

清华大学优秀博士学位论文丛书



Tsinghua
theses

边界对纳米结构的 热流调控研究

叶振强 著 Ye Zhenqiang

Study on Heat Flow Manipulation
in Nanostructures Based on Interface

清华大学出版社
TSINGHUA UNIVERSITY PRESS

清华大学优秀博士学位论文丛书

边界对纳米结构的 热流调控研究

叶振强 著 Ye Zhenqiang

Study on Heat Flow Manipulation
in Nanostructures Based on Interface

泉州师范学院内部使用

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书主要从四个方面研究了纳米尺度下边界对热流的影响和调控:石墨烯纳米带边界形状的影响;聚酰胺/硅纳米线界面的热整流效应的实验和分子动力学研究;氢化石墨烯界面的热隐形效应的分子动力学研究;固/液界面的热增强效应的分子动力学研究。希望可以为分子动力学相关领域的研究者提供帮助。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

边界对纳米结构的热流调控研究/叶振强著. —北京:清华大学出版社,2019
(清华大学优秀博士学位论文丛书)

ISBN 978-7-302-53360-3

I. ①边… II. ①叶… III. ①纳米材料—热流—调控—研究 IV. ①TB383

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 168446 号

责任编辑:黎 强 戚 亚

封面设计:傅瑞学

责任校对:王淑云

责任印制:沈 露

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦 A 座 邮 编:100084

社 总 机:010-62770175

邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 刷 者:三河市铭诚印务有限公司

装 订 者:三河市启晨纸制品加工有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:155mm×235mm 印 张:9.5 字 数:159 千字

版 次:2019 年 10 月第 1 版

印 次:2019 年 10 月第 1 次印刷

定 价:99.00 元

产品编号:080952-01

一流博士生教育

体现一流大学人才培养的高度(代丛书序)^①

人才培养是大学的根本任务。只有培养出一流人才的高校,才能够成为世界一流大学。本科教育是培养一流人才最重要的基础,是一流大学的底色,体现了学校的传统和特色。博士生教育是学历教育的最高层次,体现出一所大学人才培养的高度,代表着一个国家的人才培养水平。清华大学正在全面推进综合改革,深化教育教学改革,探索建立完善的博士生选拔培养机制,不断提升博士生培养质量。

学术精神的培养是博士生教育的根本

学术精神是大学精神的重要组成部分,是学者与学术群体在学术活动中坚守的价值准则。大学对学术精神的追求,反映了一所大学对学术的重视、对真理的热爱和对功利性目标的摒弃。博士生教育要培养有志于追求学术的人,其根本在于学术精神的培养。

无论古今中外,博士这一称号都是和学问、学术紧密联系在一起,和知识探索密切相关。我国的博士一词起源于2000多年前的战国时期,是一种学官名。博士任职者负责保管文献档案、编撰著述,须知识渊博并负有传授学问的职责。东汉学者应劭在《汉官仪》中写道:“博者,通博古今;士者,辩于然否。”后来,人们逐渐把精通某种职业的专门人才称为博士。博士作为一种学位,最早产生于12世纪,最初它是加入教师行会的一种资格证书。19世纪初,德国柏林大学成立,其哲学院取代了以往神学院在大学中的地位,在大学发展的历史上首次产生了由哲学院授予的哲学博士学位,并赋予了哲学博士深层次的教育内涵,即推崇学术自由、创造新知识。哲学博士的设立标志着现代博士生教育的开端,博士则被定义为独立从事学术研究、具备创造新知识能力的人,是学术精神的传承者和光大者。

^① 本文首发于《光明日报》,2017年12月5日。

博士生学习期间是培养学术精神最重要的阶段。博士生需要接受严谨的学术训练,开展深入的学术研究,并通过发表学术论文、参与学术活动及博士论文答辩等环节,证明自身的学术能力。更重要的是,博士生要培养学术志趣,把对学术的热爱融入生命之中,把捍卫真理作为毕生的追求。博士生更要学会如何面对干扰和诱惑,远离功利,保持安静、从容的心态。学术精神特别是其中所蕴含的科学理性精神、学术奉献精神不仅对博士生未来的学术事业至关重要,对博士生一生的发展都大有裨益。

