



هدایت حرارتی نانو نوار گرافن متخلخل استفاده شده در عملیات آشکارسازی جرم

صادق صادق زاده^{1*}، نوید رضاپور²

1- استادیار، گروه فناوری نانو، دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

2- دانشجوی کارشناسی ارشد، رشته فناوری نانو، دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

* تهران، صندوق پستی 163-16765، sadeghzadeh@iust.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 23 مهر 1394

پذیرش: 04 دی 1394

ارائه در سایت: 03 بهمن 1394

کلید واژگان:

گرافن

ضریب هدایت حرارتی

دینامیک مولکولی

جای خالی

نانو افزودنی فلزی

چکیده

در این مقاله، بازدهی هدایت حرارتی نانونوار گرافنی دارای نقص در برابر حضور نانوذرات افزوده در عملیات آشکارسازی جرم های کوچک با استفاده از دینامیک مولکولی غیرتعادلی معکوس مورد مطالعه قرار گرفته است. مدیریت هدایت حرارتی این ساختار به دلیل تلفات القایی در هدایت الکتریکی بسیار مورد بحث بوده و هر راهی که بتواند هدایت حرارتی گرافن را تحت مدیریت قرار دهد بسیار کارآمد خواهد بود. در این مقاله دیده شده که حین انجام عملیات آشکارسازی، در اثر ایجاد تخلخلهایی در سطح نانونوار و یا افزوده شدن نانوذرات خارجی، خواص حرارتی گرافن تغییر قابل توجهی می‌نماید که این مساله باید در کالیبراسیون سنسورهای جرمی بر مبنای گرافن مدنظر قرار گیرد. بطور خلاصه، شبیه‌سازی‌ها نشان داده که ضریب هدایت حرارتی گرافن با افزایش حضور نانو ذرات آهن کاهش می‌یابد. در لبه‌های نوار گرافنی مقدار ضریب هدایت حرارتی از بقیه نقاط بیشتر است که نشان می‌دهد مکان جای خالی و نانوذره بر ضریب هدایت حرارتی اثرگذار است. به‌عنوان نتیجه‌ای جالب توجه، مقدار ضریب هدایت حرارتی حالت جای خالی بیشتر از حالت نانوذره همراه با جای خالی بوده و افزایش قطر حفره، اثر مستقیم بر کاهش مقدار ضریب هدایت حرارتی داشته به طوری که با افزایش قطر حفره از 0.5 نانومتر به 4.4 نانومتر در یک نوار گرافن با عرض 5 نانومتر، مقدار ضریب هدایت حرارتی از 67 W/mK به 1.43 W/mK می‌رسد.

Thermal Conductivity of Porous Graphene Nanoribbon Implemented in Mass Detection Operations

Sadegh Sadeghzadeh*, Navid Rezapour

Mechanical Engineering Department, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran.

*P.O.B. 5517910179 Tehran, Iran, maligoodarz@srutu.edu

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 15 October 2015
Accepted 25 December 2015
Available Online 23 January 2016

Keywords:

Graphene
Thermal conductivity coefficient
Molecular Dynamics
Defect
metallic nanoparticles additives

ABSTRACT

In this paper, efficiency of defected graphene nano ribbon incorporated with additional nanoparticles on mass detection operations is studied via the Reverse Non Equilibrium Molecular Dynamics (RNEMD) method. Thermal conductivity management of this structure is challenging because of imposed losses in electrical conductivity and any procedure that could manage the thermal conductivity of graphene will be useful. In this paper it is observed that on the mass detection operation, due to the porosity generation in the nano ribbon surface or even creation of external nanoparticles, thermal properties of graphene change considerably. This should be noted in calibration of graphene based mass sensors. In summary, Results show that the graphene's thermal conductivity would reduce by increasing the concentration of nanoparticles and thermal conductivity of graphene is higher when porosities and impurities are at the edges. This indicates that the location of vacancies and nanoparticles influences the thermal conductivity. For a better thermal management with the help of nanoparticles, with respect to the porosities, addition of nanoparticles decreases the thermal conductivity more and more. By increasing the cavity's diameter from 0.5nm to 4.4nm in a specific single layer graphene, thermal conductivity was reduced from 67 W/mK to 1.43 W/mK..

1- مقدمه

حجم و غلظت و جابه‌جایی و فرکانس و سرعت و الکتروسیسته و نیروهای مغناطیسی و دما شناسایی می‌شوند. نوع متغیرهایی که با نانو حسگر شناسایی می‌شود به شش گروه تقسیم‌بندی می‌شود: متغیرهای مکانیکی، الکتریکی، نوری، شیمیایی، حرارتی و مغناطیسی. محدودیت نانو حسگر در اندازه‌گیری رسانایی الکتریکی در نیم‌رساناها یک بحث جدی بوده و بسیاری از کارهای ارائه شده تاکنون از تشخیص گازها با انرژی جذب پایین و

نانو حسگرها از لحاظ بعد هندسی به 8 حالت نانولوله، نانو فیبر، نانوسیم، نانو حفره، نانوکاوشرگر، نانوذره، نقاط کوانتومی و نانوفیلم تقسیم می‌شوند. اساس نانو حسگرها به دست آوردن اطلاعات در ابعاد اتمی و انتقال آن به حالت ماکروسکوپی برای آنالیز داده‌هاست. مکانیسم تشخیص از طریق دقت در شناسایی اتم‌ها یا مولکول‌های خاصی است که به وسیله‌ی اندازه‌گیری تغییر

Please cite this article using:

S. Sadeghzadeh, N. Rezapour, Thermal Conductivity of Porous Graphene Nanoribbon Implemented in Mass Detection Operations, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 1, pp. 345-352, 2016 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

گرافن تا سال 2004 در شرایط معمول محیطی ناپایدار فرض می شد تا اینکه برای اولین بار آندره گایم و کنستانتین نوسلوف از وجود گرافن پرده برداشته و جایزه نوبل سال 2010 را از آن خود کردند [1,2].

خواص حرارتی، الکترونیکی و مکانیکی فوق العاده ای در گرافن مشاهده شده و بنابراین گرایش به این ماده افزایش یافته تا حرارت که به عنوان توان اتلافی، مانع رشد صنعت الکترونیک است رفع شود. علی رغم پیشرفت های چشمگیر بشر در صنعت الکترونیک، هنوز هم جستجو برای مواد جدید هادی حرارت در جریان بوده و بیشترین تلاش ها برای ساخت و به کارگیری وسایل گرافنی و خصوصا ترانزیستورهای اثر میدانی گرافنی¹ صورت می گیرد [3]. با توجه به خواص الکترونیکی و گرمایی گرافن، می توان کاربردهای بالقوه ای را در وسایل نانوالکترونیکی و به طور کلی در مدیریت گرمایی برای آن متصور بود. بر اساس نتایج منتشر شده تاکنون، مقدار هدایت حرارتی گرافن در محدوده بسیار بالایی گزارش شده به طوری که با استفاده از طیفسنج رامان مقدار ضریب هدایت حرارتی بین 2500-5300 W/mK اندازه گیری شده است [4,2]. برای رسیدن به یک سیستم مطلوب بر پایه گرافن می توان تغییراتی را در ساختار اولیه طراحی شده ای این سامانه ها ایجاد نموده و سیستم گرافنی را برای رسیدن به محدوده دلخواهی از ضریب هدایت حرارتی پیش طراحی نمود. به عنوان نمونه، ترکیب توأمان نانو ذرات فلزی با گرافن منجر به خواص انتخاب گری و در نتیجه افزایش حساسیت حسگرهای گازی گرافنی می شود [5]. علاوه بر این، حفرات گرافنی نیز آینده ی خوبی در کاربردهای نانوالکترونیک و مخصوصا در مواد نیمه هادی داشته و به کارگیری آن ها در مدیریت اتلاف حرارت اهمیت به خصوصی در تلاش های تحقیقاتی تئوری و آزمایشگاهی دارد [6]؛ همچنین، عیوب مختلف مانند جای خالی نقطه ای و ناخالصی و نابه جایی می توانند حین سنتز تغییر کرده و اثرات قابل توجهی بر خواص گرافن بگذارند؛ به طوری که بتوان خواص دلخواهی در حین ساخت ایجاد نموده و در جریان طراحی نانومواد به کار برد [7]. با توجه به کارهای پیشین صورت گرفته می توان گفت، عیوب بر خواص فیزیکی و شیمیایی اثر گذاشته و پاسخ الکترونیکی گرافن دارای عیب به مولکول های گاز No2 بهتر از حالت بدون عیب است [8]. همچنین، افزایش چگالی جای خالی در گرافن می تواند ضریب هدایت حرارتی را به طور قابل توجهی کاهش دهد [9]. با توجه به اهمیت افزودن نانو ذرات بر بسترهای گرافنی و همچنین وجود حفرات در آن ها، در این مقاله سعی شده است تا اثرات حضور توأمان هردوی این اثرات بر مقدار ضریب هدایت حرارتی مطالعه شود. همچنین اثرات اندازه های مختلف حفرات و نانوذره های فلزی بر هدایت حرارتی مورد ارزیابی قرار می گیرد. در این روش، از MD برای شبیه سازی و طراحی سیستم استفاده شده و در مقایسه با کارهای پیشین صحت گذاری شده و سپس اثرات مختلف با این روش مطالعه و تحلیل شده اند. می توان این روش را برای بررسی بسیاری از سامانه های فیزیکی با موفقیت به کار برد.

