

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Московский государственный технический  
университет имени Н.Э. Баумана  
(национальный исследовательский университет)»

Факультет «Энергомашиностроение»  
Кафедра «Теплофизика»

## **Теплофизика наносистем**

### **Домашнее задание №1**

«Анализ дисперсионных соотношений фононов в графене»

Электронное учебное издание

Методические указания к выполнению Домашнего задания №1  
по курсу «Теплофизика наносистем»

Лю Шисян

Москва 2026

# 1 ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ СВЕДЕНИЯ

Фононный спектр является одной из важнейших характеристик кристаллической решетки, поскольку он определяет зависимость частот нормальных колебаний атомов от волнового вектора:

$$\omega = \omega_s(\mathbf{k}), \quad (1)$$

где  $\omega$  — угловая частота фонона,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор, а  $s$  — номер фононной ветви [1]. Для графена фононные дисперсионные соотношения имеют особое значение, так как на их основе определяются групповые скорости фононов, плотность фононных состояний, теплоемкость и теплопроводность материала [2].

Графен представляет собой двумерный кристалл углерода с гексагональной структурой [3]. Элементарная ячейка графена содержит два атома углерода, принадлежащие двум подрешеткам А и В. Векторы прямой решетки обозначаются как  $\mathbf{a}_1$  и  $\mathbf{a}_2$ , а соответствующие им векторы обратной решетки — как  $\mathbf{b}_1$  и  $\mathbf{b}_2$  [4]. Постоянная решетки графена составляет

$$a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = 2.46 \text{ \AA}. \quad (2)$$

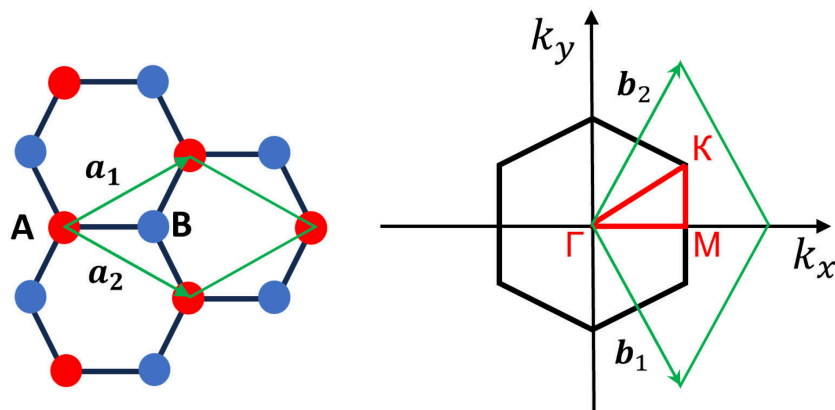


Рисунок 1 — Элементарная ячейка графена и первая зона Бриллюэна

Поскольку каждый атом обладает тремя степенями свободы, соответствующими смещениям вдоль координатных осей  $x$ ,  $y$  и  $z$ , общее число нормальных колебательных мод для каждого волнового вектора равно

$$3N = 3 \times 2 = 6. \quad (3)$$

Следовательно, фононный спектр графена включает шесть ветвей: ZA, TA, LA, ZO, TO и LO. Ветви ZA, TA и LA являются акустическими, тогда как ветви ZO, TO и LO — оптическими. Акустические ветви соответствуют синфазным колебаниям атомов в элементарной ячейке и характеризуются тем, что их частоты обращаются в нуль в точке  $\Gamma$ . Оптические ветви, напротив, связаны с относительными колебаниями атомов подрешеток A и B и имеют конечные частоты в центре зоны Бриллюэна.

## 1.1 Уравнения движения атомов

Положение атома в кристаллической решетке в произвольный момент времени можно представить как сумму его равновесного положения и малого смещения:

$$\mathbf{R}_i(t) = \mathbf{R}_i^0 + \mathbf{u}_i(t), \quad (4)$$

где  $\mathbf{R}_i^0$  — равновесное положение  $i$ -го атома, а  $\mathbf{u}_i(t)$  — его малое смещение относительно положения равновесия.

В гармоническом приближении [2], когда учитываются только члены второго порядка по атомным смещениям, уравнение движения атомов можно записать в виде

$$M_i \frac{d^2 \mathbf{u}_i}{dt^2} = \sum_j \Phi(i, j) (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i), \quad (5)$$

где  $M_i$  — масса  $i$ -го атома, а  $\Phi(i, j)$  — тензор силовых постоянных, характеризующий взаимодействие между атомами  $i$  и  $j$ .

