

بررسی رفتار گرمای ویژه یک گرافن تک لایه

حمیدرضا رستگار سدهی^۱ و رضا خرداد^۲

۱. گروه فیزیک، دانشگاه جهرم، جهرم

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، یاسوج

پست الکترونیکی: h.rastegar@jahromu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۰۴/۱۶؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۰۳/۳۱)

چکیده

در این مقاله، گرمای ویژه یک گرافن تک لایه ای در حضور اثر پولارون بررسی می شود. بدین منظور، در ابتدا الکترونی را در نظر می گیریم که با یک فونون آکوستیکی در سطح گرافن با ناخالصی کولنی قرار دارد. سپس، حالت پایه انرژی این پولارون را با استفاده از روش وردشی و تبدیل یکانی به دست می آوریم. برای محاسبه گرمای ویژه در مواد مختلف نظیر سیلیسیم کاربید، اکسید هافنیم، بورن نیتريد و اکسید سیلیس از ترمودینامیک نافزونور استفاده می کنیم. تغییرات گرمای ویژه را با پارامتر کولنی، میدان مغناطیسی، دما و بار الکتریکی برای این مواد مورد مطالعه قرار می دهیم.

واژه های کلیدی: گرافن، گرمای ویژه، پولارون، آنتروپی سالیس

۱. مقدمه

ویژگی های جالبی همچون دمای بسیار بالا در اتاق و رسانش گرمایی فوق العاده زیاد آن شده است [۴ و ۵]. خواص منحصر به فرد الکتریکی، گرمایی و مکانیکی گرافن موجب تشدید فعالیت های تحقیقاتی در دهه اخیر بر روی آن شده است [۶-۱۲]. کین و همکارانش [۱۳] اثرات برهم کنش اسپین-مدار در ساختار الکترونیکی انرژی پایین یک گرافن تک صفحه ای را مطالعه کرده اند. خواص الکترونیکی، مغناطیسی و پایداری انرژی در گرافن زیگزاگی در مراجع [۱۴ و ۱۵] مورد مطالعه قرار گرفته است. اثر پولارون در حضور میدان مغناطیسی بر پایه جفت شدگی با فونون های نوری در گرافن در مرجع

گرافن یک نانوماده تک لایه ای دو بعدی به شمار می آید که به خاطر ساختار منحصر به فرد و خواص فیزیکی آن، مطالعات زیادی روی آن انجام گرفته است. از دید نظری و تجربی، بررسی خواص فیزیکی گرافن در سال های اخیر مورد توجه فراوانی واقع شده است. مطالعه گرافن با توجه به کاربردهای ویژه اش، به عنوان یکی از فعال ترین حوزه های فیزیک ماده چگال در سال های اخیر شناخته شده است [۱-۳]. در صنعت و فناوری، گرافن به عنوان یکی از جذاب ترین مواد در تحقیقات اساسی به شمار می آید و این تحقیقات منجر به شناخت

ترمودینامیکی گرافن را تحت تأثیر میدان مغناطیسی یکنواخت بر اساس روشی که به تابع زتا مربوط است، محاسبه کرده است. در این مقاله، نویسنده همه کمیت‌های ترمودینامیکی گرافن از جمله انرژی آزاد، انرژی میانگین، آنتروپی و گرمای ویژه را به دست آورده است.

شکل تعمیم‌یافته‌ای از آنتروپی بولتزمن - گیبس اخیراً به وسیله سالیس معرفی شده است که فرمولی بر حسب پارامتر q در آن هسته اصلی نظریه مکانیک آماری غیرفزونور را تشکیل می‌دهد [۳۵-۳۷]. امروزه مکانیک آماری غیرفزونور به عنوان ابزار مهمی برای مطالعه دستگاه‌های پیچیده شناخته شده است. در دو دهه اخیر، مشاهدات فیزیکی فراوانی به وسیله فیزیک آماری غیرفزونور توضیح داده شده‌اند [۳۸ و ۳۹]. خواص ترمودینامیکی در این روزها به وسیله روش آماری غیرفزونور محاسبه می‌شوند. آنتروپی یکی از مهم‌ترین کمیت‌هایی ترمودینامیکی است که میزان بی‌نظمی دستگاه را نشان می‌دهد [۴۰ و ۴۱]. داسیلوا و همکارانش [۴۲] گرمای ویژه را برای آنتروپی سالیس از توزیع احتمالات به دست آورده‌اند. آنها ارتباط میان مکانیک آماری غیرفزونور و ترمودینامیک را به روشنی شرح داده‌اند. تاکنون، کارهای بسیاری در زمینه آنتروپی سالیس و گرمای ویژه مربوط به این آنتروپی در ساختارهای چند بعدی انجام شده است [۴۳-۴۵]. اگرچه بسیاری از مطالعات برای گرمای ویژه دستگاه‌های فیزیکی در آمار بولتزمن - گیبس انجام شده است [۴۶ و ۴۷] اما آمار سالیس فقط در مورد برخی از دستگاه‌ها به کار گرفته شده است. بررسی خواص ترمودینامیکی از منظر مکانیک آماری غیرفزونور یکی از مهم‌ترین و جدیدترین موضوعات در دهه‌های اخیر است. رفتار آنتروپی سالیس در گرافن با مواد مختلف و پارامترهای گوناگون در این مرجع بررسی شده است [۴۸].