2- مدلسازی و شبیه سازی مسأله

شکل 2 یک نمونه کلی از سیستم تک لایه گرافن (به طول 12 nm و عرض 5nm) دارای حفره و یک نانوذره فلزی بر روی یکی از حفرات آن را نشان می دهد. طوری که در ابتدا حفراتی به صورت رینگ بر روی تک لایه ی گرافن قرار داده شده و سپس نانو ذرات آهن بر روی این حفرات قرار گرفته است. روش های مختلفی برای محاسبه ی ضریب هدایت حرارتی معرفی شده اند که

غلظت های متفاوت گاز ناتوان بوده و همچنین وابستگی حساسیت نانو حسگرهای نیم رسانا در شرایط محیطی یکسان متفاوت است.

در میان مواد نانو، نانولوله های کربنی و صفحات گرافنی کاربردی گسترده در نانو حسگرها دارند زیرا دارای خواص مکانیکی و الکتریکی ویژه ای هستند و دامنه ی فرکانسی و حسگری بالا داشته و جرم کمی نیز دارند و از این رو تعداد کمی از اتم ها و مولکول های خارجی اطراف نانو حسگر، می تواند تغییر فراوانی را در فرکانس های تشدید و سرعت های موجی آن ایجاد کند. عموما تقسیم بندی طراحی نانو تشدیدکننده ها به دو روش است: ارتعاشی (برای فرکانس تشدید) و انتشار موجی (برای سرعت های موجی)؛ که اساس آن ها شناسایی تغییر فرکانس تشدید یا سرعت های موجی در نانو حسگرهاست که ناشی از اتصال اتم های خارجی و مولکول ها با سطح حسگر است. چالش اصلی شناسایی تغییر قابل توجه در فرکانس های تشدید یا سرعت موج در وضوح بالاست. با توجه به کاربرد گسترده گرافن در تشخیص و آشکارسازی جرمهای مختلف، به نظر می رسد که حین انجام عملیات آشکارسازی، خواص حرارتی گرافن تغییر نماید؛ بنابراین این مقاله سعی نموده است نشان دهد که این تغییر قابل توجه بوده و در کالیبراسیون سنسورهای جرمی بر مبنای گرافن باید مدنظر قرار گیرد. شکل 1، یک نمونه صفحه گرافنی را نشان می دهد که در آن ذراتی جهت شناسایی بر روی صفحه قرار دارند و این صفحه دارای یک نقص ذاتی برآمده از مشکلات فرآیند ساخت نیز هست. اینکه چنین نقصی چه ایراد جدی ای به پاسخ نهایی سیستم وارد می نماید و همچنین اثر وجود نانوذره ها برای شناسایی چه تغییراتی بر خواص خوب و قابل اشاره نوار گرافنی ایجاد می کنند، سؤالاتی است که در این مقاله به آن پاسخ داده می شود. در شکل 1، نقاط کناری ثابت شده اند تا شرایط مرزی گیردار در مرزها را به نمایش بگذارند.

از طرفی دیگر، تلاش های تجربی در مقیاس نانو گران بوده و شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) و روش های مکانیک های پیوسته در حسگرهای نانو تشدید استفاده می شود که دارای امتیازاتی است. شبیه سازی MD در مقایسه با آزمایش های تجربی، جزئیات بیشتری را در واکنش بین اتمی و مولکول های پیچیده ارائه می دهد. محاسبات مدل های پیوسته، گران نیست و فرمولاسیون آن ساده است و به آن به صورت فیزیکی باید نگاه کرد. محدودیت ذاتی مدل های پیوسته، حذف ساختارهای گسسته در مقیاس اتمی است و نتایج قابل اعتمادی در آنالیزهای خاص نمی دهد.

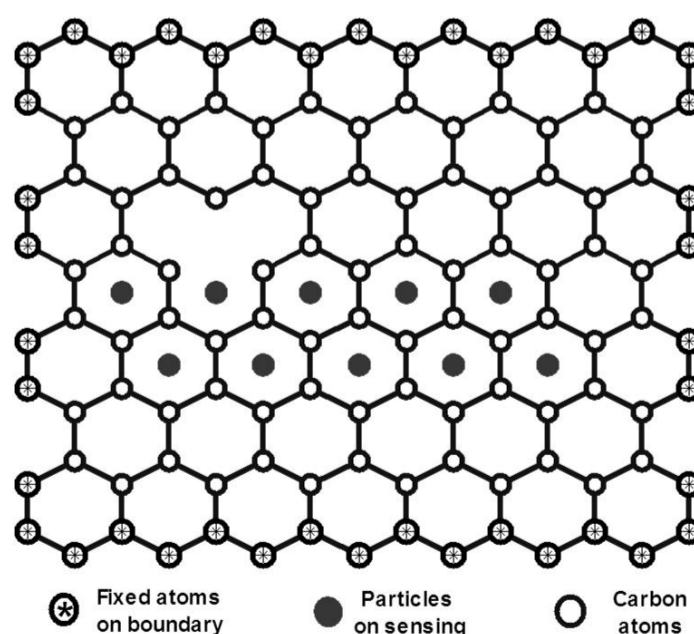


Fig. 1 Single layer graphene that is known as a mass detector.

شکل 1. صفحه ی گرافنی تک لایه که به عنوان حسگر جرمی شناخته می شود.

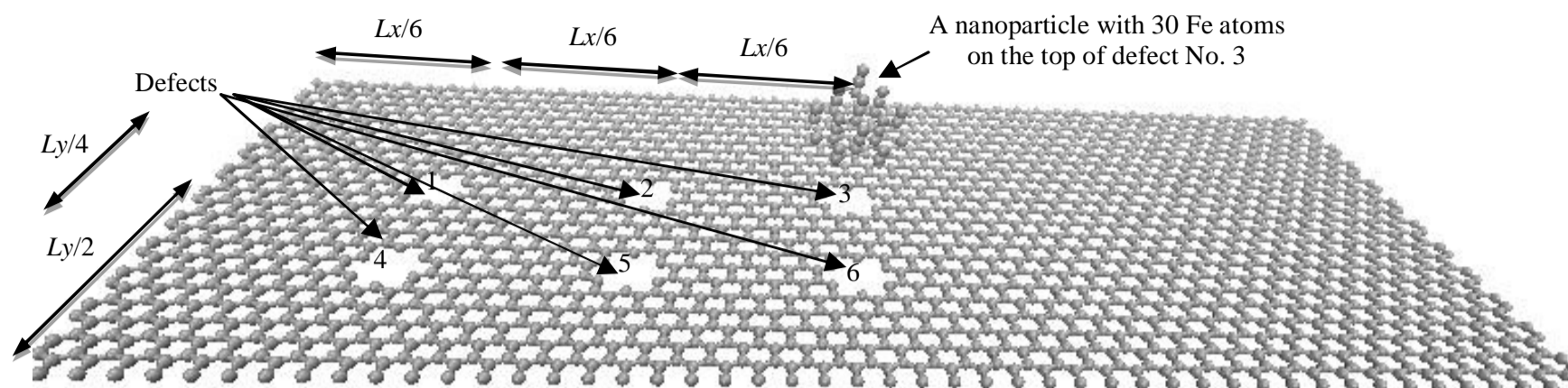


Fig. 2 An iron nano cluster on the top of a defected single layer graphene

شکل 2. نانوخوشه آهن بر روی تک لایه ی گرافن عیب دار

پتانسیل بین لایه های آهن و کربن از پتانسیل لنارد-جونز⁵ توصیف شده در رابطه ی (4) استفاده می شود [13].

$$E_{LJ} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (4)$$

که در آن ϵ ، عمق چاه انرژی و σ ، فاصله ی تعادلی ضرایب مورد استفاده در پتانسیل اند. جدول (1) برای محاسبه ی پارامترهای واکنشی پتانسیل لنارد-جونز به کار می رود.

