

# **ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**

## **МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ**

**«Физическая мезомеханика.  
Материалы с многоуровневой иерархически  
организованной структурой и интеллектуальные  
производственные технологии»,**

посвященная 90-летию со дня рождения  
основателя и первого директора ИФПМ СО РАН  
**академика Виктора Евгеньевича Панина**

в рамках  
**Международного междисциплинарного симпозиума  
«Иерархические материалы: разработка и приложения  
для новых технологий и надежных конструкций»**

**5–9 октября 2020 года  
Томск, Россия**

Томск  
Издательство ТГУ  
2020

DOI: 10.17223/9785946219242/301

ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕПЛОЕМОСТЬ ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА С ДЕФЕКТАМИ РАЗЛИЧНОГО ТИПА

<sup>1</sup>Бобенко Н.Г., <sup>1</sup>Егорушкин В.Е., <sup>2</sup>Мельникова Н.В.

<sup>1</sup>Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

<sup>2</sup>Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова Томского государственного университета, Томск

Контролирование свойств квазидвумерных наноматериалов путем изменения их структуры на атомном уровне является одной из наиболее интересных задач в области науки о наносистемах. Одним из наиболее интересных объектов данной области является, на наш взгляд, двухслойный графен (биграфен), которому сулят широкие возможности применения в оптоэлектронике, датчиках и различных высокочастотных устройствах. Для практического применения биграфена в нанoeлектронике крайне важно знать его тепловые свойства, так как тепло, выделяемое во время работы устройств, может повлиять на их стабильность и надежность. Современные экспериментальные методики пока не позволяют измерить теплоемкость биграфена, поэтому в настоящей работе теплоемкость разупорядоченного двухслойного АВ графена была исследована теоретически в рамках модели разупорядоченных металлических материалов (с ближним порядком). С использованием методов квантовой теории поля (метод температурных функций Грина) в приближении электронного времени релаксации было получено аналитическое выражение для вклада в теплоемкость от многократного упругого рассеяния электронов на точечных дефектах и областях ближнего порядка, формирующихся в процессе роста или постобработки материала:

$$C = \frac{\pi^2 k^2 T}{3S\rho} v_0 \left( 1 - \arctg \left[ \frac{v_F^2 p_F^2}{t_0} / \frac{\hbar}{2\tau} \right] + \frac{s}{2\hbar^2} \frac{p_F^2 \pi U_0^2 c(1-c)}{N} \alpha B T \right) \quad (1)$$

Здесь  $T$  - температура,  $S$  - площадь элементарной ячейки образца,  $\rho$  - плотность графена,  $v_0$  - плотность состояний на уровне Ферми идеального графена,  $v_F$  и  $p_F$  - скорость и импульс Ферми, соответственно,  $t_0$  - интеграл перескока электронов между слоями,  $\tau$  - электронное время релаксации в разупорядоченном двухслойном графене [1]. Далее  $U_0$  - потенциал межэлектронного взаимодействия,  $c$  - концентрация примеси,  $N$  - число атомов в ячейке,  $\alpha$  - параметр ближнего порядка, который является качественной и количественной характеристикой дефектности структуры биграфена [2]. Параметр  $B$  определяется соотношением постоянных Больцмана  $k$  и Планка  $\hbar$ , модуля вектора элементарной решетки  $R$  и массы электрона  $m$ :

$$B = \pi \frac{R^2 m}{\hbar^2} k \approx 0.1 \text{ К}^{-1}$$

Первое слагаемое в (1) соответствует вкладу в теплоемкость от электронов, упруго рассеянных на точечных примесях, а второе и третье - на структурах типа ближнего порядка. Второе слагаемое в (1) порядка единицы, а порядок последнего слагаемого сильно зависит от размера элементарной ячейки. Если площадь элементарной ячейки  $< 1 \text{ нм}^2$ , то третье слагаемое будет мало, и полученная в (1) электронная теплоемкость  $C \rightarrow 0$ . В реальном двухслойном графене из-за разориентированных векторов решетки двух слоев и вследствие его функционализации модуль вектора элементарной решетки материала достигает значений 10 – 30 нм. Поэтому для модифицированного графена основной вклад в теплоемкость будет давать третье слагаемое в (1), квадратично зависящее от температуры.

Из-за отсутствия экспериментальных данных по теплоемкости двухслойного графена количественное и качественное сравнение величины теплоемкости проведено с

## Секция 8. Электронная структура и свойства функциональных 2D и 3D материалов, композитов и покрытий

использованием данных  $C(T)$  для близких по структуре углеродных материалов, для которых имеются численные расчеты или экспериментальные данные в рассматриваемой температурной области.

На рисунке 1 приведена рассчитанная зависимость  $C(T)$  для однослойного бездефектного графена (фиолетовая кривая), экспериментальные данные по теплоемкости графита (зеленая кривая) [Ошибка! Источник ссылки не найден.] и рассчитанная зависимость  $C(T)$  с использованием (1) при  $R=10$  нм. Электронная теплоемкость биграфена (рис.1) составляет примерно 20% от рассчитанной теплоемкости однослойного графена и также, как и в графите, имеет квадратичную температурную зависимость при  $T > 30$  К. Электронная теплоемкость при наличии беспорядка в двухслойном графене, который приводит к увеличению размера элементарной ячейки, оказывается в 10-20 раз выше, чем в биграфене с точечными примесями.

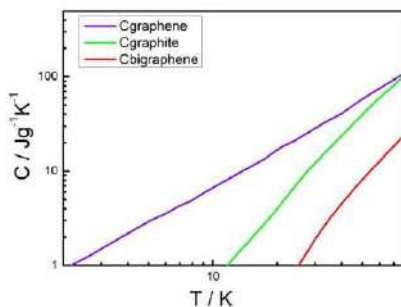


Рис. 1. Температурные зависимости теплоемкости графена [Ошибка! Источник ссылки не найден.] (фиолетовая линия), графита [Ошибка! Источник ссылки не найден.] (зеленая линия) и рассчитанная с использованием (1) для биграфена (красная линия).

Таким образом, в настоящей работе было получено выражение для расчета электронной теплоемкости двухслойного графена с точечными дефектами и областями ближнего порядка. Показано, что электронная теплоемкость очень чувствительна к изменению размера элементарной ячейки материала. При большом размере ячейки, обусловленном формированием областей с ближним порядком в результате функционализации материала, электронный вклад в  $C(T)$  может составлять до 20% от общей величины теплоемкости, что существенно меняет общепринятые представления о величине этого вклада в тепловые свойства наноматериалов.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и администрации Томской области в рамках научного проекта № 18-42-703019 р\_мол\_а, а также в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект III.23.2.8.*

1. Bobenko, N.G. Density of Electronic States of Disordered Two-Layers AB Graphene// AIP Conference Proceeding. 2018. № 2051. P. 020032.
2. Belosludtseva A.A. Concentration and Configurational Dependence of The Short-Range Order Parameter in Two-Layer Graphene //AIP Conference Proceeding. 2019. №2167. P. 020033.
3. N M Ravindra, Graphene. 2017, chapter 6 P. 6-1 to 6-3