در مقاله حاضر، سعی خواهیم کرد رفتار گرمای ویژه را برای گرافن تک‌لایه‌ای تحت تأثیر پولارون و در حضور ناخالصی کولنی برای مواد مختلفی نظیر سیلیسیم کاربید^۱، اکسید هافنیم^۲

[۱۶] مورد بررسی دقیق قرار گرفته است. برهم‌کنش مدهای فونونی با حامل‌های بار در گرافن این توانایی را دارد که بر روی خواص اساسی گرافن‌ها تأثیر ویژه‌ای داشته باشند [۱۷]. پیریرا و همکارانش [۱۸] مسئله مربوط به یک بار کولنی در گرافن را به روش عددی بر روی یک شبکه مطالعه کرده‌اند. استفاده از برهم‌کنش گرافن با مواد پولارونی برای اصلاح کردن پراکندگی خطی ساختار نواری، یکی از مهم‌ترین روش‌هایی است که در اغلب مقالات از آن استفاده شده است [۱۹-۲۱]. بر اساس این برهم‌کنش، انرژی میان الکترونی که روی سطح گرافن قرار دارد و فونونی که روی سطح ماده قرار گرفته است، خواص جفت‌شدگی قوی‌ای در گرافن تک‌لایه از خود نشان می‌دهند که در مرجع [۲۲] مطالعه جامعی در مورد این موضوع انجام گرفته است.

مدهای فونونی نقش مهمی در دینامیک حامل‌های بار در گرافن ایفا می‌کنند. با توجه به این حقیقت که خواص فیزیکی گرافن به الکترون-فونون بستگی دارد، بسیاری از تحقیقات بر روی این موضوع متمرکز شده است که گستره انرژی مربوط به این برهم‌کنش میان الکترون و فونون مورد بررسی قرار گیرد [۲۳-۲۷]. مدرسی و همکارانش [۲۸] به صورت نظری نقش جفت‌شدگی اسپین-مداری راشبا و برهم‌کنش الکترون-فونون را به صورت همزمان در ساختار الکترونیکی زیگزاگی گرافن با عرض‌های متفاوت، مورد بررسی قرار داده‌اند.

در سال‌های اخیر، اگرچه خواص فیزیکی گرافن به عنوان موضوع مهمی در نانوتکنولوژی مورد بررسی قرار گرفته است، اما تعداد تحقیقاتی که بر روی خواص ترمودینامیکی گرافن انجام شده، بسیار اندک است [۲۹-۳۱]. سانتوس و همکارانش [۳۲] رفتار توابع اصلی ترمودینامیکی در یک فضای فاز جابه‌جا ناپذیر را در حضور میدان مغناطیسی ثابت مورد بررسی قرار داده‌اند. رایت و همکارانش [۳۳] از حالات الکترونیکی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی گرافن نانونواری در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی استفاده کرده‌اند. آنها نتایج کمی و کیفی قابل توجهی را برای انرژی آزاد، آنتروپی و گرمای ویژه در گرافن نانو نواری به دست آورده‌اند. بومالی [۳۴] خواص

۱. SiC

۲. HfO₂

است. کمیت ϵ_0 ثابت دی‌الکتریک در خلأ است. پارامتر γ به صورت زیر است:

$$\gamma = (\kappa_0 - \kappa_\infty) / [(\kappa_\infty + 1)(\kappa_0 + 1)], \quad (7)$$

این پارامتر ترکیبی از ثابت‌های دی‌الکتریک شناخته شده مواد است که نشان دهنده قدرت قطبیده شدن ماده پولارونی است. κ_0 (کمترین (بیشترین) بسامد ثابت دی‌الکتریک و ρ بار الکتریکی است.

جمله آخر در معادله (۱) پتانسیل ناخالصی کولنی میان الکترون و ناخالصی هیدروژنی را شرح می‌دهد. تبدیل فوریه برای این جمله به صورت زیر است:

$$\frac{1}{r} = \sum_k \frac{\gamma \pi}{Ak} e^{-ik \cdot r}, \quad (8)$$

که A مساحت گرافن است. برای به دست آوردن انرژی پولارون، می‌توان از تبدیل یکانی لی-لو-پینس به صورت زیر استفاده کرد [۴۹]:

$$U = \exp \left[- \sum_k (ik \cdot ra_k^\dagger a_k - f_k a_k^\dagger + f_k^* a_k) \right], \quad (9)$$

که در اینجا $f(q)(f_q^*)$ تابع وردش است. هامیلتونی تبدیل شده با استفاده از تبدیل یکانی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$H' = U^{-1} H U, \quad (10)$$

اگر تابع را به دو قسمت جداگانه الکترونی و فونونی تقسیم کنیم، می‌توان $|\phi_n\rangle$ را به صورت زیر نوشت:

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \left[A_n |n-1\rangle \binom{1}{0} + C_n |n\rangle \binom{0}{1} \right], \quad (11)$$

که در آن $A_n = 1 - \delta_{n,0}$ و $C_n = \sqrt{1 + \delta_{n,0}}$ هر دو ثابت هستند. با استفاده از کمینه کردن مقدار انتظاری هامیلتونی، می‌توان انرژی حالت پایه دستگاه یعنی $E_0 = \langle \psi_0 | H' | \psi_0 \rangle$ را به صورت زیر بیان کرد:

$$E_{\pm}^{(0)} = \mp \sum_{k,\mu} \frac{\left[\frac{M_{q,\mu} \exp\left(-\frac{k^r}{r\eta^r}\right) \left(1 + \frac{k^r}{r\eta^r}\right)^r}{\hbar \omega_{SA,\mu}} + \frac{r\pi e^r}{1 \neq \pi^r S k \epsilon_0} \exp\left(-\frac{k^r}{r\eta^r}\right) \left(1 + \frac{k^r}{r\eta^r}\right) \right]}{r\pi e^r S k \epsilon_0}, \quad (12)$$

بورن نیتزید^۳ و اکسید سیلیس^۴ بررسی کنیم. برای محاسبه انرژی حالت پایه از روش وردشی و تبدیل یکانی استفاده می‌کنیم.

