

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВОГО ТРАНСПОРТА В ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТАХ МЕТОДОМ НЕРАВНОВЕСНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Игорь БОГУШ, факультет физики и инженерии

Молекулярная динамика (MD) появилась как инструмент компьютерного моделирования движения атомов и молекул сложных систем. Численное интегрирование уравнения движения атомов позволяет проследить эволюцию всей системы, при этом атомы и молекулы взаимодействуют между собой посредством межатомных потенциалов, а также могут испытывать действие внешнего поля. Если моделируемая система близка к равновесному состоянию, метод называют равновесным (EMD), в противном случае – неравновесным (NEMD). Подготовительный этап алгоритма MD предполагает генерирование начальных положений и скоростей частиц. Далее, на каждой итерации рассчитываются силы, действующие на частицы, на основе которых обновляются их положения и скорости. На каждом шаге система частиц корректируется в соответствии с различными условиями, например температурными, и рассчитываются интересующие физические величины.

Обновление положения и скорости частиц происходит в соответствии с конечно-разностными схемами интегрирования уравнений движения. В данной работе использовалась скоростная форма Верле [1] с шагом $\Delta t = 1$ ф, которая позволяет простым образом контролировать скорость частиц (температуру) и имеет высокий порядок точности.

Для контроля температуры был использован термостат со слабой связью $\tau = 10$ фс [2]. В термостате со слабой связью на каждой итерации скорость умножается на коэффициент $\lambda = \sqrt{1 + \frac{\Delta t}{\tau} \left(\frac{T_0}{T(t)} - 1 \right)}$. Количество изъятой или внесённой в термостат теплоты с N подвижными атомами находится с помощью коэффициента λ : $\Delta Q = \frac{3}{2} N k_B T(t) (\lambda^2 - 1)$

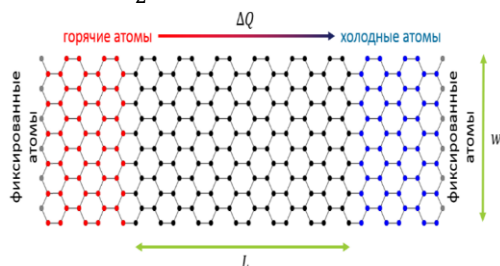


Рис.1. Схема процесса моделирования теплового транспорта в GNR

Сила \vec{f}_i , действующая на определённый атом, определяется из конкретного потенциала взаимодействия: $\vec{f}_i = -\nabla_i$. Для описания взаимодействия с атомами углерода использовался трёхчастичный потенциал Терсоффа с оптимизированными параметрами [3].

Для вычисления коэффициента теплопроводности графеновой наноленты (GNR), один конец образца поддерживается горячим, другой — холодным (Рис. 1).

Зная поток энергии со стороны горячей области в сторону холодной, можно найти теплопроводность по формуле $\kappa = -\frac{\Delta Q}{\Delta t} \frac{L}{wh\Delta T}$, где L — длина наноленты, w — ширина наноленты, h — толщина монослоя в графите, равная 0.34 нм, $\Delta T/L$ — средний градиент температуры в образце между горячими и холодными

атомами.

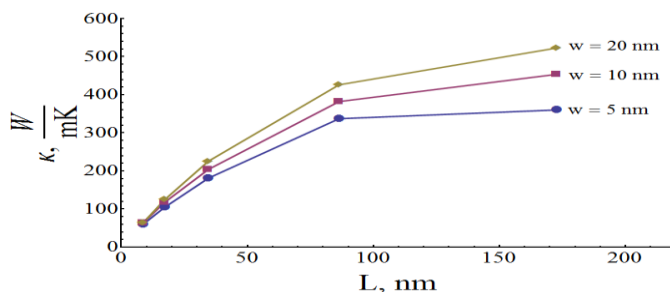


Рис. 2. Зависимость коэффициента теплопроводности κ от длины структуры при 300 К

Была проведена серия численных расчётов теплопроводности графеновых нанолент шириной от 5 до 20 нм и длиной от 8 до 173 нм при 300 К. Самая большая нанолента (20×173 нм²) состояла из 128 000 атомов. Время моделируемого процесса составляло 3 нс (3 млн. итераций по 1 фс). В течение первой наносекунды тепловой поток приобретал стационарный характер. Коэффициент теплопроводности рассчитывался на основе результатов моделирования в течение двух последних наносекунд.

