

УДК 538.9

## ФОНОННАЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ГРАФЕНОВЫХ ЛЕНТ

К. ф.-м. н. Д. Л. Ника

Государственный университет Молдовы

Молдова, г. Кишинев

dlnika@yahoo.com

*Теоретически исследована фононная (решеточная) теплопроводность микрометровых прямоугольных графеновых лент. Энергии фононов получены в рамках модели полей валентных сил, а время рассеяния фононов найдено из уравнения Больцмана в приближении времени релаксации. Проведен анализ вкладов различных механизмов рассеяния фононов и показано, что теплопроводность немонотонно зависит от длины графеновой ленты.*

*Ключевые слова: теплопроводность, фонон, графен, динамика решетки*

Уникальные теплопроводящие свойства монокристаллической пленки из атомов углерода – графена продолжают интенсивно исследоваться как экспериментально, так и теоретически [1–5]. Рекордные значения решеточной теплопроводности графена примерно  $3000\text{--}5000\text{ Вт}\cdot\text{м}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}$  при температуре  $T\approx 300\text{ К}$ , впервые измеренные в 2008 г. группой профессора А. Баландина из Калифорнийского Университета — Риверсайда [1], открывают широкие перспективы для использования графена в нанoeлектронике в качестве материала, быстро отводящего тепло от современных электронных схем [2, 4]. Несмотря на многочисленные экспериментальные и теоретические исследования теплопроводности графена, проведенные в последние четыре года, вопрос о ее зависимости от размеров графенового слоя все еще остается слабоисследованным. В представленной работе была теоретически изучена фононная теплопроводность прямоугольных графеновых лент микрометровых размеров с учетом анизотропии поверхностного рассеяния фононов и трехфононных процессов второго порядка.

На рис. 1, а представлено схематическое изображение исследуемой графеновой ленты длиной  $L$  и шириной  $d$ . В работе предполагается, что толщина и длина графеновой пленки больше  $1\text{ мкм}$ , поэтому спектр фононов является таким же, как в бесконечном графеновом листе. При меньших размерах в пленке начинают появляться стоячие волны, и энергетический спектр фононов квантуется. Это квантование необходимо учитывать при моделировании теплопроводности графеновых нанолент с шириной в несколько нанометров.

Длинноволновые фононы в графене слабо рассеиваются в трехфононных Umklapp-процессах — процессах, в которых участвует два фонона из одной зоны Бриллюэна и один фонон из соседней зоны Бриллюэна. Поэтому теплопроводность, вычисленная только с учетом трехфононных процессов, является расходящейся величиной [3–5]. Для получения конечной величины теплопроводности в графене необходимо учитывать дополнительные механизмы рассеивания длинноволновых фононов, такие как поверхностное рассеяние или трехфононные рассеяние второго порядка. В трехфононных процессах второго порядка фонон  $\vec{q}$  взаимодействует с фононом  $\vec{q}'$  в нормальном процессе с образованием виртуального фонона  $\vec{q}_i$ , который затем взаимодействует с фононом  $\vec{q}''$  в Umklapp-процессе с появлением фонона  $\vec{q}'''$ . Отметим здесь, что нормальным называется трехфононный процесс, в котором участвуют три фонона из одной зоны Бриллюэна. Тогда полное время рассеяния фонона  $\vec{q}$  определяется формулой

$$1/\tau_{tot,s}(q) = 1/\tau_{U,s}(q) + 1/\tau_{2,s}(q) + 1/\tau_{B,s}(q), \quad (1)$$

где  $\tau_{U,s}$  — время рассеяния фонона  $(\vec{q}, s)$  в трехфононных Umklapp-процессах;  $\tau_{2,s}$  — время рассеяния фонона  $(\vec{q}, s)$  в трехфононных процессах второго рода [5];  $\tau_{B,s} = \Lambda_b(s, \vec{q}, p) / v_s^{\parallel}(\vec{q})$  — время поверхностного рассеяния фонона;  $s$  — номер фононной ветви;  $\Lambda_b(s, \vec{q}, p)$  — средняя длина свободного пробега фонона при рассеянии на поверхности;  $v_s^{\parallel}(\vec{q})$  — групповая скорость фонона. Время  $\tau_{U,s}$  вы-