Поскольку графен является периодической кристаллической структурой, нормальные колебания решетки можно искать в виде блоховской волны. При этом удобно использовать массово-нормированную форму амплитуды:

$$\mathbf{u}_i(t) = \frac{\chi_i(\mathbf{k})}{\sqrt{M_i}} \exp [i (\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i^0 - \omega t)], \quad (6)$$

где  $\chi_i(\mathbf{k})$  — массово-нормированная амплитуда нормального колебания,  $\mathbf{k}$  — волновой вектор, а  $\omega$  — угловая частота фонона.

Подстановка данного выражения в уравнение движения приводит к задаче на собственные значения:

$$\mathbf{D}(\mathbf{k})\chi(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k})\chi(\mathbf{k}), \quad (7)$$

где  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  — массово-нормированная динамическая матрица, зависящая от волнового вектора.

Если  $\Omega_i(\mathbf{k})$  обозначает  $i$ -е собственное значение динамической матрицы, то

$$\Omega_i(\mathbf{k}) = \omega_i^2(\mathbf{k}). \quad (8)$$

Следовательно, фононная частота  $i$ -й ветви определяется выражением

$$\omega_i(\mathbf{k}) = \sqrt{\Omega_i(\mathbf{k})}. \quad (9)$$

Таким образом, расчет фононного спектра сводится к построению динамической матрицы  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  для каждого волнового вектора и последующему решению задачи на собственные значения.

## 1.2 Динамическая матрица графена

Поскольку элементарная ячейка графена содержит два атома, каждый из которых имеет три степени свободы, динамическая матрица графена имеет размер  $6 \times 6$ . Эту матрицу удобно представить в блочном виде [5]:

$$\mathbf{D}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{AA}(\mathbf{k}) & \mathbf{D}_{AB}(\mathbf{k}) \\ \mathbf{D}_{BA}(\mathbf{k}) & \mathbf{D}_{BB}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Здесь каждый блок имеет размер  $3 \times 3$ , поскольку он связывает три компоненты смещения одного атома с тремя компонентами смещения другого атома. Блоки  $\mathbf{D}_{AA}$  и  $\mathbf{D}_{BB}$  описывают взаимодействия внутри одной подрешетки, а блоки  $\mathbf{D}_{AB}$  и  $\mathbf{D}_{BA}$  — взаимодействия между подрешетками А и В.

Динамическая матрица строится путем преобразования Фурье силовых постоянных, заданных в реальном пространстве. В блочной форме элементы динамической матрицы можно записать как

$$\mathbf{D}_{AA}(\mathbf{k}) = \frac{1}{m_A} \left[ \Phi_A^{(0)} + \sum_{j=1}^{N_A} \Phi_{AA}^{(0,A_j)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_j}) \right], \quad (11)$$

$$\mathbf{D}_{AB}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_A m_B}} \sum_{j=1}^{N_B} \Phi_{AB}^{(0,B_j)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{B_j}), \quad (12)$$

$$\mathbf{D}_{BB}(\mathbf{k}) = \frac{1}{m_B} \left[ \Phi_B^{(0)} + \sum_{j=1}^{N_B} \Phi_{BB}^{(0,B_j)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{B_j}) \right], \quad (13)$$

$$\mathbf{D}_{BA}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{m_B m_A}} \sum_{j=1}^{N_A} \Phi_{BA}^{(0,A_j)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{A_j}). \quad (14)$$

Здесь  $m_A$  и  $m_B$  — массы атомов подрешеток А и В;  $\mathbf{R}_{A_j}$  и  $\mathbf{R}_{B_j}$  — радиус-векторы соседних атомов относительно выбранного центрального атома. Тензоры  $\Phi_{AA}^{(0,A_j)}$ ,  $\Phi_{AB}^{(0,B_j)}$ ,  $\Phi_{BB}^{(0,B_j)}$  и  $\Phi_{BA}^{(0,A_j)}$  описывают соответствующие межатомные взаимодействия.

Величины  $\Phi_A^{(0)}$  и  $\Phi_B^{(0)}$  являются самодействующими членами. Они определяются из условия трансляционной инвариантности, согласно которому однородное смещение всех атомов кристалла не должно приводить к возникновению результирующей силы.

### 1.3 Модель силовых постоянных до пятой координационной сферы

В данной работе для расчета фононного спектра графена используется модель силовых постоянных до пятой координационной сферы. Такая модель обычно обозначается как 5NNFC [6]. Она учитывает взаимодействия атома с ближайшими соседями вплоть до пятой координационной сферы включительно и позволяет построить динамическую матрицу  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$  путем преобразования Фурье силовых постоянных, заданных в реальном пространстве.

