



## 多孔石墨烯纳米带各向异性和超低热导的理论研究

吴成伟 任雪 周五星 谢国锋

### Theoretical study of anisotropy and ultra-low thermal conductance of porous graphene nanoribbons

Wu Cheng-Wei Ren Xue Zhou Wu-Xing Xie Guo-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 027803 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211477

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211477>

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

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 氢化多孔石墨烯反渗透特性及机理分析

Reverse osmotic characteristics and mechanism of hydrogenated porous graphene

物理学报. 2020, 69(9): 098201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191761>

#### 碱金属修饰的多孔石墨烯的储氢性能

Hydrogen storage capacity of alkali metal atoms decorated porous graphene

物理学报. 2020, 69(6): 068802 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20190694>

#### 多晶石墨烯纳米带热电性能的理论研究

Thermoelectric properties of polycrystalline graphene nanoribbons

物理学报. 2019, 68(24): 247202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191276>

#### 石墨烯/碳化硅异质界面热学特性的分子动力学模拟

Thermal property of graphene/silicon carbide heterostructure by molecular dynamics simulation

物理学报. 2021, 70(18): 187302 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210613>

#### 硼或氮掺杂的锯齿型石墨烯纳米带的非共线磁序与电子输运性质

Non-collinear magnetism and electronic transport of boron or nitrogen doped zigzag graphene nanoribbon

物理学报. 2019, 68(2): 027101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181754>

#### 一维线性非共轭石墨烯基(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>分子链的电子输运

Electron transport of one-dimensional non-conjugated (CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub> molecule chain coupling to graphene electrode

物理学报. 2021, 70(4): 046201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20200953>

# 多孔石墨烯纳米带各向异性和超低热导的理论研究\*

吴成伟<sup>1)2)</sup> 任雪<sup>1)2)</sup> 周五星<sup>1)2)†</sup> 谢国锋<sup>1)2)</sup>

1) (湖南科技大学材料科学与工程学院, 湘潭 411201)

2) (新能源储存与转换先进材料湖南省重点实验室, 湘潭 411201)

(2021 年 8 月 11 日收到; 2021 年 9 月 16 日收到修改稿)

利用非平衡格林函数方法研究了多孔石墨烯纳米带的热输运性质. 结果表明, 由于纳米孔洞的存在, 多孔石墨烯纳米带的热导远低于石墨烯纳米带的热导. 室温下, 锯齿型多孔石墨烯纳米带的热导仅为相同尺寸锯齿型石墨烯纳米带热导的 12%. 这是由于多孔石墨烯纳米带中的纳米孔洞导致的声子局域化引起的. 另外, 多孔石墨烯纳米带的热导具有显著的各向异性特征. 相同尺寸下, 扶手椅型多孔石墨烯纳米带的热导是锯齿型多孔石墨烯纳米带的 2 倍左右. 这是因为锯齿型方向上声子局域比扶手椅型方向上更加强烈, 甚至部分频率的声子被完全局域导致的.

**关键词:** 多孔石墨烯, 声子局域, 热导, 非平衡格林函数

**PACS:** 78.67.Rb, 65.80.Ck, 63.20.Pw, 65.80.-g

**DOI:** 10.7498/aps.71.20211477

## 1 引言

石墨烯优良的电学、力学、导热等性能, 使其成为理想纳米电子器件候选材料, 但由于石墨烯的零带隙电子结构, 限制了其在纳米电子器件领域的应用<sup>[1,2]</sup>. 因此, 近年来, 人们尝试了很多使得石墨烯打开带隙的方法<sup>[3-10]</sup>. 研究发现, 引入纳米孔洞是一种调控二维材料的电学、机械、光学等性能的有效方法<sup>[11-20]</sup>. 在石墨烯中引入孔洞缺陷, 实验上可以通过自上而下的方法, 在完美石墨烯薄膜上刻蚀孔洞, 也可以通过自下而上的方法, 通过小分子自组装合成具有周期性孔洞的二维多孔石墨烯材料. 2018 年, Moreno 等<sup>[21]</sup>利用二苯基-10, 10'-二溴-9, 9'-联二蒽 (diphenyl-10, 10'-dibromo-9, 9'-biantanthracene, DP-DBBA) 合成了周期性纳米多孔

石墨烯 (Nano-porous graphene). 研究发现, 由于孔洞的引入, 使得零带隙的石墨烯转变为固有带隙约为 1 eV 的多孔石墨烯. 更有趣的是, 多孔石墨烯中纳米级的孔洞有望用于分子筛分, 并被预测为可同时进行分子筛分和电传感的高效材料.

