度不同的各部分物体之间进行的, 所以温度的影响尤其重要. 本文中假设热导率只依赖于物质种类和温度. 对(1)式积分, 并考虑稳态导热(沿 x 方向, 热流处处相等), 可得总热流量为

$$Q = \frac{1}{\delta} \int_{T_R}^{T_L} \lambda(T) A dT, \quad (2)$$

式中, δ 为平壁厚度. 在(2)式中, 若令 $\delta=x$, $T_R=T_x$, 则其结果为位置 x 处的热流量, 此热流量也等于 Q ,

$$\frac{1}{x} \int_{T_x}^{T_L} \lambda(T) A dT = \frac{1}{\delta} \int_{T_R}^{T_L} \lambda(T) A dT. \quad (3)$$

如果已知材料热导率对温度的依赖函数 $\lambda(T)$, 那么由(3)式即可求解出平壁任意位置处的温度分布. 一般来说, 材料热导率与温度近似成幂律关系:

$$\lambda(T) = \lambda_0 \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^n, \quad (4)$$

式中, λ_0 为热导率参数, T_{ref} 为温度参数, n 为幂指数(常见材料的幂指数范围为 $-3.5 \sim 4.4$ ^[21]). 将(4)式代入(3)式, 容易得到

$$T_x^{n+1} = \left(1 - \frac{x}{\delta} \right) T_L^{n+1} + \frac{x}{\delta} T_R^{n+1}, \quad n \neq -1, \quad (5)$$

$$\ln T_x = \left(1 - \frac{x}{\delta} \right) \ln T_L + \frac{x}{\delta} \ln T_R, \quad n = -1. \quad (6)$$

2.2 热整流模型

考虑两种不同材料 A 和 B 连接而成的复合材料, 其左端热源温度为 T_L , 而右端与热源 T_R 接触. 其中, 材料 A 的热导率随温度升高而增加(幂律指数 $n > 0$), 而材料 B 的热导率随温度升高而降低($n < 0$). 其热整流的物理图像为: 如果左段材料 A 与高温热源接触, 而右段材料 B 与低温热源接触, 即 $T_L > T_R$, 那么对于 A 来说, 因其热导率随温度升高而增大, 所以材料 A 与高温热源接触后热导率较高; 类似地, 材料 B 由于

其热导率随温度升高而降低, 与低温热源接触后, 其热导率也比较高. 因而, 如果不考虑界面处的接触热阻, 整个系统的导热性能就比较好. 相反, 如果交换热源, $T_L < T_R$, 左右两段材料热导率会同时降低, 则整个系统的导热性能比较差. 因此, 由热导率温度依赖性相反的两种材料组成的复合材料可以实现热整流效应. 对于左段和右段材料分别可以得到:

$$Q_1 = \frac{1}{\delta_1} \int_{T_{\text{int}}}^{T_L} \lambda_1(T) A dT, \quad (7)$$

$$Q_2 = \frac{1}{\delta_2} \int_{T_R}^{T_{\text{int}}} \lambda_2(T) A dT, \quad (8)$$

式中, 下脚标 1 和 2 分别表示 A 和 B 材料的物理量, δ_1 和 δ_2 分别为左右两段材料的厚度, T_{int} 为界面处的温度, $\lambda_1(T) = \lambda_{0,1} (T/T_{\text{ref}})^{n_1}$, $\lambda_2(T) = \lambda_{0,2} (T/T_{\text{ref}})^{n_2}$. 在稳态导热时, $Q_1 = Q_2 = Q$. 本文中, 左右热源温度分别取为

$$T_L = T_0 \left(1 + \frac{\Delta}{2} \right), \quad T_R = T_0 \left(1 - \frac{\Delta}{2} \right), \quad (9)$$

式中, $T_0 = (T_L + T_R)/2$, 参数 Δ 为无量纲温差. 并在(4)式中, 取 $T_{\text{ref}} = T_0$. 在具体的热流计算过程中, 可以引入无量纲热流

$$q = Q \frac{\frac{\delta_1}{\lambda_{0,1} A_0} + \frac{\delta_2}{\lambda_{0,2} A_0}}{T_0}. \quad (10)$$

在低温差近似下, Dames 求解方程(7)和(8)式并得到了热整流效率的解析表达式^[21]. 结果表明, 热整流效率 γ 与无量纲温差 Δ 成正比, 并且正比于 $|n_1 - n_2|$. 因此, 选用热导率温度依赖性差异较明显的两种材料有利于提高热整流效率. 如果 Δ 不能近似为小量, 直接解析求解方程(7)和(8)式则比较困难. 本文将数值求解此热整流模型.

3 数值计算

在导热问题的数值计算中, 首先对大平壁在厚度方向上做离散化, 并建立一维导热的差分方程. 之后, 利用 Gauss-Seidel 迭代法来求解离散化之后的一维导热微分方程^[30]. 在数值计算中, 取 $T_0 = 300$, $\lambda_0 = 0.5$, 格点数 $N = 1000$, 迭代允许误差为 0.000001, 迭代步数为 1000000.