числялось с учетом всех возможных Umklapp-переходов в зоне Брюллиэна методом, описанным в [3]. Для оценки  $\tau_{2,s}$  мы учли, что наиболее интенсивно идут процессы второго рода с  $|\vec{q}'| \approx (0,6-0,7)q_{max}$  и  $|\vec{q}''| \approx (0,5-0,7)q_{max}$  и получили следующую формулу для  $\tau_{2,s}$  (детально это вывод описан в [5]):

$$\frac{1}{\tau_{2,s}} = \frac{2\pi}{9} \left( \frac{k_B T}{M(v_s^{\parallel})^2} \right)^2 \gamma_s^4 \omega_{max,s}^4. \quad (2)$$

Зависимость теплопроводности графена от геометрических размеров пленки представлена на рис. 1, б. Максимумы на кривых теплопроводности объясняются тем, что в процессе переноса тепла участвуют две группы фононов. Одна группа фононов не рассеивается на границах ленты, и их длина свободного пробега определяется длиной пленки  $L$  и Umklapp-рассеянием. Вторая группа фононов рассеивается на границе ленты, и длина их свободного пробега определяется  $L$ ,  $d$  и Umklapp-рассеянием. Рост длины пленки при фиксированной ширине приводит, с одной стороны, к увеличению длины свободного пробега фононов первой группы, а с другой стороны — к уменьшению их числа. Поэтому с ростом  $L$  вклад в теплопроводность от фононов первой группы уменьшается, а от второй — возрастает. В результате кривые фононной теплопроводности имеют максимум, который зависит от соотношения  $L/d$ . Квадратные и круглые графеновые ленты такого максимума не демонстрируют. Ухудшение качества границ ленты и соответствующее усиление поверхностного рассеяния фононов ведут к ослаблению немонотонности.

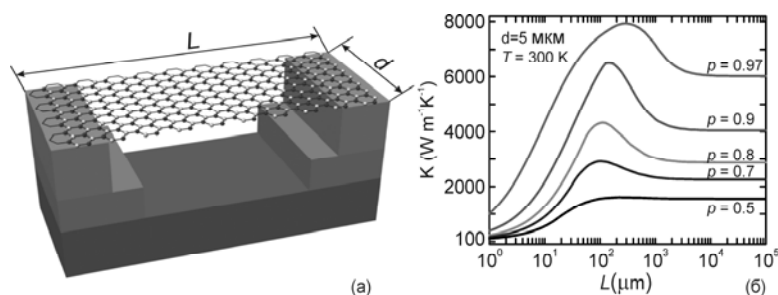


Рис. 1. Схематичное изображение графеновой ленты (а) и зависимость фононной теплопроводности от длины ленты при различной ее толщине (б)

Полученные результаты могут объяснить разброс в измеренных значениях решеточной теплопроводности графена [1, 2, 4].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке в рамках исследовательских проектов 11.817.05.10F и 12.819.05.18F

#### ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Balandin A. A. et al. Superior thermal conductivity of single-layer graphene // Nano Letters.— 2008.— N 9.— P. 902.
2. Balandin A. A. Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials // Nature Mat.— 2011.— N 10.— P. 569.
3. Nika D. L., Pokatilov E. P., Askerov A. S., Balandin A. A. Phonon thermal conduction in graphene: Role of Umklapp and edge roughness scattering // Phys. Rev. B.— 2009.— Vol. 79.— P. 155413.
4. Nika D. L., Balandin A. A. Two-dimensional phonon transport in graphene // J. Phys. Cond. Matter.— 2012.— Vol. 24.— P. 233203.
5. Nika D. L., Askerov A. S., Balandin A. A. Anomalous Size Dependence of the Thermal Conductivity of Graphene Ribbons // Nano Lett.— 2012.— Vol. 12.— P. 3238.

D. L. Nika

#### Phonon thermal conductivity in graphene ribbons.

The phonon (lattice) thermal conductivity of micrometer graphene ribbons is theoretically investigated in the framework of Valence Force Field model of lattice dynamics and Boltzmann transport equation within relaxation time approximation. The role of different phonon scattering mechanisms in thermal conductivity is analyzed. The non-monotonic dependence of the thermal conductivity on ribbon length is established.

Keywords: *thermal conductivity, phonon, graphene, lattice dynamics.*