多孔石墨烯中的纳米孔洞除了改变石墨烯的电子结构以外, 对机械性能、光学性质以及热输运等性质都会造成影响. Mortazavi 等<sup>[22]</sup>采用第一性原理研究了多孔石墨烯的力学、光学、电学以及晶格热导率. 研究发现, 多孔石墨烯薄膜可以吸收可见光、近红外以及远红外光, 在纳米光学具有很好的应用前景. 另外, 大量孔洞的出现, 多孔石墨烯的弹性模量只有石墨烯的 0.3—0.5 倍, 扶手椅方向为 174 N/m, 锯齿方向为 144 N/m, 仍具有较高的力学强度. 并且相较于石墨烯, 多孔石墨烯的热导率降低了两个数量级. 另外, Hu 等<sup>[19]</sup>在研究中用

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12074115, 11874145) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wuxingzhou@hnu.edu.cn

非平衡格林函数方法和分子动力学方法研究了石墨烯声子晶体结构的热运输, 结果都表明孔洞会显著的降低石墨烯的热导率<sup>[23,24]</sup>. Singh 等<sup>[25]</sup>利用第一性原理计算方法预测了多孔石墨烯的热电输运性能, 发现多孔石墨烯在室温下具有极大的塞贝克系数  $1662.59 \mu\text{V/K}$ , 以及热电优值  $ZT = 1.13$ , 并且表现为各向同性, 说明多孔石墨烯在热电领域也具有有良好的应用前景.

然而, 对于先前的研究大多集中在二维多孔石墨烯材料的电学、光学以及机械性能, 热输运性质的研究还非常少, 尤其是一维的多孔石墨烯纳米带的热输运性质还没有被报道过. 鉴于多孔石墨烯纳米带在各个方面的潜在应用, 本文采用非平衡格林函数 (NEGF) 方法, 系统地研究了多孔石墨烯纳米带的热输运性质. 通过与完美石墨烯纳米带热输运性质的对比, 研究了纳米孔洞的引入对热输运性质的影响.

## 2 模型与方法

多孔石墨烯的结构如图 1(a) 所示, 蓝色虚线框所框选的区域为多孔石墨烯的单胞. 每个单胞包括 80 个 C 原子和 20 个 H 原子, 多孔石墨烯具有纳米级尺寸的单胞 ( $a = 0.8534 \text{ nm}$ ,  $b = 3.2383 \text{ nm}$ ). 考虑到多孔石墨烯是有 DP-DBBA 分子聚合而成, 故按照 DP-DBBA 分子的聚合的规律<sup>[21]</sup> 裁剪出多孔石墨烯纳米带 (nano-porous graphenenanoribbons), 如图 1(b), (c) 所示. 其中, 图 1(b) 分别为宽度为 1 和 2 的锯齿型多孔石墨烯纳米带, 分别简称为 NPZGNR-1 和 NPZGNR-2. 同理, 图 1(c) 为扶手椅型多孔石墨烯纳米带 (NPAGNR-1 和 NPAGNR-2).

在纳米尺度下, 体系的声子输运呈量子输运特性, 此时声子输运表现为弹道输运, 而 NEGF 方法能精准地描述弹道输运行为<sup>[26]</sup>. 结合声子的 NEGF 方法<sup>[26,27–31]</sup>, 研究体系被分为 3 个区域: 左热库 (L), 中间散射区 (C), 右热库 (R). 左右热库为中间散射区提供温度差  $\Delta T = (T_R - T_L)$ , 且热流密度  $J_C$  可由 (1) 式<sup>[32–33]</sup> 求得:

$$J_C = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty \omega \cdot T_{\text{ph}}(\omega) \cdot [f(\omega, T_R) - f(\omega, T_L)] d\omega, \quad (1)$$

其中,  $T_R$ ,  $T_L$  分别为右热库温度和左热库温度,  $\hbar$  为约化普朗克常数,  $\omega$ ,  $T_{\text{ph}}$  分别为频率和声子透射系数, 玻色-爱因斯坦分布函数  $f(\omega, T) =$

$[\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^{-1}$ . 再结合傅里叶导热定律  $\kappa = J_C / \Delta T$ , 当  $\Delta T$  足够小时, 特定温度  $T$  下的热导  $\kappa$  可由 Landauer 公式<sup>[34]</sup> 计算得出:

$$\kappa = \frac{\hbar}{2\pi} \int_0^\infty \omega \cdot T_{\text{ph}}(\omega) \cdot \frac{\partial f(\omega, T)}{\partial T} d\omega, \quad (2)$$

由 (2) 式可知, 研究体系  $\kappa$  的关键在于获得  $T_{\text{ph}}$ . 基于 NEGF 方法, 体系的滞后格林函数<sup>[35]</sup> 表示为

$$G^r(\omega) = \left[ (\omega + i\eta)^2 \mathbf{I} - \mathbf{K} - \sum_L^r(\omega) - \sum_R^r(\omega) \right]^{-1}, \quad (3)$$

