

合肥研究院等在分子水平上调控复合材料导热性能研究中取得进展

近日，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所高分子与复合材料研究部与丹麦奥胡斯大学、挪威科学技术大学等合作，通过选择合适的硅烷偶联剂结构，实现从分子水平上调控复合材料导热性能，并进一步探究其调控机理。相关研究成果以Covalent coupling regulated thermal conductivity of poly(vinyl alcohol)/boron nitride composite film based on silane molecular structure为题，发表在Composites Part A：Applied Science and Manufacturing上。

随着电子产品朝着微型化、多功能化方向发展，其集成化程度迅速升高，功率密度大幅增加，由此带来的散热困难影响器件的工作稳定性和寿命。目前，高分子材料在电子封装材料中占据主导地位，一般高分子材料都是热的不良导体，开发高导热的高分子热管理材料成为亟待解决的问题。向高分子材料中添加高导热组元是提高复合材料导热性能的常用方法之一。然而，热载体声子容易被导热组元和高分子界面散射，限制了热量传递效率。高分子/导热组元界面成为热量传递的薄弱环节，成为制约复合材料导热性能提升的重要因素。通过共价键链接高分子/导热组元界面为增强热传导的常用方法，一般可有效降低界面热阻。但引入共价键分子自身会带来一定热阻，也有报道某些情况下会降低复合材料热导率。

为了阐明共价键结构对复合材料导热性能的影响，以指导高导热复合材料设计，研究团队通过硅烷偶联剂共价连接聚乙烯醇（PVA）和羟基改性氮化硼fBN制备复合材料。通过对比正硅酸乙酯（TEOS），乙烯基三乙氧基硅烷（VTES），3-缩水甘油醚氧丙基三甲氧基硅烷（GPTMS）三种硅烷偶联剂，发现TEOS和VTES，通过水解形成Si-OH，并进一步与PVA和fBN反应，形成共价键。然而TEOS因可水解生成更多的Si-OH（4个），相比于VTES（3个Si-OH），更倾向于发生自缩聚反应。由于侧链较长，GPTMS更倾向侧链环氧基团开环后与PVA和fBN作用，反应活性点相对较少，共价键作用较弱。

通过系统研究硅烷偶联剂对PVA/fBN复合材料的导热性能影响发现，随着TEOS和VTES含量的增加，复合材料导热性能逐步提升；GPTMS却呈现出相反趋势。对比实验结果结合分子模拟验证发现，增加硅烷偶联剂分子中可水解的Si-OR数量，导致硅烷偶联剂倾向于自缩聚，进而降低其链接PVA/fBN的效率，致使导热性能提升效果下降。在导热通路中引入长分子链，其自身热阻作用大于因共价键链接高分子/导热组元而带来的导热提升作用。研究团队利用红外热成像技术验证了硅烷偶联剂调控复合材料的热传递性能效果。结果显示PVA-VTES-fBN热响应速度最快，进一步证实了VTES具有最优的改性效果。同时，通过对复合材料的LED装置集成验证发现，VTES较GPTMS在2分钟内可降低LED芯片中心点温度0.7℃。

该研究通过选择合适的硅烷偶联剂结构，可实现从分子水平上调控复合材料导热性能，并对聚合物基热管理材料的设计具有指导意义。合肥研究院副研究员宫艺和研究员田兴友为论文的共同通讯作者，合肥研究院博士生程华和丹麦奥胡斯大学博士赵凯为论文的共同第一作者。研究工作得到国家重点研发计划，中科院STS重点项目，中科院青年创新促进会，中科院合肥研究院院长基金和Research Council of Norway等的资助。

