

多通道石墨纳米带中弹性声学声子输运和热导特性

卿前军 周欣 谢芳 陈丽群 王新军 谭仕华 彭小芳

Characteristics of acoustic phonon transport and thermal conductance in multi-terminal graphene junctions

Qing Qian-Jun Zhou Xin Xie Fang Chen Li-Qun Wang Xin-Jun Tan Shi-Hua Peng Xiao-Fang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 086301 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.086301

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.086301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I8>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

低维纳米材料量子热输运与自旋热电性质 -----非平衡格林函数方法的应用

Quantum thermal transport and spin thermoelectrics in low-dimensional nano systems: application of nonequilibrium Green's function method

物理学报.2015, 64(18): 186302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.186302>

T型双量子点分子 Aharonov-Bohm 干涉仪的电输运

Electron transport through T-shaped double quantum dot molecule Aharonov-Bohm interferometer

物理学报.2014, 63(22): 227304 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.227304>

门电压控制的硅烯量子线中电子输运性质

Transport properties in a gate controlled silicene quantum wire

物理学报.2014, 63(18): 187304 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.187304>

Au-Si₆₀-Au 分子结电子输运性质的理论计算

Theoretical calculation of electron transport properties of the Au-Si₆₀-Au molecular junctions

物理学报.2014, 63(17): 177304 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.177304>

平行耦合双量子点分子 A-B 干涉仪的电荷及其自旋输运

Charge and spin transport through parallel-coupled double-quantum-dot molecule A-B interferometer

物理学报.2014, 63(1): 017303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.017303>

多通道石墨纳米带中弹性声学声子 输运和热导特性*

卿前军¹⁾ 周欣¹⁾ 谢芳³⁾ 陈丽群^{1)†} 王新军¹⁾ 谭仕华¹⁾ 彭小芳^{1)‡}

1)(中南林业科技大学理学院, 长沙 410004)

2)(长沙理工大学, 近地空间电磁环境监测与建模湖南省普通高校重点实验室, 长沙 410004)

3)(宜春学院物理科学与工程技术学院, 宜春 336000)

(2015年11月20日收到; 2016年1月14日收到修改稿)

采用非平衡格林函数方法, 在保持总的能量输出通道中石墨链数不变的条件下, 研究并比较了并列的石墨纳米带通道中弹性声学声子输运和热导特性. 结果表明, 能量输出通道的增加能降低每个能量输出通道的热导; 与能量输入热库最近的能量输出通道热导最大, 最远的能量输出通道热导最小; 中间能量输出通道的热导性质与并列的各输出通道的结构参数密切相关, 最近和最远的能量输出通道的热导性质仅与各自能量输出通道的结构参数有关; 粗糙边缘结构能有效调节各通道的热导; 总的热导性质与能量输出通道石墨链数、能量输出通道数以及边缘结构粗糙程度密切相关.

关键词: 非平衡格林函数, 声学声子输运, 热导, 量子体系

PACS: 63.22.Rc, 73.23.Ad, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.65.086301

1 引言

近年来, 随着制造技术的不断进步, 已能够制造尺寸越来越小的纳米尺度结构. 众所周知, 在这样的低维量子结构中, 热导是量子化的, 热导的量子化单元是 $\pi^2 k_B^2 T / (3h)$ (k_B 是玻尔兹曼常量, h 是普朗克常量, T 是温度). 由于量子受限制约着声子的激发以及输运, 导致低维材料中的热导率远低于体材料中的热导率. 同时, 随着电子器件逐步小型化、集成化, 导致高集成度的量子器件群工作时热功率密度迅速增加, 这需要这些量子结构具有较高的热导率加速散热, 以免量子器件工作性质不稳定或失效. 因此, 量子器件中的热输运性质迫切需要

人们探索和优化. 为了深入理解量子结构中的热输运性质, 许多科研群体进行了深入的研究^[1-14]. 一些重要的理论研究方法被发展并用来研究低维结构中的热输运性质, 例如利用玻尔兹曼方程研究多约束纳米结构的声子热导率模型^[15]; 利用非平衡格林函数方法研究小尺度体系的热输运性质^[16]; 利用分子动力学方法研究存在空位缺陷的低维材料的热输运性质^[17] 和低维材料的瞬态热传导^[18]; 利用散射矩阵方法研究低维材料的低温热输运性质^[19]. 石墨烯是一种单原子层二维碳材料, 自从2004年首次发现以来, 由于具有轻的碳原子质量以及强的碳-碳共价键, 导致特别高的热导率, 受到许多科研群体的特别关注^[20]. 通过机械切割、电子束刻蚀等方法, 石墨烯已被设计成各种结构和尺

* 国家自然科学基金(批准号: 11247030)、湖南省自然科学基金(批准号: 14JJ4054)、长沙理工大学近地空间电磁环境监测与建模湖南省普通高校重点实验室开放基金(批准号: 20150103)、中南林业科技大学人才引进计划(批准号: 104-0160)、江西省自然科学基金(批准号: 20122BAB212009)和江西省教育厅科技项目(批准号: GJJ12601)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ldclqun@163.com

‡ 通信作者. E-mail: xiaofangpeng11@163.com

寸的石墨纳米带. 根据石墨纳米带的边缘形状, 可将其分为扶手椅型石墨带和锯齿型石墨带^[21], 这两种不同边界形状的纳米带中热输运性质存在明显的差异^[22]. 一些科研群体深入研究了这些量子结构和器件的热输运性质^[23], 并发现了许多新奇的热输运现象. 例如, 存在多层突变接口的T-形或者H-形结构能加强低温热导^[24]; 缺陷导致的热环流^[25]; 不对称的三端石墨纳米带结构中能够实现热整流^[26,27]. 许多基于石墨烯材料的具有特异热输运功能的热量子器件被设计, 如具有优良品质的热电材料^[28,29]、负微分热导结构^[30]、热导调制器^[31]等. 这些研究发现石墨纳米带中的热输运性质与石墨纳米带带边的粗糙程度^[32]、各种缺陷^[19,33-35]、石墨纳米带的弯曲程度^[31]、同位素^[36]、超晶格^[37]、外力应变以及界面接触^[38,39]、结构尺寸^[40]、异质结等^[41]密切相关^[42]. 最近, Peng等^[40]研究了石墨纳米带中多通道对声学声子输运和热导的影响, 主要研究了增加的反向能量输出通道对热输运的影响. 然而, 进一步研究多通道对热输运的影响, 对于量子器件的设计具有非常重要的物理意义, 而系统研究多通道对热输运的影响至今仍然很缺乏.

本文研究了如图1所示的多通道石墨纳米带中声学声子输运和热导性质. 在保持能量输出通道中总的石墨链数不变的条件下, 通过改变并列的能量输出通道数以及每个通道的石墨链数来调节各能量输出通道的声子透射概率和热导. 本文的研究结果表明, 能量输出通道数的增加能降低每个能量通道中的热导; 改变各能量输出通道的结构参数, 能有效调节中间能量输出通道中的声子透射概率和热导, 而与能量输入热库最近和最远的能量输出

通道的声子透射概率和热导性质仅与各自能量输出通道的结构参数密切相关, 与其他能量输出通道的结构参数无关; 与能量输入热库最近的能量输出通道中的热导最大, 最远的能量输出通道中的热导最小; 边缘结构的粗糙程度能有效调节各通道的热导. 总的热导性质与能量输出通道石墨链数、能量输出通道数以及边缘结构的粗糙程度密切相关. 这些结果为该领域提供了新的内容, 将有助于研究人员从理论和实验上更深入地理解相关结构中的声学声子输运和热导性质.