其中  $\mathbf{I}$  为单位矩阵,  $\mathbf{K}$  为常数矩阵, 在此工作中, 采用晶格动力学的方法, 结合 Gulp 程序中的 Brenner 经验势得到纳米带的  $\mathbf{K}$ , Brenner 势可准确的描述碳材料的动力学行为, 其准确性在先前的研究中以得到充分验证<sup>[36–40]</sup>.  $\sum_{L/R}^r(\omega)$  为左右热库的滞后自能项, 且左右热库与中心散射区的相互作用可被表示为  $\Gamma_{L/R} = i \left( \sum_{L/R}^r(\omega) - \sum_{L/R}^a(\omega) \right)$ , 那么  $T_{\text{ph}}$  可由 Caroli 公式<sup>[35]</sup> 求得:

$$T_{\text{ph}}(\omega) = \text{Tr} [G^r(\omega) \Gamma_L(\omega) G^a(\omega) \Gamma_R(\omega)], \quad (4)$$

其中, 超前格林函数  $G^a(\omega) = [G^r(\omega)]^\dagger$ . 通过 NEGF 方法, 中间散射区的声子局域态密度 (LDOS) 被定义为<sup>[29,30]</sup>

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

LDOS 反映了体系中声子在实空间的分布, 可以更直观地得出声子的行为信息对热导的影响.

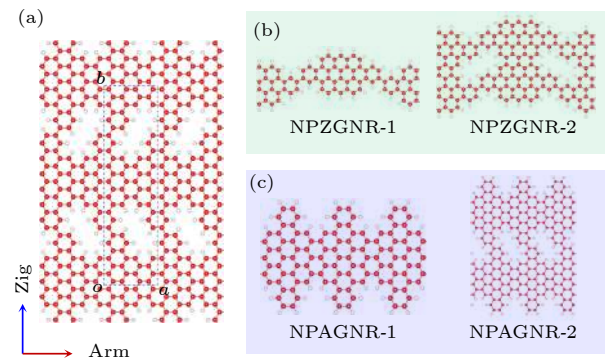


图 1 (a) 多孔石墨烯结构图, 红色代表 C 原子, 白色代表 H 原子; (b) 纳米带 NPZGNR-1 和 NPZGNR-2 的结构图; (c) 纳米带 NPAGNR-1 和 NPAGNR-2 的结构图

Fig. 1. (a) Structures of nano-porous graphene, red atoms represent C, white atoms represent H; (b) structures of NPZGNR-1 and NPZGNR-2; (c) structures of NPAGNR-1 and NPAGNR-2.

### 3 分析与讨论

首先研究了纳米孔洞对石墨烯纳米带热运输的影响, 通过对比相同宽度的完美石墨烯纳米带和多孔石墨烯纳米带的热导, 发现多孔石墨烯纳米带的热导远低于完美的石墨烯纳米带, 本文中完美石墨烯纳米带的边缘都采用 H 原子钝化. 在图 2(a), (c) 中, 分别给出了 NPAGNR-2, NPZGNR-2 以及对应相同宽度的完美石墨烯纳米带 (AGNR-2, ZGNR-2) 的热导随温度变化的关系. 从图中可知, NPGNR-2 以及对应相同宽度的石墨烯纳米带的热导都随温度的升高而升高, 这是因为随着温度升高, 更高频率的声子模式被激发, 参与热运输的声子模数增加. 同时, 还发现相同温度下, NPGNR-2 的热导都要远低于 GNR-2. 室温下 NPAGNR-2 的热导  $\kappa = 1.13 \text{ nW/K}$ , NPZGNR-2 的热导  $\kappa = 0.45 \text{ nW/K}$ , 相较于完美石墨烯纳米带, 分别下降了 66% 和 88%, 且差距会随着温度的升高进一步的增大. 为了解纳米孔洞导致热导降低的原因, 在

图 2(b), (d) 中给出了对应结构的声子透射谱. 从图中可以看出, 石墨烯纳米带的透射谱曲线呈阶梯状, 是典型的量子化热导特征, 其每一支声子模式的透射系数都为 1. 且在低频 ( $0-100 \text{ cm}^{-1}$ ) 下, 石墨烯纳米带的透射系数随着温度的升高, 呈台阶状升高 [27,28]. 虽然 NPGNR-2 同样属于理想晶格, 但是从图中可以看出, 低频下 NPGNR-2 的透射谱曲线并未像石墨烯纳米带一样呈完美的台阶状升高, 而是透射系数在整个频率范围内被抑制. 这是因为周期性纳米孔洞会阻止一定频率的声子传播, 从而造成声子局域. 周期性纳米孔洞不仅可以阻止高频光学声子模式的传播, 也可以阻止低频声子模式的传播 [19,30], 因此, 在低温 (50 K) 下 NPGNR-2 的热导就明显低于 GNR-2. 随着温度升高, GNR-2 更高频率的声子模被激发而参与导热, 而 NPGNR-2 中的声子模式被局域, 所以孔洞对热导的影响就更加明显 [41]. 另外, 从图 2(b), (d) 中可以看出, NPZGNR-2 的透射曲线被抑制的程度更大, 且在整个频率范围内出现多个零输运点, 这说明孔洞对锯齿方向运输的声子模影响更大.

