

# بستگی ترابرد گرمایی به تعداد لایه در نانونوارهای گرافینی زیگزاگ و آرمچیر

علی مهری، مریم جماعتی، رضا پهلوان یلی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل

## پیش گفتار

با کاهش اندازه‌ی وسایل الکتریکی و مکانیکی به نانومتر، ترابرد گرما از لحاظ کارکرد و طول عمر وسایل اهمیت زیادی دارد. از این رو در سال‌های اخیر پژوهش‌گران تحقیقات گسترده‌ای بر روی رفتار حرارتی نانومواد انجام داده‌اند. ویژگی‌های منحصربفرد الکتریکی، گرمایی و مکانیکی گرافین، این ماده را به یک ساختار جذاب در زمینه تحقیقات تجربی و نظری تبدیل کرده است. نتایج بررسی‌های تجربی و محاسباتی نشان داده‌اند که ساختارهای گرافینی از جمله نانونوار گرافینی دارای رسانش گرمایی قابل توجهی هستند [۱و۲]. نظم بلوری زیاد، طول پویش آزاد میانگین بلند و سرعت بالای فونون‌ها از جمله عوامل مثبت تاثیرگذار بر رسانش گرمایی آن‌هاست [۳]. فونونها نقش عمده‌ای در رسانش گرمایی بر عهده دارند. بررسی‌ها نشان داده اند که طول پویش آزاد میانگین فونون‌های گرمایی در نانونوارها از مرتبه‌ی میکرومتر تخمین زده شده است، ولی این طول به دلیل پراکندگی‌های فونونی ناشی از برهمکنش‌های فونون-فونون، فونون-مرز و فونون-نقص کاهش می‌یابد [۳].

## روش

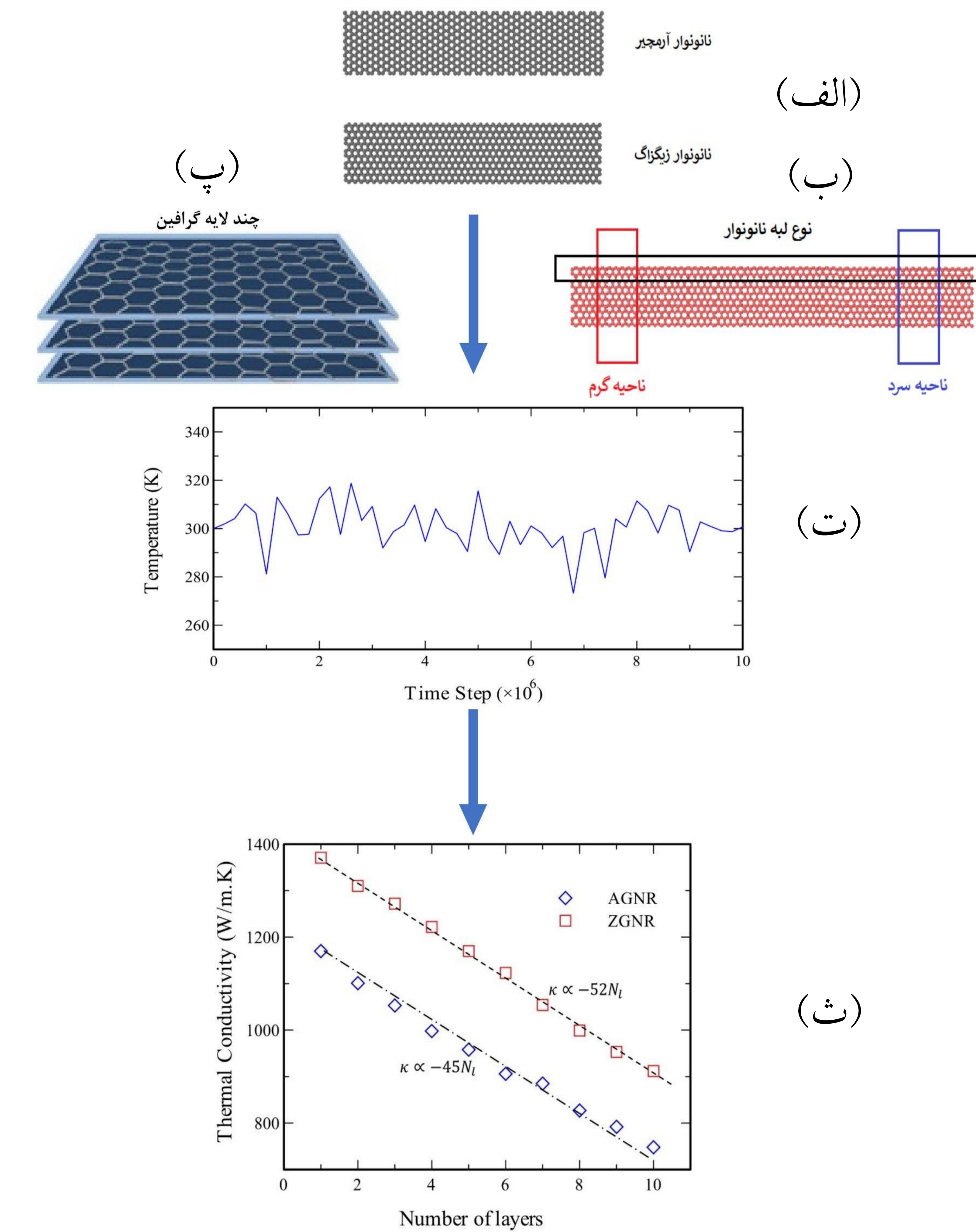
در این پژوهش با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک ملکولی بستگی رسانش گرمایی نانونوار گرافینی به افزایش تعداد لایه‌های نانونوار را با هر دو نوع لبه زیگزاگ و آرمچیر بررسی نموده‌ایم. از پتانسیل ترسوف به منظور بیان اندرکنش‌های بین اتمی استفاده شده است. همچنین از روش غیرتعادلی مولر-پلث که بر پایه قانون فوریه می‌باشد برای ایجاد شار حرارتی بهره می‌بریم. در این روش نخست کل نانولوله را به کمک یک دمپای مناسب مانند دمپای نوز-هوور در دمای  $T$  به تعادل می‌رسانیم. سپس نانولوله را به لایه‌هایی با ضخامت برابر بخش‌بندی می‌کنیم و شرایط مرزی دوره‌ای را برای شبیه‌سازی ساختار به کار می‌گیریم. لایه‌های نخست در دو انتها را به عنوان لایه‌ی واسطه برای جلوگیری از بازتاب انرژی گرمایی در نظر می‌گیریم. دمای لایه بعدی را در هر سو ثابت نگه می‌داریم. یکی از این لایه‌ها با دمای ثابت  $T_{hot}=T+\Delta T$  در یک سو نقش چشمه‌ی گرمایی را بازی میکند و دیگری با دمای ثابت  $T_{cold}=T-\Delta T$  در سوی دیگر چاهک گرما خواهد بود. برای ثابت نگه داشتن دمای چشمه و چاهک در هر گام زمانی  $t$  مقدار  $\Delta E_{hot,t}$  انرژی به چشمه افزوده و مقدار  $\Delta E_{cold,t}$  انرژی از چاهک می‌کاهیم.

