

«مقاله پژوهشی»

کاربرد مکانیک آماری در بررسی خواص ترمودینامیکی گرافن

افسانه بذرافشان¹، حمیدرضا رستگار سدهی²، رضا خرداد³، محمد قناعتیان^{4*}

1. استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه جهرم، جهرم، ایران

2. استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه جهرم، جهرم، ایران

3. استاد، گروه فیزیک، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

4. دانشیار، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، ایران

تاریخ دریافت: 1401/03/19 تاریخ پذیرش: 1401/05/20

Application of Statistical Mechanics for Thermodynamics Properties of Graphene

A. Bazrafshan¹, H. R. Rastegar Sedehi², R. Khordad³, M. Ghanaatian^{4*}

1. Assistant Professor, Department of Physics, Jahrom University, Jahrom, Iran

2. Assistant Professor, Department of Physics, Jahrom University, Jahrom, Iran

3. Professor, Department of Physics, Yasouj University, Yasouj, Iran

4. Associate Professor, Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

Received: 2022/06/09

Accepted: 2022/08/11

Abstract

In this paper, we have been used energy spectrum of ideal single layer graphene to investigate thermodynamic properties of this material. We have used Shannon and Tsallis entropies for investigating the entropy, internal energy and specific heat of this system. We plot these properties versus temperature. The obtained results show that the entropy and internal energy increase with enhancing the temperature and then these reach to a constant values. Also, the specific heat increases until it reaches a maximum and then reduces with increasing the temperature.

Keywords

Graphene, Entropy, Thermodynamics Properties, Specific Heat

چکیده

در این مقاله از انرژی مربوط به یک گرافن تک لایه استفاده شده و به کمک آن خواص ترمودینامیکی این ماده مورد بررسی قرار گرفته است. از آنتروپی‌های شانتون و سالیس برای بررسی خواص ترمودینامیکی از جمله آنتروپی، انرژی درونی و گرمای ویژه استفاده کرده‌ایم. نمودارها بر حسب دما به ازای پارامترهای مختلفی رسم شده‌اند. نتایج نشان می‌دهند که آنتروپی و انرژی درونی با زیاد شدن دما افزایش می‌یابند و سپس به مقدار ثابتی می‌رسند. همچنین، نمودار گرمای ویژه در ابتدا تا مقدار بیشینه‌ای افزایش می‌یابد و سپس با بالا رفتن دما کاهش پیدا می‌کند.

واژه‌های کلیدی

گرافن، آنتروپی، خواص ترمودینامیکی، گرمای ویژه

مقدمه

گرافن¹ از ورقه‌ای از اتم‌های کربن تشکیل شده که واحدهایی شش گوشه هستند و ضخامتی به اندازه یک اتم دارند. از سال 2004 که گرافن به صورت آزمایشگاهی ساخته شده است تا کنون یکی از مهم‌ترین مباحث در تحقیقات نظری و عملی فیزیک است. این زمینه تحقیقاتی بسیار تازه است و به سادگی نمی‌توان گفت که در دو دهه آینده تا چه اندازه بتواند در پیشرفت علمی و تکنولوژی مؤثر باشد. گرافن پتانسیل فراوانی در زمینه کاربردهای نانو تکنولوژی، الکترونیک، پدیده‌های فیزیکی انرژی بالا در حالت جامد دارد و نیز می‌تواند به درک مفاهیم فیزیک مواد دو بعدی و ماده چگال کمک قابل توجهی کند [4-1].

اهمیت گرافن و تحقیق در مورد ویژگی‌های آن، بعد از سال 2010 که جایزه نوبل فیزیک به دو دانشمند روسی که در این زمینه فعالیت می‌کردند، اعطا گردید، بسیار بیشتر شده است. در سال‌های اخیر تحقیقات بسیار گسترده‌ای بر روی جنبه‌های نظری و تجربی ویژگی‌های گرافن انجام گرفته است. مرور همگی خواص گرافن به عنوان زمینه‌ای علمی که با چنین سرعت شگفت‌انگیزی در حال پیشرفت است و هر روزه مقالات متعددی در مورد آن به چاپ می‌رسد، بسیار دشوار است. اما این نکته قابل توجه است که محاسبات ریاضی در سال‌های اخیر نقش مهمی در بررسی ویژگی‌های الکترونیکی، اپتیکی، گرمایی و ترمودینامیکی این ماده داشته است [5-9].

