

# 单层二硫化钼热导率 分子动力学研究

---

廖全文，刘志春，杨诺，刘伟

华中科技大学，能源与动力工程学院

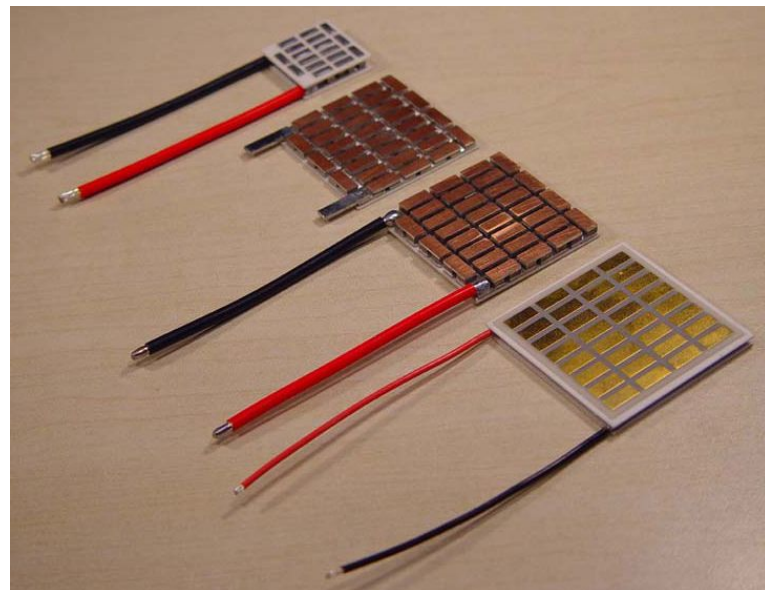
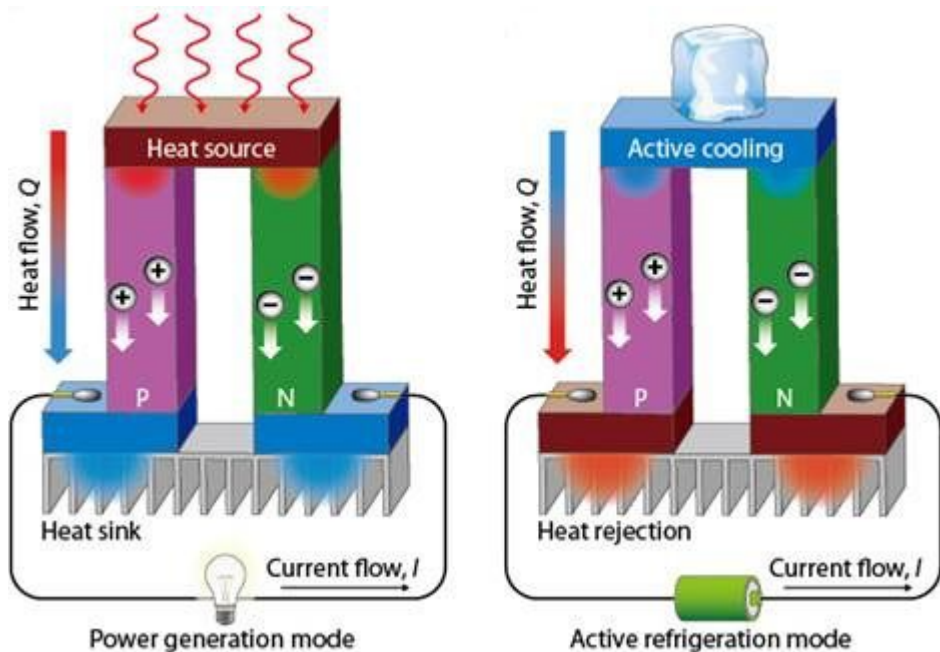
热科学与工程实验室：<http://tsl.energy.hust.edu.cn/>

