

基于量子修正的石墨烯纳米带热导率分子动力学表征方法*

郑伯昱 董慧龙 陈非凡†

(清华大学精密仪器系, 精密测试技术及仪器国家重点实验室, 北京 100084)

(2013年9月17日收到; 2014年1月7日收到修改稿)

本文提出了基于量子修正的非平衡态分子动力学模型, 可用于石墨烯纳米带热导率的表征. 利用该模型对不同温度下, 不同手性及宽度的石墨烯纳米带热导率进行了研究, 结果发现: 相较于经典分子动力学模型给出的热导率随温度升高而单调下降的结论, 在低于 Debye 温度的情况下, 量子修正模型的计算结果出现了反常现象. 本文研究还发现, 石墨烯纳米带的热导率呈现出明显的边缘效应及尺度效应: 锯齿型石墨烯纳米带的热导率明显高于扶手椅型石墨烯纳米带; 全温段的热导率及热导率在低温段随温度变化的斜率均随宽度的增加而增大. 最后, 文章用 Boltzmann 声子散射理论对低温段的温度效应及尺度效应进行了阐释, 其理论分析结果说明文章所建模型适合在全温段范围内对不同宽度和不同手性的热导率进行精确计算, 可为石墨烯纳米带在传热散热领域的应用提供理论计算和分析依据.

关键词: 石墨烯纳米带, 热导率, 量子修正, 分子动力学模拟

PACS: 65.80.Ck, 67.25.bd, 02.70.Ns

DOI: 10.7498/aps.63.076501

1 引言

石墨烯是由单层碳原子紧密堆积而成的二维蜂窝状结构分子, 由 Novoselov 等在 2004 年首次利用微机械剥离法制备^[1], 是人类发现的第一种且唯一存在的二维晶体. 石墨烯价带与导带相交于费米能级处, 禁带宽度几乎为零, 这些独特的电子结构使其具备了优良的热学、电学及力学性能^[2-4], 在高性能微纳米电子器件、复合材料及传感器领域逐渐获得了广泛的应用. 在传热学方面, 石墨烯由于其出色的热传输性能常被用作微电子领域的导热介质^[2]. 边界尺寸固定的带状石墨烯分子被称作石墨烯纳米带 (graphene nanoribbons, 简记为 GNR), 根据边界结构的不同可分为扶手椅型 (armchair graphene nanoribbons, 简记为 AGNR) 和锯齿型 (zigzag graphene nanoribbons, 简记为 ZGNR)^[4,5]. 最近发现 GNR 可被用作微尺度传热材料,

有望成为新一代芯片间的互联线^[6]. 本文对 GNR 的热导率进行了初步探索, 为揭示其热输运行为奠定了基础.

现阶段对于石墨烯热物理学特性的研究大多采用实验、理论分析和分子动力学模拟 (molecular dynamics, MD) 相结合的方法. 在实验方面, Cai 等^[7]通过石墨烯拉曼光谱的 G 峰温度效应对其热导率进行了测试, 发现石墨烯的热导率在 1350—3600 W/mK 之间. 在理论方面, Nika 等^[8]通过第一性原理计算出单层石墨烯的热导率在 2000—6000 W/mK 范围内, 林琦等^[9]研究了 N 掺杂对 ZGNR 热输运特性的影响. Zhou 等^[10]及 Zhang 等^[11]分别对 AGNR 的电子传输特性和复杂能带结构进行了研究. 在 MD 方面, Wei 等^[12]研究了 300—800 K 温度范围内不同结构及尺寸对 GNR 热导率的影响, 揭示了 GNR 热导率的尺寸依赖特性. William 等^[13]采用平衡分子动力学方法研究了室温 (300 K) 条件下边界粗糙程度及氢化率

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2012CB934103) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: cff@mail.tsinghua.edu.cn

对 GNR 的热导率的影响. 韩同伟等^[14]采用 Rebo 势和 Airebo 势在室温条件下对单层和多层石墨烯的弛豫性能进行了 MD 研究. 现有研究主要关注了 GNR 热导率高于室温时的热输运特性, 对其低温段的研究还相对空白. 考虑到 GNR 在半导体工业中的实际应用, 其工作环境温度范围通常跨度较大, 经常会涉及到低温和高温情况下的传热问题, 因此研究 GNR 全温度范围内的热输运特性是非常重要的. 由于温度较低时量子效应的存在, 一些热输运特性可能会发生变化. 本文通过引入量子修正, 提出了基于量子修正的非平衡分子动力学热导率表征方法, 与经典的 MD 模拟结果相比较, 发现 GNR 热导率在低温区域存在反常现象. 为了验证本文所建模型的普适性, 使用该模型研究了 GNR 热导率的边界效应及尺度效应, 分析了不同宽度下 AGNR 及 ZGNR 的热导率差异, 尤其是低温段的变化规律, 并用 Boltzmann 声子散射理论进行了阐释.

