

ОБЪЕДИНЁННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ ИМ. Н.Н. БОГОЛЮБОВА

На правах рукописи

Красавин Сергей Евгеньевич

ИССЛЕДОВАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ ЯВЛЕНИЙ В МАТЕРИАЛАХ С
ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ДЕФЕКТАМИ РОТАЦИОННОГО ТИПА

1.3.3. –Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
доктора физико–математических наук

Дубна-2023

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
Объединённого института ядерных исследований

С электронной версией диссертации можно ознакомиться на официальном сайте
Объединённого института ядерных исследований в информационно-
телекоммуникационной сети «Интернет» по адресу <http://dissertations.jinr.ru/>.

С печатной версией диссертации можно ознакомиться в Научно-технической библиотеке
Объединённого института ядерных исследований (г. Дубна Московской области, ул.
Жолио-Кюри, д.6).

Технический секретарь
Диссертационного совета
Кандидат физико-математических наук

Ю.М. Быстрицкий

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Одним из ключевых направлений в физике новых материалов является экспериментальное и теоретическое исследование поликристаллических материалов, в частности наноструктурированных, имеющих кластеры размером от 2 до 100 nm [1],[2]. Спектр соединений, относящийся к данному виду материалов, на сегодняшний день очень широк: от низкоразмерных систем и квантовых точек до поликристаллического графена. Поликристаллическость в данном случае практически неизбежно является сопутствующим свойством в случае увеличения размера рассматриваемого образца при промышленном производстве. Интерес к данным материалам обусловлен двумя факторами. Во-первых, получаемые при исследовании поликристаллических материалов свойства могут сильно отличаться от тех, что присущи традиционным материалам и являться при этом уникальными. Во-вторых, такие материалы интересны с точки зрения фундаментальных физических явлений, таких как квантовый транспорт, квантоворазмерные и нетривиальные оптические эффекты, аномальное поведение вязкости, теплопроводности и других кинетических характеристик. Характерной особенностью наноструктурированных материалов является малость межзёренного пространства, вследствие чего большую роль в них играют межзёренные границы (занимаемый объем границы может составлять до 50% объема материала). Вместе с тем свойства границы определяются не только размером и геометрией, но и теми дефектами, которые присутствуют в стенке. Речь в первую очередь идёт о дислокациях (трансляционных топологических дефектах) [3] и дисклинациях (ротационных топологических дефектах) [4],[5] –дефектах, характерных для границ зёрен и оказывающих, как установлено на сегодняшний день, существенное влияние на механические свойства наноструктурированных материалов. Учитывая важность последних в современной электронике, возникает дополнительный, важный класс задач, связанный с изучением вклада топологических дефектов в электропроводность и теплопроводность гранулированных наносистем. Кроме того, исследование транспортных свойств материалов, содержащих стабильные дисклинационные дефекты, имеет фундаментальное значение для физики конденсированных сред в целом, так как даёт возможность получить ответ на важнейший вопрос о том, как происходит распространение электронов и фононов в неупорядоченных средах. На сегодняшний день имеется строгое математическое (геометрическое) обоснование наличия таких дефектов в аморфных сплавах, стёклах и квазикристаллах [6],[7],[8]. Для получения ответа на эти вопросы была сформулирована модель, представленная в данной диссертации. Модель позволяет вычислить транспортные характеристики в средах, где базовым элементом является дисклинационный диполь, являющийся элементарным стабильным ротационным дефектом

Цель диссертации

Целью диссертационной работы является теоретическое исследование поведения кинетических характеристик в материалах, содержащих стабильные дисклинационные дефекты. Для достижения этой цели были сформулированы и решены следующие задачи:

- Исследование поведения теплопроводности в поликристаллических диэлектриках в рамках дисклинационной модели. Объяснение поведения теплопроводности в этих материалах в области низких температур.
- Новое объяснение аномального поведения теплопроводности в диэлектрических стёклах в области низких и промежуточных температур на основе концепции двухосного диполя, включая область так называемого плато –температуры независимого поведения коэффициента теплопроводности.
- Исследование поведения остаточного сопротивления в простых металлах содержащих дисклинационные дефекты.
- Исследование Холловской подвижности в поликристаллическом нитриде галлия.
- Исследование поведения теплопроводности в поликристаллическом монослойном графене.
- Исследование влияния дополнительных дисклинаций и пустот в границе зёрен поликристаллического графена на теплопроводность.
- Исследование влияния вакансий на теплопроводность в графене.
- Исследование электрического транспорта в поликристаллическом графене.
- Исследование влияния дополнительных дисклинаций в границе зёрен поликристаллического графена на электропроводность.

Научная новизна

— Впервые описано поведение теплопроводности поликристаллических диэлектриков в рамках универсального подхода на основе концепции дисклинаций.

— Впервые описано поведение теплопроводности и электропроводности в широком интервале температур и концентраций в материалах, содержащих стабильные дисклинационные дефекты.

— Впервые описано поведение теплопроводности в широком интервале температур и концентраций в материалах, содержащих дисклинационные петли наклонного типа.

— Впервые в рамках дисклинационной концепции стекла дано объяснение

экспериментально-наблюдаемого поведения теплопроводности диэлектрических стёкол в широком температурном интервале.

– Впервые на основе дисклинационной модели границы зерна объяснено поведение теплопроводности в поликристаллическом графене и других квазидвумерных материалах.

– Впервые проведён анализ температурного поведения подвижности в перспективном широкозонном полупроводнике –нитриде галлия с учётом всех каналов рассеяния.

Научная и практическая значимость

Научная значимость полученных результатов заключается в том, что описано поведение транспортных характеристик в широком классе материалов, содержащих линейные ротационные дефекты-дисклинации, тогда как ранее подобные расчёты были проведены лишь для трансляционных линейных дефектов-дислокаций. Практическая значимость заключается в том, что разработанная модель позволяет сформулировать необходимые условия для получения нужного поведения транспортных характеристик в какой-либо среде содержащей линейные дефекты, а также проинтерпретировать полученные экспериментальные данные.

Достоверность результатов

Основные уравнения для вычисления транспортных характеристик являются точными аналитическими выражениями (времена релаксации), что обеспечивает достоверность полученных результатов. Численная расчётная часть базируется на общепризнанном и проверенном в мире программном обеспечении.

Личный вклад

Автором диссертации были реализованы все базовые вычисления лично. Идеи и постановка задач формулировались автором либо лично, либо при активном участии В.А. Осипова.

Апробация основных результатов

Результаты диссертационной работы докладывались на следующих российских и международных конференциях: международная конференция «Extended Defects in Semiconductors» (Bologna, Italy 1.06.02-6.06.02), международная школа- семинар «Topology in Condensed Matter» (Германия, Дрезден, MPI 8.05.02-31.07. 02 г.); международная конференция «Dubna-Nano 2008» (Россия, ОИЯИ, ЛТФ, Дубна, 7.07.08-11.07.08), международная конференция «Dubna-Nano 2010» (Россия, ОИЯИ, ЛТФ, Дубна, 5.07.10-10.07.10); Всероссийская конференция «Графен: Молекула и 2D кристалл»,

Новосибирский государственный университет, Институт неорганической химии им. Николаева А.В., Институт катализа им. Г.К. Борескова, (Новосибирск, Россия 3.07.17-7.07.17); Международное совещание «Low Dimensional Materials: Theory, Modelling and Experiment» 7.07.18-12.07.18, III Международная научно-практическая конференция «Графен и родственные структуры: синтез, производство и применение», (Россия, Тамбов, 13.11.2019-15.11.19), «Международная конференция: Современные проблемы теории конденсированных сред» (Дубна, Россия, 17.10.22-22.10.22).

Публикации

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 17 работах ведущих научных журналов мира.

Среди научных изданий, в которых опубликованы результаты диссертационной работы, ведущие мировые журналы (входящие в WoS/Scopus), такие как Scientific Reports (Nature), Journal of Physics-Condensed Matter, Journal of Applied Physics, Physics Letters A, а также отечественные журналы рекомендованные ВАК РФ – Физика твёрдого тела, Физика и техника полупроводников (Российская академия наук. Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук).

Основные положения, выносимые на защиту

1. Впервые в рамках метода деформационного потенциала исследовано поведение теплопроводности при наличии в среде стабильных топологических дефектов – дисклинационных диполей. Исследованы все возможные типы дисклинационных диполей и получены точные аналитические выражения для длин свободного пробега фонона при рассеянии на статических полях напряжения этих дефектов. Одна из дипольных конфигураций (биаксиальный дисклинационный диполь) является уникальной и позволяет объяснить поведение коэффициента теплопроводности в поликристаллах.
2. Впервые в рамках метода деформационного потенциала исследовано поведение теплопроводности в материалах, содержащих замкнутые дисклинационные дефекты: дисклинационные петли наклонного типа с вектором Франка, лежащим в плоскости петли, и дисклинационные диполи имеющие конечную длину вдоль линии дефекта. В случае дисклинационной петли обнаружено аномальное поведение теплопроводности, заключающееся в том, что в области низких температур имеется заметное подавление указанной характеристики с последующим ростом по квадратичному закону характерному при рассеянии на дислокациях. Для дисклинационных диполей конечной длины в поведении теплопроводности обнаружено дополнительное, линейное по температуре поведение в области низких температур.
3. Впервые предложено объяснение поведения теплопроводности в

аморфных диэлектриках и других разупорядоченных материалах в рамках концепции биаксиального диполя. При этом использовались только два модельных параметра: размер диполя и мощность образующих диполь дисклинаций. Особый интерес представляет тот факт, что предложенная модель позволяет объяснить температурное поведение теплопроводности в области так называемого плато между 1 К и 10 К. Найдена универсальная длина, равная $10 - 20 \text{ \AA}$, что согласуется с альтернативными подходами и, в частности, кластерной моделью стекла.

4. Исследован вклад границ зёрен в теплопроводность в однослойном поликристаллическом графене. Анализ температурной зависимости коэффициента теплопроводности показал, что данный канал рассеяния является значимым во всем температурном интервале, включая область высоких температур. Показано, что присутствие в 5-7-стенке дополнительных дисклинаций, возникновение которых связано со сбоями в углах разориентировки границы зерна, может вносить существенный вклад в тепловое сопротивление.
5. Исследована зависимость коэффициента теплопроводности в однослойном графене от концентрации вакансий. В расчётах предполагалось, что модуль Юнга и, соответственно, скорости распространения волн зависят от концентрации дефектов, что наблюдалось в экспериментах по механическим свойствам однослойного графена. В определённом интервале значений концентраций вакансий величины модуля Юнга являются максимальными. Проведённые расчёты показали, что такое поведение указанных характеристик приводит к уникальной зависимости теплопроводности от концентрации вакансий, когда с увеличением концентрации величина коэффициента теплопроводности также растёт.
6. Исследован вклад границ зёрен в удельное сопротивление в однослойном поликристаллическом графене. Наряду с рассеянием зарядов на потенциале деформации рассматривается также вклад, обусловленный электростатическим потенциалом от локализованных на 5-7-дефектах носителей заряда. Показано, что главным источником рассеяния является именно деформация, а вклад от электростатического потенциала стенки может играть роль лишь при достаточно большом сконцентрированном на ней заряде. Обнаружено, что величина удельного сопротивления чувствительна к размеру границы зерна. Кроме того, присутствие в стенке дополнительных дисклинационных диполей меньшей мощности, возникающих из-за сбоя в угле разориентировки границы зерна, может существенно увеличить величину удельного сопротивления.
7. Впервые исследован вклад в остаточное сопротивление, обусловленный рассеянием электронов клиновыми дисклинациями в металлах с параболической зонной структурой. Показано, что в концентрационной зависимости остаточного сопротивления наблюдается отклонение от линейной зависимости, которая

характерна для дислокаций. Данный результат является важным с точки зрения эксперимента, так как позволяет идентифицировать эти дефекты в материалах с пластической деформацией. Кроме того, обнаружено, что остаточное сопротивление чувствительно к мощности дефекта.

8. Впервые исследована роль полей деформации дислокационных стенок на подвижность носителей в нитриде галлия в рамках модели, развитой в диссертации. Показано, что наряду с электростатическим потенциалом, обусловленным зарядом на дислокационной стенке и являющимся главным каналом рассеяния, роль полей деформации также может быть существенной в области низких температур.

Структура и объём диссертации

Диссертация объёмом 160 страниц состоит из введения, шести глав и заключения, включает 39 рисунков, 1 таблицу, список цитируемой литературы к каждой главе. Общее число ссылок цитируемой литературы 228.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во **Введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цели исследования и методы, а также описана структура диссертации и основные положения, выносимые на защиту.

Глава 1 посвящена сжато изложению кинетического подхода Больцмана, а также другим методам для описания транспортных явлений в различных материалах. Описаны все возможные каналы рассеяния в рамках концепции времени релаксации.

