**Определения решеточной теплопроводности графена  
с использованием методов *ab initio***

***Лю Ш., Баринов А.А.***

*Аспирант, 1 год обучения*

*Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана,  
факультет «Энергомашиностроение», Москва, Россия*

*E-mail: sxliu98@gmail.com*

Достижения в области микро- и нанотехнологий расширяют возможности для производства разнообразных низкоразмерных квантовых структур, в том числе графена. При этом переход от трехмерных макроскопических систем к низкоразмерным приводит к существенным изменениям свойств переносчиков взаимодействия – фононов. Так графен обладает превосходными электрическими и термическими свойствами. Более того, экспериментальные исследования теплопроводности взвешенного однослойного графена при комнатной температуре показывают оценки в диапазоне от 000 до 5000 Вт/(м∙К) [1-4]. Поэтому графен является многообещающим кандидатом для управления теплообменом в наноразмерных электронных устройствах. Однако, широкий разброс значений теплопроводности приводит к проблеме достоверной оценки теплофизических свойств графена и разработке надежных методов расчета.

В основе данной работы лежит определение свойств фононов в графене с использованием прикладных пакетов с открытым исходным кодом Quantum Espresso [5] и ShenBTE [6]. Так расчет гармонических свойств – дисперсия фононов, плотность состояний, групповая скорость – строится на основе определения межатомных силовых постоянных второго порядка (с помощью динамической матрицы). А ангармонические свойства – времена свободного пробега фононов – рассчитываются с использованием межатомных силовых постоянных второго и третьего порядка. Затем итерационным методом решается уравнение Больцмана для фононов для получения последовательности приближений, сходящейся к искомой теплопроводности графена.

Рассчитанные значения теплопроводности сравнивались с экспериментальными данными и известными моделями, полученными в приближении времени релаксации. Результаты показали, что теплопроводность при комнатной температуре составляет примерно 2800 Вт/(мК). Это согласуется с экспериментальными результатами [4]. Также было обнаружено, что ZA-ветвь имеет меньшую интенсивность рассеяния в низкочастотной области и оказывает большее влияние на теплопроводность графена. Применение приближения времени релаксации при решении уравнения Больцмана для фононов приведет к занижению теплопроводности, особенно для материалов с высокими значениями теплопроводности, как у графена.

**Литература**

1. Balandin A.A. et al. Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene // Nano Lett. 2008. Vol. 8, № 3. P. 902–907.

2. Ghosh S. et al. Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits // Appl. Phys. Lett. 2008. Vol. 92, № 15. P. 151911.

3. Sullivan S. et al. Optical Generation and Detection of Local Nonequilibrium Phonons in Suspended Graphene // Nano Lett. 2017. Vol. 17, № 3. P. 2049–2056.

4. Lee J.-U. et al. Thermal conductivity of suspended pristine graphene measured by Raman spectroscopy // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83, № 8. P. 081419.

5. Giannozzi P. et al. Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // J. Phys.: Condens. Matter. 2009. Vol. 21, № 39. P. 395502.

6. Li W. et al. ShengBTE: A solver of the Boltzmann transport equation for phonons // Computer Physics Communications. 2014. Vol. 185, № 6. P. 1747–1758.