

如何便捷的计算平衡和非平衡的热导呢？

热导率又称“导热系数”，它的数值反映了物质的热传导能力，其定义为单位温度梯度（在 1m 长度内温度降低 1K）在单位时间内经单位导热面所传递的热量。物质的组成、结构及所处的状态（固态、液态和气态）使其具有不同的导热性能。在气体和液体中，通常热量的传递是以分子或原子间相互作用或碰撞的形式实现的；而在金属中，热传导主要是以电子间相互作用和碰撞的方式进行，其中也有声子传热的贡献；在非金属固体中，热传导是通过声子间的相互作用和碰撞来实现的，即通过晶格振动来实现的。虽有差异，但这都是由于物质内部微观粒子相互碰撞和传递而产生的热传导现象。上述三种热传导方式中，速度由快到慢分别为电子碰撞、声子碰撞、分子和原子碰撞。这也是金属的热导率一般大于非金属的原因。导热系数是建筑材料最重要的热湿物性参数之一，与建筑能耗、室内环境及很多其他热湿过程息息相关。

- 方法 1：平衡态分子动力学（Equilibrium Molecular Dynamics, EMD）是模拟系统在平衡状态下来求解热导率，它基于 Green-Kubo 线性响应理论（Linear-response theory）。具体方法是：统计体系内每个粒子的势能、动能和应力张量，进而得到自相关热流，由 Green-Kubo 方程得出热导率，其关系式如下：

$$\lambda = \frac{1}{3Vk_B T^2} \int_0^\infty \langle J(t) * J(0) \rangle dt \quad (1)$$

其中 k_B 为玻尔兹曼常数， V 为系统体积， J 为有效热流。

$$J(t) = \frac{d}{dt} \sum_i r_i(t) e_i(t) \quad (2)$$

其中， r_i 表示粒子 i 空间位置， e_i 表示粒子 i 势能与动能加和。

$$e_i = \frac{1}{2} m v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_j \varphi(r_{ij}) \quad (3)$$

其中， i, j 表示不同粒子， v_i 为粒子 i 的速度， $\varphi(r_{ij})$ 为 i, j 原子间势能。

EMD 方法通常选择微正则和正则系综，且多应用于模拟计算各向同性材料的热导率，对各

向同性材料的模拟计算结果与实际或经验公式相差较多。

应用案例： 交联聚乙烯 (PEX) 的热导率与交联度、链长和拉伸应变相关。通过分子动力学模拟研究表明，热导率随着交联度的增加而增加；当原始链的长度增加时，热导率呈线性增加；当聚合物沿一个方向拉伸时，热导率在拉伸方向上增加，在垂直方向上降低。

MatCloud+案例重复：

1) 通过拖拽组件的形式搭建如下计算 workflow：



2) 设置参数后提交任务，得到可视化的热导率结果

Thermal Conductivity (W/(m*K)) 热导率			
X	Y	Z	Average
0.440369985302446	0.425435495010916	0.303190325512472	0.389665268608611

3) MatCloud+计算结果与文献的对比

	结果 W/(m*K)
MatCloud+	0.39
cal[1]	0.4 +-0.16 W/m K

Reference: [1] Xiong X, Yang M, Liu C, et al. Thermal conductivity of cross-linked polyethylene from molecular dynamics simulation[J]. Journal of Applied Physics, 2017, 122(3): 035104.

- 方法 2: 使用 Muller-Plathe 的 rNEMD 算法的 `fix thermal/conductivity` 命令执行反向非平衡 MD 模拟。动能在模拟盒子的两个不同层中的原子之间交换。这会在两层之间形成温度梯度，可以使用 `fix ave/chunk` 和 `compute ke/atom` 命令进行监控。

$$\lambda = - \frac{\sum_{\text{transfers}} \frac{m}{2} (v_h^2 - v_c^2)}{2tL_xL_y \langle \partial T / \partial z \rangle}$$

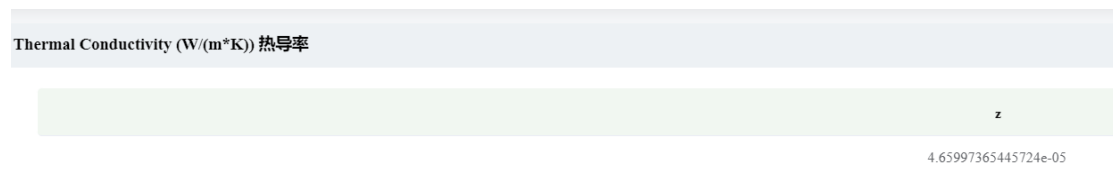
应用案例：UO_{2+x}、(U_{0.8}Pu_{0.2})O_{2-x} 和 UO₂ 结构可通过非平衡分子动力学 (NEMD) 模拟氧/金属比、温度和点缺陷浓度对热导率的影响。结果表明，计算的热导率随着温度和缺陷浓度的增加而降低。

MatCloud+案例重复：

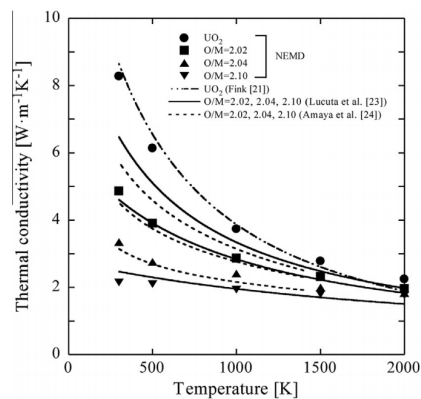
1) 通过拖拽组件的形式搭建如下计算 workflow：



2) 设置参数后提交任务，得到可视化的热导率结果



3) MatCloud+计算结果与文献的对比



UO_{2+x} 体系的热导率随温度变化

截取文献中 600k 下的热导率和平台计算结果的对比如下：

	MatCloud+	Theroy ^[2]
Thermal conductivity (Wm ⁻¹ K ⁻¹)	4.65	5+

Reference: [2] T. Matsumoto et al. / Journal of Nuclear Materials 440 (2013) 580–585

- ◆ MatCloud+平台还支持高通量计算，一个工作流即可完成多个结果的平衡和非平衡下的热导：



两种热导的便捷计算教程到此结束，想要获得详细的操作内容请私信我们。

更多 Matcloud+教程可关注 **b 站迈高科技**
更多动态请关注迈高科技微信公众号