В **разделе 1.1** представлен вывод уравнения для коэффициента теплопроводности в рамках схемы Больцмана [9],[10]. В **разделе 1.2** вводится понятие времени релаксации для коэффициента теплопроводности. **Раздел 1.3** посвящен методу теории линейного отклика (метод Кубо –Гринвуда) – альтернативному подходу для вычисления коэффициента теплопроводности. Описываются методы вычисления корреляционной функции, входящей в выражение для коэффициента теплопроводности [11]. В **разделе 1.4** кратко описываются современные численные методы вычисления коэффициента теплопроводности [12]. В **разделе 1.5** приводятся основные механизмы рассеяния фононов в твёрдых телах. Приведены аналитические выражения для времён релаксации, а также выражения для коэффициента теплопроводности соответствующие различным механизмам рассеяния. **Раздел 1.6** посвящен расчёту времени релаксации при рассеянии фононов на протяжённых дефектах. Рассматривается вывод времен релаксации, обусловленных рассеянием фононов

статическими полями напряжения краевой и винтовой дислокации, а также стенки, составленной из краевых дислокаций. В **разделе 1.7** рассказывается об особенностях поведения теплопроводности в поликристаллических материалах и стёклах. Обсуждаются низкотемпературные аномалии в этих материалах. В **разделе 1.8** даётся сжатая информация о поведении теплопроводности в низкоразмерных материалах.

Глава 2 посвящена формулированию дисклинационной модели границы зерна в поликристаллах, а также исследованию фононного рассеяния на стабильных дисклинационных дефектах и основана на работах [A3],[A5]. **Раздел 2.1** является базовым, где приводятся аргументы в пользу дисклинационной модели границы зерна. Времена релаксации, описывающие фононное рассеяние границами зёрен из **раздела 1.6**, были вычислены в предположении, что граница является малоугловой, наклонного типа [3]. Такая граница состоит из ряда хорошо определённых, параллельных краевых дислокаций с векторами Бюргерса \mathbf{b} , отстоящими друг от друга на расстоянии h , которые формируются, как хорошо известно, при смещении одного зерна относительно другого на определённый угол. Получаемое время релаксации в этом случае зависит только от расстояния между дислокациями h и не зависит от частоты [13]. Учитывая сказанное, мы получаем, что в области низких температур теплопроводность поликристалла должна определяться функциональной зависимостью теплоёмкости, которая пропорциональна T^3 . Однако ещё в ранних работах на поликристаллических образцах, наблюдалось отклонение от кубического закона [14]. В деформированных образцах LiF и сапфира, где дислокационные стенки были хорошо определены, также наблюдалось отклонение от T^3 –закона в области очень низких температур [15],[16]. Наблюдаемое отклонение от кубического температурного закона не является единственной причиной неадекватности дислокационной модели. Другой важнейшей для этого причиной является то, что большеугловая граница не может быть описана в рамках дислокационной концепции, так как само понятие вектора Бюргерса становится неопределённым по причине уменьшения расстояния между дислокациями. В работе [17] была предложена иная концепция описания границы зерна на основе других линейных дефектов ротационного типа – дисклинаций. Исходным пунктом в дисклинационной модели явился тот факт, что граница зерна является ротационным дефектом и, следовательно, должна быть описана более естественно с помощью этого класса дефектов. В отличие от дислокаций, дисклинации характеризуются аксиальным вектором ω (вектор Франка), описывающим поворот двух частей разреза материала на угол ω . В результате имеются три типа дисклинаций: клиновая, когда вектор ω параллелен линии дефекта (рисунок 1), дисклинация кручения, когда ω перпендикулярен линии дефекта (рисунок 2), и смешанная, содержащая как клиновую компоненту, так и компоненту кручения [4], [5].

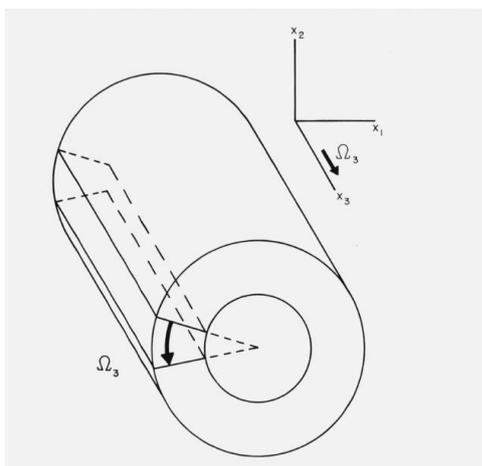


Рисунок 1 – Схематическое изображение клиновой дисклинации

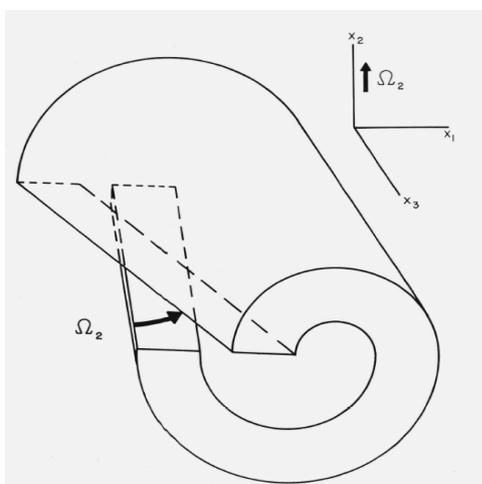


Рисунок 2 – Схематическое изображение дисклинации кручения

Дисклинации появляются в твёрдых телах в виде стабильных конфигураций, элементарной единицей которых является диполь, составленный из положительной и отрицательной дисклинации. Причина формирования стабильных дисклинационных дефектов в реальных материалах заключается в том, что энергия отдельной дисклинации пропорциональна квадрату линейного размера кристалла R [4],[18] тогда как энергия диполя, составленного из двух клиновых дисклинаций противоположенного знака, пропорциональна логарифму отношения R/L , где L – расстояние между двумя дисклинациями (плечо диполя). В разделе 2.1 диссертации приведены статические поля напряжений клинового дисклинационного диполя с векторами Франка $\omega = +\omega e_z$ в точке $(-L,0)$ и $\omega = -\omega e_z$ в точке $(+L,0)$ (см. рисунок 3) имеющие следующий вид [3],[A3],[A5]:

$$\sigma_{xx} = \frac{\mu\omega}{2\pi(1-\sigma)} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{(x+L)^2+y^2}{(x-L)^2+y^2} + \frac{y^2}{(x+L)^2+y^2} - \frac{y^2}{(x-L)^2+y^2} - l_1 \frac{(x+L)((x+L)^2-y^2)}{((x+L)^2+y^2)^2} + l_2 \frac{(x-L)((x-L)^2-y^2)}{((x-L)^2+y^2)^2} \right]$$

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu\omega}{2\pi(1-\sigma)} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{(x+L)^2+y^2}{(x-L)^2+y^2} + \frac{(x+L)^2}{(x+L)^2+y^2} - \frac{(x-L)^2}{(x-L)^2+y^2} - l_1 \frac{(x+L)((x+L)^2+3y^2)}{((x+L)^2+y^2)^2} + l_2 \frac{(x-L)((x-L)^2+3y^2)}{((x+L)^2+y^2)^2} \right]$$

$$\sigma_{zz} = \frac{\sigma\mu\omega}{\pi(1-\sigma)} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{(x+L)^2+y^2}{(x-L)^2+y^2} - l_1 \frac{(x+L)}{(x+L)^2+y^2} + l_2 \frac{(x-L)}{(x-L)^2+y^2} \right], \quad (1)$$

здесь μ -модуль сдвига, σ -коэффициент Пуассона, l_1 и l_2 – параметры, характеризующие отклонение осей ротации от линии дефекта. Интересно отметить, что поля напряжений (1) могут быть получены путём перехода от суммирования к интегрированию полей напряжения отдельных краевых дислокаций, выстроенных в ряд [19].

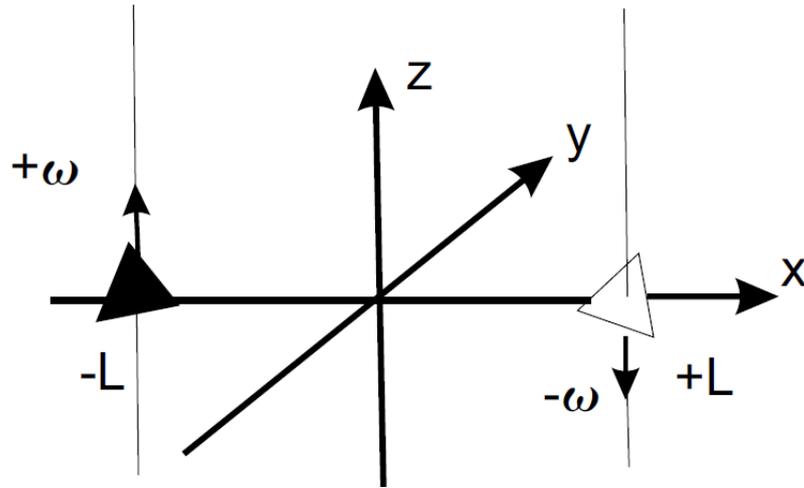


Рисунок 3 – Схематическое изображение диполя клиновых дисклинаций, образованного положительной дисклинацией в точке $(-L,0,0)$ с вектором Франка, направленным по направлению оси z , и дисклинацией в точке с координатами $(+L,0,0)$ с вектором Франка, направленным противоположно направлению оси z .

В разделе 2.2 осуществляется вычисление длины свободного пробега, обусловленное рассеянием фононов статическими полями напряжения дисклинационного клинового диполя произвольного вида. Рассматривается также вклад в коэффициент теплопроводности, вызванный этим каналом рассеяния. Вычисления осуществляются в рамках метода деформационного потенциала, ранее изложенного в разделе 1.6 при описании дислокаций. При этом предполагается, как это было сделано в классических работах по рассеянию на дислокациях [10], что присутствие протяжённого дефекта приводит к изменению скорости звука на величину δv_s . Относительное изменение скорости звука в этом случае пропорционально деформации дефекта: $\frac{\delta v_s}{v_s} = \gamma_s \Delta(\mathbf{r}) = \gamma_s \text{Sp} \frac{dv_i(\mathbf{r})}{dx_i}$ (γ_s – эффективная константа ангармонизма, $\Delta(\mathbf{r})$ – тензор деформации протяжённого дефекта). Изменение энергии акустического фонона,

связанное с присутствием дефекта может быть записано как: $\Delta E_{\text{ph}}(\mathbf{r}) = \hbar \mathbf{k} \delta v_s = \hbar \mathbf{k} v_s \gamma_s \Delta(\mathbf{r})$. В нашем случае $\Delta(\mathbf{r})$ есть сумма диагональных компонент тензора деформации, полученная на основе закона Гука: $E_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\mu(1+\sigma)} [(1+\sigma)\sigma_{ik} - \sigma\sigma_{ll}\delta_{ik}]$ и формул (1). Явное выражение для $\Delta E_{\text{ph}}(\mathbf{r})$ в нашем случае имеет вид:

$$\Delta E_{\text{ph}}(\mathbf{r}) = B \left[\frac{1}{2} \ln \frac{(x+L)^2 + y^2}{(x-L)^2 + y^2} - l_1 \frac{(x+L)}{(x+L)^2 + y^2} + l_2 \frac{(x-L)}{(x-L)^2 + y^2} \right], \quad (2)$$

где $B = \hbar \mathbf{k} v_s \gamma_s \frac{\omega}{2\pi} \frac{(1-2\sigma)}{(1-\sigma)}$. Из последнего уравнения видно, что как и для любого линейного дефекта, характер рассеяния в данном случае является двумерным с сохранением для данной геометрии z компоненты импульса. В этом случае длина свободного пробега, имеющая для двумерного рассеяния вид:

$$\Lambda_s^{-1}(q) = n_{\text{def}} \int_0^{2\pi} d\theta (1 - \cos \theta) R(\theta), \quad (3)$$

здесь $R(\theta) = (kS^2/2\pi\hbar^2 v_s^2) \overline{|\langle \mathbf{k} | \delta E_{\text{ph}}(\mathbf{r}) | \mathbf{k}' \rangle|^2}$ — эффективный радиус рассеяния.

$$\Lambda_s^{-1}(q) = n_{\text{def}} D^2 (vL)^2 q \left\{ z^2 \left(\frac{1}{2} + J_0^2(2qL) \right) + \left(8 - \frac{z(z+8)}{2} \right) \left(J_0^2(2qL) + J_1^2(2qL) \right) - \frac{4}{qL} J_0(2qL) J_1(2qL) \right\}, \quad (4)$$

где $z = \frac{\Delta l}{L} = \frac{l_1 - l_2}{L}$, $D = \frac{\pi \gamma (1-2\sigma)}{(1-\sigma)}$, $v = \frac{\omega}{2\pi}$ — индекс Франка. Интересно отметить, что данная формула (4), полученная впервые в работах [A2],[A3], позволяет вычислить длину свободного пробега фонона для всех возможных видов диполей, что достигается вариацией параметра z (или l_1, l_2) в уравнении (4). Возможны следующие варианты: $l_1 - l_2 = 2L$ — одноосный диполь, $l_1 = -l_2$ — симметричный одноосный диполь, $l_1 = l_2$ — симметричный двухосный диполь, $l_1 \neq l_2 \neq 0$ — двухосный диполь со смещёнными осями ротации. На рисунке 4 представлены зависимости длины свободного пробега от приведённого волнового вектора q/q_{max} для всех видов диполей. Из рисунка 4 видно, что зависимость, полученная для симметричного двухосного диполя, заметно отличается от аналогичных для остальных дефектов тем, что в пределе $q \rightarrow \infty$ длина свободного пробега Λ становится q — независимой. В длинноволновом пределе при $q \rightarrow 0$ реализуется дислокационная зависимость длины свободного пробега: $\Lambda \sim q^{-1}$. Таким образом, в случае независимой от q длины свободного пробега Λ теплопроводность становится пропорциональной теплоёмкости, что и наблюдается для материалов с кластерной структурой. На рисунке 5 представлена зависимость приведённой теплоёмкости $\kappa(T)/T^3$, где

