

嵌入线型缺陷的石墨纳米带的热输运性质*

姚海峰 谢月娥[†] 欧阳滔 陈元平

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

(2012年10月10日收到; 2012年11月14日收到修改稿)

采用非平衡格林函数方法研究了嵌入有限长、半无限长、无限长线型缺陷的锯齿型石墨纳米带 (ZGNR) 的热输运性质. 结果表明, 缺陷类型和缺陷长度对 ZGNR 的热导有重要影响. 当嵌入的线型缺陷长度相同时, 包含 $t5t7$ 线型缺陷的石墨纳米带比包含 Stone-Wales 线型缺陷的条带热导低. 对于嵌入有限长、同种缺陷的 ZGNR, 其热导随线型缺陷的长度增加而降低, 但是当线型缺陷很长时, 其热导对缺陷长度的变化不再敏感. 通过比较嵌入有限长、半无限长、无限长线型缺陷的 ZGNR, 我们发现嵌入无限长缺陷的条带比嵌入半无限长缺陷的条带热导高, 而后者比嵌入有限长线型缺陷的条带热导高. 这主要是因为在这几种结构中声子传输方向的散射界面数不同所导致的. 散射界面越多, 对应的热导就越低. 通过分析透射曲线和声子局域态密度图, 解释了这些热输运现象. 这些研究结果表明线型缺陷能够有效地调控石墨纳米带的热输运性质.

关键词: 石墨烯, 线型缺陷, 热导

PACS: 81.05.ue, 61.72.LK, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.62.068102

1 引言

石墨烯优良的电学性质^[1-4], 被认为是一种构建纳米电子器件^[5-8]的理想材料. 但是石墨烯的零带隙限制了其在电子学领域的应用. 因此, 人们提出了很多打开带隙^[9-14]的方法, 引入缺陷是其中的一种. 实验上通过高能电子和离子照射^[15,16]石墨烯产生各种缺陷, 如结构较为稳定的 Stone-Wales (SW) 缺陷 (一个 C—C 键旋转 90° , 最终形成 2 个五边形与 2 个七边形来替代原来的 4 个六边形) 和 $t5t7$ 缺陷 (双空位缺陷类 SW 的转变, 形成了 3 个五边形与 3 个七边形来替代原来的 6 个六边形)^[17-19]. 研究发现, 有限浓度的 SW 缺陷^[20]石墨烯的电子带隙可以被打开. SW 缺陷从锯齿型石墨纳米带的边缘移动到中心时, 它将从金属过渡到半金属再过渡到半导体^[21]. 更为有趣的是, 人们发现可以通过实验方法把石墨烯中的点缺陷连续排列成线型缺陷^[22,23]. Botell-Mendez 等^[24]利用局域态密度和广义共轭梯度方法研究了 $t5t7$ 线型缺陷锯齿型石墨纳米带中的电导, 发现含有线型缺陷

$t5t7$ 的石墨纳米带是一种较强金属性材料, 在费米能附近其电导比相同宽度的完美锯齿型石墨纳米带显著提高了. 这就说明线型缺陷在“纯碳”的纳米电子器件设计中有着重要的应用价值^[25-27].

石墨烯不但有着优良的电学性质, 也具有非常突出的热学性质. 石墨烯是目前已知的热导最高的材料, 室温下测得悬浮石墨烯的热导高达 $3000\text{--}5000\text{ W/mk}$ ^[28,29]. 类似于缺陷对石墨纳米带电学性质的调控, 缺陷也会对其热学性质产生重要影响. Hu 等^[30,31]预测了缺陷的结构将很大程度上减小石墨纳米带的热导. 用非平衡格林函数方法, Xie 等^[32]研究了含有 SW 缺陷和单空位 (DV) 缺陷锯齿型石墨纳米带的热输运性质, 发现缺陷类型和边缘效应能够很好地调控热输运. Hao 等^[33]发现石墨纳米带的热导对 SW 缺陷和单空位 (DV) 缺陷的浓度非常敏感, 随浓度增大热导成指数递减. Morooka 等^[34]研究了含有 SW 缺陷锯齿型石墨纳米带的热输运, 结果表明在低能区热流是沿着石墨纳米带边缘流动的; 在高能区热流是沿着 SW 缺陷中的七边形循环流动的. 到目前为止, 前面的研究

* 国家自然科学基金 (批准号: 11074213, 51176161, 51006086) 和湖南省自然科学基金省市联合项目 (批准号: 10JJ9001) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: xieyech@xtu.edu.cn

只讨论了单个点缺陷或者有限浓度无序点缺陷对石墨纳米带的热运输的影响, 而由多个点缺陷规则排列而成的线型缺陷对石墨纳米带热运输的影响还不是很清楚.