4 数值计算结果与分析讨论

4.1 单一材料导热

图 1 给出了单一材料大平壁内部的温度分布, 其中空心点为(5)式的计算结果, 实心点代表数值计算的结果. 可以看出, 模拟结果和解析计算的结果吻合的非常好. 对于 $n=0$ 的情形, 温度分布为由高温到低温的线性分布. 如果 $n>0$ 或 $n<0$, 温度分布分别呈向上凸或向下凹的趋势. 这些结果都与已知的热传导理论相符合, 从而验证了数值计算的准确性.

4.2 无界面热阻时的热整流模型

在热整流模型中考虑两段式的复合材料, 并分别取 $n_1 > 0$ 和 $n_2 < 0$. 对于不同的参数组合 n_1 和 n_2 情况, 简记为 (n_1, n_2) . 为了简化问题, 我们先假设 $\delta_1 = \delta_2 = \delta/2$, 且 $\lambda_{0,1} = \lambda_{0,2} = \lambda_0$. 容易验证, 按(10)式计算得到的无量纲热流值与参数 λ_0 无关. 在此假设下, 不考虑界面热阻时的无量纲热流随无量纲温差变化的 $q-\Delta$ 曲线如图 2 所示. 取了 3 组不同的参数: (3, -3), (3, -1) 和 (1, -1). $\Delta = |\Delta|$ 和 $\Delta = -|\Delta|$ 分别对应于左右两端热源交换的情况. 由图 2 可以明显地看出, 无量纲热流 q 在 $\Delta > 0$ 时的值明显地大于其在 $\Delta < 0$ 时的值, 即存在明显的热整流现象. 在图 2 的插图中, 给出了相应的 $\gamma-|\Delta|$ 关系. 在 $|\Delta| = 1.0$ 时, (3, -3), (3, -1) 和 (1, -1) 三种情形下的热整流效率分别为 4.57, 2.54 和 1.69. 此结果与文献[21]中的计算结果完全一致, 进一步验证了本文数值计算的准确性. 由图 2 可以看出: (1) 热整流效率 γ 随着 $|\Delta|$ 的增加而增大; (2) 在 $|\Delta|$ 比较小时, γ 几乎与 $|\Delta|$ 成线性关系; (3) 增大两段材料热导率温度依赖性参数

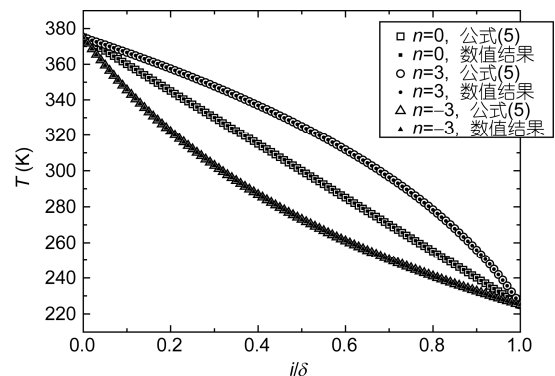


图 1 单一材料中的温度分布曲线

空心点代表公式(5)的计算结果, 实心小点代表数值计算结果

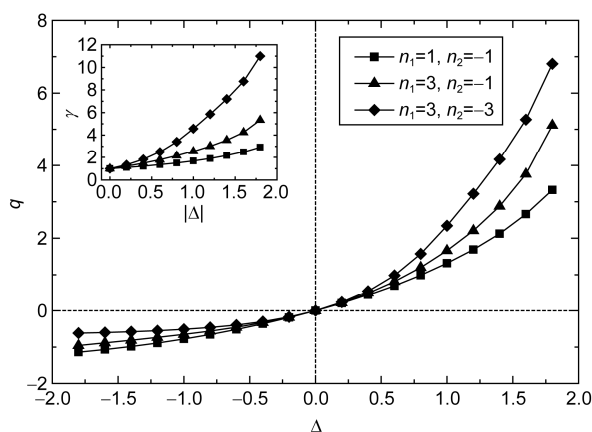


图2 复合材料中的热整流现象

插图为热整流效率 γ 随无量纲温差 $|\Delta|$ 的变化规律

的差异(即, 增大 $|n_1 - n_2|$), 有利于提高热整流效率. 在此模型中热整流效率可以达到 10 以上, 高于其他宏观体材料热整流模型的效率.