پارامترهای لنارد-جونز واکنش های بین آهن و کربن از قوانین اختلاط لورنتس- برتوله⁶ محاسبه می شوند که از روابط (5) قابل محاسبه اند [11].

$$\sigma_{C-Fe} = \frac{\sigma_{C-C} + \sigma_{Fe-Fe}}{2}, \quad \epsilon_{C-Fe} = \sqrt{\epsilon_{C-C} \times \epsilon_{Fe-Fe}} \quad (5)$$

با استفاده از جدول (1) و روابط (5)، پارامترهای واکنشی مربوطه برابر $\epsilon_{C-Fe} = 0.0409 \text{ eV}$ و $\sigma_{C-Fe} = 2.9635 \text{ nm}$ محاسبه شده و مورد استفاده قرار گرفته اند.

2-1- روش شبیه سازی

مطابق شکل 3، مدل نانونوار گرافنی به 20 ناحیه ی مساوی در جهت افقی تقسیم می شود. اولین بخش به ناحیه ی سرد و آخرین بخش به ناحیه ی گرم تعلق دارد. با اعمال حرارت به بخش گرم، انرژی جنبشی به طور مصنوعی از ناحیه ی گرم به ناحیه ی سرد منتقل می گردد؛ بنابراین در حالت تعادل، شار حرارتی از طریق تبادل انرژی بین نواحی گرم و سرد به تعادل می رسد [9]. [15]

برای بررسی اثر نانو ذرات فلزی، یک عیب در فاصله ی $Lx/6$ از ابتدای نانو نوار گرافنی ایجاد کرده و در بالای آن یک خوشه آهن مستقر شده تا اثر ناخالصی و عیب، بصورت توأمان در ضریب هدایت حرارتی تک لایه ی نانو نوار گرافنی بررسی شود. در مرحله ی بعد این عیب و ناخالصی در فواصل تعیین شده قرار داده شده تا اثر مکان عیب بر آن مشخص گردد.

روش ورله سرعتی⁷ به منظور حل دینامیک معادلات حرکت به کاررفته است [13]. گام زمانی 0.5 fs بوده و 2×10^7 گام برای زمان استراحت استفاده

جدول 1 پارامترهای واکنشی به کاررفته در پتانسیل معادل لنارد-جونز

جفت مولکولی	σ (Å)	ϵ (eV)
Fe-Fe[14]	2.517	0.70033
C-C [11]	3.41	0.00239

4- Atomic electron density

5- Lennard-Jones potential (LJ)

6- Lorentz-Berthelot (L-B) mixing rule

7- Velocity-Verlet integrator

از آن جمله می توان ترموستاتی مستقیم، گرین کوبو و دینامیک مولکولی غیر تعادلی معکوس را نام برد.

در شبیه سازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی معکوس، از نرم افزار شبیه ساز بزرگ مقیاس اتمی مولکولی لمپس¹ استفاده شده است [10]. با توجه به فیزیک مسئله، دو طرف تک لایه در جهت شار حرارت ثابت شده و سپس به نوار کوچکی از کناره سمت چپ و راست به ترتیب مقدار مشخصی از گرما کاسته و افزوده می شود تا به وسیله ی گرادیان دمایی ایجاد شده و قانون فوریه بتوان ضریب هدایت حرارتی را محاسبه نمود. شرایط مرزی در جهت شار حرارت به صورت مرزی دوره ای بوده به طوری که ذرات در سراسر مرز در تعامل اند و آن ها می توانند از یک سر جعبه وارد و از سر دیگر خارج شوند.

اکثر بررسی های صورت گرفته برای محاسبه ی ضریب هدایت حرارتی گرافن براساس پتانسیل ترسف شبیه سازی شده، اما در مطالعه ی حاضر با استفاده از روش برنر این مقدار برای لبه های زیگزاگ به دست آمده است. به عنوان میدان پتانسیل مورد قبول، از واکنش تجربی بین مولکولی به روز شده پیوندی² آیربو استفاده شده است [11]. انرژی پتانسیل اتم های کربن کووالانسی پیوندی از رابطه (1) به دست می آید.

$$E_{GNR} = \sum_i \sum_{j(>i)} [V^R(r_{ij}) - b_{ij}V^A(r_{ij})] \quad (1)$$

در رابطه ی (1)، r_{ij} فاصله ی بین اتم های i و j و V^R و V^A واکنش های جفتی هستند که به ترتیب نمایانگر دافعه و جاذبه ی بین اتمی بوده و b_{ij} پارامتر پیوندی، وابسته به واکنش های چند گانه بین اتم های i و j است. این پتانسیل، منجر به شکستن پیوند کووالانسی شده و با تغییراتی در هیبریدیزاسیون اوربیتال های اتمی درون پتانسیل کلاسیک همراه می شود. رابطه ی (2) برای بیان انرژی کلی گرافن به همراه ناخالصی Fe قابل بیان است.

$$E_{total} = E_{GNR} + E_{Fe} + E_{LJ} \quad (2)$$

که در آن، E_{total} انرژی پتانسیل کلی گرافن توأم با ناخالصی، و E_{GNR} از رابطه ی آیربو به دست آمده و سامانه های آهن با استفاده از تابع پتانسیل روش اتم جاسازی شده³ مدل شده که در رابطه ی (3) آمده است [12].

$$E_{EAM} = F \left(\sum_{j \neq i} \rho(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \quad (3)$$

F انرژی جاسازی شده تابعی از چگالی اتمی الکترون⁴ و ϕ واکنش پتانسیل جفتی و i و j تعداد اتم ها و r_{ij} فاصله ی بین آن ها است. برای بیان

1- Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

2- Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO)

3- Embedded atom method (EAM)