本文运用非平衡格林函数方法, 研究了嵌入线型缺陷的锯齿型石墨纳米带 (ZGNR) 的热运输性质. 结果表明, 当嵌入有限长线型缺陷时, ZGNR 的热导依赖于线型缺陷的类型和长度. 包含 t5t7 线型缺陷的纳米条带比包含 SW 线型缺陷的条带热导低; 对于包含同种缺陷的 ZGNR, 线型缺陷的长度越长其热导越低, 但是当长度很长时热导对长度的变化不再敏感. 我们利用透射图谱和局域态密度图解释了这些现象. 然后, 比较了在 ZGNR 中嵌入有限长缺陷、半无限长缺陷和无限长缺陷时的热运输情况, 发现嵌入无限长线型缺陷的条带其热导最高, 而嵌入有限长线型缺陷的条带热导最低. 主要是因为这些结构中在声子传输方向散射界面数不

同. 最后讨论了石墨纳米带的宽度对包含线型缺陷的纳米带热导的影响. 研究表明线型缺陷可以对锯齿型石墨纳米带的热导进行有效的调控.

2 模型与方法

我们考虑的模型是中心嵌入线型缺陷的 ZGNR, 如图 1 所示. 图 1(a), (b) 分别是嵌入有限长 SW 缺陷和有限长 t5t7 缺陷的 ZGNR 模型图 (线型缺陷的长度为 L (L'), 缺陷个数为 M (M'), ZGNR 的宽度为 N). 线型缺陷的宽度和四条锯齿碳链的宽度是相同的. 图 1(c), (d) 分别是嵌入半无限长 SW 缺陷和半无限长 t5t7 缺陷的 ZGNR 模型图. 图 1(e), (f) 分别是嵌入无限长 SW 缺陷和无限长 t5t7 缺陷的 ZGNR 模型图 (嵌入无限长缺陷的 ZGNR 的宽度为 N' , n' 是线型缺陷的宽度, n 是线型缺陷上(下)边界到 ZGNR 上(下)边界的宽度).

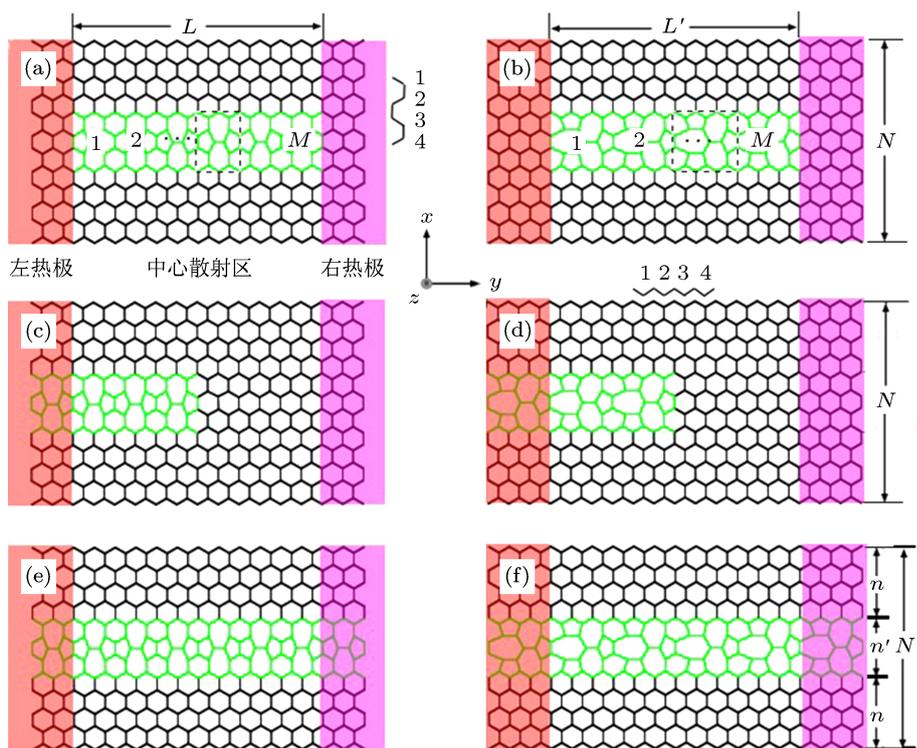


图 1 (a), (b) 分别是嵌入有限长 SW 缺陷、有限长 t5t7 缺陷的 ZGNR 模型图 (线型缺陷长度为 L (L'), 中心散射区缺陷单元个数为 M (M'), ZGNR 宽度为 N , 图中虚线方框分别为 SW 缺陷单元 (长度为 2), t5t7 缺陷单元 (长度为 3)); (c), (d) 分别是嵌入半无限长 SW 缺陷、半无限长 t5t7 缺陷的 ZGNR 模型图 (线型缺陷的宽度等于 $n' = 4$); (e), (f) 分别是嵌入无限长 SW 缺陷、无限长 t5t7 缺陷的 ZGNR 模型图 (ZGNR 的宽度 $N' = 2n + n' = N$)

研究的这些体系都可以分成三个区域: 两个左右热极 (left lead 和 right lead) 与一个中心散射区 (center region). ZGNR 中存在三类振动模式: 两个平面内的振动模式 (在 x - y 平面) 和一个平面外的振动模式 (z 方向, 垂直于 x - y 平面) [35,36], 由于垂直的