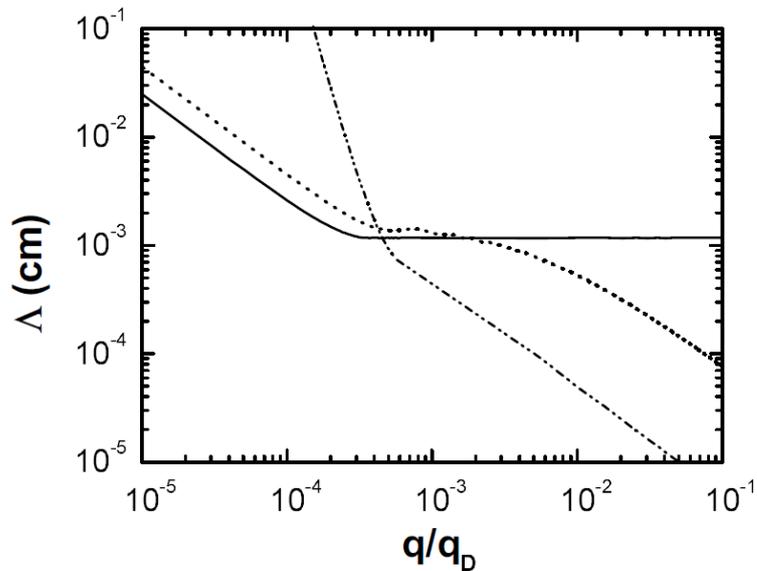


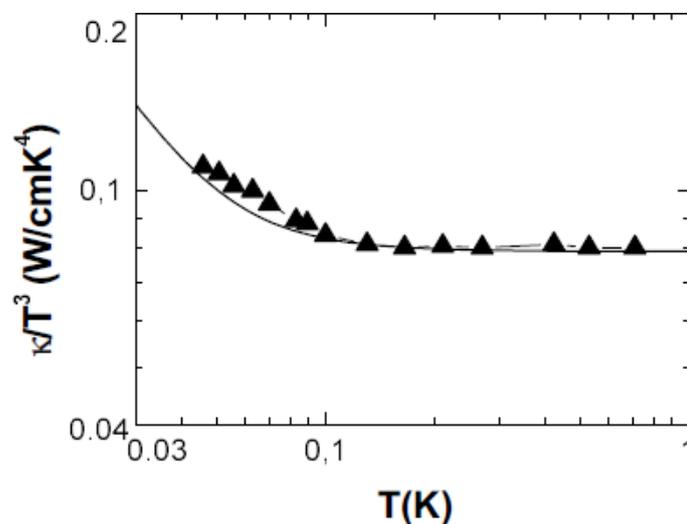
Рисунок 4 – Длина свободного пробега фонона Λ как функция приведённого волнового вектора q/q_D при рассеянии на клиновом дисклинационном диполе: а) двухосный диполь $\Delta l = 0$, черная сплошная линия, б) одноосный диполь, $\Delta l = 2L$, жёлтая прерывистая линия, в) диполь смешанного типа, $\Delta l = 0.5L$, зелёная прерывистая линия. Использовались следующие модельные параметры: $L = 1.35 \times 10^{-5} \text{cm}$, $\nu = 0.023$, $n_{\text{def}} = 9 \times 10^8 \text{cm}^{-2}$, $D = 2.6$, $\nu_S = 4.8 \times 10^5 \text{cm s}^{-1}$, $k_{\text{max}} = 2 \times 10^8 \text{cm}^{-1}$.

использовалась длина свободного пробега, описывающая рассеяние фононов полями напряжения симметричного двухосного диполя, с формулой:

$$\kappa = \frac{k_B^4 T^3}{2\pi^2 \nu_S^2 \hbar^3} \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} x^4 e^x (e^x - 1)^{-2} \Lambda_{\text{tot}}(x) dx, \quad (5)$$

здесь $x = \hbar\omega/k_B T = \hbar q \nu / k_B T$, Θ_D – температура Дебая, $\Lambda_q(sx)$ – длина свободного пробега s -ой фононной ветки, связанная с возмущением обусловленным деформацией симметричного двухосного диполя.

Рисунок 5 – График приведённой теплопроводности κ/T^3 , обусловленной рассеянием фононов статическими полями напряжения дисклинационного клинового диполя с



несмещенными осями ротации. Дисклинационный диполь в рассматриваемой задаче моделирует межзёренную границу. Используемые модельные параметры те же, что на рисунке 2. Экспериментальные точки в виде треугольников соответствуют экспериментальным значениям для материала LiF из работы [14].

В качестве тестирования использовались экспериментальные данные и материальные параметры из работы [14] для поликристаллического LiF, показанные на рисунке 5 в виде тёмных треугольников. Видно хорошее согласие во всём температурном интервале, включая область перехода, где $\kappa \sim T^2$ с уменьшением температуры. **Раздел 2.3** посвящён исследованию фононного рассеяния на другом важном с точки зрения реализации в средах дефекте – дисклинационной петле наклонного типа [A6]. Рассеяние волн на дисклинационной петле, расположенной в плоскости $z=0$ с вектором Франка $(0, \Omega, 0)$ вычислялось, как и в других разделах методом деформационного потенциала. Явное выражение для изменения энергии фонона при рассеянии на статических полях напряжения дисклинационной петли имеет вид:

$$\Delta E_{\text{ph}} = \hbar \mathbf{k} v_s \gamma_s \text{Sp} \mathbf{e}_{ii}(\mathbf{r}) = \hbar \mathbf{k} v_s \pi \gamma_s \frac{\omega}{2\pi} \frac{(1-2\sigma)}{(1-\sigma)} \cos \varphi J(2,1;1), \quad (6)$$

здесь $J(2,1;1) = \int_0^\infty k dk J_2(k) J_1\left(\frac{kr}{R}\right) \exp\left(-\frac{k|z|}{R}\right)$ – интеграл Лифшица – Ханкеля, $J_m(x)$ – функция Бесселя первого рода. Как и в случае дисклинационных диполей, в дисклинационной петле существует характерный размер – диаметр петли $2R$, отделяющий два режима рассеяния. В случае $2kR < 1$ длина свободного пробега $\Lambda_s(q) \sim q^{-6}$, а в противоположном режиме коротких волн $2kR > 1$, $\Lambda_s(q) \sim q^{-1}$. Таким образом, было показано, что дисклинационная петля наклонного типа является сильно экранированным объектом с интересной особенностью в температурном поведении коэффициента теплопроводности κ . Особенность заключается в присутствии минимума κ при некоторой температуре T^* , которая определяется из условия $2kR \sim 1$ в приближении тепловых фононов. В **разделе 2.4** рассматривается фононное рассеяние диполем клиновых дисклинаций конечной одинаковой длины d . В этом случае задача становится трёхмерной, и в отличие от предыдущего рассмотрения, где было обнаружено два режима рассеяния, здесь возникает три возможных режима за счёт дополнительного параметра [A4]. В случае $kd > 1$ имеются два варианта $kL > 1$ и $kL < 1$. Длина свободного пробега $\Lambda \sim k^{-1}$ при $kd > 1$ и $kL < 1$ (дислокационное поведение с $\omega \sim T^2$), тогда как $\Lambda \rightarrow \text{const}$ при $kd > 1$ и $kL > 1$ ($\omega \sim T^3$). В описанном случае речь идёт о рассмотренном в первом параграфе рассеянии с $d = \infty$.

Глава 3 посвящена исследованию поведения теплопроводности в стёклах в рамках дисклинационной модели неупорядоченных материалов [6],[20], в которой стеклоподобная структура рассматривается как хаотическое распределение дисклинаций и дисклинационных диполей. Основные результаты данной главы, представлены в работах [A2],[A5]. В **разделе 3.1** приводятся основные экспериментальные факты, касающиеся особенности теплопроводности в стёклах и аморфных сплавах.

Температурное поведение теплопроводности κ в данном классе материалов существенно отличается от аналогичного у кристаллов. В области очень низких температур при $0.1\text{K} \leq T \leq 1\text{K}$ теплопроводность растёт как T^2 в отличие от T^3 – поведения кристаллического SiO_2 . Для значений T в интервале $1 \div 10\text{K}$ наблюдается так называемая область "плато", то есть температурнезависимое поведение κ . Выше 10K наблюдается слабый рост теплопроводности вплоть до высоких температур. Такое поведение теплопроводности является универсальными обнаружено для широкого спектра стеклоподобных материалов (рисунок 6).

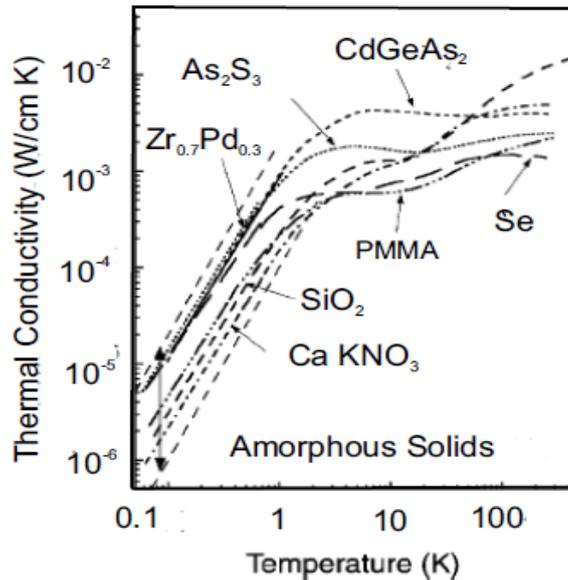


Рисунок 6 – Температурная зависимость коэффициента теплопроводности для некоторых аморфных соединений из работы: Rev.Mod.Phys. vol.74 (2002) p. 991.

Раздел 3.2 посвящен изложению основной на сегодняшний день концепции для описания тепловых и транспортных свойств стёкол и аморфных материалов – модели двухуровневых состояний (модель ДУС), впервые изложенной в классических работах [21],[22]. В **разделе 3.3** рассматривается модель критических “мягких” потенциалов, являющаяся обобщением модели ДУС [23]. Критические атомные потенциалы отличаются от других ангармонических потенциалов тем, что движения атомов в них осуществляются с аномально малой величиной квазиупругого параметра $|k| = \frac{d^2 v}{dx^2} \ll k_0 = M\omega_D^2$ (M – масса атома, ω_D – Дебаевская частота, x – обобщенная координата). **Раздел 3.4** посвящен рассмотрению проблемы теплового транспорта в рамках модели Эйнштейна [24]. В данной модели постулируется, что тепловой транспорт в стеклах выше $\sim 30\text{K}$ осуществляется посредством случайной передачи

энергии от атома к атому, совершающих независимые гармонические колебания с разными фазами в разупорядоченном материале. В **разделе 3.5** излагается фрактонная модель неупорядоченных материалов, представленная в работах [25],[26]. **Раздел 3.6** посвящён обоснованию модели стекла, где базовым элементом являются дисклинации. Данный подход имеет долгую историю и начинается с пионерских работ [27],[28] в которых рассматривались варианты различных упаковок атомов в переохлаждённых жидкостях и металлических стёклах. Общий вывод заключался в том, что в таких соединениях энергетически более выгодно формирование политетраэдрических структур, составленных из тетраэдров. Плотная упаковка тетраэдров приводит к деформациям, которые как раз и описываются дисклинациями. К примеру, упаковка с шестью прилегающими тетраэдрами приводит к тому, что общее ребро для всех шести тетраэдров становится частью линии дисклинации [28]. Концепция, предложенная в упомянутых работах, была подтверждена в более поздних работах по исследованию изометрических отображений политопа {3,3,5} существующего на гиперсфере с отрицательной кривизной на евклидову плоскость [29]– [31]. Отдельного рассмотрения заслуживает подход, предложенный в работе [32], который показал используя строгий математический аппарат гомотопической теории групп, что в модели случайной непрерывной сетки именно дисклинации являются стабильными дефектами. В этой картине дисклинационная линия пронизывает кольца с нечетным числом рёбер (5-7-дефекты), избегая кольца с чётным числом рёбер R^3 [33]. В **разделе 3.7** формулируется модель, возникшая в результате соединения положений изложенных в главе 2 и идей, представленных в пункте 3.7. В главе 2 диссертации было показано, что вклад в теплопроводность, обусловленный полями напряжений клинового дисклинационного диполя с несмещёнными осями ротации пропорционален квадрату температуры, так как в длинноволновом пределе для этого уникального рассеивателя частотная зависимость длины свободного пробега фонона: $\Lambda(\omega) \sim \omega^{-1}$. Квадратичная зависимость коэффициента теплопроводности и в низкотемпературной области была обнаружена и в стёклах с последующим выходом на плато–области, где теплопроводность с температурой практически не меняется при $5K \leq T \leq 20K$ [34],[35]. В статье [A2], являющейся базовой для главы 3, было показано, что область «плато» может быть воспроизведена в рамках предложенного формализма путём введения дополнительного Рэлеевского рассеяния, играющего главную роль при малых k (рассеяние коротких волн связанное с вариацией плотности вещества или вариацией сил межатомного взаимодействия в решётке). Таким образом, длина пробега в данном случае имеет вид:

$$\Lambda_{\text{tot}}(k) = (\Lambda_D^{-1}(k) + \Lambda_R^{-1}(k))^{-1}, \quad (7)$$

где $\Lambda_D^{-1}(k)$ даётся уравнением (4) при $z=0$ или $l_1 = l_2 = 0$, и $\Lambda_R^{-1}(k)$ есть обратная величина длины пробега, связанная с Рэлеевским рассеянием, имеющая явный вид:

$$\Lambda_R^{-1}(k) = D^{-1}(\hbar\omega/k_B)^{-4} + l_0 \quad (8)$$

(D – модельный параметр, k_B – постоянная Больцмана, l_0 – минимальная возможная длина пробега фонона). На рисунке 7 приведена суммарная длина свободного пробега Λ_{tot} в виде сплошной линии как функция частоты ($\omega_s = kv_s$, s – номер акустической ветви) для модельных параметров из [38].