2 基于量子修正的 NEMD 模型

本文采用 Lammmps 开源软件进行模拟. GNR 中的 C—C 键长为 0.142 nm. 碳原子间的相互作用势选用 Airebo 势, 在模拟单层石墨烯分子时, 可以忽略 Lennard-Jones 势项和四体扭转势项, Airebo 势可简化为

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

其中, $V^R(r_{ij})$ 和 $V^A(r_{ij})$ 分别为 Airebo 势的排斥项和吸引项, b_{ij} 是反应多体作用的键序函数. 求解原子的运动方程时采用 Velocity-Verlet 算法, 该算法弥补了传统 Verlet 算法精度不统一的问题. 边界条件为周期性边界条件.

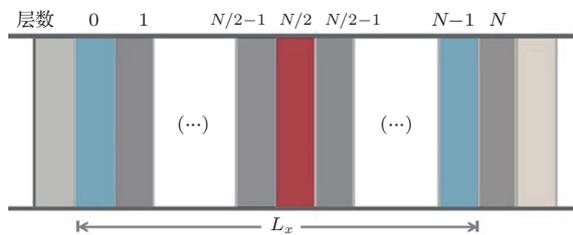


图1 NEMD 热交换过程示意图

GNR 的热导率计算采用 Muller-Plathe 的各向同性非平衡分子动力学 (nonequilibrium molecular dynamics, NEMD) 方法^[15], 原理如图 1 所示. 该算

法的基本思想是将模拟盒在 x 方向等分成 N 个局域等温层, 0 层和 $N/2$ 层分别为热沉和热源, $N/2$ 层到 $N-1$ 层与前一部分成镜像对称. 假设通过交换热沉与热源的原子能量得以使两端形成温度差, 即每隔一段时间分别取 0 层中速度最大的原子与 $N/2$ 层中速度最小的分子交换速度矢量 (原子动能), 从而可以感应出从 0 层到 $N/2$ 层的热流及与热流方向相反的温度场, 于是可以通过 Fourier 导热定律 $J = -\lambda \nabla T$ 对热导率进行求解.

Marti 等^[16]指出: 可以通过增加原子数和测量时间来增加体态中的碰撞数, 从而建立局部温度的概念. 本次模拟将模拟域等分为 80 个层, 每层的 C 原子数为 100 左右, 测量时间 1.65 ns (300 万步) 以充分建立局域温度平衡. 每一层的局域温度可由 Boltzmann 能量均分定理^[17]解得

$$T_i = \frac{2}{3Nk_B} \left\langle \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 \right\rangle, \quad (2)$$

其中 T_i 为第 i 层的局域温度, k_B 为 Boltzmann 常量, $\left\langle \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 \right\rangle$ 为该层原子的统计平均动能, (2) 式揭示了原子平均动能和局域温度的关系. 在达到稳态后, 非物理性速度交换所激发的能量传递与热流达到平衡, 此时, 导热带的温度梯度可由下式计算:

$$\nabla T_i = \frac{T_{i+1} - T_i}{x_{i+1} - x_i}. \quad (3)$$

进而热导率可表示为

$$\lambda = -\frac{J}{2tL_yL_z\nabla T}, \quad (4)$$

其中, L_yL_z 表示 GNR 的横截面积, J 为热流, t 为时间. (4) 式表明, 可以通过导热带的温度梯度对热导率进行表征, (4) 式分母中的 2 表示热源的原子要与成镜像关系的两个热沉的原子进行速率交换.

但需要指出的是, Boltzmann 能量均分定理只有在接近或者高于材料的 Debye 温度 (石墨烯的 Debye 温度 $\Theta_D \approx 322$ K^[18]) 时才是严格有效的^[17], 当温度低于 Θ_D 时, 大量声子模式没有被完全的激发出来, 此时的量子效应不可忽略, 经典的 MD 方法已无法求出精确的热导率值, 可以考虑引入量子修正解决这个问题.

