УДК 536.2.01, 536.21

РАСЧЁТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОНОНОВ В ГРАФЕНЕ С УЧЁТОМ АНИЗОТРОПИИ АТОМАРНОЙ РЕШЁТКИ

*Лю Шисян, аспирант,*

*sxliu98@gmail.com*

*Хвесюк Владимир Иванович, д.т.н., профессор,*

*khvesyuk@bmstu.ru*

*МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва*

Аннотация: В работе впервые сформулирован метод расчёта взаимодействия фононов с учётом анизотропии атомарной решётки для графена на основе метода Монте-Карло.

Ключевые слова: взаимодействие фононов, метод Монте-Карло, анизотропия.

Введение

Метод Монте Карло имеет преимущества по сравнению с методом, использующим уравнение переноса Больцмана. Этими преимуществами является более полная информация о кинетических процессах, ведущих к переносу энергии под воздействием градиента температур. Например, доли различных фонон - фононных взаимодействий, времена жизни различных фононов и другие [1]. Однако, для полной реализации метода Монте Карло необходим учёт анизотропии атомарных решёток при решении уравнений, описывающих взаимодействия фононов друг с другом (а также и фононов с дефектами решётки и примесями).

В случае графена для этого необходимо рассчитать трёхмерные дисперсионные поверхности для соответствующих зон Бриллюэна. Форма этих поверхностей [2] учитывает влияние анизотропии атомарной решётки. Это видно на рисунке 1. На нём представлены проекции сечений плоскостями, параллельными плоскости графена, дисперсионных поверхностей. Видно два семейства замкнутых кривых. Они представляют линии постоянных значений частоты (энергии) фононов. Одно семейство расположено вблизи оси дисперсионной поверхности. Это замкнутые окружности. В этой области отсутствует влияние анизотропии атомарной решётки. Имеет место однозначная связь между частотой и величиной волнового вектора фонона. Другое семейство расположено ближе к границе зоны Бриллюена. Эти кривые не являются круглыми. Это означает, что связь частоты и волновых векторов зависит не только от величин этих векторов, но и от их направлений.

Для расчета теплопроводности требуется как матрица рассеяния, отражающая ангармонизм, так и понимание конкретной комбинации происходящих взаимодействий фононов. Процесс взаимодействия делится на N-процесс и U-процесс. В этой работе предлагается метод расчета взаимодействия фононов (N-процесс и U-процесс), который учитывает анизотропию атомной решетки графена на основе метода Монте-Карло. Этот метод будет полезен при расчете теплопроводности графена.

Метод расчёта

Для фонона с частотой , частота взаимодействующего с ним фонона  определяется случайным числом. Согласно закону сохранения энергии, частота генерируемого фонона  определяется частотами двух фононов. Для процесса слияния: ; для процесса распада: . На основе анизотропных дисперсионных соотношений фононов в графене, полученных путем решения собственных значений матрицы динамики во зоне Бриллюэна [2], мы можем определить изочастотные линии в -пространстве. Векторы от начала координат до любой точки этой линии являются возможными волновыми векторами на этой частоте.