۲. مدل نظری

یک گرافن تک‌لایه‌ای که میان یک ماده و هوا قرار گرفته است را در نظر می‌گیریم که موجب برهم‌کنش قوی میان فونون آکوستیکی طولی در سطح ماده و الکترون (حفره) در گرافن می‌شود. هامیلتونی این دستگاه در حضور میدان مغناطیسی عمودی B به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$H = H_e + H_{ph} + H_{e-ph} - \frac{e^r}{\epsilon_0 \Gamma}, \quad (1)$$

که جمله اول نشان دهنده هامیلتونی الکترونی است و به شکل زیر است:

$$H_e = \left(\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{h}^*(\mathbf{k}) \right), \quad (2)$$

با

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = V_F \left[p_x - \frac{eBy}{r} + i \left(p_y + \frac{eBx}{r} \right) \right], \quad (3)$$

در رابطه فوق، $p_x(p_y)$ عملگر تکانه خطی و $V_F = 10^6$ m/s سرعت فرمی است.

جمله دوم در رابطه (۱) نشان دهنده هامیلتونی فونونی است

و به صورت زیر بیان می‌شود:

$$H_{ph} = \sum_{q,\mu} \hbar \omega_{SA,\mu} a_{q,\mu}^\dagger a_{q,\mu}, \quad (4)$$

جمله سوم که نشان دهنده جفت‌شدگی میان فونون‌ها و حامل‌های بار است و به شکل زیر بیان می‌شود:

$$H_{(e-ph)} = \sum_{q,\mu} M_{q,\mu} (a_{q-k}^\dagger + a_k) e^{(ik \cdot r)}, \quad (5)$$

که $M_{q,\mu}$ به صورت زیر است

$$M_{k,\mu} = \sqrt{\frac{\rho^r \gamma \hbar \omega_{SA,\mu}}{r \epsilon_0 k}} e^{-kz}, \quad (6)$$

همچنین، $a_k^\dagger(a_k)$ عملگرهای خلق (نابودی) برای فونون آکوستیکی سطحی (SA) با بردار موج q و بسامد ω_{SA}

۳. h-BN

۴. SiO₂

که در اینجا E_i و U_q به ترتیب ویژه مقادیر انرژی و انرژی داخلی تعمیم یافته دستگاه هستند. در معادله (۱۶)، مقدار

$\beta = 1 / (k_B T)$ و تابع پارش تعمیم یافته عبارت است از:

$$Z_q = \sum_{\text{levels}} [1 - \beta(1-q)E_i]^{1/(1-q)}, \quad (17)$$

گرمای ویژه تعمیم یافته نیز به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$C_q = \frac{\partial U_q}{\partial T}, \quad (18)$$

به کمک معادلات (۱۵) تا (۱۷)، گرمای ویژه برای آنتروپی سالیس به صورت زیر در می‌آید:

$$\frac{C_q}{k_B} = \frac{q}{(k_B T)^q} \left[\frac{\left(\sum_i p_i^q \frac{E_i}{1 - \beta(1-q)E_i} \right) - \left(\sum_i p_i^q E_i \right) \left(\sum_i p_i \frac{E_i}{1 - \beta(1-q)E_i} \right)}{\left(\sum_i p_i^q E_i \right)} \right], \quad (19)$$

برای به دست آوردن گرمای ویژه مربوط به گرافن تک‌لایه کافی است که ویژه مقادیر انرژی آن را داشته باشیم.

۳. نتایج عددی و بحث در آن

در این قسمت، نتایج به دست آمده را در مورد موادی همچون سیلیسیم کاربید، اکسید هافنیم، بورن نیتريد و اکسید سیلیس به نمایش می‌گذاریم. پارامترهای استفاده شده در جدول ۱ آمده است. در محاسبات مربوط به جمع‌های سری رابطه (۱۲) از $\mu = 1, 2$ برای دو دستگاه (یعنی گرافن تک‌لایه و ماده) استفاده شده است. برای هر دو دستگاه پارامترهای مورد نیاز در جدول ۱ قابل مشاهده است. لازم به ذکر است که این مقادیر از مرجع [۵۱] گرفته شده است. با استفاده از این پارامترها می‌توان ویژه مقادیر انرژی را محاسبه کرده، آنگاه به کمک معادله (۱۶) احتمال را به دست آورد و سپس با جایگذاری در معادله (۱۹)، گرمای ویژه را به دست آورد.

شکل ۱. الف و شکل ۱. ب گرمای ویژه را به صورت تابعی از پارامتر فید کولنی ($g = e^{\beta} / (16\pi^3 \epsilon_0)$) برای هر چهار ماده مختلف با دو مقدار مختلف به ترتیب برای پارامتر q یعنی $q = 0.4$ و $q = 1/1$ نشان می‌دهد. در اینجا مقادیر استفاده شده برای بار الکتریکی $q = 100 \text{ C}$ ، $k_c = 7.66 \text{ nm}^{-1}$

و نیز می‌توان با کمی عملیات ساده آن را به شکل زیر بازنویسی کرد:

$$E_{\pm}^{(*)} = \mp \sum_{\mu} \left[\int_0^{k_c} \frac{\rho^{\mu} \lambda \hbar \omega_{SA, \mu} e^{-\beta k z} e^{-\frac{k^{\mu}}{\hbar \eta^{\mu}} \left(1 + \frac{k^{\mu}}{\hbar \eta^{\mu}}\right)^{\mu}}}{\hbar \pi \epsilon_0 \hbar \omega_{SA, \mu}} dk + \int_0^{k_c} \frac{\rho^{\mu} \pi e^{\mu} e^{-\frac{k^{\mu}}{\hbar \eta^{\mu}} \left(1 + \frac{k^{\mu}}{\hbar \eta^{\mu}}\right)^{\mu}}}{16 \pi^3 \epsilon_0} dk \right] \quad (13)$$

در اینجا $\eta = \sqrt{eB / \hbar}$ و z_0 فاصله میان گرافن و ماده است. در پیوست الف، نحوه محاسبه انرژی پایه این دستگاه به طور کامل شرح داده شده است.