独创性和批判性思维是博士生最重要的素质

博士生需要具备很多素质,包括逻辑推理、言语表达、沟通协作等,但是最重要的素质是独创性和批判性思维。

学术重视传承,但更看重突破和创新。博士生作为学术事业的后备力量,要立志于追求独创性。独创意味着独立和创造,没有独立精神,往往很难产生创造性的成果。1929年6月3日,在清华大学国学院导师王国维逝世二周年之际,国学院师生为纪念这位杰出的学者,募款修造“海宁王静安先生纪念碑”,同为国学院导师的陈寅恪先生撰写了碑铭,其中写道:“先生之著述,或有时而不章;先生之学说,或有时而可商;惟此独立之精神,自由之思想,历千万祀,与天壤而同久,共三光而永光。”这是对于一位学者的极高评价。中国著名的史学家、文学家司马迁所讲的“究天人之际,通古今之变,成一家之言”也是强调要在古今贯通中形成自己独立的见解,并努力达到新的高度。博士生应该以“独立之精神、自由之思想”来要求自己,不断创造新的学术成果。

诺贝尔物理学奖获得者杨振宁先生曾在20世纪80年代初对到访纽约州立大学石溪分校的90多名中国学生、学者提出:“独创性是科学工作者最重要的素质。”杨先生主张做研究的人一定要有独创的精神、独到的见解和独立研究的能力。在科技如此发达的今天,学术上的独创性变得越来越难,也愈加珍贵和重要。博士生要树立敢为天下先的志向,在独创性上下功夫,勇于挑战最前沿的科学问题。

批判性思维是一种遵循逻辑规则、不断质疑和反省的思维方式,具有批判性思维的人勇于挑战自己、敢于挑战权威。批判性思维的缺乏往往被认为是中国学生特有的弱项,也是我们在博士生培养方面存在的一个普遍问题。2001年,美国卡内基基金会开展了一项“卡内基博士生教育创新计划”,针对博士生教育进行调研,并发布了研究报告。该报告指出:在美国和

欧洲,培养学生保持批判而质疑的眼光看待自己、同行和导师的观点同样非常不容易,批判性思维的培养必须要成为博士生培养项目的组成部分。

对于博士生而言,批判性思维的养成要从如何面对权威开始。为了鼓励学生质疑学术权威、挑战现有学术范式,培养学生的挑战精神和创新能力,清华大学在2013年发起“巅峰对话”,由学生自主邀请各学科领域具有国际影响力的学术大师与清华学生同台对话。该活动迄今已经举办了21期,先后邀请17位诺贝尔奖、3位图灵奖、1位菲尔兹奖获得者参与对话。诺贝尔化学奖得主巴里·夏普莱斯(Barry Sharpless)在2013年11月来清华参加“巅峰对话”时,对于清华学生的质疑精神印象深刻。他在接受媒体采访时谈道:“清华的学生无所畏惧,请原谅我的措辞,但他们真的很有胆量。”这是我听到的对清华学生的最高评价,博士生就应该具备这样的勇气和能力。培养批判性思维更难的一层是要有勇气不断否定自己,有一种不断超越自己的精神。爱因斯坦说:“在真理的认识方面,任何以权威自居的人,必将在上帝的嬉笑中垮台。”这句名言应该成为每一位从事学术研究的博士生的箴言。

提高博士生培养质量有赖于构建全方位的博士生教育体系

一流的博士生教育要有一流的教育理念,需要构建全方位的教育体系,把教育理念落实到博士生培养的各个环节中。

在博士生选拔方面,不能简单按考分录取,而是要侧重评价学术志趣和创新潜力。知识结构固然重要,但学术志趣和创新潜力更关键,考分不能完全反映学生的学术潜质。清华大学在经过多年试点探索的基础上,于2016年开始全面实行博士生招生“申请-审核”制,从原来的按照考试分数招收博士生转变为按科研创新能力、专业学术潜质招收,并给予院系、学科、导师更大的自主权。《清华大学“申请-审核”制实施办法》明晰了导师和院系在考核、遴选和推荐上的权力和职责,同时确定了规范的流程及监管要求。

在博士生指导教师资格确认方面,不能论资排辈,要更看重教师的学术活力及研究工作的前沿性。博士生教育质量的提升关键在于教师,要让更多、更优秀的教师参与到博士生教育中来。清华大学从2009年开始探索将博士生导师评定权下放到各学位评定分委员会,允许评聘一部分优秀副教授担任博士生导师。近年来学校在推进教师人事制度改革过程中,明确教科研系列助理教授可以独立指导博士生,让富有创造活力的青年教师指导优秀的青年学生,师生相互促进、共同成长。