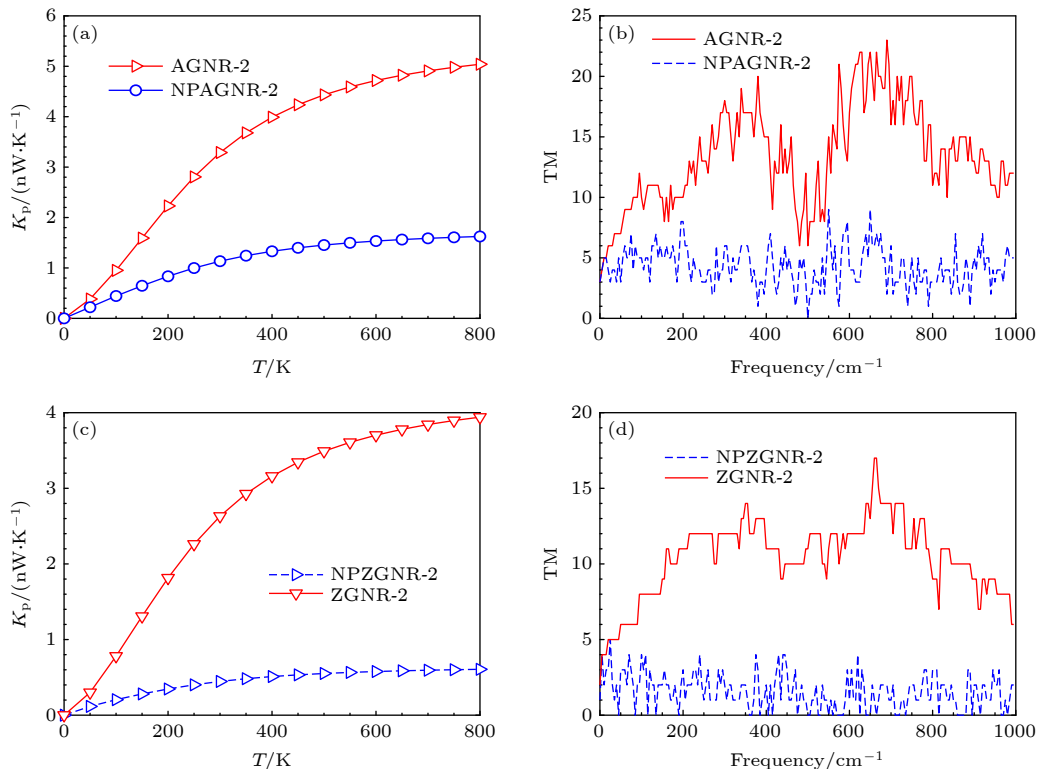


图 2 AGNR-2 和 NPAGNR-2 的热导和温度的关系 (a), 以及对应的声子透射谱图 (b); ZGNR-2 和 NPZGNR-2 的热导和温度的关系 (c), 以及对应的声子透射谱图 (d)

Fig. 2. (a) Thermal conductance of AGNR-2 and NPAGNR-2 with different temperatures; (b) phonon transmission spectrum of AGNR-2 and NPAGNR-2; (c) thermal conductance of ZGNR-2 and NPZGNR-2 with different temperatures; (d) phonon transmission spectrum of ZGNR-2 and NPZGNR-2.



为更直观地理解纳米孔洞对整个频率范围内声子模的影响, 图 3 给出了 ZGNR-2 和 NPZGNR-2 的 3 个典型的频率 ( $50\text{ cm}^{-1}$ ,  $500\text{ cm}^{-1}$ ,  $815\text{ cm}^{-1}$ ) 下的声子 LDOS. 从图中可以看出, NPZGNR-2 的孔洞破坏了完美石墨烯纳米带的声子输运通道, 使声子局域化, 而局域声子模在输运方向没有产生声子输运通道. 因此, 多孔石墨烯纳米带的热导远低于石墨烯纳米带是源于纳米孔洞的存在, 致使声子产生强烈的局域化, 尤其是低频声子的局域化导致的.

