

三终端非对称夹角石墨烯纳米结的弹道热整流

顾云凤 吴晓莉 吴宏章

Ballistic thermal rectification in the three-terminal graphene nanojunction with asymmetric connection angles

Gu Yun-Feng Wu Xiao-Li Wu Hong-Zhang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 248104 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.248104

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.248104>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I24>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

石墨烯/聚乙烯醇/聚偏氟乙烯基纳米复合薄膜的介电性能

Dielectric properties of graphene/poly(vinyl alcohol)/poly(vinylidene fluoride) nanocomposites films

物理学报.2016, 65(18): 188101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.188101>

THz 谐振腔型石墨烯光电探测器的设计

Design and performance analysis of THz microcavity-enhanced graphene photodetector

物理学报.2016, 65(16): 168101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.168101>

化学气相沉积法制备的石墨烯晶畴的氢气刻蚀

Hydrogen etching of chemical vapor deposition-grown graphene domains

物理学报.2016, 65(9): 098101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.098101>

基于石墨烯互补超表面的可调谐太赫兹吸波体

Tunable terahertz absorber based on complementary graphene meta-surface

物理学报.2016, 65(1): 018101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.018101>

含石墨烯临界耦合谐振器的吸收特性研究

Study on the absorbing properties of critically coupled resonator with graphene

物理学报.2015, 64(23): 238103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.238103>

三终端非对称夹角石墨烯纳米结的弹道热整流*

顾云风† 吴晓莉 吴宏章

(南京林业大学机械电子工程学院, 南京 210037)

(2016年6月14日收到; 2016年7月28日收到修改稿)

提出并通过非平衡格林函数法验证了一个三终端石墨烯纳米结弹道热整流的理论模型——石墨烯带两端作为左右热极, 其上加一倾斜分支作为控制热极形成一个Y形纳米结. 结果发现: 热流倾向于从与控制热极夹角较小的热极流向另一个热极; 控制热极与左右热极间夹角差别的增大有利于热整流, 这一现象在扶手椅型石墨烯带上尤其明显; 锯齿型石墨烯带加上与其呈 30° 夹角的扶手椅型分支具有最明显的热整流效应; 对于左右热极宽度不同的热整流器, 倾斜控制热极可以使整流比在原来的基础上提高超过50%.

关键词: 弹道热整流, 石墨烯, 非平衡格林函数法, 声子

PACS: 81.05.ue, 65.80.Ck

DOI: 10.7498/aps.65.248104

1 引言

热传导是一种最基本的能量传播形式, 而声子则是一种主要的热能载流子. 不过声子不属于实体粒子, 不受诸如电场、磁场等影响. 如何做到像控制电子一样调控声子一直是声子学^[1]研究的目标, 这方面研究的一个重要方向就是热整流. 这是一种不对称的热导现象: 热流沿某个方向容易通过, 反向则基本呈截止状态, 或相对较小.

在过去的十几年已经有了不少关于热整流方面的研究工作, 比如基于非线性原子链的理论模型^[2,3]; 实验方面, 在部分沉积无定形大分子的碳纳米管^[4]、量子点^[5]和三角形还原氧化石墨烯^[6]上都可以观察到热整流现象. 热整流机理一般会涉及两方面: 系统非对称性和非线性作用^[7]. 系统非对称方面, 常见的形式有质量梯度^[8,9]、结构非对称性^[10-12]和异质材料形成的界面^[13]等. 随着现代制造技术的进步, 器件的特征尺度可以达到与声子平均自由程相当的程度, 此时器件内部的声子间的非线性作用变得相对次要, 可以作为线性系统处理. 如果将这种尺度的结构用于热整流, 那么必须

借助于弹道热整流理论^[14].

一般热整流模型都是二终端结构, 即有两个热极. 不过, 鉴于经典的互易原理^[15,16]的限制, 线性系统中的弹道热整流器主要为三终端结构, 即在左右热极的基础上增加一个控制热极^[15,17-19]. 弹道热整流器同样要求有非对称性, 而控制热极则相当于提供一个非线性作用.

石墨烯是一种新型的二维材料, 经常用来研究热整流. 它具有优良的热输运性质^[20], 特别是室温下长达775 nm的声子自由程^[21], 很容易使得声子在纳米结构中以弹道方式传输. 另外随着石墨烯可控裁剪等技术^[22]的进步, 石墨烯材料将可以方便地用来制造各种结构比较复杂的器件, 甚至基于石墨烯带的集成电路^[23]. 现有文献提出的一种石墨烯弹道热整流器的模型是通过让三终端纳米结的左右热极宽度不同形成非对称性实现的^[15,19]. 对L形石墨烯纳米结的热输运性质的研究表明, 两段石墨烯带间的热导与它们之间的夹角呈正相关关系^[24,25]. 因此, 有理由相信也可以通过调整三终端石墨烯结构中终端夹角制造非对称性实现弹道热整流.