۱.۲. آمار سالیس

توزیع سالیس تعمیمی از مکانیک آماری بولتزمن - گیبس است [۳۵]. سالیس شکلی از آنتروپی است که به احتمالات میکرواحالات وابسته است و آنتروپی نافزونور نامیده می‌شود. این آنتروپی معادل با تعریف تعمیم یافته‌ای از آنتروپی بولتزمن - گیبس در حد ترمودینامیکی است. آنتروپی سالیس برای یک پارامتر حقیقی اختیاری q به شکل زیر بیان می‌شود:

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^w p_i^q}{q-1}, \quad (q \in \mathbb{R}), \quad (14)$$

در اینجا k ثابت تناسبی مثبت و $\sum_{i=1}^w p_i = 1$ است و q می‌تواند هر عدد حقیقی باشد. مشخص است که p_i احتمالات میکروسکوپی و w تعداد کل این حالات است. می‌توان آنتروپی سالیس را تحت قیده‌های مناسب زیر بشینه کرد:

$$\sum_{i=1}^w p_i = 1, \quad \sum_{i=1}^w p_i^q E_i = U_q, \quad (15)$$

با استفاده از فرایند وردش، می‌توان توزیع احتمال کانونی را به شکل زیر به دست آورد [۵۰]:

$$p(E_i) = \begin{cases} \frac{[1 - \beta(1-q)E_i]^{1/(1-q)}}{Z_q} & [1 - \beta(1-q)E_i] > 0, \\ \text{otherwise} & \end{cases} \quad (16)$$

جدول ۱. مقادیر تجربی استفاده شده در محاسبات عددی که از مرجع [۵۱] گرفته شده است.

کمیت	SiC	SiO _۲	HfO _۲	hBN
κ_c	۹/۷	۳/۹	۲۲/۰	۵/۱
κ_{∞}	۶/۵	۲/۵	۵/۰	۴/۱
$\hbar\omega_{SO,1}$	۱۱۶	۶۰	۱۹	۱۰۱
$\hbar\omega_{SO,2}$	۱۶۷	۱۴۶	۵۳	۱۹۵

ویژه با افزایش درجه نافتونوری، یعنی مقدار q ، کاهش می‌یابد. این گرمای ویژه در دماهای پایین به سمت صفر می‌رود که این رفتار قانون سوم ترمودینامیک را تأیید می‌کند. به علاوه، گرمای ویژه برای تمام مواد تا مقدار تقریبی $T = ۲۵ \text{ K}$ افزایش می‌یابد و سپس با افزایش دما تا مقدار صفر کاهش می‌یابد. برای هر چهار ماده رفتار یکسانی مشاهده می‌شود اما مقادیر بیشینه گرمای ویژه برای آنها متفاوت است. به ویژه این که در دمای بالا، مقدار حدی تمام منحنی‌ها به صفر میل می‌کند.

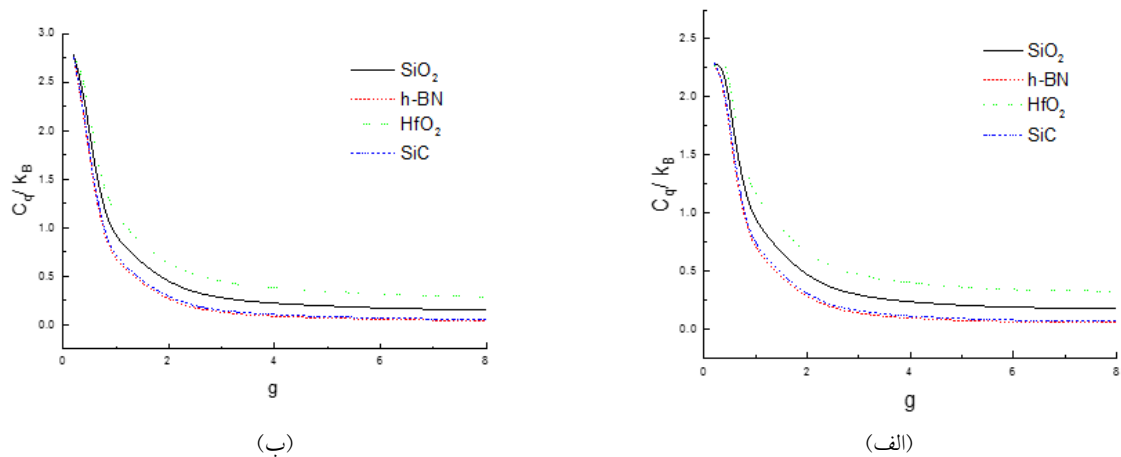
شکل ۳ نمایش دهنده گرمای ویژه به صورت تابعی از میدان مغناطیسی برای سیلیسیم کاربید، اکسید هافنیم، بورن نیتريد و اکسید سیلیس برای مقادیر $q = ۰/۹$ ، $g = ۰/۲$ و $z_0 = 1 \text{ nm}$ ، $k_c = ۷/۶ \text{ nm}^{-1}$ ، $\rho = 1۰۰ \text{ C}$ است. از شکل مشخص است که گرمای ویژه تا مقدار بیشینه‌ای افزایش پیدا می‌کند که تقریباً برابر با $B = ۲۵ \text{ T}$ است و سپس با افزایش مقدار میدان مغناطیسی شروع به کاهش یافتن می‌کند. بیشترین مقادیر گرمای ویژه برای همگی مواد، در یک میدان مغناطیسی مشابه روی می‌دهد اما بالاترین نقطه متعلق به اکسید هافنیم است. هنگامی که میدان مغناطیسی به بیش از $B = ۴۰ \text{ T}$ برسد، گرمای ویژه تقریباً برای تمامی مواد به صفر میل می‌کند.

شکل ۴ تغییرات گرمای ویژه را بر حسب بار الکتریکی برای هر چهار ماده سیلیسیم کاربید، اکسید هافنیم، بورن نیتريد و اکسید سیلیس در مقادیر $q = ۰/۹$ ، $g = ۰/۲$ و $z_0 = 1 \text{ nm}$ ، $k_c = ۷/۶ \text{ nm}^{-1}$ ، $T = ۲۰۰ \text{ K}$ می‌دهد. این نکته از شکل قابل مشاهده است که گرمای ویژه با افزایش بار الکتریکی افزایش می‌یابد اما نقاط بیشینه برای هر کدام از مواد متفاوت است. این گرمای ویژه برای تمام مواد به ازای $q \rightarrow ۰$ تا $q < ۵۰$ تقریباً صفر می‌شود.