量子修正^[19]的主要思想是通过经典力学系统中的模拟温度来计算量子系统中对应的修正温度. Lukes 等人^[17]应用量子修正方法准确计算出了单壁碳纳米管的热导率. 基于假设: 模拟温度 (T_{MD})

下的声子总能量等于量子修正温度 (T_q) 下的声子总能量^[16], 即

$$3Nk_B T_{MD_i} = \int_0^{\omega_{max}} D(\omega) n_0(\omega, T_{q_i}) \hbar \omega d\omega, \quad (5)$$

其中, n_0 为平衡态声子的波色分布函数 $n_0(\omega, T_q) = (e^{\hbar\omega/k_B T_q} - 1)^{-1} + 1/2$, ω 为声子频率, T_{MD_i} 与 T_{q_i} 分别为第 i 层的模拟温度和修正温度, $D(\omega)$ 为声子态密度, 在 Debye 近似下^[20] 可表示为

$$D(\omega) = A\omega^2, \quad 0 \leq \omega \leq \omega_D \quad (6)$$

其中 $A = 9N/\omega_D^3$, N 为对应原子数, ω_D 为 Debye 截止频率 $\omega_D = k_B \Theta_D/\hbar$. 将 (6) 式代入到 (5) 式中得

$$T_{MD_i} = \frac{1}{3Nk_B} \int_0^{\omega_D} A\hbar\omega^3 [(e^{\hbar\omega/k_B T_{q_i}} - 1)^{-1} + 1/2] d\omega. \quad (7)$$

将计算出的 T_q 代入 (4) 式中即可得到修正后的热导率值. 基于上述推导, 量子修正热导率计算模型可表述为

$$T_{MD_i} = \frac{2}{3Nk_B} \left\langle \sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 \right\rangle, \quad (8a)$$

$$T_{MD_i} = \frac{1}{3Nk_B} \int_0^{\omega_D} A\hbar\omega^3 [(e^{\hbar\omega/k_B T_{q_i}} - 1)^{-1} + 1/2] d\omega, \quad (8b)$$

$$A = 9N/\omega_D^3, \quad (8c)$$

$$\lambda = - \frac{J}{2tL_y L_z \nabla T_q}. \quad (8d)$$

3 模拟过程及结果分析

3.1 模拟过程

应用上述理论模型 (8) 计算了尺寸为 $4.5 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ 的 AGNR 分子的热导率. 积分的时间步长为 0.55 fs , 模拟过程如下: 首先按照蜂窝状晶格结构设置石墨烯各原子的初始位置, 然后弛豫整个构型以获得 GNR 的稳定结构, 采用 Nose-Hoover 控温法^[21] 在等温等压系综 (NPT) 下对系统进行调温 100000 步 (55 ps), 再在正则系综 (NVT) 下让系统自由运行 100000 步 (55 ps) 弛豫至平衡状态, 整个弛豫效果如图 2 所示.

接下来进行 3×10^6 步 (1.65 ns) 的热交换以统计热流密度和平均动能 (每隔 3×10^5 步统计一次), 继而计算出热导率. 图 3 为 AGNR 分子在 300 K 时

的平均动能分布图, 其中绿色散点、黄色散点、蓝色散点分别为 $2.1 \times 10^6 - 2.4 \times 10^6$ 步、 $2.4 \times 10^6 - 2.7 \times 10^6$ 步、 $2.4 \times 10^6 - 2.7 \times 10^6$ 步的统计结果, 红色曲线为最后三次统计的平均值, 取该平均值进行计算. 由 (2) 式可知, 可以用原子平均动能来表征温度. 由图 3 可见, 此时的温度场分布已相当稳定, 并且在热源和热沉附近表现出明显的非线性, 而在中间区域, 线性度较好, 这是由于边界的强散射现象造成的^[16], 在实际的热导率测试中, 我们也应尽量选取远离热源和热沉的区域进行计算.

