

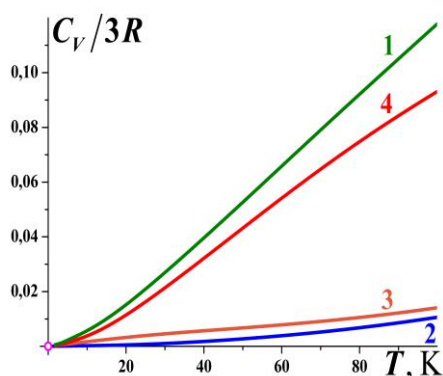
ФОНОННАЯ ТЕПЛОЕМОСТЬ ГРАФЕНОВЫХ НАНОПЛЕНОК И НАНОТРУБОК

Минакова К.А.¹, Сыркин Е.С.²

¹Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»

²Физико-технический институт низких температур НАН Украины
им. Б.И. Веркина, г. Харьков

Предсказанные в 1952 г. И.М. Лифшицем [1] и обнаруженные в 1972 г. в экспериментах [2], по неупругому рассеянию нейтронов в графите квазиизгибные моды с квадратичным законом дисперсии в длинноволновой области дают основной вклад в низкотемпературную теплоемкость графита, графеновых нанопленок и нанотрубок. На основе проведенных на микроскопическом уровне расчетов количественно описана фононная часть теплоемкости сверхтонких графеновых нанопленок – биграфена и триграфена, а также одностеночных графеновых нанотрубок. Проанализирована природа изгибной жесткости графеновых монослоев и выделены температурные интервалы, на которых вид температурной зависимости теплоемкости, определяется вкладами изгибных и колебаний. Исследован вклад крутильных колебаний в фононную теплоемкость графеновых нанотрубок. Прямолинейная температурная зависимость теплоемкости, присущая многим слоистым соединениям в широком температурном интервале (для графита и графеновых наноструктур примерно от 40 К и выше), не обусловлена квадратичной дисперсией квазиизгибных мод. Для проявления квадратичной дисперсии длинноволновых фононов в теплоемкости необходимо существование в фононном спектре слоистого или цепочечного кристалла достаточно протяженного интервала, на котором спектр имеет низкоразмерный характер, а закон дисперсии поперечной фононной моды, поляризованной вдоль направления слабой связи, еще можно считать квадратичным. Для слоистых соединений таким условиям в достаточно полной



мере удовлетворяет только биграфен. Линейный ход теплоемкости биграфена при температурах от 5 до 70 К обусловлен именно квадратичной дисперсией его квазиизгибной моды [3]. В поведении низкотемпературной теплоемкости графеновых нанотрубок проявляются как изгибные колебания трубки в качестве целого одномерного образования (при $T < 1$ К), так и (при 3 К $< T < 7$ К) квазиизгибные волны, распространяющиеся по поверхности трубки [3].

Рис. 1: Температурные зависимости теплоемкости графеновых нанотрубок. Представлены вклады в них от различных атомных смещений (кривые 2,3,4) и суммарный вклад (кривая 1)

Литература:

[1] И.М. Лифшиц, ЖЭТФ 22, 472 (1952)

[2] R. Nicklow, N. Wakabayashi, H.G. Smith, Phys. Rev. B5, 4951 (1972)

[3] V.V. Eremenko, V.A. Sirenko, I.A. Gospodarev, E.S. Syrkin, S.B. Feodosyev, I.S.

Bondar,

К.А. Minakova, Fiz. Nizk. Temp. 43, 322 (2017).