

基于分子动力学的石墨炔纳米带空位缺陷的导热特性

兰生 李焜 高新昀

Based on the molecular dynamics characteristic research of heat conduction of graphyne nanoribbons with vacancy defects

Lan Sheng Li Kun Gao Xin-Yun

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), **66**, 136801 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.136801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.136801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I13>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

掺 Fe 高阻 GaN 缓冲层特性及其对 AlGaIn/GaN 高电子迁移率晶体管器件的影响研究

Growths of Fe-doped GaN high-resistivity buffer layers for AlGaIn/GaN high electron mobility transistor devices

物理学报.2016, 65(1): 016802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.016802>

高剂量 As 离子注入对高阻 Si 电学特性的影响

Influence of high dose As ion implantation on electrical properties of high resistivity silicon

物理学报.2014, 63(13): 136803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.136803>

纳米摩擦中极性有机分子超薄膜的结构、对称性及能量机理

Relations between the structure, symmetry and the energy mechanism of the polar-organic molecule ultra-films during the tribology

物理学报.2013, 62(15): 158701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.158701>

掺 He 钛膜中 He 泡的演化研究

Study of the evolution of helium bubbles in helium-containing titanium films

物理学报.2012, 61(22): 226802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.226802>

溅射制备 Ge,Nb 共掺杂窄光学带隙和低电阻率的 TiO<sub>2</sub> 薄膜

Ge and Nb co-doped TiO<sub>2</sub> films with narrow band gap and low resistivity prepared by sputtering

物理学报.2012, 61(20): 206803 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.206803>

# 基于分子动力学的石墨炔纳米带空位缺陷的导热特性\*

兰生<sup>†</sup> 李焜<sup>‡</sup> 高新昀

(福州大学电气工程与自动化学院, 福州 350108)

(2017年4月10日收到; 2017年5月9日收到修改稿)

空位缺陷石墨炔比完整石墨炔更贴近实际材料, 而空位缺陷的多样性可导致更丰富的导热特性, 因此模拟各种空位缺陷对热导率的影响显得尤为重要. 采用非平衡分子动力学方法, 通过在纳米带长度方向上施加周期性边界条件, 基于 AIREBO (adaptive intermolecular reactive empirical bond order) 势函数描述碳-碳原子间的相互作用, 模拟了 300 K 时单层石墨炔纳米带乙炔链上单空位缺陷和双空位缺陷以及苯环上空位缺陷对其热导率的影响, 利用 Fourier 定律计算热导率. 模拟结果表明, 对于几十纳米尺度范围内的石墨炔纳米带热导率, 1) 由于声子的散射集中和声子倒逆过程增强, 与完美无缺陷的石墨炔纳米带相比, 空位缺陷会导致石墨炔纳米带热导率的下降; 2) 由于声子态密度匹配程度高低的不同, 相比于乙炔链上的空位缺陷, 苯环的空位缺陷对石墨炔纳米带热导率影响更大, 乙炔链上空位缺陷数量对石墨炔纳米带热导率的影响明显; 3) 由于尺寸效应问题, 随着长度增加, 石墨炔纳米带热导率会相应增大. 本文的研究可为在一定尺度下进行石墨炔纳米带热导率的调控问题提供参考.

**关键词:** 石墨炔纳米带, 分子动力学, 空位缺陷, 热导率

**PACS:** 68.55.Ln, 87.10.Tf, 44.10.+I, 81.05.U-

**DOI:** 10.7498/aps.66.136801

## 1 引言

碳元素存在多种同素异形体, 有二维石墨烯、一维碳纳米管以及石墨炔等. 2004年, Novoselov 等<sup>[1]</sup>在实验室首次制备得到碳纳米材料——石墨烯, 它在热学性质方面比其他传统热电材料有优势<sup>[2]</sup>. 在石墨烯的热学特性研究方面, Berber 等<sup>[3]</sup>通过分子动力学模拟得到的碳纳米管的热导率为 6600 W/mK, 文献<sup>[4—6]</sup>研究证实石墨烯具有和其他碳材料一样的极高热导率. 各种同素异形体形成了不同的碳结构, 各自有独特的力学、热学以及磁学等性质, 石墨炔就是其中之一. 1987年, Baughman 等<sup>[7]</sup>提出了石墨炔 (graphyne) 的存在, 2011年, Li 等<sup>[8]</sup>在实验室制备出一种结构的石墨炔 (graphdiyne). 石墨炔是一个以 sp, sp<sup>2</sup> 和 sp<sup>3</sup> 三

种杂化态形成的新的碳同素异形体<sup>[9,10]</sup>.