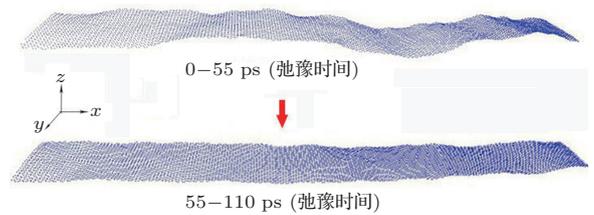


图 2 弛豫后达稳态的 AGNR 构型图

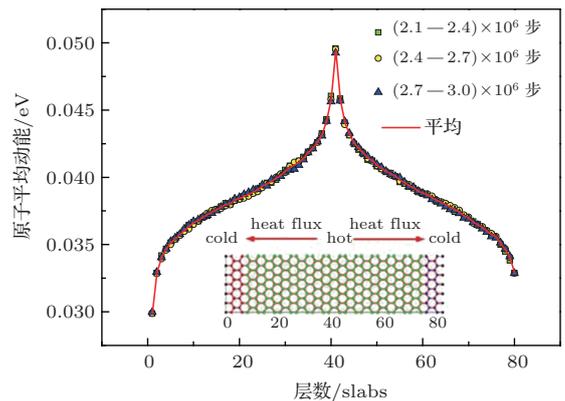


图 3 GNR 原子平均动能分布曲线

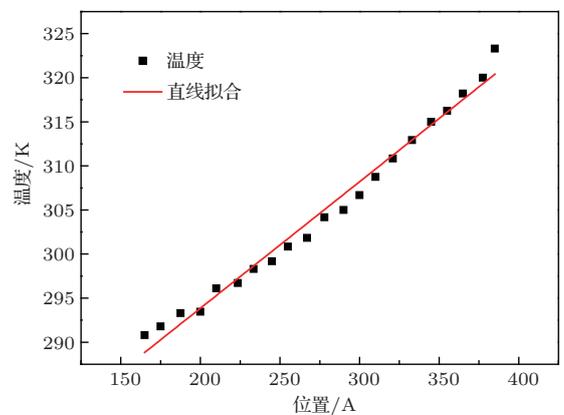


图 4 GNR 导热带温度分布曲线

图 3 中, 在热源和热沉附近 10 nm 范围内非线性

性较为明显, 因此认为选取中间线性度较好的区域进行计算较为合理. 结合 (8a), (8b) 式得到该区域修正后的温度曲线如图 4 所示, 再利用 (8d) 式求出修正后的热导率.

3.2 GNR 热导率的手性及温度影响

基于经典 MD 模型 ((2) 式、(3) 式) 和量子修正模型 ((8) 式) 分别计算了 4.5 nm × 50 nm 的 AGNR 及 ZGNR 分子在不同温度下的热导率, 计算结果如图 5 所示. 其中, 红色和绿色曲线分别表示传统 MD 方法计算所得的 AGNR 及 ZGNR 的热导率-温度曲线, 黑色和蓝色曲线分别表示由量子修正模型计算所得的 AGNR 及 ZGNR 热导率-温度曲线, 垂直虚线则表示石墨烯的 Debye 温度点所在位置.

由图 5 可以看出, 两种手性的 GNR 分子热导率随温度的变化趋势相同, 由经典 MD 方法计算的热导率随温度升高单调下降, 而采用量子修正模型计算所得的热导率在 100—200 K 间出现了一个明显的拐点. 拐点之前, 热导率随温度近似线性增加, 拐点后, 近似指数下降. 存在明显的反常现象. 在温度高于 Debye 温度 Θ_D 时, 两种模型的计算结果变化趋势相近, 在温度低于 Θ_D 时, 差距明显.

低温段的反常现象可以通过 Boltzmann 声子散射理论加以阐述. 基于空间非均匀声子散射的 Boltzmann 方程在弛豫近似下可以描述为 [8]

$$\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)\Big|_{\text{drift}} = -\left(\frac{\partial N}{\partial t}\right)\Big|_{\text{scatt}} = -n/\tau. \quad (9)$$

(9) 式包含漂移项 (drift) 和散射项 (scatt) 两部分, 其中, N 为声子的分布函数, τ 为声子的弛豫时间, n 为声子偏离平衡态的部分, 表示为 $n = N - N_0$, $N_0 = 1/\{\exp[\hbar\omega/(k_B T)] - 1\}$ (\hbar 为普朗克常量, k_B 为波尔兹曼常数, ω 为声子频率), 为平衡态声子的波色分布. 同时, 偏离项

$$n = -\tau_{\text{tot}}(v\nabla T)\frac{\partial N_0}{\partial T}, \quad (10)$$

其中 v 为声子的群速度 $v = \partial\omega/\partial q$, τ_{tot} 为总弛豫时间.