از سوی دیگر، مکانیک آماری به عنوان ابزاری بسیار قوی در بررسی سیستم‌های فیزیکی در سال‌های اخیر اهمیت ویژه‌ای یافته و هر روزه شاهدیم که اهمیت این ابزار کارآمد و ویژه افزایش چشم‌گیری پیدا می‌کند. در مکانیک آماری بررسی کمیت‌هایی همچون آنتروپی، انرژی درونی و ظرفیت گرمایی می‌تواند ویژگی‌های ترمودینامیکی سیستم را مشخص نماید. آنتروپی یک سیستم فیزیکی با اندازه‌گیری اطلاعات از دست رفته آن سیستم ارتباط دارد. در حالی که به طور معمول از آنتروپی کلاسیک بولتزمن-گیس و یا به عبارتی دیگر معادل با آن آنتروپی شانون استفاده می‌گردد، اما در سال‌های اخیر آنتروپی‌های نافزونور به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردی که دارند و به خاطر

این قابلیت که می‌توانند رفتار سیستم‌های پیچیده را به خوبی پیش‌بینی کنند، بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. این آنتروپی‌ها، آنتروپی‌های تعمیم یافته‌ای از آنتروپی کلاسیک هستند که به شیوه‌های گوناگونی تعریف گردیده‌اند و از جمله مهم‌ترین آنها می‌توان به آنتروپی سالیس²، آنتروپی رنای³، آنتروپی آبه⁴، آنتروپی لندزبرگ-ودرال⁵ و... اشاره کرد [21-10].

آنتروپی‌های نافزونور

آنتروپی کلاسیک که برای بررسی ترمودینامیک سیستم‌ها به کار رفته، آنتروپی شانون نام دارد که به سادگی می‌توان آن را به صورت زیر تعریف کرد:

$$S = -k_B \sum_{i=1}^W p_i \ln p_i \quad (1)$$

که در این رابطه p_i احتمال اشغال حالت i ام و نیز k_B ثابت بولتزمن است. آنتروپی شانون را می‌توان به کمک یک پارامتر q به چندین آنتروپی نافزونور تعمیم یافته تبدیل کرد. یکی از مهم‌ترین آنتروپی‌های تعمیم یافته تعریف شده، آنتروپی سالیس نام دارد که به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$S_q^{(T)} = \frac{k}{q-1} \left(1 - \sum_{i=1}^W p_i^q \right) \quad (2)$$

نکته مهم در مورد این آنتروپی این است که وقتی پارامتر q به سمت عدد یک میل می‌کند، این آنتروپی به آنتروپی شانون تبدیل می‌گردد.

آنتروپی سالیس را می‌توان تحت قیدهای مناسب زیر پیشینه کرد:

$$\sum_{i=1}^W p_i = 1, \quad \sum_{i=1}^W p_i^q E_i = U_q \quad (3)$$

و سپس با استفاده از فرآیند وردش، توزیع احتمال را به شکل زیر به دست آورد:

$$p(E_i) = \begin{cases} \frac{[1 - \beta(1 - q)E_i]^{1/(1-q)}}{Z_q} & [1 - \beta(1 - q)E_i] > 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$

که در اینجا E_i و U_q به ترتیب ویژه مقادیر انرژی و انرژی داخلی تعمیم یافته سیستم هستند و $\beta =$

2. Tsallis
3. Renyi
4. Abe
5. Landsberg-Vedral

1. Graphene

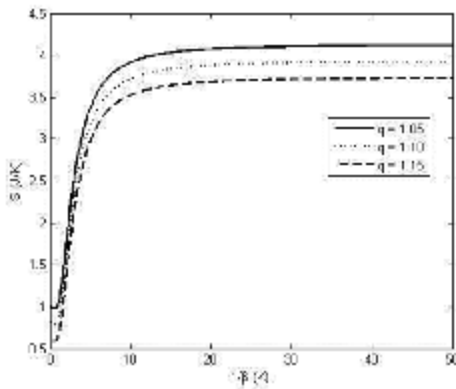
در صورتی که در هامیلتونی علاوه بر همسایه اول، نزدیکترین همسایه بعدی را هم در نظر بگیریم، می توان به طیف انرژی زیر رسید:

$$E'(\mathbf{k}) = \pm t\sqrt{3 + f(\mathbf{k})} - t' f(\mathbf{k}) \quad (12)$$

که در آن t' فاصله تا دومین همسایه است و $f(\mathbf{k})$ به صورت معادله (11) بیان می شود.