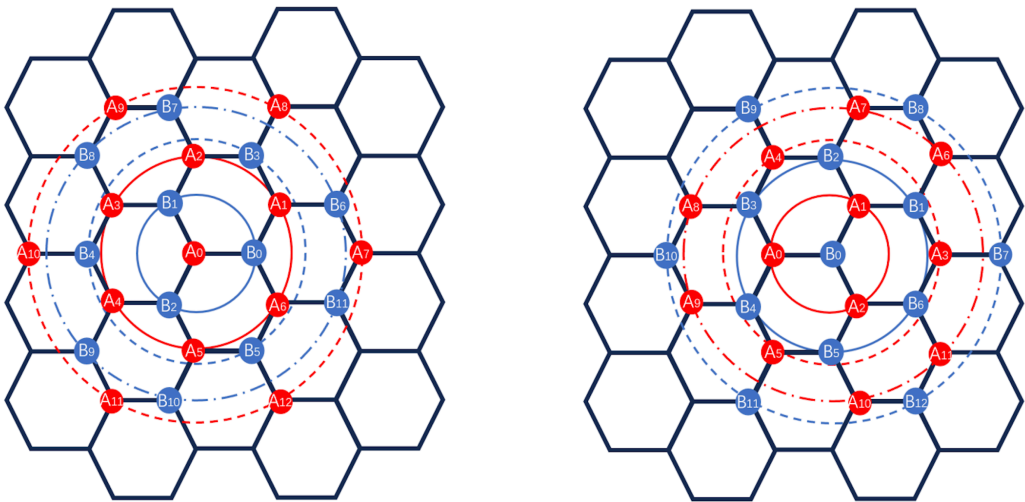


Рисунок 2 — Пять ближайших координационных сфер в графене

Для  $n$ -й координационной сферы тензор силовых постоянных удобно задавать в локальной системе координат, связанной с направлением меж-атомной связи. В этой системе координат тензор имеет диагональный вид:

$$\Phi^{(n)} = \begin{pmatrix} \phi_r^{(n)} & 0 & 0 \\ 0 & \phi_{ti}^{(n)} & 0 \\ 0 & 0 & \phi_{to}^{(n)} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Здесь  $\phi_r^{(n)}$  — радиальная силовая постоянная, соответствующая растяжению связи вдоль направления между атомами;  $\phi_{ti}^{(n)}$  — тангенциальная силовая постоянная, соответствующая изгибу связи в плоскости графена;  $\phi_{to}^{(n)}$  — тангенциальная силовая постоянная, соответствующая смещению вне плоскости графена. Радиальное направление совпадает с направлением меж-атомной связи, а два тангенциальных направления перпендикулярны ему.

Поскольку в модели учитываются пять координационных сфер, а для каждой сферы задаются три независимых параметра, всего используется 15 силовых постоянных:

$$\left\{ \phi_r^{(1)}, \phi_{ti}^{(1)}, \phi_{to}^{(1)}, \dots, \phi_r^{(5)}, \phi_{ti}^{(5)}, \phi_{to}^{(5)} \right\}. \quad (16)$$

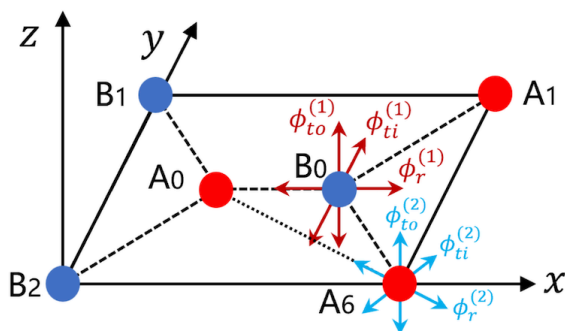


Рисунок 3 — Схематическое изображение радиальной и тангенциальных составляющих тензора силовых постоянных

В расчетах используются следующие параметры модели 5NNFC в единицах N/m:

Следует отметить, что тензор  $\Phi^{(n)}$  в приведенном виде относится к локальной системе координат, в которой ось  $x$  направлена вдоль выбранной межатомной связи. Однако в гексагональной решетке графена соседи одной и той же координационной сферы расположены в разных направлениях. Поэтому для построения полной динамической матрицы необходимо получить

Таблица 1 — Параметры модели силовых постоянных 5NNFC для графена

Координационная сфера	$\phi_r^{(n)}$ , N/m	$\phi_{ti}^{(n)}$ , N/m	$\phi_{to}^{(n)}$ , N/m
$n = 1$	414.644	134.903	99.063
$n = 2$	64.680	-48.770	-7.883
$n = 3$	-48.322	63.254	8.267
$n = 4$	9.036	2.067	-8.347
$n = 5$	16.582	2.660	1.762

тензоры силовых постоянных для всех симметрически эквивалентных направлений.

