

ماهنامه علمى پژوهشى

دسی مکانیک مدر س

mme.modares.ac.ir

## هدایت حرارتی نانو نوار گرافن متخلخل استفاده شده در عملیات آشکارسازی جرم

صادق صادق زاده<sup>1\*</sup>، نوید رضاپور<sup>2</sup>

1 - استادیار، گروه فناوری نانو، دانشکده فناوریهای نوین، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

2- دانشجوی کارشناسی ارشد، رشته فناوری نانو، دانشکده فناوریهای نوین، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

\* تھران، صندوق پستى 163-1676، sadeghzadeh@iust.ac.ir

چکیدہ	اطلاعات مقاله
در این مقاله، بازدهی هدایت حرارتی نانونوار گرافنی دارای نقص در برابر حضور نانوذرات افزوده در عملیات آشکارسازی جرم های کوچک با	مقاله پژوهشی کامل بند 22 م 1204
استفاده از دینامیک مولکولی غیرتعادلی معکوس مورد مطالعه قرار گرفته است.  مدیریت هدایت حرارتی این ساختار به دلیل تلفات القایی در	دریافت: 25 مهر 1394 بذیدش: 04 دی. 1394
هدایت الکتریکی بسیار موردبحث بوده و هر راهی که بتواند هدایت حرارتی گرافن را تحت مدیریت قرار دهد بسیار کارآمد خواهد بود. در این	پدیرس. ۲۰۵۲ کی ۲۰۷۹ ارائه در سایت: 03 بهمن 1394
مقاله دیده شده که حین انجام عملیات آشکارسازی، در اثر ایجاد تخلخلهایی در سطح نانونوار و یا افزوده شدن نانوذرات خارجی، خواص حرارتی	کلید واژگان:
گرافن تغییر قابل توجهی مینماید که این مساله باید در کالیبراسیون سنسورهای جرمی بر مبنای گرافن مدنظر قرار گیرد. بطور خلاصه،	گرافن
شبیهسازیها نشان داده که ضریب هدایت حرارتی گرافن با افزایش حضور نانو ذرات آهن کاهش مییابد. در لبههای نوار گرافنی مقدار ضریب	ضریب هدایت حرارتی
هدایت حرارتی از بقیهی نقاط بیشتر است که نشان میدهد مکان جای خالی و نانوذره بر ضریب هدایت حرارتی اثرگذار است. بهعنوان نتیجهای	ديناميک مولکولی
جالبتوجه، مقدار ضریب هدایت حرارتی حالت جای خالی بیشتر از حالت نانوذره همراه با جای خالی بوده و افزایش قطر حفره، اثر مستقیم بر	جای خالی
کاهش مقدار ضریب هدایت حرارتی داشته بهطوری که با افزایش قطر حفره از 0.5 نانومتر به 4.4 نانومتر در یک نوار گرافن با عرض 5 نانومتر،	نانو افزودنی فلزی
مقدار ضریب هدایت حرارتی از W/mK 67 به W/mK 1.43 میرسد.	

## **Thermal Conductivity of Porous Graphene Nanoribbon Implemented in Mass Detection Operations**

### Sadegh Sadeghzadeh<sup>\*</sup>, Navid Rezapour

Mechanical Engineering Department, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran. \*P.O.B. 5517910179 Tehran, Iran, maligoodarz@srttu.edu

#### **ARTICLE INFORMATION**

ABSTRACT

Original Research Paper Received 15 October 2015 Accepted 25 December 2015 Available Online 23 January 2016

مكانىڭ

Keywords: Graphene Thermal conductivity coefficient Molecular Dynamics Defect metallic nanoparticles additives mass detection operations is studied via the Reverse Non Equilibrium Molecular Dynamics (RNEMD) method. Thermal conductivity management of this structure is challenging because of imposed losses in electrical conductivity and any procedure that could manage the thermal conductivity of graphene will be useful. In this paper it is observed that on the mass detection operation, due to the porosity generation in the nano ribbon surface or even creation of external nanoparticles, thermal properties of graphene change considerably. This should be noted in calibration of graphene based mass sensors. In summary, Results show that the graphene's thermal conductivity would reduce by increasing the concentration of nanoparticles and thermal conductivity of graphene is higher when porosities and impurities are at the edges. This indicates that the location of vacancies and nanoparticles, with respect to the porosities, addition of nanoparticles decreases the thermal conductivity more and more. By

In this paper, efficiency of defected graphene nano ribbon incorporated with additional nanoparticles on

حجم و غلظت و جابهجایی و فرکانس و سرعت و الکتریسیته و نیروهای	1 - مقدمه
مغناطیسی و دما شناسایی میشوند. نوع متغیرهایی که با نانو حسگر	نانو حسگرها ازلحاظ بعد هندسی به 8 حالت نانولوله، نانو فیبر، نانوسیم، نانو
شناسایی میشود به شش گروه تقسیم <sub>ا</sub> بندی میشود: متغیرهای مکانیکی،	حفره، نانوکاوشگر، نانوذره، نقاط کوانتومی و نانوفیلم تقسیم میشوند. اساس
الکتریکی، نوری، شیمیایی، حرارتی و مغناطیسی. محدودیت نانو حسگر در	نانو حسگرها به دست آوردن اطلاعات در ابعاد اتمی و انتقال آن به حالت
اندازه گیری رسانایی الکتریکی در نیمرساناها یک بحث جدی بوده و بسیاری	ماکروسکوپیک برای آنالیز دادههاست. مکانیسم تشخیص از طریق دقت در
از کارهای ارائهشده تاکنون از تشخیص گازها باانرژی جذب پایین و	شناسایی اتمها یا مولکولهای خاصی است که بهوسیلهی اندازهگیری تغییر

Please cite this article using: S. Sadeghzadeh, N. Rezapour, Thermal Conductivity of Porous Graphene Nanoribbon Implemented in Mass Detection Operations, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 16, No. 1, pp. 345-352, 2016 (in Persian)

غلظتهای متفاوت گاز ناتوان بوده و همچنین وابستگی حساسیت نانو حسگرهای نیمرسانا در شرایط محیطی یکسان متفاوت است.