此外, 在图 4(a), (b) 中, 分别给出了宽度对 NPAGNR 和 NPZGNR 热导的影响. 图中可以看出, 两种纳米带的热导都随着宽度的增大而单调增大, 这一规律和先前类似研究中出现的规律是一致的<sup>[42]</sup>. 这是因为宽度的增大使得原子总数目增加, 参与传热的声子模式也随之增加, 声子输运系数增大, 导致更高的热导.

最后讨论不同手性对多孔石墨烯纳米带热输运性质的影响. 考虑到纳米尺度下尺寸效应的影响, 选取横向 (与输运方向垂直) 尺寸相近的 NPAGNR-2 和 NPZGNR-3 两种纳米带 (纳米带宽度分别为  $3.2\text{ nm}$  和  $2.9\text{ nm}$ ), 来比较锯齿和扶手椅两个方向上的热输运性质. 从图 5(a) 可以看出, 相同温度下 NPAGNR-2 的热导要大于 NPZGNR-3 的, 室温下 NPAGNR-2 的热导是 NPZGNR-3 的 2 倍, 这说明多孔石墨烯纳米带的热输运具有显著的各向异性特征, 并且扶手椅型多孔石墨烯纳米带的热输运能力高于锯齿型多孔石墨烯纳米带. 而且这种各向异性特征随着温度升高而变得更加显著, 当温度升高至  $800\text{ K}$  时, NPAGNR-2 的热导是 NPAGNR-3 的 2.15 倍. 为了解释多孔石墨烯纳米带显著的各向异性热输运特性, 图 5(b) 给出了 NPAGNR-2 和 NPZGNR-3 的声子透射谱曲线, NPAGNR-2 的透射系数整体高于 NPZGNR-3 的

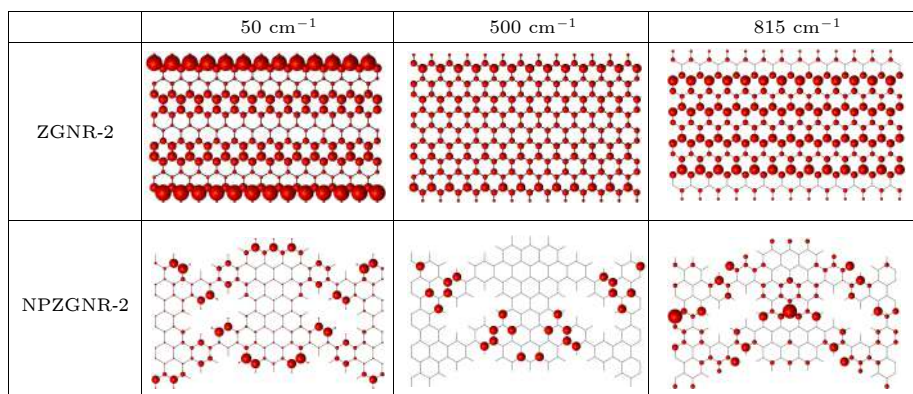


图 3 ZGNR-2 和 NPZGNR-2 在频率  $50\text{ cm}^{-1}$ ,  $500\text{ cm}^{-1}$ ,  $815\text{ cm}^{-1}$  下的局域声子态密度图

Fig. 3. LDOS of ZGNR-2 and NPZGNR-2 at  $50\text{ cm}^{-1}$ ,  $500\text{ cm}^{-1}$  and  $815\text{ cm}^{-1}$ .

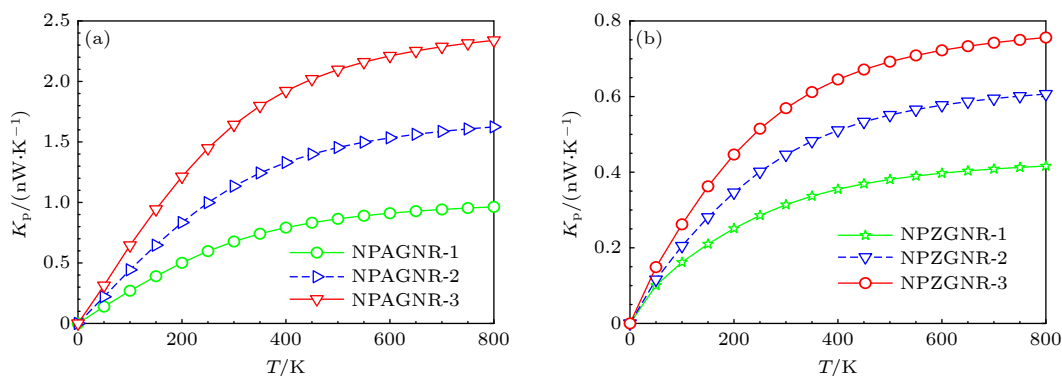


图 4 (a) NPAGNR-1, NPAGNR-2, NPAGNR-3 的热导与温度的关系图; (b) NPZGNR-1, NPZGNR-2, NPZGNR-3 的热导与温度的关系图

Fig. 4. (a) Thermal conductance of NPAGNR-1, NPAGNR-2 and NPAGNR-3 with different temperatures; (b) thermal conductance of NPZGNR-1, NPZGNR-2 and NPZGNR-3 with different temperatures.

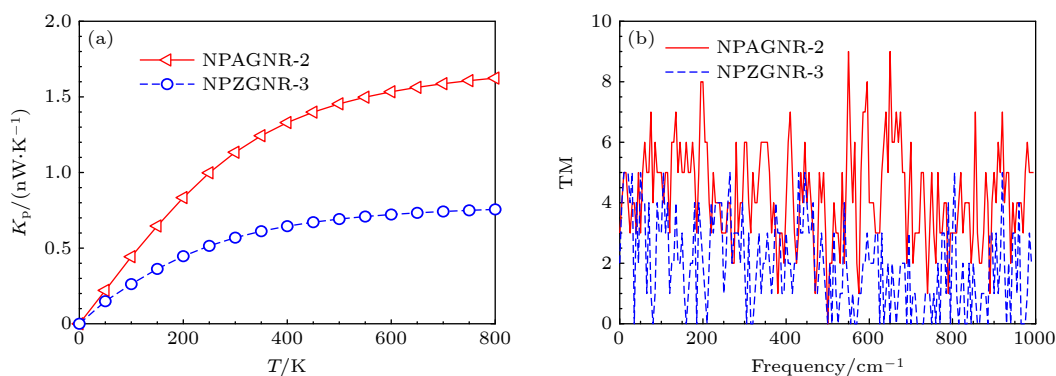
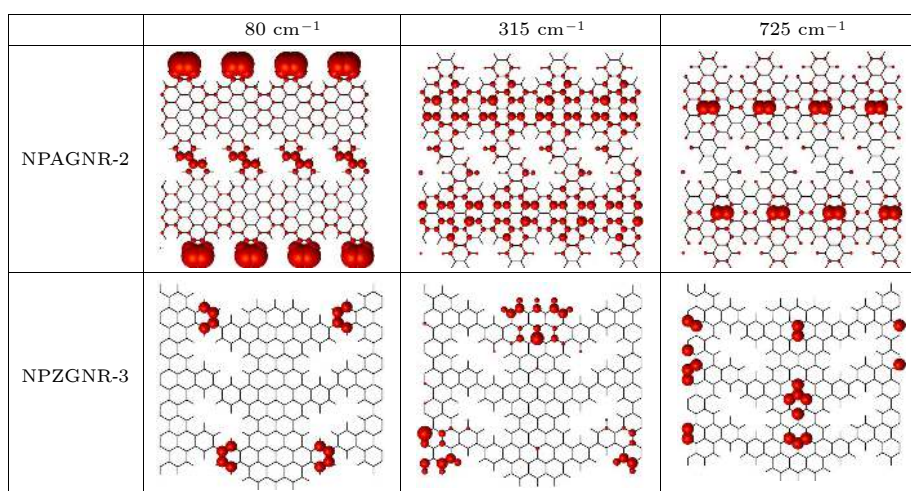


图5 AGNR-2和NPZGNR-3的热导与温度的关系图(a)以及对应的声子透射谱图(b)

Fig. 5. (a) Thermal conductance of NPAGNR-2 and NPZGNR-3 with different temperatures; (b) the corresponding phonon transmission spectrum.

图6 NPAGNR-2和NPZGNR-3在频率 $80\text{ cm}^{-1}$ ,  $315\text{ cm}^{-1}$ ,  $725\text{ cm}^{-1}$ 下的声子局域态密度Fig. 6. LDOS of NPAGNR-2 and NPZGNR-3 at  $80\text{ cm}^{-1}$ ,  $315\text{ cm}^{-1}$  and  $725\text{ cm}^{-1}$ .

透射系数,且未出现零输运频率点,而NPZGNR-3的透射系数不仅整体低于NPAGNR-2,而且从低频 $50\text{ cm}^{-1}$ 到高频 $1000\text{ cm}^{-1}$ 范围内出现多个零输运点,从而导致在锯齿型方向上多孔石墨烯纳米带具有较低的热导。

为了能更直观地理解多孔石墨烯纳米带热运输的各向异性特性,从NPZGNR-3的多个零输运点中挑选了低、中、高频零输运点,画出了NPAGNR-2和NPZGNR-3在这3个频率下的声子局域态密度。如图6所示,在频率为 $80\text{ cm}^{-1}$ ,  $315\text{ cm}^{-1}$ ,  $725\text{ cm}^{-1}$ 下,NPAGNR-2的声子分布虽然存在局域现象,但是在输运方向仍形成了一些扩展的输运通道。然而,在这3个频率点下,NPZGNR-3的声子分布严重局域化,未形成扩展的声子输运通道。所以,扶手椅型多孔石墨烯纳米带的热运输能力强于锯齿型多孔石墨烯纳米带是由于锯齿型多孔石墨烯纳