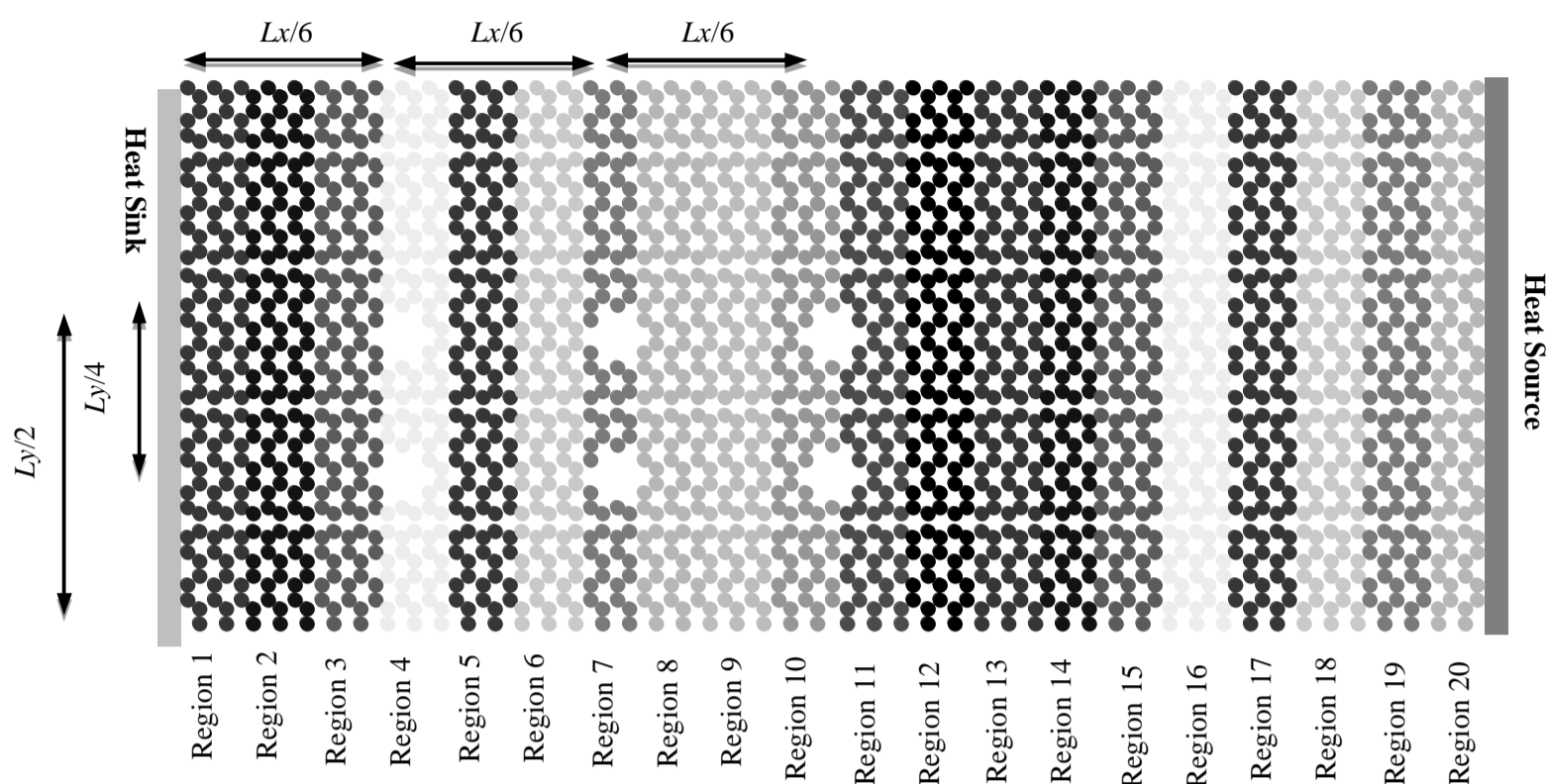


Fig. 3 The first and the last slabs are considered as cold and hot regions, respectively. After applying heat flux onto the hot region and subtracting that heat exactly from cold region, temperature profile of middle regions (slabs 2 to 19) are calculated

شکل 3. بخش 1 ناحیه سرد و بخش 20 ناحیه گرم در نظر گرفته شده است. پس از اعمال شار حرارتی لازم به ناحیه گرم و گرفتن همان شار از ناحیه سرد، پروفیل دمایی در نواحی میانی (2 تا 19) محاسبه می شود.

مختلف (1.2 nm, 2 nm, 2.7 nm, 3.5 nm, 4.2 nm) گذاشته شده و نتایج به دست آمده با [15] مقایسه شده است. در [17] مقدار ضریب هدایت حرارتی برای نوار گرافنی با طول 10 نانومتر و عرض 2.1 نانومتر 102.07 W/mK گزارش شده است. ضریب هدایت حرارتی وابسته به طول بوده که علت آن پراکندگی فونون آکوستیک است. برای مثال این مقدار برای طول دو برابر در مرجع ذکر شده برابر با 140 W/mK است. مقادیر بزرگتری نیز برای آن گزارش شده که اساساً به طول گرافن وابسته است. البته پتانسیل مورد استفاده بین اتم‌های کربن، شرایط مرزی مختلف در جهت انتقال حرارت و روش‌های ترموستاتی مختلف در محاسبه ضریب هدایت حرارتی، منجر به اختلاف نتایج شده و بر مقادیر محاسبه شده مؤثرند. مقادیر بسیار بزرگی بین 3000 تا 5000 W/mK (سایز میکرومتر) در [18] گزارش شده اما طول گرافن (12nm) مورد مطالعه در این کار بسیار کوتاه‌تر از پویش آزاد میانگین فونونی فوق‌العاده بلند در مواد کربن تک اتمی (در حدود 1μm) است. فونون با طول موجی بزرگتر از دو برابر اندازه‌ی شعاع قطع شبیه‌سازی، منجر به کاهش ضریب هدایت حرارتی می‌شود. شکل 4 مقایسه‌ی تغییرات دما در نواحی میانی هر نانونوار و اثر طول‌های مختلف بر آن را نشان می‌دهد.

مقدار ضریب هدایت حرارتی برای طول 20 نانومتر در [19] برای گرافن با آرایش زیگزاگ 92.3W/mK گزارش شده است. همچنین برای طول 12 نانومتر در [15] برابر با 121 W/mK اندازه‌گیری شده است. در [20] منحنی برای طول‌های مختلف نانونوار گرافن ارائه شده است. شکل 5، مقایسه بین نتایج کار حاضر و مراجع مورد اشاره برای تغییرات ضریب هدایت حرارتی بر حسب طول‌های مختلف نانونوار را نشان می‌دهد. همان‌گونه که ملاحظه می‌شود، تطابق بسیار خوبی بین نتایج دیده می‌شود. شکل 6 مقایسه‌ی تغییرات دما در نواحی میانی و اثر موقعیت‌های مختلف حفره را نشان می‌دهد. شکل 7 مقایسه تغییرات ضریب هدایت حرارتی بر حسب موقعیت‌های مختلف حفره در جهت x را نشان می‌دهد.

شده تا سیستم تحت هنگرد کانونی متعادل شود. پس از آن ترموستات نوز- هوور¹ با هنگرد میکرو کانونی به کاررفته تا انرژی ثابت شود. زمان شبیه‌سازی 20ns و اجرای شبیه‌سازی 4×10^7 گام است.

2-2- محاسبات ضریب هدایت حرارتی

در حالت ماکروسکوپی، ضریب هدایت حرارتی (k) طبق قانون فوریه، از رابطه‌ی (6) محاسبه می‌شود.

$$k = \frac{J}{2A \cdot \Delta T} \quad (6)$$

که A ، ناحیه‌ی سطح مقطع گرافن بوده و ضخامت لایه‌ی گرافن را به‌طور پیش‌فرض 3.35 \AA در نظر می‌گیریم. ΔT گرادیان دمایی در جهت طولی است. شار حرارت، جریان حرارت بر واحد سطح بوده که واحد آن (W/m^2) است. به‌منظور تحمیل شار گرمایی و محاسبه‌ی پروفیل گرمایی، جعبه‌ی شبیه‌سازی به N بخش در جهت x تقسیم می‌شود. بخش‌ها طوری انتخاب می‌شوند که ضخامت و حجم یکسانی داشته باشند. دمای جنبش محلی لحظه‌ای T_k در بخش k ام از رابطه‌ی (7) قابل محاسبه است.

$$\frac{3}{2} n_k k_B T_k(\text{slab}) = \sum_{i \in k}^{nk} m_i v_i^2 \quad (7)$$

که در آن، n_k برابر با تعداد اتم‌ها، k_B ثابت بولتزمن، m جرمی از اتم کربن و v_i سرعت i امین اتم است [16,15,9].