در میان مواد نانو، نانولولههای کربنی و صفحات گرافنی کاربردی گسترده در نانو حسگرها دارند زیرا دارای خواص مکانیکی و الکتریکی ویژهای هستند و دامنهی فرکانسی و حسگری بالا داشته و جرم کمی نیز دارند و ازاینرو تعداد کمی از اتمها و مولکولهای خارجی اطراف نانو حسگر، میتواند تغییر فراوانی را در فرکانسهای تشدید و سرعتهای موجی آن ایجاد کند. عموما تقسیم بندی طراحی نانو تشدیدکنندهها به دو روش است: ارتعاشی (برای فرکانس تشدید) و انتشار موجی (برای سرعتهای موجی)؛ که اساس آنها شناسایی تغییر فرکانس تشدید یا سرعتهای موجی در نانو حسگرهاست که ناشی از اتصال اتمهای خارجی و مولکولها با سطح حسگر است. چالش اصلی شناسایی تغییر قابل توجه در فرکانس های تشدید یا سرعت موج در وضوح بالاست. با توجه به کاربرد گسترده گرافن در تشخیص و آشکارسازی جرمهای مختلف، به نظر می رسد که حین انجام عملیات آشکارسازی، خواص حرارتی گرافن تغییر نماید؛ بنابراین این مقاله سعی نموده است نشان دهد که این تغییر قابل توجه بوده و در کالیبراسیون سنسورهای جرمی بر مبنای گرافن باید مدنظر قرار گیرد. شکل 1، یک نمونه صفحه گرافنی را نشان میدهد که در آن ذراتی جهت شناسایی بر روی صفحه قرار دارند و این صفحه دارای یک نقص ذاتی برآمده از مشکلات فرآیند ساخت نیز هست. اینکه چنین نقصی چه ایراد جدیای به پاسخ نهایی سیستم وارد مینماید و همچنین اثر وجود نانوذرهها برای شناسایی چه تغییراتی بر خواص خوب و قابل اشاره نوار گرافنی ایجاد میکنند، سؤالاتی است که در این مقاله به آن پاسخ داده می شود. در شکل 1، نقاط کناری ثابت شدهاند تا شرایط مرزی گیردار در مرزها را به نمایش بگذارند.

از طرفی دیگر، تلاشهای تجربی در مقیاس نانو گران بوده و شبیهسازی دینامیک مولکولی (MD) و روشهای مکانیکهای پیوسته در حسگرهای نانو تشدید استفاده میشود که دارای امتیازاتی است. شبیهسازی MD در مقایسه با آزمایشهای تجربی، جزئیات بیشتری را در واکنش بیناتمی و مولکولهای پیچیده ارائه میدهد. محاسبات مدلهای پیوسته، گران نیست و فرمولاسیون آن ساده است و به آن به صورت فیزیکی باید نگاه کرد. محدودیت ذاتی مدلهای پیوسته، حذف ساختارهای گسسته در مقیاس اتمی است و نتایج قابل اعتمادی در آنالیزهای خاص نمی دهد.



گرافن تا سال 2004 در شرایط معمول محیطی ناپایدار فرض می شد تا اینکه برای اولین بار آندره گایم و کنستانتین نوسلوف از وجود گرافن پرده برداشته و جایزهی نوبل سال 2010 را از آن خود کردند [2,1].

