

DOI: 10.13718/j.cnki.xdzk.2021.01.007

类石墨烯材料 AlN 单层膜德拜温度和热容量随温度的变化

何勇军¹, 周庭艳², 马朝科³

1. 重庆市第一中学, 重庆 401329; 2. 重庆邮电大学 理学院, 重庆 400065;
3. 西南大学 物理科学与技术学院, 重庆 400715

摘要: 在充分考虑原子非简谐振动的基礎上, 研究了氮化铝(aluminium nitrite, AlN)单层膜的键能、德拜温度和热容量随温度的变化规律。结果表明, 研究相关热学参量时应考虑非简谐效应, 温度越高, 非简谐效应的影响越明显, 第 2 非简谐效应的影响越显著。AlN 单层膜的共价能、共价参量和极性参量均随温度呈非线性变化, 在 500~1 500 K 的温度范围变化较快, 高于 1 500 K, 变化逐步变缓, 最终平稳。极低温下, 键能随温度升高而线性地增大, 高于 150 K 后, 键能随温度升高而非线性地增大, 且温度愈高, 非简谐效应愈显著。德拜温度随温度升高而线性地增大。温度不太高时, 定容比热随温度升高而线性地增大, 温度较高时, 定容比热随温度的升高逐步变缓。

关键词: 氮化铝单层膜; 键能; 德拜温度; 热容量; 非简谐效应; 类石墨烯

中图分类号: O482.2

文献标志码: A

文章编号: 1673-9868(2021)01-0060-07

石墨烯的发现及其研究热潮推动了其他二维层状材料, 尤其是类石墨烯材料成为新材料的研究热点^[1-2]。金属硫族化合物材料(TMDs)^[3]、过渡金属氧化物^[4]和其他二维化合物已成为近年来人们高度关注的材料。氮化铝(aluminium nitrite, AlN)是一种重要的半导体材料, 它的高电导率、低介电常数与易匹配的热膨胀系数等优异性能使它已成为一种极具吸引力的微电子封装材料^[5-6]。实验方面, 2016 年 Turan 等^[7]通过压力烧结方法成功制备了 AlN 陶瓷材料, 该材料可作为优质的储能材料; 同时, Jankowski 等^[8]和 Zeng 等^[9]从实验上成功制备了各种 AlN 纳米级薄膜或者切片, 以及石墨烯与类石墨烯材料组成的复合薄膜。理论方面, 文献[10-11]基于密度泛函理论计算了 Al_nN_{8-n} 类石墨烯化合物相关物性; Darvish 等^[12]利用 vdW-DF 法研究了以石墨烯为基底的 AlN 的 DMMP 吸附; Camacho-Mojica 等^[13]通过密度泛函方法研究了 AlN 薄膜的线缺陷; 文献[14-15]利用了哈里森键联轨道法研究了二维化合物 Al_nN_{8-n} 类石墨烯的弹性和介电性质, 以及 π 键和 σ 键的极性、键能、内聚能和有效原子电荷等。

热容量是一个表征材料热学性能的重要物理量, 在新材料和新电子器件设计中必须考虑热容量随温度的变化规律。Wang 等^[16]详细研究了炭化断路器的热容量, Qiao 等^[17]对纳米液体熔盐同时进行了实验和理论研究, Ordonez-Miranda 等^[18]对 VO_2 的热容量进行了模拟, 等等。虽然目前已对 AlN 单层膜的实验制备、几何结构, 以及电学性能和力学性能进行了研究, 但至今仍未发现对其热容量等热学性能的研究, 更未从微观上讨论键能等微观结构对材料热学性能的定量影响。鉴于键能和德拜温度与热容量密

收稿日期: 2019-01-22

基金项目: 国家自然科学基金项目(11047147); 教育部留学回国人员启动基金项目([2014]1685)。

作者简介: 何勇军, 中学高级教师, 主要从事固体统计理论研究。

切相关, 本研究在考虑到原子的非简谐振动基础上, 应用固体理论和方法, 对类石墨烯 AlN 单层膜的键能和德拜温度进行了研究. 在此基础上重点研究了 AlN 单层膜的热容量, 以期有助于具有稳定热学性能的电子器件的研发.