振动模式与平面内的振动模式之间没有耦合, 其哈密顿量是可以分离的, 且热运输主要是由 z 方向的振动模式引起的, 其振动模式算出的输运性质基本上能表达出三个振动模式的热运输信息, 所以只考虑了垂直的振动模式对热运输的影响. 紧束缚哈密

顿量可以表示为

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

其中 $H_{\alpha} = \frac{1}{2}(\dot{u}^{\alpha})^T \dot{u}^{\alpha} + \frac{1}{2}(u^{\alpha})^T K^{\alpha} u^{\alpha}$ ($\alpha = L, C, R$) 表示左热极, 中心区域和右热极的哈密顿量, u^{α} 代表位移矢量, \dot{u}^{α} 代表动量算符. K^{α} 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 $0.265 \text{ eV}/\text{\AA}^2$ [37]. $V^{LC} = (V^{CL})^T$ 或 $V^{RC} = (V^{CR})^T$ 是左边或右边相对于中心区域的耦合矩阵.

基于哈密顿量, 依据非平衡格林函数方法 [38,39], 体系的延迟格林函数可以表示为

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

ω 是声子的振动频率, I 是单位矩阵. $\sum_{\beta}^r(\omega) = V^{C\beta} g_{\beta}^r V^{\beta C}$ ($\beta = L, R$) 表示延迟自能项, g_{β}^r 是表面格林函数, 它能被计算通过递归格林函数方法 [40]. 体系的格林函数被获得后, 通过卡路里公式就可以得到透射系数 $T[\omega]$:

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

其中 $G^a(\omega) = [G^r(\omega)]^{\dagger}$ 是中心散射区超前格林函数和 $\Gamma_{\beta} = i\left(\sum_{\beta}^r - \sum_{\beta}^a\right)$ 表示左热极或右热极和中心区的相互作用项.

通过朗道公式, 体系的热导可以被求得

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

其中 \hbar 是普朗克常量, $P(\omega, T)$ 表示不同温度下不同频率下的声子对输运贡献的权重因子, $P(\omega, T) = \omega \partial f(\omega, T) / \partial T$, 这里的 T 表示温度, $\partial f(\omega, T) = \{\exp[\hbar\omega/(KT)] - 1\}^{-1}$ 是波色 - 爱因斯坦分布函数.

通过非平衡格林函数方法 (NEGF), 在中心散射区原子的声子局域态密度 (LDOS) 可以定义为

$$\text{LDOS}(\omega) = -\text{Im}[G^r(\omega)]/\pi. \quad (5)$$

声子的局域态密度可以给出体系中的声子在实空间的分布, 因此能够提供更加详细的热输运信息.

3 结果和讨论

在图 2(a) 中, 我们给出了内部嵌入有限长缺陷的 ZGNR 的热导随温度的变化关系, 其中, 连接圆的点线、虚线、实线分别是嵌入 1, 5, 15 个 SW 缺陷的纳米带的热导曲线. 而连接方框的点线、虚线、实线分别是嵌入 1, 5, 15 个 t5t7 缺陷的纳米带的热导曲线. 作为对比, 我们也给出了相同宽度完