بررسی ترمودینامیک گرافن تک لایه به کمک آنتروپی های شانون و سالیس

در این بخش با استفاده از آنتروپی سالیس، ترمودینامیک گرافن تک لایه ای را مورد بررسی قرار می دهیم. شکل (1) نمایش دهنده تغییرات آنتروپی سالیس بر حسب دما به ازای مقادیر متفاوت پارامتر q است که پارامتر نافزونور نام دارد و هنگامی که به سمت یک میل کند، رفتار آنتروپی سالیس مشابه رفتار آنتروپی شانون می گردد. همان گونه که از شکل مشخص است آنتروپی سالیس به ازای تمام مقادیر q در دمای پایین و به سرعت افزایش می یابد و آنگاه رفتار یکنواختی را از خود به نمایش می گذارد. به عبارت دیگر کمیت آنتروپی که نشان دهنده میزان بی نظمی سیستم است، با بالا رفتن دما به سرعت افزایش می یابد اما بعد از گذر از دمایی مشخص هر چه که میزان دما اضافه گردد، بی نظمی سیستم تغییر محسوسی نمی کند.



شکل 1. رفتار آنتروپی سالیس بر حسب دما به ازای مقادیر مختلف پارامتر q

همچنین از شکل مشخص است که هر چه مقدار این پارامتر افزایش می یابد، آنتروپی سالیس زودتر به مقدار ثابت خود می رسد؛ به عبارتی دیگر با افزایش این پارامتر، آنتروپی

$1/(k_B T)$. همچنین تابع پارش تعمیم یافته عبارت است از:

$$Z_q = \sum_{\text{levels}} [1 - \beta(1 - q)E_i]^{1/(1-q)} \quad (5)$$

گرمای ویژه تعمیم یافته نیز به شکل زیر تعریف می شود:

$$C_q = \frac{\partial U_q}{\partial T} \quad (6)$$

به این ترتیب گرمای ویژه برای آنتروپی سالیس به صورت زیر در می آید:

$$\frac{C_q}{k_B} = \frac{q}{(k_B T)^2} \left[\left(\sum_i p_i^q \frac{E_i^2}{1 - \beta(1-q)E_i} \right) - \left(\sum_i p_i^q E_i \right) \left(\sum_i p_i \frac{E_i}{1 - \beta(1-q)E_i} \right) \right] \quad (7)$$

گرافن تک لایه

کرین ششمین عنصر در جدول تناوبی عناصر و دارای دو ایزوتروپ پایدار است. هنگامی که این شش اتم تشکیل مولکول و جامد می دهند، انرژی کل کاهش می یابد و موجب همپوشانی توابع موج الکترونی در مکان های مختلف اربیتال های مولکولی یا نوار انرژی جامدات می گردد.

با در نظر گرفتن تقریب نزدیک ترین همسایه و با توجه به پارامتر جهش t حالات پایه الکترون شامل دو حالت π متعلق به اتم هایی از زیر شبکه های A و B است. در این تقریب، فرآیند جهش درون زیر شبکه ها روی نداده بلکه فقط میان آنها رخ می دهد. به این ترتیب هامیلتونی تنگ-بست به وسیله ماتریس 2×2 زیر بیان می گردد:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & t S(\mathbf{k}) \\ t S^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

که در آن \mathbf{k} بردار موج است و

$$S(\mathbf{k}) = \exp\left(\frac{ik_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a \sqrt{3}}{2}\right) + \exp(-ik_x a). \quad (9)$$

که این ترتیب طیف انرژی به صورت زیر حاصل می گردد:

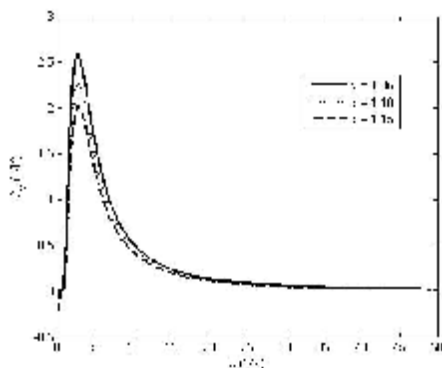
$$E(\mathbf{k}) = \pm t |S(\mathbf{k})| = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} \quad (10)$$

که در آن t فاصله نزدیک ترین همسایه و

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3} k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2} k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2} k_x a\right) \quad (11)$$

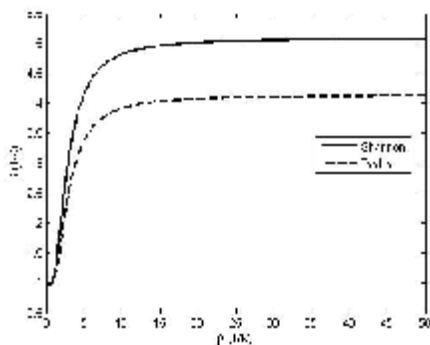
است.

می‌گردد که میزان گرمای ویژه که به میزان قابل توجهی رسیده، کاهش پیدا کند.



شکل 3. رفتار گرمای ویژه در آنترپوی سالیس بر حسب دما به ازای مقادیر مختلف پارامتر q

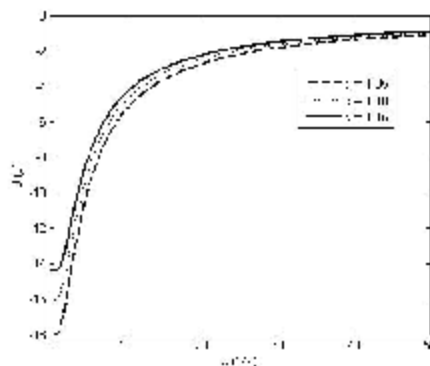
در شکل (4) تغییرات آنترپوی بر حسب دما در دو آنترپوی شانون و سالیس به ازای پارامترهای یکسان مقایسه گردیده است. همان گونه که از شکل مشخص است در هر دو حالت پس از گذر زمان مشخصی نمودار آنترپوی به مقدار ثابتی میل می‌کند. در آنترپوی سالیس رسیدن به بالاترین نقطه آنترپوی به مقدار q وابسته است.



شکل 4. تغییرات آنترپوی بر حسب دما در آنترپوی‌های شانون و سالیس به ازای $q = 1.1$

شکل (5) تغییرات انرژی درونی بر حسب دما در دو آنترپوی شانون و سالیس را نشان می‌دهد. از این شکل می‌توان به وضوح دریافت که رفتار این کمیت در هر دو فرمالیسم شباهت فراوانی به هم دارد و پس از گذشتن مدت زمان معینی نمودارها به مقدار ثابتی می‌رسند.

کاهش می‌یابد، چون با در نظر گرفتن میزان برهمکنش‌ها در این سیستم مقدار بی‌نظمی و در نتیجه آنترپوی کاهش پیدا می‌کند.



شکل 2. تغییرات انرژی درونی در آنترپوی سالیس بر حسب دما به ازای مقادیر مختلف پارامتر q

در شکل (2) تغییرات انرژی درونی در آنترپوی سالیس به ازای مقادیر مختلف q رسم شده است. آنچه در این شکل دیده می‌شود این است که انرژی درونی با بالا رفتن دما، افزایش پیدا می‌کند. به عبارتی دیگر، میزان انرژی درونی سیستم که در دمای صفر بسیار اندک است؛ زیرا که جنب و جوش در این دما تقریباً صفر است، با افزایش دما به نحو کاملاً واضحی افزایش می‌یابد. دلیل این امر آن است که سیستم با گرفتن گرما به سرعت انرژی خود را افزایش می‌دهد و متحنی صعودی را در این شکل ایجاد می‌کند. این افزایش به مقدار q وابسته است و با تغییر این پارامتر می‌توان میزان انرژی درونی را اضافه کرد.

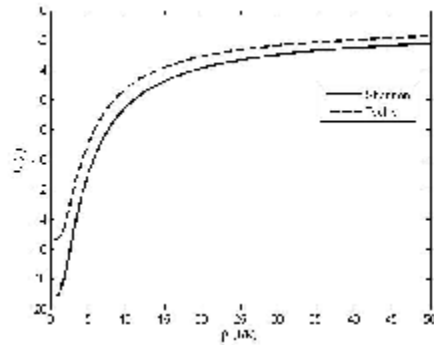
شکل (3) رفتار گرمای ویژه در آنترپوی سالیس بر حسب مقادیر مختلف دما به ازای مقادیر گوناگون پارامتر q را نشان می‌دهد. در این شکل ابتدا با افزایش دما، بالا رفتن مقدار گرمای ویژه مشاهده شده و آنگاه پس از رسیدن به نقطه بیشینه، نمودارها شروع به کاهش یافتن کرده و با بالا رفتن دما به اندازه کافی، مقدار آنها به سمت صفر میل می‌کند. در این شکل هم کاملاً واضح است که با تغییر مقدار پارامتر q می‌توان بیشینه این نمودار را تعیین کرد. همچنین عرض این انحنا نمایش دهنده گاف مربوط به گرافن است و مشخص است که بالا رفتن دما باعث

یافتن می‌کند. اگر دما به اندازه کافی بالا رود، گرمای ویژه به سمت صفر میل می‌کند. مشخص است که در آنتروپی سالیس با توجه به تغییر مقدار q نقطهٔ بیشینه در نمودار می‌تواند کاهش یابد.

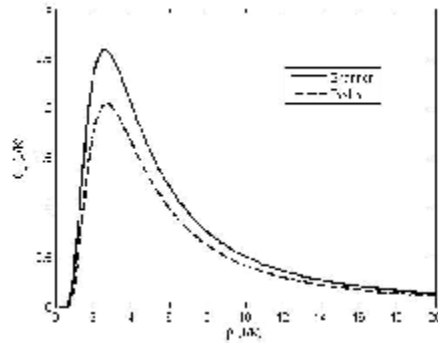
بحث و نتیجه‌گیری

در این مقاله به کمک آنتروپی سالیس ویژگی‌های ترمودینامیکی گرافن تک لایه‌ای مورد بررسی قرار گرفته است. این خواص که شامل آنتروپی، انرژی درونی و گرمای ویژه هستند، نمایش دهندهٔ خواص ترمودینامیکی گرافن می‌باشند. همه نمودارهای رسم شده، با مقدار این منحنی‌ها برای آنتروپی شانون یعنی هنگامی که پارامتر q به سمت مقدار یک میل می‌کند، مقایسه گردیده‌اند.

نمودارهای مربوط به این خواص بر حسب دما رسم گردیده‌اند. نمودار مربوط به آنتروپی سیستم نشان می‌دهد که با افزایش دما، بی‌نظمی سیستم به سرعت افزایش می‌یابد و آنگاه به مقدار ثابتی می‌رسد که این مقدار ثابت به پارامتر حقیقی نافزونور q وابستگی قابل ملاحظه‌ای دارد. همچنین انرژی درونی سیستم با بالا رفتن دما به میزان قابل توجهی زیاد می‌شود که این ویژگی هم به پارامتر q وابسته است. در نهایت رسم نمودار مربوط به گرمای ویژه بر حسب دما نشان می‌دهد که این خصوصیت همان گونه که انتظار می‌رود، پس از رسیدن به مقدار بیشینه‌ای، کاهش پیدا کرده که این مقدار بیشینه با گاف نواری سیستم متناسب است. این نقطه بیشینه هم با تغییر مقدار پارامتر q قابل تغییر است و می‌توان میزان آن را با توجه به شرایط و نیازی که سیستم دارد، تنظیم کرد.