* 国家自然科学基金(批准号: 51376094, 51476033)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gu_yunfeng@sina.com

本文研究了终端夹角对三终端石墨烯弹道热整流的影响, 以及利用终端夹角改进左右热极宽度不同的整流器的整流效果. 发现通过在石墨烯带上附加倾斜的控制热极可以获得弹道热整流效应, 整流比可以超过10%; 对于左右热极宽度不同的热整流器, 倾斜控制热极可以使整流比在原来的基础上提高超过50%.

2 计算模型与方法

2.1 非平衡格林函数法

如图1(a)所示, 本文讨论的模型是一条石墨烯直带加上一个分支的Y形结构, 虚线包围的纳米结是中心散射区 (scattering region, S), 石墨烯带的左右两端分别作为纳米结的左热极 (left terminal, L) 和右热极 (right terminal, R), 石墨烯带的分支端则作为控制热极 (control terminal, C). 在简谐近似下, 体系的哈密顿量可以写为^[26]

$$H = \sum_{\alpha=S,L,C,R} H_{\alpha} + \sum_{\beta=L,C,R} (\mathbf{u}_{\beta})^T \mathbf{V}_{\beta S} \mathbf{u}_S. \quad (1)$$

这里 $H_{\alpha} = (\dot{\mathbf{u}}_{\alpha})^T \dot{\mathbf{u}}_{\alpha}/2 + (\mathbf{u}_{\alpha})^T \mathbf{K}_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}/2$ 代表区域 α ($\alpha = S, L, C, R$) 的哈密顿量, 其中 $\mathbf{u}_{\alpha} = \sqrt{m} \mathbf{x}_{\alpha}$, \mathbf{x}_{α} 为原子偏离其平衡位置的位移矢量, 碳原子质量 $m = 1.993 \times 10^{-26}$ kg; \mathbf{K}_{α} 是力常数

矩阵; $\mathbf{V}_{\beta S}$ 是中心散射区与各个热极之间的耦合矩阵. 对于石墨烯结构, 应用比较广泛同时也是最方便的获得力常数矩阵的方法就是将晶格看成一个弹簧-质量系统, 每个原子与一定范围内的近邻原子之间的关系则用虚拟弹簧的力常数表示. 对此, Saito等^[27]的专著里有详细的介绍. 一般情况下, 需要考虑每对原子间沿着键长度方向的拉伸作用力、面内切向作用力和面外切向作用力. 本文考虑的距离最远的原子为第四近邻原子^[27]. 这一力常数模型在我们以往的工作中证实可以给出与实验结果符合得相当好的声子色散关系^[20]. 同时这一类力常数模型在现有文献中也被用于基于非平衡格林函数的石墨烯带的声子热输运分析中^[28,29].

基于如(1)式的哈密顿量, 根据非平衡格林函数法可以获得中心散射区的随声子频率 ω 变化的延迟格林函数^[30]

$$\mathbf{G}_S = [(\omega + i0^+)^2 \mathbf{I} - \mathbf{K}_S - \boldsymbol{\Sigma}_L - \boldsymbol{\Sigma}_R - \boldsymbol{\Sigma}_C]^{-1}, \quad (2)$$

其中 \mathbf{K}_S 是整个晶格的力常数矩阵与中心散射区相关的部分, \mathbf{I} 和 $\boldsymbol{\Sigma}_{\alpha} = \mathbf{V}_{S\alpha} \mathbf{g}_{\alpha} \mathbf{V}_{\alpha S}$ ($\alpha = L, C, R$) 分别是单位矩阵和各个热极的自能. 热极表面格林函数 \mathbf{g}_{α} 可以通过递归迭代的方法获得^[30]. 基于 \mathbf{G}_S 和热极的带宽函数 $\boldsymbol{\Gamma}_{\alpha} = i(\boldsymbol{\Sigma}_{\alpha} - \boldsymbol{\Sigma}_{\alpha}^*)$, 可以获得满足互易原理^[15,16]的各对热极间的透射系数