结合 (10) 式和文献 [8] 给出的热流的表达式, 热流可表示为

$$\begin{aligned} J &= \sum_{s,q} (s,q) \hbar\omega_s(q) n(q, \omega_s) \\ &= -\nabla T \sum_{s,\vec{q}} \tau_{\text{tot}} v^2(s,q) \frac{\partial N_0(\omega_s)}{\partial T} \hbar\omega_s(q). \end{aligned} \quad (11)$$

结合 Fourier 导热定律, 可得热导率的表达式 [8]

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{4\pi k_B T^2 L_z} \sum_s \left\{ \int_0^{q_{\text{max}}} \hbar\omega_s(q) v_s(q)^2 \tau_{\text{tot}} \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\exp[\hbar\omega_s(q)/k_B T]}{[\exp(\hbar\omega_s(q)/k_B T) - 1]^2} dq \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

其中 s 为声子模态, q 为波数. 在低温状态下, GNR 中可近似认为散射弛豫时间 τ_B 为主要的边界散射时间, 因此有

$$\tau_{\text{tot}} \approx \tau_B = \frac{d}{v_s(\omega_s)} \frac{1+p}{1-p}, \quad (13)$$

其中, d 为 GNR 的截面宽度, p ($0 < p < 1$) 为描述 GNR 边界光滑程度的参数. 将 (13) 式代入 (12) 式, 且令 $x = \hbar\omega/k_B T$ (当温度较低时, $x \rightarrow \infty$), (12) 式变为

$$\lambda = \left[\frac{k_B^2 d}{4\pi \hbar^2 L_z} \frac{1+p}{1-p} \sum_s \int_0^\infty \frac{x^2}{v} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx \right] T. \quad (14)$$

由于 $0 < p < 1$, 且积分项为正, 因此 (14) 式右边温度 T 的系数亦为正. 即在低温段, 热导率随温度升高近似线性增加.

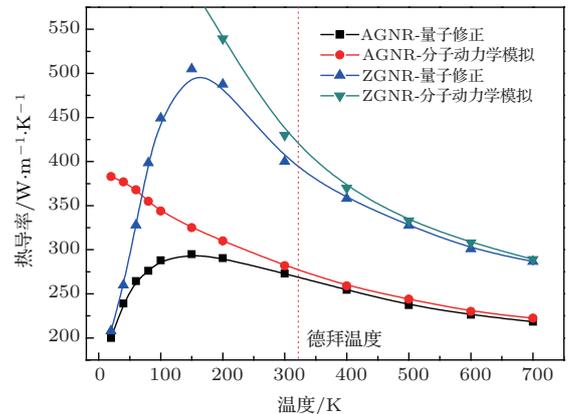


图 5 (网刊彩色) MD 及量子修正后 AGNR 及 ZGNR 的温度特性曲线

由图 5 还可看出: 尺度相同, 温度一定时, ZGNR 的热导率明显高于 AGNR, 与文献 [22] 中的研究结论一致. 这主要是边界散射的差异造成的, AGNR 的边界散射要强于 ZGNR, 导致声子沿锯齿型方向的传播速度要高于扶手椅型方向的传播速度. Paul 等 [23] 引入边界粗糙函数, 从理论上分析了两种手性影响热输运特型的微观机理, 也得到了相同的结论.

经量子修正模型计算, AGNR 在 300 K 时的热导率为 272 W/mK, 与文献 [22] 中相似条件下的计算结果相近, 其差异可能在于: 文献 [22] 中选取的

原子间势能为 Tersoff 势, 本文采用的为 Airebo 势. 经研究表明 [24]: Tersoff 势下石墨烯的声子谱与实验测量和采用其他势的理论计算所得到的结果差别较大, 相比之下, (2) 式的 Airebo 势更能精确地计算 GNR 的热导率.

3.3 GNR 热导率的尺度效应

考虑到微尺度下, GNR 的宽度可能会对热输运特性造成影响, 下文利用量子修正模型对不同宽度下 GNR 的热导率进行了研究. 分别构建了长度 50 nm, 宽度范围为 2—10 nm 的一系列 AGNR 及 ZGNR 分子模型, 计算结果如图 6 所示. 其中黑色、红色、蓝色、绿色、粉色曲线分别为 2 nm, 4.5 nm, 6 nm, 8 nm 及 10 nm 宽度的 GNR 热导率-温度曲线.

