

عنوان مقاله:

بررسی اثر نقص های استون-والز بر هدایت حرارتی گرافن با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی

محل انتشار:

اولین کنگره ملی کاربرد مواد و ساخت پیشرفته در صنایع (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

مریم عزیزی - گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران

سعداله ابراهیمی - پژوهشکده علوم نانو، دانشگاه کردستان، سنندج، ایران

خلاصه مقاله:

یکی از مهمترین آلوتروپ های کربن، نانوساختار دوبعدی گرافن است که دارای خواص فوق العاده حرارتی، شیمیایی و مکانیکی بوده و دارای پتانسیل بالایی جهت استفاده در صنایع مختلف می باشد. استفاده از این نانوساختار در دستگاه های مختلف حرارتی مانند یک سوسازهای حرارتی، و خنک کننده ها می تواند بازده، و طول عمر آنها را افزایش دهد. بررسی های تجربی و نظری هدایت حرارتی گرافن را بسیار بالا و دارای بالاترین هدایت حرارتی در مواد نشان می دهند. از طرفی، نقص های ساختاری در گرافن می تواند خواص حرارتی آن را تغییر دهد. در طول سنتز گرافن احتمال وجود نقص در ساختار آن وجود دارد، وجود نقص های ساختاری در رشد نانوروبان گرافن، به خصوص در مرزخانه ها اجتناب ناپذیر است. که می توان به نقص هایی مانند جای خالی، اضافه کردن اتم، استون- والز و غیره اشاره کرد. از آنجا که نقص های استون- والز منجر به تغییر خواص ساختار باند الکترونیکی، تراکم حالات گرافن، و باعث تغییر واکنش شیمیایی شبکه ی گرافن می شوند، در این کار پژوهشی به بررسی هدایت حرارتی نانوروبان گرافن زیگزاگ حاوی نقص استون- والز محوری پرداخته می شود. در این کار از شبیه سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی معکوس با استفاده از پتانسیل ایربو، تاثیر نقص استون- والز محوری تا تراکم بالا که به طور تصادفی قرار گرفته اند، بر روی هدایت حرارتی نانوروبان گرافن بررسی می شود. همچنین طیف فونونی و اثر هم پوشانی طیف فونونی بر روی هدایت حرارتی گرافن نیز بررسی می شود. نتایج شبیه سازی نشان می دهد که به ازای وجود نقص استون- والز هدایت حرارتی تا یک مقدار بحرانی بین 30-40% کاهش می یابد، و پس از مقدار بحرانی، هدایت حرارتی افزایش می یابد

کلمات کلیدی:

شبیه سازی دینامیک مولکولی، نقص استون- والز، نانوروبان گرافن زیگزاگ، پتانسیل ایربو، هدایت حرارتی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/673797>