图3中, 进一步给出了上述(3,-3), (3,-1)和(1,-1)三种情形下, 热整流模型中平壁内各点处的温度分布. 可以看出, 参数为(1,-1)时, 正反两个方向($\Delta=1.5$ 和 $\Delta=-1.5$)上温度分布虽然存在一定差异, 但是都接近为线性, 因而热整流效率不高. 在参数为(3,-1)时, 左段材料温度较高, 因为左段材料的热导率随温度升高的幂次明显高于右段材料热导率随温度降低的幂次($|n_1| > |n_2|$), 所以, 左段材料处于高温有利于系统导热. 在(3,-3)情形下, 正反方向的温度分布差异比较明显, 热整流效率也比较高. 在热流较大的方向上($\Delta=1.5$, 实心三角), 温度变化在左端热源处相对比较平缓, 而在靠近界面处($i=N/2$)急速下降; 对于右段材料, 温度则比较低. 这一结果符合之前介绍的热整流原理分析: 在 $\Delta > 0$ 时, 材料A因为热导率随温度升高而增大, 所以应该尽量处于高温段, 以获得高热导率; 同样道理, 右段材料因为热导率随温度升高而减小, 应尽量处于低温端, 以提高热导率. 这样, 整体系统的热导率就比较高. 但是, 由于温度分布的连续性, 左段材料中靠近材料界面处的温度值还是比较低. 这必然会降低左段材料的热导率, 从而降低整个系统的热整流效率. 这一现象即为本文在前人研究结果的基础上引入界面热阻的动机, 因为界面热阻可以在界面处形成温度跳跃, 在一定程度上可以使得左段材料处于高温而同时右段材料处于低温, 尽可能地趋近于热整流机制所要求的温度分布状态,

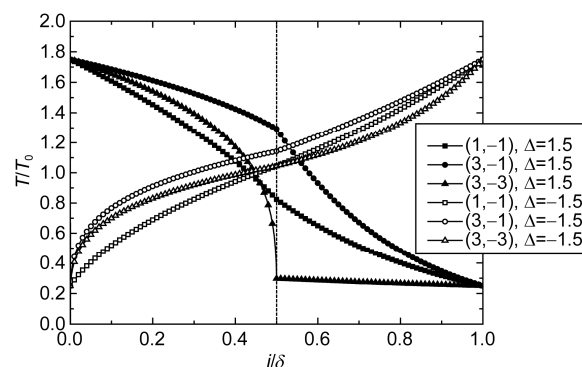
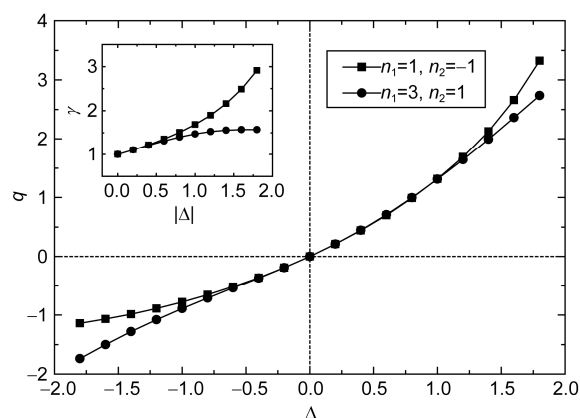


图3 无界面热阻时复合材料中的温度分布曲线

以提高热整流效率.

对于本文所研究的热整流机理而言, 之前的研究都是针对左右两段材料热导率分别随温度升高而增加或降低, 即 $n_1 > 0$ 且 $n_2 < 0$. 但是, 如果在此模型中, 我们取 $n_1=3$ 和 $n_2=1$, 计算结果表明, 如果左右两段材料的热导率都随温度升高而增大(即 $n_1 > 0$ 且 $n_2 > 0$, 但是 $n_1 \neq n_2$), 仍然可以观察到热整流现象, 如图4所示. 在无量纲温差 $|\Delta|$ 较小时($|\Delta| < 0.5$), 可以看到, (3,1)情形下热流密度和热整流效率的结果与(1,-1)情形相差很小. 在 $|\Delta|$ 较大时, 两者则有明显区别, (3,1)情形下的热整流效率明显低于(1,-1)情形, 并且(3,1)情形下的 γ 值随着 $|\Delta|$ 的增加而几乎达到定值, 而(1,-1)情形下的 γ 值随着 $|\Delta|$ 的增加而增大. 因此, 若要达到比较高的热整流效率, 最好取 $n_1 > 0$ 且 $n_2 < 0$, 并且取较大的 $|n_1 - n_2|$ 值.

如前文所述, 在本文的计算中, 假设 $\delta_1 = \delta_2 = \delta/2$,

图4 复合材料在(1,-1)和(3,1)情形下的 q - Δ 曲线插图为相应的 γ - $|\Delta|$ 变化曲线

且 $\lambda_{0,1}=\lambda_{0,2}=\lambda_0$. 下面来讨论复合材料两侧厚度变化和两侧材料热导率参数不一致时的情况. 首先来考虑两侧厚度变化的时的情况, 图 5 中, 给出了分别在 (3, -3), (3, -1) 和 (1, -1) 情形下热整流效率随 δ_1/δ 变化的曲线图. 可以看到, 在两侧厚度差异较大 (δ_1/δ 接近 0 或接近 1) 时, 都很难达到比较高的热整流效率. 而在 $\delta_1/\delta \approx 0.5$ (即 $\delta_1=\delta_2$) 时, 热整流效率最高. 其次, 再来考虑 $\lambda_{0,1} \neq \lambda_{0,2}$ 的情形. 可以假设 $\lambda_{0,1}=\lambda_0$, $\lambda_{0,2}=\rho\lambda_{0,1}=\rho\lambda_0$. 类似地, 在 (3, -3), (3, -1) 和 (1, -1) 情形下, 热整流效率随参数 ρ 变化的结果如图 6 所示. 由图可见, 在 $\rho \approx 1$ 时, 复合材料的热整流效率达到最佳值. 根据上述计算结果, 在 $\delta_1 \approx \delta_2$ 和 $\lambda_{0,1} \approx \lambda_{0,2}$ 时可以得到最佳的热整流效率. 因此在本文中, 如无特殊说明, 一般取 $\delta_1=\delta_2=\delta/2$ 且 $\lambda_{0,1}=\lambda_{0,2}$.