在促进博士生交流方面,要努力突破学科领域的界限,注重搭建跨学科的平台。跨学科交流是激发博士生学术创造力的重要途径,博士生要努力提升在交叉学科领域开展科研工作的能力。清华大学于2014年创办了“微沙龙”平台,同学们可以通过微信平台随时发布学术话题、寻觅学术伙伴。3年来,博士生参与和发起“微沙龙”12 000多场,参与博士生达38 000多人次。“微沙龙”促进了不同学科学生之间的思想碰撞,激发了同学们的学术志趣。清华于2002年创办了博士生论坛,论坛由同学自己组织,师生共同参与。博士生论坛持续举办了500期,开展了18 000多场学术报告,切实起到了师生互动、教学相长、学科交融、促进交流的作用。学校积极资助博士生到世界一流大学开展交流与合作研究,超过60%的博士生有海外访学经历。清华于2011年设立了发展中国家博士生项目,鼓励学生到发展中国家亲身体验和调研,在全球化背景下研究发展中国家的各类问题。

在博士学位评定方面,权力要进一步下放,学术判断应该由各领域的学者来负责。院系二级学术单位应该在评定博士论文水平上拥有更多的权力,也应担负更多的责任。清华大学从2015年开始把学位论文的评审职责授权给各学位评定分委员会,学位论文质量和学位评审过程主要由各学位分委员会进行把关,校学位委员会负责学位管理整体工作,负责制度建设和争议事项处理。

全面提高人才培养能力是建设世界一流大学的核心。博士生培养质量的提升是大学办学质量提升的重要标志。我们要高度重视、充分发挥博士生教育的战略性、引领性作用,面向世界、勇于进取,树立自信、保持特色,不断推动一流大学的人才培养迈向新的高度。



清华大学校长

2017年12月5日

丛书序二

以学术型人才培养为主的博士生教育,肩负着培养具有国际竞争力的高层次学术创新人才的重任,是国家发展战略的重要组成部分,是清华大学人才培养的重中之重。

作为首批设立研究生院的高校,清华大学自20世纪80年代初开始,立足国家和社会需要,结合校内实际情况,不断推动博士生教育改革。为了提供适宜博士生成长的学术环境,我校一方面不断地营造浓厚的学术氛围,一方面大力推动培养模式创新探索。我校已多年运行一系列博士生培养专项基金和特色项目,激励博士生潜心学术、锐意创新,提升博士生的国际视野,倡导跨学科研究与交流,不断提升博士生培养质量。

博士生是最具创造力的学术研究新生力量,思维活跃,求真求实。他们在导师的指导下进入本领域研究前沿,吸取本领域最新的研究成果,拓宽人类的认知边界,不断取得创新性成果。这套优秀博士学位论文丛书,不仅是我校博士生研究工作前沿成果的体现,也是我校博士生学术精神传承和光大的体现。

这套丛书的每一篇论文均来自学校新近每年评选的校级优秀博士学位论文。为了鼓励创新,激励优秀的博士生脱颖而出,同时激励导师悉心指导,我校评选校级优秀博士学位论文已有20多年。评选出的优秀博士学位论文代表了我校各学科最优秀的博士学位论文的水平。为了传播优秀的博士学位论文成果,更好地推动学术交流与学科建设,促进博士生未来发展和成长,清华大学研究生院与清华大学出版社合作出版这些优秀的博士学位论文。

感谢清华大学出版社,悉心地为每位作者提供专业、细致的写作和出版指导,使这些博士论文以专著方式呈现在读者面前,促进了这些最新的优秀研究成果的快速广泛传播。相信本套丛书的出版可以为国内外各相关领域或交叉领域的在读研究生和科研人员提供有益的参考,为相关学科领域的发展和优秀科研成果的转化起到积极的推动作用。

感谢丛书作者的导师们。这些优秀的博士学位论文,从选题、研究到成文,离不开导师的精心指导。我校优秀的师生导学传统,成就了一项项优秀的研究成果,成就了一大批青年学者,也成就了清华的学术研究。感谢导师们为每篇论文精心撰写序言,帮助读者更好地理解论文。

感谢丛书的作者们。他们优秀的学术成果,连同鲜活的思想、创新的精神、严谨的学风,都为致力于学术研究的后来者树立了榜样。他们本着精益求精的精神,对论文进行了细致的修改完善,使之在具备科学性、前沿性的同时,更具系统性和可读性。

