

اثر تهی‌جای‌های گسترده بر خواص گرمایی نانونوارهای آرمچیری گرافن

روح‌اله فرقدان و فرشته مسعودی‌نیا

گروه فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان

پست الکترونیکی: rfarghadan@kashanu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۰۴/۲۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۶/۰۹/۲۸)

چکیده

این مقاله به بهینه‌سازی خواص گرمایی نانونوارهای آرمچیری گرافن، با ایجاد نقش‌های تکرار شونده که شامل تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای هستند، می‌پردازد. نانونوارهای مورد بررسی از ابرسلول‌هایی با ساختار دوره‌ای از تهی‌جای‌های گسترده با هندسه، ابعاد و تقارن‌های مختلف نسبت به محور نانونوار تشکیل شده‌اند. به منظور محاسبه طیف پاشندگی فونونی، ظرفیت گرمایی و خواص انتقال گرما، از مدل ثابت نیرو با در نظر گرفتن چهار همسایه نزدیک و نظریه لاندائور استفاده شده است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که ساختار هندسی تهی‌جای‌ها گسترده و جای آنها نقش بسیار مؤثری در کنترل خواص گرمایی به‌ویژه در دماهای پایین دارد. علاوه بر این مدهای فونونی درون و بیرون صفحه‌ای، نقش متفاوتی در ظرفیت گرمایی و ضرایب رسانش فونونی از خود نشان می‌دهند. محاسبه سهم مدهای فونونی درون صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای نیز نشان می‌دهد که مدهای فونونی بیرون صفحه‌ای به ویژه در دماهای پایین سهم بیشتری در ترابرد و ظرفیت گرمایی نانونوارها، حتی در حضور تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای دارند. این نتایج می‌تواند در بهینه‌سازی و طراحی نانو قطعات گرمایی و ترموالکتریکی مفید باشد.

واژه‌های کلیدی: تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای، نانونوار آرمچیری گرافن، ظرفیت گرمایی، رسانش گرمایی

۱. مقدمه

رسانش گرمایی در مواد کربنی شامل دو سهم فونونی و الکترونی است، که بخش عمده این رسانش مربوط فونون‌ها به ویژه فونون‌های آکوستیک است. از طرف دیگر سهم رسانش الکترونی با افزایش دما به شدت کاهش می‌یابد، به طوری که مقدار این سهم در حدود ۱-۲ درصد مقدار رسانش گرمایی کل است. در نتیجه سهم رسانش الکترونی در مقایسه با سهم رسانش فونونی قابل چشم‌پوشی است [۱].

رسانش گرمایی در نانونوارهای گرافنی همانند گرافن توسط فونون‌ها به ویژه فونون‌های آکوستیکی صورت می‌گیرد [۲، ۳]. شکل لبه‌های نانونوارها، موجب می‌شود رسانش گرمایی نانونوار لبه‌زیگزاگی به‌طور محسوسی، در حدود ۵۰-۲۰ درصد بیشتر از رسانش نانونوار لبه‌آرمچیری باشد. این مورد به علت تفاوت بین محدوده پراکندگی فونونی از لبه‌زیگزاگی و لبه‌آرمچیری و همچنین اندازه محدود نانونوارها است [۱، ۴، ۵]. رسانش گرمایی نانونوارها به صورت نمایی با عرض نوارها تغییر می‌کند [۶]؛ همچنین رسانش گرمایی

زمانی که نانونوار از عرض محدود می‌شود، نسبت به زمانی که از لبه ناهموار محدود می‌شود کمتر است [۷، ۸]. وابستگی رسانش گرمایی نانونوارها به طول، زمانی که طول نوار کمتر از 100nm باشد، تقریباً به صورت خطی است؛ و با افزایش طول نانونوار رسانش گرمایی به آرامی افزایش پیدا می‌کند [۹]. از طرف دیگر نقص‌های ساختاری به شدت بر روی خواص گرمایی نانونوارها اثر گذارند. در نتیجه مطالعه انواع نقص‌های ساختاری و هندسه آنها در ساختار شبکه، به منظور بهینه‌سازی انرژی حرارتی و حذف گرمای زائد در وسایل الکترونیکی و ترموالکتریکی بسیار حائز اهمیت است. نقص‌ها و ناکاملی‌ها به دو دسته ناکاملی‌های خطی و نقطه‌ای تقسیم می‌شوند؛ یکی از انواع ناکاملی‌های نقطه‌ای، تھی‌جای‌ها هستند. در تھی‌جای ساده، یک پیوند اشباع نشده وجود دارد که به آن تھی‌جای یگانه می‌گویند در حالی که اگر بیش از یک اتم کربن از ساختار جدا شده باشد، تھی‌جای چندگانه پدید می‌آید. نقصی که در این مقاله بررسی شده است تھی‌جای‌های چندگانه یا گسترده است. از جمله نقص‌های دیگر می‌توان به ناکاملی استون-ولز و ناهمواری‌های سطح و لبه‌های نانونوارهای گرافنی اشاره کرد [۴، ۱۰ و ۱۱].

از آنجایی که رسانش گرمایی به شدت به ساختار هندسی و اثرات نقص‌های ساختاری حساس است برای کاهش رسانش گرمایی به منظور افزایش ضرایب سیبک و کارایی قطعات ترموالکتریکی می‌توان از مهندسی نقص‌ها استفاده کرد [۱۰]. در واقع ایجاد تھی‌جای، نوع تھی‌جای و بی‌نظمی ساختاری، آرایش ایزوتوپ‌ها، لبه‌های ناهموار و پراکندگی مرزی، می‌توانند ترابرد گرمایی را به طور قابل ملاحظه‌ای کاهش دهند [۹، ۱۲-۱۵]. از طرف دیگر تأثیر نقص‌ها روی احتمال پراکندگی فونون‌ها و ضریب رسانش گرمایی نمونه واقعی، به غلظت نقص‌ها، جای نقص‌ها و شکل هندسی لبه‌ها بستگی دارد [۱۲، ۱۵]. اثر نقص دوتھی‌جای و استون-ولز در رسانش گرمایی نانونوار آرمچیری نیز مورد بررسی قرار گرفته است [۱۶]. نتایج نشان می‌دهد، حتی مکان یک تھی‌جای نیز در رسانش گرمایی نانونوار می‌تواند اثرگذار باشد [۱۲].