William 等<sup>[11]</sup>研究认为石墨烯纳米带的热导率受到结构尺寸的影响, Zhang 等<sup>[12]</sup>研究表明石墨炔 (graphyne) 的导热系数低于石墨烯, 石墨炔 (graphyne) 导热系数大小还与温度等有关. Ouyang 等<sup>[13]</sup>利用格林函数法研究发现石墨炔纳米带的热导率与其手性有关. 文献<sup>[14—16]</sup>用理论方法研究了石墨炔家族的热导特性. 文献<sup>[17, 18]</sup>成功地预测特定结构的石墨炔热传输性能. Zhan 等<sup>[19]</sup>计算了尺寸为 10.9 nm × 3.8 nm、300 K 时石墨炔纳米带的热导率, 其热导率数值是 (20.98 ± 0.56) W/mK. 石墨炔纳米带的空位缺陷的热学等性质会受到缺陷的影响<sup>[20]</sup>. 因此, 在研究石墨炔纳米带热导率时, 不仅要研究完美石墨炔纳米带的热导率, 也要对存在缺陷的石墨炔纳米带进行

\* 福建省自然科学基金 (批准号: 2015J01194) 和国家自然科学基金 (批准号: 61174117) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: lansheng@fzu.edu.cn

<sup>‡</sup> 通信作者. E-mail: 417955272@qq.com

研究, 这样对于调整石墨炔纳米带的热导率有一定实际意义. 因此, 对含有缺陷的石墨炔纳米带模拟计算研究是必要的, 而空位缺陷是纳米材料比较常见的一种缺陷. 本文就空位缺陷对石墨炔纳米带热导率的影响方面进行了研究.

## 2 分子动力学模拟

### 2.1 模拟方法

本文进行热导率的计算主要使用LAMMPS (large-scale atomic molecular massively parallel simulator) 软件<sup>[21]</sup>. 使用MS (materials studio) 来构建仿真模型. VMD (visual molecular dynamics) 设计用于建模、可视化分析生物系统, 如蛋白质、核酸、脂质双分子层组件等. 本文主要用VMD将MS所建模型生成的PDB文件生成LAMMPS可以读取的格式, 然后导入LAMMPS进行仿真, 如图1所示.

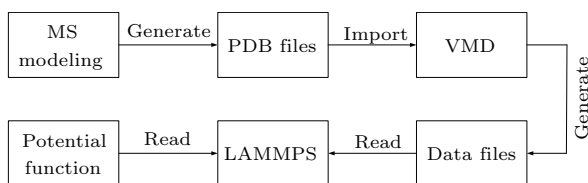


图1 仿真流程图

Fig. 1. The flow chart of the simulation.

### 2.2 仿真模型的构建

首先根据石墨炔的几何结构, 利用MS软件构建石墨炔的单胞模型, 晶胞参数为 $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ ,  $a = 7.13 \text{ \AA}$ ,  $b = 7.13 \text{ \AA}$ ,  $c = 15 \text{ \AA}$ , 如图2所示; 然后, 建成石墨炔超胞, 再沿(010)方向切出不同尺寸的锯齿型石墨炔纳米带, 沿(100)方向切得扶手椅型石墨炔纳米带, 如图3所示.

如图4所示, 通过MS软件构建石墨炔纳米带, 纳米带乙炔链上的碳原子和苯环上的碳原子存在空位缺陷.

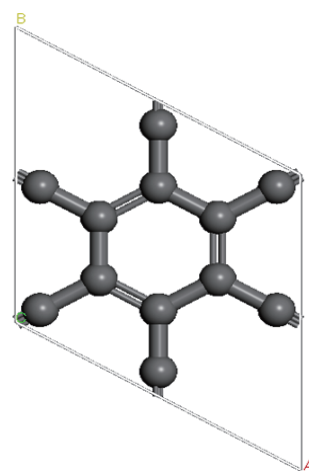


图2 石墨炔结构示意图

Fig. 2. Diagram of graphyne structure.

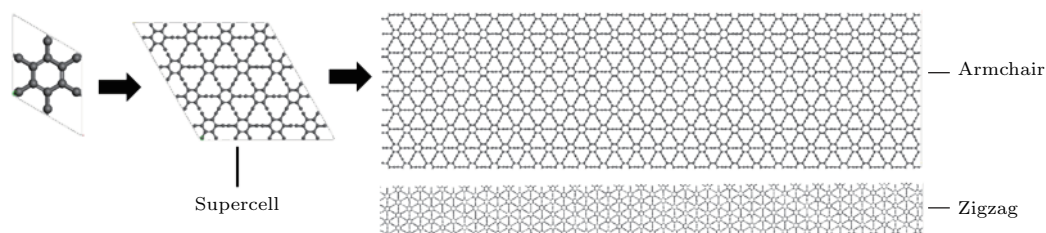


图3 石墨炔纳米带建模过程

Fig. 3. Modeling process of graphyne nanoribbons.