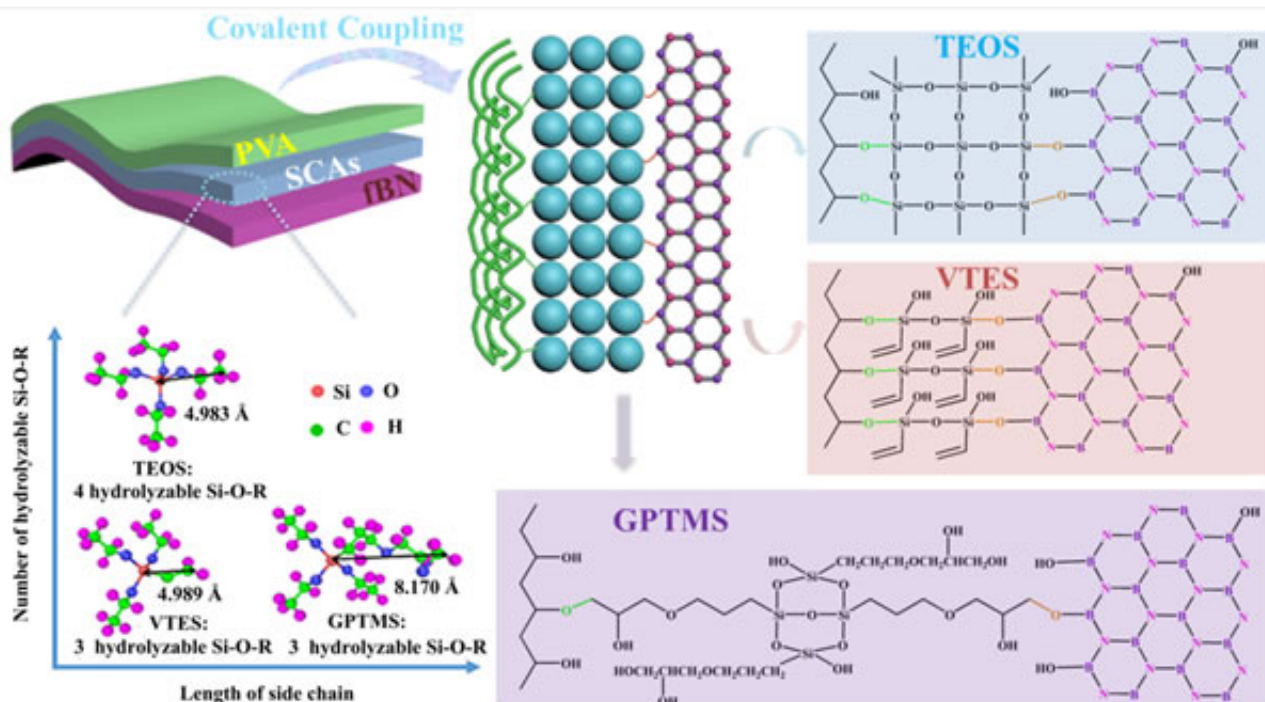


图1.三种硅烷偶联剂与PVA/fBN交联结构示意图。

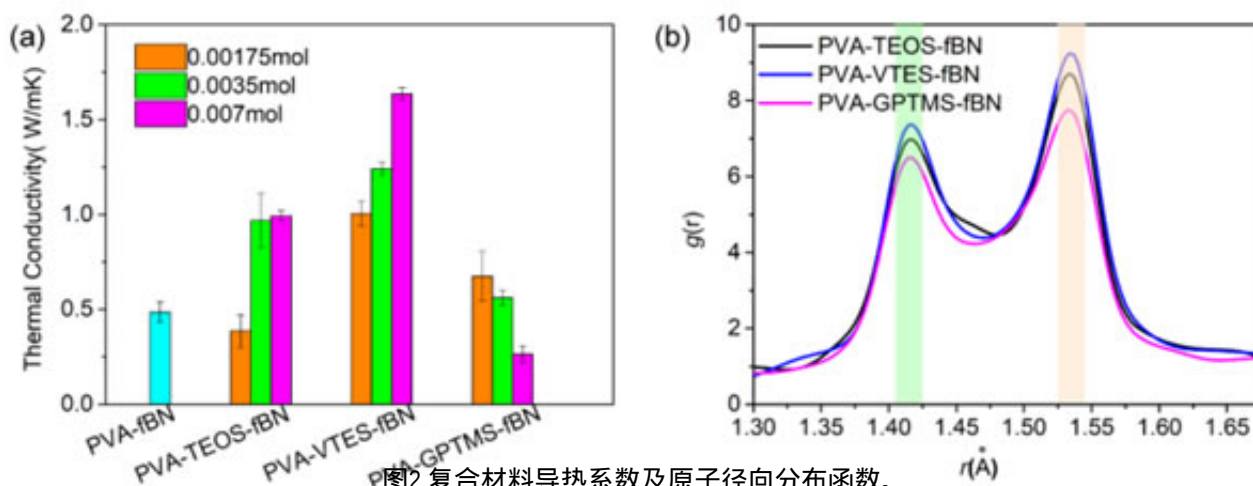


图2.复合材料导热系数及原子径向分布函数。