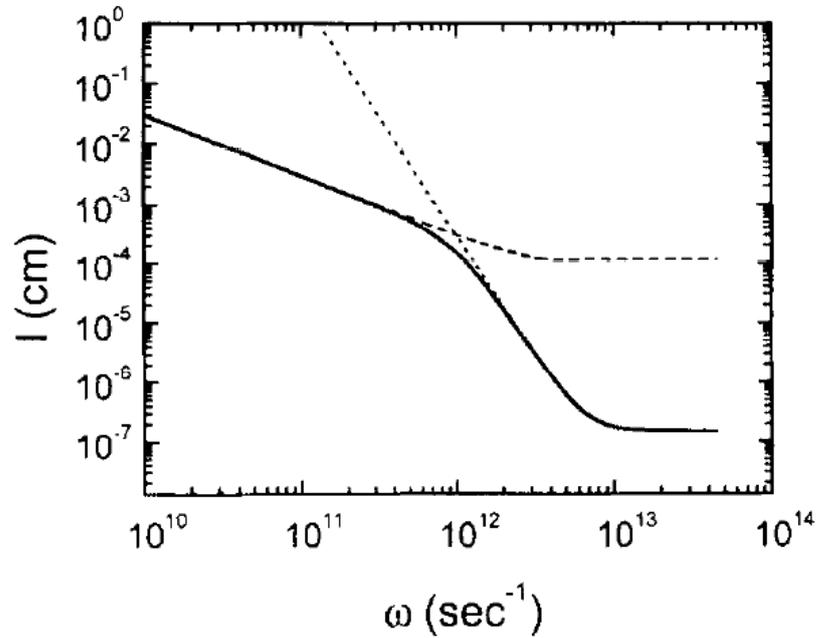


Рисунок 7 – Длина свободного пробега фонона Λ_D (пунктирная линия), Λ_R (точечная линия), Λ_{tot} (сплошная линия). Используемые при расчёте параметры: $n_{def} = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, $2L = 20 \text{ \AA}$, $v = 4.1 \times 10^5 \text{cm/s}$, $D = 1.0 \text{ cm}^{-1} \text{K}^{-4}$, $l_0 = 15 \text{ \AA}$, $v = \Omega/2\pi = 0.1$

Из рисунка 7 видно, что в длинноволновом пределе доминирует рассеяние, обусловленное дисклинационным диполем ($\Lambda_{tot} \sim \omega^{-1}$), затем возникает область, где оба канала рассеяния – дипольный и Рэлеевский дают вклад в Λ_{tot} . В высокочастотном пределе, как было сказано выше, Рэлеевский вклад является лидирующим. Соответствующая Λ_{tot} из рисунка 7 температурная зависимость теплопроводности с учетом Дебаевского спектра и материальных параметров для аморфного SiO_2 представлена на рисунке 8, где экспериментальные точки показаны в виде чёрных треугольников. Расчёт производился по формуле (5). Из рисунка видно, что имеется хорошее согласие с экспериментом.

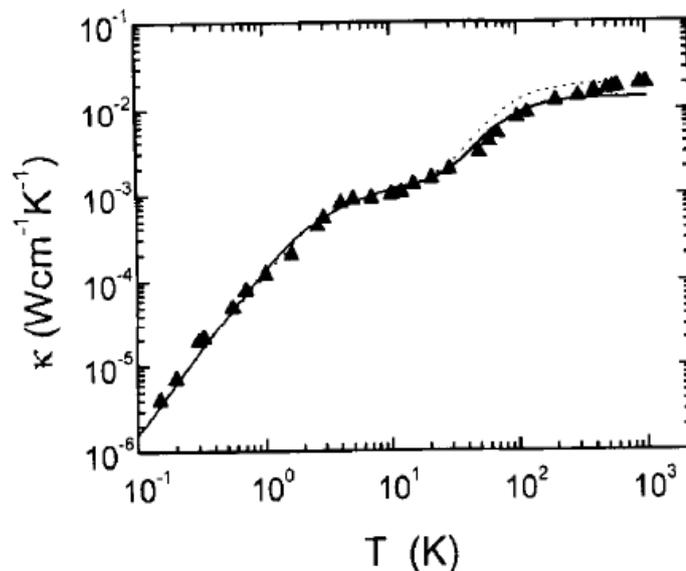


Рисунок 8 – Температурная зависимость коэффициента теплопроводности, вычисленная по формулам (7) и (8) при $l_0 = 10 \text{ \AA}$ (сплошная темная линия), $l_0 = 15 \text{ \AA}$ (точечная линия). Используемый набор параметров для данного рисунка: $\theta = 342 \text{ K}$. Экспериментальные точки для тестируемого соединения a-SiO₂ взяты из работы [35].

Отметим, что наилучшее согласие для a-SiO₂ было достигнуто при размере диполя $2L$ равным 20 \AA , что согласуется с кластерной моделью стекла [36],[37]. Заметим также, что в отличие от общепринятого подхода в рамках модели двухуровневых систем (ДУС), в данном подходе нет необходимости вводить плохо определённый физический параметр Λ_{\min} – минимальную длину свободного пробега, как это было сделано в работе [38]. На рисунке 9 представлены кривые со стеклоподобным поведением для других соединений.

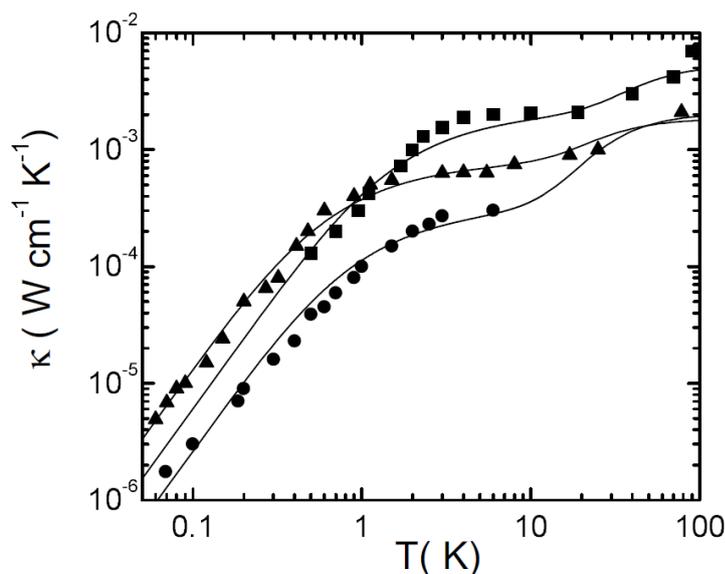


Рисунок 9 – Температурная зависимость коэффициента теплопроводности, вычисленная по формулам (7) и (8), для аморфного a-GeO₂ (чёрные квадраты), a-Se (треугольники),

полистерол (чёрные кружки).

Видно, что имеется также хорошее согласие между экспериментальными точками и расчётными кривыми. Получено хорошее согласие с экспериментальными зависимостями $\chi(T)$ для широкого класса соединений. Глава 4 посвящена, в отличие от предыдущих глав, исследованию электронного рассеяния в металлах с простой зонной структурой, содержащих дисклинационные дефекты. В разделе 4.1 на основе метода деформационного потенциала вычислялась энергия возбуждения для электронов при рассеянии на статических полях напряжения отдельной клиновой дисклинации:

$$\delta U(\mathbf{r}) = -G_d \text{Sp } E_{AB}(\mathbf{r}), \quad (9)$$

где $E_{AB}(\mathbf{r})$ – диагональные компоненты тензора деформации дисклинационного клинового дефекта, G_d – константа деформационного потенциала. Как и в случае фононов рассмотрена дисклинация с линией дефекта вдоль оси z . Вектор Франка Ω , характеризующий мощность дефекта, со-направлен с линией дефекта. С учётом условия сохранения компоненты волнового вектора электрона \mathbf{k} при рассеянии по оси z , вычислялась двумерная амплитуда рассеяния $f_{\text{def}}(\theta)$, а также усреднённое по конфигурациям дефектов обратное время релаксации $\langle \tau^{-1} \rangle$.

Кроме того, в расчёты был включён дополнительный канал рассеяния, связанный с так называемым топологическим рассеянием [39]. В результате, с помощью формулы Друде вычислялось остаточное сопротивление ρ , обусловленное данными дефектами как функция их концентрации. При этом расчёт ρ проводился как с учётом топологического вклада, так и без него. Показано, что в области малых концентраций дефектов ($n_{\text{def}} < 10^{11} \text{cm}^{-2}$), главным источником рассеяния является рассеяние связанное с деформационным каналом, который приводит к корневой зависимости ρ от концентрации дефектов n_{def} . Вычисления также показали сильную зависимость ρ от мощности дисклинации Ω . Результаты данного раздела представлены автором в работе [A1]. В разделе 4.2 исследовался вклад в остаточное сопротивление ρ обусловленный рассеянием электронов статическими полями напряжения клинового дисклинационного диполя общего вида т.е. когда оси ротации смещены относительно линий дефектов на расстояния l_1 и l_2 ($z \neq 0$ в уравнении (4)). Расчёт остаточного сопротивления также производился по формуле Друде с временем релаксации, вычисленным в рамках Борновского приближения по формуле (9), где $E_{AB}(\mathbf{r})$, в данном случае, диагональные компоненты клинового дисклинационного диполя [A9]. Задача о рассеянии электронов дислокационными стенками в нитриде галлия (GaN) является последней в главе 4 и рассматривается в разделе 4.3 на основе работы [A10]. Как и в предыдущих главах, дислокационная стенка в данной задаче моделируется клиновым

дисклинационным диполем и исследуется роль статических полей напряжения наряду с электростатическим потенциалом стенки, обусловленным зарядом на дислокациях и примесями [A11]. В Борновском приближении вычисляется время релаксации и подвижность для каждого канала рассеяния с характерной для полупроводников деформационной константой $G=4 \text{ eV}$. Результаты вычислений температурной зависимости подвижности μ представлены на рисунке 10. Как видно из рисунка, вклад от деформаций стенки в μ может доминировать при низких температурах для определённых концентраций дислокаций в стенке ($N_{\text{dis}} \approx 10^8 \text{ cm}^{-2}$), и концентрации стенок $n_{\text{def}} \approx 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Теоретический анализ показал, что подвижность, связанная с деформационным рассеянием, изменяется с температурой по закону $T^{3/2}$.

Холловская подвижность для данного материала вычислялась для двух значений $N_{\text{dis}} = 4 \times 10^8$ и $2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ из работы [40]. Результаты вычислений представлены на рисунке 11, из которого видно, что имеется хорошее согласие с экспериментом в температурном интервале $30\text{K} < T < 100 \text{ K}$.

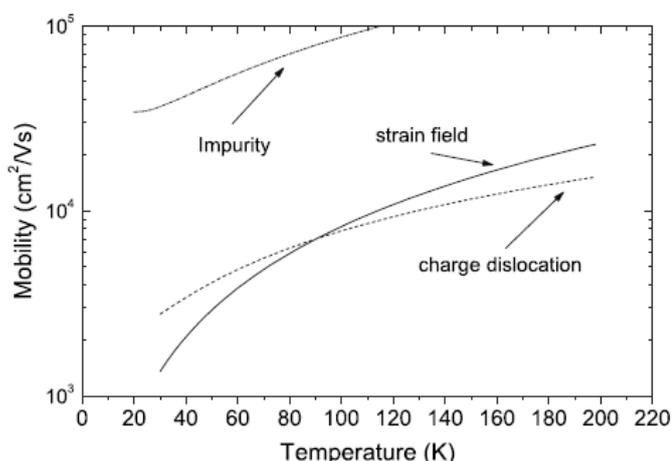


Рисунок 10 – Подвижность для каждого канала рассеяния как функция температуры с модельными параметрами: $N_{\text{dis}}=10^8 \text{ cm}^{-2}$, $n_{\text{def}}=1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, $f=0.8$, $n=4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, $p=10^{-2} \mu\text{m}$, $h=1.2 \mu\text{m}$

Глава 5 посвящена исследованию теплового транспорта в перспективном наноматериале – монослойном поликристаллическом графене, представляющим из себя однослойную плёнку, которая состоит из углеродных колец, образующих гексагональную решётку. В **разделе 5.1** рассматриваются кристаллографические и транспортные аспекты чистого монослойного графена. Одной из особенностей транспортных свойств графена как известно, является высокая подвижность носителей ($\mu \sim 1500027000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$), которая слабо зависит от температуры, [41], [42].