خواص حرارتی، الکترونیکی و مکانیکی فوقالعادهای در گرافن مشاهدهشده و بنابراین گرایش به این ماده افزایش یافته تا حرارت که بهعنوان توان اتلافي، مانع رشد صنعت الكترونيك است رفع شود. على رغم پیشرفتهای چشمگیر بشر در صنعت الکترونیک، هنوز هم جستجو برای مواد جدید هادی حرارت در جریان بوده و بیشترین تلاشها برای ساخت و به کارگیری وسایل گرافنی و خصوصا ترانزیستورهای اثر میدانی گرافنی<sup>1</sup> صورت می گیرد [3]. با توجه به خواص الکتریکی و گرمایی گرافن، می توان کاربردهای بالقوهای را در وسایل نانوالکترونیکی و بهطورکلی در مدیریت گرمایی برای آن متصور بود. بر اساس نتایج منتشرشده تاکنون، مقدار هدایت حرارتی گرافن در محدوده بسیار بالایی گزارششده بهطوریکه با استفاده از طيفسنج رامان مقدار ضريب هدايت حرارتي بين W/mK و2500-5300 W/mK اندازه گیری شده است [4,2]. برای رسیدن به یک سیستم مطلوب بر پایه گرافن میتوان تغییراتی را در ساختار اولیه طراحی شدهی این سامانهها ایجاد نموده و سیستم گرافنی را برای رسیدن به محدوده دلخواهی از ضریب هدایت حرارتی پیش طراحی نمود. بهعنوان نمونه، ترکیب توأمان نانو ذرات فلزی با گرافن منجر به خواص انتخاب گری و درنتیجه افزایش حساسیت حسگرهای گازی گرافنی میشود [5]. علاوه بر این، حفرات گرافنی نیز آیندهی خوبی در کاربردهای نانوالکترونیک و مخصوصا در مواد نیمههادی داشته و به کارگیری آنها در مدیریت اتلاف حرارت اهمیت به خصوصی در تلاشهای تحقیقاتی تئوری و آزمایشگاهی دارد [6]؛ همچنین، عیوب مختلف مانند جای خالی نقطهای و ناخالصی و نابه جایی میتوانند حین سنتز تغییر کرده و اثرات قابل توجهی بر خواص گرافن بگذارند؛ به طوری که بتوان خواص دلخواهی در حين ساخت ايجاد نموده و در جريان طراحي نانومواد به كار برد [7]. با توجه به کارهای پیشین صورت گرفته میتوان گفت، عیوب بر خواص فیزیکی و شیمیایی اثر گذاشته و پاسخ الکتریکی گرافن دارای عیب به مولکولهای گاز No2 بهتر از حالت بدون عیب است [8]. همچنین، افزایش چگالی جای خالی در گرافن می تواند ضریب هدایت حرارتی را به طور قابل توجهی کاهش دهد [9]. با توجه به اهمیت افزودن نانو ذرات بر بسترهای گرافنی و همچنین وجود حفرات در آنها، در این مقاله سعی شده است تا اثرات حضور توأمان هردوی این اثرات بر مقدار ضریب هدایت حرارتی مطالعه شود. همچنین اثرات اندازههای مختلف حفرات و نانوذرههای فلزی بر هدایت حرارتی مورد ارزیابی قرار می گیرد. در این روش، از MD برای شبیه سازی و طراحی سیستم استفادهشده و در مقایسه با کارهای پیشین صحه گذاری شده و سپس اثرات مختلف با این روش مطالعه و تحلیل شدهاند. می توان این روش را برای

بررسی بسیاری از سامانههای فیزیکی با موفقیت به کار برد.

2- مدلسازي و شبيه سازي مسأله

شکل 2 یک نمونه کلی از سیستم تک لایه گرافن (به طول nm 12 و عرض 5nm ) دارای حفره و یک نانوذره فلزی بر روی یکی از حفرات آن را نشان میدهد. طوری که در ابتدا حفراتی بهصورت رینگ بر روی تک لایهی گرافن قرار دادهشده و سپس نانو ذرات آهن بر روی این حفرات قرار گرفته است. روشهای مختلفی برای محاسبهی ضریب هدایت حرارتی معرفی شدهاند که

1- Graphene Field Effect Transistors (GFET)

مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دورہ 16، شمارہ 1



**شکل 2**. نانوخوشه آهن بر روی تک لایهی گرافن عیب دار

از آن جمله می توان ترموستاتی مستقیم، گرین کوبو و دینامیک مولکولی غیر تعادلی معکوس را نام برد.

در شبیهسازی دینامیک مولکولی غیر تعادلی معکوس، از نرمافزار شبیهساز بزرگمقیاس اتمی مولکولی لمپس<sup>1</sup> استفاده شده است [10]. با توجه به فیزیک مسئله، دو طرف تک لایه در جهت شار حرارت ثابت شده و سپس به نوار کوچکی از کناره سمت چپ و راست به ترتیب مقدار مشخصی از گرما کاسته و افزوده میشود تا بهوسیلهی گرادیان دمایی ایجادشده و قانون فوریه بتوان ضریب هدایت حرارتی را محاسبه نمود. شرایط مرزی در جهت شار حرارت بهصورت مرزی دورهای بوده بهطوری که ذرات در سراسر مرز در تعامل اند و آنها میتوانند از یک سر جعبه وارد و از سر دیگر خارج شوند.

اکثر بررسیهای صورت گرفته برای محاسبهی ضریب هدایت حرارتی گرافن براساس پتانسیل ترسف شبیهسازی شده، اما در مطالعهی حاضر با استفاده از روش برنر این مقدار برای لبههای زیگزاگ بهدستآمده است. بهعنوان میدان پتانسیل موردقبول، از واکنش تجربی بینمولکولی بهروز شده پیوند ی<sup>2</sup> آیربو استفادهشده است [11]. انرژی پتانسیل اتمهای کربن کووالانسی پیوندی از رابطه (1) به دست میآید.

$$E_{\rm GNR} = \sum_{i} \sum_{j \in i} \left[ V^R(r_{ij}) - b_{ij} V^A(r_{ij}) \right]$$
(1)

در رابطهی (1)،  $r_{ij}$  فاصلهی بین اتمهای i و j و i و  $V^R$  و  $V^R$  و  $V^R$  و اکنشهای جفتی هستند که به ترتیب نمایانگر دافعه و جاذبه ی بیناتمی بوده و j پارامتر پیوندی، وابسته به واکنشهای چند گانه بین اتمهای i و j است. این پتانسیل، منجر به شکستن پیوند کوالانسی شده و با تغییراتی در هیبریدیزاسیون اوربیتال های اتمی درون پتانسیل کلاسیک همراه می شود. رابطهی (2) برای بیان انرژی کلی گرافن به همراه ناخالصی Fe قابل بیان

$$E_{\text{total}} = E_{\text{GNR}} + E_{\text{Fe}} + E_{\text{LJ}}$$
(2)

پتانسیل بین لایه ای آهن و کربن از پتانسیل لناردجونز<sup>5</sup> توصیف شده در رابطهی (4) استفاده می شود [13].

$$E_{LJ} = \mathbf{4}\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$
(4)

که در آن  $\mathcal{F}$  عمق چاه انرژی و  $\sigma$ ، فاصلهی تعادلی ضرایب مورداستفاده در پتانسیل اند. جدول(1) برای محاسبهی پارامترهای واکنشی پتانسیل لناردجونز به کار می رود.