این مقاله به مطالعه چگونگی تغییرات رسانش فونونی و ظرفیت گرمایی نانونوارهای آرمچیری گرافن در حضور تھی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای در دماهای مختلف می‌پردازد. خواص گرمایی نانونوارهای آرمچیری در حضور تھی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای و نقش مدهای فونونی درون و بیرون صفحه‌ای تاکنون مورد بررسی قرار نگرفته است. این نوع نانونوارها به دلیل کوچک بودن ضرایب رسانش گرمایی نسبت به نانونوارهای زیگزاگی کمتر مورد توجه قرار گرفته‌اند؛ اما با توجه به اینکه رسانش الکتریکی کمتری دارند، تھی‌جای‌های گسترده می‌توانند با تغییر نسبت رسانش‌های الکتریکی و گرمایی، ضرایب ترموالکتریکی مناسب‌تری را پیش‌بینی کنند. تھی‌جای‌های انتخاب شده از نظر تعداد اتم‌های خارج شده از سلول، اندازه و تقارن هندسی نسبت به محور نانونوار متفاوت می‌باشند. نشان داده خواهد شد که این جزئیات ساختاری متفاوت، می‌تواند اثرات متفاوتی در خواص ترابرد گرمایی نانونوارهای گرافنی ایجاد کند. به منظور بررسی دقیق سهم مدهای فونونی متفاوت در رسانش گرمایی، سهم مدهای فونونی درون صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای در دماهای پایین به صورت ویژه مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد، که مدهای فونونی بیرون صفحه‌ای در دماهای کوچک‌تر، سهم بیشتری را در خواص گرمایی از خود نشان می‌دهد و تغییرات این نوع مدها به ویژه در مورد ظرفیت گرمایی نانونوارها در حضور تھی‌جای‌ها محسوس‌تر است. در آخر باید اشاره کرد که کارهای تجربی برای ایجاد نقش‌های تکرار شونده که می‌توانند شامل تھی‌جای‌های گسترده نیز باشند در نانونوارها بررسی شده است [۱۷].

۲. روش انجام محاسبات نظری

در این مقاله از دو روش ثابت نیرو برای محاسبه ماتریس دینامیکی و در نهایت محاسبه طیف فونونی و روش لانداور برای محاسبه رسانش فونونی، ضریب عبور و ظرفیت گرمایی استفاده شده است.

۲.۱. مدل ثابت نیرو

با استفاده از مدل ثابت نیرو، رابطه پاشندگی نانوآر گرافنی محاسبه می‌شود. در این مدل، نیروهای بین اتمی مانند ثابت‌های فنر نمایش داده می‌شوند؛ و ماتریس دینامیکی به صورت رابطه زیر نوشته می‌شود [۱۸]:

$$D^{ij}(k) = \left(\sum_{j''} K^{(ij'')} - M_i \omega^2(k) I \right) \delta_{ij} - \sum_{j'} K^{(ij')} e^{ik \cdot R_{ij'}} \quad (1)$$

در رابطه بالا $\Delta R_{ij} = R_i - R_j$ مختصات نسبی اتم i م با توجه به اتم j م است. ارتعاش اتم i م توسط ماتریس ثابت نیروی K^{ij} به اتم j م جفت می‌شود، که یک ماتریس 3×3 است. مقادیر این ماتریس را می‌توانید در مرجع [۱۵] مشاهده کنید. یادآوری می‌کنیم که j مکان یک اتم در نزدیکی سلول واحد است. جمع روی j' ، جمع روی تمام مکان‌های همسایه اتم i م، با $K^{(ij'')} \neq 0$ است. جمع روی j' ، جمع روی تمام مکان‌های معادل اتم j م است. k بردار شبکه وارون و M_i جرم اتم کربن است. محاسبات مربوط به ماتریس دینامیکی تا همسایگی چهارم در نظر گرفته شده است؛ همچنین هر اتم دارای ۱۸ همسایگی نزدیک می‌باشد، که برای هر اتم این تعداد همسایگی در نظر گرفته می‌شود.

ماتریس ثابت نیرو نیز از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۸]:

$$K^{(A, B_m)} = U_m^{-1} K^{(A, B)} U_m \quad (m = 2, 3), \quad (2)$$

U_m ماتریس دوران حول محور Z است، که اتم B_1 را به جایگاه اتم B_m می‌برد. ماتریس دوران U_m به صورت زیر می‌باشد [۱۶]:

$$U_m = \begin{pmatrix} \cos \theta_m & \sin \theta_m & 0 \\ -\sin \theta_m & \cos \theta_m & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

علت استفاده از ماتریس‌های دوران این است که زوایای اتم‌ها متفاوت است [۱۸]. با مشخص شدن ماتریس‌های ثابت نیرو برای تمامی همسایه‌ها، ماتریس دینامیکی تشکیل می‌شود. ابعاد ماتریس دینامیکی با توجه به آزادی عمل اتم‌ها در سه جهت هنگامی که درون سلول N اتم وجود دارد $3N \times 3N$ خواهد بود. مثلاً برای ابرسلولی دارای ۶۶ اتم، ابعاد ماتریس‌های

دینامیکی 198×198 خواهند بود که با قطری‌سازی دقیق آنها، می‌توان بسامدهای مجاز طیف فونونی را برحسب بردار شبکه وارون k به دست آورد.