纳米传热实验室：<http://energy.hust.edu.cn/nanoheat/>

# 主要内容

- 一. 背景
- 二. 计算模型及方法
- 三. 结果与讨论
- 四. 结论

# 背景



热电材料的热电转换效率：

无量纲热电优值  $ZT = \frac{S^2 \sigma T}{K}$

$S$  : Seebeck系数

$\sigma$  : 电导率

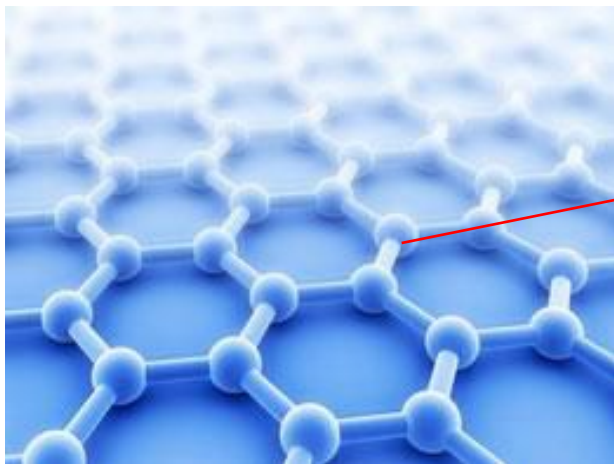
$S^2 \sigma$  : 功率因子

$T$  : 绝对温度

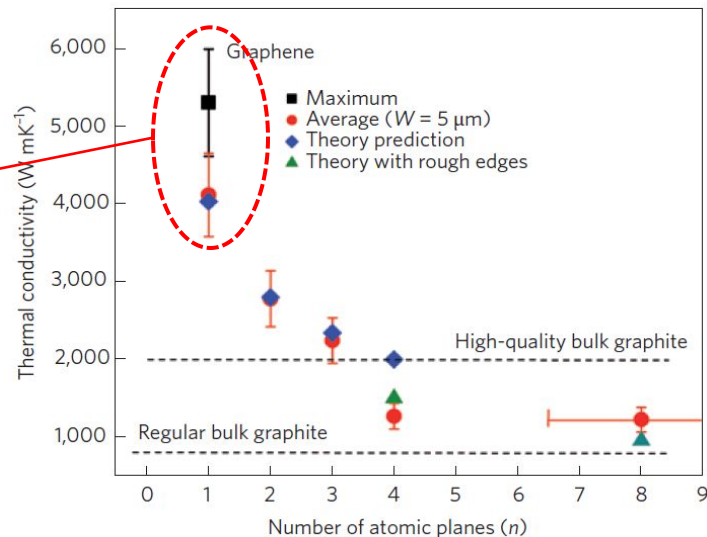
$K$  : 热导率  $K = K_e + K_p$

# 背景

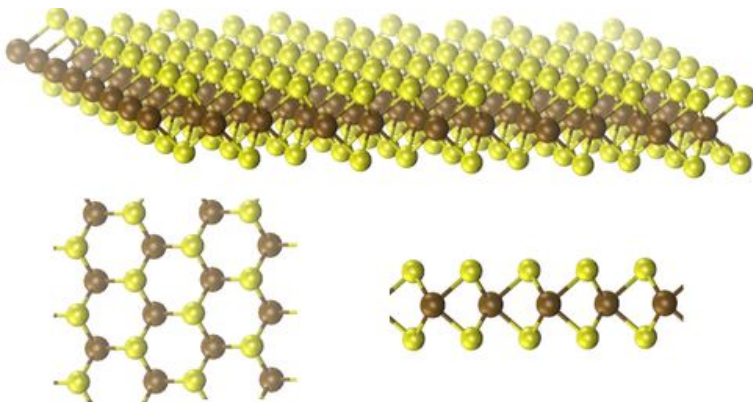
## 石墨烯



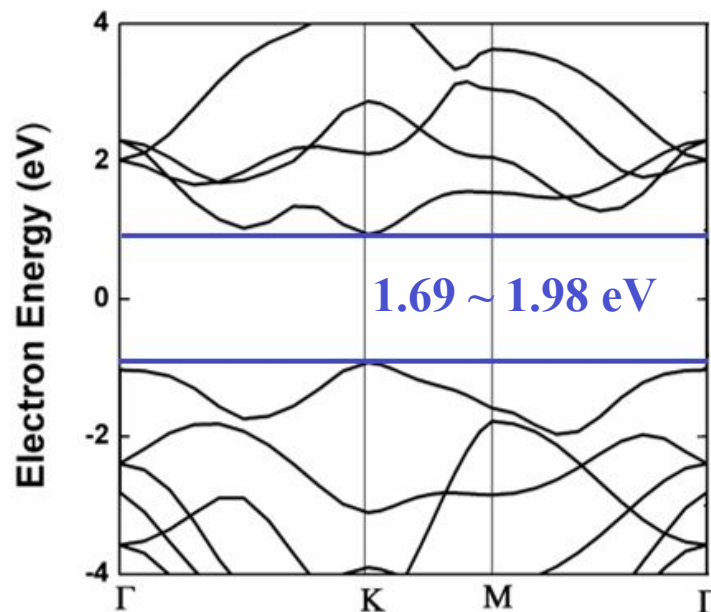
Nat. Mater., 2011, 10(8): 569-581.