پارامترهای لناردجونز واکنشهای بین آهن و کربن از قوانین اختلاط لورنتس - برتوله <sup>6</sup> محاسبه میشوند که از روابط (5) قابل محاسبهاند [11].  $\sigma_{\rm C-Fe} = \frac{\sigma_{\rm C-C} + \sigma_{\rm Fe-Fe}}{2}, \quad \varepsilon_{\rm C-Fe} = \sqrt{\varepsilon_{\rm C-C} \times \varepsilon_{\rm Fe-Fe}}$ (5) با استفاده از جدول (1) و روابط (5)، پارامترهای واکنشی مربوطه برابر  $\sigma_{\rm C-Fe} = 2.9635$  nm و  $\varepsilon_{\rm C-Fe} = 0.0409 \, eV$  محاسبه شده و مورداستفاده قرار گرفتهاند.

#### 1-2- روش شبيهسازى

مطابق شکل 3، مدل نانونوار گرافنی به 20 ناحیهی مساوی در جهت افقی تقسیم میشود. اولین بخش به ناحیهی سرد و آخرین بخش به ناحیهی گرم تعلق دارد. با اعمال حرارت به بخش گرم، انرژی جنبشی بهطور مصنوعی از ناحیهی گرم به ناحیهی سرد منتقل میگردد؛ بنابراین در حالت تعادل، شار حرارتی از طریق تبادل انرژی بین نواحی گرم و سرد به تعادل میرسد [9].

برای بررسی اثر نانو ذرات فلزی، یک عیب در فاصله *Lx/*6 از ابتدای نانو نوار گرافنی ایجاد کرده و در بالای آن یک خوشه آهن مستقر شده تا اثر ناخالصی و عیب، بصورت توأمان در ضریب هدایت حرارتی تک لایه ینانو نوار گرافنی بررسی شود. در مرحله ی بعد این عیب و ناخالصی در فواصل تعیین شده قرار داده شده تا اثر مکان عیب بر آن مشخص گردد.

روش ورله سرعتی<sup>7</sup> بهمنظور حل دینامیک معادلات حرکت بهکاررفته

است[13]. گام زمانی fs بوده و  $0.5 ext{ fs}$  گام برای زمان استراحت استفاده

**جدول 1** پارامترهای واکنشی بهکاررفته در پتانسیل معادل لنارد-جونز

Table 1 Interfacial parameters of equivalent Lenard-Jones potential

جفت مولكولي	σ (Å)	ε (eV)
Fe-Fe[14]	2. 517	0. 70033
C-C [11]	3.41	0. 00239

4- Atomic electron density

5- Lennard-Jones potential (LJ)

6- Lorentz-Berthelot (L-B) mixing rule

7- Velocity-Verlet integrator

347

$$E_{\text{GNR}} \text{ is constructed in the set of the set of$$

1- Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) 2- Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO)

3- Embedded atom method (EAM)

مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دورہ 16، شمارہ 1

است.



**Fig. 3** The first and the last slabs are considered as cold and hot regions, respectively. After applying heat flux onto the hot region and subtracting that heat exactly from cold region, temperature profile of middle regions (slabs 2 to 19) are calculated شکل **3**. بخش 1 ناحیهی سرد و بخش 20 ناحیهی گرم و گرفتن همان شار از ناحیهی سرد، پروفیل

دمایی در نواحی میانی (2تا 19 ) محاسبه میشود. دمایی در نواحی میانی (2تا 19 ) محاسبه میشود.

> شده تا سیستم تحت هنگرد کانونی متعادل شود. پسازآن ترموستات نوز -هوور<sup>1</sup> با هنگرد میکرو کانونی به کاررفته تا انرژی ثابت شود. زمان شبیهسازی 20ns و اجرای شبیهسازی 10<sup>7</sup>×4 گام است.

## 2-2- محاسبات ضریب هدایت حرارتی در حالت ماکروسکوپی، ضریب هدایت حرارتی (k) طبق قانون فوریه، از رابطهی (6) محاسبه می شود.

$$k = \frac{J}{\mathbf{2}A \cdot \Delta T} \tag{6}$$

که A ناحیهی سطح مقطع گرافن بوده و ضخامت لایهی گرافن را به طور پیش فرض A 3.35 در نظر می گیریم.  $\Delta T$  گرادیان دمایی در جهت طولی است. شار حرارت، جریان حرارت بر واحد سطح بوده که واحد آن ( $W/m^2$ ) است. به منظور تحمیل شار گرمایی و محاسبه یپروفیل گرمایی، جعبه ی شبیه سازی به N بخش در جهت x تقسیم می شود. بخش ها طوری انتخاب می شوند که ضخامت و حجم یکسانی داشته باشند. دمای جنبش محلی لحظه ای  $T_k$  در بخش k ام از رابطه ی(7) قابل محاسبه است.