4.3 界面热阻效应

正如引言中指出, 界面热阻的计算问题较为复

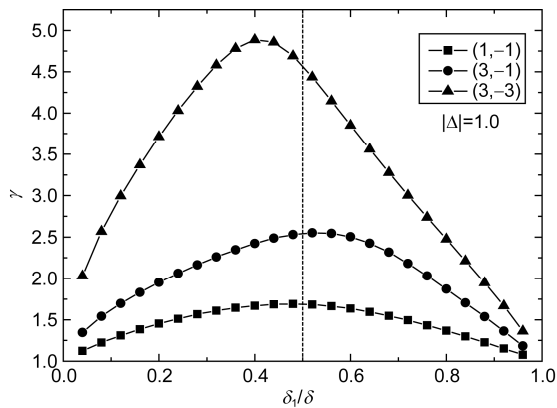


图 5 复合材料两侧厚度变化的热整流效率

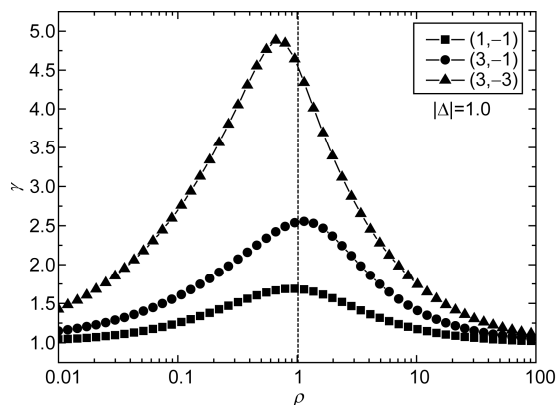


图 6 热整流效率随参数 ρ 变化的曲线图

杂. 本文重点并非在于计算界面处热阻的大小, 而在于考察界面热阻大小对热整流效率的影响分析. 一般来说, 界面热阻在高温段可以近似为常数, 而在低温段可以认为界面热阻正比于 T^{-3} (Debye 比热定律)^[21]. 张九如和金燕^[28]得到的固体界面热阻大小与温度成反比. 本文中, 首先假定界面热阻为恒定值, 以研究界面热阻的大小如何影响体材料的热整流效率. 之后, 引入界面热阻随温度的变化, 来分析界面热阻的温度依赖特性对热整流效率的影响.

设定左右两段材料厚度相等, 交界面处于格点 $i=N/2$ (左段材料) 和 $i=N/2+1$ (右段材料) 之间. 如果考虑界面热阻, 这两个节点的差分方程中需引入界面热阻项. 在数值计算中, 格点 $i=N/2$ 和 $i=N/2+1$ 之间的界面热阻按如下方式引入:

$$\lambda'_{\text{int}} = \frac{dx}{\frac{dx}{\lambda_{\text{int}}} + R_{\text{int}}}, \quad (11)$$

式中, $dx=\delta/N$ 为单元格厚度, λ_{int} 为不考虑界面热阻时界面处的热导率, R_{int} 即为界面热阻. 如前所述, 在高温下, R_{int} 可以近似为常量. $R_{\text{int}}=0$ 时, 对应于无界面热阻的情形. 为了方便计算, 取无量纲化的界面热阻

$$r_{\text{int}} = \frac{R_{\text{int}}}{\frac{\delta_1}{\lambda_{0,1}A} + \frac{\delta_2}{\lambda_{0,2}A}}. \quad (12)$$

考虑恒定的界面热阻时, 热整流效率 γ 随无量纲界面热阻大小 r_{int} 的变化如图 7 所示. 我们发现, 在无量纲温差 $|\Delta|$ 较小时, γ 随着 r_{int} 的增加而降低, 也就是说, 此时界面热阻只能起到降低热整流效率的作用. 在 $|\Delta|$ 较大时, γ - $|\Delta|$ 曲线存在一个最佳的界面热阻值

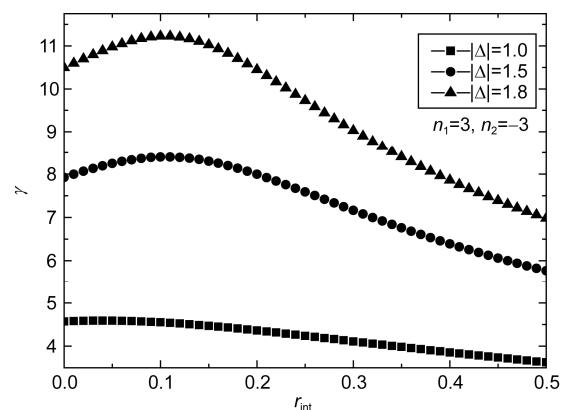


图 7 (3, -3) 情形下的 γ - r_{int} 变化曲线

$r_{\text{int}} \approx 0.1$, 在此热阻下, 系统的热整流效率达到最高. 对于较小的 r_{int} , 随着 r_{int} 的增大, 热整流效率 γ 会提高; 但是由于界面热阻自身会起到阻碍热传导的作用, 在界面热阻很大时, 温度降落主要发生在界面处, 相反两个方向上的热流量差别不大, 因此还是会明显地降低热整流效率.