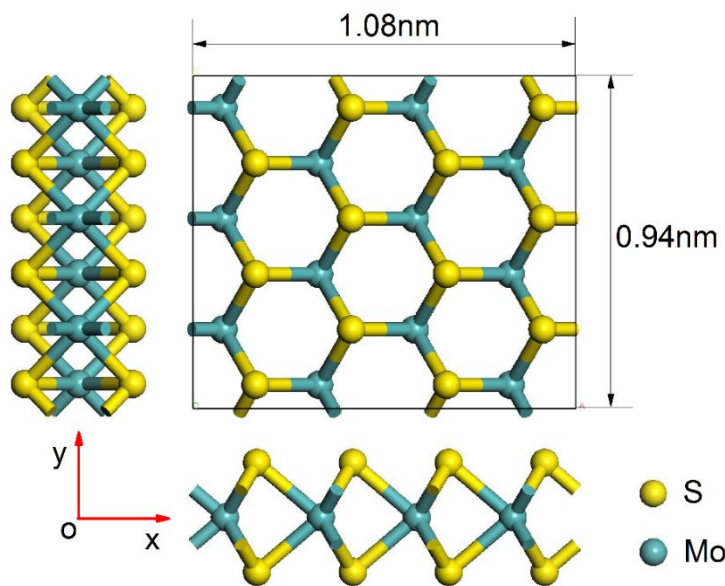
## 单层MoS<sub>2</sub>



Solid State Commun., 2012, 152(10): 909-913.  
 Nano Res., 2012, 5(1): 43-48.  
 Phys. Rev. B, 2013, 87(11): 115418.  
 J. Appl. Phys., 2013, 113(10): 104304.



# 计算模型及方法——导热系数

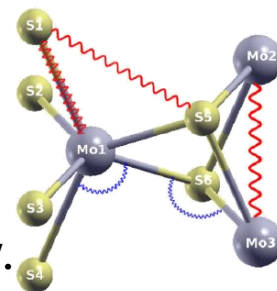


SLMoS<sub>2</sub>的结构示意图

## 势函数

Stillinger-Weber势  
(包含二体力和三体力)

J. Appl. Phys., 2013, 114(6): 064307.



## 计算尺寸

$2 \times 2 \times 1$  ( $2.16 \times 1.88 \times 0.62 \text{ nm}^3$ )



$32 \times 32 \times 1$  ( $34.56 \times 30.28 \times 0.62 \text{ nm}^3$ )

使用LAMMPS, 平衡分子动力学 (EMD)

计算热导率, 由Green-Kubo公式得到

$$\kappa = \frac{1}{3k_B T^2 V} \int_0^\infty \langle \vec{J}(\tau) \cdot \vec{J}(0) \rangle d\tau$$

$k_B$  玻尔兹曼常数

$V$  模拟系统的体积

$T$  绝对温度

$\vec{J}(\tau) \cdot \vec{J}(0)$  热流自相关函数

$\langle \rangle$  统计平均

# 计算模型及方法——热膨胀系数

$$C_V = 3nN_A k_B \int E(x)g(v) dv$$

$$E(x) = \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2}, x = hv / k_B T$$

