



不同方向的声子模式对石墨烯热导率贡献的研究

安盟, 宋琪琛, 杨诺* nuo@hust.edu.cn

Nano Heat Group, <http://energy.hust.edu.cn/nanoheat/>

华中科技大学能源与动力工程学院, 武汉, 430074



文章编号: 153708

华中科技大学
Huazhong University of Science and Technology

摘要

本文采用非平衡态分子动力学 (NEMD) 模拟研究了室温下, 利用冻结法分别计算了不同方向的声子模式对有限尺寸的石墨烯热导率的贡献。研究表明石墨烯的热导率小于利用冻结方法分别计算得到的垂直于平面声子模式的热导率和平面内声子模式的热导率之和。此外, 我们还计算了石墨烯的功率谱和利用冻结方法分别计算了垂直于平面声子模式的功率谱和平面内声子模式的功率谱。与石墨烯功率谱相比, 利用冻结方法计算得到的平面内声子模式的功率谱在高频部分出现更多的尖峰, 表示更多的传热通道。由此可得, 冻结法抑制了平面内声子模式和垂直于平面声子模式间存在耦合作用, 减小了声子散射。本工作有助理解不同模式之间传热的内在机制。

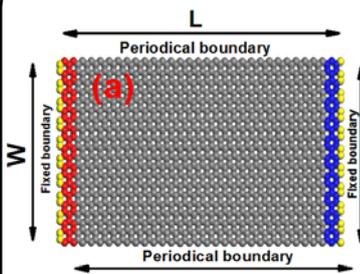


图1 (a) NEMD方法计算有限尺寸石墨烯热导率的示意图, 将两端的原子 (黄色) 固定, 靠近两端的原子被施加热浴并分别保持310K (红色) 和290K (蓝色);

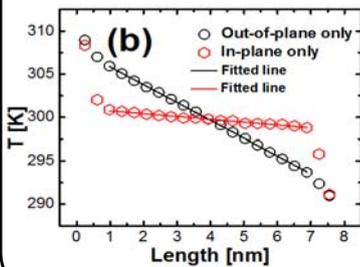


图1 (b) 利用冻结方法分别计算得到的平面内声子模式和垂直于平面声子模式的温度分布, 对线性区域使用最小二乘拟合 (红色直线和黑色直线)。

方法与模型

NEMD模拟

- Morse相互作用势函数
- Velocity Verlet algorithm
- 郎之万热库
- 热导率:
$$\kappa = -\frac{J}{A \cdot \nabla T}$$

本文采用冻结的方法计算了不同方向声子模式的热导率。第一种情况, 我们利用NEMD模拟得到石墨烯 (Both) 的热导率。第二种情况, 将原子在平面内的振动冻结, 仅允许其在垂直平面方向振动, 计算得到了垂直于平面的声子模式 (Out-of-plane only) 的热导率。第三种情况, 将原子在垂直于平面方向的振动冻结, 仅允许其在平面内振动, 计算得到了平面内声子模式 (In-plane only) 的热导率。

模拟结果和分析

1. 不同方向声子模式热导率的尺寸与温度效应。

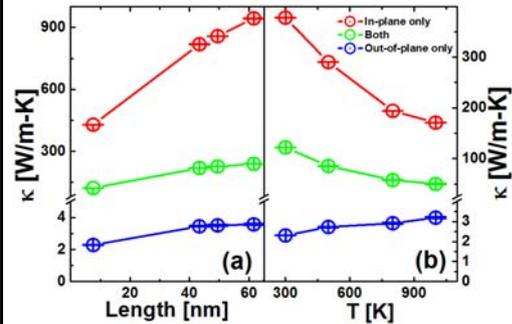


图2 (a) 热导率与系统长度的关系。(b) 热导率与温度的关系。

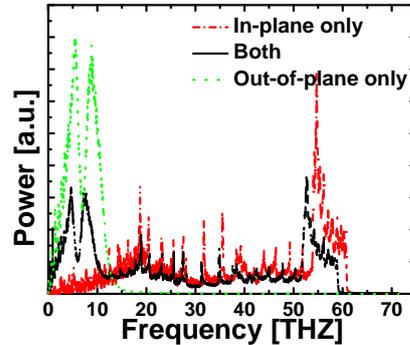


图3 石墨烯的功率谱 (黑色实线)。In-plane only 的功率谱 (红色实线) 和 Out-of-plane only 的功率谱 (绿色实线)。

2. 物理机制

(a) 冻结的方法抑制了平面内声子模式与垂直于平面声子模式之间的耦合作用, 减小了声子散射, 从而导致石墨烯热导率低于冻结情况下不同方向声子模式的热导率之和。如图3所示, 与石墨烯功率谱相比, In-plane only 模式的功率在高频部分出现更多的尖峰, 尖峰代表本征模式, 更多的尖峰代表更多的传热通道。

(b) 石墨烯Both模式和In-plane only模式的热导率随温度增高而减小。然而Out-of-plane only模式的热导率对温度不敏感。随着温度升高, 三声子散射增加, 三声子散射对热阻有贡献。因此冻结情况下In-plane only模式的热导率随温度升高而减小。然而, 对于Out-of-plane only模式, 随着温度增加, 参与三声子散射的声子比例变小。所以Out-of-plane only模式的热导率与温度没有明显的依赖关系。

结论

本文通过非平衡态分子动力学模拟研究了室温下, 利用冻结法计算了有限尺寸石墨烯不同声子模式的热导率, 并且得出了不同声子模式对热导率的贡献。结果表明石墨烯的热导率小于利用冻结方法分别计算得到的垂直于平面声子模式的热导率和平面内声子模式的热导率之和。此外, 我们还计算了不同情况的功率谱帮助我们理解其内在的物理机制。

致谢

本工作得到以下科研经费的支持: 国家自然科学基金(51576076) (杨诺)。本工作所做的模拟计算工作得到了国家超级计算机中心 (天津) SCTS/CGCL高性能计算中心的大力支持。