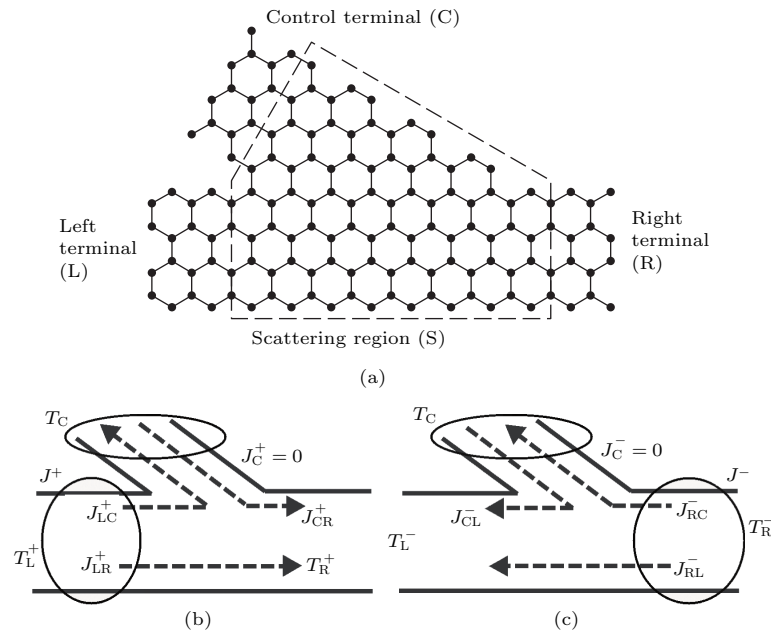


图1 (a) 三终端石墨烯纳米结示意图及其 (b) $\Delta T > 0$ 和 (c) $\Delta T < 0$ 时终端温度和热流方向

Fig. 1. (a) Schematic diagram of a three-terminal graphene nanojunction, and the terminal temperatures and heat flux directions for (b) $\Delta T > 0$ and (c) $\Delta T < 0$, respectively.

$$\tau_{\alpha\beta} = \tau_{\beta\alpha} = \text{Trace}(\mathbf{T}_\alpha \mathbf{G}_S \mathbf{T}_\beta \mathbf{G}_S^*)$$

$$(\alpha, \beta = \text{L, C, R}), \quad (3)$$

这里上标“*”表示共轭转置. 利用透射系数, 由热极 α 流到热极 β 的热流就可以表示为

$$J_{\alpha\beta}(T_\alpha, T_\beta) = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty \tau_{\alpha\beta} \omega [f(T_\alpha) - f(T_\beta)] d\omega$$

$$(\alpha, \beta = \text{L, C, R}), \quad (4)$$

其中,

$$f(T_\alpha) = 1 / \{ \exp[\hbar\omega / (K_B T_\alpha)] - 1 \} \quad (5)$$

是温度为 T_α 的热极 α 中声子的玻色-爱因斯坦分布函数, \hbar 和 K_B 则分别为约化普朗克常数和玻尔兹曼常数.

将热流由左热极向右热极传播的情形定义为正向传播, 并且用上标“+”表示. 相应的示意图为图 1(b). 这时左热极温度 T_L^+ 比右热极温度 T_R^+ 高, 纳米结中平均温度 $T_0^+ = (T_L^+ + T_R^+) / 2$, 左右热极温度与此平均温度的偏离值 $\Delta T = (T_L^+ - T_R^+) / 2 > 0$. 由左热极流向右热极的热流可以在 (4) 式的基础上表示为^[18]

$$J^+ = J_{\text{LR}}^+(T_L^+, T_R^+) + J_{\text{LC}}^+(T_L^+, T_C). \quad (6)$$

控制热极设定一个固定的控制温度 T_C , 相应的一对 T_L^+ 和 T_R^+ 使得控制热极处于热平衡状态, 也就是控制热极中的热流为零^[15]:

$$J_C^+ = J_{\text{LC}}^+(T_L^+, T_C) + J_{\text{RC}}^+(T_R^+, T_C) = 0. \quad (7)$$

如图 1(b) 所示, (6) 式表示左右热极间的热能交换由两部分构成: 左右热极之间直接的热能交流 $J_{\text{LR}}^+(T_L^+, T_R^+)$ 和左热极流入控制热极经过转化后流入右热极的, 即 $J_{\text{LC}}^+(T_L^+, T_C) = -J_{\text{RC}}^+(T_R^+, T_C)$. 由于控制热极总体上没有热流出入, 热量由左热极流入, 全部在右热极流出.

反向传播用上标“-”表示, 示意图如图 1(c). 这时右热极的温度 T_R^- 比左热极的 T_L^- 高, 即与平均温度 $T_0^- = (T_L^- + T_R^-) / 2$ 偏离 $\Delta T = (T_L^- - T_R^-) / 2 < 0$, 从右热极流向左热极的热流

$$J^- = J_{\text{RL}}^-(T_R^-, T_L^-) + J_{\text{RC}}^-(T_R^-, T_C). \quad (8)$$

此种情形下控制热极热流同样要求为零, 即

$$J_C^- = J_{\text{RC}}^-(T_R^-, T_C) + J_{\text{LC}}^-(T_L^-, T_C) = 0. \quad (9)$$

如图 1(c) 所示, 这一限制同样使得右热极流入的热量全部在左热极流出.

衡量热整流效果可以用下面定义的热整流比来度量:

$$R = |J^+ - J^-| / \min(J^+, J^-). \quad (10)$$

(10) 式使用要求正向和反向传播时控制温度 T_C 和 $|\Delta T|$ 相同. 现有文献对热整流比的定义并没有统一^[31]. 本文采用的热整流比定义是比较常见的一个^[9,12,13,15,19]: 正反向热流差与两者的最小值相比. 也有文献采用热流差比上正反向热流的较大值这一定义^[18]. 当然不用热流而代之以相应的热导率或热导定义热整流比也是一种选择^[4,7,11]. 根据热导或热导率用热流表示的定义式, 可以发现用热流与用热导或热导率定义热整流比是近似等效的^[7,11], 不过要求正反向传热对应的温差要相同^[31].