3- بحث و نتیجه‌گیری

3-1- صحت سنجی

برای اطمینان از صحت کار ارائه شده، ضریب هدایت حرارتی برای نانونوار گرافن زیگزاگ بدون عیب با نتایج ارائه شده در [9] و [16] مقایسه شده است؛ همچنین در مرحله‌ی بعد عیوبی روی نانونوار گرافن معلق در مناطق

1- Nose-hoover thermostat

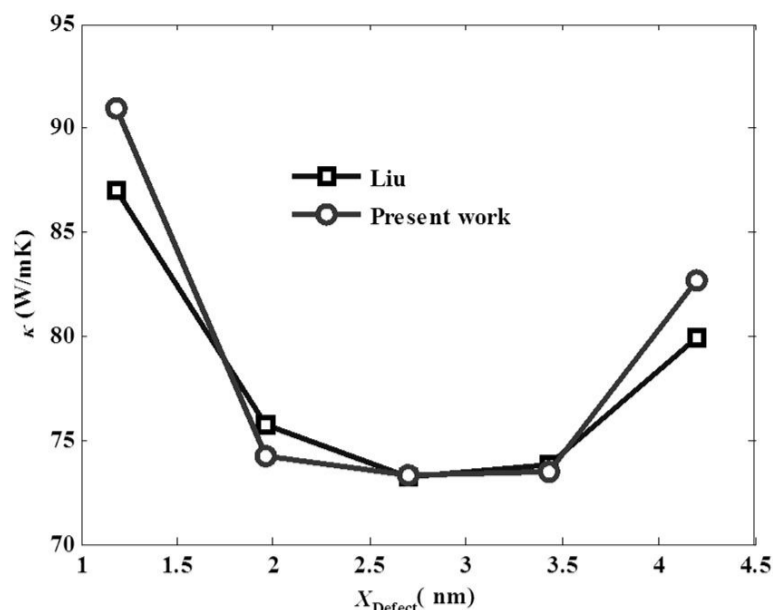


Fig. 7 Effect of defect location on the thermal conductivity of suspended graphene nano ribbon

شکل 7. نمودار اثر مکان عیب بر ضریب هدایت حرارتی نانونوار گرافن معلق

سامانه های گرافنی به طور گسترده استفاده شود.

به عنوان مثال می توان برای مدیریت بیشتر بر مقدار هدایت حرارتی سیستم بر پایه گرافن، از نانو ذرات فلزی بر روی نانونوار گرافن استفاده نمود. در ادامه این اثرات و حتی اثر حضور نانو ذرات بر روی یک نانونوار گرافن تک لایه حفره دار نیز مورد ارزیابی قرار می گیرد.

4- مدیریت ضریب هدایت حرارتی با استفاده از افزودنی های فلزی

4-1- شبیه سازی اثرات نانو ذرات فلزی بر بستر گرافنی

در اینجا، مدل گرافن بدون عیب محتوی 2279 اتم بوده و 12 اتم آهن به صورت خوشه بر روی نانونوار قرار گرفته و شماتیکی از نانونوار به همراه عیوب و خوشه آهن در شکل 2 نشان داده شده است. در مدل اول، عیبی وجود ندارد و ناخالصی آهن با غلظت های مختلف بر روی نانونوار گرافنی قرار گرفته است؛ بنابراین با استفاده از تغییر در ضریب هدایت حرارتی می توان جرم های مختلفی از آهن را شناسایی کرد و عملیات آشکارسازی جرمی را بر روی آن انجام داد. درصد غلظت جرمی آهن از رابطه $C_{Fe}(\%) = \frac{N_{Fe}M_{Fe}}{N_{Fe}M_{Fe} + N_C M_C} \times 100$ محاسبه می شود؛ که در آن، N_{Fe} ، M_{Fe} و N_C تعداد اتم های آهن، جرم اتمی آهن، تعداد ذره های کربن در نانونوار گرافنی و جرم اتمی کربن می باشند. این محاسبات در دمای 300 درجه کلوین محاسبه شده و در سایر دماها هم تغییرات مشابهی قابل ارائه است. نانوذره های مختلف برای رسیدن به غلظت مورد نظر با مکاندهی در موقعیتهای منظمی بر روی صفحه گرافنی و به صورت پراکنده خوشه ای فرض شده اند. شکل 8 نشان می دهد که با افزایش غلظت آهن مقدار ضریب هدایت حرارتی کاهش یافته که می تواند به کایرالیته زیگزاگ ارتباط داشته باشد.

وجود نانو ذرات فلزی، اثرهای غیر هماهنگ و در نتیجه عدم تطابق را در حالت های فونونی در طی فرایندهای انتقال ایجاد می کند و بنابراین طول پویس آزاد میانگین¹ را کاهش می دهند. مشابه آنچه پیش از این نیز اشاره شده است [22,21] این یافته ها نشان می دهد که کنترل انتقال حرارت در مقیاس نانو هنگام طراحی دستگاه های حرارتی بر پایه ی نانونوار گرافنی به طور بالقوه امکان پذیر است.

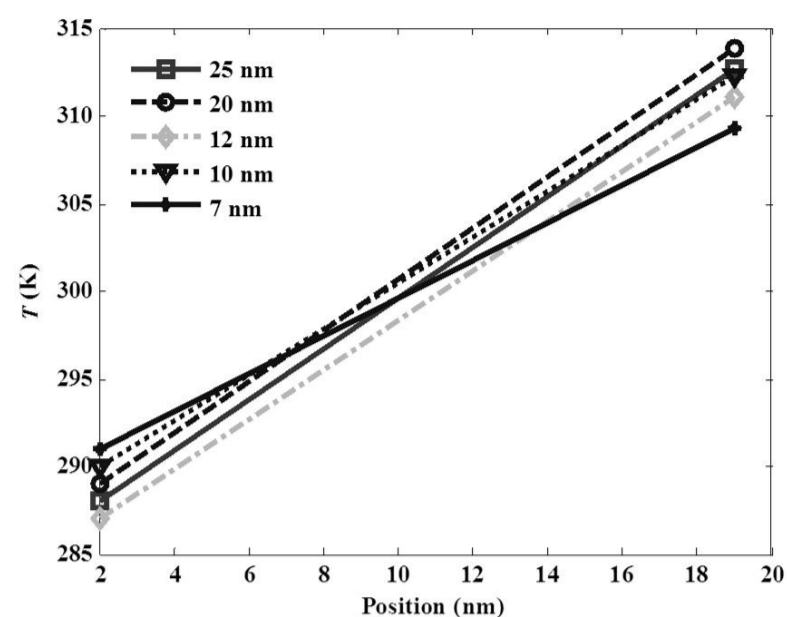


Fig. 4 Effect of length of nano ribbon on the temperature gradient of suspended graphene

شکل 4. نمودار اثر طول بر گرادیان دمایی نانونوار گرافن معلق

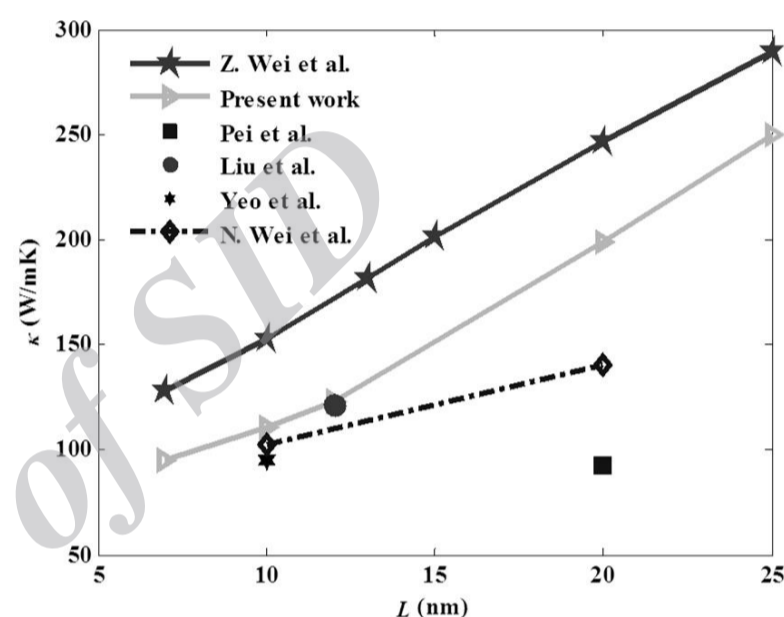


Fig. 5 Comparison of thermal conductivity of non-defected zigzag graphene nano ribbon