下面分析恒定界面热阻时热整流效率提高的机理. 在(3,-3)情形下, 取 $|\Delta|=1.5$, 大平壁内部的温度分布如图 8 所示. 如 4.2 小节中所述, 在 $r_{\text{int}}=0$ 且 $\Delta=1.5$ 时, 右段材料的温度较低, 左段材料中靠近左端热源处温度较高, 但是在靠近界面处温度较低(图 8). 考虑到材料 A 热导率与温度成正比, 所以左段材料靠近界面处的低温部分热导率较低, 从而影响了整个系统的热整流效率. 如果界面热阻不为零($r_{\text{int}}=0.1$ 且 $\Delta=1.5$), 温度分布(图 8)在右段基本没有明显变化, 而在界面处, 由于界面热阻效应, 温度分布存在明显的跳跃, 因而使得左段材料的温度分布能够处于相对高温的状态, 材料的热导率也相对较高. 这种情况下, 虽然温度梯度相对于无界面热阻的情况降低了, 但是热导率有增大的趋势, 因此系统的整体导热性能不会有明显的降低. 对于反方向导热的情况($\Delta=-1.5$), 其温度分布变化不甚明显, 主要体现为界面处的温度跳跃和系统整体热阻的增加. 因此, 在界面热阻较小时, 其对系统内部温度分布的调整使得系统的热整流效率有可能升高. 如果界面热阻较高, 则其阻碍导热的作用就明显加强, 因而系统的热整流效率也就比较低.

总之, 恒定界面热阻对整个系统导热性能的影响主要体现在两个方面: 一方面界面热阻增加了系

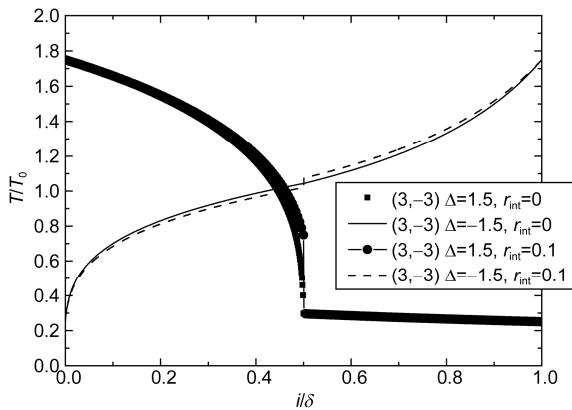


图 8 $r_{\text{int}}=0$ 和 $r_{\text{int}}=0.1$ 时复合材料中的温度分布曲线

统整体的热阻, 降低了导热性能, 这一因素在界面热阻较高时起主导作用; 另一方面界面处的温度分布由于界面热阻的存在而发生跳跃, 引起系统内温度分布的调整, 使之更接近于热整流机制所需的温度分布, 因而可以提高热整流效率, 这一因素在界面热阻较低时起主导作用. 这两方面的因素综合作用, 使得系统出现如图 7 所示的 $\gamma-r_{\text{int}}$ 变化曲线, 并在 $|\Delta|$ 较大时存在一最佳界面热阻值.

考虑界面热阻随温度变化的情况. 如前文所述, 在低温下可以假设界面热阻为

$$R_{\text{int}} = R_{\text{int},0} \left(\frac{T_{\text{int}}}{T_0} \right)^{-3}, \quad (13)$$

式中, T_{int} 为界面处的平均温度, 参数 $R_{\text{int},0}$ 用以表征界面热阻的大小. 可以按如下方式对界面热阻做无量纲化:

$$r_{\text{int}} = \frac{R_{\text{int},0}}{\frac{\delta_1}{\lambda_{0,1}A} + \frac{\delta_2}{\lambda_{0,2}A}} \left(\frac{T_{\text{int}}}{T_0} \right)^{-3} = r_{\text{int},0} \left(\frac{T_{\text{int}}}{T_0} \right)^{-3}. \quad (14)$$

$|\Delta|=1.5$ 时热整流效率 γ 随无量纲界面热阻参数 $r_{\text{int},0}$ 变化的曲线如图 9 所示. 可以看出, 在(3,-3)情形下, 热整流效率随 $r_{\text{int},0}$ 的增大而降低, 表明界面热阻不利于提高热整流效率. 但是在(3,-1)、(3,0)以及(3,1)情形下, γ 随 $r_{\text{int},0}$ 变化的曲线则出现类似于图 7 中 $|\Delta|$ 较大时的结果, 即存在一个最佳的界面热阻值, 在 $r_{\text{int},0}$ 较小时, γ 随 $r_{\text{int},0}$ 增大而升高, 在 $r_{\text{int},0}$ 较大时, 界面处温度降落较大, 不利于实现热整流.