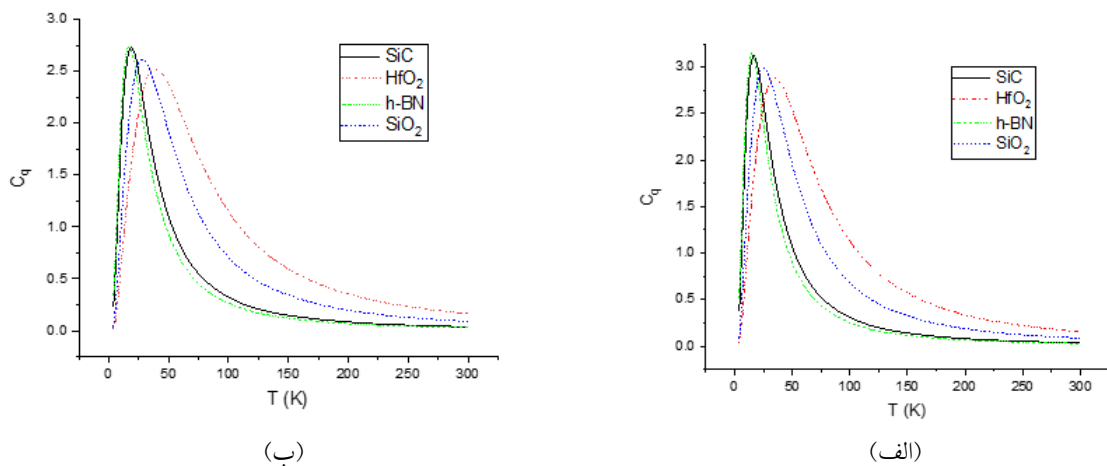
در شکل ۵ تغییرات گرمای ویژه به صورت تابعی از دما برای سیلیسیم کاربید با چهار مقدار مختلف q و پارامترهای $g = ۰/۲$ و $z_0 = 1 \text{ nm}$ ، $k_c = ۷/۶ \text{ nm}^{-1}$ ، $\rho = 1۰۰ \text{ C}$ شده است. از شکل به وضوح مشخص است که مقدار گرمای ویژه با افزایش درجه نافتونوری زیاد می‌شود.

$T = ۲۰۰ \text{ K}$ است و فاصله میان مواد و گرافن را برابر $z_0 = 1 \text{ nm}$ گرفته‌ایم. از شکل‌ها مشخص است که گرمای ویژه به تدریج با افزایش پارامتر قید کولنی کاهش می‌یابد؛ زیرا که پتانسیل کولنی با زیاد شدن این پارامتر افزایش می‌یابد. بنابراین، گرمای ویژه با افزایش پارامتر قید کولنی در دمای ثابت، کاهش پیدا می‌کند. همچنین از شکل‌ها مشاهده می‌شود که با افزایش پارامتر قید کولنی، مقدار گرمای ویژه برای همه مواد مورد نظر کاهش پیدا می‌کند. در مقادیر کوچک پارامترهای کولنی، گرمای ویژه به صورت ناگهانی از نقطه‌ای بالایی به کمینه مقدار خود می‌رسند و سپس رفتاری خطی را در مقادیر بزرگ‌تر پارامتر قید کولنی خواهند داشت. به عبارت دیگر، می‌توان دید که برای مقادیر کوچک پارامتر قید کولنی، گرمای ویژه به سرعت کاهش می‌یابد و سپس به مقداری ثابت برای تمام این مواد می‌رسد. این مقدار ثابت برای اکسید هافنیم از همه مواد دیگر بزرگ‌تر است.

شکل ۲. الف و شکل ۲. ب گرمای ویژه به صورت تابعی از دما برای سیلیسیم کاربید، اکسید هافنیم، بورن نیتريد و اکسید سیلیس با مقادیر مختلف q به ترتیب برابر $q = 1/1$ و $q = ۰/۹$ نشان داده شده است. مقادیر استفاده شده برای پارامترها عبارتند از: $\rho = 1۰۰ \text{ C}$ ، $k_c = ۷/۶ \text{ nm}^{-1}$ ، $T = ۲۰۰ \text{ K}$ و $z_0 = 1 \text{ nm}$. از شکل‌ها کاملاً واضح است که گرمای ویژه برای تمام مواد مورد نظر یک مقدار بیشینه دارد. این مقدار بیشینه بستگی به هر کدام از مواد دارد و در دماهای متفاوتی روی می‌دهد. همچنین می‌توان دید که مقدار گرمای



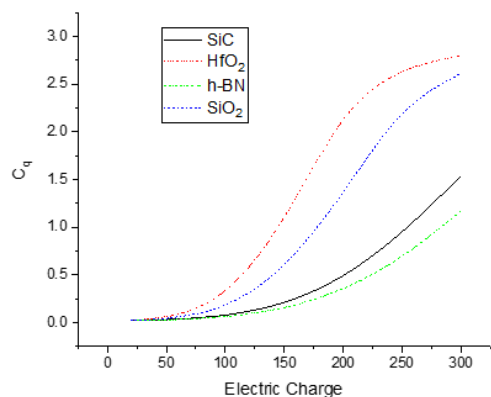
شکل ۱. رفتار گرمای ویژه بر حسب پارامتر قید کولنی به ازای مقادیر $\mu=2$ ، $\rho=100^\circ\text{C}$ ، $T=200^\circ\text{K}$ ، $z_0=1\text{nm}$ ، $k_c=7/6\text{nm}^{-1}$. منحنی (الف) و $q=1/1$ و (ب) $q=0/9$.