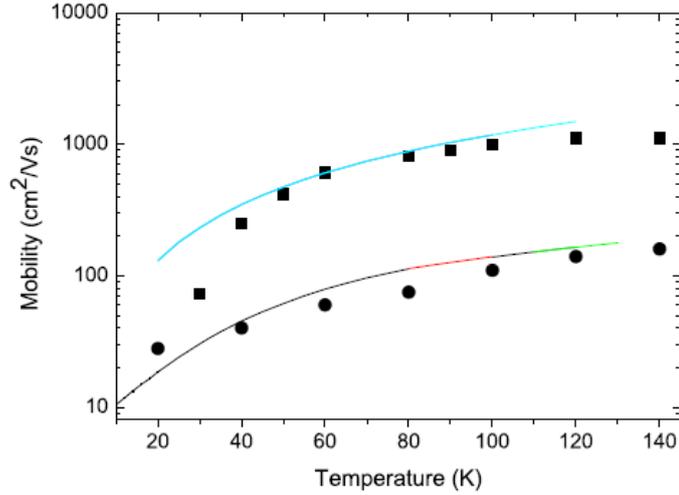


Рисунок 11 – Холловская подвижность как функция температуры для двух образцов GaN с $N_{dis}=10^8\text{cm}^{-2}$ (чёрные квадраты), $N_{dis}=2 \times 10^{10}\text{cm}^{-2}$ (чёрные кружки) из работы [A10]. Сплошные линии – теоретические кривые. Набор модельных параметров (для квадратов): $G=9\text{eV}$, $f=0.92$, $p=9 \times 10^{-3}\mu\text{m}$, $n_{def}=2.7 \times 10^{10}\text{cm}^{-2}$; (для кружков): $G=7\text{eV}$, $f=0.98$, $p=6 \times 10^{-3}\mu\text{m}$, $n_{def}=1.5 \times 10^{10}\text{cm}^{-2}$.

Также на сегодняшний день хорошо установлено, что графен имеет самую высокую среди твёрдых тел теплопроводность: $48.4 \div 53 \text{ Вт см}^{-1}\text{K}^{-1}$, [43],[44]. Учитывая квазидвумерный характер теплопроводности, уравнение (5) в данном случае может быть записано как (см.[45],[A15]):

$$\kappa_{\alpha\beta} = \frac{1}{hL_xL_y} \sum_{sq} \tau(qs) v_{\alpha}(s, q) v_{\beta}(s, q) \frac{\partial N_0(\omega_s)}{\partial T} \hbar \omega_s(q) + \kappa_N, \quad (10)$$

где $L_x=d$ – ширина образца, L_y – длина образца, h – толщина слоя, $\tau(qs)$ – суммарное время релаксации от всех каналов, $v_{\beta}(s, q)$ – компонента групповой скорости фонона, соответствующая s -й моде, $N(\omega_s)$ – плотность фононных состояний соответствующая данной s -й моде. Введение последнего члена κ_N в уравнение (10), который описывает вклад, связанный с нормальными процессами и рассмотренный в главе 1, позволяет получить адекватные значения теплопроводности в графене. Время релаксации в формуле (10) связано с временами релаксации отдельных каналов рассеяния $\tau_i(q, s)$ через формулу:

$$\frac{1}{\tau(q, s)} = \sum_i \frac{1}{\tau_i(q, s)}. \quad (11)$$

В $\tau_i(q, s)$ входит: рассеяние на границах образца, рассеяние на точечных примесях, фонон-фононное рассеяние, а также, в случае поликристаллического графена, рассеяние статическими полями напряжений межзёрненной стенки. **Раздел 5.2** посвящён формулированию модели, описывающей рассеяние фононов областями деформации,

обусловленными межзёренными стенками. Модель математически близка к той, что развивается в главе 2, однако в данном случае стенка моделируется не одним клиновым дисклинационным диполем, а набором выстроенных в ряд дисклинационных диполей, что позволяет более тонко рассмотреть рассеяние в высокочастотном пределе и учесть прозрачность стенки (см. [A16]). Такое рассмотрение обусловлено тем, что межзёренные границы в поликристаллическом графене состоят из периодически повторяющихся в определённом направлении 5-7-диполей (пентагон-гептагонные кольца), что соответствует мощности дефекта $\Omega = \pm 60^\circ$ (рисунок 12а). При этом возможны замкнутые конфигурации с образованием дефектов типа Стоуна-Уэйлса (рисунок 12b).

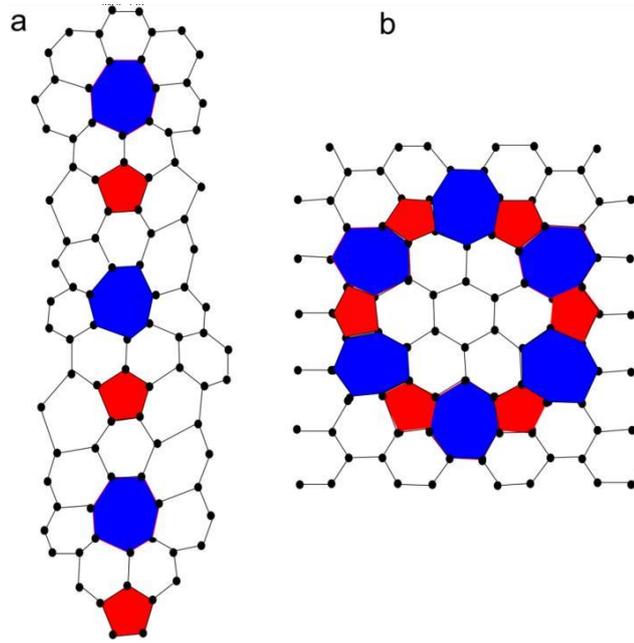


Рисунок 12 – Два иллюстративных примера границ зёрен в графене: а) открытая конфигурация б) замкнутая конфигурация.

Таким образом, поле напряжения границы зерна в данном подходе есть сумма полей напряжения каждого диполя. В этом случае изменение энергии фонона, связанное с присутствием такого дефекта, может быть записано как: $\Delta E_{ph}(\mathbf{r}) = \hbar k v_s \gamma_s \Delta(\mathbf{r}) = \hbar k v_s \gamma_s \frac{\Omega}{2\pi} \frac{(1-2\sigma)}{(1-\sigma)} \sum_{n=1}^p \ln \frac{(x-x_{n1})^2 + (y-y_{n1})^2}{(x-x_{n2})^2 + (y-y_{n2})^2}$, где каждый отдельный член суммы даётся выражением (3) при $l_1 = l_2 = 0$. Используя уравнение (3а) для длины свободного пробега, можно получить в данном случае уравнение общего вида:

$$\Lambda_{GB,s}^{-1}(q) = \frac{n_{GB} v^2 D^2 \pi}{4k} \sum_{n=1}^p \sum_{m=1}^p [-\mathfrak{S}(k, x_{n2}, x_{m1}, y_{n2}, y_{m1}) - \mathfrak{S}(k, x_{n1}, x_{m2}, y_{n1}, y_{m2}) + \mathfrak{S}(k, x_{n1}, x_{m1}, y_{n1}, y_{m1}) + \mathfrak{S}(k, x_{n2}, x_{m2}, y_{n2}, y_{m2})], \quad (12)$$

где n_{GB} – концентрация границ, p – число диполей в стенке, $D = \frac{\gamma_s(1-2\sigma)}{1-\sigma}$,

$\nu = \frac{\Omega}{2\pi}$ – индекс Франка. Явное выражение для функции $\mathfrak{S}(k, x_{ni}, x_{mj}, y_{ni}, y_{nj})$ есть комбинация функций Бесселя первого рода:

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}(k, x_{ni}, x_{mj}, y_{ni}, y_{nj}) = & -2\pi k^2 [(x_{ni} - x_{mj})^2 + (y_{ni} - \\ & y_{mj})^2] [J_0^2(k\sqrt{(x_{ni} - x_{mj})^2 + (y_{ni} - y_{mj})^2}) + \\ & J_1^2(k\sqrt{(x_{ni} - x_{mj})^2 + (y_{ni} - y_{mj})^2}) \\ & - \frac{1}{k\sqrt{(x_{ni} - x_{mj})^2 + (y_{ni} - y_{mj})^2}} J_0(k\sqrt{(x_{ni} - x_{mj})^2 + (y_{ni} - y_{mj})^2}) \\ & J_1(k\sqrt{(x_{ni} - x_{mj})^2 + (y_{ni} - y_{mj})^2})]. \end{aligned} \quad (13)$$

Для дефектов типа Стоуна-Уэйлса в выражении (13) мы должны задать следующие параметры: $p=2$, $(x_{1i}, y_{1i}) = (\pm \frac{L}{2} + \delta, \frac{L}{2} \pm \delta)$, $(x_{2i}, y_{2i}) = (\mp \frac{L}{2} - \delta, -\frac{L}{2} \mp \delta)$. Для ориентированной вдоль оси x стенки, составленной из двух 5-7-диполей с координатами $(x_{11}, y_{11}) = (L, 0)$, $(x_{12}, y_{12}) = (0, 0)$, $(x_{21}, y_{21}) = (2L + h, 0)$, $(x_{22}, y_{22}) = (L + h, 0)$.

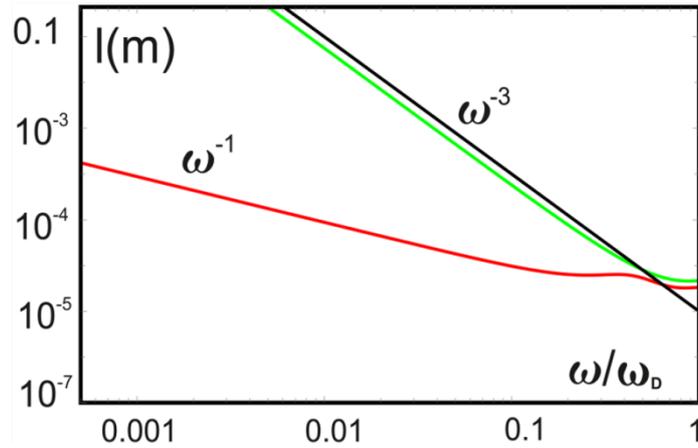


Рисунок 13 – Длина свободного пробега продольных фононов для незамкнутой границы (красная линия), замкнутой границы (зелёная линия) как функция приведенной частоты ω/ω_D . Используемый набор параметров: $L=h=0.24$ nm, $n_{GB} = n_{SW} = 2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, $\nu=0.16$, $\sigma=0.16$, $\delta=0.04$. Для сравнения с полученными результатами в виде сплошной тёмной линии приведена зависимость длины свободного пробега от ω/ω_D для точечной примеси с концентрацией $n_{pd} = 2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$.

На рисунке 13 представлены кривые зависимости длины свободного пробега Λ от приведённой частоты для рассмотренных двух типов дефектов. В случае дефекта типа Стоуна-Уэйлса (зелёная линия) в длинноволновом пределе $\Lambda_{SW} \sim \omega^{-3}$, как и в случае точечной примеси в двумерном пространстве, тогда как для коротких волн $\Lambda_{SW} \rightarrow \text{const}$ (см. [A13]). Для незамкнутой конфигурации, как видно из рисунка 13 (красная линия), поведение длины свободного пробега иное. В

длинноволновом пределе реализуется дислокационное поведение, где $\Lambda_{GB} \sim \omega^{-1}$. В коротковолновом пределе, также как и для дефектов Стоуна-Уэйльса, получается частото- независимое поведение длины свободного пробега. Различие в поведении между разомкнутой и неразомкнутой стенками заключается в том, что в случае разомкнутой, поля напряжений являются дальнедействующими и пропорциональны $1/r$ с увеличением расстояния от дефекта, в то время как соответствующие поля SW дефекта являются сильно экранированными. На рисунке 14 представлена зависимость длины свободного пробега Λ_q от приведённой частоты для различных значений расстояния между диполями h , при фиксированной величине размера стенки равной в данном расчёте 10 nm. Как видно из рисунка 14 для всех кривых имеется смена режима с дислокационного, где $\Lambda_{GB} \sim \omega^{-1}$, на режим $\Lambda_{GB} \sim \text{const}$. При дальнейшем увеличении частоты в поведении Λ_{GB} наблюдаются ступенчатообразные пики, свидетельствующие о том, что в этом энергетическом режиме 5-7 стенка действует как дифракционная решётка, образующая обратную решётку в k -пространстве с периодом $1/h$.