2 理论模型与公式

准一维的石墨纳米带结构如图1所示, 左边区域I是温度为 T_1 的能量输入热库, 中间是声子的散射区域, 右边区域(图1(a)的右边区域为II区域, 图1(b)的右边区域为II和III区域, 图1(c)的右边区域为II, III和IV区域, 且设右边区域的温度相等)为温度 T_2 的能量输出热库^[43,44], 且假设温度差 δT ($\delta T = T_1 - T_2 > 0$)很小, 在计算中可以用平均温度 T [$T = (T_1 + T_2)/2$]代替区域I, II, III, IV中的温度. 该结构中存在三支振动声学模: 两支平面内振动模 (x - y 平面) 与一支和石墨带平面垂直的振动模 (z 方向, 垂直于 x - y 平面)^[40], 由于垂直振动模与平面内的振动模之间没有耦合, 其哈密顿量是可以分离的. 许多以前的研究只着眼于与石墨带平面垂直的振动模的热输运研究^[19,24-26,40], 在这些研究的基础上, 目前的工作研究了多端石墨衔接对热输运的影响, 并与以前的研究进行比较,

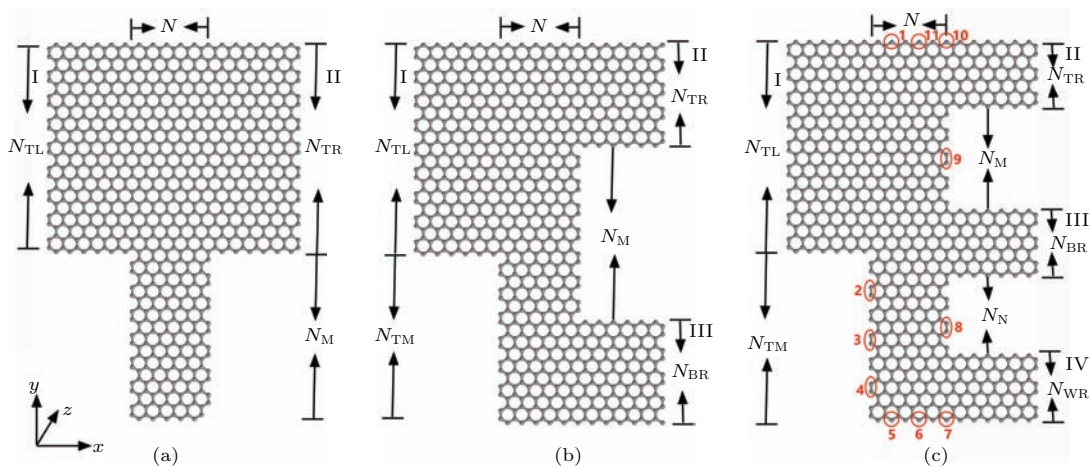


图1 (a), (b)和(c)分别为二通道、三通道、四通道纳米结构的示意图

Fig. 1. (a), (b) and (c) are schematics of two-terminal, three-terminal and four-terminal ballistic junctions, respectively.

所以在本文中仅仅考虑对与石墨带平面垂直的振动模的热运输的性质研究. 同时, 为了解所有声学模所贡献的总的热导性质, 研究与石墨带平面垂直的振动模的热运输性质是很有必要的. 由于常温下石墨烯中声子的平均自由程为 775 nm^[40], 远大于本文所考虑的量子结构, 所以电-声相互作用不予考虑.

对于图 1 所示的结构, 在弹性散射近似下, 计算热导的公式可写为^[40]

$$K_{(I-v)} = \frac{\hbar^2}{k_B T^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \tau_{(I-v)}(\omega) \frac{\omega^2 e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega} - 1)^2} d\omega, \quad (1)$$

其中 $\tau_{(I-v)}(\omega)$ 是区域 I 的声子穿越散射区域后进入区域 v (v 指的是 II, III 或 IV 区域) 的透射概率, $\beta = 1/(k_B T)$, k_B 是玻尔兹曼常量, ω 是声子振动频率, \hbar 是普朗克常量. 计算热导的中心问题是计算透射概率 $\tau_{(I-v)}(\omega)$. 透射概率 $\tau_{(I-v)}(\omega)$ 可表示为^[13]

$$\tau_{(I-v)}(\omega) = \text{Tr}(\mathbf{G}^r \Gamma_I \mathbf{G}^a \Gamma_v), \quad (2)$$

其中 Γ_I 和 Γ_v 分别表示能量输入端和其他能量输出端的接触扩展函数. $\mathbf{G}^r = (\mathbf{G}^a)^\dagger$ 是中心散射区的前进格林函数. 在图 1(a) 中 \mathbf{G}^r 可表示为

$$\mathbf{G}^r = [(\omega + i0^+)^2 \mathbf{I} - \mathbf{K}^I - \sum_{\text{TL}}^r - \sum_{\text{TR}}^r]^{-1}, \quad (3)$$

在图 1(b) 中 \mathbf{G}^r 可表示为

$$\mathbf{G}^r = \left[(\omega + i0^+)^2 \mathbf{I} - \mathbf{K}^I - \sum_{\text{TL}}^r - \sum_{\text{TR}}^r - \sum_{\text{BR}}^r \right]^{-1}, \quad (4)$$

在图 1(c) 中 \mathbf{G}^r 可表示为

$$\mathbf{G}^r = \left[(\omega + i0^+)^2 \mathbf{I} - \mathbf{K}^I - \sum_{\text{TL}}^r - \sum_{\text{TR}}^r - \sum_{\text{BR}}^r - \sum_{\text{WR}}^r \right]^{-1}, \quad (5)$$

其中, 0^+ 是趋近于零的微扰正数小量, \mathbf{I} 是单位矩阵, \mathbf{K}^I 是中间散射区的动力学矩阵, \sum_{TL}^r , \sum_{TR}^r , \sum_{BR}^r , \sum_{WR}^r 分别代表左端和中间散射区、右上端和中间散射区、右中间端口和中间散射区、右下端和中间散射区的耦合推迟自能. 通过上述方法计算出声子的透射系数, 再通过 (1) 式计算出该结构中的热导. 具体的计算方法可参考文献^[17].

3 数值结果和分析

图 2 描述了图 1 所示结构中弹性声子的透射概率随约化频率的变化关系. 图 2(a₁) 蓝线对应图 1(a) 结构横向宽度为 $N_{\text{TL}} = N_{\text{TR}} = 18\alpha$ 且 $N_{\text{M}} = 0$ 的理想结构中的透射概率, 图 2(b₁) 蓝线对应图 1(a) 结构横向宽度为 $N_{\text{TL}} = N_{\text{TR}} = 24\alpha$ 且 $N_{\text{M}} = 0$ 的理想结构中的透射概率. 图 2(a₁) 和 (b₁) 的黑线、绿线和红线分别对应图 (b) 结构参数为 $N_{\text{TL}} = 18\alpha$, $N_{\text{TR}} = 8\alpha$, $N_{\text{BR}} = 10\alpha$, $N_{\text{TM}} = N_{\text{M}} = 14\alpha$ 和 $N_{\text{TL}} = 24\alpha$, $N_{\text{TR}} = 12\alpha$, $N_{\text{BR}} = 12\alpha$, $N_{\text{TM}} = N_{\text{M}} = 8\alpha$ 结构中总的、II 通道和 III 通道的透射概率. 图 2(a₂) 和 (b₂) 对应图 1(c) 结构中结构参数为 $N_{\text{TL}} = 18\alpha$, $N_{\text{TR}} = N_{\text{BR}} = N_{\text{WR}} = 6\alpha$, $N_{\text{TM}} = 14\alpha$, $N_{\text{M}} = 8\alpha$, $N_{\text{N}} = 6\alpha$ 和 $N_{\text{TL}} = 24\alpha$, $N_{\text{TR}} = N_{\text{BR}} = N_{\text{WR}} = 8\alpha$, $N_{\text{TM}} = 8\alpha$, $N_{\text{M}} = N_{\text{N}} = 4\alpha$ 的透射概率, 图中蓝线、黑线、绿线和红线分别对应总的、II 通道、III 通道和 IV 通道的透射概率. 图 2(a₃) 和 (b₃) 中蓝线对应图 1(a) 中结构参数为 $N_{\text{TL}} = N_{\text{TR}} = 18\alpha$, $N_{\text{M}} = 14\alpha$ 和 $N_{\text{TL}} = N_{\text{TR}} = 24\alpha$, $N_{\text{M}} = 8\alpha$ 结构中总的透射概率, 图中红线和绿线分别对应图 1(b) 和 (c) 结构中总的透射概率. 所有结构中 $N = 5\sqrt{3}\alpha$ ($\alpha = 0.145$ nm). 从图 2(a₁) 和 (b₁) 中可以看到, 对于不存在突变衔接的理想石墨纳米带, 由于不存在结构对声子的散射影响, 总的输运谱线呈现理想的量子台阶行为. 而当石墨纳米带中存在突变衔接时, 不连续的突变量子散射界面对声子的散射影响导致透射曲线被下降的峰-谷输运曲线所代替. 比较图 2(a₁) 和 (b₁), 随着石墨带横向宽度由 $N = 18\alpha$ (α 是碳碳键长) 增加到 $N = 24\alpha$ ($\alpha = 0.145$ nm), 石墨带对声学波的横向受限减弱, 声子总的透射概率也随着增大. 比较图 2(a₁) 和 (a₂) 或者图 2(b₁) 和 (b₂), 在保持总的能量输出通道中石墨链数不变的条件下, 随着能量输出通道由一个变成两个甚至三个, 每个能量输出通道中的声子透射概率明显降低. 这是由于虽然总的石墨链 n 不变, 但每个能量输出通道的横向宽度变窄, 导致对声子的散射增强, 进而导致每个能量输出通道的声子透射概率明显降低. 从图 2(a₁) 和 (a₂) 以及图 2(b₁) 和 (b₂) 中发现, 在多能量输出通道中, 与能量输入通道的距离越远的能量输出通道, 声子的