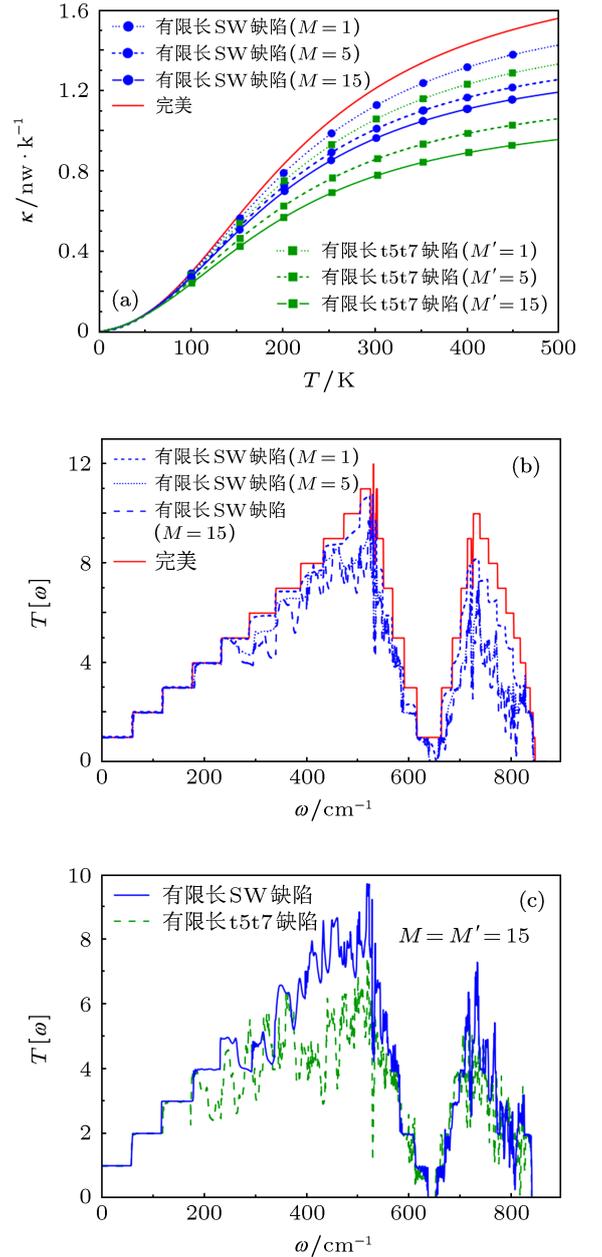


图 2 (a) 嵌入 M (M') 个 SW (t5t7) 缺陷的 ZGNR 在热导与温度的关系 (点线、虚线、实线连接的圆 (方框) 分别表示代表 M (M') 等于 1, 5, 15 个缺陷的 ZGNR 的热导曲线, 图中的实线为完美 ZGNR 的热导曲线), 宽度 $N = 12$; (b) 对应于 (a) 嵌入 M 等于 1, 5, 15 个 SW 缺陷的 ZGNR 和完美 ZGNR 的透射图谱; (c) 对应于 (a) 嵌入不同缺陷的 ZGNR 在缺陷个数相等 ($M = M' = 15$) 时的透射图

美 ZGNR 的热导曲线. 从图中可以看出, 在低温区 (0—50 K), 包含缺陷的 ZGNR 的热导和完美 ZGNR 的热导是重合的. 随着温度的升高, 它们的热导都在逐渐增大且它们的热导差也在变大. 含缺陷的 ZGNR 的热导都小于完美 ZGNR 的热导. 对于包含同种缺陷的 ZGNR, 缺陷越多 (M 或者 M' 越大), 相比于完美 ZGNR 的热导就越低. 同时, 我们还可以看到, 当嵌入的 SW 缺陷和 t5t7 缺陷数量相同 ($M = M'$) 时, 包含 t5t7 缺陷的 ZGNR 的热导比包含 SW 缺陷的热导小. 因此, 嵌入有限长缺陷的 ZGNR 的热导对缺陷数量和缺陷类型都非常敏感.

为了比较嵌入不同缺陷数量的 ZGNR 的热输运情况, 图 2(b) 给出了 SW 缺陷个数 M 分别为 1, 5, 15 的 ZGNR 的声子透射谱, 实线是作为对比的完美 ZGNR 的透射图. 从图中可以看到, 在低频区 (0—100 cm^{-1}), 包含缺陷的 ZGNR 的透射曲线与完美 ZGNR 的透射曲线是重合的, 呈现出完整的台阶状, 说明低频声子几乎没有被缺陷散射, 因此在低温区包含缺陷的 ZGNR 和完美 ZGNR 的热导是重合的. 在高频区域, 完美 ZGNR 的透射谱仍然呈现台阶状, 而包含缺陷的 ZGNR 则由于缺陷对声子的散射透射曲线呈现出很多的振荡. 缺陷数量越多, 声子透射率越低, 振荡越多, 对声子的散射越强, 因此相应的热导也就越低. 在图 2(c) 中比较了嵌入两种不同类型缺陷的 ZGNR 在缺陷数相同时的声子透射情况. 从图中可以明显看到嵌入 t5t7 缺陷的 ZGNR 的声子透射系数要低于嵌入 SW 缺陷的透射系数, 特别是频率范围 (200—500 cm^{-1}) 内. 这就说明缺陷数量相同时, t5t7 缺陷比 SW 缺陷对频率范围 (200—500 cm^{-1}) 内声子有更强的散射作用, 因而嵌入 t5t7 缺陷的 ZGNR 比嵌入 SW 缺陷的条带的热导要低.

为了更详细地讨论缺陷数量与缺陷类型对石墨纳米带热导的影响, 图 3(a) 给出了室温 (300 K) 下, 嵌入缺陷的 ZGNR 的热导比 k_d/k_p (k_d, k_p 分别是嵌入缺陷和完美 ZGNR 的热导) 随缺陷数 $M (M')$ 的变化关系. 可以看到, 当嵌入的缺陷数 $M (M')$ 较少 ($M (M') < 10$) 时, ZGNR 的热导比随缺陷数的增加快速减小, t5t7 缺陷的条带的比 SW 缺陷的条带的热导比减小得更快; 当嵌入的缺陷数量较多 ($M (M') > 10$) 即缺陷连成的线型缺陷较长时, 缺陷数量的变化对热导比的影响逐渐减弱, 曲线变得比较平缓. 最终嵌入 SW 缺陷的 ZGNR 的热导比将趋近于 76.8%, 即嵌入有限长 SW 线型缺陷的条带其热

导是完美条带的 76.8%, 而嵌入有限长 t5t7 线型缺陷的条带其热导是完美条带的 62.3%. 两种不同缺陷条带的热导比相差 14.5%.