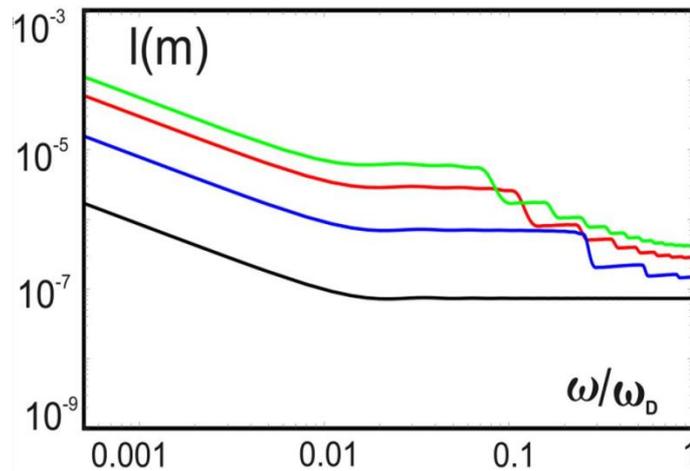


Рисунок 14 – Длина свободного пробега продольных фононов Λ как функция приведённой частоты ω/ω_D при рассеянии на границу размером $L=10$ nm и различными расстояниями между 5-7 дефектами: $h=3.4$ nm (зелёная линия), $h=2$ nm (красная линия), $h=0.9$ nm (голубая линия). Чёрная линия соответствует рассеянию на одном диполе с размером $L=10$ nm. Другие параметры те же, что и на рисунке 13.

Используя формулу для расчёта теплопроводности (10), в данном разделе было произведено вычисление κ , где наряду с рассмотренными ранее в литературе каналами рассеяния был введён дополнительный, связанный с рассеянием фононов деформацией обусловленной 5-7-стенкой и представленный формулой (12). Результаты приведены на рисунке 15 вместе с экспериментальными точками из работы [41] в высокотемпературной области. Вычисления были произведены для стенок, имеющих размер 2.5 nm (голубая линия) и 10 nm (оранжевая линия). Кривая, имеющая чёрный цвет, соответствует расчёту для графена без стенок. Значения κ сильно зависят от размера стенки. Наименьшее

значение κ было получено для стенки с размером 2.5 nm. Интересно отметить, что отношение $\kappa(10\text{nm})/\kappa(2.5\text{nm})$ увеличивается с ростом температуры вплоть до максимального значения $\kappa(T)$, с последующим плавным стремлением к 1. Характерной особенностью полученных результатов является то, что вклад в теплосоппротивление, связанный с рассеянием на границах зерна существенен во всем температурном интервале, как это видно из рисунка, включая область очень высоких температур, где большую роль играют процессы переброса. **Раздел 5.3** посвящён исследованию влияния на теплопроводность дополнительных дисклинаций меньшей мощности, встроенных в границу. Такие встроенные дисклинации возникают в стенке в результате сбоя в угле разориентировки [46].

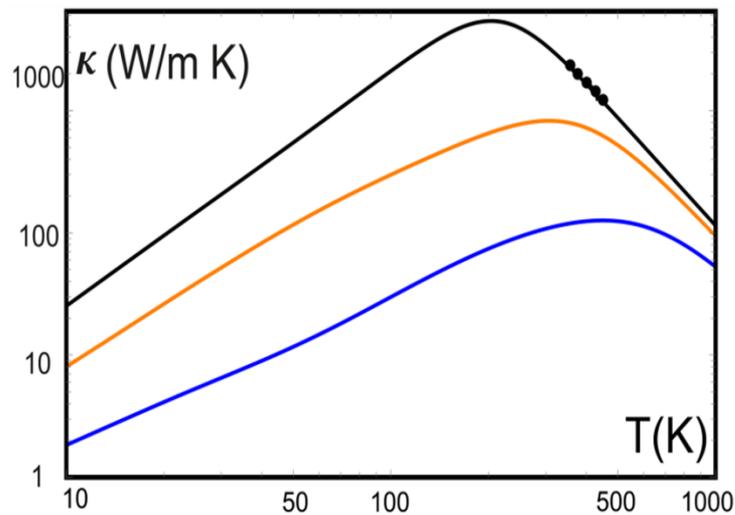


Рисунок 15 – Температурная зависимость коэффициента теплопроводности для поликристаллического графена со средним размером границы зерна 2.5 nm ($h=0.3$ nm, $n_{GB} = 1.6 \times 10^{17} \text{m}^{-2}$, голубая линия) и 10 nm ($h=1$ nm, $n_{GB} = 9.5 \times 10^{15} \text{m}^{-2}$ оранжевая линия). Другие параметры для вычислений: $l_0 = 2.9 \times 10^{-6} \text{m}^{-2}$, $V_{N,LA} = 9.8 \times 10^{-30} \text{с K}^{-3} \text{m}^{-1}$, $V_{N,TA} = 1.5 \times 10^{-29} \text{с K}^{-3} \text{m}^{-1}$, $V_{U,LA} = 1.47 \times 10^{-29} \text{с K}^{-3} \text{m}^{-1}$, $V_{U,TA} = 2.27 \times 10^{-29} \text{с K}^{-3} \text{m}^{-1}$, $V_{N,ZA} = 4.6 \times 10^{-26} \text{с K}^{-3} \text{m}^{-1}$, $V_{U,ZA} = 6.9 \times 10^{-26} \text{с K}^{-3} \text{m}^{-1}$. Чёрная линия соответствует свободному от дефектов монослойному графену. Экспериментальные точки, нанесённые на чёрную линию взяты из работы [41].

В случае графена мощность таких дисклинаций лежит в интервале $-60^\circ < \omega < 60^\circ$. Также в данном разделе исследуется влияние на теплопроводность зернограницных пустот. На рисунке 16 схематически представлены: дисклинационный встроенный в стенку диполь и нанопустота.

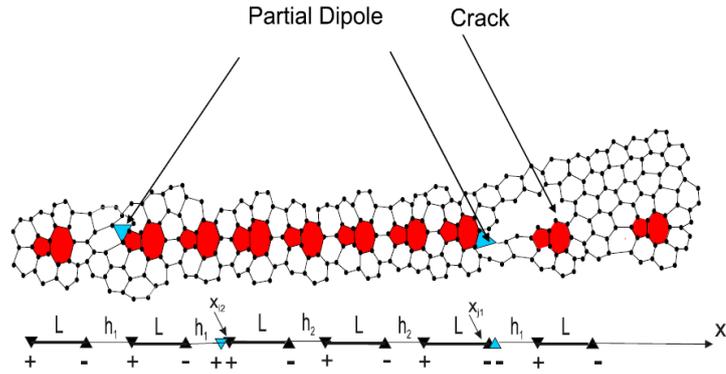


Рисунок 16 – Граница зерна в поликристаллическом графене содержащая встроенный диполь и нанопустоту. В дальнейших расчётах используется расстояние между встроенными в стенку диполями (бирюзовые треугольники) равное 2 nm.

Таким образом, наряду с рассеянием, вызванным статическими полями напряжений границы зерна, имеются два дополнительных канала рассеяния, обусловленные наличием дополнительных встроенных диполей и нанопустот. В этом случае в энергии возмущения, связанной с присутствием дефекта появляется дополнительный член связанный с наличием дополнительного диполя:

$$\Delta E_{ph}(\mathbf{r}) = \hbar k v_s \gamma_s \left(\frac{\Omega}{2\pi} \frac{(1-2\sigma)}{(1-\sigma)} \sum_{n=1}^p \ln \frac{(x-x_{n1})^2 + (y-y_{n1})^2}{(x-x_{n2})^2 + (y-y_{n2})^2} + \frac{\omega}{2\pi} \frac{(1-2\sigma)}{(1-\sigma)} \ln \frac{(x-x_{m1})^2 + (y-y_{m1})^2}{(x-x_{m2})^2 + (y-y_{m2})^2} \right), \quad (14)$$

(x_{mi}, y_{mi}) – координаты i – й дисклинации в стенке, мощность встроенной в стенку дисклинации).

На рисунке 17 представлены зависимости длин свободного пробега от приведённой частоты для стенки без встроенного диполя (голубая линия) и со встроенным диполем (оранжевая линия). Стенка имеет длину 6.5 nm с расстоянием между диполями 0.48 nm и встроенным диполем размером 2 nm состоящим из дисклинаций мощностью 45°. В вычислениях для каждого канала рассеяния использовалась одинаковая концентрация дефектов

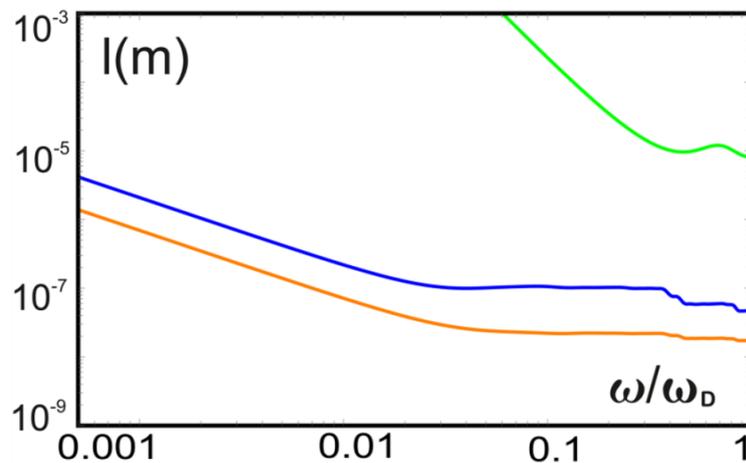


Рисунок 17 – Длина свободного пробега продольных фононов Λ как функция приведённой частоты для границы зерна $\mathcal{L}=6.5$ nm с дополнительным дисклинационным диполем в стенке. Используемое расстояние между 5-7 диполями в стенке h равно 0.48 nm вне встроеного диполя, и 0.14 nm внутри области встроеного диполя. Плечо встроеного диполя равно 2 nm. Голубой линией показана зависимость длины свободного пробега фонона от приведенной частоты без дополнительного диполя. Оранжевой линией показана та же зависимость со встроеным диполем. Зелёной линией показана длина свободного пробега при рассеянии фонона на нанопустоте. Используемые модельные параметры: $n_{GB}=n_{cr} = n_{PDD}=2.3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, мощность встроеного диполя $\omega=45^\circ$, число диполей $p = 12$.

Из рисунка видно, что наличие встроеного диполя приводит к подавлению длины свободного пробега, при этом вклад от нанопустот (зелёная линия) имеющих ω^{-3} зависимость Λ не является существенным при рассеянии. На рисунке 18 представлена зависимость теплопроводности от температуры без встроеного диполя (синяя линия) и вместе с ним (зелёная линия). Используемые параметры те же, что и для рисунка 17. Расчёт производился в рамках модели Каллауэя по формуле (10). Видно, что в случае стенки со встроеным диполем, κ заметно уменьшается, причём во всём температурном интервале. Таким образом, даже в области $300\text{K} < T < 500\text{K}$ вклад от встроеного диполя превалирует над процессами переброса. В последнем **разделе 5.4** рассматривается влияние вакансий на теплопроводность в монослойном графене. В экспериментах [47], было установлено, что при имплантации графена атомами аргона происходит модификация модуля Юнга E_{2D} в зависимости от дозы облучения. При этом максимум E_{2D} достигается при 0.2% содержания вакансий, и имеет величину, равную 550Nm^{-1} . Таким образом, E_{2D} является функцией n_{def} . Учитывая этот эффект, в работе [A14] был проведён расчёт при помощи формулы (10) с суммарной длиной свободного пробега, являющейся функцией скорости: $\Lambda_{tot,\lambda}^{-1}(v_\lambda) = \Lambda_{0,\lambda}^{-1}(v_\lambda) + \Lambda_{imp,\lambda}^{-1}(v_\lambda) + \Lambda_{N,\lambda}^{-1}(v_\lambda) + \Lambda_{U,\lambda}^{-1}(v_\lambda)$, где наряду с нормальными процессами

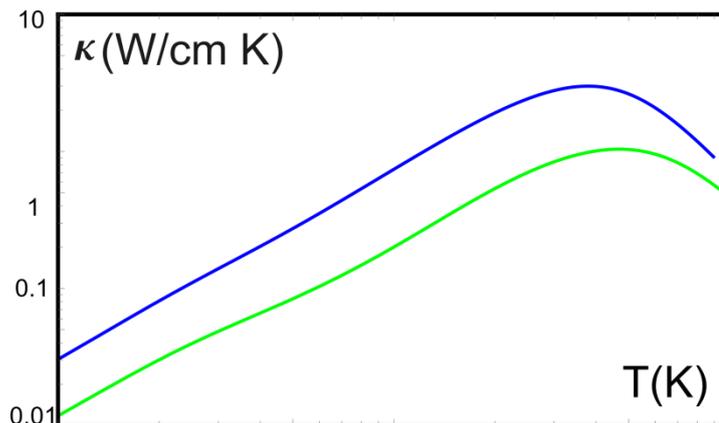


Рисунок 18 – Температурная зависимость коэффициента теплопроводности для поликристаллического графена со средней величиной границы зерна равной 6.5 nm и встроеным диполем размером 2 nm и мощностью 45° . Кривая, соответствующая границе со встроеным диполем показана зелёной линией. Для обеих кривых используемая концентрация равна $2.3 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Другие параметры те же, что и на рисунке 19.