Для этого используется матрица поворота [5] вокруг оси  $z$ :

$$\mathbf{U}_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где  $\theta$  — угол между направлением межатомной связи и осью  $x$ .

Тензор силовых постоянных для повернутого направления определяется выражением:

$$\Phi' = \mathbf{U}_z^{-1}(\theta) \Phi \mathbf{U}_z(\theta). \quad (18)$$

Например, для первых ближайших соседей атома  $A_0$  тензоры взаимодействия с атомами  $B_0$ ,  $B_1$  и  $B_2$  могут быть записаны следующим образом:

$$\Phi(A_0, B_0) = \Phi^{(1)}, \quad (19)$$

$$\Phi(A_0, B_1) = \mathbf{U}_z^{-1} \left( \frac{2\pi}{3} \right) \Phi^{(1)} \mathbf{U}_z \left( \frac{2\pi}{3} \right), \quad (20)$$

$$\Phi(A_0, B_2) = \mathbf{U}_z^{-1} \left( \frac{4\pi}{3} \right) \Phi^{(1)} \mathbf{U}_z \left( \frac{4\pi}{3} \right). \quad (21)$$

Таким образом, благодаря симметрии графена можно построить силовые постоянные для всех направлений, используя ограниченный набор независимых параметров. После этого соответствующие тензоры силовых постоянных подставляются в выражения для блоков динамической матрицы  $\mathbf{D}_{AA}(\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{D}_{AB}(\mathbf{k})$ ,  $\mathbf{D}_{BA}(\mathbf{k})$  и  $\mathbf{D}_{BB}(\mathbf{k})$ .

## 1.4 Высокосимметричный путь в зоне Бриллюэна

Фононные дисперсионные кривые строятся вдоль высокосимметричного пути первой зоны Бриллюэна:

$$\Gamma \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow \Gamma. \quad (22)$$

Точка  $\Gamma$  соответствует центру зоны Бриллюэна, точка  $M$  — середине ее границы, а точка  $K$  — вершине гексагональной зоны Бриллюэна.

Для каждого значения волнового вектора  $\mathbf{k}$  на выбранном пути строится динамическая матрица  $\mathbf{D}(\mathbf{k})$ , после чего решается задача на собственные значения. В результате получается набор функций

$$\omega_1(\mathbf{k}), \omega_2(\mathbf{k}), \dots, \omega_6(\mathbf{k}), \quad (23)$$

которые образуют фононное дисперсионное соотношение графена.

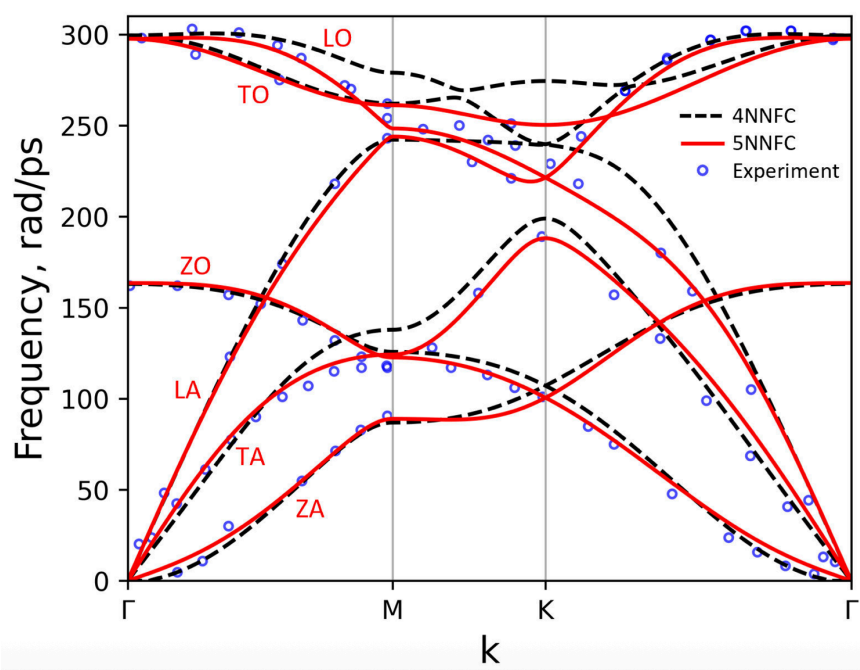


Рисунок 4 — Фононные дисперсионные кривые графена вдоль высокосимметричного пути  $\Gamma - M - K - \Gamma$ : сравнение результатов, полученных в рамках моделей 4NNFC и 5NNFC, с экспериментальными данными