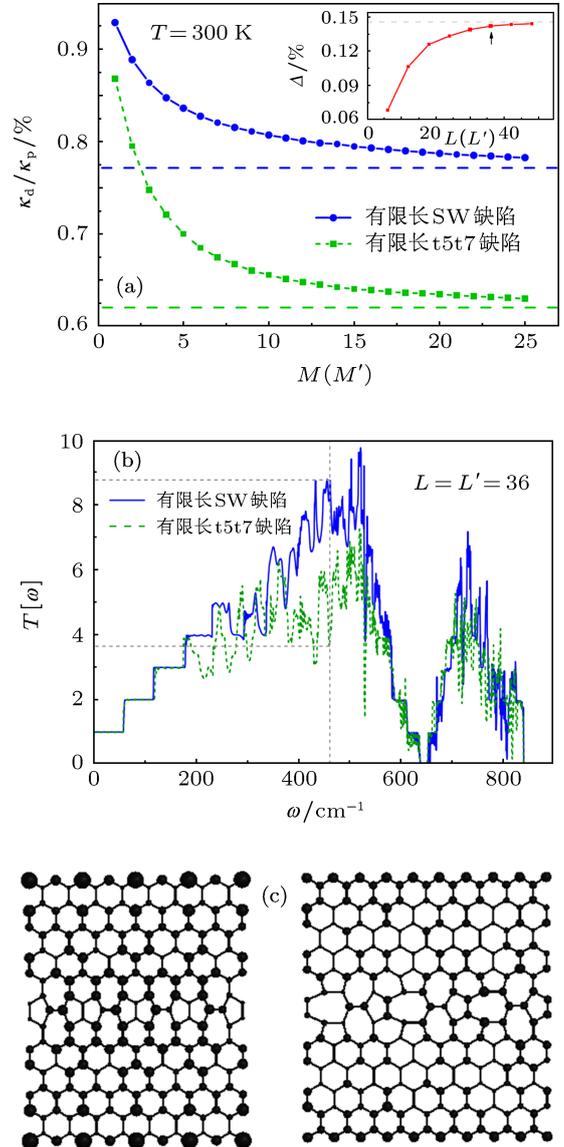


图 3 (a) 嵌入有限长缺陷的 ZGNR 的热导比 k_d/k_p 与缺陷个数 $M (M')$ 的关系图 (带缺陷 ZGNR 的热导为 k_d , 完美 ZGNR 的热导为 k_p), 温度 $T = 300 \text{ K}$, 宽度 $N = 12$; (a) 插图是嵌入两种不同缺陷的 ZGNR 在缺陷长度相等时的热导比差 (Δ) 与缺陷长度 $L (L')$ 的关系; (b) 是嵌入两种不同缺陷的 ZGNR 在线型缺陷长度相同时 ($L = L' = 36$) 的透射图谱; (c) 对应于 (b) 做出嵌入两种不同缺陷的 ZGNR 的中心一段区域的局域态密度 LDOS, 左边的是中心散射区的 SW 缺陷从第 8 个到第 11 个形成的缺陷石墨纳米带的 LDOS, 右边的是 t5t7 缺陷从第 5 个到第 8 个形成的缺陷石墨纳米带的 LDOS (频率 $\omega = 463.1 \text{ cm}^{-1}$)

由于 SW 缺陷比 t5t7 缺陷单胞的长度要短 (见图 1 的插图), 因此当缺陷数量相同时, 由多个 SW 缺陷连接而成的线型缺陷和 t5t7 线型缺陷的长度也不相同. 为了更好地反映两种缺陷对 ZGNR 热导的影响, 图 3(a) 的插图中给出了当嵌入的

两种线型缺陷长度相同 ($L = L'$) 时, 热导比差 Δ ($\Delta = (k_{sw} - k_{t5t7})/k_p$, k_{sw} , k_{t5t7} 分别是嵌入 SW, t5t7 缺陷的条带的热导, k_p 是完美 ZGNR 的热导) 随线型缺陷长度 L (L') 的变化关系. 从图中可以看到, Δ 总是大于 0, 说明当线型缺陷长度相同时嵌入 SW 缺陷的条带其热导比总是要大于嵌入 t5t7 缺陷的条带. 而且随着线型缺陷长度的增加, 由缺陷类型引起的热导比差 (Δ) 变得越来越大, 最后也达到了 14.5%. 图 3(b) 给出了嵌入两种不同线型缺陷的 ZGNR 在缺陷长度 ($L = L' = 36$) 相同时的透射图. 与图 2(c) 比较, 发现两种缺陷在数量相同和长度相同时对声子透射的影响非常相似——t5t7 缺陷对声子的散射特别是对频率在 (200—500 cm^{-1}) 范围内声子的散射要比 SW 缺陷要强. 这就说明, 两种线型缺陷对热导的影响主要是由两种缺陷的结构差异导致的, 而不是由缺陷长度决定的. 为了说明这一点, 图 3(c) 在频率 $\omega = 463.1 \text{ cm}^{-1}$, 对应图 3(b) 给出了嵌入两种类型缺陷的 ZGNR 在其中心一段区域的声子 LDOS 图. 因为无论是哪一段的区域, 它们对应实空间原子位置出现的声子态密度构成平行于运输方向的通道数是不变的. 图 3(c) 左边的是中心散射区的 SW 缺陷从第 8 个到第 11 个形成的缺陷石墨纳米带的 LDOS, 右边的是 t5t7 缺陷从第 5 个到第 8 个形成的缺陷石墨纳米带的 LDOS. 从图中可以发现, 包含 SW 缺陷的 ZGNR 其声子主要分布于线型缺陷区域的上下方多条锯齿形碳链上, 沿运输方向形成了较多的运输通道, 因此对声子的散射相对较小; 而在包含 t5t7 缺陷的 ZGNR 中, 线型缺陷对声子的运输通道破坏较大, 只在缺陷区域的上下边界形成了两条运输通道, 所以对声子的散射较为严重. 因此, 嵌入 SW 缺陷的 ZGNR 的透射率要比嵌入 t5t7 缺陷的 ZGNR 的大.