(Λ_N) и процессами переброса (Λ_U) фигурирует также член связанный с рассеянием на вакансиях. В свою очередь, скорости входящие в последнее выражение для обратной длины свободного пробега выражаются в 2D случае через модуль Юнга как: $v_{LA} = \sqrt{E_{2D}/\rho(1 - \sigma^2)}$, $v_{TA} = \sqrt{E_{2D}/2\rho(1 + \sigma)}$. Таким образом, возможна проверка как влияет изменение E_{2D} на поведение теплопроводности графена при допировании моновакансиями. На рисунке 19 приведён график расчётов из работы [A14]

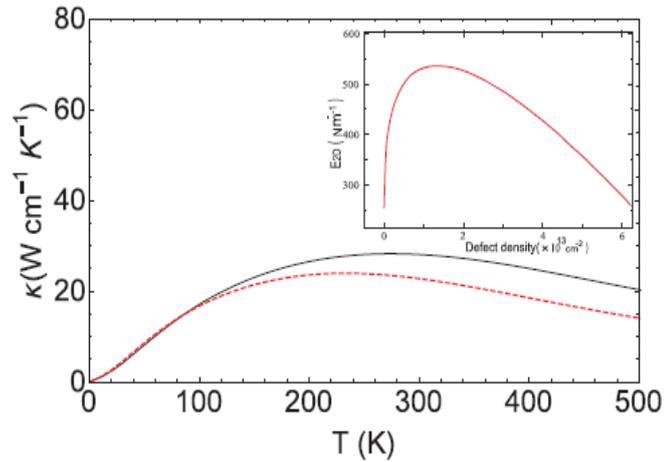


Рисунок 19 – Температурная зависимость коэффициента теплопроводности для ленты графена шириной $2.9 \mu\text{m}$ и концентрацией вакансий $n_{\text{def}} = 1.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$. Сплошная кривая соответствует вычислениям, где v_{LA} , v_{TA} зависят от изменяющегося E_{2D} , прерывистая кривая соответствует постоянным значениям скоростей с фиксированным $E_{2D} = 360 \text{Nm}^{-1}$.

Вставка на рисунке 19 показывает колоколообразную зависимость $E_{2D}(n_{\text{def}})$ из работы [47] и использованную в вычислениях $\kappa(T)$. Из рисунка 19 видно подрастание теплопроводности при $T > 200 \text{K}$. Такое поведение объясняется тем, что при заданной в вычислениях концентрации $n_{\text{def}} = 1.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ величина E_{2D} максимальна и равна 540Nm^{-1} , что приводит к большим по сравнению со случаем фиксированного значения $E_{2D} = 360 \text{Nm}^{-1}$ скоростям. Кроме температурной зависимости теплопроводности в данной главе исследуется и её зависимость от концентрации вакансий при $T = 300 \text{K}$. Было обнаружено, что увеличение κ имеет место в интервале концентраций $2.8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2} < n_{\text{def}} < 5.3 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$. Объяснение этого эффекта заключается в том, что при высоких температурах определяющую роль играют нормальные процессы и процессы переброса Umklapp, где κ сильно зависит от скоростей v_λ , которые в данном случае зависят от концентрации n_{def} .

В главе 6 исследуется вклад от границ зёрен в удельное сопротивление в поликристаллическом монослойном графене в рамках схемы уравнения Больцмана.

Формализм, развитый в главе 5, позволяет вычислить время релаксации при рассеянии электронов статическими полями напряжений

симметричной стенки составленной из 5-7-диполей. Однако наряду с этим вкладом существует дополнительный, связанный с зарядом, локализованным на стенке, который также рассмотрен в данной главе. Задача, сформулированная в главе 6, в первую очередь заключалась в том, чтобы получить ответ на вопрос, почему в поликристаллическом графене разброс значений удельного сопротивления ρ так велик и варьируется от 0.1 к Ω μm до 100 к Ω μm (см. [48]). Вторым важным пунктом, подлежащим разрешению, заключался в получении ответа на вопрос какой канал является доминирующим при рассеянии электронов на заряженной стенке. В **разделе 6.1** формулируется модель (см. [A17]) для вычисления времени релаксации и проводимости в случае, когда рассеяние электронов (дырок) осуществляется деформацией стенки и зарядом, сосредоточенным на ней. Вычисление электростатического потенциала $V_Q(r, z)$, вызванное 5-7-стенкой, осуществлялось решением уравнения Пуассона, где рассматриваются 5-7-дефекты как точечные заряженные объекты, окруженные облаками со средним радиусом R экранирующего заряда противоположного знака. Эффективный 2D электростатический потенциал в этом случае имеет следующий явный вид:

$$V_Q(r) = \frac{e^2 R}{4\epsilon\epsilon_0} (N_A - N_D) \sum_{l=0}^p G_{22}^{11} \left(\frac{R^2}{r_l^2} \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \right) - \frac{ee^*}{2\epsilon\epsilon_0} \sum_{l=0}^p \frac{1}{r_l}, \quad (15)$$

где $r = (x, y)$, N_D, N_A – концентрация доноров и акцепторов, G_{22}^{11} – функция Майера, $r_l = \sqrt{(x - l\tilde{h})^2 + y^2}$, \tilde{h} – эффективное расстояние между диполями, p – число диполей в стенке, e – заряд электрона, e^* – эффективный заряд сосредоточенный на диполе. Потенциал, связанный с полями напряжения зернограничной 5-7-стенки $V_\epsilon(r)$, аналогичен рассмотренному в главе 5 и представленный уравнением (14), однако в данном случае энергия электрона пропорциональна константе деформации G , значения которой для графена лежат в интервале 10–20 eV. Суммарное время релаксации для обоих каналов рассеяния вычислялось по формуле (11). В данном разделе приведены также формулы для вычисления проводимости (удельного сопротивления ρ). Особенностью сформулированной модели является то, что она позволяет осуществить вычисление удельного сопротивления ρ от угла разориентировки стенки θ . Данный расчёт приведён на рисунке 23 в виде вставки. Кроме того, как и в главе 5, модель позволяет исследовать роль дополнительных дисклинаций, возникающих вследствие сбоя в угле разориентировки, в данном случае на удельное сопротивление.

В **разделе 6.2** исследуется поведение ρ как функция концентрации носителей δn_{def} для симметричных стенок с различными углами разориентировки при отсутствии дополнительных дисклинаций меньшей мощности, о которых говорилось выше. В первую очередь было показано, что решающая роль как источника рассеяния принадлежит деформации стенки, то есть $V_\epsilon(r)$, тогда как зарядовый член при $e^* = (0.02 \div 0.05)e$ не существенен. Роль электростатического рассеяния, как это отмечено в данном разделе, может возрасти, если допустить, что эффективный заряд на стенке – e^* существенно выше. На рисунке 20 показаны результаты

расчётов для $e^* = 0.3 e$ и $0.8 e$, из которых видно, что при $0.8e$ электростатический вклад может быть конкурентен с деформационным. Наибольшее значение ρ_{GB} было получено нами для углов разориентировки в интервале $26.01^\circ - 32.2^\circ$, где линейная плотность 5-7-дефектов в стенке максимальная (см. рисунок 21). Дальнейшее увеличение θ приводит к уменьшению линейной плотности дефектов и, соответственно, падению ρ_{GB} .

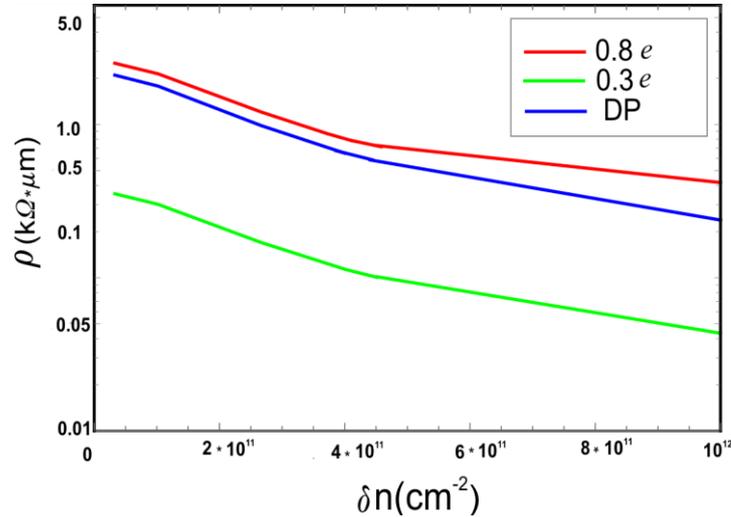


Рисунок 20 – Удельное сопротивление, обусловленное рассеянием электронов электростатическим потенциалом границы зерна, в поликристаллическом графене при $T=300$ К как функция концентрации носителей. Используемый при расчёте эффективный заряд: $e^*=0.3e$ (зелёная линия), $e^*=0.8e$ (красная линия). Синей линией обозначен вклад от деформационного потенциала при параметрах: $G=13$ eV, $\theta=13.2^\circ$, $L=0.246$ nm, $h=0.84$ nm, $p=916$ (p-число диполей в стенке)

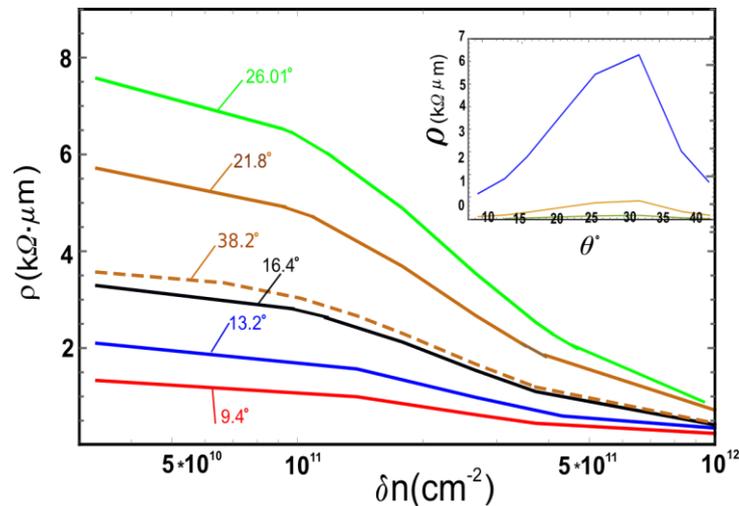


Рисунок 21 – Удельное сопротивление как функция концентрации носителей при $T=300$ К для различных углов разориентировки: 9.4° (красная линия), 13.2° (голубая линия), 16.4° (чёрная линия), 16.4° (чёрная линия), 21.8° (коричневая линия), 26.01° (зелёная линия). 38.2° (прерывистая коричневая линия). Размер границы зерна в расчётах равен $1 \mu\text{m}$. Другие параметры: константа деформационного потенциала $G=13$ eV, эффективный заряд на стенке $e^*=0.02e$,

Раздел 6.3. посвящён исследованию роли дополнительных диполей, возникающих в результате сбоя угла разориентировки границы зерна.

Для проведения расчётов используются диполи разной длины d . На рисунке 22 приведена зависимость удельного сопротивления от концентрации носителей δn для стенок со встроенными диполями с $d=0.1 \mu\text{m}$ и $0.8 \mu\text{m}$. Для сравнения приведён график с $d=0 \mu\text{m}$. Из рисунка 22 видно, что для малых d (короткие диполи), имеется слабое подрастание ρ , тогда как при $d=0.8 \mu\text{m}$ ρ_{GB} увеличивается на порядок. Таким образом, обозначенная в начале этого пункта проблема большой вариации значений удельного сопротивления разрешена посредством введения дополнительных дисклинаций в виде диполей меньшей мощности (в данном случае $\omega=45^\circ$). Расчёты показывают, что чем более разупорядочена стенка, тем менее она чувствительна к углу разориентировки θ .

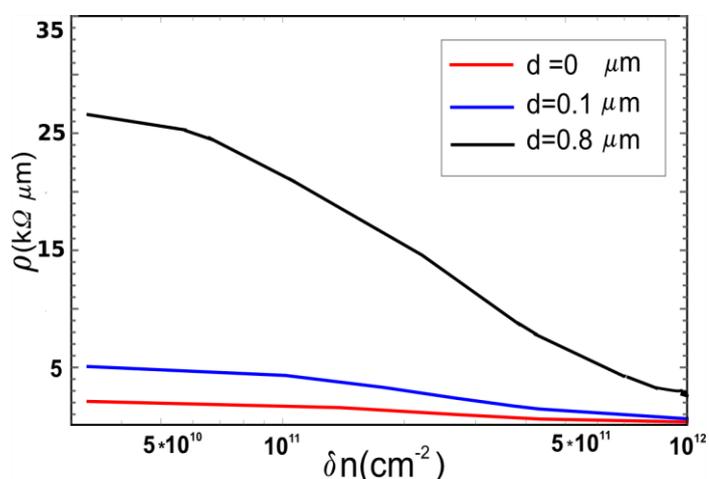


Рисунок 22 – Удельное сопротивление при $T=300 \text{ K}$ как функция концентрации носителей при наличии в границе зерна с углом разориентировки $\theta=13.2^\circ$ дополнительного встроенного диполя. Размер стенки $L=1 \text{ nm}$, мощность встроенного диполя $\omega=45^\circ$. Используемые в вычислениях размеры встроенных диполей: $d=0.1 \mu\text{m}$ (синяя линия), $d=0.8 \mu\text{m}$ (чёрная линия), $d=0 \mu\text{m}$ (красная линия). Величина деформационного потенциала $G=13 \text{ eV}$.