透射概率越小. 这是由于离能量输入通道越远, 对声子的散射越强的原因. 在图 2(a₃) 中总的透射概率曲线表明, 能量输出通道由单通道变到两通道, 以及由两通道变到三通道, 总的透射概率明显降低. 而在图 2(b₃) 中总的透射概率曲线表明, 能量

输出通道由单通道变到两通道, 总的透射概率明显降低. 而由两通道变到三通道, 总的透射概率基本保存不变. 这表明, 总的透射概率不仅与能量输出端量子通道数有关, 还与能量输出通道的总石墨链 n 有关.

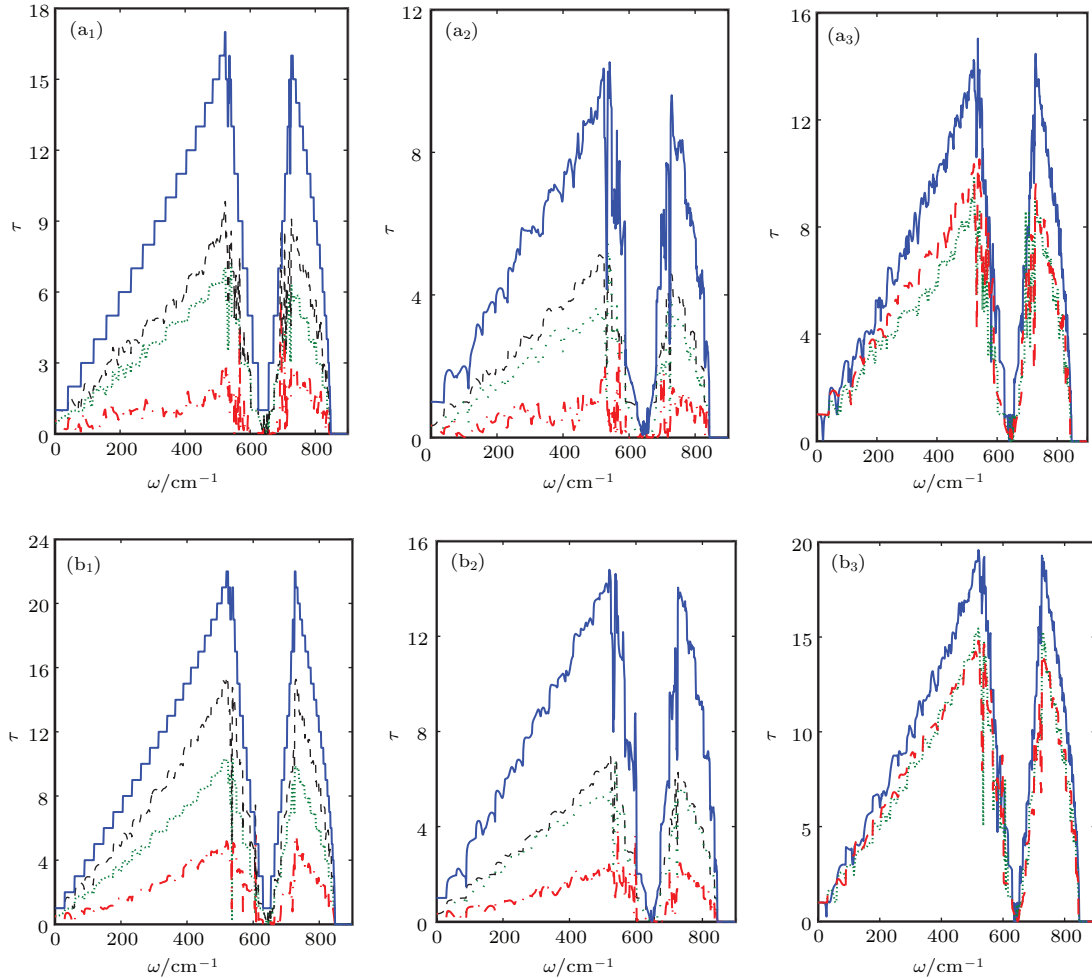


图 2 (网刊彩色) (a₁) 和 (b₁) 中蓝线表示理想结构的透射概率, (a₁) 和 (b₁) 中黑线、绿线、红线分别表示图 1(b) 结构中总的、II 通道、III 通道的透射概率; (a₂) 和 (b₂) 中蓝线、黑线、绿线、红线分别表示图 1(c) 结构总的、II 通道、III 通道、IV 通道的透射概率; (a₃) 和 (b₃) 中蓝线、绿线、红线分别表示图 1(a), (b) 和 (c) 结构中总的透射概率

Fig. 2. (color online) The blue curves in (a₁) and (b₁) correspond to the transmission rate in the idea structure; the black, green, and red curves in (a₁) and (b₁) correspond to the total transmission rate, the transmission rates in the II and III terminals in the structure of Fig. 1(b). (a₂) and (b₂) correspond to the phonon transmission rates in the structure of Fig. 1(c); the blue, black, green, and red curves correspond to the total transmission rate, the transmission rates in the II, III and IV terminals, respectively. The blue, green, and red curves in(a₃) and (b₃) correspond to the total transmission rates in the structure of Fig. 1(a), (b) and (c) respectively.

为了进一步研究多衔接通道的石墨纳米带中声子透射概率的性质, 在图 3 中, 我们进一步研究了在保持能量输出通道总的横向石墨链 $N = 24\alpha$ 不变时, 通过改变三个能量输出通道的横向宽度, 比较各输出通道的声子透射概率的性质. 在图 3 中有三种不同结构, 对应结构参数分

别为: 1) $N_{TL} = 24\alpha, N_{TR} = N_{BR} = N_{WR} = 8\alpha, N_{TM} = 8\alpha, N_M = N_N = 4\alpha$; 2) $N_{TL} = 24\alpha, N_{TR} = 6\alpha, N_{BR} = 8\alpha, N_{WR} = 10\alpha, N_{TM} = 8\alpha, N_M = 6\alpha, N_N = 2\alpha$; 3) $N_{TL} = 24\alpha, N_{TR} = 8\alpha, N_{BR} = 6\alpha, N_{WR} = 10\alpha, N_{TM} = 8\alpha, N_M = N_N = 4\alpha$. 图 3(a₁) 中蓝线、黑线和红线分别对应 1), 2),

3) 结构中II通道的透射谱. 图3(a₂)中蓝线、黑线、红线分别对应1), 2), 3) 结构中的III通道的透射谱. 图3(a₃)中蓝线、黑线、红线分别对应1), 2), 3) 结构中的IV通道的透射谱. 图3(a₄)蓝线、黑线、红线分别对应1), 2)和3) 结构中总的透射谱. 在图3中可以看到, 声子在II通道中的透射概率是最大的. 这是由于II通道与I通道最近, 声子从I通道到II通道的输运过程中遭受的散射最弱. 当II通道横向宽度由8 α 变为6 α , 由于该热输运通道变窄导致对声子的散射增强, 因此该通道中声子的透射概率有所降低. 比较图3(a₁)的黑线和红线, 当保持II通道横向宽度不变时, 改变其他能量输出通道的横向宽度, II通道中的声子透射概率几乎没改变, 说明其他通道的结构参数变化对II通道中的声子透射概率几乎没有影响. 这是因为虽然其他通道的结构参数发生变化, 由于能量输出通道中总的石墨链数

不变, 这些变化没有影响到能量输入通道和II通道的相对位置, 从而这些变化几乎没有影响到II通道中的声子透射概率. 而从图3(a₂)中我们发现保持III通道横向宽度不变, 减少II通道横向宽度同时增加IV通道横向宽度, III通道中声子透射系数明显降低. 这与II通道中的声子透射系数几乎不受其他通道结构变化影响明显不同. 这是由于II通道和IV通道横向宽度变化影响了III通道与能量输出端的相对位置, 导致声子从能量输入端输运到能量输出III通道时声子散射概率受到影响.