根据图 3 和图 8 给出的温度分布的结果可以看出,

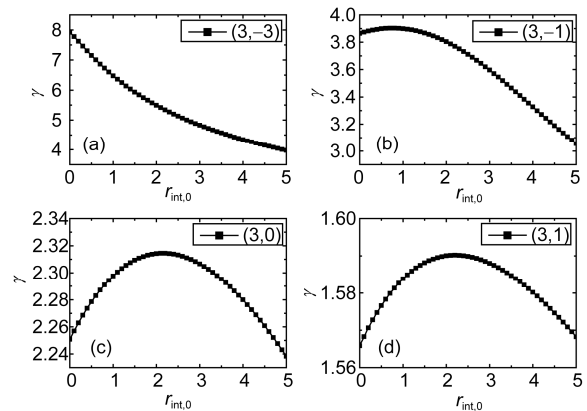


图 9 $|\Delta|=1.5$ 时 $\gamma-r_{\text{int},0}$ 变化曲线

(a) (3,-3)情形; (b) (3,-1)情形; (c) (3,0)情形; (d) (3,1)情形

在(3,-3)情形下, $\Delta > 0$ 时(正方向)界面处的平均温度明显低于 $\Delta < 0$ 时(反方向)的界面温度. 由于界面热阻与温度的三次方成反比. 在正向时, 界面热阻较高, 阻碍了热传导, 热流密度较低; 而反向界面热阻则可以忽略, 热流密度相对于不考虑界面热阻时不会有明显的变化. 因此, 热整流效率 γ 会随着界面热阻参数 $r_{\text{int},0}$ 的增大而降低. 而对于(3,-1)的情形, 由于 $\Delta > 0$ 时的界面平均温度高于 $\Delta < 0$ 时的界面平均温度, 因此, 反向时较大的界面热阻会降低反方向的热流密度, 而正向界面热阻较小, 几乎不会影响其正方向热输运, 从而有利于提高系统的热整流效率. 在 $r_{\text{int},0}$ 较大时, 界面处的温度降落比较大, 正反两个方向的热流密度差别不大, 热整流效率明显降低.

文献[28]运用线性响应理论给出了固体界面热阻的另外一个模型, 即界面热阻大小与温度成反比:

$$R_{\text{int}} = R_{\text{int},0} \left(\frac{T_{\text{int}}}{T_0} \right)^{-1}. \quad (15)$$

同样可以对此界面热阻做无量纲化:

$$r_{\text{int}} = \frac{R_{\text{int},0}}{\frac{\delta_1}{\lambda_{0,1}A} + \frac{\delta_2}{\lambda_{0,2}A}} \left(\frac{T_{\text{int}}}{T_0} \right)^{-1} = r_{\text{int},0} \left(\frac{T_{\text{int}}}{T_0} \right)^{-1}. \quad (16)$$

为了对比分析不同的界面热阻模型, 图 10 以(3,-3)情形为例给出了在 $|\Delta|=1.5$ 时热整流效率 γ 随无量纲界面热阻参数 $r_{\text{int},0}$ 的变化. 图 10 中, 方点代表恒定热阻模型, 圆点代表了模型(16), 而三角点代表了模型(14). 对于(3,-3)情形来说, 在界面热阻模型(14)中并没有出现能够得到最大热整流效率的最佳热阻

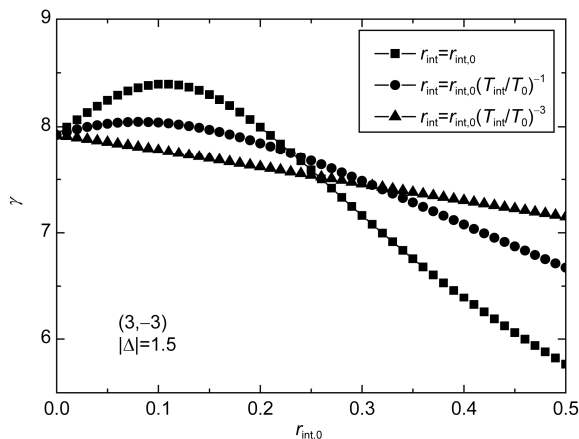


图 10 热整流效率随界面热阻大小的变化

值, 而在恒定界面热阻模型和界面热阻模型(16)中, 则都出现了一个最佳的界面热阻值.