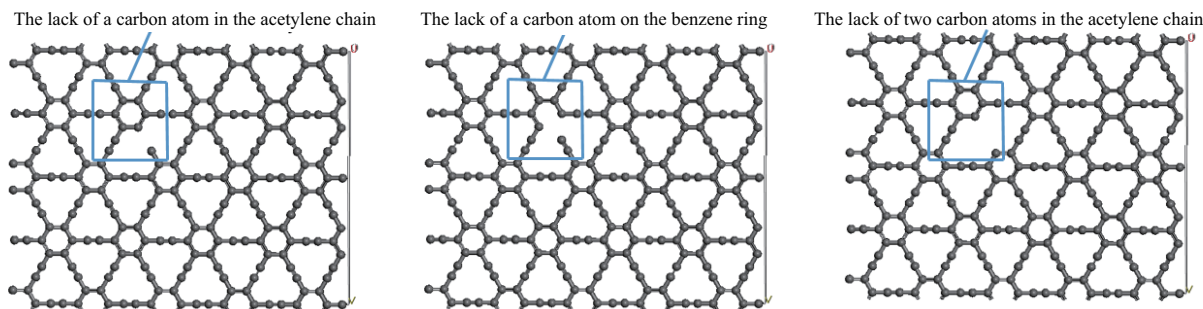


图4 石墨炔纳米带空位缺陷

Fig. 4. Vacancy defects of graphyne nanoribbons.

### 2.3 势函数的选取

在分子动力学模拟中,原子与原子之间的相互作用力由势函数来体现.对于分子动力学模拟,势函数的选取决定着模拟计算的准度和精度.对于碳纳米管、石墨炔、金刚石、石墨、石墨烯等以碳为成分的物质和材料,采用的势函数大多是由Stuart等[22,23]提出的AIREBO (adaptive intermolecular reactive empirical bond order)势函数. AIREBO势函数可以用于纳米材料的力学[24,25]以及热学性能[26-28]方面的研究,本文研究石墨炔纳米带的导热率也采用AIREBO势函数.

AIREBO势函数表达式为

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[ E_{ij}^{\text{REBO}} + E_{ij}^{\text{LJ}} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{\text{TORSION}} \right], \quad (1)$$

其中,  $E_{ij}^{\text{REBO}}$  是REBO势函数,  $E_{ij}^{\text{LJ}}$  是(Lennard-Jones) 12-6对势,  $E_{kijl}^{\text{TORSION}}$  是依赖于二面角的四体扭转项.  $E_{ij}^{\text{REBO}}$ ,  $E_{ij}^{\text{LJ}}$  及  $E_{kijl}^{\text{TORSION}}$  的表达形式分别为:

$$E_{ij}^{\text{REBO}} = \sum_i \sum_{j(>i)} [V^{\text{R}}(r_{ij}) - b_{ij}V^{\text{A}}(r_{ij})], \quad (2)$$

$$E_{ij}^{\text{LJ}} = 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (3)$$

$$E_{kijl}^{\text{TORSION}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} w_{ij}(r_{ij}) \times w_{jk}(r_{jk})w_{kl}(r_{kl}) \times V^{\text{TORSION}} w_{ijkl}, \quad (4)$$

其中,

$$V^{\text{R}}(r) = f^c(r)(1 + Q/rA e^{-\alpha r}), \quad (5)$$

$$V^{\text{A}}(r) = f^c(r) \sum_{n=1,3} B_n e^{-\beta_n r}, \quad (6)$$

$$V^{\text{TORSION}} = \frac{1}{2} \sum_{k=1} V_k [1 - (-1)^k \cos(kw)], \quad (7)$$

其中  $V_k$  由每个独立的分子发生转动的能量和阻碍决定.模拟之前要对模型进行体系能量最小化[27].

### 2.4 非平衡分子动力学方法

目前,材料的导热性能分子动力学模拟方法有Green-Kubo平衡态分子动力学方法[29,30],Muller-Plathe逆向非平衡态分子动力学方法(RNEMD)[31]、声子谱法(phonon spectra method)和正向非平衡态分子动力学方法[32].此外,Rosenblum等[33]利用另外的声子态密度方法计算了材料热学性质.

本文用Muller-Plathe RNEMD.如图5所示的计算模型中,石墨炔纳米带的中间为热区(hot region),两端为冷区(cold region),冷区层的原子和热区层原子的能量交换产生热传导.

某一时刻第  $l$  层的温度  $T_l$  为

$$T_l = \frac{1}{3Nk_B} \sum_i m_i v_i^2, \quad (8)$$

其中  $N$  为层中的原子数,  $m_i$  表示  $i$  原子的质量,  $v_i$  为对应原子的速度,  $k_B = 1.3806505 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$  为 Boltzmann 常量.在一个区域定义温度需要使这个区域的原子数超过30个.

整个体系达到动态稳定后,石墨炔纳米带体系的导热系数为

$$k = -\frac{\frac{1}{2} \sum_{N_{\text{transfer}}} (m v_h^2 - m v_c^2)}{2At \frac{\partial T}{\partial z}}, \quad (9)$$

其中  $N_{\text{transfer}}$  是交换能量的原子数量,  $A$  是石墨炔纳米带传热方向的横截面积,  $m$  是原子质量,  $v_c$  是冷浴中速度最快的原子的速率,  $v_h$  是热浴中速度最慢的原子的速率,  $t$  是模拟时间,  $T$  是温度.计算时取冷热区之间的线性温度梯度拟合值[34].