这套丛书涵盖清华众多学科,从论文的选题能够感受到作者们积极参与国家重大战略、社会发展问题、新兴产业创新等的研究热情,能够感受到作者们的国际视野和人文情怀。相信这些年轻作者们勇于承担学术创新重任的社会责任感能够感染和带动越来越多的博士生,将论文书写在祖国的大地上。

祝愿丛书的作者们、读者们和所有从事学术研究的同行们在未来的道路上坚持梦想,百折不挠!在服务国家、奉献社会和造福人类的事业中不断创新,做新时代的引领者。

相信每一位读者在阅读这一本本学术著作的时候,在吸取学术创新成果、享受学术之美的同时,能够将其中所蕴含的科学理性精神和学术奉献精神传播和发扬出去。



清华大学研究生院院长

2018年1月5日

作者序言

传热学是研究热量传递规律的一门学科,传热的基本方式有热传导、热对流和热辐射三种。热传导是日常生活中最常见的传热方式之一,也是本书关注的重点。热传导是指当不同物体之间或同一物体内部存在温差时,热量就会通过物体内部分子、原子和电子的微观振动、位移和相互碰撞而发生传递的现象。

导热的基本定律是傅里叶导热定律,它指出单位时间内通过给定截面的热量正比于垂直于该截面方向上的温度梯度和截面面积,并且热量传递的方向与温度升高的方向相反。在传统的工业领域里,傅里叶导热定律得到了广泛的应用。但是,傅里叶导热定律是一种唯象定律,它和描述粒子扩散的菲克定律、描述流体黏性的牛顿定律一样,都是基于实验结果得出来的经验规律。唯象定律的研究对象都是平衡态或者准平衡态系统。准平衡态系统是指偏离平衡态不远的系统,这一类系统可以划分成宏观上足够小、微观上足够大的微元,每个微元体系可以看成是平衡态系统。但是,当系统的时间尺度和空间尺度降到足够小的情况下,系统将无法看成准平衡系统。时间尺度的标杆是导热粒子的弛豫时间,它表示系统到达平衡态所需的时间,通常在皮秒量级。空间尺度的标杆是导热粒子的平均自由程,即导热粒子相互发生碰撞前走过的距离,通常在纳米量级。这里的导热粒子因材施教,气体的导热粒子是气体分子,金属的导热粒子是电子和声子,石墨烯等晶体材料的导热粒子则是声子。本书的研究重点是声子导热,声子是量子化的晶格振动的能量,是晶体材料导热过程中的能量载体。

随着科技的发展,纳米技术得到广泛的应用。纳米尺度的狭义定义通常指 $1\sim 100\text{nm}$,接近于平均自由程。目前的研究结果表明傅里叶导热定律在纳米尺度下不适用。譬如,对于硅纳米线、碳纳米管、石墨烯等低维纳米材料而言,根据傅里叶导热定律得到的热导率随系统特征尺寸的变化而变化;另外,研究还发现纳米材料边界处的热流密度低于中心区域的热流密度。因此,傅里叶导热定律不能够准确描述纳米结构中的热输运规律。纳

米结构的特点就是尺寸小、面体比高,边界影响显著。纳米结构与体材料相比,最大的不同就是边界效应。需要强调的是,界面是一种特殊边界,因此本书中所指的“边界”包含“界面”。由于边界效应,纳米系统的热流由扩散输运引起的扩散热流和弹道输运引起的弹道热流两部分组成,扩散热流可以通过温度梯度描述,而弹道热流则不行。由此可见,研究纳米结构中边界对热流的影响,对弥补现有傅里叶导热定律的不足有着重要意义。

本书围绕边界对热流影响相关的科学问题,从多个方面阐述了如何利用边界实现对热流的调控:

(1) 以石墨烯纳米带为研究对象,揭示不同的边界形状对纳米带热流分布的影响,并建立声子气黏性模型来解释边界对热流的影响。

(2) 利用实验手段和分子动力学方法研究无机材料/有机材料纳米界面的热整流现象。两种材料性质迥异,有望通过边界的影响来产生热整流现象。

(3) 利用氢化石墨烯的界面设计热斗篷。希望通过氢原子构建热流通道,在石墨烯基底上实现纳米尺度热隐形。

(4) 研究固/液界面的导热增强现象。以液态氩(Ar)和金属金(Au)为研究对象,用分子动力学方法研究固/液界面附近的热流分布。

以上四方面的内容涉及纳米尺度导热领域热点问题,即尺寸效应、热整流、热隐形、热整流,作者通过具体案例的分析,对相关问题提出了一些解决思路。

作者希望本书内容能够促进热管理、热设计等领域的发展,引起人们对纳米结构中热流研究的重视。书中的研究方法以分子动力学为主,希望能够为广大分子动力学学习者提供帮助。

叶振强

2018年10月

摘要

纳米结构材料具有尺寸小、面体比高的特点,边界效应显著。针对纳米尺度导热,目前主要关注的是边界对热物性和温度场的影响,而在纳米尺度下,由于傅里叶导热定律不适用,热流无法单纯地通过温度场和热导率描述,不能反映完整的热流场。所以,对热流调控的研究既富有科学意义,又极具应用价值。本书从多个角度研究了纳米尺度下边界对热流的影响和调控。

以宽度约为 4 nm 的石墨烯纳米带为例,研究了扶手椅形和锯齿形边界对色散关系、弛豫时间、比热容、热导率和热流分布的影响。边界使热导率大大降低,并且锯齿形边界的热导率高于扶手椅形的热导率,两者分别为 $585.4 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ 和 $396.8 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ 。通过研究热流分布发现,界面处热流衰减显著,而且扶手椅形边界的衰减程度大于锯齿形。基于热质理论建立声子气黏性模型,得到扶手椅形和锯齿形的黏度分别为 $3.1 \times 10^{-8} \text{ Pa} \cdot \text{S}$ 和 $2.2 \times 10^{-8} \text{ Pa} \cdot \text{S}$ 。扶手椅形纳米带声子气的边界滑移更小,热流更小,热导率更低。

针对聚酰胺(PA)/硅(Si)纳米线界面,首次在实验中观测到纳米线界面产生的热整流效应。结果显示当热流从 Si 流向 PA 时热导更高,热整流系数约为 4%,测量误差小于 1%。分子动力学模拟表明,热整流的主要原因在于正、反热流对应的声子局域化程度不同,热流从 PA 流向 Si 时的局域化程度大于 Si 流向 PA 时,因此后者对应的热导更高。

基于氢化石墨烯界面,设计得到纳米热隐形斗篷。分子动力学模拟分析了影响斗篷热隐形效率的主要因素,包括斗篷厚度、氢化浓度、氢排布方式、官能团质量等。结果表明氢化浓度增加,热隐形效率增加;而斗篷厚度则对结果产生非单调性影响,热隐形效率在特定厚度下达到极大值。氢排布方式对热隐形效率的影响与对热导率的影响完全相反,热导率越低的排布方式对应的热隐形效率越高。增加官能团质量也能够改善热隐形效率。

在液态氩(Ar)和金属金(Au)的界面附近,分子动力学模拟表明 Ar 原子数密度大大增加,出现类似于晶体的规则排布。远离 Ar/Au 界面的 Ar 原子中几乎不存在声子,而在界面附近则激发出大量声子。热导率的计算结果显示近壁面 Ar 原子的热导率相比中心区域升高约 50%,并呈现出各向异性的特点。其中,垂直于界面方向的热导率相对较低。另外,界面势能作用参数越大,导热增强越显著,证实了界面对导热的增强效应。

关键词: 边界;热流调控;热整流;热隐形;热增强

Abstract

Boundary effect is significant at nanoscale because nanomaterials have super high specific surface ratio. The previous studies mostly focus on the influence of the boundary on thermal properties and temperature fields. However, Fourier law is invalid at nanoscale, so the heat flow cannot be described merely based on the thermal conductivity and temperature gradient. There is still no equation can reflect the entire heat flow field, which conceals the mechanism of nanoscale heat transfer in some sense. Hence, the studies on heat flow manipulation is both of scientific and applied significance. In this dissertation, we investigate how boundaries affect heat flow, and how to achieve the manipulation of heat flow.