当嵌入 ZGNR 中的有限长缺陷扩展到半无限长、无限长时, 就会形成如图 1(c), (d) 和图 1(e), (f) 的两种结构. 图 4(a) 给出了嵌入有限长、半无限长、无限长线型缺陷的石墨纳米带的热导随温度的变化关系. 连接空心 (实心) 三角形、空心 (实心) 方框、空心 (实心) 圆的实线分别表示嵌入有限长 SW(t5t7) 缺陷、半无限长 SW(t5t7) 缺陷、无限长 SW(t5t7) 缺陷的 ZGNR 的热导曲线. 从图中可以看出, 由于缺陷类型的影响, 同种结构中含有 t5t7 缺陷的条带总是比含有 SW 缺陷的热导低. 通过比较

包含同种缺陷的三种不同结构的热导可以发现, 嵌入无限长缺陷的热导比嵌入半无限长缺陷的热导高, 而嵌入半无限长缺陷的热导比嵌入有限长缺陷的热导高这主要是由于不同体系对应的散射界面数不同所引起的. 图 4(b) 给出了对应于图 4(a) 中嵌入 t5t7 缺陷的三种不同结构的透射图谱. 可以看到, 由于嵌入无限长线型缺陷的条带是周期结构, 因此整个透射曲线呈现出完整的台阶状. 对于嵌入半无限长线型缺陷的条带, 虽然两边的结构是周期的, 但是在中间存在一个散射界面, 因此透射谱在频率大于 200 cm^{-1} 的区域平台被破坏, 出现了一些振荡, 因此其对应的热导要低于嵌入无限长线型缺陷的条带. 而对于嵌入有限长缺陷的条带, 由于在声子传输方向存在着多个散射界面, 因此对声子的散射更为严重, 透射曲线出现了更多的振荡, 相应的热导也就更低.

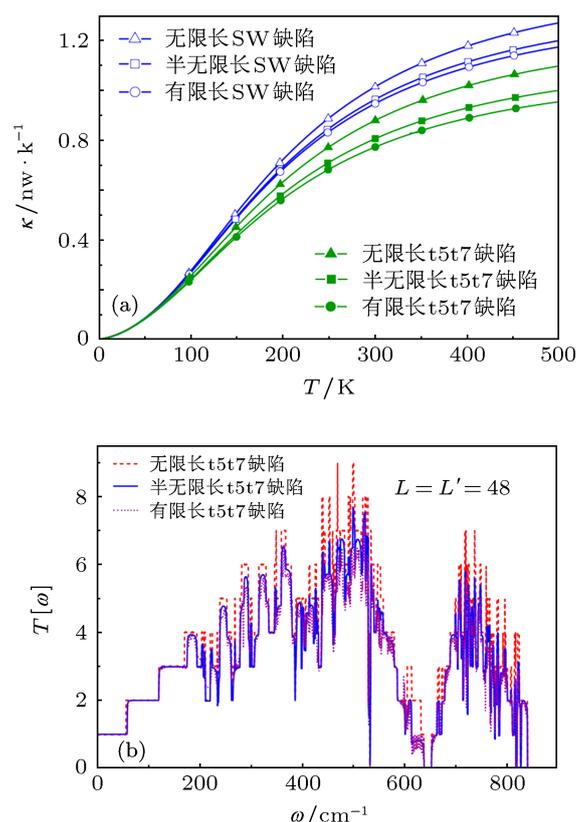


图 4 (a) 嵌入有限长缺陷、半无限长缺陷和无限长缺陷的 ZGNR 的热导随温度的变化关系 (连接空心 (实心) 三角形、空心 (实心) 方框、空心 (实心) 圆的实线分别代表 ZGNR 包含有限长 SW(t5t7) 缺陷、半无限长 SW(t5t7) 缺陷、无限长 SW(t5t7) 缺陷的热导曲线), $L = L' = 48$, $N = N' = 12$; (b) 对应于 (a) 嵌入有限长 t5t7 缺陷、半无限长 t5t7 缺陷、无限长 t5t7 缺陷的 ZGNR 的透射图