۲.۲. روش لاندائور

با استفاده از روش لاندائور می‌توان ضریب عبور فونونی را برای نانوآرهای گرافنی محاسبه کرد. با داشتن ضریب عبور فونونی و جایگذاری آن در رابطه (۴) ظرفیت گرمایی در حجم ثابت نیز به دست می‌آید [۹، ۱۹]

$$C_v = 3rk_B \int_0^\infty d\omega \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right)^2 \frac{\tau_S(\omega)}{\sinh^2 \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right)}, \quad (4)$$

در رابطه (۴)، $\tau_S(\omega)$ ضریب عبور فونونی و $\hbar\omega$ انرژی فونون است. در این روش تنها پراکندگی‌های الاستیک در نظر گرفته می‌شود و از برهم‌کنش‌های فونون-فونون صرف نظر می‌شود؛ همچنین فرض می‌شود که تمامی اتصالات بالستیک کاملاً بی‌درو هستند. در نتیجه تابع ضریب عبور برای مد S پراکنده شده یکنواخت، به صورت رابطه (۵) است. در این رابطه، $\omega_S(q)$ پاشندگی از مدهای گسسته S را در بیشترین کمترین مقدار خود بیان می‌کند [۹]:

$$\tau_S(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{for } \omega_S^{\min} \leq \omega \leq \omega_S^{\max} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (5)$$

برای محاسبه دقیق فاصله بین ω_S^{\min} و ω_S^{\max} را در 1 cm^{-1} انتخاب کرده‌ایم؛ در نهایت ضریب رسانش گرمایی را می‌توان

به صورت $k_{ph} = \frac{J_{ph}}{\Delta T}$ تعریف کرد. در این رابطه ΔT به

صورت $\Delta T = T_{\text{hot}} - T_{\text{cold}}$ می‌باشد. در حد پاسخ خطی ΔT

به صورت، $\Delta T \ll T \equiv \frac{(T_{\text{hot}} - T_{\text{cold}})}{2}$ است؛ با استفاده از

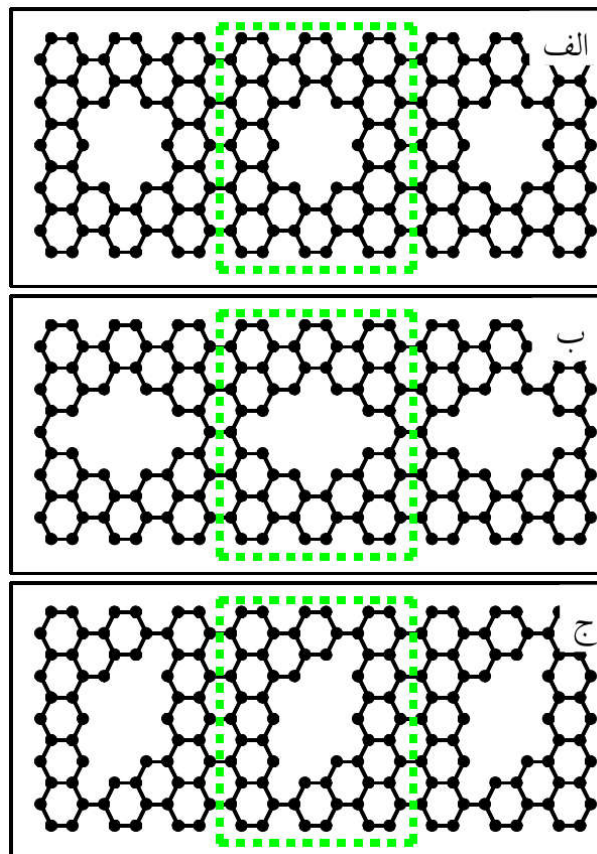
معادله شار انرژی گرمایی (J_{ph}) و با جایگذاری $x = \frac{\hbar\omega}{k_B T}$

می‌توان معادله رسانش فونونی را به صورت زیر به دست آورد [۹، ۱۹]:

$$\kappa_{ph} = \frac{k_B T}{h} \int_0^\infty dx \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \tau \left(x \frac{k_B T}{h} \right), \quad (6)$$

آرمچیری، خواص گرمایی مانند ظرفیت گرمایی فونونی، رسانش گرمایی فونونی و ضریب عبور فونونی را بررسی کنیم. لازم به ذکر است که از طریق این نقص‌های تکرارشونده حتی خواص مغناطیسی بلند برد را نیز می‌توان کنترل کرد. همچنین از آنجایی که این نقص‌ها به صورت هوشمندانه ایجاد می‌شوند و امکان ساخت ساختار تجربی آنها وجود دارد، لذا تقارن دوره‌ای در این ساختارها حفظ می‌شود و بردار موج k می‌تواند عدد کوانتومی مناسبی برای این ساختارها باشد. از طرفی طبق نظریه تابع چگالی این ساختارها پایدار هستند [۲۰، ۲۱].

در این محاسبات یک نانونوار آرمچیری $N=11$ با سه آرایش هندسی متفاوت از تهی‌جای‌ها، شبیه‌سازی شده است (شکل ۱). شکل ۱. الف دارای ۶۰ اتم در هر ابرسلول است. ساختار هندسی تهی‌جای، به صورت شش‌گوشی است که در مرکز هر ابرسلول جای گرفته است. شکل ۱. ب و ۱. ج دارای ۵۸ اتم کربن با ساختار تهی‌جای لوزی رخ می‌باشند، در تمام موارد، تعداد اتم‌های حذف شده از هر دو نوع زیرشبکه A و B برابر است. در شکل ۲ ضریب عبور گرمایی، ظرفیت گرمایی و ضریب رسانش گرمایی برای یک نانونواری آرمچیری کامل (بدون حضور تهی‌جای‌ها) مورد بررسی قرار گرفته است. همان‌طور که در شکل ۲. الف مشهود است، مدهای فونونی بیرون صفحه‌ای محدوده بسامدی کوچک‌تری را نسبت به مدهای درون صفحه‌ای به خود اختصاص داده‌اند. از محدوده بسامدهای 850 cm^{-1} به بالا، سهم این مدها در ضریب عبور گرمایی صفر می‌شود. در محدوده بسامدی کمتر از 850 cm^{-1} سهم مدهای بیرون صفحه‌ای در ضریب عبور بسیار بیشتر از سهم مدهای درون صفحه‌ای می‌باشد (شکل ۱. الف). این موضوع سبب می‌شود که در دماهای پایین که عموماً مدهای فونونی با بسامدهای کوچک‌تر به دلیل انرژی کمترشان تحریک می‌شوند، مدهای فونونی خارج صفحه‌ای سهم بیشتری داشته باشند. در شکل ۲. ب و ۲. ج همان‌طور که مشاهده می‌شود. در دماهای حدوداً زیر 50 کلون سهم مدهای بیرون صفحه‌ای در ضرایب ظرفیت گرمایی و رسانش فونونی از سهم مدهای فونونی درون صفحه‌ای بسیار بیشتر است.