$g(v)$  是声子态密度，由速度自相关函数的傅里叶变换得到

$$\gamma = -\frac{1}{6} - \frac{1}{2} \frac{d \ln B}{d \ln V}$$

$$\frac{d \ln B}{d \ln V} = \frac{x^2 \frac{d^3 E}{dx^3} - x \frac{d^2 E}{dx^2}}{3x \frac{d^2 E}{dx^2} - 6 \frac{dE}{dx}} - \frac{2}{3}$$

$$\gamma|_{x=1} = -\frac{1}{6} \frac{\frac{d^3 E}{dx^3}}{\frac{d^2 E}{dx^2}} + \frac{1}{3}$$

$$\alpha = \frac{\gamma C_V}{3VB}$$

$$B = -V \frac{dP}{dV}$$

$$P = -\frac{dE}{dV}$$

$$B = V \frac{d^2 E}{dV^2}$$

$$V = V_0 x^3$$

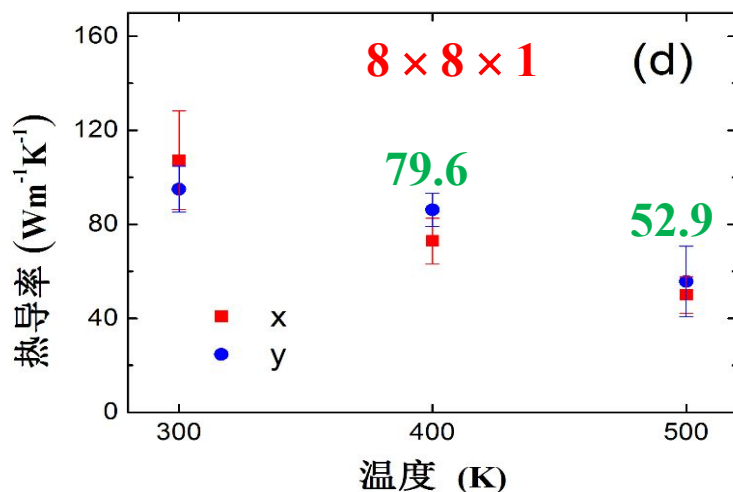
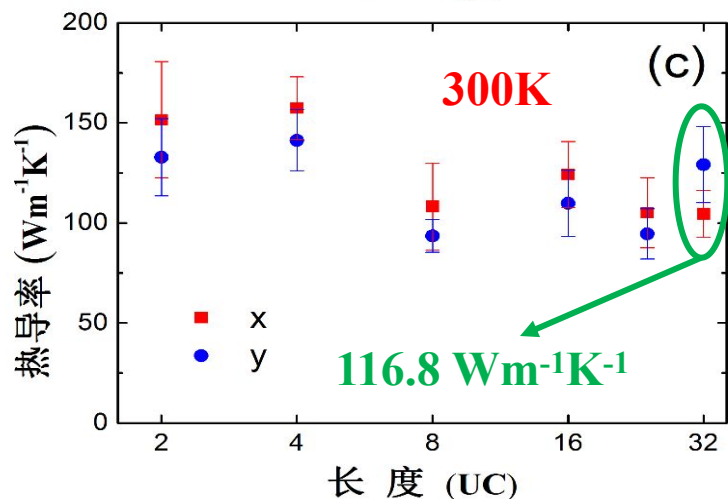
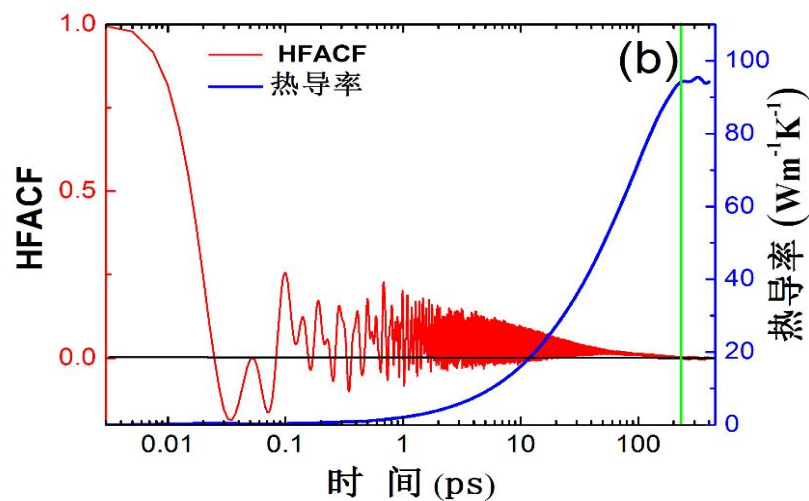
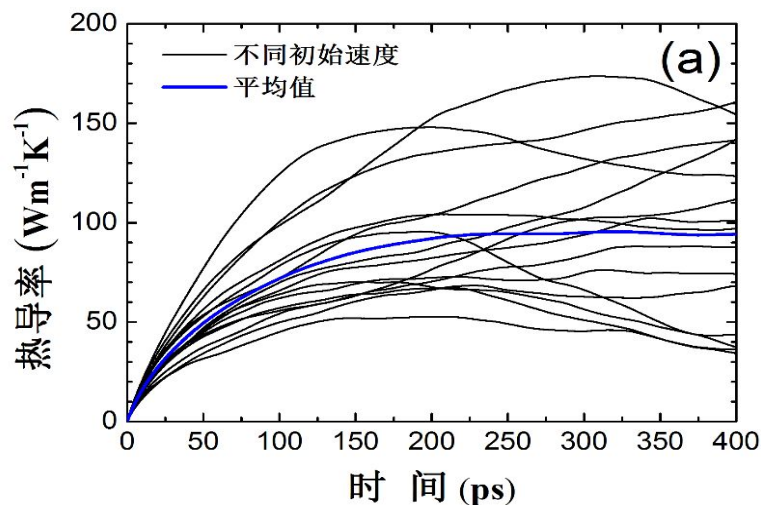
$$B = \frac{1}{9V_0 x} \frac{d^2 E}{dx^2} - \frac{2}{9V_0 x^2} \frac{dE}{dx}$$