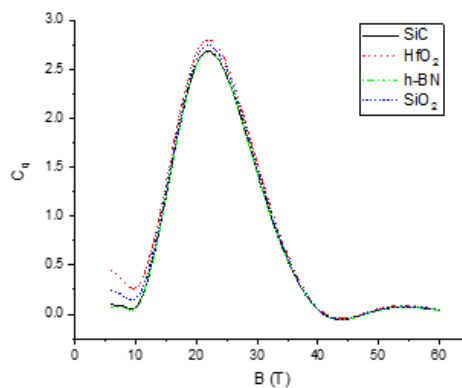
شکل ۲. رفتار گرمای ویژه بر حسب دما برای مقادیر $\mu=2$ ، $\rho=100^\circ\text{C}$ ، $z_0=1\text{nm}$ ، $k_c=7/6\text{nm}^{-1}$ و $g=0/2$. (الف) به ازای $q=1/1$ و (ب) به ازای $q=0/9$.

در شکل ۷ رفتار گرمای ویژه برای اکسید هافنیم به صورت سه بعدی بر حسب پارامترهای دما و q با پارامترهای $\mu=2$ ، $z_0=1\text{nm}$ ، $\rho=100^\circ\text{C}$ ، $k_c=7/6\text{nm}^{-1}$ ، $g=0/2$ رسم شده است. در اینجا هم گرمای ویژه به مقداری بیشینه رسیده و آنگاه کاهش پیدا می‌کند. تفاوت این رفتار با شکل ۶ در این است که برای اکسید هافنیم پهنای اطراف این قله به صورت قابل توجهی از سیلیسیم کاربرد بیشتر است. به طور خلاصه، باید به این نکته اشاره کرد که عوامل متعددی در نظم یا بی‌نظمی دستگاه دخالت دارند. این نظم یا بی‌نظمی می‌تواند در رفتار گرمای ویژه تأثیرگذار باشد.

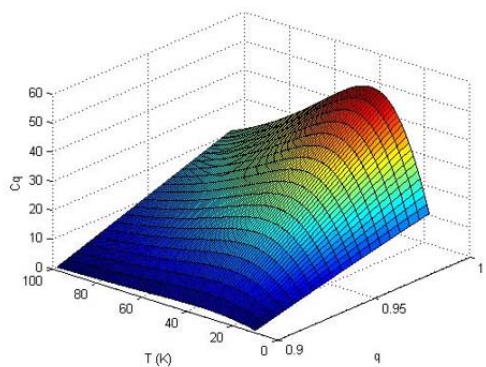
همچنین می‌توان دید که مقدار گرمای ویژه برای مقادیر بسیار بزرگ دما، یعنی مقادیر تقریباً بزرگ‌تر از $T=250\text{K}$ به سمت صفر میل می‌کند. در شکل ۶ رفتار سه بعدی گرمای ویژه برای سیلیسیم کاربرد بر حسب پارامترهای دما و q با مقادیر ثابت $\mu=2$ ، $z_0=1\text{nm}$ ، $\rho=100^\circ\text{C}$ ، $k_c=7/6\text{nm}^{-1}$ ، $g=0/2$ رسم شده است. در این شکل واضح است که گرمای ویژه پس از رسیدن به قله‌ای شروع به کاهش کرده و به سمت صفر می‌رود. همچنین با فاصله گرفتن مقدار پارامتر q از یک، گرمای ویژه به سمت صفر میل می‌کند.



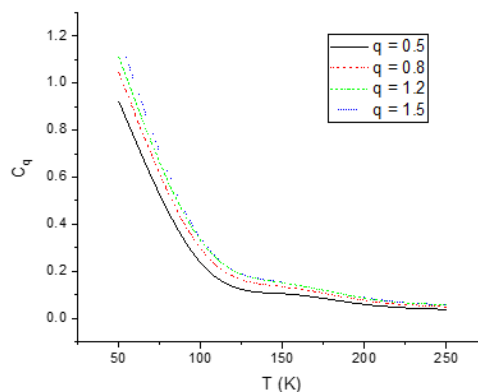
شکل ۴. رفتار گرمای ویژه بر حسب بار الکتریکی به ازای مقادیر $\mu = 2$ ، $T = 200\text{ K}$ ، $z_0 = 1\text{ nm}$ ، $k_c = 7 / 6\text{ nm}^{-1}$ ، $g = 0.2$ و $q = 0.9$.



شکل ۳. رفتار گرمای ویژه بر حسب میدان مغناطیسی به ازای مقادیر $\mu = 2$ ، $T = 200\text{ K}$ ، $\rho = 100\text{ C}$ ، $z_0 = 1\text{ nm}$ ، $k_c = 7 / 6\text{ nm}^{-1}$ و $q = 0.9$.



شکل ۶. رفتار سه بعدی گرمای ویژه برای سیلیسیم کاربید بر حسب پارامترهای دما و q با مقادیر ثابت $\mu = 2$ ، $z_0 = 1\text{ nm}$ ، $\rho = 100\text{ C}$ و $g = 0.2$ ، $k_c = 7 / 6\text{ nm}^{-1}$.



شکل ۵. رفتار گرمای ویژه بر حسب دما به ازای مقادیر $\mu = 2$ ، $\rho = 100\text{ C}$ ، $z_0 = 1\text{ nm}$ ، $k_c = 7 / 6\text{ nm}^{-1}$ و $q = 0.9$ و $g = 0.2$.

اکسید هافنیم، بورن نیتريد و اکسید سیلیس با پارامترهای مختلف از جمله درجه نافتونوری، میدان مغناطیسی، پارامتر قید کولنی، دما و بار الکتریکی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. نتایج عددی نشان می‌دهند که گرمای ویژه تابعی است که با افزایش دما و پارامتر قید کولنی کاهش پیدا می‌کند. همچنین با زیاد شدن بار الکتریکی به مقدار آن افزوده می‌شود. علاوه بر آن مشاهدات نشان می‌دهد که گرمای ویژه بر حسب دما ساختاری بیشینه‌دار را در دماهای کوچک به نمایش می‌گذارد.