而对于III通道横向宽度由8 α 变为6 α , III通道中声子透射概率进一步降低, 这是由于III通道的横向宽度变窄, 从而导致III通道对声子散射增强的原因. 比较图3(a₁)和(a₂), 我们发现III通道中声子透射概率不仅与III通道横向宽度紧密相关,

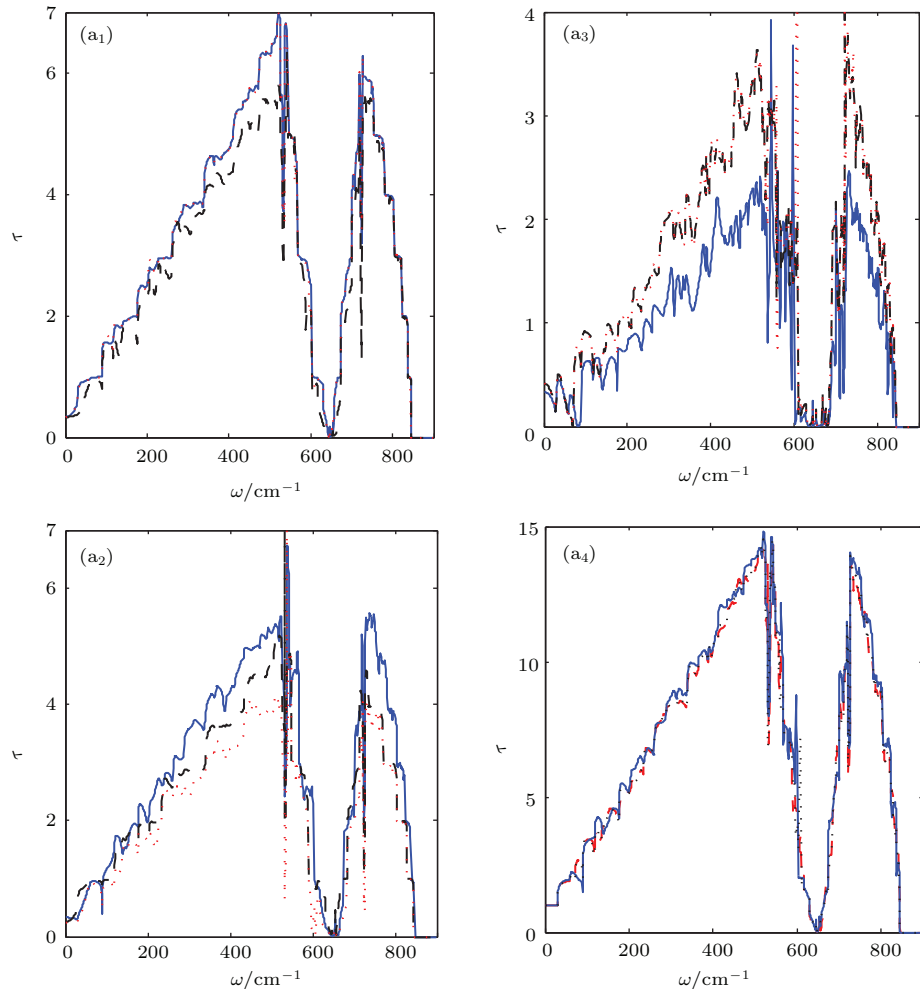


图3 (网刊彩色) (a₁), (a₂), (a₃) 分别表示图1(c)三种不同结构参数中II通道, III通道, IV通道的透射概率; (a₄)表示图1(c)中三种不同结构参数的总的透射概率

Fig. 3. (color online) (a₁), (a₂), and (a₃) correspond to the transmission rates in the II, III, and IV terminals in the structure of Fig. 1(c) with three different structure parameters; (a₄) corresponds to the total transmission rates in the structure of Fig. 1(c) with three different structure parameters.

也与II通道和IV通道横向宽度紧密相关. 此外, 从图3(a₃)中发现, 对于IV通道横向宽度由 8α 变为 10α , 而II通道横向宽度由 8α 变为 6α , IV通道中声子透射系数明显增加. 这是由于IV通道的横向宽度变宽时, 声子由能量输入通道进入IV通道的过程中对声子散射减弱的缘故. 而保持IV通道横向宽度不变, 同时III通道横向宽度由 8α 变为 6α , 而II通道横向宽度由 6α 变为 8α , IV通道中声子透射系数几乎不变. 这是因为虽然其他通道的结构参

数发生变化, 而能量输出通道中石墨链总数不变, 其他通道的结构参数变化没有影响到能量输入通道和IV通道的相对位置, 从而这些变化几乎没有影响到IV通道中的声子透射概率. 在图3(a₄)中发现, 虽然随着三个声子输出通道的横向宽度变化, 三个能量输出通道中声子透射概率发生变化, 而总的声子透射概率几乎没有改变. 这表明对于总的能量输入通道中石墨链数不变, 只需控制总的能量输出通道横向宽度就能控制声子透射概率.

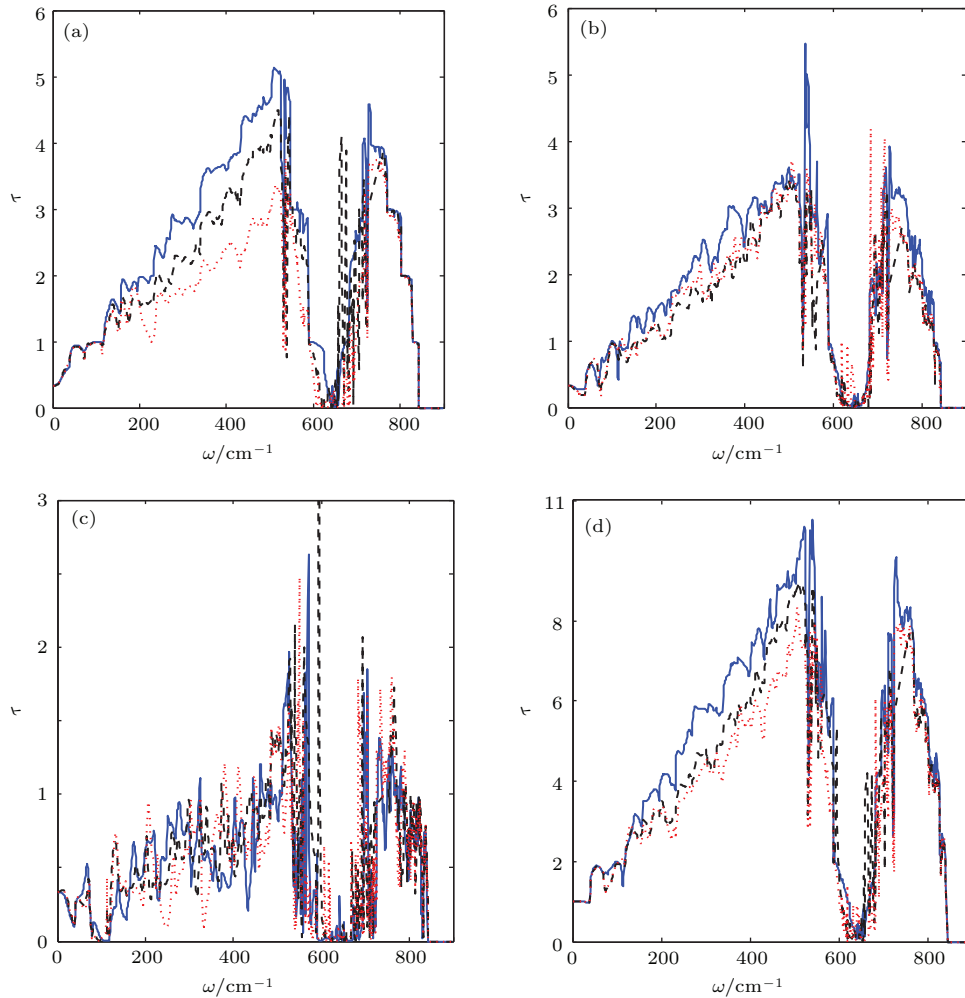


图4 (网刊彩色)(a), (b), (c), (d) 分别对应图1(c)结构中II, III, IV通道以及总的透射概率. 蓝线、黑线和红线分别表示理想边缘结构, 去掉1—5号原子后的非理想边缘结构, 以及去掉1—11号原子后的非理想边缘结构的透射曲线.