- $P$  压强  $x$
- $V$  体积  $V_0$
- $E$  总能  $C_V$
- $B$  等温体积模量

Solid State Ionics, 176.5 (2005): 613-619.

J. Chem Phys 83.12 (1985): 6405-6412.

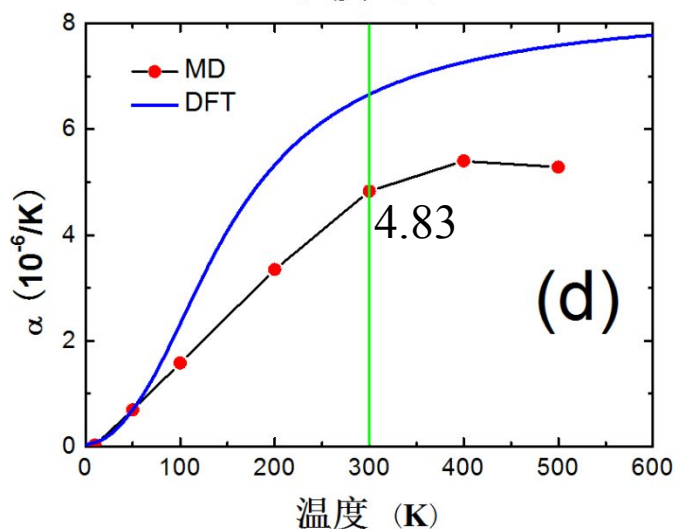
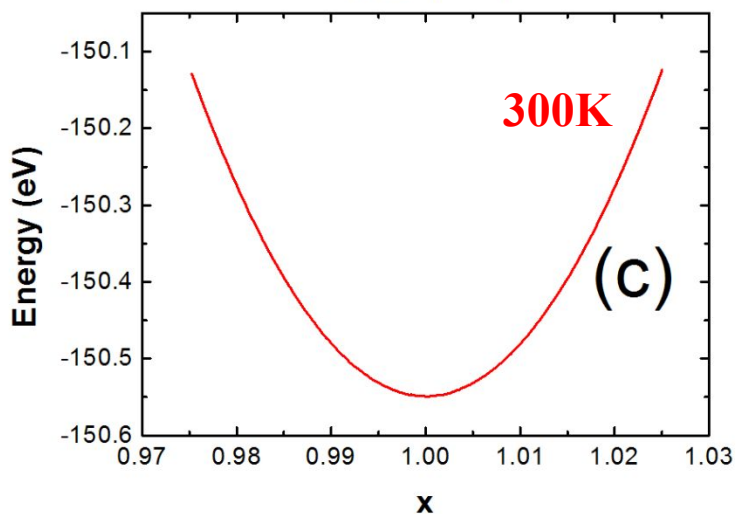
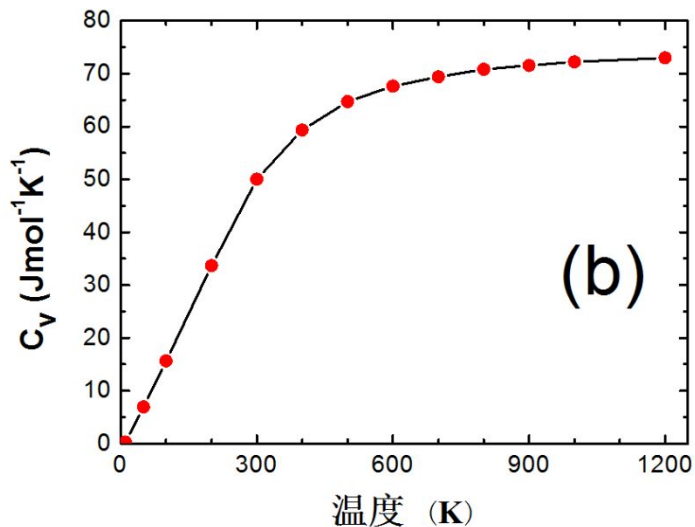
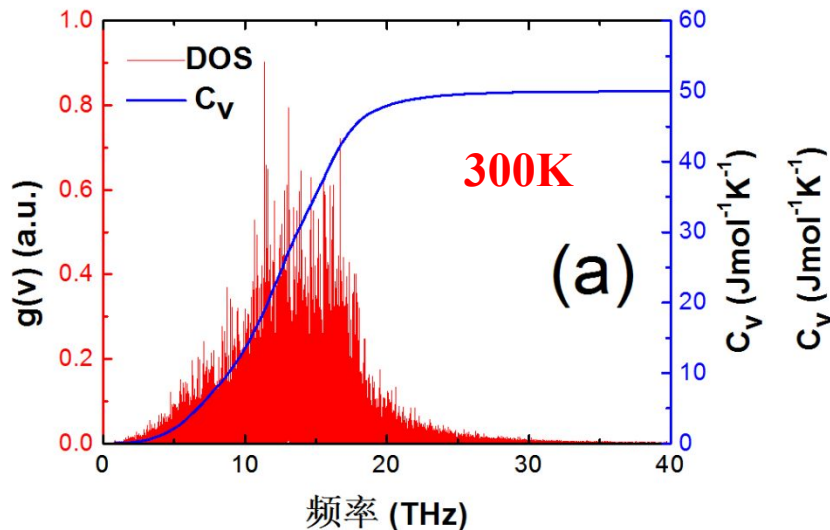
# 结果与讨论——导热系数