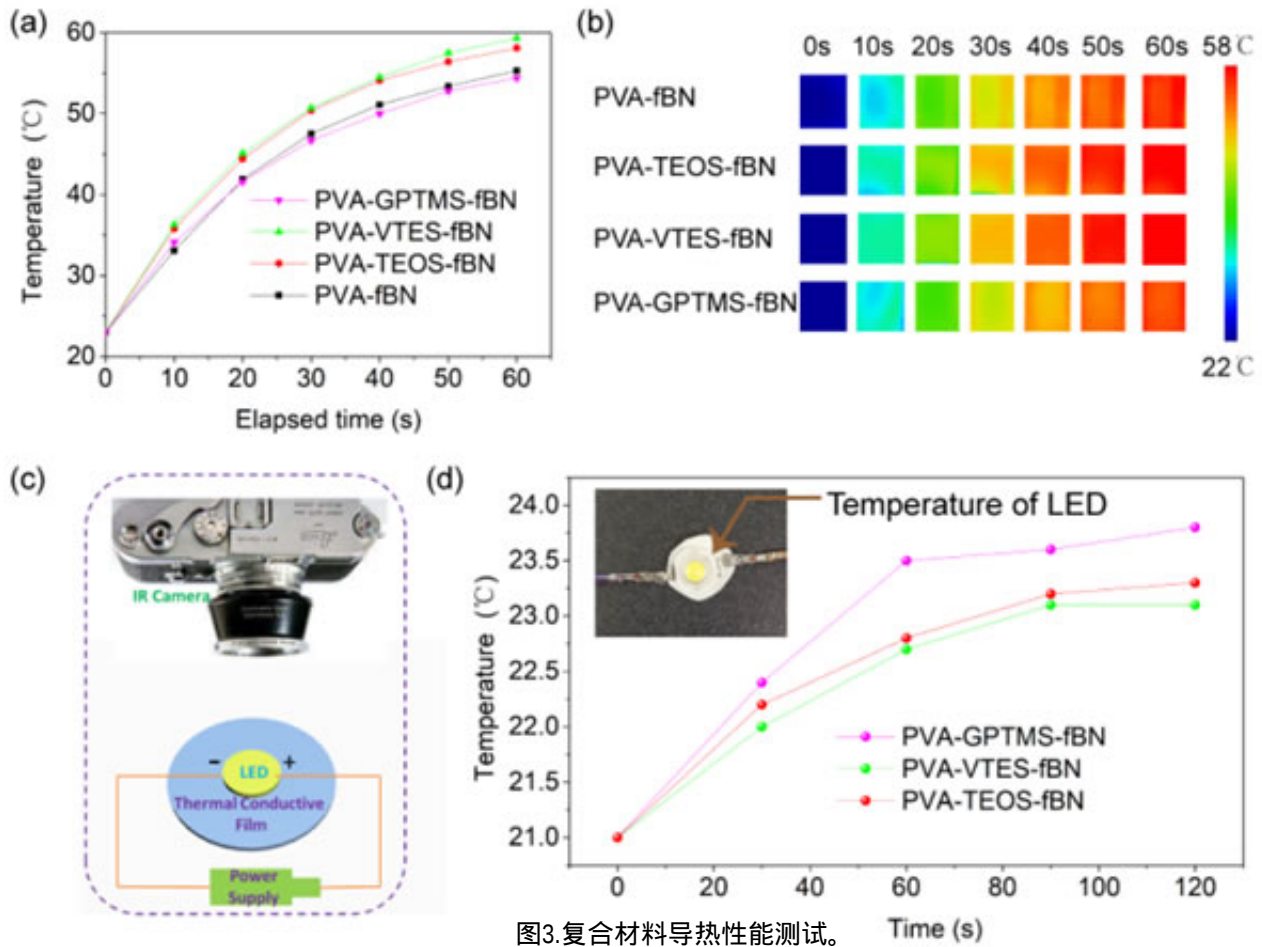


图3.复合材料导热性能测试。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/159140.html>