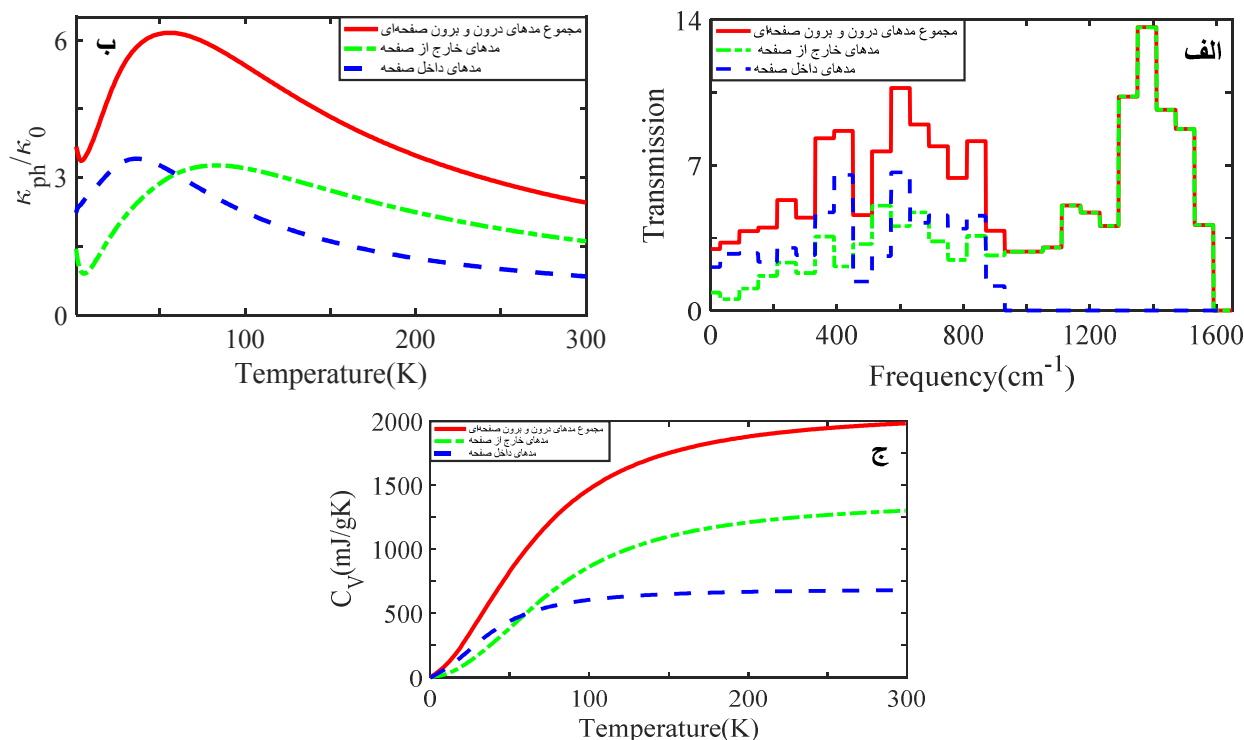
شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نانونوارهای آرمچیری دارای سه نوع تهی‌جای به همراه نمایش ابرسلول به صورت نقطه‌چین. (الف) شش ضلعی، (ب) لوزی رخ متقارن، (ج) لوزی رخ نامتقارن.

معادله (۶). با در نظر گرفتن سهم تمام مدهای فونونی مجاز، ضریب رسانش فونونی را مشخص می‌کند. در این عبارت یک نتیجه مهم این است که منحنی پراکندگی از تمام جزئیات به جزء تابع عبور مستقل است؛ این نتیجه از آنجا ناشی می‌شود که چگالی حالت‌ها در انتگرال بسامد به وسیله سرعت گروه حذف می‌شود. برای رسم نمودار رسانش فونونی از $\frac{\kappa_{ph}}{\kappa_0}$ استفاده

$$\kappa_0 \text{ می‌شود که به صورت } \kappa_0 = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3h} \text{ می‌باشد [۹].}$$

۳. نتایج و بحث

هدف ما بررسی انواع نقص‌ها و تهی‌جای‌هایی که به صورت تجربی در نانونوارهای گرافنی وجود دارد، نیست بلکه هدف ما این است که با ایجاد نقص‌های تکرارشونده در نانونوارهای



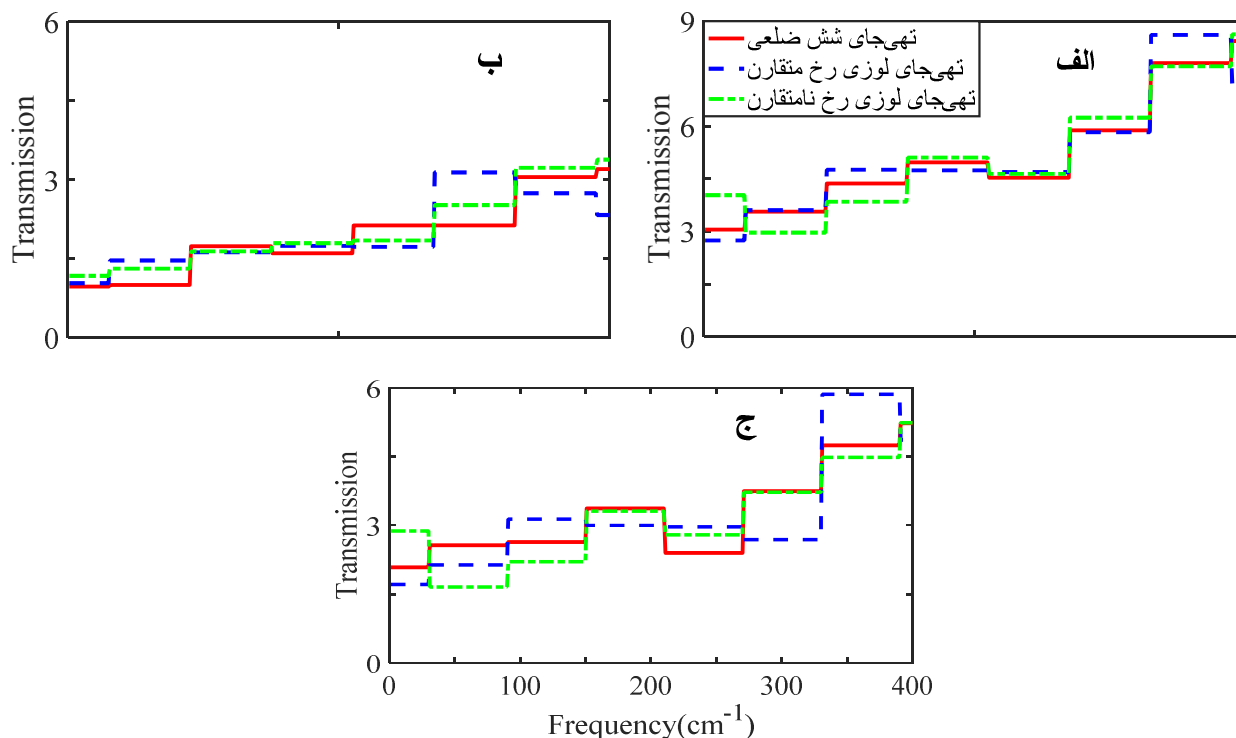
شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) خواص ترابرد گرمایی نانوآرهای آرمچیری بدون نقص. خط ممتد مربوط به مجموع مدهای درون و بیرون صفحه‌ای، خط چین مربوط به مدهای خارج از صفحه و خط - نقطه مربوط به مدهای داخل صفحه است. (الف) ضریب عبور فونونی، (ب) رسانش گرمایی فونونی، (ج) ظرفیت گرمایی.