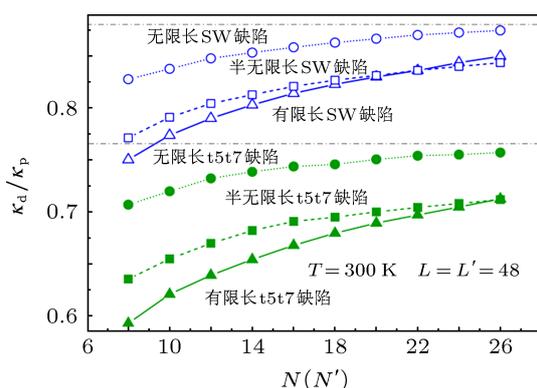


图5 ZGNR 嵌入有限长缺陷、半无限长缺陷和无限长缺陷的石墨纳米带的热导比 (κ_d/κ_p) 与石墨纳米带宽度 $N(N')$ 的关系 (温度 $T=300$ K, $L=L'=48$)

最后我们讨论了嵌入线型缺陷的 ZGNR 在室温 (300 K) 下的热导比 (κ_d/κ_p) 与纳米带宽度 N 的关系, 如图 5 所示. 从图中可以看到, 随着宽度 N 的增加, 所有结构的热导比曲线都在上升, 但是增大的幅度随温度的升高而变小. 这主要是因为石墨纳米带宽度的增加减弱了线型缺陷对条带热运输的影响. 同时也可以发现, 嵌入无限长缺陷、半无限长缺陷和有限长缺陷的 ZGNR 的热导比曲线对应的斜率是依次变大的. 由于 ZGNR 含有有限长缺陷和含有半无限长缺陷的热导比曲线比较靠近且前者的曲线斜率大于后者, 所以它们的曲线会有交叉. 相比于其他两种结构的条带, 含有有限长缺陷的条

带在宽度较大时对热导的调制范围更大一些. 另外, 在宽度较大时, 对于嵌入无限长 SW 缺陷的条带的热导比将稳定在 88%, 而嵌入无限长 t5t7 缺陷的条带, 其热导比将稳定在 76.5%.

4 总结

本文运用非平衡格林函数方法研究了嵌入线型缺陷的 ZGNR 的热输运性质. 对于嵌入有限长线型缺陷的石墨纳米带, 其热导依赖于缺陷的类型和缺陷的长度. 当线型缺陷的长度相等时, 包含 t5t7 缺陷的条带比包含 SW 缺陷的条带的热导低. 当嵌入的缺陷类型相同时, 石墨纳米带的热导随线型缺陷的长度增加而降低, 但是当线型缺陷很长时热导对缺陷长度的变化不再敏感. 我们利用透射图谱和局域态密度图解释了这些现象. 我们比较了在 ZGNR 中嵌入有限长缺陷、半无限长缺陷和无限长缺陷时的热输运情况, 发现嵌入无限长缺陷的条带比嵌入半无限长缺陷的条带热导高, 而嵌入半无限长缺陷的条带比嵌入有限长线型缺陷的条带热导高. 这主要是因为声子传输方向这几种结构的散射界面数不同. 散射界面越多, 对应的热导就越低. 这些研究结果表明通过线型缺陷能够很好地调控石墨纳米带的热输运性质.