دما، برهم‌کنش الکترون-فونون، میدان مغناطیسی و برهم‌کنش کولنی الکترون با ناخالصی از جمله این عوامل هستند. رقابتی میان این عوامل برای نظم‌دهی یا بی‌نظمی در دستگاه وجود دارد.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، رفتار گرمای ویژه تحت اثر پولارون در یک گرافن تک‌لایه در حضور ناخالصی کولنی مورد بررسی قرار گرفته است. رفتار گرمای ویژه برای چهار ماده سیلیسیم کاربید،

در رابطه فوق b_j^+ و b_j عملگرهای بوزون هستند که روابط مربوط به جابه‌جا پذیری بوزون را ارضا می‌کنند. همچنین شاخص j مقادیر x و y را می‌گیرد.

با قرار دادن معادله (۵) در جمله اول معادله (۱) خواهیم داشت:

$$H'_e = e^{-Y} H_e e^Y = V_F \left(H_{r,r}^o, H_{l,r}^o \right), \quad (\text{الف.۶})$$

با

$$H_{l,r} = \frac{\hbar\lambda}{\sqrt{r}} (b_x^+ + b_x) + \frac{eB}{\lambda\sqrt{\lambda}} (b_x - b_x^+) - \left(\frac{i\hbar\lambda}{\sqrt{r}} \right) (b_y^+ + b_y) - \left(\frac{ieB}{\lambda\sqrt{\lambda}} \right) (b_y - b_y^+) - \sum_q \left[\hbar q_x (a_q^+ + f_q^*) (a_q + f_q) - i\hbar q_y (a_q^+ + f_q^*) (a_q + f_q) \right] \quad (\text{الف.۷})$$

و

$$H_{r,l} = H_{l,r} = \frac{\hbar\lambda}{\sqrt{r}} (b_x^+ + b_x) - \frac{eB}{\lambda\sqrt{\lambda}} (b_x - b_x^+) + \left(\frac{i\hbar\lambda}{\sqrt{r}} \right) (b_y^+ + b_y) - \left(\frac{ieB}{\lambda\sqrt{\lambda}} \right) (b_y - b_y^+) - \sum_q \left[\hbar q_x (a_q^+ + f_q^*) (a_q + f_q) + i\hbar q_y (a_q^+ + f_q^*) (a_q + f_q) \right], \quad (\text{الف.۸})$$

جمله H'_e قطری شده است و می‌توان مقادیر انرژی را با استفاده از $E_{e,n}^r = \langle \psi_n | H'_e | \psi_n \rangle$ به دست آورد. بعد از محاسبات پیچیده خواهیم داشت:

$$E_{e,n} = \beta V_F \sum_{q,\mu} \hbar q f_q^* f_q, \quad (\text{الف.۹})$$

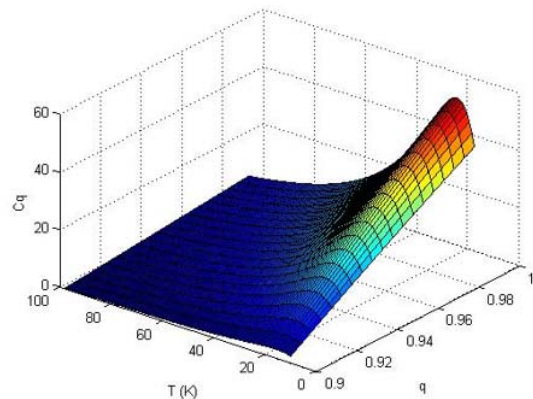
که از روابط $b_j |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ ، $b_j^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ و $\langle 0 | a_q = 0$ استفاده شده است. $\beta = \pm 1$ شاخص نواری است و به نوارهای رسانش و ظرفیت ربط پیدا می‌کند. با استفاده از (الف.۱) تا (الف.۴)، جملات سوم و چهارم هم به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$H'_{ph} = \sum_{q,\mu} \hbar \omega_{SA,\mu} (a_q a_q^+ + a_q^+ f_q + f_q^* a_q + f_q^* f_q), \quad (\text{الف.۱۰})$$

و

$$H'_{e-ph} = \sum_{q,\mu} V_{q,\mu}^* (a_q^+ + f_q^*) \exp \left(-\frac{\sum_j q_j b_j^+}{\lambda\sqrt{r}} \right) \exp \left(\frac{\sum_j q_j b_j}{\lambda\sqrt{r}} \right) + \sum_{q,\mu} V_{q,\mu} (a_q + f_q) \exp \left(\frac{\sum_j q_j b_j^+}{\lambda\sqrt{r}} \right) \exp \left(-\frac{\sum_j q_j b_j}{\lambda\sqrt{r}} \right). \quad (\text{الف.۱۱})$$

بنابراین، انرژی کل را می‌توان به صورت تابعی از f_q و f_q^* نوشت. در پایان، به وسیله انرژی کل مربوط به آنها، می‌توان



شکل ۷. رفتار سه بعدی گرمای ویژه برای اکسید هافنیم بر حسب پارامترهای دما و q با مقادیر ثابت $\mu = 2$ ، $Z_o = 1nm$ ، $k_c = 7.6nm^{-1}$ و $g = 0.2$ و $\rho = 100C$.