به منظور مقایسه ضرایب رسانش گرمایی دو نوع مد فونونی، در شکل ۲. ب ضرایب رسانش گرمایی برای مدهای درون

صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای بر حسب دما رسم شده است. در دمای ۵۰ کلوین سهم رسانش گرمایی مدهای درون صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای با همدیگر برابر می‌شود، با افزایش دما سهم مدهای بیرون صفحه‌ای کاهش یافته که این موضوع به علت کوچک بودن سرعت مدهای فونونی بیرون صفحه‌ای نسبت به مدهای درون صفحه‌ای می‌باشد. نمایش ظرفیت گرمایی در حجم ثابت بر حسب دما نیز در شکل ۲. ج رسم شده است. ظرفیت حرارتی نانوآرهای آرمچیری نیز رفتاری مشابه با ضریب رسانش گرمایی برای دو نوع مد فونونی دارد. در واقع از آنجا که ظرفیت حرارتی (در مدل لاندائور) تنها تابعی از تعداد مدهای فونونی (تابع ضریب عبور) می‌باشد، لذا با تغییر ضرایب عبور فونون، ظرفیت گرمایی نیز تغییر می‌کند. همان‌طور که در شکل ۲. ج مشهود است با افزایش دما ظرفیت حرارتی به مقدار ثابت می‌رسد که تأیید کننده رفتار کلاسیکی ظرفیت حرارتی نانوآرهای در دماهای بالا می‌باشد.

به منظور بهبود کارایی قطعات ترموالکتریکی تلاش بر آن است که بدون کاهش خواص رسانایی الکترونی، ضرایب رسانش گرمایی این قطعات کاهش یابد. از آنجا که ضرایب عبور الکترونی و فونونی در حضور نقص‌ها می‌توانند رفتار متفاوتی از خود نشان دهند، در ادامه مقاله ما به بررسی اثرات نقص‌های گسترده در رسانش گرمایی می‌پردازیم. مهم‌ترین دلیل رفتار دوگانه نقص‌های ساختاری در ترابرد الکترونی و گرمایی به این مسئله معطوف می‌شود که، بر خلاف رسانش الکترونی، عمده سهم رسانش گرمایی توسط فونون‌هایی با انرژی پایین صورت می‌گیرد. همچنین از آنجا که مدهای فونونی خارج صفحه‌ای در بسامدهای پایین جمعیت متفاوتی از مدهای درون صفحه‌ای دارند، سهم هر دو نوع مد فونونی را به تفکیک مورد بررسی قرار می‌دهیم.

در شکل ۲. ب ضرایب رسانش گرمایی برای مدهای درون صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای بر حسب دما رسم شده است. در دمای ۵۰ کلوین سهم رسانش گرمایی مدهای درون صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای با همدیگر برابر می‌شود، با افزایش دما سهم مدهای بیرون صفحه‌ای کاهش یافته که این موضوع به علت کوچک بودن سرعت مدهای فونونی بیرون صفحه‌ای نسبت به مدهای درون صفحه‌ای می‌باشد. نمایش ظرفیت گرمایی در حجم ثابت بر حسب دما نیز در شکل ۲. ج رسم شده است. ظرفیت حرارتی نانوآرهای آرمچیری نیز رفتاری مشابه با ضریب رسانش گرمایی برای دو نوع مد فونونی دارد. در واقع از آنجا که ظرفیت حرارتی (در مدل لاندائور) تنها تابعی از تعداد مدهای فونونی (تابع ضریب عبور) می‌باشد، لذا با تغییر ضرایب عبور فونون، ظرفیت گرمایی نیز تغییر می‌کند. همان‌طور که در شکل ۲. ج مشهود است با افزایش دما ظرفیت حرارتی به مقدار ثابت



