

**ЭЛЕКТРОННЫЕ ТЕПЛОВЫЕ СВОЙСТВА ТУРБОСТРАТНОГО БИГРАФЕНА\***

Н.Г. Бобенко, Ю.А. Чумаков, А.А. Белослудцева

*Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия*

Электронный теплоперенос в неупорядоченном турбостратном двухслойном графене исследован с учетом беспорядка, возникающего при вращении слоев относительно друг друга и формировании в структуре локальных областей ближнего порядка различного типа. Получены и проанализированы аналитические выражения для электронных теплоемкости и теплопроводности в зависимости от температуры, угла вращения, концентрации и места крепления чужеродных атомов относительно поверхности материала. Показано, что отклонение от линейной температурной зависимости электронных тепловых свойств обусловлено зависимостью времени релаксации электронов, многократно рассеивающихся на областях ближнего порядка, от температуры и угла поворота графеновых слоев. При больших углах вращения между слоями электронная теплоемкость и теплопроводность прямо пропорциональны температуре  $T$  независимо от типа структурных дефектов и концентрации чужеродных атомов. Изменение характера зависимости электронных (тепловых) свойств двухслойного графена от температуры наблюдается при локализации чужеродных атомов в первой координационной сфере и малых углах вращения до  $15^\circ$ . Учет рассеяния электронов на ближнеупорядоченных комплексах такого типа приводит к нелинейной температурной зависимости электронной теплопроводности ( $\sim T^{1.5}$ ), что соответствует результатам экспериментальных данных. При этом величина теплоемкости и теплопроводности определяется только углом вращения между слоями, уменьшаясь с его ростом. Максимальный электронный вклад до 10% от значения полной теплопроводности может наблюдаться при малых углах и локализации чужеродных атомов в первой координационной сфере на поверхности турбостратного графена.

**Ключевые слова:** тепловые транспортные свойства, турбостратный графен, ближний порядок, микроструктура.

**Введение**

Самонагрев является основной проблемой стабильной работы электроники, оптоэлектроники и фотоники, компоненты которых в перспективе планируется изготавливать с использованием турбостратного биграфена (ТБГ). Тепловые свойства ТБГ могут усиливаться или подавляться в зависимости от структуры образца [1–7]. Для практического применения, например, в термоэлектрических материалах, важно знать, как при изменении структуры меняются теплоемкость и теплопроводность ТБГ.

На настоящий момент не существует работ по экспериментальному исследованию теплоемкости ТБГ. Проведенные в [1] единичные теоретические исследования показали, что удельная теплоемкость ТБГ зависит от температуры ( $T$ ), как  $T^{1.3}$  при  $T < 15$  К. Обнаружено, что фонная теплоемкость определяется углом закручивания в области низких температур.

Теплопроводность ТБГ чаще всего исследуется для температур выше 200–300 К и вблизи малых «магических» углов [2], однако получаемые образцы поликристаллического ТБГ имеют области с разным углом поворота слоев относительно друг друга ( $\theta$ ) [3–5]. Кроме того, величина угла поворота может меняться с температурой для некоторых образцов ТБГ вследствие слабых межслоевых взаимодействий [6]. Поэтому исследование температурной зависимости тепловых свойств ТБГ от угла вращения важно на всем диапазоне углов.

В [7] описаны структура и теплопроводность ( $K$ ) ТБГ при  $\theta \approx 11.7^\circ$  до и после отжига. Обнаружено повышение теплопроводности на порядок после отжига образца. Показано, что  $K \sim T^{1.5}$  при температурах от 50 до 125 К. Рассчитанное фонное значение теплопроводности меньше измеренного, что объясняется авторами дополнительным рассеянием фононов на остаточном полимерном слое, который идентифицируется методом просвечивающей электронной микроскопии.

Существует большое число работ, посвященных расчету фонной теплопроводности (продольной и поперечной) для ТБГ с дефектами и без, в зависимости от угла вращения, размера образца и т.д. [8, 9]. Продольная и поперечная теплопроводность зигзагообразного ТБГ с различными углами закручивания исследована в [9] с использованием неравновесной молекулярной дина-

\* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект No 20-72-00138).

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала  
**«Известия высших учебных заведений. Физика»**  
осуществляется на платформе  
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU  
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>