米带的声子局域性明显强于扶手椅型多孔石墨烯纳米带导致的,并且当温度持续升高时,扶手椅型多孔石墨烯纳米带中更多的声子模被激发参与导热,而锯齿型多孔石墨烯纳米带中大部分声子完全局域,对热导没有贡献。

## 4 结 论

利用非平衡格林函数方法研究了纳米孔洞的引入、宽度以及手性对多孔石墨烯纳米带热运输性质的影响。发现由于纳米空洞的引入,多孔石墨烯纳米带的热导远低于石墨烯纳米带的热导,通过分析声子透射谱和声子局域态密度发现这是由于纳米孔洞会阻止部分频率的声子传播,引起声子局域,从而大幅度降低热导。另外,随着纳米带宽度的增大,原子数目增加,使得更多的声子模参与导

热, 导致扶手椅型多孔石墨烯纳米带和锯齿型多孔石墨烯纳米带的热导都随着宽度的增大而单调增大. 最后, 通过比较 NPAGNR-2 和 NPZGNR-3 的热导, 发现扶手椅型多孔石墨烯纳米带的热导是锯齿型多孔石墨烯纳米带热导的 2 倍以上, 表明多孔石墨烯纳米带的热输运具有显著的各向异性特性. 通过分析声子透射谱和声子局域态密度可知: 在锯齿型方向, 整个频率范围内, 声子局域化更为严重, 导致更低的热导.