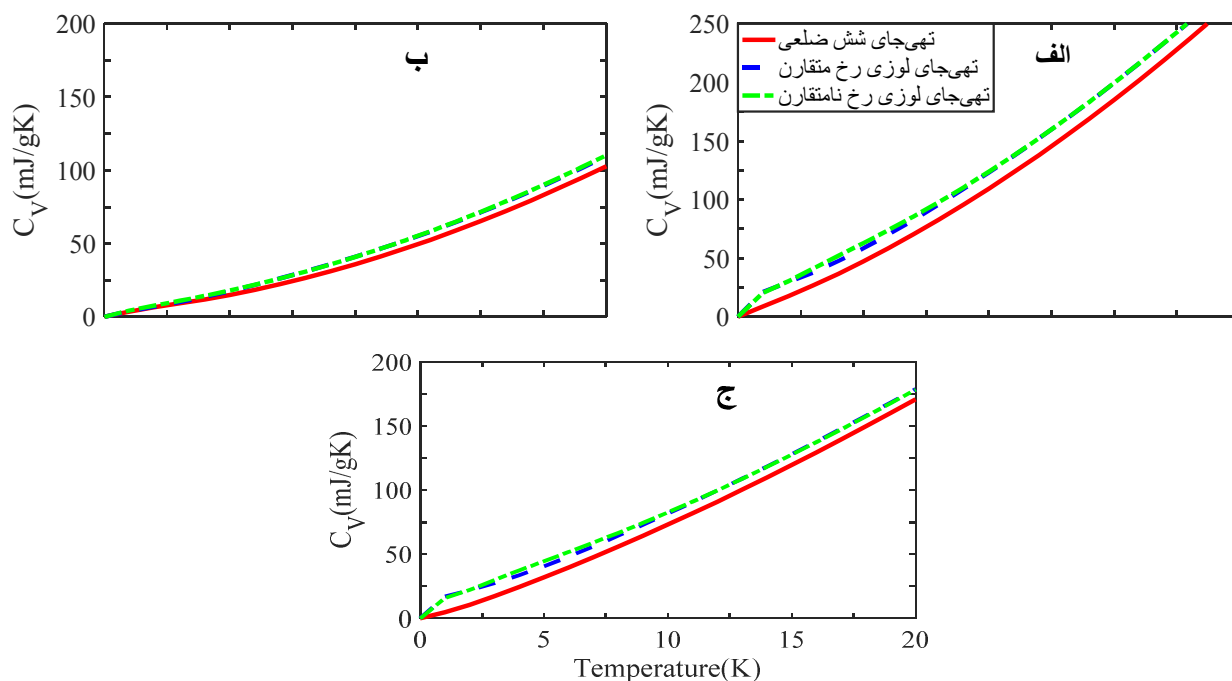
شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ضریب عبور فونونی نانونوار آرمچیری دارای نقص (در محدوده بسامد پایین). خط ممتد مربوط به تهی‌جای شش ضلعی، خط چین مربوط به تهی‌جای لوزی رخ متقارن و خط-نقطه مربوط به تهی‌جای لوزی رخ نامتقارن است. (الف) مجموع مدهای درون و بیرون صفحه‌ای، (ب) مدهای داخل صفحه، (ج) مدهای خارج از صفحه.

می‌تواند داشته باشد. این تغییرات در بازه‌های بسامدی مختلف، متفاوت بوده و رفتاری منظم و قابل پیش‌بینی ارائه نمی‌کند. همچنین برخلاف مدهای فونونی خارج صفحه‌ای، مدهای فونونی درون صفحه‌ای در بیشتر محدوده بسامدی نشان داده شده، برای هر سه نوع تهی‌جای نمایش داده شده در شکل ۱ تغییرات کمتری را نشان می‌دهد.

در ادامه مقاله به بررسی اثرات ضرایب عبور فونونی بر خواص گرمایی نانونوارها در دماهای پایین می‌پردازیم (زیر ۲۰ کلون). در اینجا نیز مشابه نانولوله‌های کربنی سهم عمده رسانش و ظرفیت گرمایی فونونی با انرژی بسیار بیشتر از انرژی گرمایی با مقدار $(\hbar\omega \gg k_B T)$ نقشی در ویژگی‌های تراپردی نانونوارها ندارند.

در شکل ۴ تغییرات دمایی ظرفیت گرمایی برای مدهای فونونی درون و بیرون صفحه‌ای در حضور سه نوع تهی‌جای گسترده (نمایش یافته در شکل ۱) رسم شده است. به منظور

در شکل ۳، ضرایب عبور فونون‌ها در دماهایی در بسامدهای کوچک‌تر نمایش داده شده است. مقایسه تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای با ساختارهای داخلی متفاوت (شش‌گوشی، لوزی رخ متقارن و لوزی رخ نامتقارن) نشان می‌دهد، که ساختار داخلی ابرسلول‌ها می‌تواند ضرایب عبور فونونی را در تمام محدوده‌های بسامدی تغییر دهد. نکته قابل توجه آنکه مدهای خارج صفحه‌ای حتی در حضور نقص‌های تهی‌جای گسترده نیز سهم بیشتری در ضرایب عبور فونونی نسبت به مدهای درون صفحه‌ای دارند. به‌ویژه در بسامدهای $(\omega < 400 \text{ cm}^{-1})$ این موضوع دیده می‌شود. از طرف دیگر مقایسه ضرایب عبور فونونی لوزی رخ متقارن و لوزی رخ نامتقارن نشان می‌دهد، نه تنها تعداد اتم‌های حذف شده می‌تواند در تغییرات ضرایب عبور فونونی مؤثر باشد، بلکه ساختار درونی تهی‌جای‌ها و سمت‌گیری و یا تقارن آنها نیز نسبت به محور نانونوار نقش بسزایی در تغییر خواص گرمایی