We study the spectral phonon properties of graphene nanoribbons (GNR), especially on the influence of edge chirality, i. e. armchair and zigzag. Boundary effect leads to a sharp reduction of thermal conductivity. The thermal conductivity of zigzag GNR is higher than armchair GNR, which is $585.4\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ and $396.8\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$. The heat flow profiles show that a remarkable degradation can be seen nearby the edge. In addition, the heat flow degradation of armchair GNR is stronger than zigzag GNR. We establish the model of phonon gas viscosity based on thermomass theory, estimating that the phonon gas viscosities of armchair GNR and zigzag GNR are $3.1 \times 10^{-8} \text{Pa} \cdot \text{S}$ and $2.2 \times 10^{-8} \text{Pa} \cdot \text{S}$. Hence, the heat flow boundary slip of armchair GNR is weaker than zigzag GNR, resulting in a lower heat flow and thermal conductivity of armchair GNR.

The thermal rectification (TR) in polyamide (PA) and silicon (Si) nanowire interface is experimentally investigated for the first of this kind. It shows that the heat flow from Si to PA is favored. TR ratio is about

4% with less than 1% uncertainty. The molecular dynamics simulations show that the mechanism of nanowire interface TR can be explained by the phonon localization theory. The extent of phonon localization of PA-to-Si heat flow is greater than Si-to-PA heat flow. Hence, the latter has higher thermal conductivity.

We designed a graphene-based nanoscale thermal cloak, achieving the thermal cloaking in nanostructures. The influences of cloak thickness, hydrogen fraction, hydrogen distribution and mass of functional group are investigated by the molecular dynamics simulations. It is found that the cloaking performance is correlated with the functionalization fraction and it has a local maximum at a certain thickness, since the heat flow reduction in the exterior and the protected region reverses if the thickness is excessive. The influence of hydrogenation distribution on thermal cloaking is totally opposite to that of the thermal conductivity. The higher thermal conductivity, the poorer thermal cloaking performance. The atomic mass of the functional group is also positively correlated with the cloaking performance.

The molecular dynamics simulations show that the atom density of Ar increases remarkably and a quasi-crystal structure appears nearby the Ar and Au interface. There are no phonons in the Ar atoms that far from the Ar/Au interface. However, the closer to the interface, the more phonons are excited. The thermal conductivity of the Ar atoms nearby the interface is anisotropic, the mean value of which is 50% higher than the thermal conductivity of the atoms far from the interface. The direction that perpendicular to the interface has the lowest thermal conductivity. The increase of interface potential parameters can promote the thermal enhancement nearby the interface. Hence, it is demonstrated that the heat conduction can be enhanced by the interface.

Key words: Boundary; Heat flow manipulation; Thermal rectification; Thermal cloaking; Thermal enhancement

主要符号对照表

A	振幅	[m]
a_0	键长	[m]
c	比热容	[J/(K · m ³)]
D	质量扩散系	[m ² /s]
D	动力学矩阵	
D_h	声子气扩散系数	[m ² /s]
E	总能量	[J]
E_k	动能	[J]
E_p	势能	[J]
e	极化向量	
F	合外力	[N]
f	声子数密度	
f_0	平衡态下声子数密度	
f_h	单位体积热质阻力	[N/m ³]
G	热导	[W/K]
G_p	样品热导	[W/K]
I	电流	[A]
J	微观热流	[W]
k_B	玻尔兹曼常数	[J/K]
l	平均自由程	[m]
M_h	声子动量	[kg · m/s]
m_b	原子质量	[kg]
N_T	原胞总数	
p_h	热质压力	[Pa]
Q	简正模式	[m]
	热流	[W]

Q_h	加热端焦耳热	[W]
Q_s	样品热流	[W]
q	波矢	[rad/m]
R	电阻	[Ω]
r_0	原子平衡位置	[m]
r_{ij}	原子间距	[m]
s	原胞内原子总数	
T	温度	[K]
T_H	高温热浴温度	[K]
T_L	低温热浴温度	[K]
t	时间	[s]
u	原子振动波形	[m]
u_h	热质速度	[m/s]
V	体积	[m ³]
	电压	[V]
v_g	声子群速度	[m/s]
x, y, z	空间坐标	

希腊符号

α	热扩散系数	[m ² /s]
β	单位体积阻力系数	[kg/(s · m ³)]
Δ	温度变化	[K]
δ	偏差	
ϵ	能量参数	[J]
η_c	热汇聚效率	
η_h	声子气黏度	[Pa · s]
η_{TC}	热隐形效率	
η_{TR}	热整流系数	
Λ	频谱区间	
λ	热导率	[W/(m · K)]
ν	频率	[Hz]
ρ_h	热质密度	[kg/m ³]