1 物理模型

本研究采用的计算模型见图 1, 图 1 中黑色原子(Al 原子)和白色原子(N 原子)构成二维六角格子平面系统. 设 Al 原子和 N 原子数均为 n , 最近邻原子间距离为 d , 取任一原子为坐标原点, 平面为 oxy 平面(图 1), z 轴垂直纸面向外.

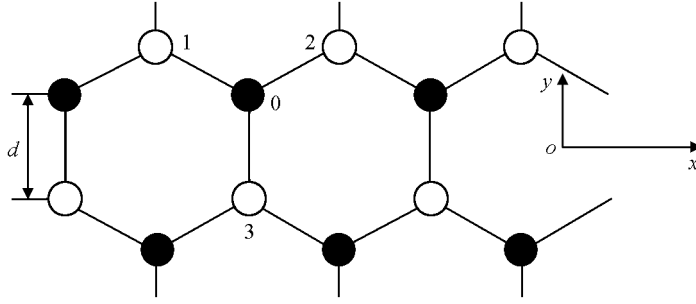


图 1 类石墨烯 AlN 单层膜的结构示意图

平衡状态下 AlN 单层膜中一个原子的平均相互作用能为^[15]

$$\varphi(d) = -\frac{2V_2}{\alpha_c} \left[1 - \frac{2}{3}\alpha_c^2 + 3\alpha_c \frac{C}{V_2} + \frac{2}{9}\alpha_c^4(6\alpha_c^2 - 1) \frac{V_1^2}{V_2^2} \right] - \frac{2V_2^*}{\alpha_c^* \sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3}\alpha_c^{*2} \right) \quad (1)$$

其中: V_1 为金属化能; $C=0.20$ eV, 用来描述短程作用^[15]; V_2 和 V_2^* 分别为 σ 键和 π 键的共价能, $V_2^* = \eta_2 \hbar^2/md^2$, $V_2^* = \eta_{pp\pi} \hbar^2/md^2$, 这城 d 是最近邻原子间距离, \hbar 是普朗克常数, m 是自由电子的质量. 因为 AlN 单层膜为典型的 sp^2 杂化, 所以 $\eta=3.22$, $\eta_{pp\pi}=0.63$ ^[15]. α_c 和 α_c^* 分别是 σ 键和 π 键的共价参量, 定义为:

$$\alpha_c^* = \frac{V_2^*}{\sqrt{V_2^{*2} + V_3^{*2}}} \quad \alpha_c = \frac{V_2}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \quad (2)$$

另外, σ 键和 π 键的极性参量定义为:

$$\alpha_p = \frac{V_3}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \quad \frac{V_3^*}{\sqrt{V_2^{*2} + V_3^{*2}}} \quad (3)$$

其中: V_3 和 V_3^* 分别为 σ 键和 π 键的极化能.

$T=0$ K 时各原子静止在平衡位置, 键长为 d_0 . 任意温度下, 键长为 d , 对平衡位置的位移为 $\delta=d-d_0$. 因热运动, 原子在平衡位置沿键长方向作非简谐振动. 将相互作用势展开为级数, 则 $\varphi(\delta)=\varphi(0)+\frac{1}{2}\epsilon_0\delta^2+\epsilon_1\delta^3+\epsilon_2\delta^3+\dots$. 第 2 项为简谐项, 第 3 项后各项分别称为第 1、第 2、……非简谐项, $\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2, \dots$ 分别称为简谐系数和第 1、第 2、……非简谐系数, 由(1)式可得:

$$\epsilon_0 = \frac{4}{d^2}\alpha_c V_2 \left\{ 1 - 2\alpha_p^2 + \frac{54C}{\alpha_c V_2} - \frac{10}{3}\alpha_c^2(1 - 6\alpha_c^2\alpha_p^2 - \frac{3}{5}\alpha_p^2) \frac{V_1^2}{V_2^2} \right\} + \frac{1}{d^2\sqrt{3}}\alpha_c V_2(1 - 2\alpha_p^2) \quad (4)$$

$$\epsilon_1 = -\frac{4\alpha_c V_2}{d^3} \left\{ \left[1 - \frac{1}{3}\alpha_c^2 - 2\alpha_c\alpha_p \left(\frac{V_3}{V_2} \right) + 2\alpha_c^3\alpha_p \left(\frac{V_3}{V_2} \right) \right] + \frac{18C}{\alpha_c V_2} + \left(-\frac{10}{3}\alpha_c + 2\alpha_c\alpha_p^2 + \frac{10}{3}\alpha_c^3 + 30\alpha_c^3\alpha_p \right) \frac{V_1^2}{V_2 \sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \right\} \quad (5)$$

$$\epsilon_2 = -\frac{\alpha_c V_2}{d^4} \left\{ \left(-7 - \frac{17\alpha_c^2}{3} + 6\alpha_c^4 \right) + (-14\alpha_c + 34\alpha_c^3 - 20\alpha_c^5) \alpha_p \left(\frac{V_3}{V_2} \right) - \frac{54C}{\alpha_c V_2} + \left(-\frac{70}{3}\alpha_c + \frac{170}{3}\alpha_c^3 + \alpha_c \alpha_p - \frac{100}{3}\alpha_c^5 + 310\alpha_c^3 \alpha_p^2 - 420\alpha_c^5 \alpha_p^2 \right) \frac{V_1^2}{V_2 \sqrt{V_3^2 + V_2^2}} \right\} \quad (6)$$

一般情况下 $d(T) = d_0 + \bar{\delta}(T)$, 其中原子平均位移 $\bar{\delta}(T)$ 和线膨胀系数 $\alpha_l = (1/d_0)(d\bar{\delta}/dT)$ 分别为^[19-20]:

$$\bar{\delta}(T) = -\frac{3\epsilon_1 k_B T}{\epsilon_0^2} \left[1 + \frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} + \left(\frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} \right)^2 \right] \quad (7)$$

$$\alpha_l = -\frac{3\epsilon_1 k_B}{a_0 \epsilon_0^2} \left[1 + \frac{6\epsilon_2 k_B}{\epsilon_0^2} T + \frac{27\epsilon_2^2 k_B^2}{\epsilon_0^2} T^2 \right] \quad (8)$$

$T=0$ K 时, σ 键和 π 键的共价能、极性参量和共价参量中原子间距均取 d_0 . 非零温情况下, 因原子非简谐振动, 键长变为

$$d(T) = d_0(1 + \alpha_l T) \quad (9)$$

使得 σ 键和 π 键的共价能变为

$$V_2(T) = \frac{\eta_2 \hbar^2}{md_0^2(1 + \alpha_l T)^2} \quad V_2^*(T) = \frac{\eta_{pp\pi} \hbar^2}{md_0^2(1 + \alpha_l T)^2} \quad (10)$$

将(10)式代入(3)式可求出极性参量和共价参量随温度的变化关系, 从而由(1)式可得到类石墨烯的键能随温度的变化为

$$\varphi(T) = -\frac{2V_2(T)}{\alpha_c(T)} \left[1 - \frac{2}{3}\alpha_c^2(T) + 3\alpha_c(T) \frac{C}{V_2(T)} + \frac{2}{9}\alpha_c^4(T)(6\alpha_c^2(T) - 1) \frac{V_1^2}{V_2^2(T)} \right] - \frac{2V_2^*(T)}{\alpha_c^*(T)\sqrt{3}} \left(1 - \frac{2}{3}\alpha_c^{*2}(T) \right) \quad (11)$$

德拜温度是二维材料热学性质的一个重要特征量. 文献[21]给出简谐近似下二维六角结构的德拜温度 θ_{D0} 与简谐系数 ϵ_0 的关系为

$$k_B \theta_{D0} = \hbar \sqrt{\frac{8\epsilon_0}{3M}} \quad (12)$$

其中: \bar{M} 为折合原子量, $\bar{M}^{-1} = M_{Al}^{-1} + M_N^{-1}$, M_{Al} 和 M_N 分别为 Al 和 N 的原子量. (12)式中未考虑非简谐效应的影响, 因而不能反映德拜温度的实际变化规律. 利用振动频率 ω 与温度的关系式, 可得到德拜温度 θ_D 与温度 T 的关系为^[19]

$$\theta_D = \theta_{D0} \left[1 + \left(\frac{15\epsilon_1^2}{2\epsilon_0^3} - \frac{2\epsilon_2}{\epsilon_0^2} \right) k_B T \right] \quad (13)$$

按照晶格热容的德拜理论, 对由 N 个原胞组成的二维晶格, 定容热容量为^[20]

$$C_V = 4Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^x x^2}{(e^x - 1)^2} dx \quad (14)$$

而定容比热为

$$c_v = \frac{4R}{\mu} \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^2 \int_0^{\theta_D/T} \frac{e^x x^2}{(e^x - 1)^2} dx \quad (15)$$

式中: μ 为折合摩尔质量, $\mu^{-1} = \mu_{Al}^{-1} + \mu_N^{-1}$, μ_{Al} 和 μ_N 分别是 Al 和 N 的摩尔质量.

2 结果与讨论

文献[15]给出了 AlN 单层膜 $T=0$ K 时的几个参数, 分别为 $d_0 = 1.78 \times 10^{-10}$ m, $V_1 = 3.15$ eV, $V_2 = 7.84$ eV, $V_3 = 1.52$ eV, $V_2^* = 5.30$ eV 和 $V_3^* = 0.98$ eV. 相应地, 可算出 $T=0$ K 时的极性参量 $\alpha_p = 0.56$

和共价参量 $\alpha_c = 0.83$. 将这些数据以及 $C = 0.20 \text{ eV}$ 代入(5)、(6)、(7)式, 可求得 AlN 单层膜原子振动的几个参数: $\epsilon_0 = 0.507 \times 10^2 \text{ J/m}^2$, $\epsilon_1 = -0.947 \times 10^{12} \text{ J/m}^3$ 和 $\epsilon_2 = -0.225 \times 10^{22} \text{ J/m}^4$. 将这些数据代入(10)式, 可得到 AlN 单层膜 σ 键和 π 键的共价能随温度的变化(图 2), 图 2 中虚线、实线和点线分别对应只考虑简谐近似、计及第 1 非简谐项、计及第 2 非简谐项的结果.

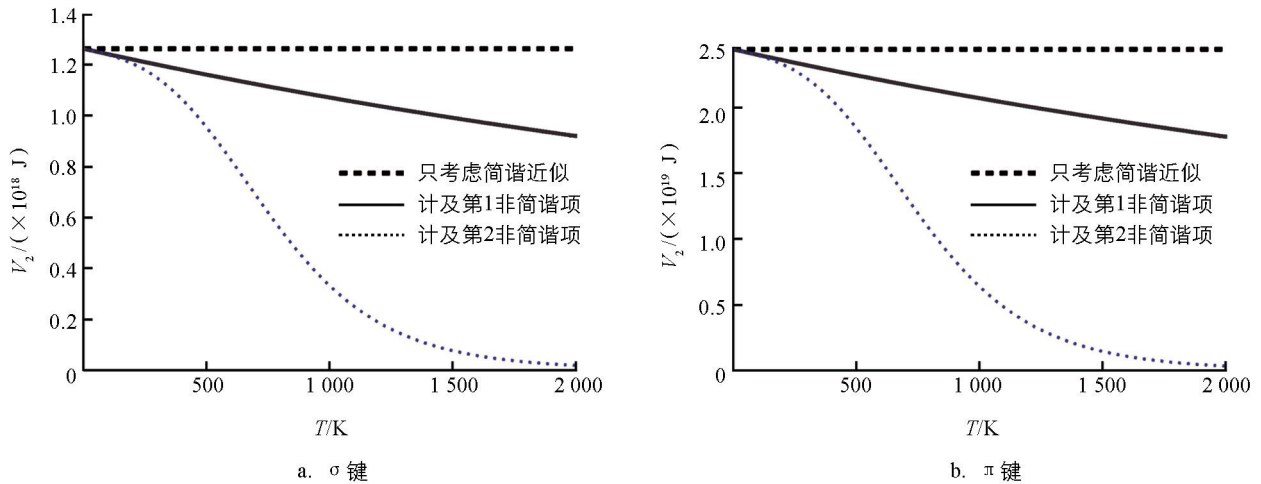


图 2 AlN 单层膜 σ 键的共价能 V_2 和 π 键的共价能随温度的变化

由图 2 看出, 如果只考虑到简谐项, AlN 单层膜 σ 键和 π 键的共价能均与温度无关; 考虑到第 1 非简谐项, 它们随温度升高而线性减小; 考虑到第 2 非简谐项, 它们随温度升高非线性减小. 在 $500 \sim 1\,500 \text{ K}$ 的温度范围变化较快, 表明温度愈高, 非简谐效应愈显著. 超过 $1\,500 \text{ K}$, 变化逐步趋缓, 最终平稳.

将上述数据代入(3)式, 可得到 AlN 单层膜 σ 键的共价参量和极性参量随温度的变化(图 3), 图 3 中虚线、实线和点线分别对应只考虑简谐近似、计及第 1 非简谐项、计及第 2 非简谐项的结果.

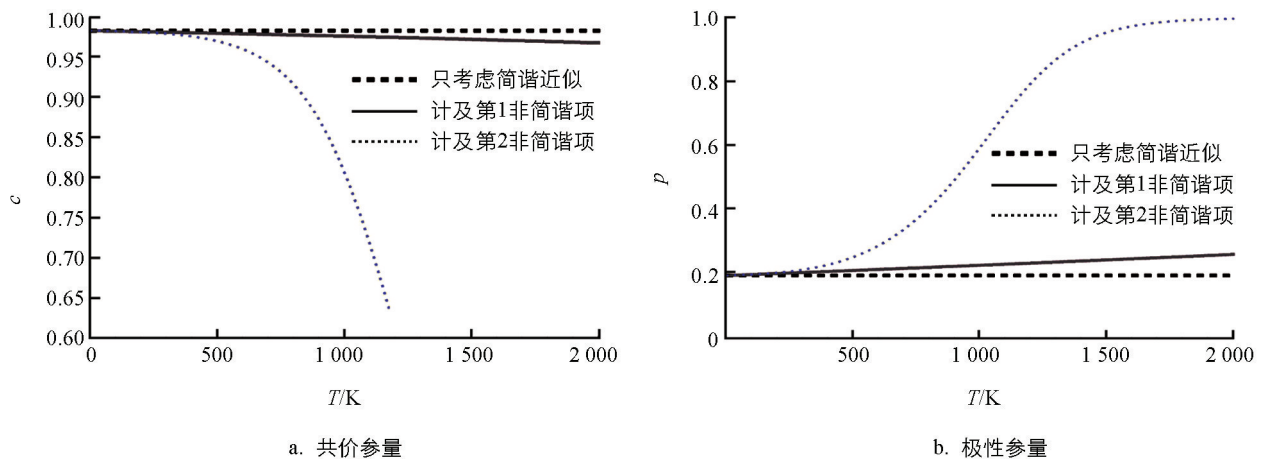


图 3 AlN 单层膜共价参量和极性参量随温度的变化

由图 3 看出, 简谐近似下, σ 键的共价参量和极性参量均不变; 只计及第 1 非简谐项时, 共价参量随温度升高而线性地缓慢变化; 计及第 2 非简谐项时, 共价参量随温度升高非线性减小. 相反地, 极性参量随温度升高而非线性增大. 在 400 K 以下, 共价参量变化极小, 几乎保持为 0.982 , 导致极性参量变化也极小, 几乎保持为 0.189 . 在 $400 \sim 1\,500 \text{ K}$ 的温度范围变化较快, 温度愈高, 非简谐效应愈显著. 高于 $1\,500 \text{ K}$ 后逐步趋于稳定, $T = 2\,000 \text{ K}$ 时共价参量约为 0 , 从而使得极性参量接近于稳定值 1 .

由(11)式, 可得到 AlN 单层膜的键能随温度的变化(图 4), 图 4 中虚线、实线和点线分别对应只考虑简谐近似、计及第 1 非简谐项、计及第 2 非简谐项的结果.

由图 4 看出, 如果只考虑到简谐项, AlN 单层膜 σ 键的键能与温度无关, 保持为 $-1.800 \times 10^{-18} \text{ J}$;

考虑到第 1 非简谐项后,键能随温度升高而线性地缓慢增加;考虑到第 2 非简谐项,在极低温下(低于 150 K),键能随温度的变化与只考虑到第 1 非简谐项相近,表明极低温下第 2 非简谐效应的影响较小.高于 150 K 后,键能随温度升高非线性增大,且温度愈高,变化越大,表明非简谐效应愈显著.

将 Al 和 N 的原子量 27 和 14 个原子量单位与 $\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2$ 代入(13)式,可得到 AlN 单层膜的德拜温度随温度的变化(图 5),图 5 中虚线、实线和点线分别对应只考虑简谐近似、计及第 1 非简谐项、计及第 2 非简谐项的结果.

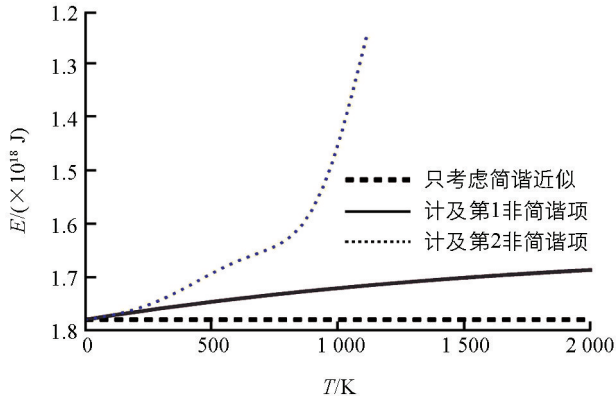


图 4 AlN 单层膜 σ 键的键能随温度的变化

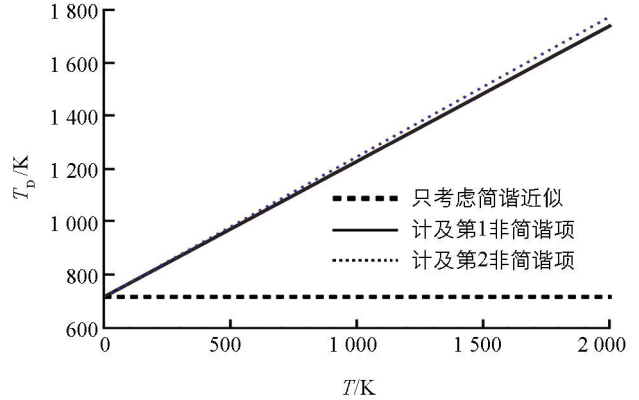


图 5 AlN 单层膜的德拜温度随温度的变化

由图 5 看出,简谐近似下,AlN 单层膜的德拜温度与温度无关,始终为 716.887 K. 考虑到第 1 和第 2 非简谐项后,德拜温度均随温度升高而线性增大,表明温度愈高,非简谐效应愈显著.另外,此两种情况下的德拜温度差 $\Delta\theta_D = \theta_{D2} - \theta_{D1}$ 随着温度升高而增大.例如, T 为 0, 500, 1 000, 1 500, 2 000 K 时, $\Delta\theta_D$ 分别为 0.000, 8.660, 17.319, 25.978, 34.638 K, 表明第 2 非简谐效应对德拜温度的影响略大于第 1 非简谐效应,且温度越高,第 2 非简谐效应的影响越明显.实际上,德拜温度是反映材料中原子间结合力的一个重要物理量,德拜温度和原子振动频率上限成正比.一般地,德拜温度越高,原子间作用力越大,杨氏模量越大,振动频率越高.对 AlN 单层膜,温度越高,原子振动越强,因此振动频率越大,原子振动时偏离平衡位置的位移越大,使得非简谐效应随温度的升高越来越明显,从而导致了德拜温度随温度的变化逐步增大.因此,考虑第 1 和第 2 非简谐效应对应的德拜温差也随温度的升高而变大.

由(15)式可得到 AlN 单层膜定容比热随温度的变化(图 6),图 6 中虚线、实线和点线分别对应只考虑简谐近似、计及第 1 非简谐项、计及第 2 非简谐项的结果.

由图 6 可看出,只考虑简谐效应时 AlN 单层膜的定容比热随温度的升高非线性地增大.一般地,定容热容量在温度较高时会趋于稳定,即随温度的变化逐步趋缓.因此,只考虑简谐效应,计算值与实际相差较大.当考虑到非简谐项后,AlN 单层膜的定容比热在低温下与只考虑简谐效应时较为接近,但当温度高于 200 K 后,非简谐效应与简谐近似对应的定容比热的差 $\Delta c_v = c_{v0} - c_v$ 随温度升高而增大,即非简谐效应愈显著.尤其是,温度比较高时,非简谐效应对应的定容比热随温度的变化趋缓,逐步接近稳定,与实际比较相符.例如, $T = 1 000$ K 时,考虑非简谐效应后定容比热约为 99.93 J/K,与第一性原理计算的三维 AlN 的定容比热以及实验值极为接近^[22-23],而非简谐效应近似对应的高达 260.55 J/K 则相差极大.另外,考虑到第 2 非简谐项对应的值

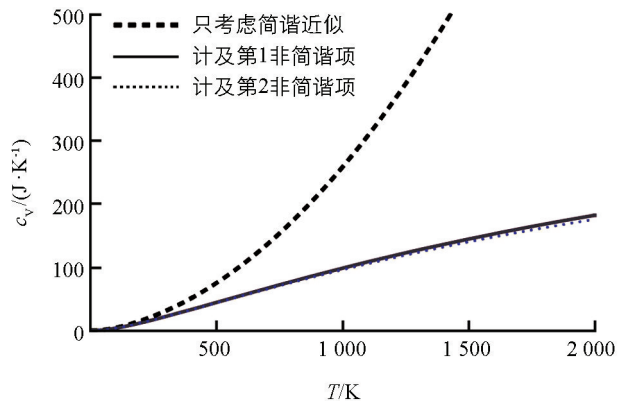


图 6 AlN 单层膜定容比热随温度的变化

总是略低于只考虑第 1 非简谐项. 表明二阶非简谐效应对定容比热有一定影响.

3 结 论

基于上述研究可知, ① 研究相关热学参量时应考虑非简谐效应, 温度越高, 非简谐效应的影响越明显, 第 2 非简谐效应的影响越显著. ② AlN 单层膜的 σ 键和 π 键的共价能、共价参量和极性参量均随温度呈非线性变化, 在 500~1 500 K 的温度范围变化较快, 高于 1 500 K, 变化逐步变缓, 最终平稳. ③ 在极低温度下, 键能随温度升高而线性地增大, 高于 150 K 后, 键能随温度升高而非线性地增大, 且温度愈高, 非简谐效应愈显著. ④ 德拜温度随温度升高而线性地增大. ⑤ 温度不太高时, 定容比热随温度升高而线性地增大, 温度较高时, 定容比热随温度的升高逐步变缓.

参考文献:

- [1] 龙怡希, 任晓霞, 张皓. ZnS 类石墨烯热膨胀系数、弹性模量以及有效电荷变化规律研究 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2019, 44(9): 21-26.
- [2] 申凤娟, 郑瑞伦. 非简谐振动和吸附对金属基外延石墨烯吸附系统电导率的影响 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2019, 41(11): 64-72.
- [3] RAMAKRISHNA MATTE H, GOMATHI A, MANNA A, et al. MoS₂ and WS₂ Analogues of Graphene [J]. *Angewandte Chemie International Edition*, 2010, 49(24): 4059-4062.
- [4] LI D, KANER R B. MATERIALS SCIENCE: Graphene-Based Materials [J]. *Science*, 2008, 320(5880): 1170-1171.
- [5] YUN C, FENG Y B, QIU T, et al. Mechanical, Electrical, and Thermal Properties of Graphene Nanosheet/aluminum Nitride Composites [J]. *Ceramics International*, 2015, 41(7): 8643-8649.
- [6] TUMMALA R R. Ceramic and Glass-Ceramic Packaging in the 1990s [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 1991, 74(5): 895-908.
- [7] TURAN S, CINAR A, KAYA P. Microstructure-Thermal Conductivity Relationship in Pressureless Sintered AlN Ceramics for Energy Applications [C] //European Microscopy Congress 2016: Proceedings. Weinheim Germany: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co KGaA, 2016: 924-925.
- [8] JANKOWSKI K, RUTKOWSKI P, KATA D, et al. Microstructural Analysis of Aluminum Nitride-GPLS Composites [J]. *Ceramics International*, 2016, 42(7): 9025-9031.
- [9] ZENG Q, CHEN Z L, ZHAO Y, et al. Graphene-assisted Growth of High-quality AlN by Metalorganic Chemical Vapor Deposition [J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2016, 55(8): 085501-1-085501-5.
- [10] GEIM A K, GRIGORIEVA I V. Van Der Waals Heterostructures [J]. *Nature*, 2013, 499(7459): 419-425.
- [11] SINGH A K, ZHUANG H L, HENNIG R G. Ab Initio Synthesis of Single-layer III-V Materials [J]. *Physical Review B*, 2014, 89(24): 245431-1-245431-10.
- [12] DARVISH G M, DALIRANDEH Z, KHOSRAVI A, et al. Aluminum Nitride Graphene for DMMP Nerve Agent Adsorption and Detection [J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2014, 145(1-2): 260-267.
- [13] CAMACHO-MOJICA D C, LÓPEZ-URÍAS F. Extended Line Defects in BN, GaN, and AlN Semiconductor Materials: Graphene-like Structures [J]. *Chemical Physics Letters*, 2016, 652: 73-78.
- [14] DAVYDOV S Y. On the Specific Features of the Density of States of Epitaxial Graphene Formed on Metal and Semiconductor Substrates [J]. *Semiconductors*, 2013, 47(1): 95-104.
- [15] DAVYDOV S YU. Вклад π -связей в эффективные заряды, энергию когезии и силовые константы графеноподобных соединений [J]. *Физика твердого тела*, 2016, 58(2): 392-399.
- [16] WANG X M, ZHANG L S, YANG C, et al. Estimation of Temperature-dependent Thermal Conductivity and Specific Heat Capacity for Charring Ablators [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 129: 894-902.
- [17] QIAO G, LASFARGUES M, ALEXIADIS A, et al. Simulation and Experimental Study of the Specific Heat Capacity of Molten Salt Based Nanofluids [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 111: 1517-1522.