Fig. 4. (color online)(a), (b), (c), and (d) correspond to the transmission rates in the II, III, and IV terminals in the structure of Fig. 1(c). Blue, black, and red curves correspond to the transmission curves with ideal edge structure, non-ideal edge structure with 1–5 atoms being extracted, and non-ideal edge structure with 1–11 atoms being extracted, respectively.

由于目前的实际纳米加工过程中石墨烯纳米带的边缘结构常常为非理想边缘结构, 在图4中我们对比研究了理想边缘结构与非理想边缘结构的声子透射概率. 图4中的曲线对应图1(c)结构中结

构参数为 $N_{TL} = 18\alpha$, $N_{TR} = N_{BR} = N_{WR} = 6\alpha$, $N_{TM} = 14\alpha$, $N_M = 8\alpha$, $N_N = 6\alpha$ 的透射谱图4中的(a), (b), (c)和(d)分别对应II, III, IV通道以及总的透射谱. 图中的蓝线、黑线和红线分别对应理

想边缘结构、去掉1—5号原子后的非理想边缘结构以及去掉1—11号原子后的非理想边缘结构的透射谱. 从图4(a)—(c)中发现, 在频率趋近于0的低频区域, 非理想边缘结构对这些低频长波长声子的散射影响很小, 导致总的透射概率在频率趋近于0时总趋近于1. 而随着频率的增加, 非理想边缘结构对高频声子的散射增强. 计算结果表明增强的散射波与入射波相互耦合对各个声子输出端的影响明显不同: 耦合能明显降低与能量输入端最近的输出端的声子透射概率, 耦合对中间输出通道的声子透射概率影响较弱, 而耦合导致最远的输出端的声子透射概率振荡加剧, 甚至导致声子透射概率变大. 由于最近的输出端的声子透射概率最大, 从而导致总的透射概率也随着降低. 比较图4(a)—(c)中声子的透射概率发现, 非理想边缘结构对各个通道的散射影响程度是不相同的. 计算结果表明, 非理想边缘结构对II通道声子散射的影响最大, 对IV通道声子散射的影响最小. 因此, 我们可以通过调节非理想边缘结构的粗糙程度来调节各个通道的声子透射概率.

在图5中, 本文研究了约化热导随温度的变化关系. 图5(a₁)和(b₁)的蓝线、红线和紫线分别对应图1(b)结构参数为 $N_{TL} = 18\alpha$, $N_{TR} = 8\alpha$, $N_{BR} = 10\alpha$, $N_{TM} = N_M = 14\alpha$ 和 $N_{TL} = 24\alpha$, $N_{TR} = 12\alpha$, $N_{BR} = 12\alpha$, $N_{TM} = N_M = 8\alpha$ 结构中总的、II通道和III通道的约化热导随温度的变化. 图5(a₂)和(b₂)对应图1(c)结构中结构参数为 $N_{TL} = 18\alpha$, $N_{TR} = N_{BR} = N_{WR} = 6\alpha$, $N_{TM} = 14\alpha$, $N_M = 8\alpha$, $N_N = 6\alpha$ 和 $N_{TL} = 24\alpha$, $N_{TR} = N_{BR} = N_{WR} = 8\alpha$, $N_{TM} = 8\alpha$, $N_M = N_N = 4\alpha$ 的约化热导随温度的变化, 图中蓝线、红线、紫线和黑线分别对应总的、II通道、III通道和IV通道的约化热导随温度的变化. 图5(a₃)和(b₃)中蓝线对应图1(a)中结构参数为 $N_{TL} = N_{TR} = 18\alpha$, $N_M = 14\alpha$ 和 $N_{TL} = N_{TR} = 24\alpha$, $N_M = 8\alpha$ 结构中总的约化热导随温度的变化, 红线和紫线分别对应图1(b)和(c)结构中总的约化热导随温度的变化. 从图5(a₁)—(a₃)和(b₁)—(b₃)中可以看出, 当 $T \rightarrow 0$ 时, 只有截止频率为零的最低的零模被激发, 总热导即零阶模的热导, 不论结构几何参数怎么变化, K/T 接近理想的量子化热导单元 $\pi^2 k_B^2 T / (3h)$. 这说明石墨纳米带散射结构对长波长极限($\omega \rightarrow 0$, $k \rightarrow 0$, k 为波数)的声学振动的散

射极小. 在低温区域随着温度的增加, 更多的声学模被激发, 热导也随着增加. 在图5(a₁)与(a₂)中可以发现, III通道中的热导低于II通道中的热导, IV通道中的热导低于III通道中的热导. 这是由于III通道中声子的透射概率低于II通道中声子的透射概率, 而IV通道中声子的透射概率低于III通道中声子的透射概率的缘故. 比较图5(a₁)和(a₂), 在保持能量输出通道中总的石墨链数不变时, 图1(b)结构中II通道中的热导远高于图1(c)结构中II通道中的热导. 这一现象容易理解: 图1(c)结构中II通道横向宽度比图1(b)结构中II通道横向宽度窄, 因此图1(c)结构对通过II通道中的声子的散射比图1(b)结构更强, 从而导致更低的热导. 在图5(a₃)与(b₃)中我们发现随着石墨带横向宽度由 18α 变为 24α , 声子总的透射概率也随着加强, 从而导致(b₃)中的总的热导低于(a₃)中的总的热导. 这些现象也说明, 总的热导不仅与能量输出端量子通道数有关, 还与能量输出通道的总的石墨链宽有关. 因此, 通过调节能量输出通道数以及输出通道的石墨链宽, 可以在一定程度上调控热导的大小.

图6展示了在保持总的能量输出通道中石墨链宽 24α 不变时, 通过改变三个输出端口的石墨链宽, 比较各输出端口约化热导随温度的变化. 在图6中, 对应结构参数分别为: 1) $N_{TL} = 24\alpha$, $N_{TR} = N_{BR} = N_{WR} = 8\alpha$, $N_{TMB} = 8\alpha$, $N_M = N_N = 4\alpha$; 2) $N_{TL} = 24\alpha$, $N_{TR} = 6\alpha$, $N_{BR} = 8\alpha$, $N_{WR} = 10\alpha$, $N_{TM} = 8\alpha$, $N_M = 6\alpha$, $N_N = 2\alpha$; 3) $N_{TL} = 24\alpha$, $N_{TR} = 8\alpha$, $N_{BR} = 6\alpha$, $N_{WR} = 10\alpha$, $N_{TM} = 8\alpha$, $N_M = N_N = 4\alpha$. 图6(a₁)中蓝线、黑线和红线分别对应1), 2), 3)结构中的II通道的约化热导随温度的变化; 图6(a₂)中蓝线、黑线、红线分别对应1), 2), 3)结构中的III通道的约化热导随温度的变化; 图6(a₃)中蓝线、黑线、和红线分别对应1), 2), 3)结构中的IV通道约化热导随温度的变化; 图6(a₄)中蓝线、黑线和红线对应1), 2)和3)结构中总的约化热导随温度的变化. 从图6(a₁)中可以看出, II通道横向石墨链宽从 8α 变为 6α , 由于II通道横向宽度的变窄对声子的散射增强, 热导明显降低; 当保持II通道横向宽度为 8α 不变而改变III, IV通道的横向宽度时, II通道中的热导几乎没有变化. 本文认为这是由于虽然III, IV通道的横向宽度发生了变化, 但是输出通道总的石墨链宽 24α 不变, II通道相对能量输入