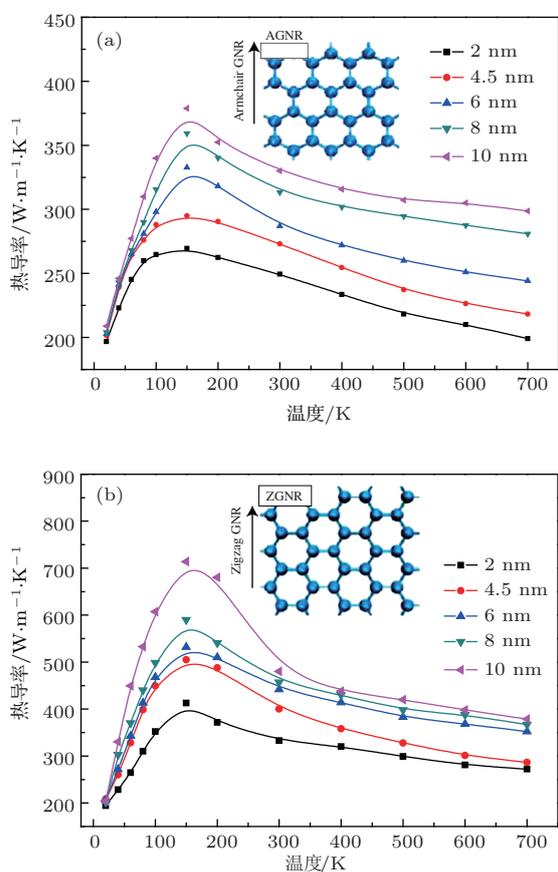


图6 (网刊彩色) 不同宽度下 AGNR 及 ZGNR 的热导率温度曲线 (a) 不同宽度 AGNR 的热导率温度曲线; (b) 不同宽度 ZGNR 的热导率温度曲线

由图 6 可以看出, 对于不同宽度的 AGNR 和 ZGNR 分子, 热导率随温度的变化规律基本相同. 热导率在低温段随温度近似线性增长, 其斜率随纳米带宽度的增加而增大 (即从黑色曲线到粉色曲线在低温段的斜率逐渐增大). 当温度一定时, AGNR

和 ZGNR 的热导率均随着纳米带宽度的增加而增大 (即从黑色曲线到粉色曲线逐渐增大).

根据声子散射理论, 当纳米带宽度与声子的平均自由程处于同一量级时, 边界效应会成为影响热输运特性的主要因素. 当宽度增加时, 声子模态增加, 而边界固定的声子模态不变 [25], 热输运的边界效应降低, 热导率随之增大.

低温段的尺度效应可进一步由 Boltzmann 理论进行阐释. 由 (14) 式可以看出, 热导率随温度变化的斜率

$$k = \left[\frac{k_B^2}{4\pi\hbar^2 L_z} \frac{1+p}{1-p} \sum_s \int_0^\infty \frac{x^2}{v} \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} dx \right] d$$

与纳米带宽度 d 近似正相关, 即在低温段, 斜率 k 随纳米带宽度的增加而增大, 这与图 6 所示的模拟结果完全符合.

4 结论

本文建立了基于量子修正的 NEMD 热导率表征模型, 可在全温度范围内实现热导率的精确计算, 论文通过对 GNR 热导率的研究得到了如下结论:

1. 模拟过程中发现, 在热源和热沉附近 (大约 10 nm 范围内), 温度场会出现明显的非线性变化, 在热导率的实际测试中, 应该而且容易避开这一区域.
2. GNR 的热导率表现出明显的温度效应. 相较于经典 MD 模型给出的热导率随温度升高而单调下降的计算结果, 通过量子修正模型得到的热导率, 在低于 Debye 温度的情况下存在反常现象, 即在 100—200 K 间出现明显拐点, 拐点前热导率随温度升高成近似线性增加, 而在拐点后则随着温度升高呈近似指数下降.
3. 手性不同, 热导率差异较大. 温度一定时, 相同尺度的 ZGNR 热导率明显高于 AGNR, 体现出明显的边界效应.
4. GNR 的热导率呈现明显的尺度效应. 其随着纳米带宽度的增加而增大, 且在低温段, 热导率随温度变化的斜率也会随纳米带宽度的增加逐渐增大.