2.2 三终端石墨烯纳米结

如同 (3) 式所示, 热极间的透射系数具有互易性. 在不考虑声子间的非线性作用时, 互易性使得二终端结构不适合作为弹道热整流器件^[15]. 因此本文研究的是如图 1(a) 所示的三终端结构.

三终端结构产生弹道热整流效应的关键在于左右热极与控制热极间的声子透射系数不同^[15,18,19], 也就是说左右热极与控制热极间必须具有非对称性. 在图 2 给出的四种结构中, 控制热极与左右热极之间的夹角不同. 如果控制热极与宽度相同的左右热极垂直, 那么左右热极间不会具有热整流现象^[15].

根据边缘特征可以将石墨烯带分为扶手椅型 (armchair, A) 和锯齿型 (zigzag, Z). 图 2(a) 和图 2(b) 所示的结构是锯齿型石墨烯直带分别加一条扶手椅型分支和锯齿型分支. 图 2(c) 和图 2(d) 所示的结构则是扶手椅型石墨烯直带分别加一条锯齿型分支和扶手椅型分支. 锯齿型石墨烯带宽度如图 2(b) 所示用锯齿链的数目 N_z 来表示, 而扶手椅型的则如图 2(d) 所示用碳二聚链数 N_a 来确定^[32].

为了叙述方便, 本文参照 Xu 等^[24] 在研究 L 形石墨烯带夹角时的命名方法, 对图 2 中的各个结构根据各终端石墨烯带类型和角度命名为: 左(右)端类型+控制端类型+左端和控制端间角度. 按照此规则, 图 2 中各纳米结依次为: “ZA30”, “ZZ60”, “AZ30” 和 “AA60”.

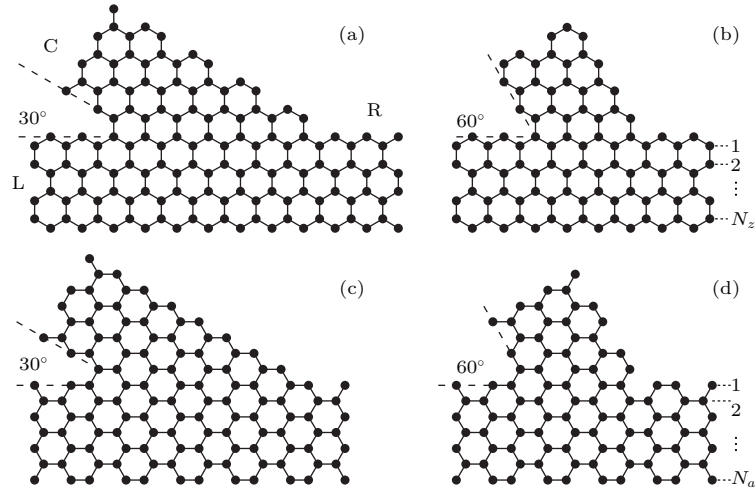


图2 根据石墨烯带边缘特征和角度分成的四种三终端纳米结 ($N_z = 4, N_a = 7$) (a) ZA30; (b) ZZ60; (c) AZ30; (d) AA60

Fig. 2. The four kinds of three-terminal nanojunctions classified in terms of the edge shape and connection angle ($N_z = 4, N_a = 7$): (a) ZA30; (b) ZZ60; (c) AZ30; (d) AA60.

3 结果与讨论

3.1 纳米结 ZA30

首先分析图 2(a) 中的 ZA30. 该结构左(右)热极属于锯齿型, 控制热极则属于扶手椅型. 计算中, $N_z = 4, N_a = 7$. 控制热极与左热极夹角 30° , 与右热极的夹角则为 150° . 图 3 是根据 (3) 式计算得到的各对热极之间的透射系数, 其中虚线与实线分别表示控制热极和右热极之间的透射系数 τ_{CR} 与左热极和控制热极之间的透射系数 τ_{LC} . ZA30 中控制热极与左热极的角度远小于与右热极之间的夹角, 这一非对称性使得如图 3 所示, 在大部分频段 $\tau_{LC} < \tau_{CR}$, 特别是低频部分 (比如小于 500 cm^{-1}) 更为明显. 低频声子是热传导的主力, 这部分声子透射系数的不同对形成弹道热整流很关键. 虽然有三个终端, 但是 Y 形石墨烯带如同 L 形石墨烯带一样, 声子带间大夹角同样导致两段石墨烯带匹配得较好, 即引起较小的声子散射 [24].

