1. A strain is necessary for knots to be stable. Or the thermal fluctuation could release the knot.

这个主要和你采取的model有和模拟体系太小关系。真实的knot应该是不规则结构，不满足你的x, y,z曲线方程的。另外，如果几百nm内只有一个knot，没有strain也不会完全release。当然，你模拟的体系，长度太短了，所以会有这个结论。

正因为如此，如何定义一个strain=0的结构，如何定义strain=0.1 0.2…是个问题。实验上的knot, 应该是knot 的C-C相比graphene 有很大形变，但是离knot远的ribbon上应该是没有形变的，因而也没有strain/stress。因此个人认为，strain的定义应该还是以远离knot的ribbon C-C距离变化为准。

1. 考察strain effect确实是knot热导计算的重要工作。首先考察不同strain/stress 下的稳定的knot结构。考察断裂的临界strain/stress. 进而系统研究不同strain/stress 下结构的热导变化。热导变化主要来源于两个方面，1，knot形状的改变；2，strain对ribbon C-C 键长的改变；它们都对热导有影响。PPT第9页的热导随strain变化的图，估计得按照重新定义的strain重新整理。系统考察不同宽度、长度的结构热导随strain变化的规律，回答两个基本问题，strain 越大热导越低吗？knot 对热导的影响是否与宽度有关？
2. Knot 相当于一个大的缺陷，一般出现knot，ribbon 热导会降低很多。很光滑的knot, 相当于strain=0 , 如果热导和其相当长度的没有strain的ribbon 差不多的话，会是非常有意思的结果，说明声子会拐弯而且散射增大不多。不过要看你的计算结果了。
3. 由于knot本身占据的尺寸比较大，你模拟的整个体系长度比较小的时候，knot自身占据的长度（展开长度）不能忽略，因此石墨烯热导与长度成正比。这个时候要找到一个很好的量来比较有、无knot的体系间的热导。没有strain的knot的展开长度是可以通过你刚开始搭建结构的方程算出来的。因此可以定义knot的展开长度 + ribbon其他区域X 方向的长度来定义整个体系的长度。这样即使有strain存在，整个体系的长度也不会改变太多。温度梯度就用 温差/整个体系长度 来统一定义，这样可以给出热导率了，前面讲了用热流来比较，现在想来不大正确，还是应该用热导率。形象的比喻，一条绳子不管打多大的节，打几个节，其实绳子的总长度还是没变的，变小的只是沿X方向的长度。因此PPT第10页K-NX 的热导数据估计要重新整理。还要补充上不同strain下K-NX 走势。这里要对比一般小的缺陷和比较大的反量子点缺陷对热导的影响 与 knot对热导的影响的异同。争取从输运理论上描述knot对热导的影响规律，可参见【Journal of the Physical Society of Japan 81 (11), 114601】
4. 关于PPT最后一页dos图。 出这个关联长度lc 是个比较有意思的想法，不过估计会很长。因此ribbon声子自由程很长，knot的振动也会传播的很长。 另外个人补充建议，应该补充不同strain、不同宽度下体系的dos，通过这个来分析解释不同宽度、strain下knot对热导的影响。另外，研究相同长度下，knot浓度大是，dos变化。
5. 个人感觉knot的存在，会在低频声子区域增加很多knot自身振动引起的低频声子枝。如果knot半径很大、很平滑，这些声子枝可能会与ribbon的声子枝差不多。这个时候热导不会因knot改变太多。而半径变小，或者形变比较大的时候，这些声子枝会变得越来越局域，形成局域声子，大大增加声子散射，会对热导降低很多。这些都可通过dos看出来。因此应该重点关注中、低频dos与graphene 的区别。至于高频，本来对热导影响不大，另外，knot的存在使得整个体系高频会发生很大改变。除此之外, knot的存在也使得ZA模式的对称性被破坏，如果传说中石墨烯主要是ZA导热的话，这个或许对热导的破坏效力会在你模拟很大体系时显现出来（当然只是一个point，没不要真的去做）。