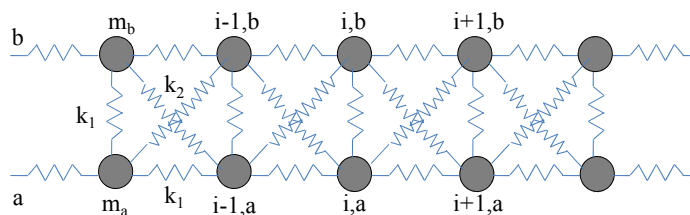


حالت‌ها، ضریب عبور فونونی، رسانندگی گرمایی و خواص ترمودینامیکی مانند انرژی درونی و آنتروپی را به دست آورد [۲ و ۳]. همچنین می‌توان به کمک طیف بسامد، اثر عامل‌های مختلف مانند جرم، نیروهای بین اتمی، نیروی اتلاف محیط و غیره را بر خواص گرمایی ساختارها بررسی کرد [۴ و ۵]. بنابراین اهمیت بررسی طیف برای مطالعه دیگر خواص فونونی آشکار می‌شود. در این مقاله، با استفاده از روش ماتریس انتقال و با در نظر گرفتن اثر همسایه دوم، به ارائه یک مدل در تقریب هماهنگ پرداخته [۶-۸]، طیف بسامد فونونی را برای یک نانوساختار نردبانی به دست می‌آوریم. همچنین اثر تغییر در جرم ذرات را بر شاخه‌های آکوستیکی

یکی از موضوعاتی که امروزه توجه بسیاری از دانشمندان را به خود جلب کرده است، مسئله بررسی خواص گرمایی و فونونی نانوساختارها است. در این رهگذر، یکی از ویژگی‌های مهم و اساسی، بررسی طیف بسامد فونونی است [۱]. در سال‌های اخیر تحقیقات بسیاری در این زمینه انجام شده و نتایج قابل توجهی درباره ارتعاشات شبکه و طیف فونونی نانوساختارها به دست آمده است. زیرا مطالعه خواص گرمایی و ترمودینامیکی نانوساختارها وابسته به بررسی طیف فونونی آنها است. به عبارت دیگر با محاسبه طیف بسامد می‌توان خواص فونونی نانوساختارها از جمله چگالی



شکل ۱. دستگاه نردبانی متشکل از دو زنجیره اتمی a و b با جرم‌های متفاوت m_a و m_b ، تحت تأثیر فنرهای همسایه اول و دوم.

a چنین می‌شود

$$\begin{aligned}
 -m_a \omega^2 u_{i,a,x} = & -k_1(u_{i,a,x} - u_{i+1,a,x}) - k_1(u_{i,a,x} - u_{i-1,a,x}) \\
 & -\frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,x} - u_{i+1,b,x}) - \frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,x} - u_{i-1,b,x}) \\
 & -\frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,y} - u_{i+1,b,y}) + \frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,y} - u_{i-1,b,y}),
 \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned}
 -m_a \omega^2 u_{i,a,y} = & -\frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,x} - u_{i+1,b,x}) \\
 & + \frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,x} - u_{i-1,b,x}) - \frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,y} - u_{i+1,b,y}) \\
 & - \frac{k_2}{\gamma}(u_{i,a,y} - u_{i-1,b,y}) - k_1(u_{i,a,y} - u_{i,b,y}),
 \end{aligned} \quad (4)$$

که در آن m_a جرم ذره، ω بسامد، $(u_{i,a,y})$ جابه‌جایی اتم i ام در شاخه a در راستای محور x (محور y) و k_1 و k_2 به ترتیب ثابت‌های فنر میان همسایه‌های اول و دوم هستند. برای ذره i ام در شاخه b نیز می‌توان به همین روش معادلات حرکت را به دست آورد. اکنون با داشتن معادلات حرکت می‌توانیم طیف بسامد فونونی را به دست آوریم. به عنوان یک حالت خاص با فرض $k_2 = 0$ ، می‌توان تأثیر همسایه دوم را نادیده گرفت. در ادامه برای این حالت خاص، خواص فونونی و گرمایی دستگاه نردبانی را بررسی می‌کنیم.

اکنون با استفاده از روابطی که در بخش قبل به دست آوردیم، طیف بسامد فونونی را برای دستگاه نردبانی مطابق شکل ۱ بررسی می‌کنیم. به کمک معادلات حرکت برای دو ذره i ام در شاخه a و i ام در شاخه b ، و با استفاده از شرط بلوخ $\varphi = e^{\pm i q}$ ، که در آن با فرض یک بودن ثابت شبکه، $\bar{u}_{i\pm 1} = \varphi \bar{u}_i$

و اپتیکی بسامد بررسی می‌کنیم. سپس به کمک طیف فونونی، برای یک حالت خاص، چگالی حالت‌های دستگاه را در حالت ایده‌آل محاسبه می‌کنیم. در پایان نیز رسانندگی گرمایی ساختار را به دست می‌آوریم.

با توجه به اهمیت بسامدهای ویژه در مطالعه خواص فونونی، ابتدا به بررسی طیف بسامد فونونی می‌پردازیم. بنابراین معادلات حرکت را در تقریب هماهنگ و در حضور همسایه دوم برای یک دستگاه نردبانی بررسی می‌کنیم. انرژی پتانسیل کشسانی فنر بر حسب جابه‌جایی اتم‌ها از مکان تعادل چنین است

$$U = \frac{1}{2} \sum_{ij} k_{ij} [\hat{n}_{ij} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)]^2, \quad (1)$$

که در آن \vec{r}_i ، (\vec{r}_j) ، جابه‌جایی اتم i ام (j ام) از مکان تعادل در صفحه شامل نردبان، k_{ij} ، ثابت فنر بین اتم‌های i ام و j ام و \hat{n}_{ij} بردار یکه در راستای خط واصل این دو اتم است. با استفاده از انرژی پتانسیل (۱)، معادله حرکت به صورت زیر به دست می‌آید

$$\vec{F} = -\vec{\nabla} U. \quad (2)$$

اکنون به کمک روابط (۱) و (۲)، معادلات حرکت را برای یک ساختار نردبانی، در حضور همسایه دوم به دست می‌آوریم. همان‌طور که در شکل ۱ دیده می‌شود، دستگاه از دو زنجیره اتمی نامحدود a و b با جرم‌های متفاوت m_a و m_b تشکیل شده است که همسایه‌های اول و دوم آن به ترتیب توسط فنرهایی با ثابت‌های k_1 و k_2 به یکدیگر متصل شده‌اند. با تفکیک قسمت زمانی دامنه‌های جابه‌جایی از قسمت مکانی به صورت $\bar{u} = u e^{-i\omega t}$ ، معادلات حرکت برای ذره i ام در شاخه

دهیم، شار گرما می‌تواند از آن عبور کند. رابطه رسانندگی گرمایی یک نانوساختار به صورت زیر است [۱۱]

$$\kappa = \frac{\hbar^2}{k_B T^2} \sum_n \frac{1}{2\pi} \int_{\omega_n}^{\omega} \tau(\omega) \frac{\omega^2 e^{\beta \hbar \omega}}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2} d\omega, \quad (12)$$

که در آن T دما، ω بسامد، \hbar ثابت پلانک، k_B ثابت بولتزمن، τ ضریب عبور و $\beta = \hbar \omega / k_B T$ است. اکنون به کمک روابط فوق می‌توانیم خواص فونونی و گرمایی دستگاه نردبانی را بررسی کنیم.

برای یک ساختار نردبانی مانند شکل ۱، می‌توان طیف بسامد فونونی را به کمک رابطه (۷) محاسبه کرد. در شکل ۲ نمودار طیف بسامد برای مورد خاص $r_k = 0.5$ و $r_m = 1$ رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نمودار دارای چهار شاخهٔ بسامد است. چون دستگاه نردبانی از یاخته‌های دو اتمی تشکیل شده است، علاوه بر بسامد آکوستیکی، بسامد اپتیکی نیز دارد. به علت اینکه هر اتم دارای دو درجهٔ آزادی در صفحهٔ شامل نردبان است، بنابراین حداکثر چهار شاخهٔ بسامد برای این دستگاه وجود دارد. که شاخه‌هایی که از صفر شروع می‌شوند آکوستیکی (شاخه‌های ۱ و ۲ در شکل ۲) و دو شاخهٔ دیگر (شاخه‌های ۳ و ۴ در شکل ۲)، اپتیکی هستند. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود در این مورد خاص، شاخه‌های ۱ و ۳، کاملاً متقارن است. لازم به ذکر است که طیف بسامد فونونی برای بردار موج q ، از 0 تا $-\pi$ کاملاً متقارن با ناحیهٔ 0 تا π است، بنابراین از رسم آن خودداری می‌کنیم. اکنون تغییرات احتمالی هر یک از شاخه‌های بسامد را با تغییر در جرم اتم‌های دستگاه، به‌طور جداگانه بررسی می‌کنیم.

شکل ۳، شاخه‌های بسامد را برای مورد $r_k = 0.5$ ، برای چند مقدار مختلف r_m ، نشان می‌دهد. در شکل ۳-الف، تغییرات شاخهٔ ۱ آکوستیکی نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌کنیم با افزایش مقدار r_m ، شاخهٔ بسامد شمارهٔ ۱ با آهنگ تقریباً یکسانی کاهش می‌یابد. شکل ۳-ب تغییرات شاخهٔ ۲ آکوستیکی را نشان می‌دهد. دیده می‌شود که افزایش مقدار r_m ، طیف بسامد فونونی را به سمت بسامدهای پایین‌تر

است، ماتریس دینامیکی ضرایب دستگاه با بدون بعد کردن بسامد ($m_a \omega^2 / k_1 \rightarrow \omega^2$)، به صورت زیر به دست می‌آید

$$D = \begin{pmatrix} \omega^2 - R & 0 & r_k \cos(q) & ir_k \sin(q) \\ 0 & \omega^2 - 1 - r_k & ir_k \sin(q) & 1 + r_k \cos(q) \\ r_k \cos(q) & -ir_k \sin(q) & r_m \omega^2 - R & 0 \\ -ir_k \sin(q) & 1 + r_k \cos(q) & 0 & r_m \omega^2 - 1 - r_k \end{pmatrix}, \quad (5)$$

که در آن q بردار موج فونونی، $r_k = k_1 / k_2$ ، $r_m = m_b / m_a$ و $R = 2 + r_k - 2 \cos(q)$ است. با صفر قرار دادن دترمینان ماتریس فوق می‌توان مدهای ویژه دستگاه (طیف بسامد فونونی) را به دست آورد

$$\det D = 0. \quad (7)$$

اگر از اثر اتلاف محیط صرف‌نظر کنیم، $|\varphi| = 1$ خواهد بود. بنابراین مدهای ویژه دستگاه در منطقهٔ اول بریلوئن به دست می‌آیند

$$q \in [-\pi, +\pi], \quad (8)$$

با استفاده از بسامدهای ویژه که از رابطه (۷) به دست می‌آید، می‌توان چگالی حالت‌های فونونی دستگاه نردبانی را به کمک رابطهٔ زیر به دست آورد [۹]

$$\text{DOS}(\omega) = \frac{-1}{\pi} \sum_n \text{Im} \left(\frac{1}{\omega + i\eta - \omega_n} \right), \quad (9)$$

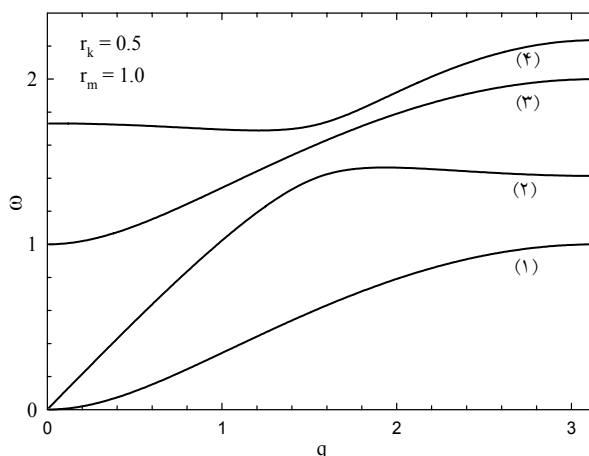
که در آن ω_n بسامدهای ویژه دستگاه نردبانی است. با استفاده از روش ماتریس انتقال می‌توان رابطهٔ ضریب عبور فونونی را به صورت دقیق به دست آورد [۱۰]

$$\tau(\omega) = \frac{4 |\det M|^2 \sin^2 qa}{\left| M_{11} e^{-iqa} - M_{22} e^{iqa} + M_{12} - M_{21} \right|^2}, \quad (10)$$

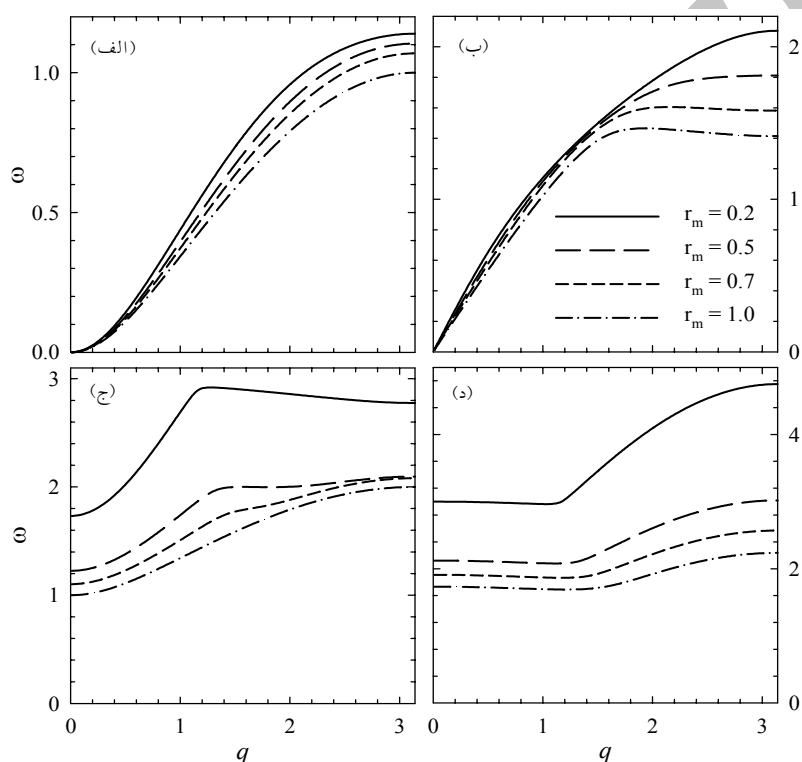
که در آن a ثابت شبکه و M ماتریس انتقال دستگاه است که می‌توان آن را به کمک رابطه‌های (۳) و (۴)، از طریق رابطهٔ بازگشتی زیر به دست آورد

$$\bar{u}_{n+1} = \alpha \bar{u}_n + \beta \bar{u}_{n-1}, \quad (11)$$

که در آن α و β ، درایه‌های ماتریس انتقال دستگاه هستند. اکنون با به دست آوردن ضریب عبور می‌توانیم رسانندگی گرمایی دستگاه نردبانی را محاسبه کنیم. طبق تعریف رسانندگی، چنانچه دستگاه را در معرض یک گردایان دمایی خارجی قرار



شکل ۲. طیف بسامد فونونی ساختار نردبانی در حضور همسایهٔ دوم به صورت تابعی از بردار موج q برای مورد $r_k = 0.5$ و $r_m = 1$.

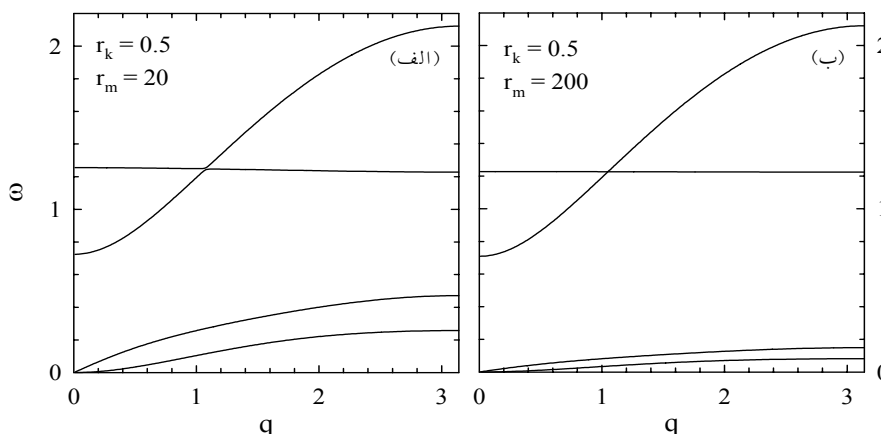


شکل ۳. شاخه‌های بسامد دستگاه نردبانی در حضور همسایهٔ دوم به صورت تابعی از بردار موج q برای $r_k = 0.5$ و چند مقدار مختلف r_m .

بسامدهای پایین‌تر می‌رود. طیف ابتدا ثابت بوده، سپس در یک بردار موج خاص q ، صعود می‌کند. همچنین دیده می‌شود مقدار کمینه در نقاط میانی طیف، کمی جابه‌جا شده و تقعر منحنی کاهش می‌یابد.

اکنون چنانچه طیف بسامد را برای مقادیر بزرگ نسبت جرم اتم‌ها r_m رسم کنیم مشاهده می‌کنیم با افزایش مقدار r_m در طیف بسامد گاف ایجاد می‌شود. نتیجهٔ این کار در شکل ۴

کشانده، یک مقدار بیشینه در نقاط میانی طیف ایجاد می‌شود. در شکل ۳-ج، تغییرات شاخهٔ ۳ اپتیکی رسم شده است، که نشان می‌دهد افزایش مقدار r_m به گونه‌ای بسامد را کاهش می‌دهد که رفته رفته مقدار بیشینهٔ آن در نقاط میانی از بین می‌رود و به صورت تقریباً یکنواخت صعود می‌کند. در شکل ۳-د تغییرات شاخهٔ ۴ اپتیکی بررسی شده است. مشاهده می‌شود با افزایش مقدار r_m ، طیف بسامد فونونی به سمت

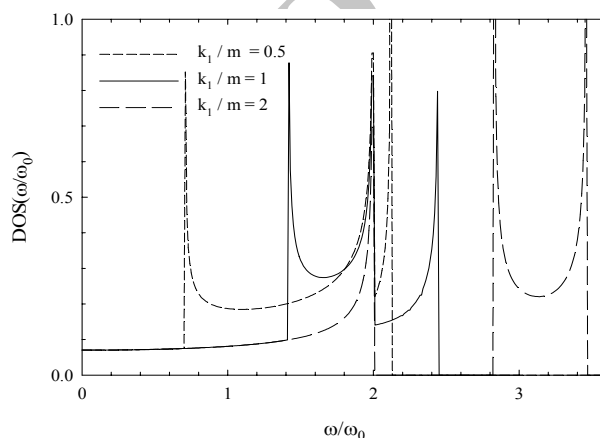


شکل ۴. شاخه‌های بسامد دستگاه نردبانی در حضور همسایه دوم به صورت تابعی از بردار موج q برای مقدار $r_k = 0.5$ در r_m های بزرگ.

اول را بر چگالی حالت‌ها بررسی کرده‌ایم.

لازم به ذکر است که تغییر قدرت فنر همسایه اول معادل است با اینکه بسامد اتم‌های هر یاخته دستگاه را تغییر دهیم. در حالت ایده‌آل (نمودار خط پر)، در نمودار چگالی حالت‌ها سه قله تشدید بسیار تیز مشاهده می‌شود. با افزایش قدرت ثابت فنر همسایه اول (نمودار با شاخص $k_1/m = 2$)، در مقایسه با حالت ایده‌آل دستگاه، پنجره مجاز بسامد فونونی افزایش یافته، یک گاف در نمودار ایجاد می‌شود. افزایش بیشتر مقدار ثابت فنر، باعث می‌شود ناحیه گاف بسامد پهن‌تر شود. ایجاد گاف به این معنی است که در گستره‌ای از بسامد، هیچ حالت فونونی وجود ندارد. همچنین با تضعیف قدرت فنر همسایه اول (نمودار با شاخص $k_1/m = 0.5$)، کاهش پنجره بسامد فونونی مشاهده می‌شود. به طوری که در حالت حدی، نتیجه چگالی حالت مربوط به یک زنجیره اتمی به دست می‌آید.

به عنوان آخرین نتیجه، رسانندگی گرمایی را با استفاده از رابطه (۱۲) محاسبه می‌کنیم. نتیجه این کار در شکل ۶ نشان داده شده است. مطابق شکل در حالت ایده‌آل (نمودار خط پر)، مشاهده می‌شود رسانندگی با افزایش دما سیر صعودی دارد. یادآوری می‌کنیم که مقدار $k_B T / \hbar \omega_0 = 1$ تقریباً معادل با دمای نیم کلونین ($0.5K$) است. در حالت خاصی که از اثر همسایه دوم صرف نظر کرده‌ایم، مشاهده می‌کنیم با افزایش قدرت فنر همسایه اول (نمودار با شاخص $k_1/m = 2$)، در مقایسه با حالت ایده‌آل، رسانندگی گرمایی کاهش می‌یابد. درحالی که



شکل ۵. چگالی حالت‌های فونونی دستگاه نردبانی در حالت خاص $k_1 = 0$ و $r_m = 1$ برای چند مقدار تغییر در بسامد اتم‌ها (تغییر در قدرت ثابت فنر k_1) در مقایسه با حالت ایده‌آل.

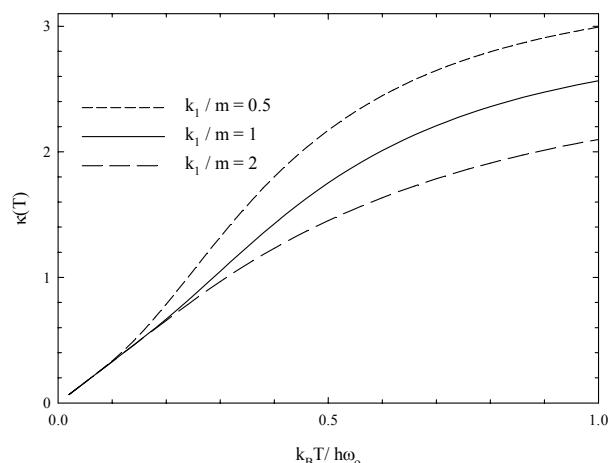
نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود با افزایش هر چه بیشتر در مقدار نسبت جرم اتم‌ها، شاخه‌های آکوستیکی طیف به سمت بسامدهای پایین‌تر میل می‌کند. تا جایی که در حالت حدی شکل ۴-ب، مشاهده می‌شود که شاخه‌های آکوستیکی به سمت بسامدهای نزدیک صفر میل کرده‌اند.

با استفاده از نتایج به دست آمده از طیف بسامد، می‌توانیم به کمک رابطه (۹)، چگالی حالت‌های فونونی دستگاه نردبانی را محاسبه کنیم. شکل ۵ چگالی حالت‌ها را در حالت ایده‌آل، برای موردی که از اثر همسایه‌های دوم صرف نظر کرده‌ایم ($k_1 = 0$)، نشان می‌دهد. در این حالت خاص اثر تغییر قدرت فنر همسایه

در این مقاله با ارائه یک مدل ساده، طیف بسامد فونونی یک نانوساختار نردبانی متشکل از دو زنجیره اتمی نامحدود با جرم‌های متفاوت m_a و m_b ، در حضور همسایه دوم بررسی شده است. سپس به کمک آن چگالی حالت‌های دستگاه، برای یک حالت خاص - در غیاب اثر همسایه دوم - و با تغییر قدرت ثابت فنر همسایه اول، محاسبه شده است. در پایان رسانندگی گرمایی دستگاه در این حالت خاص به دست آمده است. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش نسبت جرم ذرات، طیف بسامد فونونی دستگاه به سمت بسامدهای پایین‌تر میل می‌کند و در حالت حدی یک گاف در طیف مشاهده می‌شود. در حالت خاصی که از اثر همسایه‌های دوم چشم‌پوشی کردیم، با افزایش قدرت فنر همسایه اول که معادل با افزایش بسامد اتم‌ها است، در نمودار چگالی حالت‌ها بازه مجاز بسامد فونونی افزایش یافته، یک گاف در نمودار به وجود می‌آید. در این حالت موج فونونی نمی‌تواند از دستگاه عبور کند. همچنین رسانندگی گرمایی دستگاه نیز کاهش می‌یابد. در حالی که با کاهش قدرت فنر، مشاهده می‌شود در مقایسه با حالت ایده‌آل، رسانندگی گرمایی افزایش می‌یابد.

سپاسگزاری

بدین وسیله از حمایت‌های مالی معاونت پژوهشی دانشگاه شهرکرد قدردانی می‌شود.



شکل ۶. رسانندگی گرمایی دستگاه نردبانی به صورت تابعی از دما، در حالت خاص $k_1 = 0$ و $k_1/m = 1$ ، برای چند مورد تغییر در بسامد اتم‌ها (قدرت فنر همسایه اول k_1)، در مقایسه با حالت ایده‌آل.

کاهش قدرت آن باعث می‌شود رسانندگی افزایش یابد (نمودار با شاخص $k_1/m = 0.5$). در دماهای پایین با توجه به تابع توزیع بوز-اینشتین، فونون‌های با بسامدهای پایین راحت‌تر برانگیخته می‌شوند. از طرفی در غیاب فنرهای همسایه دوم، کاهش قدرت فنرهای همسایه اول چگالی مدها را به صورت مؤثر (مطابق شکل ۵ در بازه بسامدی صفر تا دو)، افزایش می‌دهد. به عبارت دیگر کاهش قدرت فنرها باعث افزایش چگالی مدها در بسامدهای پایین می‌شود که به دلیل برانگیخته شدن آسان‌تر است و این به نوبه خود باعث افزایش ضریب رسانندگی گرمایی می‌شود. در واقع در حد دماهای بسیار پایین و فنرهای خیلی قوی دستگاه مانند یک جسم صلب (فاقد فونون) رفتار می‌کند.

and Chemistry of Solids, **67** (2006) 851.

7. W Zhang, N Mingo and T S Fisher, *Phys. Rev. B* **76** (2007) 195426.
8. L Li and X Yang, *Physica B* **403** (2008) 2888.
9. H Zhao and J B Freund, *Phys. Rev. B* **80** (2009) 165304.
10. L Nie, L Wang, L H Zhao and K Q Chen, *Phys. Letters. A* **364** (2007) 343.
11. A N Cleland, "Foundations of Nanomechanics", Springer-Verlag, New York, (2003).

1. M J Leamy and A Dicarolo, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **198** (2009) 1572.
2. A K Kushwaha, *Physica B* **405** (2010) 1638.
3. G Y Fang, Z H Feng, L Hong and Z D Liang, *Computational Materials Science*, **20** (2001) 228.
4. K Kang, S Qin and C Wang, *Physica E* **41** (2009) 817.
5. J Lan, J S Wang, C K Gan and S K Chin, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 115401.
6. W H Qi, M P Wang and M Zhou, *Journal of Physics*