对应图 3 的透射系数, 图 4 表示的是控制热极温度 $T_C = 10 \text{ K}$ 时, 正向和反向传播时利用 (7) 和 (9) 式确定的左右热极的温度. 由于透射系数在绝大部分频段中 $\tau_{CR} > \tau_{LC}$, 在 $|\Delta T|$ 相同的情况下, 热流正向流动时左右热极中的高温 T_L^+ (或低温 T_R^+) 大于反向流动时的高温 T_R^- (或低温 T_L^-) [15]. 对此可以给出一个简单的证明. 将玻色-爱因斯坦分布函数, 即 (5) 式在 T_C 处进行泰勒展开 [19]:

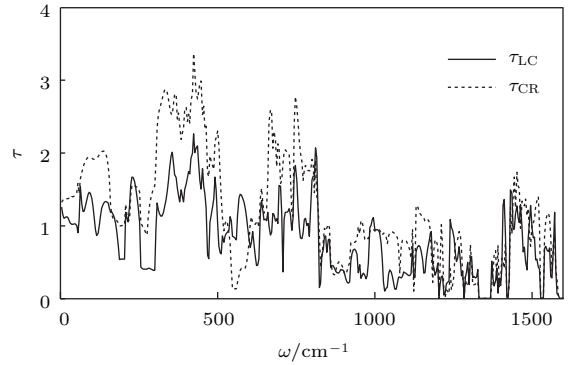


图3 ZA30 中左右热极与控制热极之间的声子透射系数随频率的变化

Fig. 3. The phonon transmission between the control terminal and the left (right) terminal in ZA30 as a function of phonon frequency.

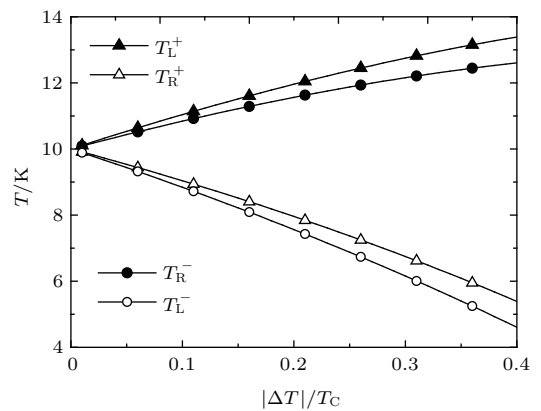


图4 ZA30 中终端温度 $T_L^{+/-}$ 和 $T_R^{+/-}$ 随 $|\Delta T|$ 的变化 ($T_C = 10 \text{ K}$)

Fig. 4. The terminal temperatures $T_L^{+/-}$ and $T_R^{+/-}$ in ZA30 as a function of $|\Delta T|$ ($T_C = 10 \text{ K}$).

$$f(T_\alpha) = f(T_C) + \left. \frac{\partial f}{\partial T} \right|_{T_C} (T_\alpha - T_C) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right|_{T_C} (T_\alpha - T_C)^2 + \dots \quad (11)$$

将(11)式代入(7)式和(9)式,可以近似获得

$$\begin{aligned} T_0^+ - T_C &\approx -\mu|\Delta T| - \frac{1}{2}v\Delta T^2, \\ T_0^- - T_C &\approx \mu|\Delta T| - \frac{1}{2}v\Delta T^2, \end{aligned} \quad (12)$$

其中,

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{F^{(1)}(\tau_{LC}) - F^{(1)}(\tau_{CR})}{F^{(1)}(\tau_{LC}) + F^{(1)}(\tau_{CR})}, \\ v &= \frac{F^{(2)}(\tau_{LC}) + F^{(2)}(\tau_{CR})}{F^{(1)}(\tau_{LC}) + F^{(1)}(\tau_{CR})}. \end{aligned} \quad (13)$$

这里 $F^{(n)}(\tau_{\alpha\beta}) = \int_0^\infty \tau_{\alpha\beta}\omega [\partial^n f / \partial T^n]_{T_C} d\omega$. 由(12)式可以进一步获得 $T_0^+ - T_0^- = -2\mu|\Delta T|$, 即对于一个给定的 T_C , 正反向传播的平均温度差与 $|\Delta T|$ 成正比关系, 比例系数的大小取决于 μ 中 $F^{(1)}(\tau_{LC})$ 和 $F^{(1)}(\tau_{CR})$ 之间的差异. 由于在大部分频段 $\tau_{LC} < \tau_{CR}$, 导致 $F^{(1)}(\tau_{LC}) < F^{(1)}(\tau_{CR})$, 进而 $\mu < 0$, 因此可以得到平均温度 $T_0^+ > T_0^-$. 另外(12)式也显示平均温度与 $|\Delta T|$ 之间的关系是非线性的. 这可以解释图4中正向传播时热极温度为什么相对较高, 并且表示成凹口向下的曲线.

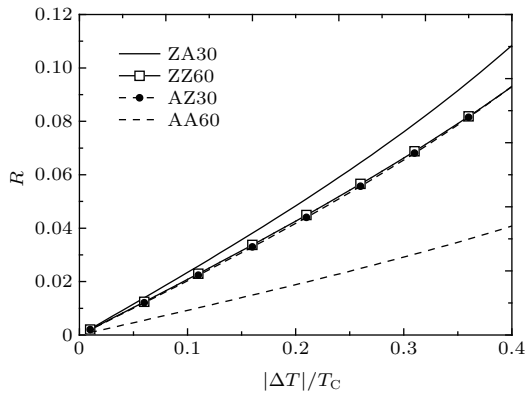


图5 四种纳米结的整流比随 $|\Delta T|$ 的变化

Fig. 5. The rectification ratios of four kinds of nano-junctions as a function of temperature bias $|\Delta T|$.