شکل 5. مقایسه ضریب هدایت حرارتی در نانونوار گرافن زیگزاگ بدون عیب

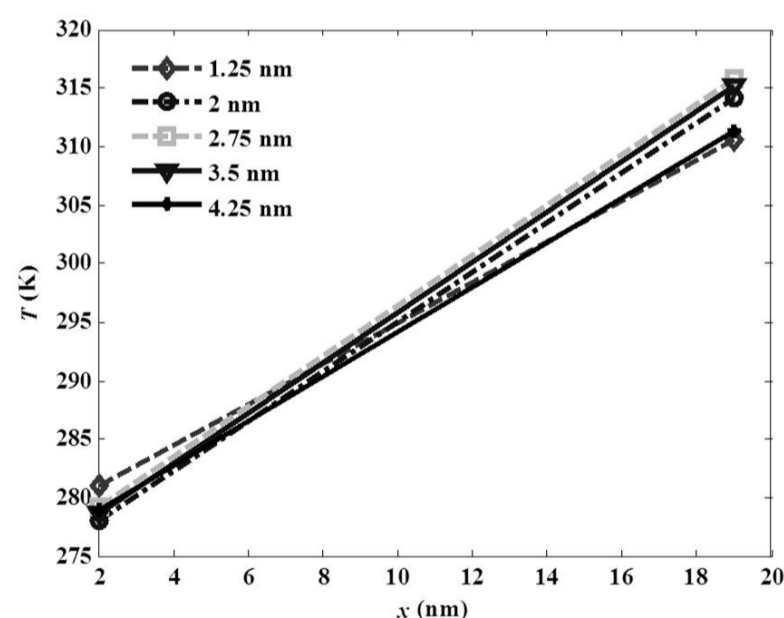


Fig. 6 Effect of defect location on the temperature gradient of suspended graphene nano ribbon

شکل 6. نمودار اثر مکان عیب بر گرادیان دمایی نانونوار گرافن معلق

مشاهده می شود که مقایسه های صورت گرفته به خوبی صحت کار حاضر را نشان داده و بنابراین با توجه به اینکه هم گرافن تک لایه بدون حفره و هم حالت حفره دار مدل و صحنه گذاری شده و هردو در توافق خوبی با کارهای اشاره شده بوده است، روش و مدل استفاده شده صحیح بوده و قابلیت توسعه جهت شبیه سازی سامانه های مبتنی بر گرافن را داشته و می تواند در طراحی

1- Mean Free Pass (MFP)

حرارتی به دلیل ناهمسانگردی ساختار زنبوری گرافن و وابستگی جهت و مقدار گرمای انتقالی به شکل و جهت شبکه بندی کاهش می یابد. شکل 11 این جهات عبور و نحوه عبور گرما و حرکت فونون ها از طرف چپ و راست حفره، برای قطرهای 0.5nm و 3.6 nm را نشان می دهد. البته در کارهای دیگر نشان داده شده که زمان استراحت¹ ناشی از پراکندگی عیب نقطه ای با غلظت جای خالی نسبت عکس دارد؛ بنابراین میانگین افزایشی از چگالی حالت فونون ها² باعث کاهش بیشتری در زمان استراحت و پویا آزاد میانگین شده و در نتیجه ضریب هدایت حرارتی کاهش می یابد [24,23] که این یافته ها با نتایج این مقاله که به صورت ساده تر به ضریب هدایت حرارتی پایین تر برای حفرات با اندازه ها و چگالی بزرگ تر رسیده است، همخوانی و تطابق خوبی دارد.

5- نتیجه گیری

به طور خلاصه، تغییر هدایت حرارتی تک لایه ی گرافن در حضور عیب و نانو ذرات فلزی در مکان های مختلف با استفاده از دینامیک مولکولی غیرتعادلی

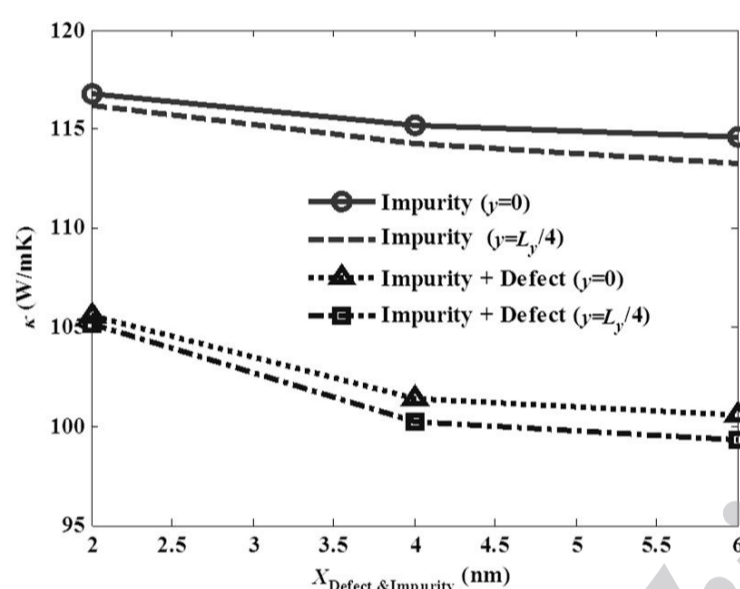


Fig. 9 Thermal conductivity of suspended graphene nano ribbon when there are metallic nanoparticle and also when defects are placed with them

شکل 9. نمودار ضریب هدایت حرارتی تک لایه گرافن در حضور نانو ذرات فلزی و همچنین حضور توأم نانو ذرات فلزی و عیب در مکان های مختلف گرافن معلق

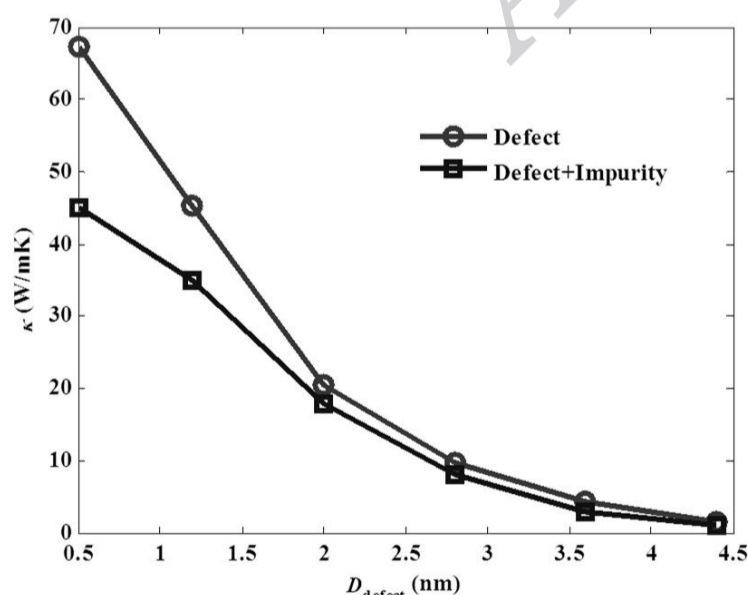


Fig. 10 Thermal conductivity with respect to the various diameters of defects on the middle of suspended graphene nano ribbon (alone defect and simultaneous nanoparticles and defects)

شکل 10. نمودار ضریب هدایت حرارتی برحسب قطرهای مختلف عیب در وسط سطح تک لایه گرافن (عیب به تنهایی و عیب توأم با ناخالصی)

1- Relaxation time

2- Phonon Density of States (DOS)

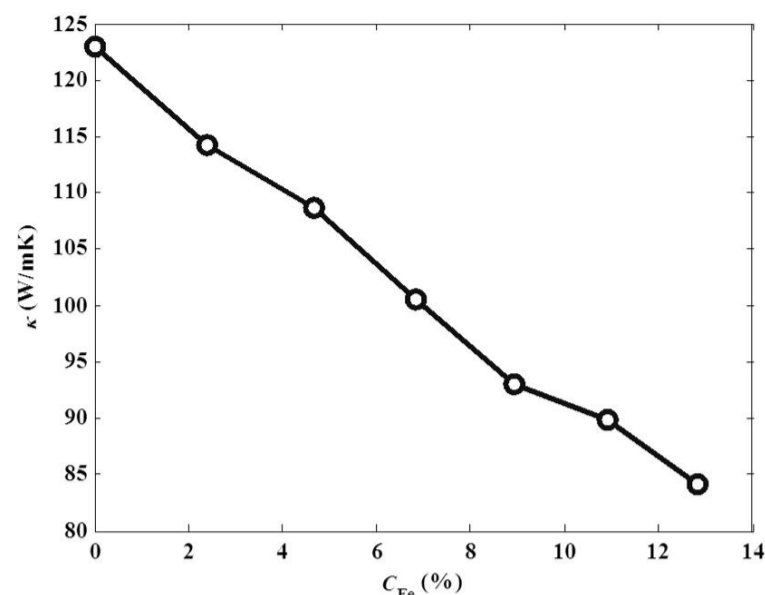


Fig. 8 Effect of metallic nano particle concentration on the thermal conductivity of suspended graphene nano ribbon

شکل 8. نمودار اثر غلظت نانو ذرات فلزی بر ضریب هدایت حرارتی نوار گرافن معلق

4-2- شبیه سازی اثر نانو ذرات فلزی و عیب به صورت توأم در مکان های مختلف بستر گرافنی

مانند شکل 2، گرافن دارای عیب، محتوی 2273 اتم است که عیوب به صورت سه حفره در وسط و سه حفره در پایین مدنظر قرار گرفته اند. باید به این نکته توجه شود که هر مدل ساختاری از نانونوار محتوی فقط یک عیب است؛ که به همراه خوشه آهن در مکان های مختلف قرار دارد. شکل 9 نمودار ضریب هدایت حرارتی برحسب موقعیت نانو ذره و همچنین عیب به همراه نانو ذره برای دو حالت که در آن ها فاصله عمودی از مبدأ برابر نصف عرض صفحه گرافنی و یک چهارم آن است را نشان می دهد. این شکل نشان می دهد که در نزدیکی لبه اگر عیبی موجود باشد به علت اینکه پدیده ی تونل زنی رخ می دهد و پراکندگی مرزی را داریم، فرکانس فونونی در نزدیکی لبه ها بیشتر بوده و فونون ها دارای انرژی بالاتر هستند [15]؛ بنابراین در منطقه ی 2 نانومتری ضریب هدایت حرارتی از مناطق دیگر بیشتر است. نزدیک شدن هرچه بیشتر نانو ذره و عیب توأم به سمت مرز پایینی صفحه گرافنی باعث کاهش بسیار شدیدتر ضریب هدایت حرارتی در محلی با x بیشتر می گردد. این نتیجه می تواند به دلیل اثرات تغییر مدهای فونونی تحت تأثیر لبه پایینی صفحه گرافنی باشد.

4-3- شبیه سازی اثر اندازه ی عیب بر ضریب هدایت حرارتی گرافن معلق

نقش اندازه ی عیب جای خالی به تنهایی و به همراه ناخالصی آهن، در ضریب حرارتی گرافن معلق از طریق شبیه سازی دینامیک مولکولی، در این بخش بررسی شده است. حضور عیوب در مواد گرافنی به دلیل روش های مختلف سنتز اجتناب ناپذیر بوده و اثرهایشان بر ضریب هدایت حرارتی تاکنون روشن شده است.

نتایج حاصل از افزایش قطر حفره و حضور ناخالصی از 0.5 تا 4.4 نانومتر در شکل 10 به نمایش درآمده است. همان گونه که ملاحظه می شود، وجود مسیرهای ناهمسانگردی برای انتقال گرما اثر زیادی بر میزان هدایت حرارتی خواهد گذاشت.

در یک سیستم همسانگرد، جهت انتقال گرما اهمیت نداشته و نحوه جابجایی گرما از طریق انتقال فونون ها به صورت خطوط موازی و کاملاً همگن است؛ بنابراین ضریب هدایت حرارتی به مساحت مقطع و ایجاد حفره بستگی چندانی ندارد. با این وجود با افزایش اندازه ی عیب، مقدار ضریب هدایت

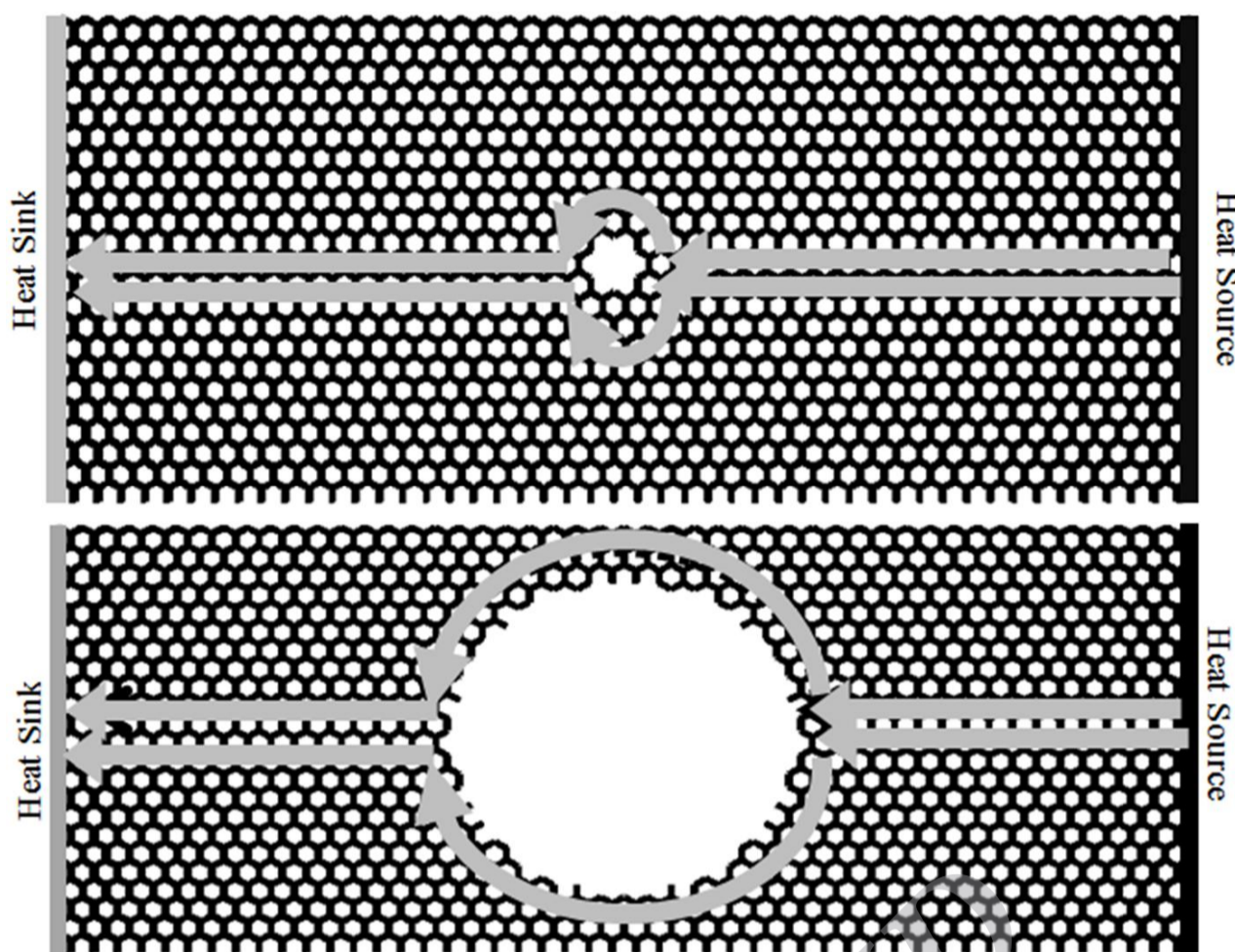


Fig. 11 Comparison of heat path directions (passage channel) of two thermal lines on the top and bottom of middle line of graphene sheet for defects with diameters as size as 2.1 and 3.6 nm and 5 nm wide

شکل 11. مقایسه جهت‌های عبور گرما (کانال عبور) دو خط حرارتی در بالا و پایین خط وسط صفحه گرافنی برای حفرات با قطرهای 2.1 و 3.6 نانومتر بر روی یک ورق با عرض 5 نانومتر

معکوس بررسی شده است. با استفاده از مقایسه نتایج با چند کار قبلی در این زمینه، صحت این کار به تأیید رسیده و سپس برای شبیه‌سازی اثرات حفره و نانو ذرات بر ضریب هدایت حرارتی گرافن مورد استفاده قرار گرفته است. با توجه به شبیه‌سازی‌های صورت گرفته، نتایج زیر را می‌توان به‌عنوان یافته‌های ارزشمند این مقاله بیان نمود:	D_{defect}	قطر حفره (nm)
1- با فاصله گرفتن حفره از لبه تک لایه گرافن، مقدار ضریب هدایت حرارتی کاهش یافته و در نقاط نزدیک به وسط ورق به سمت مقدار ثابتی میل می‌کند.	E_{total}	انرژی پتانسیل کلی گرافن توأم با ناخالصی
2- ضریب هدایت حرارتی گرافن با افزایش حضور نانو ذرات فلزی کاهش می‌یابد.	E_{GNR}	انرژی پتانسیل کلی گرافن بدون ناخالصی
3- مکان جای خالی و نانوذره بر ضریب هدایت حرارتی اثرگذار است به‌طوری‌که در لبه‌های گرافن مقدار ضریب هدایت حرارتی از بقیه‌ی نقاط بیشتر بوده و این اثر هم در مرکز و هم در $y=1.3 \text{ nm}$ وجود دارد.	κ	ضریب هدایت حرارتی ($\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$)
4- حضور نانوذره به‌صورت توأمان با جای خالی مقدار ضریب هدایت حرارتی را از حالت ناخالصی بیشتر کاهش می‌دهد.	k_B	ثابت بولتزمن
5- با افزایش قطر حفره، مقدار ضریب هدایت حرارتی کاهش یافته تا در قطر حفره‌ی 4.4 نانومتری به کمترین مقدار خود 1.43 W/mK می‌رسد.	M	جرم اتم کربن
6- با افزایش اندازه‌ی عیب، مقدار ضریب هدایت حرارتی به دلیل ناهمسانگردی ساختار زنبوری گرافن و وابستگی جهت و مقدار گرمای انتقالی به شکل و جهت شبکه‌بندی کاهش می‌یابد و وجود مسیرهای ناهمسانگردی برای انتقال گرما اثر زیادی بر میزان هدایت حرارتی گذاشته است.	M_C	جرم اتمی کربن
	M_{Fe}	جرم اتمی آهن
	n_k	تعداد اتم‌ها
	N_{Fe}	تعداد اتم‌های آهن
	N_C	تعداد ذره‌های کربن در نانونوار گرافنی
	T_k	دمای جنبش محلی لحظه‌ای
	T	دما (K)
	ΔT	گرادیان دمایی در جهت طولی
	v_i	سرعت i امین اتم
	علائم یونانی	
	ε	عمق چاه انرژی (J)
	σ	فاصله‌ی تعادلی (nm)

7- مراجع

- [1] A. K. Geim, K. S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature materials*, Vol. 6, No. 3, pp. 183-191, 2007 .
- [2] S. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan, E. Pokatilov, D. Nika, A. Balandin, W. Bao, F. Miao, C. Lau, Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits, *Applied Physics Letters*, Vol. 92, No. 15, pp. 151911, 2008 .
- [3] F. Schwierz, Graphene transistors, *Nature nanotechnology*, Vol. 5, No. 7, pp. 487-496, 2010 .

6- فهرست علائم

A	ناحیه‌ی سطح مقطع گرافن
C_{Fe}	غلظت آهن

- and energetics of iron clusters (Fe n , $n \leq 36$): Molecular dynamics studies using a Lennard–Jones type potential, *Journal of alloys and compounds*, Vol. 403, No. 1, pp. 349-356, 2005 .
- [15] D. Liu, P. Yang, X. Yuan, J. Guo, N. Liao, The defect location effect on thermal conductivity of graphene nanoribbons based on molecular dynamics, *Physics Letters A*, Vol. 379, No. 9, pp. 810-814, 2015 .
- [16] Z. Guo, D. Zhang, X.-G. Gong, Thermal conductivity of graphene nanoribbons, *Applied physics letters*, Vol. 95 (163103), No. 16, pp. 1-10, 2009 .
- [17] N. Wei, L. Xu, H.-Q. Wang, J.-C. Zheng, Strain engineering of thermal conductivity in graphene sheets and nanoribbons: a demonstration of magic flexibility, *Nanotechnology*, Vol. 22, No. 10 (105705), pp. 1-11, 2011 .
- [18] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C. N. Lau, Superior thermal conductivity of single-layer graphene, *Nano letters*, Vol. 8, No. 3, pp. 902-907, 2008 .
- [19] Q.-X. Pei, Z.-D. Sha, Y.-W. Zhang, A theoretical analysis of the thermal conductivity of hydrogenated graphene, *Carbon*, Vol. 49, No. 14, pp. 4752-4759, 2011 .
- [20] Z. Wei, Z. Ni, K. Bi, M. Chen, Y. Chen, In-plane lattice thermal conductivities of multilayer graphene films, *Carbon*, Vol. 49, No. 8, pp. 2653-2658, 2011 .
- [21] V. Adamyan, V. Zavalniuk, Lattice thermal conductivity of graphene with conventionally isotopic defects, *Journal of Physics: Condensed Matter* Vol. 24, No. (41): 415401, pp. 1-6, 2012 .
- [22] H. Yang, Y. Tang, J. Gong, Y. Liu, X. Wang, Y. Zhao, P. Yang, S. Wang, Influence of doped nitrogen and vacancy defects on the thermal conductivity of graphene nanoribbons, *Journal of molecular modeling*, Vol. 19, No. 11, pp. 4781-4788, 2013 .
- [23] H. Zhang, G. Lee, K. Cho, Thermal transport in graphene and effects of vacancy defects, *Physical Review B*, Vol. 84, No. 11 (115460), pp. 1-5, 2011 .
- [24] P. Klemens, D. Pedraza, Thermal conductivity of graphite in the basal plane, *Carbon*, Vol. 32, No. 4, pp. 735-741, 1994 .
- [4] T. Y. Ng, J. J. Yeo, Z. Liu, A molecular dynamics study of the thermal conductivity of graphene nanoribbons containing dispersed Stone–Thrower–Wales defects, *Carbon*, Vol. 50, No. 13, pp. 4887-4893, 2012 .
- [5] E. Nagelli, R. Naik, Y. Xue, Y. Gao, M. Zhang, L. Dai, Sensor arrays from multicomponent micropatterned nanoparticles and graphene, *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 44 (444010), pp. 1299–1309, 2013 .
- [6] Y. Xuan, Y. Q. Wu, T. Shen, M. Qi, M. A. Capano, J. A. Cooper, P. Ye, Atomic-layer-deposited nanostructures for graphene-based nanoelectronics, *Applied Physics Letters* Vol. 92(1), No. 1 (013101), pp. 1-3, 2008 .
- [7] A. Hashimoto, K. Suenaga, A. Gloter, K. Urita, S. Iijima, Direct evidence for atomic defects in graphene layers, *Nature*, Vol. 430, No. 7002, pp. 870-873, 2004 .
- [8] Y. Hajati, T. Blom, S. Jafri, S. Haldar, S. Bhandary, M. Shoushtari, O. Eriksson, B. Sanyal, K. Leifer, Improved gas sensing activity in structurally defected bilayer graphene, *Nanotechnology*, Vol. 23, No. 50 (505501), pp. 1-5, 2012 .
- [9] J. J. Yeo, Z. Liu, T. Y. Ng, Comparing the effects of dispersed Stone–Thrower–Wales defects and double vacancies on the thermal conductivity of graphene nanoribbons, *Nanotechnology*, Vol. 23, No. 38 (385702), pp. 1-7, 2012 .
- [10] S. Plimpton, P. Crozier, A. Thompson, LAMMPS-large-scale atomic/molecular massively parallel simulator, *A Software from Sandia National Laboratories*, 2007 .
- [11] S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, *The Journal of chemical physics*, Vol. 112, No. 14, pp. 6472-6486, 2000 .
- [12] M. S. Daw, M. I. Baskes, Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Physical Review B*, Vol. 29, No. 12, pp. 6443, 1984 .
- [13] M. P. Allen, Introduction to molecular dynamics simulation, *Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins*, Vol. 23 of NIC Series, pp. 1-28, 2004 .
- [14] M. Böyükata, E. Borges, J. Braga, J. Belchior, Size evolution of structures