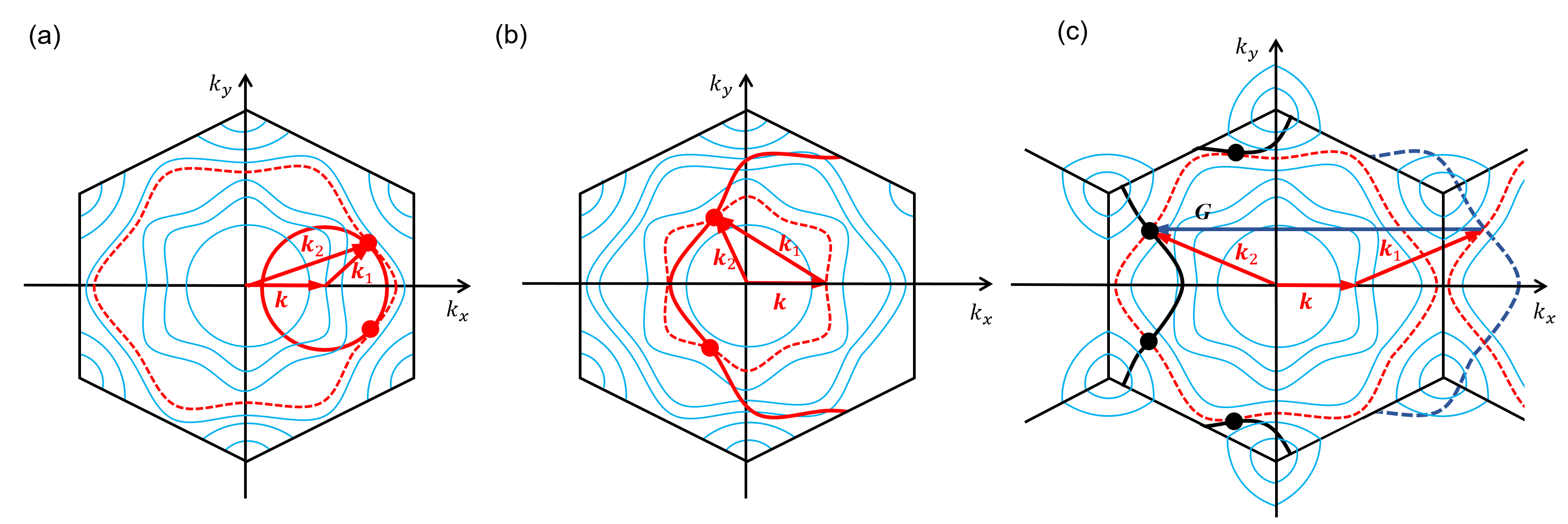


Рис.1 Схема сохранения импульса рассеяния фононов: (a) N-процесс при ; (b) N-процесс при ; (c) U-процесс при .

Красная точка представляет N-процесс, а черная точка — U-процесс.

Во-первых, предположим, что направление  является положительным направлением , то есть  можно однозначно определить по частоте . Затем, используя точку  в центре круга, рисуется изочастотная линия  и находится точка пересечения с изочастотной линией  с нулевой точкой в ​​качестве центра. Если точка пересечения находится внутри первой зоны Бриллюэна, это N-процесс (рис. 1a и 1b). Если точка пересечения находится за пределами первой зоны Бриллюэна, это U-процесс (рис. 1c). Наконец, изменив направление , приведенный выше расчет повторяется.

На основе описанного выше метода можно определить комбинации фононных мод , в которых происходят N-процесс и U-процесс. Следовательно, интегрируя эти комбинации, теплопроводность графена можно рассчитать методами первых принципов.

Выводы

В работе представлен метод решения уравнений сохранения энергии и квазиимпульса при взаимодействии трёх фононов в условиях анизотропной среды на основе метода Монте-Карло. Результаты показывают, что фононную анизотропию графена нельзя игнорировать. Между N-процессом и U-процессом фононного взаимодействия имеется существенное различие: N-процесс играет важную роль в низкочастотном диапазоне, тогда как U-процесс более значим в высокочастотном диапазоне.

Список использованных источников

1. Хвесюк В. И. и др. Принципиально новые подходы к решению теплофизических задач применительно к наноэлектронике // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2023. № 3 (26). C. 190–197.

2. Хвесюк, В. И. и др. Расчет теплоемкости двумерного графена с учетом полных дисперсионных соотношений // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. МММЭК-2023 : Материалы V международной конференции. – Москва: ООО "МАКС Пресс", 2023. – С. 115-118.

CALCULATION OF PHONON INTERACTION IN GRAPHENE TAKING INTO ACCOUNT ANISOTROPY OF THE ATOMIC LATTICE

S. Liu, V.I. Khesyuk

Abstract: The work analyzes various phonon interaction processes using the Monte Carlo method, clearly distinguishes between the N-process and the U-process for the first time, and calculates the thermal conductivity of graphene based on first principles.

Key words: phonon interaction, Monte Carlo method, anisotropy.