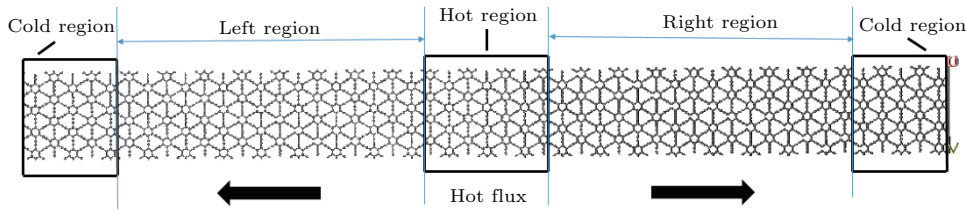


图5 石墨炔纳米带计算模型

Fig. 5. Calculation model of graphyne nanoribbons.



### 3 模拟结果与讨论

在非平衡态分子动力学模拟过程中, 热流方向的温度梯度应呈线性分布, 在模拟结构的中间区域均表现出了一致的线性度, 通过模拟结构的温度曲线获取温度梯度, 用 Fourier 定律计算热导率 [35].

为了加快计算速率和达到计算精度, 使用 Verlet 算法求解运动方程, 积分时间步长为 0.4 fs. 整个模拟分为三个过程: 首先, 在等温等压 (NPT) 系综 [模拟过程中保持  $N$  (原子数量), 压力 ( $P$  为 300 Pa), 温度 ( $T$  为 30 K) 不变的系综] 下模拟  $4 \times 10^5$  step; 再转到正则 (NVT) 系综 (模拟过程中保持  $N$ ,  $V$  (体积),  $T$  温度不变的系综) 下继续运行  $4 \times 10^5$  step; 然后在微正则 (NVE) 系综下运行  $2 \times 10^5$  step, 通过交换冷热原子使系统内部形成一定的温差, 最后通过热流与温度梯度的比值求得纳米带的热导率.

#### 3.1 单空位缺陷对锯齿型石墨炔纳米带热导率的影响

首先在室温 (300 K) 下模拟相同宽度的锯齿型石墨炔纳米带 (zigzag graphyne nanoribbons, ZGYNRs) 热导率与其长度间的关系以及乙炔链上空位缺陷对热导率的影响, 选取纳米带的宽为 2.733 nm, 长分别为 10.5, 21, 30.391, 42 和 63 nm. 根据模拟计算得到宽为 2.733 nm, 长为 63 nm 的 ZGYNRs 沿  $Z$  轴的温度分布, 温度曲线如图 6 所示. 由图 6 计算出平均温度梯度为 0.6544 K/nm, 将该温度梯度与交换的能量 753.612 eV 代入热导率计算公式求出该尺寸下 ZGYNRs 的热导率为 26.3631 W/(m·K). 按照同样的方法求出其他尺寸下的 ZGYNRs 热导率.

由图 7 可以得到: 同一宽度下, 不论是完整石墨炔纳米带还是有空位缺陷石墨炔纳米带, 热导率随着 ZGYNRs 长度的增加而增加. 本文模拟的热导率的大小与尺寸有关, 与文献 [36] 中的计算结果有相同的规律: 当模拟的尺寸小于其分子的平均自由程时会出现 Casimir 限制效应 [26], 使得模拟得到的热导率要比实验值小, 随着长度的继续增加, 热导率会趋于一个稳定值. 声子平均自由程由 3 种过程决定: 声子间的碰撞、边界对声子散射和缺陷对声子的散射 [37]. 在 ZGYNRs 中, 声子的散射受边界的限制, 根据声子气动模型和弹射声子模型, 相同条件下热量的输运主要依靠声子的振动, 当 ZGYNRs 材料长度增大, 尺寸效应 [38,39] 使热导率

也随之增加. 有缺陷的热导率小, 这是因为缺陷会导致晶格振动不能保持连续性, 在导热区域形成一个传输阻塞区, 阻挡了能量载体声子的传播, 同时, 声子在缺陷面上发生反射现象, 使得热导率下降. 由图 7 还可以看出, 有空位缺陷的 ZGYNRs 热导率略低于完美的 ZGYNRs 热导率. 随着 ZGYNRs 纳米带长度的增加, 有缺陷的纳米带与完整的纳米带有交叉点, 说明在达到一定尺寸下, 完美的石墨炔纳米带热导率的尺寸增强效应比乙炔链上空位的显现得慢, 所以存在图 7 中的交叉点.