Публикации автора по результатам диссертации

[A1] *Krasavin S.E., Osipov V.A.* Disclination-induced residual resistivity in simple metals//Phys.Lett. A. – 1997. – Vol. 236. – P. 245–248.

[A2] *Osipov V.A., Krasavin S.E.* Disclination dipoles as the basic structural elements of dielectric glasses// Phys.Lett. A. – 1998. – Vol. 250. – P. 369–374

[A3] *Osipov V.A. and Krasavin S.E.* Towards the grain boundary phonon scattering problem: evidence for a low-temperature crossover//J.Phys.Cond.Mat. – 1998. – Vol. 10. – P. L639–L644.

[A4] *Krasavin S.E., Osipov V.A.* Peculiarities in the low-temperature phonon scattering by finite wedge disclination dipoles//Phys.Lett. A. – 2000. – Vol. 277. – P. 245–248.

[A5] *Krasavin S.E. and Osipov V.A.* The effect of long-range strain fields on

transport properties of disclinated materials// J.Phys.Cond.Mat-. 2001.- Vol. 13. – P. 1023–1040.

[A6] *Красавин С.Е., Осипов В.А.* Особенности низкотемпературного фононного рассеяния в материалах с дисклинационными петлями наклонного типа// Физ.тв.тела. – 2002. – Т. 44. – Вып.6–С. 1102–1105.

[A7] *Krasavin S.E. and Osipov V.A.* Thermal transport in materials with disclination dipoles and disclination loops// J.Phys.Cond.Mat. – 2002. – Vol.14. – P. 12923–12928.

[A8] *Krasavin S.E.* Disclinations as a source of thermal resistance in icosahedral i-ALPdMn quasicrystals//J.Phys.Cond.Mat. – 2005. – Vol. 17. – P. 6173–6177.

[A9] *Krasavin S.E.* Residual resistivity due to wedge disclination dipoles in metals with rotational plasticity//Phys.Lett. A. – 2007. – Vol. 361. – P. 442–444.

[A10] *Krasavin S.* Electron scattering due to dislocation wall strain field in GaN layers//J.Appl.Phys. – 2009. – Vol. 105. – P. 126104-1–126104-3.

[A11] *Krasavin S.* Mobility in epitaxial GaN: Limitation of electron transport due to dislocation walls//J.Phys.Cond.Mat. Conf. Ser. – 2010. – Vol.248. – P. 1-3.

[A12] *Красавин С.Е.* О влиянии заряженных дислокационных стенок на подвижность в эпитаксиальных слоях GaN// ФТП. – 2012. – Т. 46. – Вып. 5. – С.616–619.

[A13] *Krasavin S.E. and Osipov V.A.* Effect of Stone-Wales defects on the thermal conductivity of graphene//J.Phys.Cond.Mat. – 2015. – Vol.27. – P.425302–P.425302-1–425302-6.

[A14] *Krasavin S.E. and Osipov V.A.* Vacancy-induced enhancement of thermal conductivity in graphene//EPL. – 2016. – Vol. 113. – P. 66002-p1-66002-p3.

[A15] *Krasavin S.E. and Osipov V.A.* Phonon Scattering by defects in polycrystalline graphene//J.Struct.Chem. 2018. – Vol.59. – №4. – P. 860-863.

[A16] *Krasavin S.E. and Osipov V.A.* Impact of grain boundary characteristics on thermal transport in polycrystalline graphene//J.Appl.Phys. 2019. – Vol.125. – P. 084301-1–084301-7.

[A17] *Krasavin S.E., Osipov V.A.* Electrical Resistivity of polycrystalline graphene: effect of grain-boundary induced strain fields//Sci.Rep.(Nature) 2022. – Vol.12. – P. 14553–14561.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. *Гочжун Цао, Ин Ван.* Наноструктуры и наноматериалы. Синтез свойства и применение // Научный мир, 2012.
2. *Гуткин, М.Ю., Овидько И.А.* Дефекты и механизмы пластичности в наноструктурных и некристаллических материалах / СПб: Янус, 2000.
3. *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972.
4. *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинации в кристаллах. – Л.: Наука, 1986.
5. *Вит Р. Де,* Континуальная теория дисклинаций. – М.: Мир, 1977.
6. *Rivier N.,* Continuous random networks From graphs to glasses//Adv. Phys. 1987 vol.36 № 1 p.95-134.

7. *Klemán M.*, Curved crystals, defects and disorder // *Adv. Phys.* 1989. – Vol. 38. № 6. – P. 605–667.
8. *Klemán M., Sadoc J.F.*, A tentative description of the crystallography of amorphous solids // *J.de Phys.* // 1979. – Т. 40. – P. L 569-L574.
9. *Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г.* Физика полупроводников. – Л.: Наука, 1977.
10. *Займан Дж.*, Электроны и фононы // *Иностранная литература.* – М., 1962.
11. *Kubo R.*, Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction problems // *J.Phys/Soc.Jap.* – 1957. – P. 570–586.
12. *Tenenbaum A., Ciccotti G., and Gallico R.* Stationary nonequilibrium states by molecular dynamics.Fourier's law // *Phys.Rev. A.* – 1982. – Vol. 25. – № 5. – P. 2778–2787.
13. *Klemens P.G.* The Scattering of Low-Frequency Lattice Waves by Static Imperfections // *Proc.Phys.Soc. A.* – 1955. – 68. – P. 1113–1128.
14. *Anderson A.C. and Malinowski M.E.* Interaction between Thermal Phonons and Dislocations in LiF // *Phys.Rev.B.* – 1972. – Vol. 5. – P. 3199–3210.
15. *Roth E.P. and Anderson A.C.* Scattering of thermal phonons by low-angle grain boundaries in LiF and NaCl // *Phys.Rev.B.* – 1978. – Vol. 17. – P. 3356–3361.
16. *Wolfmeyer M.W., Dillinger J.R.* The thermal conductivity of sapphire between 0.4 and 4° K // *Phys.Lett. A.* – 1971. – Vol. 34. – P. 247–248.
17. *Li J.C.M.* Disclination model of high angle grain boundaries // *Surf.Sci.* – 1972. – Vol. 31. – P. 12–26.
18. *Romanov A. and Kolesnikova A.L.* Application of disclination concept to solid structure // *Progr.Mater.Sci.* – 2009. – 54. – P. 740–769.
19. *Li J.C.M.* Some elastic properties of an edge dislocation wall // *Acta Met.* – 1960. – Vol. 8. – P. 563–574.
20. *Frank F.C. and Kasper J.S.* Complex Alloy Structures Regarded as Sphere Packing. I. Definitions and Basic Principles // *Acta Cryst.* – 1958. – 11. – P. 184–190.
21. *Phillips W.A.* Tunneling States in Amorphous Solids // *J.Low Temp.Phys.* – 1972. – Vol. 7. – № 3. – P. 351–360.
22. *Anderson P.W., Halperin B.I. and Varma C.M.* Anomalous low-temperature thermal properties of glasses and spin glasses // *Phil.Mag.A.* – 1972. – Vol. 25. – P. 1–9.
23. *Galperin Yu.M., Karpov V.G., Kozub V.I.* Localized states in glasses // *Adv.in Phys.* . – 1989. – Vol. 38. – P.669–737.
24. *Cahill D.G. and Pohl R.O.*, Heat flow and lattice vibrations in glasses // *Solid State Comm.* – 1989. – Vol. 70. – № 10. – P. 927–930.
25. *Alexander S., Laermans C., Orbach R., and Rosenberg H.M.* Fracton interpretation of vibrational properties of cross-linked polymers, glasses, and irradiated quartz // *Phys.Rev.B.* – 1983. – Vol. 28. – № 8. – P. 4615–4619.
26. *Alexander S., Entin-Wohlman O., Orbach R.* Phonon-fracton anharmonic interactions: The thermal conductivity of amorphous materials // *Phys.Rev.B.* – 1986. – Vol. 34. – № 4. – P. 2726–2734.
27. *Frank F.C.* Supercooling of liquids // *Proc.R.Soc.London Ser.A* 215. – 1952. – P. 43–46.

28. *Bernal J.D.* The Bakerian Lecture, 1962. The structure of Liquids // Proc.Roy.Soc.London A. – 1964. – Vol. 280. – №1382. – P. 299–322.
29. *Kleman M. and Friedel J.* Disclinations, dislocations and continuous defects: A reappraisal // Rev. Mod. Phys. – 2008. – Vol. 80. – P. 63–112.
30. *Kleman M. and Sadoc J.F.* “A tentative description of the crystallography of amorphous solids” // J.de Phys.Lett. – 1979. – T. 40. – P. L 569–L574.
31. *Sadoc J.F.* Use of regular polytopes for the mathematical description of the order in amorphous structures. J.Non-Cryst.Sol. 44. – 1981. – P. 1–16.
32. *Rivier N.* Disclination lines in glasse // Phil.Mag. A. – 1979. – Vol. 40. – №6. – P. 859– 868.
33. *Kleman M. and Friedel J.* Disclinations, dislocations and continuous defects: A reappraisal // Rev. Mod. Phys. – 2008. – Vol. 80. – P. 63–112.
34. *Zeller R.C. and Pohl R.O.* Thermal Conductivity and Specific Heat of Noncrystalline Solids// Phys.Rev.B. – 1988. – Vol. 4. – P. 2029–2041.
35. *Cahill D.G. and Pohl R.O.*, Lattice vibrations and heat transport in crystals and glasses// Ann.Rev.Phys.Chem. – 1988. – Vol. 39. – P. 93–121.
36. *Phillips J.C.*, Structural model of two-level glass states// Phys.Rev.B. – Vol. 24. – P. 1744–1750.
37. *Micoulaut M. and Phillips J.C.* Rings and rigidity transitions in network glasses//Phys.Rev.B. – 2003. – Vol. 67. – P. 104204-1-9.
38. *Graebner J.E., Golding B., and Allen L.C.* Phonon localization in glasses// Phys.Rev.B. – Vol. 34. – P. 5696–5701.
39. *Osipov V.A. Aharonov.* –Bohm effect in planar systems with disclination vortices// Phys.Lett.A. – 1992. – Vol. 164. – P. 327–330.
40. *Keller S., Keller B.P., Wu Y.-F. , Heying B., Kapolnek D., Speck J.C., Mishra U.K., and DenBaars S.P.* Influence of sapphire nitridation on properties of gallium nitride grown by metalorganic chemical vapor deposition//Appl.Phys.Lett. – 1996. – 68. – P. 1525–1527.
41. *Chen S., Moore A.L., Cai W., Suk J.W., An J., Mishra C., Amos Ch., Magnuson C.W., Kang J., Li Shi, and Ruoff R.S.* Transport in Suspended Monolayer Graphene of Variable Sizes in Vacuum and Gaseous Environments// Acs Nano. – 2011. – Vol. 5. – P. 321–328.
42. *Balandin A.A.*, Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials//Nat.Mater. – 2011. – Vol. 10. P. 569–581.
43. *Ghosh S., Calizo I., Teweldebrhan D., Pokatilov E.P., Nika D.L., Balandin A.A., Bao W., F. Miao, and Lao C.N.* Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronics circuits // Appl.Phys.Lett. – 2008. – Vol. 92. – 151911-1-151911-3.
44. *Nika D.L., Pokatilov E.P., Askerov A.S., and Balandin A.A.* Phonon Thermal Conduction in graphene: Role of Umklapp and edge roughness // Phys.Rev. B. – 2009. – Vol. 79. – P. 155413-1-155413-12.
45. *Alofi A. and Srivastava G.P.* Thermal Conductivity of graphene and graphite// Phys.Rev.B. – 2013. – Vol. 87. – P.115421-1-10.
46. *Ovid'ko I.A. and Sheinerman A.G.* Cracks at disclinated grain boundaries in graphene//J.Phys.D: Appl. Phys. – 2013. – 46. – P. 345305-1-9.
47. *Lopez-Polin G., Gomez-Navarro C., Parente V., Guinea F., Katsnelson M.I., Perez-Murano F., Gomez - Herrero J.* Increasing elastic modulus of graphene by

controlled defect creation // Nat.Phys. – 2015. – Vol. 11. – P. 26–31.

48. *Isacsson A., Cummings A.W., Colombo L., Kinare J.M. and S. Roche S.* Scaling properties of polycrystalline graphene: a review // 2D Mater. 2017. – Vol. 4. – P. 1–13.