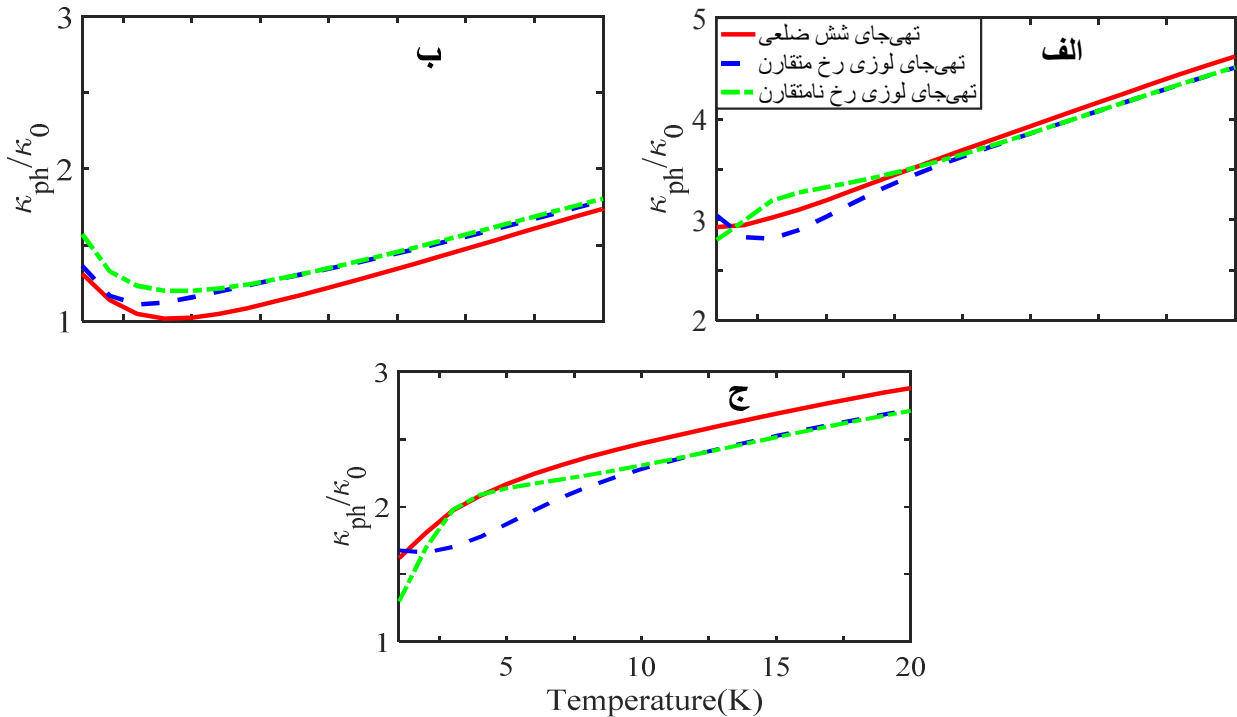
شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) ظرفیت گرمایی نانونوار آرمچیری دارای نقص در دماهای پایین. خط ممتد مربوط به تهی‌جای شش ضلعی، خط چین مربوط به تهی‌جای لوزی رخ متقارن و خط-نقطه مربوط به تهی‌جای لوزی رخ نامتقارن است. (الف) مجموع مدهای درون و بیرون صفحه‌ای، (ب) مدهای داخل صفحه، (ج) مدهای خارج از صفحه.

حضور تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای تغییر نمی‌کند. نمودار ۴. الف نشان می‌دهد، که ظرفیت گرمایی در نقص تهی‌جای به شکل شش ضلعی کاهش بیشتری نسبت به بقیه نقص‌ها از خود نشان می‌دهد. مقایسه سهم مدهای درون صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای با توجه به شکل ۴. ب و ۴. ج نشان می‌دهد، سهم عمده ظرفیت گرمایی حتی در حضور تهی‌جای‌ها نیز متعلق به مدهای فونونی درون صفحه‌ای می‌باشد. نکته جالب توجه آنکه مدهای فونونی بیرون صفحه‌ای تغییرات بیشتری نسبت به حضور تهی‌جای‌های مختلف در مقایسه با مدهای درون صفحه‌ای در دماهای پایین از خود نشان می‌دهند (شکل ۴. ج). همچنین برای هر دو نوع مد فونونی، جهت‌گیری ساختار هندسی تهی‌جای‌ها نسبت به محور نانونوار، تأثیر محسوسی در تغییر ظرفیت گرمایی ندارد.

رفتار مدهای فونونی درون صفحه‌ای و بیرون صفحه‌ای برحسب دما، برای نقص‌های مختلف متفاوت می‌باشد. به عنوان مثال برای تهی‌جای به شکل شش ضلعی، مدهای بیرون صفحه‌ای بیشترین و مدهای درون صفحه‌ای کمترین نقش را در

مقایسه ظرفیت گرمایی، از آنجا که ابرسلول‌های مختلف تعداد اتم‌های متفاوتی دارند، ظرفیت گرمایی محاسبه شده، به تعداد اتم‌های ابرسلول تقسیم شده است. اما به صورت کلی می‌توان گفت با کاهش تعداد اتم‌ها در ابرسلول از آنجا که سهم مدهای فونونی کاهش می‌یابد، ویژگی‌های تراپرد فونونی و ظرفیت گرمایی مربوط به فونون‌ها می‌تواند کاهش بیابد؛ اما به دلیل وابستگی ویژگی‌های تراپردی به جزییات اتمی و بلوری ساختارها، رفتار ویژگی‌های تراپردی در دماهای متفاوت یکسان نخواهد بود. به عنوان مثال، ضرایب عبور فونونی در برخی بسامدها کاهش و در برخی دیگر افزایش می‌یابد (شکل ۳). این موضوع می‌تواند تأثیرات مختلفی به‌ویژه در دماهای پایین، که مدهای فونونی کوچک و در واقع کمتری درگیر هستند ایجاد نماید.

نتایج محاسبات ما نشان می‌دهد حتی در حضور تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای نیز، منحنی ظرفیت گرمایی برحسب دما رفتاری سهمی‌گون نشان می‌دهد. در نتیجه رفتار کیفی ظرفیت گرمایی نانونوارهای آرمچیری گرافن در



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) رسانش گرمایی فونونی نانونوار آرمچیری دارای نقص در دماهای پایین. خط ممتد مربوط به تهی‌جای شش ضلعی، خط چین مربوط به تهی‌جای لوزی رخ متقارن و خط - نقطه مربوط به تهی‌جای لوزی رخ نامتقارن است. (الف) مجموع مدهای درون و بیرون صفحه‌ای، (ب) مدهای داخل صفحه، (ج) مدهای خارج از صفحه.

تقارن تهی‌جای‌ها حساس‌تر بوده و تغییرات شدیدتری را نشان می‌دهد. علاوه بر این به دلیل جمعیت فونونی بیشتر مدهای خارج از صفحه‌ای در بسامدهای پایین، در دماهای پایین ضرایب رسانش فونونی مدهای خارج از صفحه‌ای نیز بزرگ‌تر است.