پیوست الف

در این بخش، روش یافتن انرژی حالت پایه معادله (۱۲) را بررسی می‌کنیم. برای این هدف، ابتدا معادله (۹) را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$U = \exp \left[-\sum_q (-f_q a_q^+ + f_q^* a_q + i q r a_q^+ a_q) \right] = \exp [Z] \quad (\text{الف.۱})$$

به وسیله معادله بالا، هامیلتونی تبدیل به شکل زیر درمی‌آید:

$$H' = e^{-Z} H_e e^Z \quad (\text{الف.۲})$$

بنابراین، خواهیم داشت:

$$H' = e^{-Z} H_e e^Z + e^{-Z} \left(\sum_{q,\mu} \hbar \omega_{SA,\mu} a_q a_q^+ \right) e^Z + e^{-Z} \left(\sum_{q,\mu} V_{q,\mu} (a_q^+ + a_q) e^{i q r} \right) e^Z - e^{-Z} \left(\frac{e^r}{\epsilon r} \right) e^Z \quad (\text{الف.۳})$$

که در آن H_e در معادله (۲) معرفی شده است. اکنون، روابط زیر را معرفی می‌کنیم:

$$e^{-A} B e^A = B + [B, A] + \frac{1}{2!} [[B, A], A] + \dots \quad (\text{الف.۴})$$

و

$$p_j = \frac{\hbar\lambda}{\sqrt{r}} (b_j^+ + b_j), \quad r_j = \frac{i}{\lambda\sqrt{r}} (b_j - b_j^+), \quad (\text{الف.۵})$$

موج این کار را هم می‌توان با مقدار ثابتی بهنجار کرد.

معادله (۱۲) را به دست آورد. با استفاده از شرایط مرزی تابع

مراجع

26. D M Basko, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 081405.
27. A Mogulkoc, M Modarresi, and B S Kandemir, *Eur. Phys. J. B* **88** (2015) 1.
28. M Modarresi, A Mogulkoc, M R Roknabadi, and N Shahtahmasebi, *Physica E* **66** (2015) 303.
29. K S Yi, D Kim, K S Park, and J J Quinn, *Physica E* **40** (2008) 1715.
30. M K Li, S J Lee, and T W Kang, *Curr. Appl. Phys.* **9** (2009) 769.
31. R Nasir, M A Khan, M Tahir, and K Sabeeh, *J. Phys. Condens. Matter* **22** (2010) 25503.
32. V Santos, R V Maluf, and C A S Almeida, *Ann. Phys. NY* **349** (2014) 402.
33. A R Wright, J Liu, Z Ma, Z Zeng, W Xu, and C Zhang, *Microelectronics Journal* **40** (2008) 716.
34. A Boumali, *Phys. Scr* **90** (2015) 045702.
35. C Tsallis, *J. Stat. Phys* **52** (1988) 479.
36. C Tsallis, "Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics", Springer: New York, USA (2009).
37. R Khordad, and H R Rastegar Sedehi *Superlattice. Microst.* **101** (2017) 559.
38. K Tarmissi, and A B Hamza, *Expert Syst. Appl* **36** (2009) 9409.
39. M Khader, and A B Hamza, *Expert Syst. Appl* **39** (2012) 5548.
40. J J Hopfield, and A V M Herz, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **92** (1995) 6655.
41. R Khordad, and H R Rastegar Sedehi, *Indian J. Phys* **91** (2017) 825.
42. E P da Silva, C Tsallis, and E M F Curado, *Physica A* **199** (1993) 137.
43. J L Xiao, *Superlatt. Microstruc* **90** (2016) 308.
44. Y Sun, Z H Ding, and J L Xiao, *J. Low. Temp. Phys* **177** (2014) 151.
45. R Khordad, *Contin. Mech. Thermodyn* **28** (2016) 947.
46. R Khordad, and H R Rastegar Sedehi, *J. Low. Temp. Phys.* **190** (2018) 200.
47. R Khordad, *Solid State Commun.* **269** (2017) 118.
48. R Khordad, and H R Rastegar Sedehi, *Indian J. Phys* **92** (2018) 979.
49. T D Lee, F E Low, and D pines, *Phys. Rev.* **90** (1953) 297.
50. C Tsallis, R S Mendes, and A R Plastino, *Physica A* **261** (1998) 534.
51. Z W Wang, L Liu, and Z Q Li, *Appl. Phys. Lett.* **106** (2015) 101601..
1. J Yan, Y Zhang, P Kim, and A Pinczuk, *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007) 166802.
2. M Wang, D Galpaya, Z B Lai, Y Xu, and C Yan, *Int. J. Smart Nano Mater.* **5** (2014) 123.
3. D M Basko, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 125418.
4. S Acharya and R Sharma *Indian J. Phys* **90** (2016) 543.
5. M Calandra and F Mauri, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 205411.
6. Y J Kim, G Y Bae, S Chun, and W Park, *J. Nanosci. Nanotechnol* **16** (2016) 2769.
7. S Won, *Nanoscale* **6** (2014) 6057.
8. W Lee, S Suzuki, and M Miyayama, *Nanomaterials* **4** (2014) 599.
9. J W Rhim, and K Moon, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 035402.
10. J P Hogue, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 064302.
11. G Giovannetti, P A Khomyakov, G Brocks, P J Kelly, J van den Brink, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 073103.
12. C L Kane and E J Mele, *Phys. Rev. Lett* **95** (2005) 146802.
13. C L Kane and E J Mele, *Phys. Rev. Lett* **95** (2005) 226801.
14. B Xu, J Yin, Y D Xia, X G Wan, K Jiang, and Z G Liu, *Appl. Phys. Lett* **96** (2010) 163102.
15. G Lee, and K Cho, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 165440.
16. Z W Wang, L Liu, and Z Q Li, *Appl. Phys. Lett* **106** (2015) 101601.
17. I T Lin, and J M Liu, *Appl. Phys. Lett* **103** (2013) 081606.
18. V M Pereira, J Nilsson, and A H C Neto, *Phys. Rev. Lett* **99** (2007) 166802.
19. B Hunt, J D S Yamagishi, A F Young, M Yankowitz, B J LeRoy, K Watanabe, T Taniguchi, P Moon, M Koshino, P J Herrero, and R C Ashoori, *Science* **340** (2013) 1427.
20. J P Hogue, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 155438.
21. M Kindermann, B Uchoa, and D L Mille, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 115415.
22. Z H Ding, Y Zhao, and J L Xiao, *Superlatt. Microstruct.* **97** (2016) 298.
23. D M Basko, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 125418.
24. T Stauber, N M R Peres, and A H Castro Neto, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 085418.
25. B Kandemir, and A Mogulkoc, *Solid State Commun.* **177** (2014) 80.