获得了各个热极间的声子透射系数和热极温度后, 就可以根据(6)和(8)式分别计算正向热流和反向热流. 在一个给定的控制温度下, 通过将 $|\Delta T|$ 相同时的正向和反向热流进行比较, 由定义式(10)式可以获得如图5所示的ZA30的整流比(实线)随 $|\Delta T|$ 的变化规律: 热整流比随着温度差的增加而

显著上升, 这与图4中正反向传播时热极温度差随 $|\Delta T|$ 的增大而增大的规律一致. 当 $|\Delta T| = 0.4T_C$ 时, 热整流比可以大于0.1. 这一结果表明, 完全可以通过在石墨烯带上附加倾斜的控制热极获得弹道热整流效应. 结构的非对称性使得热流倾向于从与控制热极夹角较小的热极流向另一个热极.

3.2 控制热极与左热极间夹角变化的影响

图5中的实线和带矩形标志的实线分别代表图2中ZA30和ZZ60的整流比, 这两种结构都是锯齿型石墨烯带的基础上加一个分支, 不同的是ZZ60加的分支仍然是锯齿型, 而ZA30的换成了扶手椅型分支. 另外后者控制热极与左热极之间的夹角比较小. 对L形石墨烯带夹角的影响的研究表明, 两段石墨烯带连接处的夹角大小与两者之间的热导呈正相关关系[24]. 从控制热极与左右热极间夹角的差异性来看, ZA30明显比ZZ60大, 即前者控制热极与左右热极间的热导差异大, 最终导致ZA30的热整流比相对更大. 同理, 如图5所示AZ30的热整流比比AA60的热整流比更大.

如图2所示, ZA30和ZZ60的主干为锯齿型石墨烯带, 而AZ30和AA60则基于扶手椅型. 图5给出的结果表明基于扶手椅型的纳米结热整流比的大小对夹角变化更加敏感. 不过, 从热整流比的大小来看, 基于锯齿型带的ZA30和ZZ60更适合作为热整流器, 特别是ZA30.

3.3 左右热极宽度不同的纳米结

对于非均质的纳米结而言, 可以通过调节控制热极的位置产生非对称性, 最终实现弹道热整流[18]. 对于本文考虑的均质石墨烯带, 现有文献一般通过让左右热极宽度不一致产生非对称性[15,19], 比如图6(a)所示的结构ZA90. 该结构的左热极宽度与图2中的锯齿型石墨烯带一致, 即 $N_z^L = 4$; 右热极则加宽为 $N_z^R = 7$.

图7的点划线代表右热极加宽的ZA90的整流比, 在 $|\Delta T| = 0.4T_C$ 时可以达到0.22, 大约为用实线表示的ZA30的两倍. 如果进一步将控制端与左热极间的夹角缩小, 即变成图6(b)所示的右热极加宽的ZA30, 那么由图7划线表示的结果显示整流比明显变大. 计算表明, 夹角变小可以使 $|\Delta T| = 0.4T_C$ 时的整流比与图6(a)的结构相比上升大约55%.

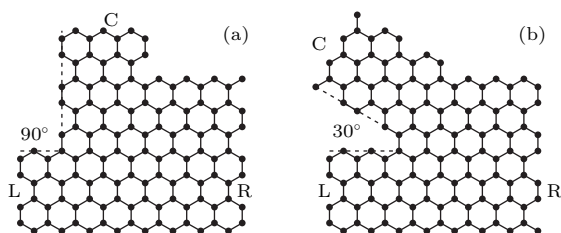


图6 左热极宽度 $N_z^L = 4$, 右热极 $N_z^R = 7$ 的 (a) ZA90 和 (b) ZA30

Fig. 6. (a) ZA90 and (b) ZA30 whose left terminal width $N_z^L = 4$, and right terminal width $N_z^R = 7$.

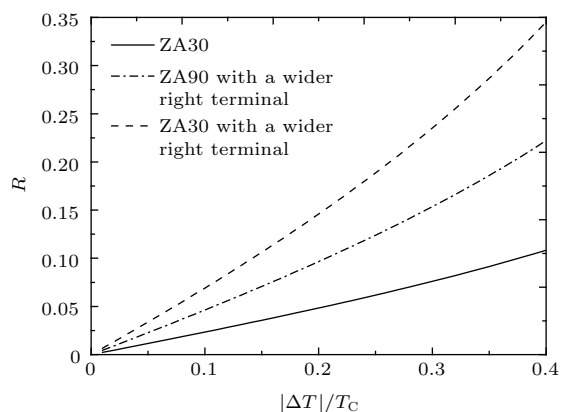


图7 ZA30 与右热极加宽的 ZA90 和 ZA30 的整流比

Fig. 7. The rectification ratios of ZA30, and the other two junctions with a wider right terminal, which are ZA90 and ZA30.