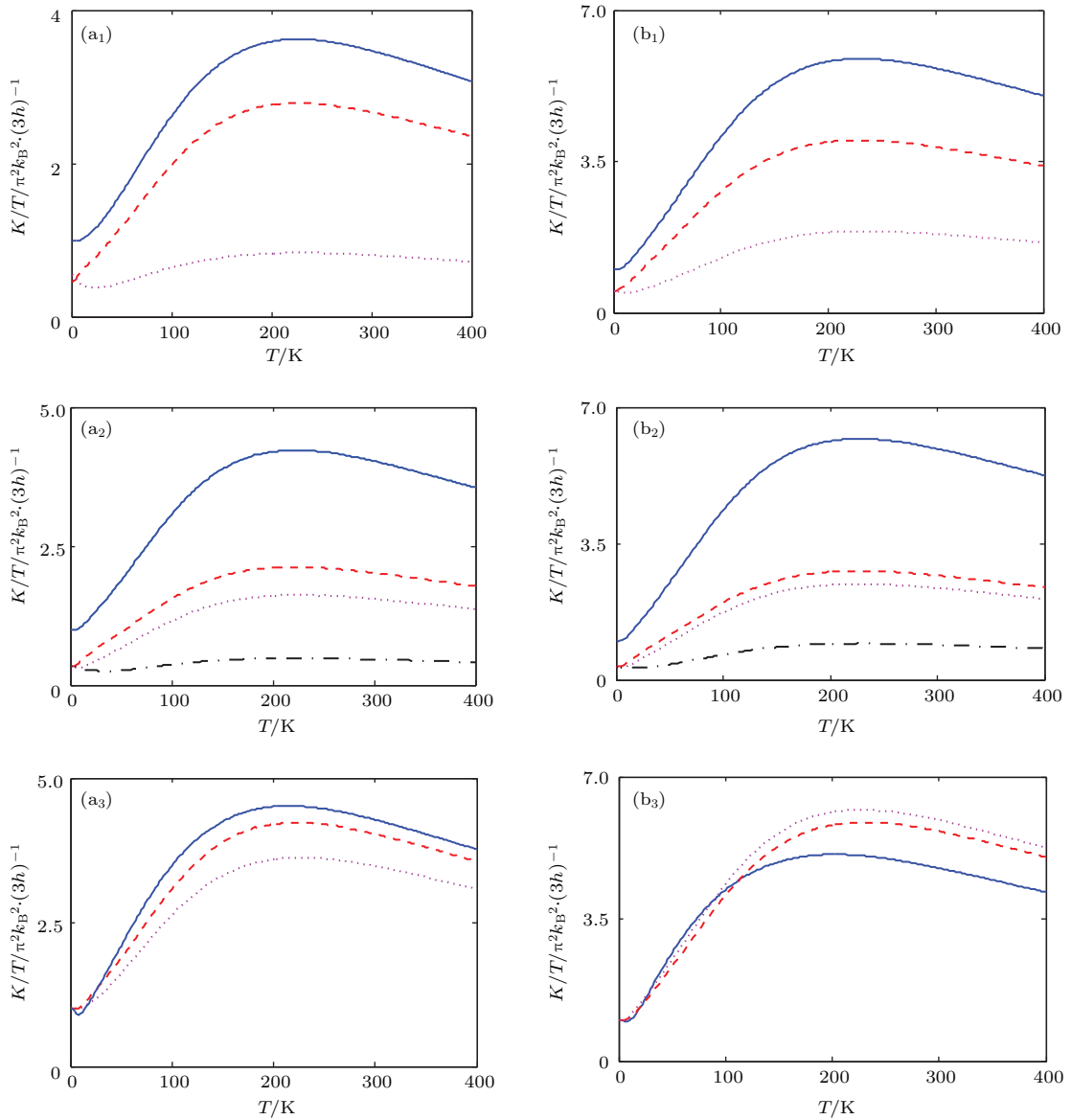


图5 (网刊彩色) (a₁) 和 (b₁) 中的蓝线、红线、紫线分别表示图1(b) 结构的总的、II通道、III通道的约化热导随温度的变化, (a₂) 和 (b₂) 分别表示图1(c) 结构中总的、II通道、III通道和IV通道的约化热导随温度的变化, (a₃) 和 (b₃) 中蓝线、绿线、红线分别表示图1(a), (b) 和 (c) 结构约化热导随温度的变化

Fig. 5. (color online) The black, green, and red curves in (a₁) and (b₁) correspond to the total reduced thermal conductance, the reduced thermal conductances in the II, and III terminals in the structure of Fig. 1(b). (a₂) and (b₂) correspond to the reduced thermal conductances in the structure of Fig. 1(c); the blue, black, green, and red curves correspond to the total reduced thermal conductance, the reduced thermal conductances in the II, III and IV terminals, respectively. The blue, green, and red curves in (a₃) and (b₃) correspond to the total reduced thermal conductance in the structure of Fig. 1(a), (b) and (c), respectively.

通道的相对位置没变, 导致声子从能量输入通道经历散射结构到II通道透射概率没变, 从而导致II通道中热导性质也没变. 而从图6(a₂)中我们发现, 保持III通道横向宽度为8α不变而使II通道横向石墨链宽从8α变为6α, III通道中的热导明显降低, 这是由于III通道中的声子透射概率和II通道、IV通道的横向宽度的几何参数密切相关, 这一点可从图3(a₂)的透射谱得到证实. 当III通道横向

宽度从8α变为6α, III通道横向宽度的变窄也会加强对该通道中声子的散射影响, 导致III通道中热导进一步降低. 这表明III通道的热导与II,III,IV通道的结构参数都密切相关. 从图6(a₃)发现当IV通道横向石墨链宽从8α增加到10α时, 由于IV通道横向宽度的变宽导致结构对声子的散射减弱, IV通道中热导明显增强. 而IV通道横向石墨链宽保持10α不变, 改变II,III通道的结构参数, 由于IV

通道相对能量输入通道的相对位置没变, 导致声子从能量输入通道经历散射结构到IV通道透射概率没变, 从而导致该通道热导性质也没有发生变化. 这一点IV通道与II通道的热导性质是相似的. 从图6(a₄)中的热导曲线表明, 在保持输出端口总的

石墨链宽 24α 不变时, 改变II,III,IV通道的结构参数虽然能改变各个通道的热导性质, 但是总的热导性质几乎没改变. 这些现象表明, 通过调节具有多通道的石墨纳米带各个能量输出通道的结构参数, 可以在一定程度上调控各个能量通道热导大小.