شکل 5. تغییرات انرژی درونی بر حسب دما در آنتروپی‌های شانون و سالیس به ازای $q = 1.1$



شکل 6. تغییرات گرمای ویژه بر حسب دما در آنتروپی‌های شانون و سالیس به ازای $q = 1.1$

شکل (6) رفتار گرمای ویژه در دو آنتروپی شانون و سالیس بر حسب دما را مقایسه کرده است. در این شکل افزایش دما در ابتدا موجب بالا رفتن مقدار گرمای ویژه شده و سپس با رسیدن به نقطه‌ای بیشینه، شروع به کاهش

[1] M. I. Katsnelson, Graphene: Carbon in Two Dimensions, Cambridge University Press, New York, (2012).
 [2] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, Nature 438 (2005) 197.
 [3] A. K. Geim, K. S. Novoselov, The rise of graphene, Nat. Mater. 6 (2007) 183.
 [4] Q. Zhao, M. B. Nardelli, J. Bernholc, Ultimate strength of carbon nanotubes:

A theoretical study, Phys. Rev. B 65 (2002) 144105.
 [5] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, Electron transport in disordered graphene, Phys. Rev. B 74 (2006) 235443.
 [6] A. R. Wright, J. Liu, Z. Ma, Z. Zeng, W. Xu, C. Zhang, Thermodynamic properties of graphene nanoribbons under zero and quantizing magnetic fields, Microelectron. J. 40 (2008) 716.
 [7] R. Nasir, M.A. Khan, M. Tahir, K. Saibeeh, Thermodynamic properties of a

- weakly modulated graphene monolayer in a magnetic field, *J. Phys.: Condens. Matter* 22 (2010) 25503.
- [8] M. K. Li, S.J. Lee, T.W. Kang, Silicon-compatible high-hole-mobility transistor with an undoped germanium channel for low-power application, *Curr. Appl. Phys.* 9 (2009) 769.
- [9] F. Molitor, J. Gttinger, C. Stampfer, S. Drscher, A. Jacobsen, T. Ihn, and K. Ensslin, Transport gap in side-gated graphene constrictions, *J. Phys. Condens. Matter.* 23 (2011) 243201.
- [10] C. Beck, Generalised information and entropy measures in physics, *Contemp. Phys.* 50 (2009) 495.
- [11] C. Tsallis, Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics, *J. Stat. Phys.* 52 (1988) 479.
- [12] C. Tsallis, R.S. Mendes, A.R. Plastino, The role of constraints within generalized nonextensive statistics, *Physica A* 261 (1998) 534.
- [13] S. Abe, C. Beck, E.G.D. Cohen, Superstatistics, thermodynamics, and fluctuations, *Phys. Rev. E* 76 (2007) 031102.
- [14] G. Kaniadakis, Statistical mechanics in the context of special relativity, *Phys. Rev. E* 66 (2002) 056125.
- [15] S.C. Kenfact, A. Fotue, M.F.C. Fobasso, G.N. Bawe, L.C. Fai, Probability density of bipolaron in a parabolic potential two-dimensional quantum dot under external magnetic and electric fields, *Superlattices Microstruct.* 111 (2017) 32.
- [16] R. Khordad, H.R. Rastegar Sedehi, Magnetic susceptibility of graphene in non-commutative phase-space: Extensive and non-extensive entropy, *Eur. Phys. J. Plus*, 134 (2019) 133.
- [17] R. Khordad, H.R. Rastegar Sedehi, H. Bahramiyan, Study of non-extensive entropy of bound polaron in monolayer graphene, *Indian J Phys*, 92(8) (2018) 979.
- [18] R. Houça, A. Jellal, Thermodynamic properties of graphene in a magnetic field and Rashba coupling, *Phys. Scr.* 94 (2018) 105707.
- [19] H.R. Rastegar Sedehi, Thermodynamics properties of Bernal stacking multilayer graphene, *Eur. Phys. J. B* 93 (2020) 14.
- [20] H.R. Rastegar Sedehi, R. Khordad, Entropy and specific heat of graphene at low and high temperatures under an external magnetic field, *Solid State Communications* 313 (2020) 113911.
- [21] H.R. Rastegar Sedehi, R. Khordad, Investigation of specific heat in the monolayer graphene, *Iranian Journal of Physics Research*, 20 (2020) 355.

COPYRIGHTS



© 2022 by the authors Licensee PNU, Tehran, Iran This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4 0 International (CC BY4 0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)