## نتایج

همان‌طور که در تصویر مشاهده می‌کنیم رسانش گرمایی در هر دو نوع نانونوار با افزایش تعداد لایه کاهش می‌یابد. اگرچه کاهش رسانش در نانونوار گرافینی زیگزاگ با نرخ بزرگتری نسبت به نانونوار آرمچیر رخ می‌دهد. این کاهش رسانش را می‌توان به تشدید مدهای فونونی بیرون صفحه‌ای نسبت داد. این رفتار با رفتار رسانش گرمایی گزارش شده توسط کائو و همکارانش سازگاری دارد [۴]. جزییات روش محاسباتی می‌تواند در نتیجه اثرگذار باشد، اما رفتار رسانش بر حسب عوامل مختلف را به طور یکسان تخمین می‌زند. همچنین نتایج نشان می‌دهند که رسانش گرمایی در نانونوارهای زیگزاگ مقدار بیشتری نسبت به نانونوارهای آرمچیر دارند، که با بررسی‌های نظری انجام شده سازگاری دارند. لازم به ذکر است بررسی‌های آزمایشگاهی نشان داده‌اند که عوامل بسیاری از جمله کیفیت نمونه، دمای اعمال شده و استراتژی آزمایش بر نتایج بسیار اثر گذار هستند [۵].

## مراجع

- [1] M.M. Sadeghi, M.T. Pettes and L. Shi; “Thermal Transport in Graphene”; Solid State Communications 152(15) (2012) 1321-1330.
- [2] A.A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao and C.N. Lau; “Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene”; Nano Letters, 8(3) (2008) 902-907.
- [3] M.H. Begum, M. Muhtashim, S.M. Jiban, T.I. Toriq and A.Z. Mamun; “Temperature Dependent Thermal Conductivity of Graphene Nanoribbon (GNR) for Different Interatomic Potentials: An Equilibrium Molecular Dynamics Study’; International Conference on Computer, Communication, Chemical, Materials and Electronic Engineering (IC4ME2), IEEE (2019).
- [4] H.Y. Cao, Z.X. Guo, H.G. Xiang and X.G. Gong; “Layer and Size Dependence of Thermal Conductivity in Multilayer Graphene Nanoribbon”; Physics Letters A 376 (2012) 525-528.
- [5] J.H. Zou, Z.Q. Ye and B.Y. Cao; “Phonon Thermal Properties of Graphene from Molecular Dynamics using Different Potentials”; The Journal of Chemical Physics 145(13) (2016) 134705.



الف) نانونوارهای آرمچیر و زیگزاگ. ب) نحوه قرار گرفتن نواحی گرم و سرد در شبیه سازی. پ) چندلایه‌ی گرافینی. ت) افت و خیز دمای سامانه در مجاورت دمای انتخاب شده در زمان شبیه سازی. ث) رسانش گرمایی چندلایه‌های گرافینی زیگزاگ (قرمز) و آرمچیر (آبی) بر حسب تعداد لایه‌ها در دمای  $T=300\text{ K}$ .

بیست و ششمین گردهمایی فیزیک ماده چگال

دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان