

## L 型石墨纳米结的热输运\*

鲍志刚 陈元平<sup>†</sup> 欧阳滔 杨凯科 钟建新

(湘潭大学材料与光电物理学院,量子工程与微纳能源技术研究所,湘潭 411105)

(2010年5月28日收到;2010年7月9日收到修改稿)

利用非平衡格林函数方法研究了由半无限长扶手椅型和锯齿型边界石墨纳米带连接而成的 L 型石墨纳米结的热输运性质. 结果表明, L 型石墨纳米结的热导依赖于 L 型石墨纳米结的夹角和石墨纳米带的宽度. 在 L 型石墨纳米结的夹角从  $30^\circ$  增加到  $90^\circ$  再增加到  $150^\circ$  过程中, 其热导显著增大. 夹角为  $90^\circ$  的 L 型石墨纳米结的热导随着扶手椅型纳米带宽度增加时, 在低温区热导随着宽度的增大而降低, 在高温区热导随宽度的增大而升高. 对于夹角为  $150^\circ$  的 L 型石墨纳米结, 其热导无论是在低温区还是在高温区都随着锯齿型纳米带宽度的增加而降低. 利用声子透射谱对这些热输运现象进行了合理的解释. 研究结果阐明了不同 L 型石墨纳米结中的热输运机理, 为设计基于石墨纳米结的热输运器件提供了重要的物理模型和理论依据.

**关键词:** 石墨纳米结, 热输运, 热导

**PACS:** 81.05.ue, 65.80.Ck, 44.10.+i

## 1. 引言

自从单层石墨片被成功制备以来, 这种新型的二维六角晶格结构由于其奇异的电子输运性质, 如极高的载流子迁移率<sup>[1]</sup>和优良的弹道输运性质<sup>[2]</sup>, 引起了人们的极大兴趣<sup>[3-8]</sup>. 通过机械切割、电子束刻蚀等方法<sup>[9-12]</sup>, 已经可以从石墨片上制备出不同宽度和边界形状的准一维结构, 即石墨纳米带. 通常情况下, 根据石墨纳米带的边界形状可以把它分为两类: 锯齿型边界石墨纳米带和扶手椅型边界石墨纳米带<sup>[13,14]</sup>. 研究表明, 锯齿型边界石墨纳米带是金属型, 而扶手椅型边界石墨纳米带则由它的宽度决定是金属型还是半导体型: 宽度满足  $N_A = 3K + 2$  ( $N_A$  是石墨纳米带的原子层数,  $K$  是整数) 的扶手椅型边界石墨纳米带是金属型, 其余宽度是半导体型<sup>[15]</sup>. 通过连接石墨纳米带, 人们设计并制备了各种形状的石墨纳米结, 例如 L 型结<sup>[16]</sup>、T 型结<sup>[17]</sup>、Z 型结<sup>[18]</sup> 等等. 这些纳米结特别是 L 型结不但在纳米电路中起着重要的连接作用, 而且由于其奇特的电子输运性质可以做成各种纳米电子

器件<sup>[19-21]</sup>.

石墨纳米带不但具有很好的电学性质<sup>[22,23]</sup>, 而且还具有优良的热学性质. 理论和实验研究都表明石墨纳米带具有极高的热导<sup>[24-26]</sup>, 热导值达到  $5300 \text{ W/mK}$ , 远高于其他的纳米材料<sup>[27-29]</sup>. 这就表明石墨纳米带可以作为很好的热器件材料<sup>[30,31]</sup>. 类似于边界对电子性质的影响, 边界形状对石墨纳米带的热输运性质也有显著影响<sup>[32]</sup>. 不同边界的石墨纳米带其热导表现出各向异性的特征, 室温下锯齿型边界石墨纳米带的热导比扶手椅型边界石墨纳米带的热导大 30%<sup>[33]</sup>; 同时, 各种结构调制也将影响石墨纳米带的热输运性质<sup>[34,35]</sup>. 例如, Ouyang 等<sup>[36]</sup>的计算结果表明超晶格的周期长度和同位素的原子质量能够调制石墨纳米带的热导. Hu 等<sup>[37]</sup>计算得出不对称石墨纳米结构的热导小于相当大小的对称结构的热导. 这就说明石墨纳米带的热输运对其几何结构非常敏感. 因此对于由石墨纳米带连接而成的各种石墨纳米结, 特别是由不同边界的纳米带连接而成的纳米结而言, 其内部蕴含了丰富的热输运现象. 这些热输运现象对于设计基于石墨片的热器件有着重要的意义.

\* 国家自然科学基金(批准号:51006086, 11074213)、高等学校博士学科点专项科研基金(批准号:200805301001)、湖南省高校创新平台开放基金(批准号:09K034)、湖南省教育厅科研基金(批准号:09C956)和湖南省研究生科研创新项目(批准号:CX2010B253)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: chenyp@xtu.edu.cn

本文研究了由半无限长扶手椅型和锯齿型边界石墨纳米带连接而成的 L 型石墨纳米结的热输运性质. 研究表明, L 型结的夹角和石墨纳米带的宽度对热输运有显著的影响. L 型结的热导随夹角的增大而增大. 当夹角为 90° 的 L 型结的扶手椅型纳米带的宽度增加时, 在低温区域其热导随着宽度的增大而降低, 在高温区域热导则随着宽度的增加而升高. 对于夹角为 150° 的 L 型结, 其热导在低温和高温区域都随着锯齿型纳米带宽度的增加而减小. 通过分析声子的透射系数, 我们解释了这些热输运现象. 这些结果表明利用几何结构可以对 L 型石墨纳米结的热导进行有效的调控.

## 2. 模型和方法

图 1(a)–(c) 分别给出了夹角为 30°, 90° 和 150° 的 L 型结的模型图. 每个 L 型结是由宽度为  $N_A$  的半无限长的扶手椅型和宽度为  $N_Z$  的半无限长的锯齿型边界的石墨纳米带连接一个 L 型的中心区域(用 C 表示)而成. 两个半无限长石墨纳米带分别为左热极(用 L 表示)和右热极(用 R 表示). 在石

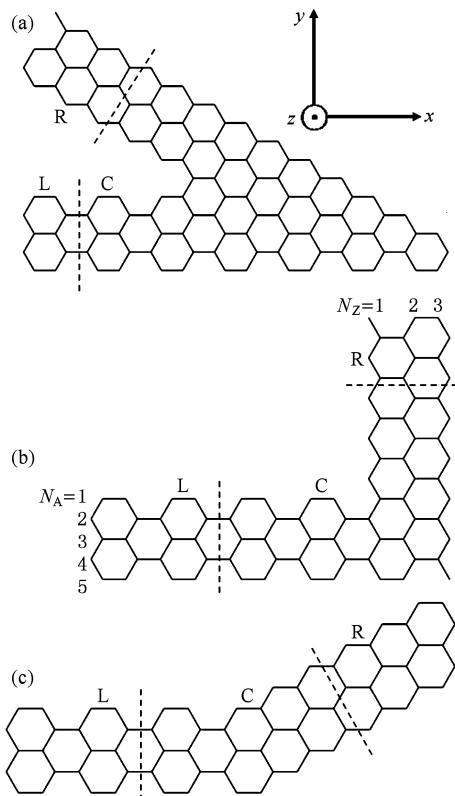


图 1 L 型结的模型图 (a), (b) 和 (c) 分别对应于夹角为 30°, 90° 和 150°. 宽度  $N_A = 5, N_Z = 3$

墨纳米带中存在着三类声子振动模式: 两个平面内(在  $x-y$  平面内)振动模式和一个垂直于  $x-y$  平面的振动模式<sup>[38,39]</sup>. 由于垂直的振动模式与平面内的振动模式之间没有耦合, 其哈密顿量可以完全分离. 因此在本文中, 我们只考虑了垂直振动模式对热输运的影响. 为了描述声子在 L 型结中的热输运性质, 紧束缚近似哈密顿量表示为

$$H = \sum_{\alpha=L,C,R} H_{\alpha} + (\mathbf{u}^L)^T \mathbf{V}^{LC} \mathbf{u}^C + (\mathbf{u}^C)^T \mathbf{V}^{CR} \mathbf{u}^R, \quad (1)$$

其中  $H_{\alpha} = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{u}}^{\alpha})^T \dot{\mathbf{u}}^{\alpha} + \frac{1}{2}(\mathbf{u}^{\alpha})^T \mathbf{K}^{\alpha} \mathbf{u}^{\alpha}$  ( $\alpha = L, C, R$ )

表示左热极、中心区域和右热极的哈密顿量,  $\mathbf{u}^{\alpha}$  代表位移矢量,  $\dot{\mathbf{u}}^{\alpha}$  代表动量算符.  $\mathbf{K}^{\alpha}$  是力常数矩阵, 最近邻原子间的力常数矩阵元取为  $5.3 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ , 次近邻原子取为  $0.265 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ <sup>[40]</sup>.  $\mathbf{V}^{LC} = (\mathbf{V}^{CL})^T$  和  $\mathbf{V}^{RC} = (\mathbf{V}^{CR})^T$  分别表示左热极和右热极与中心区域的相互作用项. 根据非平衡格林函数方法<sup>[39, 41–43]</sup>, L 型结的推迟的格林函数可以表达为

$$G^r = [(\omega + i\eta)^2 I - K^C - \sum_L^r - \sum_R^r]^{-1}, \quad (2)$$

其中  $\omega$  是声子振动的频率,  $\eta$  为一个正的无穷小量.

$\sum_{\beta}^r = \mathbf{V}^{C\beta} g_{\beta}^r \mathbf{V}^{\beta C}$  ( $\beta = L, R$ ) 代表左热极或者右热极的自能,  $g_{\beta}^r$  是热极的表面格林函数<sup>[44]</sup>. 通过计算得到推迟的格林函数后, 可以求出声子的透射系数和热导<sup>[40,42,43]</sup>:

$$T = \text{Tr}(G^r \Gamma_L G^a \Gamma_R), \quad (3)$$

$$\kappa(t) = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega \cdot P(\omega, t) \cdot T, \quad (4)$$

其中  $G^a = (G^r)^+$  是超前格林函数,  $\Gamma_{\beta} = i[\sum_{\beta}^r - \sum_{\beta}^a]$  ( $\beta = L, R$ ) 表示左热极或者右热极与中心区域的相互作用项,  $\hbar$  是普朗克常量,  $P(\omega, t)$  表示不同温度下不同频率的声子对运输的贡献的权重因子,  $P(\omega, t) = \omega \partial f_{\beta}(\omega, t) / \partial t$ , 这里  $t$  表示温度, 其中  $f_{\beta}(\omega, t) = \{\exp[\hbar\omega / (k_B t)] - 1\}^{-1}$  是玻色-爱因斯坦分布函数.

## 3. 结果和讨论

图 2(a) 给出了图 1 中三种不同夹角的 L 型结的热导随温度的变化关系. 从图中可以看到, 尽管三种结构的热导都随着温度的升高而增大, 但是 L 型结的热导对夹角非常敏感, 夹角越大热导越高. 通过分析不同夹角的 L 型结的声子透射系数来解

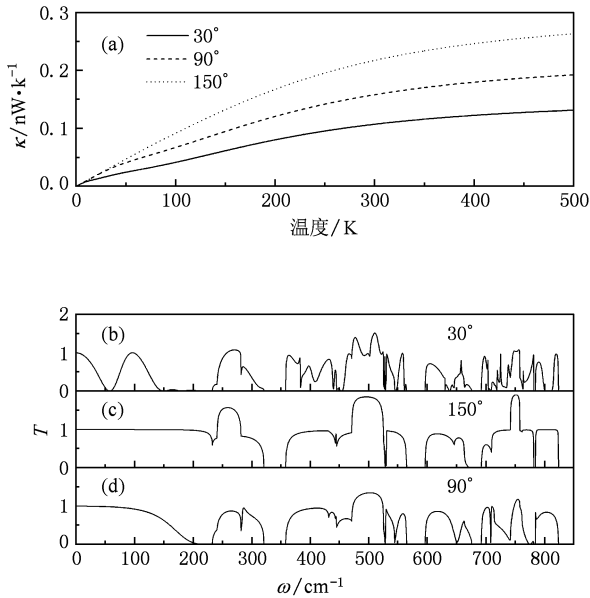


图2 L型结的热导随温度变化及L型结的声子透射谱图 (a) 夹角为30°, 90°和150°, 宽度  $N_A = 5, N_Z = 3$  的L型结的热导随温度的变化关系; (b), (c)和(d)对应于图1中三种L型结的声子透射系数

释这些热输运现象. 在图2(b)–(d)中分别给出了夹角为30°, 150°, 90°的L型结的声子透射谱. 在温度较低的时候, 因为只有低频声子起作用, 所以热导很低. 随着温度的升高, 高频声子将参与输运, 而且温度越高, 高频声子的作用也越大, 因此三种L型结的热导都随着温度的升高而升高. 另外通过比较图2(b), (c), (d)可以看到, 这三种结构的透射系数存在着明显的差别. 在图2(b)中, 夹角为30°的L型结的透射谱中有很多的共振峰和谷, 量子化台阶被完全破坏, 透射系数的最大值远小于2, 并且透射谱出现了很宽的零透射频带. 这就说明不管是低频还是高频声子通过夹角为30°的L型结时都受到了很大的散射, 因此该结构的热导较低. 而在图2(c)中, 夹角为150°的L型结的透射谱呈现出量子化台阶, 透射系数的最大值接近于2, 振荡也较少, 因此该L型结对声子的散射小, 声子几乎可以无反射地透过, 从而热导也较高. 而对于夹角为90°的L型结来说, 其声子输运情况介于前二种结构之间. 在图2(d)中, 在频率为  $0 < \omega < 100 \text{ cm}^{-1}$  区域内, 透射系数表现出一个量子化台阶, 这与夹角为150°的L型结的透射系数相似. 由于低温热导主要取决于低频声子的贡献, 因此夹角为90°的L型结的热导曲线与夹角为150°的L型结的热导曲线在低温区基本重合. 在夹角为90°的L型结声子透射谱的高频区域, 与夹角为

150°的L型结比较, 透射系数呈现了一些振荡, 而与夹角为30°的L型结比较, 其振荡又没有这么剧烈. 所以夹角为90°的L型结的声子的透射和反射介于前两者之间, 热导也介于两者之间.

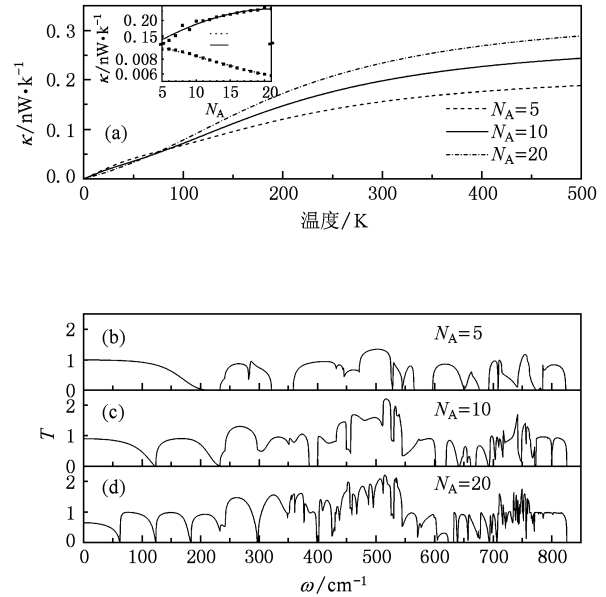


图3 夹角90°的L型结的热导随温度变化及L型结的声子透射谱图 (a) 夹角为90°, 宽度  $N_Z = 3, N_A = 5, 10, 20$  的L型结的热导随温度的变化关系, 内插图中点线和实线分别表示温度为10 K和300 K时热导随  $N_A$  的变化; (b), (c)和(d)分别表示  $N_A = 5, 10, 20$  的L型结的声子透射系数

图3(a)给出了在不同宽度  $N_A$  下, 夹角为90°的L型结的热导随温度的变化曲线. 从图中可以看到, 三种结构的热导都随着温度的升高而增大, 然而在不同的温度区域热导随着宽度  $N_A$  的变化表现出相反的变化趋势. 在低温区域 ( $0 < t < 65 \text{ K}$ ) 热导随着  $N_A$  的增大而减小, 而在高温区域 ( $85 \text{ K} < t < 500 \text{ K}$ ) 热导随着  $N_A$  的增大而增大. 为了更清晰地反映出热导随着宽度的变化关系, 在内插图中分别用虚线和实线表示温度为10和300 K时热导随着宽度  $N_A$  的变化趋势. 为了说明这种低温和高温热导的不同变化, 在图3(b)–(d)中分别给出了  $N_A = 5, 10, 20$  的L型结的声子透射谱. 通过比较图3(b), (c), (d)可以看到, 低频声子 ( $0 < \omega < 65 \text{ cm}^{-1}$ ) 透射系数随着宽度  $N_A$  的增加而降低. 由于低温热导主要由低频声子的输运情况决定, 因此低温热导随宽度  $N_A$  的增大而减少. 在高频区域, 纳米带的宽度  $N_A$  的变化对声子的透射也有重要影响. 当  $N_A = 5$  时, 由于构成L型结的两条半无限长纳米带的宽度很窄, 在纳米带中存在的声子模式数较少, 相应地能够透射过L型结的声子模式也很少. 同时由于L型结的散射声子

透射谱呈现一些谷和峰,并且存在很宽的禁止频带,因此在图 3(b)中我们可以看到高频声子透射系数的最大值小于 2,因此总的高频声子的透射系数较小.随着扶手椅型纳米带的宽度增大,在纳米带中可以被激发的声子模式数增多.因此在图 3(c),(d)中除了看到由于多模式的叠加呈现得更加密集的共振峰和谷,而且透射系数的最大值也大于 2,因此总的高频声子的透射系数增大.由于高频声子对高温热导起着主导作用,所以夹角为  $90^\circ$  的 L 型结的高温热导随着宽度  $N_A$  的增大而增大.

图 4(a)给出了在不同的宽度  $N_z$  下,夹角为  $150^\circ$  的 L 型结的热导随温度的变化关系.从图中可以看出,三种宽度下 L 型结的热导都随着温度升高而升高,然而与夹角为  $90^\circ$  的 L 型结热导随着宽度  $N_A$  的变化进行比较,其热导随着宽度  $N_z$  的变化却表现出不同的变化趋势.在较低温度时热导变化趋势相同,但是在较高温度时,其热导随着宽度  $N_z$  的增大而减小.图 4(a)中的内插图更清晰地给出了在温度为 300 K 时热导随着宽度  $N_z$  的变化.为了分析热导的这种变化,在图 4(b)—(d)中分别给出了宽度  $N_z=3,6,12$  的 L 型结的声子透射谱.通过比较图 4(b),(c),(d)可以看到,随着宽度  $N_z$  的增加,低频声子的透射系数降低.因为低温热导主要取决于低频声子的贡献,所以低温热导随着宽度  $N_z$  的增加而降低.对于声子透射谱的高频段,当  $N_z=3$  时,在图 4(b)中我们看到了很少的峰和谷,声子透射谱呈现较完美的量子化台阶,这说明声子在夹角为  $150^\circ$  的 L 型结中受到的散射很小.随着宽度  $N_z$  的增加,尽管在 L 型结的锯齿型纳米带中存在的声子模式数增多,但是由于锯齿型石墨纳米带宽度的增加反而增强了 L 型结对声子的散射,因此在图 4(c),(d)中我们可以看到声子透射谱呈现较多的共振峰和谷,总的高频声子的透射系数也随之降低.因此在高温区,夹角为  $150^\circ$  的 L 型石墨纳米结的热导反而随着宽度  $N_z$  的增加而减小.

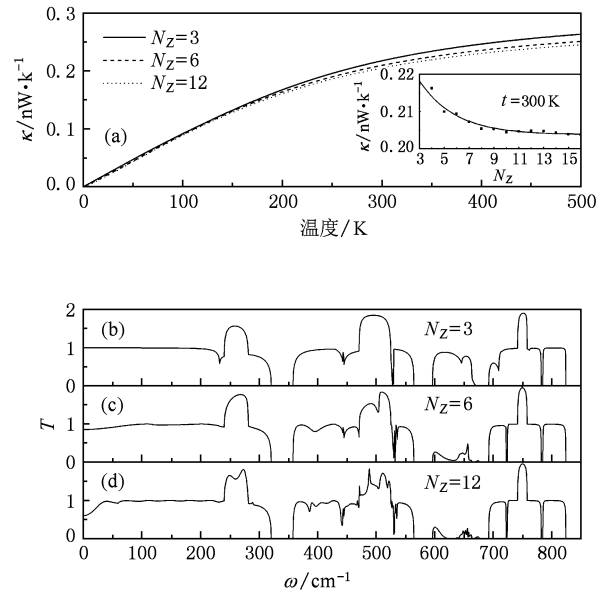


图 4 夹角为  $150^\circ$  的 L 型结的热导随温度的变化及 L 型结构的声子谱图 (a) 夹角为  $150^\circ$ , 宽度  $N_A=5$ ,  $N_z=3,6$  和 12 的 L 型结的热导随温度的变化关系(内插图为  $t=300$  K 时热导随着宽度  $N_z$  的变化图); (b), (c) 和 (d) 分别表示  $N_z=3,6,12$  的 L 型结的声子透射系数

## 4. 结 论

通过非平衡格林函数方法,研究了由半无限长扶手椅型和锯齿型边界石墨纳米带连接而成的 L 型石墨纳米结的热输运性质.结果表明,L 型石墨纳米结的夹角和石墨纳米带的宽度对其热导都有重要影响.L 型石墨纳米结的热导随着其夹角的增大而增大.夹角为  $90^\circ$  的 L 型石墨纳米结的热导随着扶手椅型纳米带宽度  $N_A$  的变化经历一个转变:在低温区热导随着宽度  $N_A$  的增大而降低;在高温区热导随宽度  $N_A$  的增大而升高.对于夹角为  $150^\circ$  的 L 型石墨纳米结,其热导在低温区 and 高温区都随着锯齿型纳米带宽度  $N_z$  的增加而降低.我们的研究结果能为设计基于石墨片的热、电器件提供理论参考.

[1] Chen J H, Jang C, Xiao S, Ishigami M, Fuhrer M S 2008 *Nature Nanotech.* **3** 206  
 [2] Du X, Skachko I, Barker A, Andrei E Y 2008 *Nature Nanotech.* **3** 491  
 [3] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666

[4] Zhang Y B, Tan Y W, Stormer H L, Kim P 2005 *Nature* **438** 201  
 [5] Huang L F, Li Y L, Ni M Y, Wang X L, Zhang G R, Zeng Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S306 (in Chinese) [黄良锋、李延龄、倪美燕、王贤龙、张国仁、曾 雉 2009 物理学报 **58** S306]  
 [6] Geima A K, Novoselov K S 2007 *Nature Mater.* **6** 183

- [7] Hu H, Cai J M, Zhang C D, Gao M, Pan Y, Du S X, Sun Q F, Niu Q, Xie X C, Gao H J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 037202
- [8] Luo T, Zhu W, Shi Q W, Wang X P 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3775 (in Chinese) [罗涛、朱伟、石勤伟、王晓平 2008 物理学报 **57** 3775]
- [9] Berger C, Song Z M, Li X B, Wu X S, Brown N, Naud C, Mayou D, Li T B, Hass J, Marchenkov A N, Conrad E H, First P N, de Heer W A 2006 *Science* **312** 1191
- [10] Campos L C, Manfrinato V R, Sanchez-Yamagishi J D, Kong J, Jarillo-Herrero P 2009 *Nano Lett.* **9** 2600
- [11] Liu S P, Zhou F, Jin A Z, Yang H F, Ma Y J, Li H, Gu C Z, Lü L, Jiang B, Zheng Q S, Wang S, Peng L M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4251 (in Chinese) [刘首鹏、周锋、金爱子、杨海方、马拥军、李辉、顾长志、吕力、姜博、郑泉水、王胜、彭练矛 2005 物理学报 **54** 4251]
- [12] Tang C, Ji L, Meng L J, Sun L Z, Zhang K W, Zhong J X 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7815 (in Chinese) [唐超、吉璐、孟利军、孙立忠、张凯旺、钟建新 2009 物理学报 **58** 7815]
- [13] Kobayashi Y, Fukui K, Enoki T, Kusakabe K, Kaburagi Y 2005 *Phys. Rev. B* **71** 193406
- [14] Li A H, Zhang K W, Meng L J, Li J, Liu W L, Zhong J X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4356 (in Chinese) [李爱华、张凯旺、孟利军、李俊、刘文亮、钟建新 2008 物理学报 **57** 4356]
- [15] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Nature* **444** 347
- [16] Chen Y P, Xie Y E, Yan X H 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 063711
- [17] Chen Y P, Xie Y E, Sun L Z, Zhong J X 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 092104
- [18] Chen Y P, Xie Y E, Zhong J X 2008 *Phys. Lett. A* **372** 5928
- [19] Yan Q M, Huang B, Yu J, Zheng F W, Zang J, Wu J, Gu B L, Liu F, Duan W H 2007 *Nano Lett.* **7** 1469
- [20] Zhang Z Z, Wu Z H, Chang K, Peeters F M 2009 *Nanotechnology* **20** 415203
- [21] Chen Y P, Xie Y E, Wei X L, Sun L Z, Zhong J X 2010 *Solid State Communications* **150** 675
- [22] Tan C L, Tan Z B, Ma L, Chen J, Yang F, Qu F M, Liu G T, Yang H F, Yang C L, Lü L 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5726 (in Chinese) [谭长玲、谭振兵、马丽、陈军、杨帆、屈凡明、刘广同、杨海方、杨昌黎、吕力 2009 物理学报 **58** 5726]
- [23] Zhou B H, Duan Z G, Zhou B L, Zhou G H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 037204
- [24] Balandin A A, Ghosh S, Bao W Z, Calizo I, Teweldebrhan D, Miao F, Lau C N 2008 *Nano Lett.* **8** 902
- [25] Nika D L, Pokatilov E P, Askerov A S, Balandin A A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 155413
- [26] Jiang J W, Wang J S, Li B W 2009 *Phys. Rev. B* **79** 205418
- [27] Kim P, Shi L, Majumdar A, McEuen P L 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 215502
- [28] Pop E, Mann D, Wang Q, Goodson K, Dai H J 2006 *Nano Lett.* **6** 96
- [29] Pop E, Mann D, Cao J, Wang Q, Goodson K, Dai H J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 155505
- [30] Prasher R 2010 *Science* **328** 185
- [31] Seol J H, Jo I, Moore A L, Lindsay L, Aitken Z H, Pettes M T, Li X S, Yao Z, Huang R, Broido D, Mingo N, Ruoff R S, Shi L 2010 *Science* **328** 213
- [32] Lan J H, Wang J S, Gan C K, Chin S K 2009 *Phys. Rev. B* **79** 115401
- [33] Xu Y, Chen X B, Gu B L, Duan W H 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 233116
- [34] Jiang J W, Wang J S, Li B W 2009 *Phys. Rev. B* **79** 205418
- [35] Yang N, Zhang G, Li B W 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 033107
- [36] Ouyang T, Chen Y P, Yang K K, Zhong J X 2009 *Eur. Phys. Lett.* **88** 28002
- [37] Hu J N, Ruan X L, Chen Y P 2009 *Nano Lett.* **9** 2730
- [38] Saito R, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1998 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (London: Imperial College Press) p170
- [39] Wang J S, Wang J, Zeng N 2006 *Phys. Rev. B* **74** 033408
- [40] Morooka M, Yamamoto T, Watanabe K 2008 *Phys. Rev. B* **77** 033412
- [41] Mingo N 2006 *Phys. Rev. B* **74** 125402
- [42] Yamamoto T, Watanabe K 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 255503
- [43] Wang J S, Wang J, Lü J T 2008 *Eur. Phys. J. B* **62** 381
- [44] Sancho M P L, Sancho J M L, Rubio J 1985 *J. Phys. F: Met. Phys.* **15** 851

## Thermal transport in L-shaped graphene nano-junctions\*

Bao Zhi-Gang Chen Yuan-Ping<sup>†</sup> Ouyang Tao Yang Kai-Ke Zhong Jian-Xin

(*Institute for Quantum Engineering and Micro-Nano Energy Technology, Faculty of Materials,  
Optoelectronics and Physics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China*)

(Received 28 May 2010; revised manuscript received 9 July 2010)

### Abstract

By using nonequilibrium Green's function method, the thermal transport properties of L-shaped graphene nano-junctions consisting of a semi-infinite armchair-edged nanoribbon and a semi-infinite zigzag-edged nanoribbon were studied. It is shown that the thermal conductance of the L-shaped graphene nano-junctions depends on the included angles and the widths of the graphene nanoribbons. As the angle of L-shaped graphene nano-junctions increases from  $30^\circ$  to  $90^\circ$  and further to  $150^\circ$ , the thermal conductance obviously increases. For the right-angle L-shape graphene nano-junction, the thermal conductance undergoes a transition with the increasing of the widths of the armchair nanoribbons. The thermal conductance decreases at low temperature region and increases at high temperature region. Meanwhile the thermal conductance of L-shape graphene nano-junction with included angle  $150^\circ$  decreases by increasing the widths of zigzag-edged nanoribbons in both low and high temperature regions. These thermal transport phenomena can be reasonably explained by analyzing the phonon transmission coefficient. We illustrate the mechanisms of thermal transport for different L-shaped graphene nano-junctions. The results provide significant physical models and theoretical basis for designing the thermal devices based on the graphene nano-junctions.

**Keywords:** graphene nano-junction, thermal transport, thermal conductivity

**PACS:** 81.05.ue, 65.80.Ck, 44.10.+i

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51006086, 11074213), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. 200805301001), the Open Fund based on Innovation Platform of Hunan Colleges and Universities of China (Grant No. 09K034), the Scientific Research Fund of the Hunan Provincial Education Department of China (Grant No. 09C956) and the Hunan Provincial Innovation Foundation for Postgraduate Student, China (Grant No. CX2010B253).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: chenyp@xtu.edu.cn