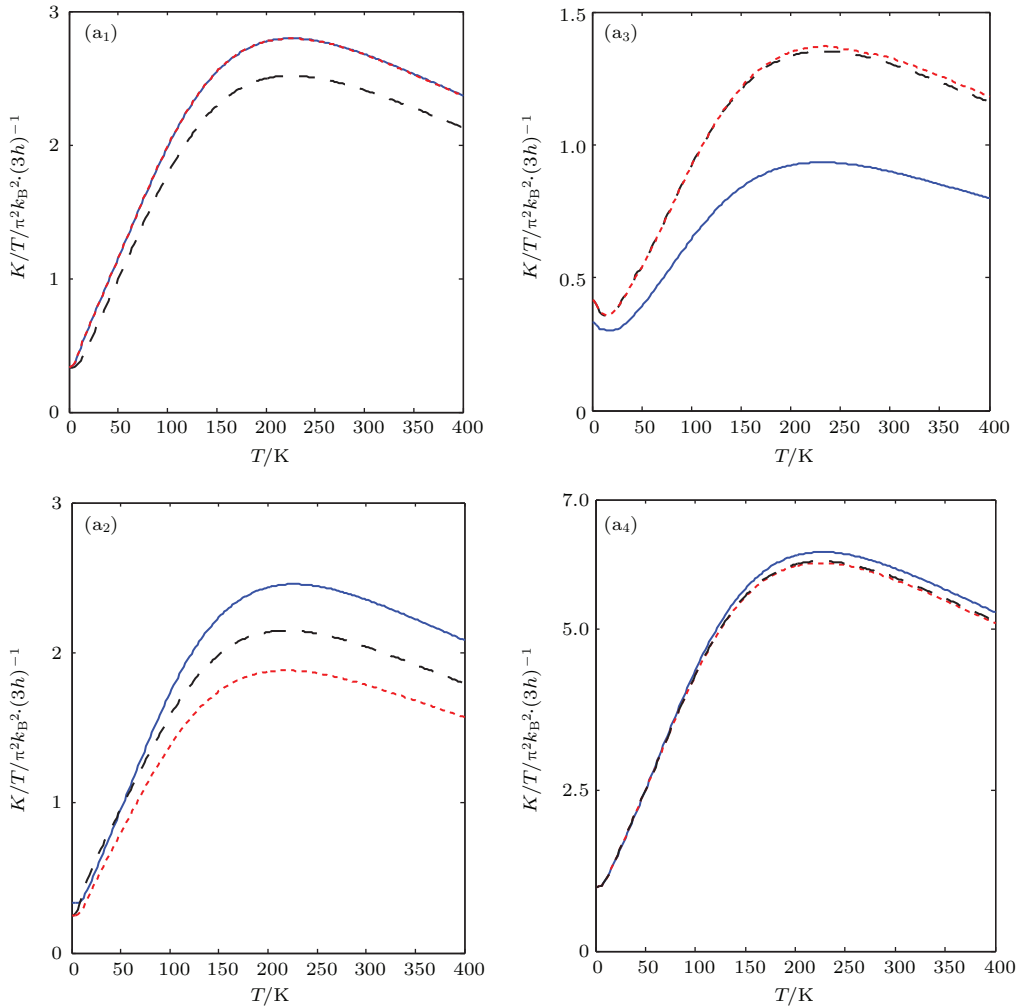


图6 (网刊彩色) (a₁), (a₂), (a₃) 分别表示图1(c)三种不同结构参数中II通道, III通道, IV通道的约化热导随温度的变化; (a₄) 表示图1(c)中三种不同结构参数的总的约化热导随温度的变化.

Fig. 6. (color online) (a₁), (a₂), and (a₃) correspond to the reduced thermal conductances as a function of temperature in the II, III, and IV terminals in the structure of Fig. 1(c) with three different structure parameters; (a₄) corresponds to the reduced thermal conductances as a function of temperature in the structure of Fig. 1(c) with three different structure parameters.

为了对比研究理想边缘结构与非理想边缘结构中的热导性质, 在图7中, 我们研究了图1(c)结构中不同粗糙程度的边缘结构的热输运性质. 图7中的曲线为图1(c)结构中结构参数为 $N_{TL} = 18\alpha$, $N_{TR} = N_{BR} = N_{WR} = 6\alpha$, $N_{TM} = 14\alpha$, $N_M = 8\alpha$, $N_N = 6\alpha$ 的约化热导随温度的变化. 图7(a), (b), (c)和(d)分别对应II, III, IV通道以及总的约化热导随温度的变化. 图中的蓝线、黑线

和红线分别对应理想边缘结构、去掉1—5号原子后的非理想边缘结构以及去掉1—11号原子后的非理想边缘结构的约化热导随温度的变化. 研究结果表明在低温条件下, 各个通道中理想边缘结构与非理想边缘结构具有相同的热导性质, 这是由于低温情形只有长波长声学声子被激发, 粗糙边界对这些声子的散射很少的缘故. 而随着温度的增加, 高频短波长声子也被激发, 这些声子较易遭受粗糙边界的

散射影响. 这种散射影响由于对各个输出通道的声子透射概率影响各不相同, 从而导致与能量输入端最近的输出端以及中间输出端的热导明显降低; 而

导致与能量输入端最远的输出端的热导反而增强. 由于与能量输入端最近的输出端热导最大. 因此, 边界越粗糙, 总的热导也降低越明显.

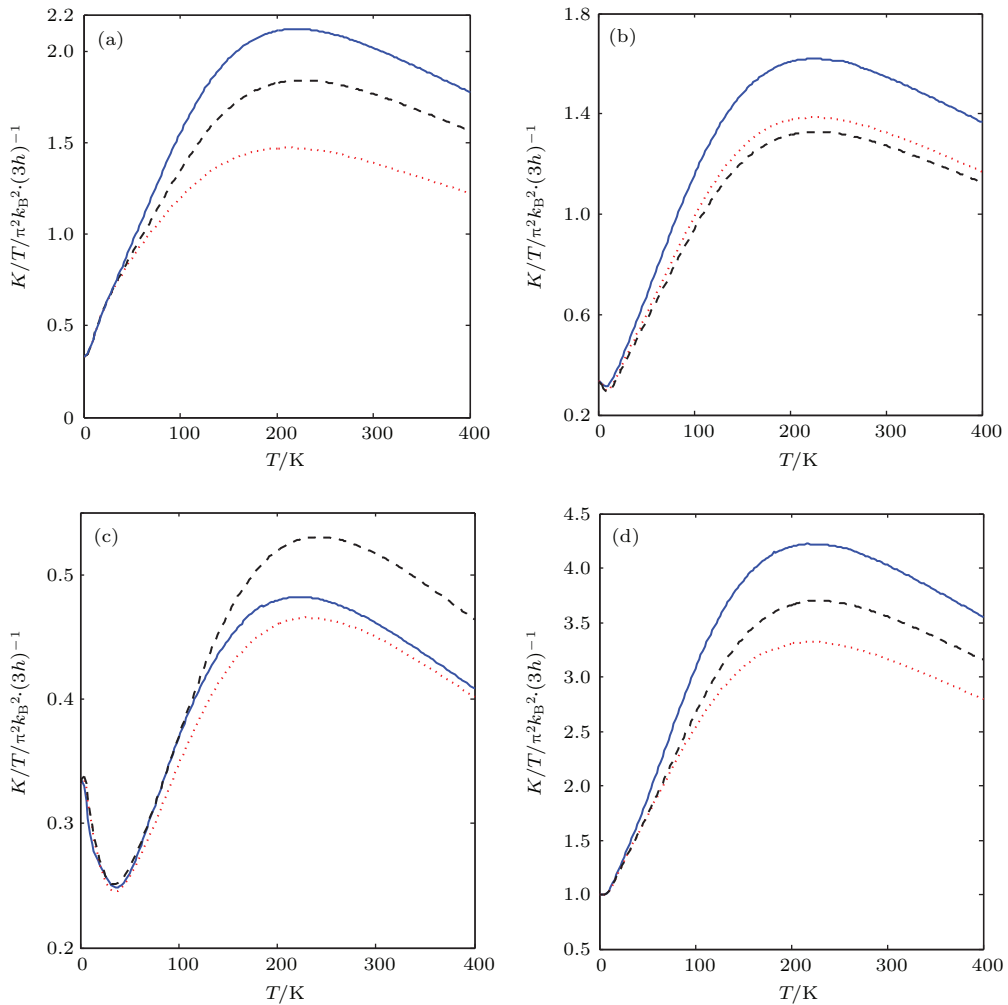


图 7 (网刊彩色) (a), (b), (c), (d) 分别对应图 1 (c) 结构中 II, III, IV 通道以及总的约化热导随温度的变化. 蓝线, 黑线和红线分别表示理想边缘结构, 去掉 1—5 号原子后的非理想边缘结构和去掉 1—11 号原子后的非理想边缘结构的约化热导随温度的变化.

Fig. 7. (color online) (a), (b), (c), and (d) correspond to the reduced thermal conductances as a function of temperature in the II, III, and IV terminals in the structure of Fig. 1 (c). Blue, black, and red curves correspond to the reduced thermal conductances as a function of temperature with ideal edge structure, non-ideal edge structure with 1–5 atoms being extracted, and non-ideal edge structure with 1–11 atoms being extracted, respectively.

4 结 论

本文采用非平衡格林函数方法, 在保持总的能量输出通道中石墨链宽不变时, 研究了具有多并列通道的石墨纳米带中弹性声学声子输运和热导特性, 得到了一些有趣的物理结果: 1) 能量输出通道数的增加能降低每个能量输出通道中的热导; 2) 各能量输出通道的结构参数能有效调节中间能量输

出通道中的声子的透射概率和热导, 而与能量输入通道最近和最远的能量输出通道的声子透射概率和热导仅与各自能量输出通道的结构参数有关, 与其他能量输出通道的结构参数无关; 3) 与能量输入端口最近的端口热导最大, 最远的端口热导最小; 4) 粗糙边缘结构能有效调节各通道的热导; 5) 总的热导与能量输出通道总石墨链数, 能量输出通道数, 以及边缘结构的粗糙程度密切相关.