5 理论与实验结果的对比分析

为了进一步验证理论模型的准确性, 本文将数值计算结果与已有的实验结果进行了对比分析. Kobayashi 等人^[24]依据 $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ 和 LaCoO_3 热导率的温度依赖特性设计了热整流器, 并对其热整流效率进行了测量. 考虑到 $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ 和 LaCoO_3 的晶体结构几乎是同构的, 文献[24]中忽略了界面处的接触热阻. 图 11 中给出了在无界面热阻情形下理论值与实验值的对比. 在本文的数值计算中, 所需的两段体材料热导率参数与幂指数是利用文献[24]中这两种钴氧化物热导率的实验值拟合得到的. 可以看到, 图 11 中本文的数值计算结果与 Kobayashi 等人的实验结果十分接近. 虽然在无量纲温差较小的时候, 二者仍有一定的偏差. 但考虑到对本文对材料热导率模型进行了简化以及材料热导率参数拟合时的不确定性, 总体上说, 本文的数值计算具有较高的可靠性.

在图 12 中, 给出了当 $T_0=18$ K 时不同界面热阻模型下热整流效率的理论值(空心方块)与 Balcerek 和 Tyc^[31]的实验结果(实心点)随无量纲温度的变化. 图 12 中, 空心方块为 Balcerek 和 Tycy 实验测定的 CuZn-Sn 复合材料的热整流效率, 圆点代表了无界面热阻模型, 上三角点代表了模型(16), 而下三角点代表了模型(14). 可以看到, 无界面热阻模型的计算结果和实验值相差较大, 而考虑界面热阻之后的计算结果

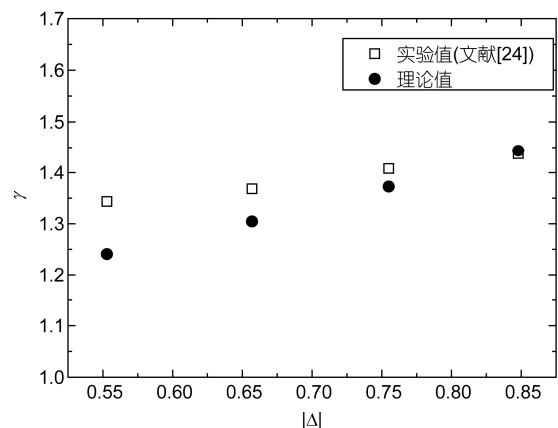


图 11 数值计算与文献[24]实验结果的对比

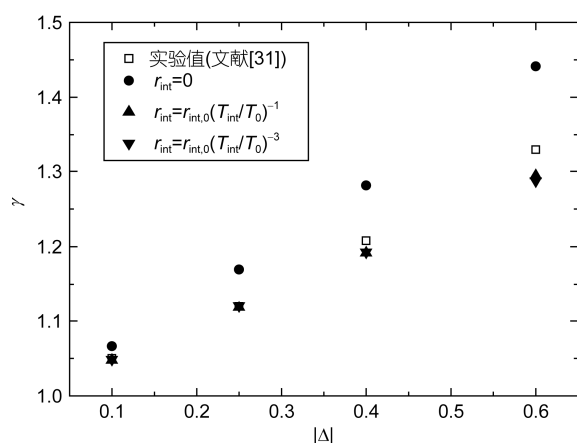


图 12 数值计算与文献[31]实验结果的对比

与实验值较为一致. 说明本文采用的考虑界面热阻的热整流模型能够更准确地描述一般复合体材料的热整流效应.

6 结论

本文中, 我们研究了一种利用宏观体材料热导率的温度依赖特性实现热整流的机制, 并引入界面

热阻, 以分析其对热整流效率的影响. 研究发现, 对于恒定界面热阻的情形, 在两端热源温差较大时, 存在一个最佳的界面热阻值, 在此热阻下, 系统的热整流效率达到最高. 分析表明, 出现此最佳界面热阻值的原因是: 界面热阻较小时, 可以实现对温度分布的调节, 使之趋近于热整流机制所要求的温度分布, 有利于提高热整流效率. 而在界面热阻较大时, 其阻碍传热的特性起主导作用, 导致热整流效率降低. 对于界面热阻随温度变化的情形, 在适当的参数下也存在一个类似的最佳界面热阻值. 其原因是反方向界面热阻较大, 使得热流量降低; 而正方向界面热阻较低, 热流量不受影响. 从而整体热整流效率可以提高. 因此, 本文的研究结果表明, 无论是考虑恒定界面热阻还是考虑界面热阻随温度变化的情形, 都存在一个能实现最高热整流效率的最佳界面温度值.

一般来说, 界面热阻在正反两个方向上会明显不同. 其实, 很多不同的热整流机理都与界面热阻的不对称性有关, 或者说界面热阻的不对称性本身就是实现热整流效应的重要方法之一^[1,7,21]. 在本文中, 界面热阻的方向差异性体现为界面热阻的温度依赖性.