۴. نتیجه‌گیری

به‌طور خلاصه با استفاده از روش ثابت نیرو و روش لانداور به محاسبه ضرایب عبور، ظرفیت گرمایی و ضرایب رسانش فونونی نانونوارهای آرمچیری گرافن در حضور نقص‌های تهی‌جای گسترده با ساختار دوره‌ای پرداخته‌ایم. در این بررسی که در محدوده دماهای پایین در حدود ($T < 20\text{K}$) صورت گرفته است، نقص‌ها به صورت هوشمندانه و با توجه به مهندسی نقص‌ها به ساختار نانونوارهای آرمچیری اضافه شده‌اند، که بتوانند خواص گرمایی مانند ظرفیت گرمایی، رسانش فونونی و ضریب عبور فونونی را بهینه کنند. نقش

ترابرد فونونی ایفا می‌کنند (مقایسه شکل‌های ۵. ب و ۵. ج). از طرف دیگر ضرایب رسانش الکترونی نیز نسبت به تقارن و هندسه تقارن‌ها به شدت تغییر می‌کند [۲۲]. لذا با بهره‌گیری از این نتایج می‌توان ضرایب ترمودینامیکی را با مهندسی تهی‌جای‌ها بهینه کرد.

در شکل ۵، ضرایب رسانش فونونی برحسب دما در محدوده دمای پایین، برای نانونوارهای آرمچیری دارای نقص به تفکیک، برای مدهای درون و بیرون صفحه‌ای رسم شده است. به دلیل پهن‌شدگی ناشی از تابع توزیع بوز-اینشتین، تابع رسانش بر حسب دما از خود رفتاری پله‌ای نشان نمی‌دهد. به صورت کلی، ضریب رسانش فونونی برای مدهای درون صفحه‌ای و مدهای بیرون صفحه‌ای رفتاری سهمی‌گون بر حسب دما مشاهده می‌شود. ضریب رسانش فونونی نسبت به ظرفیت گرمایی تغییرات شدیدتری را نسبت به حضور تهی‌جای‌ها و ساختار هندسی آنها نشان می‌دهد. همچنین برخلاف ظرفیت گرمایی، ضرایب رسانش فونونی نسبت به

نوع مد فونونی در حضور تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای در ظرفیت گرمایی و ضریب رسانش فونونی نشان می‌دهد. با توجه به اینکه تغییراتی که نقش‌های گسترده با ساختار دوره‌ای در خواص گرمایی نانونوارهای آرمچیری ایجاد کرده‌اند، نتیجه آن این می‌شود که ایجاد نقص‌های گسترده و تکرار شونده به صورت هوشمندانه در نانونوارهای آرمچیری می‌تواند این ساختار را به گزینه مناسبی برای کاربرد در بهینه‌سازی و طراحی نانو قطعات الکترونیکی و ترموالکتریکی تبدیل کند.

مدهای فونونی درون و بیرون صفحه‌ای به تفکیک مورد بررسی قرار گرفته است، محاسبات نشان می‌دهد که در حضور تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای، نمودار پاشندگی فونونی و در نتیجه آن ضرایب عبور فونونی در تمام محدوده بسامدی به طور محسوسی تغییر می‌کند. این تغییرات برای محدوده بسامدی پایین‌تر، کمتر از 400 cm^{-1} شدیدتر می‌باشد؛ از طرفی در حضور تهی‌جای‌های گسترده با ساختار دوره‌ای، در نمودار ضریب عبور فونونی شاهد افزایش در محدوده بسامدی $(0 < \omega < 400 \text{ cm}^{-1})$ هستیم. نتایج ما، نقش متفاوتی را برای دو

مراجع

1. A A Balandin, *Nat. mater* **10** 8 (2011) 569.
2. H Zhang, L Geunsik, and C Kyeongjae, *Phys. Rev. B* **84** 11 (2011) 115460.
3. P Xiao-Fang, *et al.*, *Carbon* **100** (2016) 36.
4. H Karamitaheri, *et al.*, *J. Appl. Phys.* **111** 5 (2012) 054501.
5. B Liu, *et al.*, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47** 16 (2014) 165301.
6. M Yarifard, J Davoodi, and H Rafii-Tabar, *Comput. Mater. Sci.* **111** (2016) 247.
7. Z X Xie, C Ke-Qiu, and D Wenhui, *J. Phys. Condens. Matter* **23** 31 (2011) 315302.
8. ح تشکر، ف کنجوری و ع نجاتی، مجله پژوهش فیزیک ایران **۱۴** (۱۳۹۳) ۲۲۱.
8. H Tashakori, F Kanjouri, and A Nejati, *Iranian Journal of Physics Research* **14** 4 (2015) 221.
9. J Zimmermann, P Pasquale, and C Gianarelio, *Phys. Rev. B* **78** 4 (2008) 045410.
10. H Karamitaheri, *et al.*, *IEEE. Trans. on Electron Devices* **60** 7 (2013) 2142.
11. H Sadeghi, S Sangtarash, and J L Colin, *Sci. Reports* **5** (2015) 9514.
۱۲. ج داودی و م تشه، مجله پژوهش فیزیک ایران **۱۳** (۱۳۹۲) ۴۵.
12. J Davoodi and M R Tasheh, *Iranian Journal of Physics Research* **13** 1 (2015) 45.
13. Lan, Jinghua, *et al.*, *Phys. Rev. B* **79** 11 (2009) 115401.
14. K Zberekci, *et al.*, *Phys. Rev. B* **88** 11 (2013) 115404.
15. S K Jaćimovski, *et al.*, *Superlattices and Microstructures* **88** (2015) 330.
16. J J Yeo, L Zishun, and N Teng Yong, *Nanotechnol* **23** 38 (2012) 385702.
17. L Rosales, *et al.*, *Phys. Rev. B* **80** 7 (2009) 073402.
18. R Saito S, G Dresselhaus, and M S Dresselhaus, press, "Physical properties of carbon nanotubes", London, Imperial college (1998).
19. Z Ferdows, R Lake, *Appl. Phys. Lett.* **97** 21 (2010) 212102.
20. H Sevinçli, M Topsakal, and S Ciraci, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 245402.
21. L Rosales, M Pacheco, Z Barticevic, A Latgé, and P A Orellana, *Nanotechnol* **20** (2009) 095705.
22. C Pan, J He, D Yang, and K Chen, *J. Nanomaterials.* **2016** (2016) 6093673.