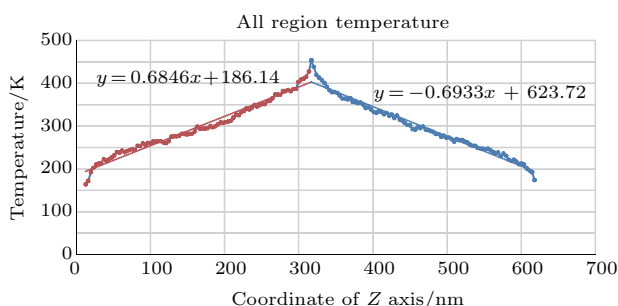


图 6  $Z$  轴的温度分布

Fig. 6. Temperature of  $Z$  axis.

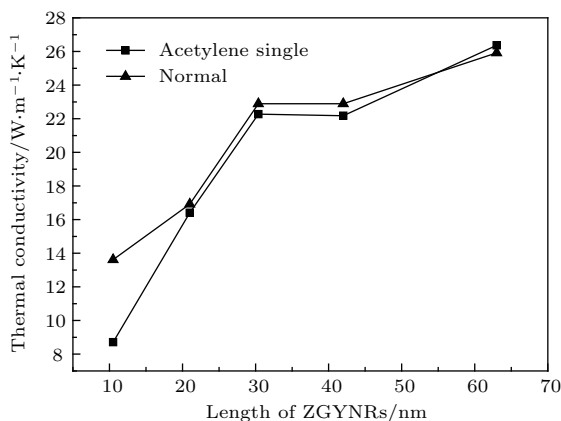


图 7 完美石墨炔和乙炔链单空位缺陷的热导率

Fig. 7. The thermal conductivity of normal graphyne and acetylene chain with single vacancy defect.

模拟了室温 (300 K) 下苯环上空位缺陷对 ZGYNRs 热导率的影响, 计算了宽固定为 2.733 nm, 长分别为 10.5, 21, 30.391, 42 和 63 nm ZGYNRs 的热导率, 计算结果如图 8 所示. 由图 8 可以得到: 乙炔链缺一个碳原子的 ZGYNRs 热导率高于苯环上缺一个碳原子的 ZGYNRs 热导率. 随着纳米带长度的增加, 苯环上的碳原子缺失对石墨炔纳米带热导率的影响要强于乙炔链上碳原子缺失对热导率的影响, 因为乙炔链上的碳原子有更多的低频声子模式和高频声子模式 [40,41], 导致了乙炔链上的碳

原子分担较低的热传输比率, 乙炔链上的碳原子声子态密度匹配程度低, 并且引起Umklapp散射<sup>[42]</sup>, 产生热传导阻碍. 乙炔链上的碳原子对石墨炔纳米带的正常热导作用较小, 苯环上的碳原子对热传导的贡献更大, 因为苯环上的声子态密度占比更大, 所以苯环缺失原子对热导率的影响明显<sup>[43]</sup>, 两种缺陷处对ZGYNRs声子热导率减少的原因都是强散射和声子的集中<sup>[43]</sup>.

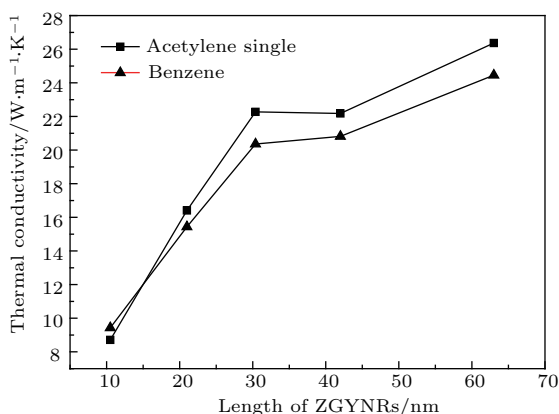


图8 乙炔链单空位和苯环单空位缺陷的石墨炔热导率  
Fig. 8. The graphyne thermal conductivity of acetylene chain with single vacancy and benzene with single vacancy defect.

### 3.2 双空位缺陷对ZGYNRs热导率的影响

在室温(300 K)下模拟双空位缺陷对ZGYNRs热导率的影响, 分别计算了宽固定为2.733 nm, 长10.5, 21, 30.391, 42和63 nm的ZGYNRs的热导率, 计算结果如图9所示. 由图9可以得到: 同一宽度下, 当ZGYNRs长度大于23 nm时, 双空位缺陷ZGYNRs的热导率低于单空位缺陷ZGYNRs的热导率. 在较小的纳米尺度下, 我们认为交叉点的物理涵义是小尺寸时(小于20 nm), 乙炔链上缺少一个原子和两个原子的散射不同, 导致乙炔链上缺少一个原子和两个原子的热导率有差异, 随着尺寸增加, 碳纳米材料的尺寸效应<sup>[38,39]</sup>使热导率增加, 乙炔链上缺少一个原子时尺寸效应引起的热导变化速率更快, 所以两种缺陷的热导率有一个交叉点, 即平衡点.