Процесс теплопереноса в графене без дефектов и границ (графен бесконечной ширины) осуществляется в баллистическом режиме при длине образца меньше длины свободного пробега фонона [4]. Баллистический режим теплового транспорта характеризуется прямо пропорциональной зависимостью коэффициента теплопроводности от длины образца. С дальнейшим увеличением длины образца вероятность рассеяния фонона возрастает, и процесс теплового транспорта переходит от баллистического режима к диффузному.

Это приводит к отклонению от линейной зависимости, пока коэффициент теплопроводности не достигнет постоянного значения для макроскопических размеров. В GNR, ширина которого соизмерима или меньше длины, важную роль играет процесс рассеяния на границе наноленты, и коэффициент теплопроводности растёт нелинейно даже при малых длинах.

С увеличением ширины наноленты уменьшается влияние рассеяния на границе в процессе теплопереноса, тем самым увеличи-

вается коэффициент теплопроводности и средний свободный пробег тепловых фононов. Описанные выше эффекты наблюдаются на Рис. 2, где представлена зависимость коэффициента теплопроводности от длины для нанолент шириной 5, 10, 20 нм при 300 К.

На Рис. 3 представлена зависимость κ от относительного удлинения в обоих направлениях структуры, считая среднее расстояние между соседними атомами в недеформированном графене, равным 1.44 \AA . Т.к. в формулу расчёта коэффициента теплопроводности входит L/w , то одновременное увеличение длины и ширины образца не может повлиять на теплопроводность без изменения величины $\Delta Q/\Delta T$. Поэтому изменение теплопроводности является следствием деформаций структуры GNR.

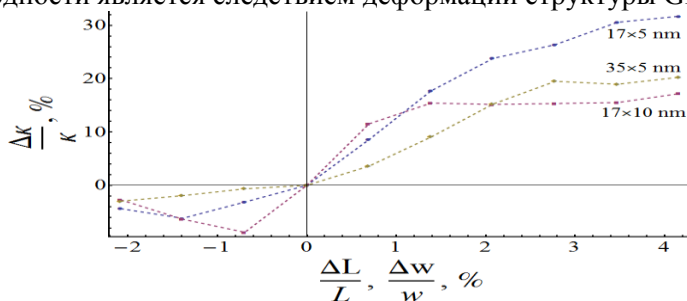


Рис. 3. Зависимость относительного изменения коэффициента теплопроводности κ от относительного удлинения GNR в обоих направлениях при 300 К

В заключение, в работе рассчитан коэффициент теплопроводности графеновых нанолент в области комнатных температур с помощью NEMD. Показана зависимость теплопроводности от линейных размеров структуры.

Основным каналом рассеяния фононов в GNR является рассеяния фононов на границе наноленты. Важным эффектом является сильная зависимость теплопроводности GNR от его растяжения.

Моделирование производилось с помощью технологий параллельного программирования на графических картах CUDA, что позволило получить результат, соизмеримый с результатами работы вычислительных кластеров ведущих научных групп.

Литература:

1. HAIRER, E., LUBICH, C., WANNER, G. Geometric numerical integration illustrated by the Störmer/Verlet method. In: *Acta Numerica*, 12 (2003): 399-450.
2. BERENDSEN, Herman J.C. *Simulating The Physical World. Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics*. Cambridge University Press; 1st edition (2007). 626 p.
3. LINDSAY, L., BROIDO, D. A. Optimized Tersoff and Brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and graphene. In: *Phys. Rev.*, B 82, 209903 (2010).
4. NIKA, D.L. GHOSH, S., POKATILOV, E.P., BALANDIN, A.A. Thermal conductivity of graphene flakes: Comparison with bulk graphite. In: *Appl. Phys. Lett.*, 94, 203103 (2009).

Рекомендовано

Денис НИКА, докт. физ.-мат. наук, доцент

Работа выполнена по институциональному проекту 15.817.02.29F