本文利用夹角、宽度等因素制造结构非对称性以实现热整流, 虽然是针对石墨烯的研究, 但是对其他晶格类型应该也有参考意义. 另外对于电子传热方面, 从三终端热整流器的原理上讲, 只要控制热极与左右热极间的电子热导存在差异, 同样也可以形成热整流. 不过与声子传热的贡献相比, 电子对热整流的影响不大. 对于金属材料而言, 电子的确可以说是热传输最重要的载流子之一. 但是半导体或绝缘体中声子则对热导的贡献最大. 而实验可以证实宽度 10 nm 以下的石墨烯纳米带均是半导体^[33]. 一般认为碳类材料的热输运主要由声子完成^[34], 对于本文涉及的低温下的石墨烯带弹道热输运也可以从理论上证明如此^[35]. 这就是为什么现有文献中类似的多终端石墨烯纳米结主要探讨声子热输运规律^[15]. 不过对于掺杂的石墨烯, 最近有研究认为室温下的电子贡献的热导率可以达到大约 10%^[36]. 另外, 三终端石墨烯纳米结在电学上也有相关研究^[37]. 进一步考虑到电子传输也会受石墨烯带夹角的影响^[38], 本文所讨论的结构在电学性质方面应该也是一个值得探讨的问题.

4 结 论

本文利用非平衡格林函数法研究了三终端石墨烯纳米结中的声子弹道热输运规律. 纳米结以锯齿型(或扶手椅型)石墨烯带的两端作为左右热极, 其上加一倾斜分支作为控制热极. 结果证实了可以利用控制热极与左右热极间夹角的非对称性制造热整流效应. 当控制热极温度相同、左右热极温差一致时, 热流倾向于从与控制热极夹角较小的热极流向另一个热极, 并且正向和反向传播时纳米结中的平均温度差与左右热极温差成正比. 控制热极与左右热极间夹角差异增大有利于加强热整流效果. 与扶手椅型石墨烯带相比较, 控制热极角度的变化对锯齿型石墨烯带的整流比影响较小. 不过锯齿型石墨烯带具有更明显的热整流效应, 特别是带有与其呈 30° 夹角的扶手椅型分支的. 不对称夹角不但可以使三终端石墨烯纳米结具有弹道热整流效应, 而且还可以使左右热极宽度不同的热整流器的整流比在原来的基础上提高超过 50%. 本文虽然给出的是一个理论模型, 但是可以对设计热整流器件给予一定的指导.

参考文献

- [1] Maldovan M 2013 *Nature* **503** 209
- [2] Terraneo M, Peyrard M, Casati G 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 094302
- [3] Li B W, Wang L, Casati G 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 184301
- [4] Chang C W, Okawa D, Majumdar A, Zettl A 2006 *Science* **314** 1121
- [5] Scheibner R, König M, Reuter D, Wieck A D, Buhmann H, Molenkamp L W 2007 *New J. Phys.* **10** 083016
- [6] Tian H, Xie D, Yang Y, Ren T L, Zhang G, Wang Y F, Zhou C J, Peng P G, Wang L G, Liu L T 2012 *Sci. Rep.* **2** 523
- [7] Zeng N, Wang J S 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024305
- [8] Yang N, Li N B, Wang L, Li B W 2007 *Phys. Rev. B* **76** 020301
- [9] Shah T N, Gajjar P N 2013 *Eur. Phys. J. B* **86** 497
- [10] Yang N, Zhang G, Li B W 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 243111
- [11] Wang Y, Vallabhaneni A, Hu J N, Qiu B, Chen Y P, Ruan X L 2014 *Nano Lett.* **14** 592
- [12] Wang Y, Chen S Y, Ruan X L 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 163101
- [13] Chen X K, Xie Z X, Zhou W X, Tang L M, Chen K Q 2016 *Carbon* **100** 492
- [14] Ding X, Ming Y 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 046601