图10是含有缺陷的ZGYNRs和完美ZGYNRs的热导率, 其中ZGYNRs的宽度为2.733 nm. 从图中可以看出, 随着长度的增加, 各种缺陷情况下ZGYNRs热导率都随之上升, 空位缺陷对ZGYNRs热导率有影响, 并且与空位缺陷数量和位置有

关. ZGYNRs乙炔链上缺少一个原子时尺寸效应引起的热导率上升速率快, 随着纳米带长度的增加, 缺少一个原子与完美的纳米带的热导率有交叉点. 也可以说, 乙炔链上缺少一个原子的声子散射热阻效应与尺寸效应有一个竞争关系, 随着尺寸的增加, 乙炔链上缺少一个原子的声子散射热阻效应逐步减弱, 尺寸效应增强快.

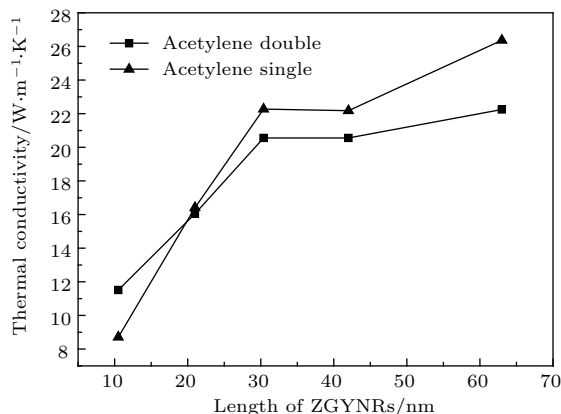


图9 乙炔链单空位和双空位缺陷石墨炔热导率  
Fig. 9. The graphyne thermal conductivity of single vacancy defect and double vacancy defects in acetylene chain.

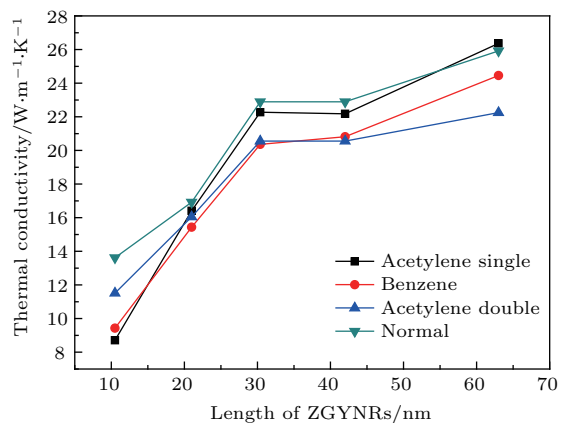


图10 含有缺陷的锯齿型石墨炔纳米带的热导率对比  
Fig. 10. Thermal conductivity of ZGYNRs with different vacancy defects.

### 3.3 空位缺陷对AGYNRs热导率的影响

在室温(300 K)下模拟乙炔链上单空位、苯环上单空位及乙炔链上双空位缺陷对扶手椅型石墨炔纳米带(AGYNRs)热导率的影响, 分别计算了宽固定为2.4699 nm, 长分别为10.5, 21, 30.391, 42, 63和84的AGYNRs的热导率, 计算结果如图11所示. 从图中可以看出, 随着长度的增加, 各种缺陷

情况下AGYNRs的热导率都随之上升,空位缺陷的存在导致AGYNRs的热导率低于完美情况AGYNRs值.乙炔链上单空位缺陷的AGYNRs热导率略高于苯环上空位缺陷的AGYNRs的热导率,单空位缺陷AGYNRs热导率高于双空位AGYNRs热导率.

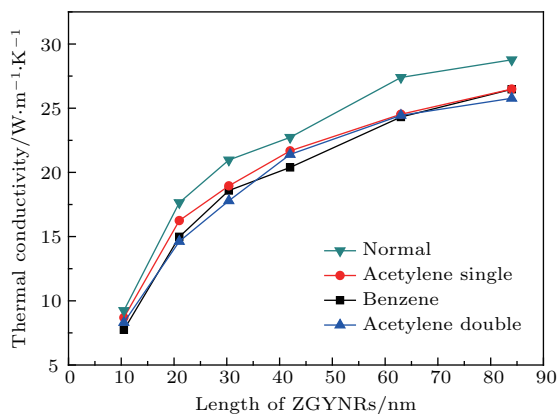


图 11 几种空位缺陷的扶手型石墨炔纳米带热导率  
Fig. 11. Thermal conductivity of AGYNRs with different vacancy defects.

## 4 结 论

本文使用非平衡态分子动力学方法研究了室温下单空位缺陷和双空位缺陷对ZGYNRs和AGYNRs热导率的影响,并与完美石墨炔纳米带热导率进行比较,得出的主要结论如下.

1) 由于尺寸效应的影响,ZGYNRs和AGYNRs型石墨炔纳米带热导率都随着纳米带长度的增加而逐渐增大,完美的石墨炔纳米带热导率与有缺陷的石墨炔纳米带热导率具有同样规律.由于声子传播受到散射的影响,含有空位缺陷的ZGYNRs和AGYNRs的热导率分别比相对应的完美的石墨炔纳米带的热导率低.