$$\frac{3}{2}n_k k_B T_k (slab) = \sum_{i\in k}^{nk} m_i v_i^2$$
<sup>(7)</sup>

که در آن،  $n_k$  برابر با تعداد اتمها،  $k_B$  ثابت بولتزمن، m جرمی از اتم

مختلف (1.2 nm, 2 nm, 2.7 nm, 3.5 nm, 4.2 nm) گذاشته شده و نتایج بهدستآمده با [15] مقایسه شده است. در [17] مقدار ضریب هدایت حرارتی برای نوار گرافنی با طول 10 نانومتر و عرض 2.1 نانومتر 102.07 W/mK گزارش شده است. ضریب هدایت حرارتی وابسته به طول بوده که علت آن پراکندگی فونون آکوستیک است. برای مثال این مقدار برای طول دو برابر در مرجع ذکرشده برابر با 140 W/mK است. مقادیر بزرگتری نیز برای آن گزارششده که اساسا به طول گرافن وابسته است. البته پتانسیل مورداستفاده بین اتمهای کربن، شرایط مرزی مختلف در جهت انتقال حرارت و روشهای ترموستاتی مختلف در محاسبهی ضریب هدایت حرارتی، منجر به اختلاف نتایج شده و بر مقادیر محاسبه شده مؤثرند. مقادیر بسیار بزرگی بین 3000 تا W/mK (سایز میکرومتر) در [18] گزارششده اما طول گرافن (12nm) موردمطالعه در این کار بسیار کوتاهتر از پویش آزاد میانگین فونونی فوقالعاده بلند در مواد کربن تک اتمی (در حدود 1μm) است. فونون با طولموجی بزرگتر از دو برابر اندازهی شعاع قطع شبیهسازی، منجر به کاهش ضریب هدایت حرارتی میشود. شکل 4 مقایسهی تغییرات دما در نواحی میانی هر نانونوار و اثر طولهای مختلف بر آن را نشان میدهد.

مقدار ضریب هدایت حرارتی برای طول 20 نانومتر در [19] برای گرافن با آرایش زیگزاگ 92.3W/mK گزارش شده است. همچنین برای طول 12 نانومتر در [15] برابر با W/mK ا12 اندازه گیری شده است. در [20] منحنی برای طول های مختلف نانونوار گرافن ارائه شده است. شکل 5، مقایسه بین نتایج کار حاضر و مراجع مورداشاره برای تغییرات ضریب هدایت حرارتی برحسب طول های مختلف نانونوار را نشان می دهد. همان گونه که ملاحظه می شود، تطابق بسیار خوبی بین نتایج دیده می شود. شکل 6 مقایسه ی تغییرات دما در نواحی میانی و اثر موقعیت های مختلف حفره را نشان می دهد. شکل 7 مقایسه تغییرات ضریب هدایت حرارتی بر حسب موقعیت های مختلف حفره در جهت x را نشان می دهد.

که در آن،  $n_k$  برابر با تعداد آنمها،  $\kappa_B$  کابت بولترمن، m جرمی آر آد $v_i$  کربن و  $v_i$  سرعت i امین آتم است [16,15,9].

3- بحث و نتیجه گیری 1-3- صحت سنجی

برای اطمینان از صحت کار ارائهشده، ضریب هدایت حرارتی برای نانونوار گرافن زیگزاگ بدون عیب با نتایج ارائهشده در [9] و [16] مقایسه شده است؛ همچنین در مرحلهی بعد عیوبی روی نانونوار گرافن معلق در مناطق

1- Nose-hoover thermostat

مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دورہ 16، شمارہ 1

95

90

85

80

75

<sub>K</sub> (W/mK)



70 1 1.5 2 2.5 3 3.5 4 4.5  $X_{\text{Defect}}(\text{ nm})$ 

**Fig. 7** Effect of defect location on the thermal conductivity of suspended graphene nano ribbon

شكل 7. نمودار اثر مكان عيب بر ضريب هدايت حرارتي نانونوار گرافن معلق

سامانههای گرافنی بهطور گسترده استفاده شود.

بهعنوان مثال می توان برای مدیریت بیشتر بر مقدار هدایت حرارتی سیستم بر پایه گرافن، از نانو ذرات فلزی بر روی نانونوار گرافن استفاده نمود. در ادامه این اثرات و حتی اثر حضور نانو ذرات بر روی یک نانونوار گرافن تک لایه حفرهدار نیز مورد ارزیابی قرار می گیرد.

## 4- مدیریت ضریب هدایت حرارتی با استفاده از افزودنیهای فلزی

#### 1-4 - شبيهسازي اثرات نانو ذرات فلزي بر بستر گرافني

در اینجا، مدل گرافن بدون عیب محتوی 2279 اتم بوده و 12 اتم آهن بهصورت خوشه بر روی نانونوار قرارگرفته و شماتیکی از نانونوار به همراه عیوب و خوشه آهن در شکل 2 نشان دادهشده است. در مدل اول، عیبی وجود ندارد و ناخالصی آهن با غلظتهای مختلف بر روی نانونوار گرافنی قرارگرفته است؛ بنابراین با استفاده از تغییر در ضریب هدایت حرارتی میتوان جرمهای مختلفی از آهن را شناسایی کرد و عملیات آشکارسازی جرمی را بر روی آن انجام داد. درصد غلظت جرمی آهن از رابطه برهای مختلفی از آهن را شناسایی کرد و عملیات آشکارسازی جرمی را بر روی آن انجام داد. درصد غلظت جرمی آهن از رابطه روی آن انجام داد. درصد غلظت جرمی آهن از رابطه  $N_{\rm Fe} = \frac{N_{\rm Fe}M_{\rm Fe}}{N_{\rm Fe}+N_{\rm C}M_{\rm C}}$ **100** ×  $M_{\rm Ce} N_{\rm Ce}$  تعداد اتمهای آهن، جرم اتمی آهن، تعداد ذرههای کربن در نانونوار گرافنی و جرم اتمی کربن میباشند. این محاسبات در دمای 300 نانونوار گرافنی و جرم اتمی کربن میباشند. این محاسبات در دمای ماله مالی انه موقعیتهای منظمی بر روی صفحه گرافنی و به صورت پراکنده خوشه ای موقعیتهای منظمی بر روی صفحه گرافنی و به صورت پراکنده خوشه ای هرض شده اند. شکل 8 نشان میدهد که با افزایش غلظت آهن مقدار ضریب هرام شده اند. شکل 8 نشان میدهد که با افزایش غلظت آهن مقدار خریب