- [15] Ouyang T, Chen Y P, Xie Y E, Wei X L, Yang K K, Yang P, Zhong J X 2010 *Phys. Rev. B* **82** 245403
- [16] Liang B, Yuan Y, Cheng J C 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 094305 (in Chinese) [梁彬, 袁樱, 程建春 2015 物理学报 **64** 094305]
- [17] Ming Y, Wang Z X, Ding Z J, Li H M 2010 *New J. Phys.* **12** 103041
- [18] Zhang L F, Wang J S, Li B W 2010 *Phys. Rev. B* **81** 100301
- [19] Xie Z X, Li K M, Tang L M, Pan C N, Chen K Q 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 183110
- [20] Gu Y F, Ni Z H, Chen M H, Bi K D, Chen Y F 2012 *J. Heat Trans.* **134** 062401
- [21] Ghosh S, Calizo I, Teweldebrhan D, Pokatilov E P, Nika D L, Balandin A A, Bao W, Miao F, Lau C N 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 151911
- [22] Zhang Y, Liu L Q, Xi N, Wang Y C, Dong Z L 2012 *Sci. Sin.: Phys. Mech. Astron.* **42** 358 (in Chinese) [张崧, 刘连庆, 席宁, 王越超, 董再励 2012 中国科学: 物理学 力学 天文学 **42** 358]
- [23] Areshkin D A, White C T 2007 *Nano Lett.* **7** 3253
- [24] Xu Y, Chen X B, Wang J S, Gu B L, Duan W H 2010 *Phys. Rev. B* **81** 195425
- [25] Bao Z G, Chen Y P, Ouyang T, Yang K K, Zhong J X 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 028103 (in Chinese) [鲍志刚, 陈元平, 欧阳滔, 杨凯科, 钟建新 2011 物理学报 **60** 028103]
- [26] Chen X B, Duan W H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 186302 (in Chinese) [陈晓彬, 段文晖 2015 物理学报 **64** 186302]
- [27] Saito R, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1998 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (London: Imperial College Press) pp166–171
- [28] Pourfath M 2014 *Non-equilibrium Green's Function Method for Nanoscale Device Simulation* (Wien: Springer-Verlag) pp221–230
- [29] Scuracchio P, Dobry A, Costamagna S, Peeters F M 2015 *Nanotechnology* **26** 305401
- [30] Wang J S, Wang J, Lü J T 2008 *Eur. Phys. J. B* **62** 381
- [31] Roberts N A, Walker D G 2011 *Int. J. Therm. Sci.* **50** 648
- [32] Zhang G 2015 *Nanoscale Energy Transport and Harvesting: A Computational Study* (Boca Raton: CRC Press) pp91–141
- [33] Li X, Wang X, Zhang L, Lee S, Dai H 2008 *Science* **319** 1229
- [34] Balandin A A 2011 *Nat. Mater.* **10** 569
- [35] Munoz E, Lu J, Yakobson B I 2010 *Nano Lett.* **10** 1652
- [36] Kim T Y, Park C H, Marzari N 2016 *Nano Lett.* **16** 2439
- [37] Ye E J, Sui W Q, Zhao X A 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 193303
- [38] Chen Y P, Xie Y E, Yan X H 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 063711

Ballistic thermal rectification in the three-terminal graphene nanojunction with asymmetric connection angles*

Gu Yun-Feng[†] Wu Xiao-Li Wu Hong-Zhang

(College of Electronic and Mechanical Engineering, Nanjing Forestry University, Nanjing 210037, China)

(Received 14 June 2016; revised manuscript received 28 July 2016)

Abstract

By using the nonequilibrium Green's function method, the ballistic thermal rectification in the three-terminal graphene nanojunction is studied. The dynamics of atoms is described by the interatomic fourth-nearest neighbor force-constant model. The nanojunction has a Y-shaped structure, created by a combination of a straight graphene nanoribbon and a leaning branch as the control terminal holding a fixed temperature. No heat flux flows through the control terminal. There exists a temperature bias between the two ends of the graphene nanoribbon serving as the left and right terminals, respectively. The primary goal of this paper is to demonstrate that the ballistic thermal rectification can be introduced by the asymmetric structure with different connection angles between terminals. The control terminal has a smaller connection angle with respect to the left terminal than to the right terminal. The forward direction is defined as being from the left terminal to the right terminal. The results demonstrate that, given the same control temperature and absolute temperature bias, the heat flux in the graphene nanoribbon tends to run preferentially along the forward direction. When the difference between the connection angles increases, the rectification ratio rises. Compared with that of the zigzag graphene nanoribbon, the rectification ratio of the armchair nanoribbon is much sensitive to the direction the control terminal. However, the greatest rectification ratio is found in the zigzag graphene nanoribbon which has a connection angle of 30 degrees with respect to the armchair branch. In addition, the direction of the control terminal can be adjusted to raise more than 50% of the rectification ratio of the graphene thermal rectifier based on the width discrepancy between the left and right terminals. The mechanism of the ballistic thermal rectification is also discussed. In the three-terminal graphene nanojunction, a smaller connection angle with respect to the control terminal leads to more phonon scatterings. The confirmation of this conclusion comes from a comparison of phonon transmission between different couples of terminals, which shows that in most of the frequency spectrum, the phonon transmission between the control terminal and the left terminal is smaller than between the control terminal and the right terminal. Given the same control terminal temperature and temperature bias, the asymmetric connection angles therefore will introduce a higher average temperature of the left and right terminals, and a larger heat flux in the forward process. Moreover, the average temperature difference between in the forward process and in the reverse process is found to be proportional to the temperature bias, and the proportionality coefficient will become bigger if the asymmetry is strengthened.

Keywords: ballistic thermal rectification, graphene, nonequilibrium Green's function method, phonon

PACS: 81.05.ue, 65.80.Ck

DOI: 10.7498/aps.65.248104

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51376094, 51476033).

[†] Corresponding author. E-mail: gu_yunfeng@sina.com