参考文献

- [1] 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
- [2] Liu Y Y, Zhou W X, Tang L M, Chen K Q 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 203111
- [3] Basko D 2011 *Science* **334** 610
- [4] Prasher R 2010 *Nature* **328** 185
- [5] Yao H F, Xie Y E, Ouyang T, Chen Y P 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 068102 (in Chinese) [姚海峰, 谢月娥, 欧阳滔, 陈元平 2013 物理学报 **62** 068102]
- [6] Sun Q F, Yang P, Guo H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 175901
- [7] Peng X F, Chen K Q 2015 *Sci. Rep.* **5** 16215
- [8] Tan S H, Tang L M, Chen K Q 2014 *Phys. Lett. A* **378** 1952
- [9] Liu Y Y, Zhou W X, Tang L M, Chen K Q 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 263118
- [10] Chen K Q, Li W X, Duan W, Shuai Z, Gu B L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045422
- [11] Zhang G, Zhang H 2011 *Nanoscale* **3** 4604
- [12] Wang J S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 160601
- [13] Wang J S, Wang J, Lu J T 2008 *Eur. Phys. J. B* **62** 381
- [14] Ping Y, Qing F S, Hong G, Bambi H 2007 *Phys. Rev. B* **75** 235319
- [15] Hua Y C, Cao B Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 146501 (in Chinese) [华钰超, 曹炳阳 2015 物理学报 **64** 146501]
- [16] 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]
- [17] Zheng B Y, Dong H L, Chen F F 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 076501 (in Chinese) [郑伯昱, 董慧龙, 陈非凡 2014 物理学报 **63** 076501]
- [18] Yao W J, Cao B Y 2014 *Chin. Sci. Bull.* **27** 3495
- [19] Peng X F, Wang X J, Gong Z Q, Chen K Q 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 233105
- [20] Bai K K, Zhou Y, Zheng H 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 086102
- [21] Ouyang F P, Xu H, Li M J 2008 *Acta Phys. Chim. Sin.* **24** 328 (in Chinese) [欧阳方平, 徐慧, 李明君 2008 物理化学学报 **24** 328]
- [22] Xu Y, Chen X, Gu B L, Duan W 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 233116
- [23] Xu Y, Chen X, Wang J S, Gu B L, Duan W 2010 *Phys. Rev. B* **81** 195425
- [24] Peng X F, Wang X J, Chen L Q, Chen K Q 2012 *Europhys. Lett.* **98** 56001
- [25] Morooka M, Yamamoto T, Watanabe K 2008 *Phys. Rev. B* **77** 033412
- [26] Ouyang T, Chen Y, Xie Y 2010 *Phys. Rev. B* **82** 245403
- [27] Yang N, Zhang G, Li B 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 033107
- [28] Zheng H, Liu H J, Tan X J, Lv H Y, Pan L, Shi J, Tang X F 2012 *Appl. Phys. Lett.* **100** 093104
- [29] Huang W, Wang J S, Liang G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 045410
- [30] Hu J, Wang Y, Vallabhaneni A, Ruan X, Chen Y P 2011 *Phys. Rev. B* **99** 113101
- [31] Ouyang T, Chen Y, Xie Y, Stocks G M, Zhong J 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 233101
- [32] Sevinçli H, Cuniberti G 2010 *Phys. Rev. B* **81** 113401
- [33] Tan S H, Tang L M, Xie Z X, Pan C N, Chen K Q 2013 *Carbon* **65** 181
- [34] Xie Z X, Chen K Q, Duan W H 2011 *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 315302
- [35] Peng X F, Chen K Q 2014 *Carbon* **77** 360
- [36] Ouyang T, Chen Y P, Yang K K, Zhong J X 2009 *Europhys. Lett.* **88** 28002
- [37] Zhu T, Ertekin E 2014 *Phys. Rev. B* **90** 195209
- [38] Chen J, Zhang G, Li B 2013 *Nanoscale* **5** 532
- [39] Chen J, Walther J H, Koumoutsakos P 2014 *Nano Lett.* **14** 819
- [40] Peng X F, Xiong C, Wang X J, Chen L Q, Luo Y F, Li J B 2013 *Computational Materials Science* **77** 440
- [41] Pan C N, Xie Z X, Tang L M, Chen K Q 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 103115
- [42] Xu Y, Li Z, Duan W 2014 *Small* **11** 2182
- [43] Zhu J L, Dai Z S, Hu X 2003 *Phys. Rev. B* **68** 45324
- [44] Xia J B, Li S S 2003 *Phys. Rev. B* **68** 75310

Characteristics of acoustic phonon transport and thermal conductance in multi-terminal graphene junctions*

Qing Qian-Jun¹⁾ Zhou Xin¹⁾ Xie Fang³⁾ Chen Li-Qun^{1)†} Wang Xin-Jun¹⁾
Tan Shi-Hua¹⁾ Peng Xiao-Fang^{1)2)‡}

1) (*Institute of Mathematics and Physics, Central South University of Forestry and Technology, Changsha 410004, China*)

2) (*Hunan Province Higher Education Key Laboratory of Modeling and Monitoring on the Near-Earth Electromagnetic Environments, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410004, China*)

3) (*School of Physics Science and Engineering Technology, Yichun University, Yichun 336000, China*)

(Received 20 November 2015; revised manuscript received 14 January 2016)

Abstract

By using non-equilibrium Green's function method, we investigate the transmission rate of acoustic phonon and thermal conductance through a parallel multi-terminal graphene junctions, the relationship between the thermal-transport property in each terminal and the number of quantum terminals, the relationship between the thermal-transport property in each terminal and the relative position of quantum terminals in quantum structure, and also study the thermal-transport property in each terminal and the rough degree of edge structure. The results show that when the graphene chains (dimer lines) across the ribbon width are fixed, the increase of the number of the parallel multi-terminal graphene junctions can reduce the transmission rate of the phonons and the thermal conductance of each output terminal as well. This is because the increase of the number of the graphene junctions can lead to the decrease of the transverse dimension of the each output terminal, which enlarges the strength of the phonon scattering and results in the reduction of the phonon transmission. Owing to long distance scattering, the transmission rate of the phonons of the furthest distant output terminal is the smallest, and also the thermal conductance of the furthest output terminal is the smallest. On the contrary, the strength of the phonon scattering is the weakest for the closest output terminal. So the transmission rate of the phonons is the biggest, which induces the thermal conductance to be the biggest. The thermal conductance of the middle-output terminal depends sensitively on the structural parameters of each terminal. This is because mainly the relative position between the middle-output terminal and the phonon-input terminal is related closely to the structural parameters of each terminal, which can influence the strength of the phonon scattering and the transmission rate of the phonons. However, the thermal conductances in the top and bottom output terminals are just sensitively dependent on the structural parameters of the respective output terminal. This is because the relative position between the top (or

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11247030), the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 14JJ4054), the Open Research Fund of the Hunan Province Higher Education Key Laboratory of Modeling and Monitoring on the Near-Earth Electromagnetic Environments, Changsha University of Science and Technology, China (Grant No. 20150103), the Talent Introducing Foundation of Central South University of Forestry and Technology, China (Grant No. 104-0160), the Natural Science Foundation of Jiangxi Province, China (Grant No. 20122BAB212009), and the Scientific Research Fund of Jiangxi Provincial Education Department of China (Grant No. GJJ12601).

† Corresponding author. E-mail: ldclqun@163.com

‡ Corresponding author. E-mail: xiaofangpeng11@163.com

bottom) output terminal and the phonon-input terminal is only related to the structural parameters of the respective output terminal. The rough edge structure can reduce obviously the transmission rate of the phonons, and the thermal conductance of the closest output terminal as well. The rough edge structure can modulate slightly the transmission rate of the phonons and the thermal conductance of the other output terminal. The total thermal conductance is related closely to the number of total graphene chains, the number of the multi-terminal graphene junctions, and the rough degree of edge structure. These results shed new light on the understanding of the thermal transport behaviors of multi-terminal junction quantum devices based on graphene-based nanomaterials in practical application.

Keywords: nonequilibrium Green's functions, acoustic phonon transport, thermal conductance, quantum system

PACS: 63.22.Rc, 73.23.Ad, 44.10.+i

DOI: [10.7498/aps.65.086301](https://doi.org/10.7498/aps.65.086301)