- [1] Jin Z F, Tong G P, Jiang Y J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8537 (in Chinese) [金子飞, 童国平, 蒋永进 2009 物理学报 **58** 8537]
- [2] 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
- [3] 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, 屈帆明, 刘广同, 杨海方, 杨昌黎, 吕力 2009 物理学报 **58** 5726]
- [4] Xie Y E, Chen Y P, Zhong J X 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 103714
- [5] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [6] Areshkin D A, Gunlycke D, White C T 2007 *Nano Lett.* **7** 204
- [7] Xu Z, Zheng Q S, Chen G 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 223115
- [8] Liao W H, Zhou G H, Xi F 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 126105
- [9] Wei Y, Tong G P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1931 (in Chinese) [韦勇, 童国平 2009 物理学报 **58** 1931]
- [10] Hu X H, Xu J M, Sun L T 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 047106 (in Chinese) [胡小会, 许俊敏, 孙立涛 2012 物理学报 **61** 047106]
- [11] Trauzettel B B, Bulaev D V, Loss D, Burkard G 2006 *Nat. Phys.* **3** 192
- [12] Nakada K, Fujita M, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1996 *Phys. Rev. B* **54** 17954
- [13] Hu H X, Zhang Z H, Liu X H, Qiu M, Ding K H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7156 (in Chinese) [胡海鑫, 张振华, 刘新海, 邱明, 丁开和 2009 物理学报 **58** 7156]
- [14] Brey L, Fertig H A 2006 *Phys. Rev. B* **73** 235411
- [15] Zhang Y L, Liu K H, Wang W L, Bai X D, Wang E G 2009 *Physics* **38** 401 (in Chinese) [张盈利, 刘开辉, 王文龙, 白雪冬, 王恩哥 2009 物理 **38** 401]
- [16] Chen J H, Cullen W G, Jang C, Fuhrer M S, Williams E D 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 236805
- [17] Kotakoski J, Krasheninnikov A V, Kaiser V, Meyer J C 2011 arXiv: 1102.0174v1 [cond-mat.mtrl-sci]
- [18] Ma J, Alfe D, Michaelides A, Wang E 2009 *Phys. Rev. B* **80** 033407
- [19] Lee G D, Wang C Z, Yoon E, Hwang N M, Kim D Y, Ho K M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 205501
- [20] Peng X Y, Ahuja R 2008 *Nano Lett.* **8** 4464
- [21] Lu P, Zhang Z H, Guo W L 2009 *Phys. Lett. A* **373** 3354
- [22] Lahiri J, Lin Y, Bozkurt P, Oleynik I I, Batzill M 2010 *Nanotechnology* **5** 326
- [23] Terrones H, Lü R, Terrones M, Dresselhaus M S 2012 *Rep. Prog. Phys.* **75** 062501
- [24] Botello-Méndez A R, Declerck X, Terrones M, Terrones H, Charlier J C 2011 *Nanoscale* **3** 2868
- [25] Lin X Q, Ni J 2011 *Phys. Rev. B* **84** 075461
- [26] Kou L Z, Tang C, Guo W L, Chen C F 2011 *ACS. Nano* **5** 1012
- [27] Gunlycke D, White C T 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 136806
- [28] Hou Q W, Cao B Y, Guo Z Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7809 (in Chi-

- nese) [侯泉文, 曹炳阳, 过增元 2009 物理学报 **58** 7809]
- [29] Bao W X, Zhu C C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3552 (in Chinese) [保文星, 朱长纯 2006 物理学报 **55** 3552]
- [30] Hu J N, Ruan X L, Chen Y P 2009 *Nano Lett.* **9** 2730
- [31] Yang P, Wang X L, Li P, Wang H, Zhang L Q, Xie F W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 076501 (in Chinese) [杨平, 王晓亮, 李培, 王欢, 张立强, 谢方伟 2012 物理学报 **61** 076501]
- [32] Xie Z X, Chen K Q, Duan W H 2011 *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 315302
- [33] Hao F, Fang D N, Xu Z P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 041901
- [34] Morooka M, Yamamoto T, Watanabe K 2008 *Phys. Rev. B* **77** 033412
- [35] Saito R, Dresselhaus G, Dresselhaus M S 1998 *Physical Properties of Carbon Nanotubes* (London: Imperial College Press) p170
- [36] Yamamoto T, Watanabe K, Mii K 2004 *Phys. Rev. B* **70** 245402
- [37] Brenner D W 1990 *Phys. Rev. B* **42** 9458
- [38] Mingo N 2006 *Phys. Rev. B* **74** 125402
- [39] Wang J S, Wang J, Lu J T 2008 *Eur. Phys. J. B* **62** 381
- [40] Lopez S M P, Sancho J M 1985 *Rubio J. Phys. F: Met. Phys.* **15** 851

Thermal transport of graphene nanoribbons embedding linear defects*

Yao Hai-Feng Xie Yue-E[†] Ouyang Tao Chen Yuan-Ping

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

(Received 10 October 2012; revised manuscript received 14 November 2012)

Abstract

Using nonequilibrium Green's function method, the thermal transport properties of zigzag graphene nanoribbons (ZGNR) embedding a finite (semi-infinite or infinite) long linear defect are investigated in this paper. The results show that defect type and defect length have significant influence on the thermal conductance of ZGNR. When the embedded linear defects have the same lengths, thermal conductance of ZGNR embedding $t5t7$ defect is lower than that of ZGNR embedding Stone-Wales defect. As for the ZGNR embedding finite and the same type defects, their thermal conductance reduce with the increase of the defect length. However, as the linear defect is long enough, the thermal conductance is insensitive to the change of length. By comparing the ZGNRs embedding finite, semi-infinite and infinite long defects, we find that the thermal conductance of ZGNR embedding an infinite long defect is higher than that of ZGNR embedding a semi-infinite defect, while the thermal conductance of the latter is higher than that of ZGNR embedding a finite long defect. This is due to the fact that different structures possess different numbers of scattering interfaces in the phonon transmission direction. The more the scattering interfaces, the lower the thermal conductance is. These thermal transport phenomena are explained by analyzing transmission coefficient and local density of states. These results indicate that linear defects can tune thermal transport property of ZGNR efficiently.

Keywords: graphene, line defect, thermal conductance

PACS: 81.05.ue, 61.72.LK, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.62.068102

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11074213, 51176161, 51006086), and Joint Funds of Hunan Provincial Natural Science Foundation of China (Grant No. 10JJ9001).

[†] Corresponding author. E-mail: xieyech@xtu.edu.cn