**Fig. 4** Effect of length of nano ribbon on the temperature gradient of suspended graphene

**شکل 4**. نمودار اثر طول بر گرادیان دمایی نانونوار گرافن معلق



**Fig. 5** Comparison of thermal conductivity of non-defected zigzag graphene nano ribbon





باشد. وجود نانو ذرات فلزی، اثرهای غیر هماهنگ و درنتیجه عدم تطابق را در حالتهای فونونی در طی فرایندهای انتقال ایجاد میکند و بنابراین طول پویش آزاد میانگین<sup>1</sup> را کاهش میدهند. مشابه آنچه پیشازاین نیز اشارهشده است [22,21] این یافتهها نشان میدهد که کنترل انتقال حرارت در مقیاس نانو هنگام طراحی دستگاههای حرارتی بر پایهی نانونوار گرافنی بهطور بالقوه امکان پذیر است.

1- Mean Free Pass (MFP)

مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دورہ 16، شمارہ 1

x (nm)

**Fig. 6** Effect of defect location on the temperature gradient of suspended graphene nano ribbon

**شکل 6**. نمودار اثر مکان عیب بر گرادیان دمایی نانونوار گرافن معلق

مشاهده می شود که مقایسه های صورت گرفته به خوبی صحت کار حاضر را نشان داده و بنابراین با توجه به اینکه هم گرافن تک لایه بدون حفره و هم حالت حفره دار مدل و صحه گذاری شده و هردو در توافق خوبی با کارهای اشاره شده بوده است، روش و مدل استفاده شده صحیح بوده و قابلیت توسعه جهت شبیه سازی سامانه های مبتنی بر گرافن را داشته و می تواند در طراحی

\_ . \_

349



**Fig. 8** Effect of metallic nano particle concentration on the thermal conductivity of suspended graphene nano ribbon **شکل 8**. نمودار اثر غلظت نانو ذرات فلزی بر ضریب هدایت حرارتی نوار گرافن معلق

# 4-2- شبیهسازی اثر نانو ذرات فلزی و عیب بهصورت توأمان در مکانهای مختلف بستر گرافنی

مانند شکل 2، گرافن دارای عیب، محتوی 2273 اتم است که عیوب بهصورت سه حفره در وسط و سه حفره در پایین مدنظر قرارگرفتهاند. باید به این نکته توجه شود که هر مدل ساختاری از نانونوار محتوی فقط یک عیب ضریب هدایت حرارتی برحسب موقعیت نانوذره و همچنین عیب به همراه نانوذره برای دو حالت که در آنها فاصله عمودی از مبدأ برابر نصف عرض صفحه گرافنی و یکچهارم آن است را نشان میدهد. این شکل نشان میدهد که در نزدیکی لبه اگر عیبی موجود باشد به علت اینکه پدیدهی تونل زنی رخ میدهد و پراکندگی مرزی را داریم، فرکانس فونونی در نزدیکی لبهها بیشتر بوده و فونونها دارای انرژی بالاتر هستند [15]؛ بنابراین در منطقهی 2 نانومتری ضریب هدایت حرارتی از مناطق دیگر بیشتر است. نزدیک شدن کاهش بسیار شدیدتر ضریب هدایت حرارتی از مناطق دیگر بیشتر است. نزدیک شدن کاهش بسیار شدیدتر ضریب هدایت حرارتی در محلی با x بیشتر میگردد. این نتیجه میتواند به دلیل اثرات تغییر مدهای فونونی تحت تأثیر لبه پایینی صفحه گرافنی باشد.

## 4-3- شبیهسازی اثر اندازهی عیب بر ضریب هدایت حرارتی گرافن معلق

نقش اندازهی عیب جای خالی بهتنهایی و به همراه ناخالصی آهن، در ضریب حرارتی گرافن معلق از طریق شبیهسازی دینامیک مولکولی، در این بخش بررسی شده است. حضور عیوب در مواد گرافنی به دلیل روشهای مختلف سنتز اجتنابناپذیر بوده و اثرهایشان بر ضریب هدایت حرارتی تاکنون روشن

حرارتی به دلیل ناهمسانگردی ساختار زنبوری گرافن و وابستگی جهت و مقدار گرمای انتقالی به شکل و جهت شبکهبندی کاهش می ابد.

شکل 11 این جهات عبور و نحوه عبور گرما و حرکت فونونها از طرف چپ و راست حفره، برای قطرهای 0.5nm و 3.6 nm را نشان میدهد.