Расчет фононных дисперсионных кривых выполняется с использованием программы, реализованной в среде MATLAB. Исходный код программы размещен в открытом доступе на GitHub: [https://github.com/lyushisyan/Graphene-lattice-dynamics/blob/main/Graphene\\_5NNFC\\_2D.m](https://github.com/lyushisyan/Graphene-lattice-dynamics/blob/main/Graphene_5NNFC_2D.m).

## 2 ЗАДАНИЕ

В данной работе необходимо рассчитать фоновые дисперсионные кривые графена вдоль высокосимметричного пути

$$\Gamma \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow \Gamma. \quad (24)$$

### Задание 1. Влияние отношения масс атомов

Рассчитать фоновый спектр графена при различных отношениях масс атомов двух подрешеток:

$$\frac{m_B}{m_A} = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1, 1.2. \quad (25)$$

В расчетах принять:

$$m_A = m, \quad m_B = \left( \frac{m_B}{m_A} \right) m. \quad (26)$$

Для каждого значения отношения масс построить график фоновых дисперсионных кривых. На графиках должны быть представлены все шесть фоновых ветвей: ZA, TA, LA, ZO, TO и LO.

### Задание 2. Влияние силовых постоянных

Рассчитать фоновый спектр графена при различных коэффициентах масштабирования силовых постоянных:

$$\eta = 0.8, 0.9, 1.0, 1.1, 1.2. \quad (27)$$

Все силовые постоянные необходимо умножить на коэффициент  $\eta$ :

$$\Phi' = \eta \Phi. \quad (28)$$

В расчетах принять одинаковые массы атомов двух подрешеток:

$$m_A = m_B = m. \quad (29)$$

Для каждого значения  $\eta$  построить график фоновых дисперсионных кривых. На графиках должны быть представлены все шесть фоновых ветвей: ZA, TA, LA, ZO, TO и LO.

## Требования к отчету

Отчет должен содержать:

1. цель работы;
2. краткие теоретические сведения;
3. графики фононных дисперсионных кривых для задания 1 или 2;
4. выводы по результатам выполненных расчетов;
5. ответы на контрольные вопросы.

## Контрольные вопросы

1. Почему элементарная ячейка графена содержит две подрешетки А и В, и как это влияет на число фононных ветвей?
2. Что означают обозначения фононных ветвей ZA, TA, LA, ZO, TO и LO?
3. Чем акустические фононные ветви отличаются от оптических с физической точки зрения?
4. Почему частоты акустических ветвей должны обращаться в нуль в точке Г?
5. Как массы атомов подрешеток А и В входят в динамическую матрицу?
6. Что описывают радиальная и тангенциальные силовые постоянные  $\phi_r^{(n)}$ ,  $\phi_{ti}^{(n)}$  и  $\phi_{to}^{(n)}$ ?

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Zhang Z.M.* Nano/Microscale Heat Transfer. — Cham : Springer International Publishing, 2020.
2. *Srivastava G.P.* The Physics of Phonons. — 2nd ed. — Boca Raton : CRC Press, 2022.
3. *Balandin A.A.* Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials // Nature Materials. — 2011. — Vol. 10, no. 8. — P. 569–581.
4. *Liu S., Yin F., Khvesyuk V.I.* Investigating Anisotropic Three-Phonon Interactions in Graphene's Thermal Conductivity Using Monte Carlo Method // International Journal of Thermophysics. — 2025. — Vol. 46, no. 2. — P. 22.
5. *Zimmermann J., Pavone P., Cuniberti G.* Vibrational modes and low-temperature thermal properties of graphene and carbon nanotubes: Minimal force-constant model // Physical Review B. — 2008. — Vol. 78, no. 4. — P. 045410.
6. *Mohr M., Maultzsch J., Dobardžić E., [et al.].* Phonon dispersion of graphite by inelastic x-ray scattering // Physical Review B. — 2007. — Vol. 76, no. 3. — P. 035439.