参考文献

- Roberts N A, Walker D G. A review of thermal rectification observations and models in solid materials. *Int J Therm Sci*, 2011, 50: 648–662
- Li N B, Ren J, Wang L, et al. Colloquium: Phononics: Manipulating heat flow with electronic analogs and beyond. *Rev Modern Phys*, 2012, 84: 1045–1066
- Casati G. The heat is on—and off. *Nature Nanotechnol*, 2007, 2: 23–24
- Starr C. The copper oxide rectifier. *J Appl Phys*, 1935, 7: 15–19
- Somers II R R, Fletcher L S, Flack R D. Explanation of thermal rectification. *AIAA J*, 1987, 25: 620–621
- Rogers G F C. Heat transfer at the interface of dissimilar metals. *Int J Heat Mass Transf*, 1961, 2: 150–154
- Li B, Wang L, Casati G. Thermal diode: Rectification of heat flux. *Phys Rev Lett*, 2004, 93: 184301
- Terraneo M, Peyrard M, Casati G. Controlling the energy flow in nonlinear lattices: A model for a thermal rectifier. *Phys Rev Lett*, 2002, 88: 094302
- Wu G, Li B. Thermal rectification in carbon nanotube intramolecular junctions: Molecular dynamics calculations. *Phys Rev B*, 2007, 76: 085424
- Yang N, Zhang G, Li B. Thermal rectification in asymmetric graphene ribbons. *Appl Phys Lett*, 2009, 95: 033107
- Hu B, Yang L, Zhang Y. Asymmetric heat conduction in nonlinear lattices. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 124302
- 王军, 李京颖, 郑志刚. 热整流效应的消失与翻转现象. *物理学报*, 2010, 59: 0476–0481
- 李威, 冯妍卉, 唐晶晶, 等. 碳纳米管 Y 形分子结的热导率与热整流现象. *物理学报*, 2013, 62: 076107
- 鞠生宏, 梁新刚. 带孔硅纳米薄膜热整流及声子散射特性研究. *物理学报*, 2013, 62: 026101
- 张茂平, 钟伟荣, 艾保全. 非对称双链分子结构的热整流效应. *物理学报*, 2011, 60: 060511
- Chang C W, Okawa S, Majumdar A, et al. Solid-state thermal rectifier. *Science*, 2006, 314: 1121–1124
- Hu J, Ruan X, Chen Y P. Thermal conductivity and thermal rectification in graphene nanoribbons: A molecular dynamics study. *Nano Lett*,

- 2009, 9: 2730–2735
- 18 Zhong W, Huang W, Deng X, et al. Thermal rectification in thickness-asymmetric graphene nanoribbons. *Appl Phys Lett*, 2011, 99: 193104
 - 19 Hu B, He D, Yang L, et al. Thermal rectifying effect in macroscopic size. *Phys Rev E*, 2006, 74: 060201(R)
 - 20 Peyrard M. The design of a thermal rectifier. *Europhys Lett*, 2006, 76: 49–55
 - 21 Dames C. Solid-state thermal rectification with existing bulk materials. *J Heat Transf*, 2009, 131: 061301
 - 22 Go D B, Sen M. On the condition for thermal rectification using bulk materials. *J Heat Transf*, 2010, 132: 124502
 - 23 Sawaki D, Kobayashi W, Moritomo Y, et al. Thermal rectification in bulk materials with asymmetric shape. *Appl Phys Lett*, 2011, 98: 081915
 - 24 Kobayashi W, Teraoka Y, Terasaki I. An oxide thermal rectifier. *Appl Phys Lett*, 2009, 95: 171905
 - 25 Miller J, Jang W, Dames C. Thermal rectification by ballistic phonons in asymmetric nanostructures. In: *Proceedings of HT2009 2009 ASME Summer Heat Transfer Conference*, San Francisco, California USA, July 19–23, 2009
 - 26 董源. 基于热质理论的纳米系统热整流现象. *工程热物理学报*, 2013, 34: 1723–1726
 - 27 Li B, Lan J, Wang L. Interface thermal resistance between dissimilar anharmonic lattices. *Phys Rev Lett*, 2005, 95: 104302
 - 28 张九如, 金燕. 固体界面热整流现象的解析. *材料科学与工程*, 2002, 20: 432–434
 - 29 Hu G J, Cao B Y. Thermal resistance between crossed carbon nanotubes: Molecular dynamics simulations and analytical modeling. *J Appl Phys*, 2013, 114: 224308
 - 30 戴锅生. *传热学*. 北京: 高等教育出版社, 2011
 - 31 Balcerek K, Tyc T. Heat flux rectification in tin- α -brass system. *Phys Status Solidi A-Appl Mat.*, 1978, 47: K125–K128

Interface thermal resistance effect on thermal rectification using bulk materials

ZHU YuXin, WANG Jue, LUO Shuang, WANG Jun & XIA GuoDong

Key Laboratory of Enhanced Heat Transfer and Energy Conservation, Ministry of Education, College of Environmental and Energy Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China

Within the framework of heat conduction by the Fourier's law, one is able to observe thermal rectification phenomenon in a two-segment bar with segments that have different temperature dependences. However, the interface thermal resistance between these two segments has been neglected in the previous studies. In the present work, an interface thermal resistance has been introduced into the thermal rectification model, and its influence on the thermal rectification effect is investigated by numerical method. It is found that the thermal rectification ratio could be enhanced by weak interface thermal resistance, while high interface thermal resistance suppresses the heat conduction and reduce the thermal rectification ratio.

thermal rectification, thermal conductivity, interface thermal resistance

doi: 10.1360/N092014-00447