البته در کارهای دیگر نشان دادهشده که زمان استراحت<sup>1</sup> ناشی از پراکندگی عیب نقطهای با غلظت جای خالی نسبت عکس دارد؛ بنابراین میانگین افزایشی از چگالی حالت فونونها<sup>2</sup> باعث کاهش بیشتری در زمان استراحت و پویش آزاد میانگین شده و درنتیجه ضریب هدایت حرارتی کاهش مییابد[24,23] که این یافتهها با نتایج این مقاله که بهصورت سادهتر به ضریب هدایت حرارتی پایینتر برای حفرات با اندازهها و چگالی بزرگتر رسیده است، همخوانی و تطابق خوبی دارد.

#### 5- نتيجه گيري

بهطور خلاصه، تغییر هدایت حرارتی تک لایهی گرافن در حضور عیب و نانو ذرات فلزی در مکانهای مختلف با استفاده از دینامیک مولکولی غیرتعادلی



**Fig. 9** Thermal conductivity of suspended graphene nano ribbon when there are metallic nanoparticle and also when defects are placed with them

**شکل 9**. نمودار ضریب هدایت حرارتی تک لایه گرافن در حضور نانو ذرات فلزی و همچنین حضور توأم نانوذرات فلزی و عیب در مکانهای مختلف گرافن معلق



**Fig. 10** Thermal conductivity with respect to the various diameters of defects on the middle of suspended graphene nano ribbon (alone defect and simultaneous nanoparticles and defects)

شکل 10. نمودار ضریب هدایت حرارتی برحسب قطرهای مختلف عیب در وسط . سطح تک لایه گرافن (عیب بهتنهایی و عیب توأمان با ناخالصی)

1- Relaxation time

2- Phonon Density of States (DOS)

مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دورہ 16، شمارہ 1

شده است.

نتايج حاصل از افزايش قطر حفره و حضور ناخالصي از 0.5 تا 4.4 نانومتر در شكل 10 به نمايش درآمده است. همان گونه كه ملاحظه می شود، وجود مسیرهای ناهمسانگردی برای انتقال گرما اثر زیادی بر میزان هدایت حرارتی خواهد گذاشت.

در یک سیستم همسانگرد، جهت انتقال گرما اهمیت نداشته و نحوه جابجایی گرما از طریق انتقال فونونها به صورت خطوط موازی و کاملا همگن است؛ بنابراین ضریب هدایت حرارتی به مساحت مقطع و ایجاد حفره بستگی چندانی ندارد. بااین وجود با افزایش اندازهی عیب، مقدار ضریب هدایت

350



**Fig. 11** Comparison of heat path directions (passage channel) of two thermal lines on the top and bottom of middle line of graphene sheet for defects with diameters as size as 2.1 and 3.6 nm and 5 nm wide

**شکل 11**. مقایسه جهتهای عبور گرما (کانال عبور) دو خط حرارتی در بالا و پایین خط وسط صفحه گرافنی برای حفرات با قطرهای 2.1 و 3.6 نانومتر بر روی یک ورق با عرض 5 نانومتر

> معکوس بررسی شده است. با استفاده از مقایسه نتایج با چند کار قبلی در این زمینه، صحت این کار به تائید رسیده و سپس برای شبیهسازی اثرات حفره و نانو ذرات بر ضریب هدایت حرارتی گرافن مورداستفاده قرارگرفته است. با توجه به شبیهسازی های صورت گرفته، نتایج زیر را می توان به عنوان یافته های ارزشمند این مقاله بیان نمود:

> 1- با فاصله گرفتن حفره از لبه تک لایه گرافن، مقدار ضریب هدایت حرارتی کاهشیافته و در نقاط نزدیک به وسط ورق به سمت مقدار ثابتی میل میکند.

> 2- ضریب هدایت حرارتی گرافن با افزایش حضور نانو ذرات فلزی کاهش مییابد.

> 3- مکان جای خالی و نانوذره بر ضریب هدایت حرارتی اثرگذار است بهطوریکه در لبههای گرافن مقدار ضریب هدایت حرارتی از بقیهی نقاط بیشتر بوده و این اثر هم در مرکز و هم درm 1.3 nm وجود دارد.

> 4- حضور نانوذره بهصورت توأمان با جای خالی مقدار ضریب هدایت حرارتی را از حالت ناخالصی بیشتر کاهش میدهد.

> 5- با افزایش قطر حفره، مقدار ضریب هدایت حرارتی کاهشیافته تا در قطرحفرهی 4.4 نانومتری به کمترین مقدار خود W/mK 1.43 میرسد.

Ddeffect
$$D_{deffect}$$
 $E_{total}$  $E_{total}$  $E_{total}$  $E_{total}$  $E_{GNR}$  $iu(z)$  $\mu_{C}$  $\mu_{R}$  $\mu_$ 

عمق چاه اترژی (۱) فاصلهی تعادلی (nm)

7- مراجع

 $\sigma$ 

- [1] A. K. Geim, K. S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature materials*, Vol. 6, No. 3, pp. 183-191, 2007.
- S. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan, E. Pokatilov, D. Nika, A. Balandin,
   W. Bao, F. Miao, C. Lau, Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits, *Applied Physics Letters*, Vol. 92, No. 15, pp. 151911, 2008.
- [3] F. Schwierz, Graphene transistors, *Nature nanotechnology*, Vol. 5, No. 7, pp. 487-496, 2010.

6- با افزایش اندازهی عیب، مقدار خون است میات می شد. ناهمسانگردی ساختار زنبوری گرافن و وابستگی جهت و مقدار گرمای انتقالی به شکل و جهت شبکهبندی کاهش می یابد و وجود مسیرهای ناهمسانگردی برای انتقال گرما اثر زیادی بر میزان هدایت حرارتی گذاشته است.