参考文献

[1] 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

- [2] Jin F, Zhang ZH, Wang CZ, Deng XQ, Fan Z Q 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 036103 (in Chinese) [金峰, 张振华, 王成志, 邓小清, 范志强 2013 物理学报 **62** 036103]
- [3] Yin W H, Han Q, Yang X H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 248502 (in Chinese) [尹伟红, 韩勤, 杨晓红 2012 物理学报 **61** 248502]
- [4] Xiao J, Yang Z X, Xie W T, Xiao L X, Xu H, OuYang F P 2012 *Chin.Phys. B* **21** 027102
- [5] Deng S X, Liang S D 2012 *Chin.Phys. B* **21** 047306
- [6] Shao Q, Liu G, Teweldebrhan D 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 202108
- [7] Cai W W, Moore A L, Zhu Y W, Li X S, Chen S S, Shi L, Ruoff R S 2010 *Nano Lett.* **10** 1645
- [8] Nika D L, Pokatilov E P, Askerov A S, Balandin A A 2009 *Phys. Rev. B* **79** 155413
- [9] Lin Q, Chen Y H, Wu J B, Kong Z M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 097103 (in Chinese)[林琦, 陈余行, 吴建宝, 孔宗敏 2011 物理学报 **60** 097103]
- [10] Zhou B H, Duan Z G, Zhou B L, Zhou G H 2010 *Chin. Phys. B* **19** 037204
- [11] Zhang L J, Xia T S 2010 *Chin. Phys. B* **19** 117105
- [12] Wei Z Y, Bi K D, Chen Y F 2010 *Journal of Southeast University (Natural Science Edition)* **40** 306 (in Chinese) [魏志勇, 毕可东, 陈云飞 2010 东南大学学报 **40** 306]
- [13] William J E, Lin H, Pawel K 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 203112
- [14] HanT W, He P F 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3408 (in Chinese)[韩同伟, 贺鹏飞 2010 物理学报 **59** 3408]
- [15] Florian M L 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 6082
- [16] Maiti A, Mahan G D, Pantelides S T 1997 *Solid State Communications.* **102** 517
- [17] Lukes J R, Zhong H L 2007 *J. Heat Transfer.* **129** 705
- [18] Hu J N, Ruan X L, Chen Y P 2009 *Nano Lett.* **9** 2730
- [19] WangS C, Liang X G, Xu X H, Ohara T 2009 *Appl. Phys.* **105** 014316
- [20] Hasegawa H 2009 *Phys. Rev. E* **80** 011126
- [21] Evens D J, Holian B L 1985 *Chem. Phys.* **83** 4069
- [22] Guo Z G, Zhang D E, Gong X G 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 163103
- [23] Paul P, David E, Raj S 2012 *Journal of Heat Transfer.* **134** 122401
- [24] Srivastava G P The Physics of Phonons (IOP, Philadelphia 1990) p99
- [25] Vandescuren M, Hermet P, Meunier V, Henrard L, Lambin P 2008 *Phys. Rev. B* **78** 195401

Characterization of thermal conductivity for GNR based on nonequilibrium molecular dynamics simulation combined with quantum correction*

Zheng Bo-Yu Dong Hui-Long Chen Fei-Fan[†]

(State Key Laboratory of Precision Measurement Technology and Instruments, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 17 September 2013; revised manuscript received 7 January 2014)

Abstract

A nonequilibrium molecular dynamics model combined with quantum correction is presented for characterizing the thermal conductivity of graphene nanoribbons (GNR). Temperature effect on graphene nanoribbon thermal conductivity is revealed based on this model. It is shown that different from the decreasing dependence in classical nonequilibrium molecular dynamics simulations, an “anomaly” is revealed at low temperatures using quantum correction. Besides, the conductivity of GNR shows obvious edge and scale effects: The zigzag GNR have higher thermal conductivity than the zigzag GNR. The whole temperature range of thermal conductivity and the slope of thermal conductivity at low temperatures both show an increasing dependence of width. Boltzmann-Peierls phonon transport equation is used to explain the temperature and scale effects at low temperatures, indicating that the model constructed is suitable for a wide temperature range of accurate calculation for thermal conductivity of different chirality and width. Research provides a possible theoretical and computational basis for heat transfer and dissipation applications of GNR.

Keywords: graphene nanoribbons, thermal conductivity, quantum correction, nonequilibrium molecular dynamics simulation

PACS: 65.80.Ck, 67.25.bd, 02.70.Ns

DOI: [10.7498/aps.63.076501](https://doi.org/10.7498/aps.63.076501)

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2012CB934103).

[†] Corresponding author. E-mail: cff@mail.tsinghua.edu.cn