导热系数存在微弱的各向异性

(a) 不同初始速度的热导率及平均值； (b) 热流自相关函数与热导率积分曲线；  
 (c) 300K 下 SLMoS<sub>2</sub> 热导与尺寸的变化关系； (d) 8×8×1 结构热导率与温度的关系

# 结果与讨论——热膨胀系数



热膨胀系数低于理论值



非谐性考虑不足  
(声子散射偏低)

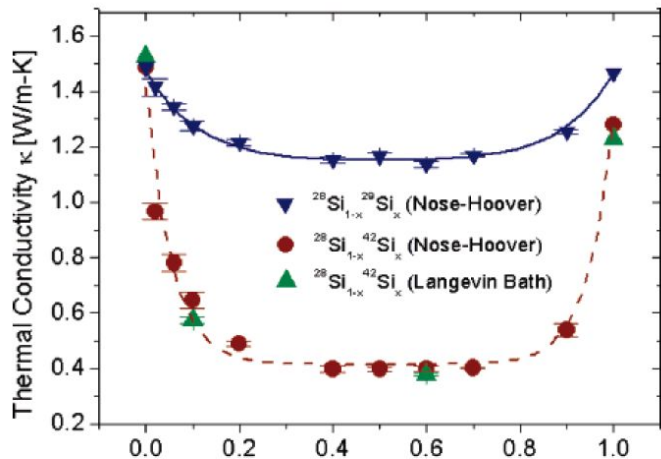


导热系数偏高

(a) 300K时声子振动态密度及比热容的积分曲线；(b) 等容比热容随温度的变化关系；(c) 300K时总能与线应变率的关系；(d) 热膨胀系数与温度的关系。



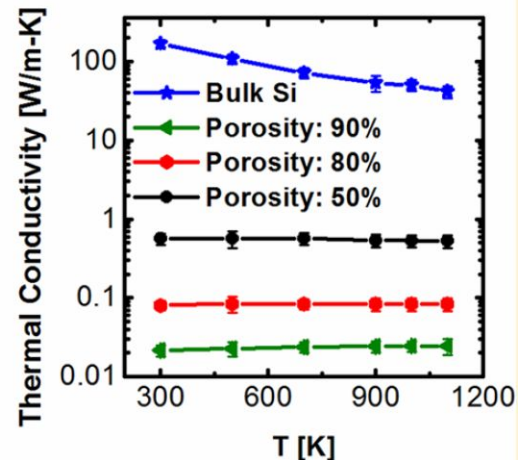
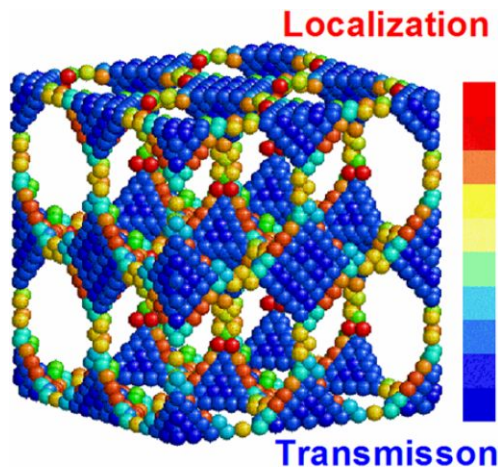
# 结果与讨论——声子工程



The concentration of doping atom ( $x$ )

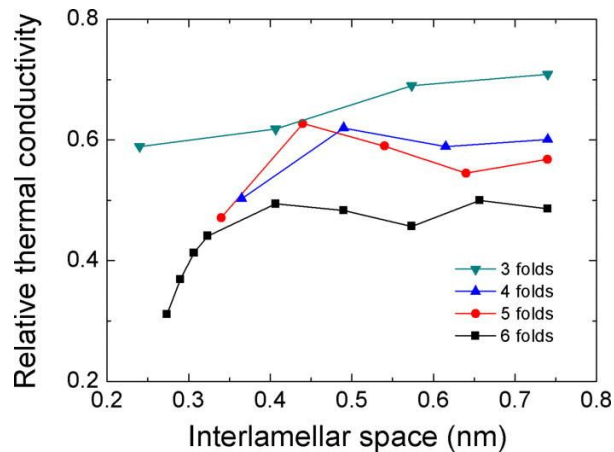
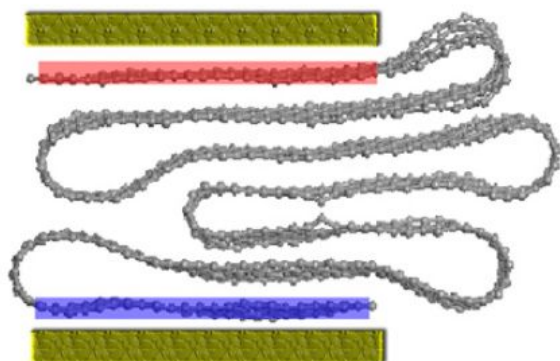
Nano Lett., 2008, 8(1): 276-280.

硅纳米带同位素掺杂



Nano letters, 2008, 8(1): 276-280.

体硅纳米多孔结构



Appl. Phys. Lett., 2012, 100(9): 093107.

石墨烯折叠结构

# 结论

1. 使用分子动力学方法计算了 $\text{SLMoS}_2$ 的热导率，热导率结果是116.8 (300K)、79.6 (400K)、52.9 (500K)  $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 。
  2. 对热膨胀系数的计算表明，势函数对非谐性考虑不足，致使热导率的结果偏高，得到的结果是真实结果的上限。
- 通过声子工程（声子晶体、同位素掺杂等），可实现热导率的大幅降低， $\text{SLMoS}_2$ 有望成为高性能的热电材料。

# 致谢

感谢老师和同学的无私帮助!

感谢国家自然科学基金资助!



51576076(N.Y.), 51376069 (Z.L.)

谢谢！

请批评指正！



華中科技大學

HUZHONG UNIVERSITY OF SCIENCE & TECHNOLOGY