- [18] ORDONEZ-MIRANDA J, EZZAHRI Y, JOULAIN K, et al. Modeling of the Electrical Conductivity, Thermal Conductivity, and Specific Heat Capacity of VO_2 [J]. *Physical Review B*, 2018, 98(7): 075144.
- [19] 郑瑞伦, 胡先权. 固体理论及其应用 [M]. 重庆: 西南师范大学出版社, 1996: 267-271.
- [20] 郑瑞伦, 胡先权. 面心立方晶格的非简谐效应 [J]. *大学物理*, 1994, 13(5): 15-18.
- [21] DAVYDOV S Y. Estimating Anharmonic Characteristics of Single-sheet Graphene at High Temperatures [J]. *Technical Physics Letters*, 2011, 37(12): 1161-1164.
- [22] 阴知见, 邵天骄, 温 斌. 氮化铝热膨胀系数及高温弹性系数的第一性原理研究 [J]. *燕山大学学报*, 2013, 37(1): 27-33.
- [23] 郭连权, 张智勇, 刘嘉慧. AlN 晶体声子谱及其热学性能的第一原理计算 [J]. *沈阳工业大学学报*, 2013, 35(6): 630-634.

Temperature Dependence of Debye Temperature and Heat Capacity of Graphene-Like AlN Monolayers

HE Yong-jun¹, ZHOU Ting-yan², MA Chao-ke³

1. *Chongqing No. 1 Middle School, Chongqing 401329, China;*

2. *College of Science, Chongqing University of Posts and Telecommunications, Chongqing 400065, China;*

3. *School of Physical Science and Technology, Southwest University, Chongqing 400715, China*

Abstract: The AlN (aluminium nitrite) monolayer is a new research hotspot of two-dimensional materials. Taking the anharmonic oscillation of atoms into full consideration, the authors of this paper study the variations of bond energy, Debye temperature and heat capacity with temperature. The results show that the non-harmonic effect should be considered if thermal parameters are studied. The non-harmonic effect becomes increasingly obvious with increasing temperature. The covalent energy, covalent parameters and polarity parameters of AlN monolayers vary nonlinearly with temperature. They change rapidly in the temperature range of 500—1 500 K, and with a temperature of $>1\ 500$ K they change gradually slower, and finally become almost constant. At very low temperature, the bond energy increases linearly with the temperature. With a temperature of >150 K, the bond energy increases nonlinearly with the temperature, and the higher is the temperature, the more obvious the non-harmonic effect will be. The Debye temperature increases linearly with the temperature. When the temperature is not too high, the specific heat capacity increases linearly with the temperature. If the temperature is fairly high, the specific heat capacity varies gradually with the temperature.

Key words: aluminium nitrite monolayer; bond energy; Debye temperature; heat capacity; anharmonic effect; graphene-like