> **6- فهرست علائم** A ناحیهی سطح مقطع گرافن *C*<sub>Fe</sub> غلظت آهن

مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دورہ 16، شمارہ 1

#### هدایت حرارتی نانو نوار گرافن متخلخل استفادهشده در عملیات آشکارسازی جرم

and energetics of iron clusters (Fe n,  $n \le 36$ ): Molecular dynamics studies using a Lennard–Jones type potential, *Journal of alloys and compounds*, Vol. 403, No. 1, pp. 349-356, 2005.

- [15] D. Liu, P. Yang, X. Yuan, J. Guo, N. Liao, The defect location effect on thermal conductivity of graphene nanoribbons based on molecular dynamics, *Physics Letters A*, Vol. 379, No. 9, pp. 810-814, 2015.
- [16] Z. Guo, D. Zhang, X.-G. Gong, Thermal conductivity of graphene nanoribbons, *Applied physics letters*, Vol. 95 (163103), No ,16 .pp. 1-10, 2009.
- [17] N. Wei, L. Xu, H.-Q. Wang, J.-C. Zheng, Strain engineering of thermal conductivity in graphene sheets and nanoribbons: a demonstration of magic flexibility, *Nanotechnology*, Vol. 22, No. 10 (105705), pp. 1-11, 2011.
- [18] A. A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C. N. Lau, Superior thermal conductivity of single-layer graphene, *Nano letters*, Vol. 8, No. 3, pp. 902-907, 2008.
- [19] Q.-X. Pei, Z.-D. Sha, Y.-W. Zhang, A theoretical analysis of the thermal conductivity of hydrogenated graphene, *Carbon*, Vol. 49, No. 14, pp. 4752-4759, 2011.
- [20] Z. Wei, Z. Ni, K. Bi, M. Chen, Y. Chen, In-plane lattice thermal conductivities of multilayer graphene films, *Carbon*, Vol. 49, No. 8, pp. 2653-2658, 2011.
- [21] V.Adamyan, V. Zavalniuk, Lattice thermal conductivity of graphene with conventionally isotopic defects, *Journal of Physics: Condensed Matter* Vol. 24, No. (41): 415401, pp. 1-6, 2012.
- [22] H. Yang, Y. Tang, J. Gong, Y. Liu, X. Wang, Y. Zhao, P. Yang, S. Wang, Influence of doped nitrogen and vacancy defects on the thermal conductivity of graphene nanoribbons, *Journal of molecular modeling*, Vol. 19, No. 11, pp. 4781-4788, 2013.
- [23] H. Zhang, G. Lee, K. Cho, Thermal transport in graphene and effects of vacancy defects, *Physical Review B*, Vol. 84, No. 11 (115460), pp. 1-5, 2011.
- [24] P. Klemens, D. Pedraza, Thermal conductivity of graphite in the basal plane, *Carbon*, Vol. 32, No. 4, pp. 735-741, 1994.

- [4] T. Y. Ng, J. J. Yeo, Z. Liu, A molecular dynamics study of the thermal conductivity of graphene nanoribbons containing dispersed Stone– Thrower–Wales defects, *Carbon*, Vol. 50, No. 13, pp. 4887-4893, 2012.
- [5] E. Nagelli, R. Naik, Y. Xue, Y. Gao, M. Zhang, L. Dai, Sensor arrays from multicomponent micropatterned nanoparticles and graphene, *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 44 (444010), pp. 1299–1309, 2013.
- [6] Y. Xuan, Y. Q. Wu, T. Shen, M. Qi, M. A. Capano, J. A. Cooper, P. Ye, Atomic-layer-deposited nanostructures for graphene-based nanoelectronics, *Applied Physics Letters* Vol. 92(1), No. 1 (013101), pp. 1-3, 2008.
- [7] A. Hashimoto, K. Suenaga, A. Gloter, K. Urita, S. Iijima, Direct evidence for atomic defects in graphene layers, *Nature*, Vol. 430, No. 7002, pp. 870-873, .2004
- [8] Y. Hajati, T. Blom, S. Jafri, S. Haldar, S. Bhandary, M. Shoushtari, O. Eriksson, B. Sanyal, K. Leifer, Improved gas sensing activity in structurally defected bilayer graphene, *Nanotechnology*, Vol. 23, No. 50 (505501), pp. 1-5, 2012.
- [9] J. J. Yeo, Z. Liu, T. Y. Ng, Comparing the effects of dispersed Stone– Thrower–Wales defects and double vacancies on the thermal conductivity of graphene nanoribbons, *Nanotechnology*, Vol. 23, No. 38 (385702), pp. 1-7, 2012.
- [10] S. Plimpton, P. Crozier, A. Thompson, LAMMPS-large-scale atomic/molecular massively parallel simulator, A Software from Sandia National Laboratories, 2007.
- [11] S. J. Stuart, A. B. Tutein, J. A. Harrison, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, *The Journal of chemical physics*, Vol. 112, No. 14, pp. 6472-6486, 2000.
- [12] M. S. Daw, M. I. Baskes, Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Physical Review B*, Vol. 29, No. 12, pp. 6443, 1984.
- [13] M. P. Allen, Introduction to molecular dynamics simulation, *Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins*, Vol. 23 of NIC Series, pp. 1-28, 2004.
- [14] M. Böyükata, E. Borges, J. Braga, J. Belchior, Size evolution of structures

مهندسی مکانیک مدرس، فروردین 1395، دورہ 16، شمارہ 1

352