## 参考文献

- [1] Balandin A A, Ghosh S, Bao W Z, Calizo I, Teweldebrhan D, Miao F, Lau C N 2008 *Nano Lett.* **8** 902
- [2] Xu X, Pereira L F, Wang Y, Wu J, Zhang K, Zhao X, Bae S, Tinh Bui C, Xie R, Thong J T, Hong B H, Loh K P, Donadio D, Li B, Ozyilmaz B 2014 *Nat. Commun.* **5** 3689
- [3] Gao H, Wang L, Zhao J, Ding F, Lu J 2011 *J. Phys. Chem. C* **115** 3236
- [4] Slawińska J, Zasada I, Klusek Z 2010 *Phys. Rev. B* **81** 155433
- [5] Dean C R, Young A F, Meric I, Lee C, Wang L, Sorgenfrei S, Watanabe K, Taniguchi T, Kim P, Shepard K L, Hone J 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 722
- [6] Zhang Y, Tang T T, Girit C, Hao Z, Martin M C, Zettl A, Crommie M F, Shen Y R, Wang F 2009 *Nature* **459** 820
- [7] Zhou S Y, Gweon G H, Fedorov A V, First P N, de Heer W A, Lee D H, Guinea F, Castro Neto A H, Lanzara A 2007 *Nat. Mater.* **6** 770
- [8] Giovannetti G, Khomyakov P A, Brocks G, Kelly P J, van den Brink J 2007 *Phys. Rev. B* **76** 073103
- [9] Ohta T, Bostwick A, Seyller T, Horn K, Rotenberg E 2006 *Science* **313** 951
- [10] Jeon K J, Lee Z, Pollak E, Moreschini L, Bostwick A, Park C M, Mendelsberg R, Radmilovic V, Kostecki R, Richardson T J, Rotenberg E 2011 *ACS Nano*. **5** 1042
- [11] Kaur S, Narang S B, Randhawa D K K 2017 *J. Mater. Res.* **32** 1149
- [12] Du L, Nguyen T N, Gilman A, Muniz A R, Maroudas D 2017 *Phys. Rev. B* **96** 245422
- [13] Zhao Y, Yang L, Kong L, Nai M H, Liu D, Wu J, Liu Y, Chiam S Y, Chim W K, Lim C T, Li B, Thong J T L, Hippalgaonkar K 2017 *Adv. Func. Mater.* **27** 1702824
- [14] Sadeghzadeh S, Rezapour N 2016 *Superlattice. Microst.* **100** 97
- [15] Nemnes G A, Visan C, Manolescu A 2017 *J. Mater. Chem. C* **5** 4435
- [16] Sadeghi H, Sangtarash S, Lambert C J 2015 *Sci. Rep.* **5** 9514
- [17] Hu S, An M, Yang N, Li B 2016 *Nanotechnology* **27** 265702
- [18] Baskin A, Kral P 2011 *Sci. Rep.* **1** 36
- [19] Hu S, Zhang Z, Jiang P, Ren W, Yu C, Shiomi J, Chen J 2019 *Nanoscale* **11** 11839
- [20] Xiao Y, Chen Q Y, Ma D K, Yang N, Hao Q 2019 arXiv preprint arXiv: 1910.04913
- [21] Moreno C, Vilas-Varela M, Kretz B, Garcia-Lekue A, Costache M V, Paradinas M, Panighel M, Ceballos G, Valenzuela S O, Peña D, Mugarza A 2018 *Science* **360** 6385
- [22] Mortazavi B, Madjet M E, Shahrokhi M, Ahzi S, Zhuang X, Rabeczuk T 2019 *Carbon* **147** 377
- [23] Hu S, Zhang Z, Jiang P, Chen J, Volz S, Nomura M, Li B 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 3959
- [24] Feng T, Ruan X 2016 *Carbon* **101** 107
- [25] Singh D, Shukla V, Ahuja R 2020 *Phys. Rev. B* **102** 075444
- [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] Wu Y, Cai S H, Deng M S, Sun G Y, Liu W J 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 026501 (in Chinese) [吴宇, 蔡绍洪, 邓明森, 孙光宇, 刘文江 2018 物理学报 **67** 026501]
- [28] Wu Y, Cai S H, Deng M S, Sun G Y, Liu W J, Cen C 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 116501 (in Chinese) [吴宇, 蔡绍洪, 邓明森, 孙光宇, 刘文江, 岑超 2017 物理学报 **66** 116501]
- [29] 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]
- [30] Zhou W X, Chen K Q 2015 *Carbon* **85** 24
- [31] Qian X, Zhou J, Chen G 2021 *Nat. Mater.* **20** 1188
- [32] Yamamoto T, Watanabe K 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 255503
- [33] Mingo N, Yang L 2003 *Phys. Rev. B* **68** 245406
- [34] Sevinçli H, Sevik C, Çam T, Cumiberti G 2013 *Nature. Sci. Rep.* **3** 1228
- [35] Peng Y N, Yu J F, Cao X H, Wu D, Jia P Z, Zhou W X, Chen K Q 2020 *Physica E: Low-Dimens. Syst. Nanostruct.* **122** 114160
- [36] Gale J. D. 1997 *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **93** 629
- [37] Lu Y, Guo J 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 043112
- [38] Lindsay L, Broido D A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 205441
- [39] Khare R, Mielke S L, Paci J T, Zhang S, Ballarini R, Schatz G C, Belytschko T 2007 *Phys. Rev. B* **75** 075412
- [40] Brenner D W, Shenderova O A, Harrison J A, Stuart S J, Ni B, Sinnott S B 2002 *J. Phys.: Condens. Matter* **14** 783
- [41] Chen X K, Hu X Y, Jia P, Xie Z X, Liu J 2021 *Int. J. Mech. Sci.* **206** 106576
- [42] Li D, Wu Y, Kim P, Shi L, Yang P, Majumdar A 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 2934

# Theoretical study of anisotropy and ultra-low thermal conductance of porous graphene nanoribbons<sup>\*</sup>

Wu Cheng-Wei<sup>1)2)</sup> Ren Xue<sup>1)2)</sup> Zhou Wu-Xing<sup>1)2)†</sup> Xie Guo-Feng<sup>1)2)</sup>

1) (*School of Materials Science and Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China*)

2) (*Hunan Provincial Key Laboratory of Advanced Materials for New Energy Storage and Conversion, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201, China*)

( Received 11 August 2021; revised manuscript received 16 September 2021 )

## Abstract

The thermal transport properties of porous graphene nanoribbons are studied by the non-equilibrium Green's function method. The results show that owing to the existence of nano-pores, the thermal conductance of porous graphene nanoribbons is much lower than that of graphene nanoribbons. At room temperature, the thermal conductance of zigzag porous graphene nanoribbons is only 12% of that of zigzag graphene nanoribbons of the same size. This is due to the phonon localization caused by the nano-pores in the porous graphene nanoribbons. In addition, the thermal conductance of porous graphene nanoribbons has remarkable anisotropy. With the same size, the thermal conductance of armchair porous graphene nanoribbons is about twice higher than that of zigzag porous graphene nanoribbons. This is because the phonon locality in the zigzag direction is stronger than that in the armchair direction, and even part of the frequency phonons are completely localized.

**Keywords:** porous graphene, phonon localization, thermal conductance, non-equilibrium Green's function

**PACS:** 78.67.Rb, 65.80.Ck, 63.20.Pw, 65.80.-g

**DOI:** 10.7498/aps.71.20211477

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12074115, 11874145).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [wuxingzhou@hnu.edu.cn](mailto:wuxingzhou@hnu.edu.cn)