2) 在一定的纳米尺度下,ZGYNRs的热导率与空位缺陷位置有关,有空位缺陷的热导率比完美ZGYNRs的热导率低,一个苯环空位缺陷石墨炔纳米带的热导率高于双空位缺陷石墨炔纳米带的热导率,但低于单空位缺陷石墨炔纳米带的热导率;苯环上的碳原子缺失对石墨炔纳米带热导率的影响要大于乙炔链上碳原子缺失的热导率.

3) 声子传播的能量耗散和声子态密度匹配度问题引发的热阻效应会使ZGYNRs的热导率减低,而尺寸效应引起热导率升高,二者存在竞争关系,在乙炔链单原子空位缺陷的ZGYNRs的热导率表

现尤其明显,这为利用乙炔链上的单原子空位调控ZGYNRs的热导率提供了一定思路.

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V 2004 *J. Sci.* **306** 666
- [2] Kim R, Datta S, Lundstrom M S 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 034506
- [3] Berber S, Kwon Y K, Tomanek D 2000 *J. Phys. Rev. Lett.* **84** 4613
- [4] Ghosh S, Calizo I, Teweldebrhan D 2008 *J. Appl. Phys. Lett.* **92** 151911
- [5] Hu J, Ruan X, Chen Y P 2009 *J. Nano Lett.* **9** 2730
- [6] Guo Z, Zhang D, Gong X G 2009 *J. Appl. Phys. Lett.* **95** 16310
- [7] Baughman R H, Eckhardt H, Kertesz M 1987 *J. Chem. Phys.* **87** 6687
- [8] Li J, Porter L, Yip S 1998 *J. Nucl. Mater.* **255** 139
- [9] Zhang H, He X, Zhao M, Zhang M, Zhao L, Feng X 2012 *J. Phys. Chem. C* **116** 16634
- [10] Kou J, Zhou X, Chen Y, Lu H, Wu F, Fan J 2013 *J. Chem. Phys.* **139** 064705
- [11] Willian J E, Liu H, Pawel K 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 203112
- [12] Zhang Y Y, Pei Q X, Wang C M 2012 *Comp. Mater. Sci.* **65** 406
- [13] Ouyang T, Chen Y P, Liu L M, Xie Y, Wei X L, Zhong J X 2012 *Phys. Rev. B* **85** 235436
- [14] Zhang Y Y, Pei Q X, Wang C M 2012 *Mater. Sci.* **65** 406
- [15] Zhan H, Zhang Y, Bell J M, Mai Y W, Gu Y 2014 *Carbon* **77** 416
- [16] Ouyang T, Chen Y 2012 *Phys. Rev. B* **85** 235436
- [17] Liu Y, Hu C, Huang J, Sumpter B G, Qiao R 2015 *J. Chem. Phys.* **142** 244703
- [18] Liu Y, Huang J, Yang B, Sumpter B G, Qiao R 2014 *Carbon* **75** 169
- [19] Zhan H, Zhang Y, Bell J M, Mai Y W, Gu Y 2014 *Carbon* **77** 416
- [20] Wen Z H 2014 *M. S. Dissertation* (Hunan: Xiangtan University) (in Chinese) [温志宏 2014 硕士学位论文 (湖南:湘潭大学)]
- [21] Plimpton S, Thompson A, Shan R, Moore S, Kohlmeyer A <http://lammps.sandia.gov> [2016-8-11]
- [22] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 6472
- [23] Shenderova B, Stuart H, Sinnott N 2002 *J. Phys: Condens. Matter* **14** 783
- [24] Lu Y, Qian J 2016 *Appl. Math. Mech.* **37** 9 (in Chinese) [鲁莹, 钱劲 2016 应用数学和力学 **37** 9]
- [25] Liu H Y, Li Z 2015 *J. Mater. Sci. Engin.* **33** 1 (in Chinese) [刘海洋, 李政 2015 材料科学与工程学报 **33** 1]
- [26] Huang L Y, Han Q 2012 *Sci. Sin.: Phys. Mech. Astron.* **42** 3 (in Chinese) [黄凌燕, 韩强 2012 中国科学: **42** 3]
- [27] Hui Z X, He P F, Dai Y, Wu A H 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 074401 (in Chinese) [惠治鑫, 贺鹏飞, 戴瑛, 吴艾辉 2014 物理学报 **63** 074401]

- [28] Tang J J, Feng Y H, Li W, Cui L, Zhang X X 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 226102 (in Chinese) [唐晶晶, 冯妍卉, 李威, 崔柳, 张欣欣 2013 物理学报 **62** 226102]
- [29] Schelling P K, Phillpot S R, Keblinski P 2002 *Phys. Rev. B* **65** 144306
- [30] Che J, Çağın T, Deng W, Goddard W A III 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 6888
- [31] Müller-Plathe F 1999 *Phys. Rev. E* **59** 4894
- [32] Berber S, Kwon Y K, Tománek D 2000 *Phys Rev Lett.* **84** 4613
- [33] Rosenblum I, Adler J, Brandon S 1998 *Comp. Mater. Sci.* **12** 9
- [34] Yang P, Wang X L, Li P, Wang H, Zhang L Q, Xie F W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 76501 (in Chinese) [杨平, 王晓亮, 李培, 王欢, 张立强, 谢方伟 2012 物理学报 **61** 76501]
- [35] Wei Z Y, Bi K D, Chen Y F 2010 *J. 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]
- [36] Yao C J, Wang X M, Li Y Y, Wang J 2013 *J. Yangzhou University (Natural Science Edition)* **16** 22 (in Chinese) [姚承军, 汪晓明, 李莹莹, 王健 2013 扬州大学学报 **16** 22]
- [37] Li W, Feng Y H, Zhang X X, Chen Y 2012 *CIESC Journal* **63** 75 (in Chinese) [李威, 冯妍卉, 张欣欣, 陈阳 2012 化工学报 **63** 75]
- [38] Guo Z X, Zhang D E, Gong X G 2009 *J. Appl. Phys. Lett.* **95** 163103
- [39] Alaghemandl M, Algaer E, Bohm M C, Müller-Plathe F 2009 *J. Nanotechnology* **20** 115704
- [40] Sho H, Takuma H, Takuma S, James E, Junichiro S 2013 *International J. Heat and Mass Transfer* **67** 1024
- [41] Ragesh C, Sarith P S 2013 *Solid State Communications* **73** 1
- [42] Rajabpour A, Allaei S M V, Kowsary F 2011 *J. Appl. Phys. Lett.* **99** 051917
- [43] Zhou W X, Chen K Q 2015 *Carbon* **85** 24



# Based on the molecular dynamics characteristic research of heat conduction of graphyne nanoribbons with vacancy defects\*

Lan Sheng<sup>†</sup> Li Kun<sup>‡</sup> Gao Xin-Yun

(School of Electric Engineering and Automation, Fuzhou University, Fuzhou 350108, China)

( Received 10 April 2017; revised manuscript received 9 May 2017 )

## Abstract

As a kind of nano-material, graphyne nanoribbon has some physical properties and its properties should be studied for its better usage. In the process of preparing graphyne nanoribbons, it is possible that vacancy defects exist in the lattice structure, which will affect the physical properties of the graphyne nanoribbons. The flotation of graphyne is closer to the actual situation in engineering than the complete graphyne nanoribbons, and the diversity of vacancy defects can lead to various thermal conductivities, so it is very important to simulate the effects of various vacancy defects on thermal conductivity. In order to better predict and control heat transfer characteristics of graphyne nanoribbons, this paper focuses on the effects of vacancy defects on the heat transfer characteristics of graphyne nanoribbons. According to the different cutting directions of graphyne nanoribbons, two different types of graphyne nanoribbons are obtained, i.e., armchair type and zigzag type. We compare the effects of vacancy defects on the thermal conductivity of two different chiral graphynes nanoribbons to improve the persuasiveness of the conclusion. In this paper, non-equilibrium molecular dynamics method is adopted, by applying periodic boundary conditions in the length direction of the nanoribbons, the interaction between the carbon-carbon atoms is described based on a potential function of adaptive intermolecular reactive empirical bond order (AIREBO). At 300 K, the effects of single vacancy defect in the acetylene chain, single vacancy defect in the benzene ring or double vacancy defects in the acetylene chain on the thermal conductivities of single-layer graphyne nanoribbons are simulated. Fourier's law is used to calculate the thermal conductivities of graphyne nanoribbons. The simulation results show that for the thermal conductivity of graphyne nanoribbons in a few-dozen nanometer range: 1) as a result of the phonon scattering and enhanced phonon Umklapp process, the graphyne nanoribbons with vacancy defects will cause the thermal conductivity to decrease and becomes lower than that of the complete graphyne nanoribbons; 2) due to the difference in phonon density-of-states matching degree, the vacancy defect in the benzene ring of graphyne nanoribbons has a greater effect on the thermal conductivity than that of vacancy defect in the acetylene chain of graphyne nanoribbons, the vacancy defects have a strong influence on the thermal conductivity of in the acetylene chain of graphyne nanoribbons; 3) because of the influence of size effect, the thermal conductivity of graphyne nanoribbon increases with length increasing. In this paper, the research of the thermal conductivity of graphyne nanoribbon provides the reference for controlling their thermal conductivity on a certain scale.

**Keywords:** graphyne nanoribbons, molecular dynamics, vacancy defects, thermal conductivity

**PACS:** 68.55.Ln, 87.10.Tf, 44.10.+I, 81.05.U-

**DOI:** 10.7498/aps.66.136801

\* Project supported by the Science Foundation of the Fujian Province, China (Grant No. 2015J01194) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61174117).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: lansheng@fzu.edu.cn

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: 417955272@qq.com