

单层 AlN 类石墨烯材料热力学性质 随温度的变化研究^①

何勇军¹, 周庭燕², 马朝科³

1. 重庆市第一中学校, 重庆 400030; 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: 考虑原子振动的非简谐效应, 搭建了固体物理模型, 研究了氧化铝(AlN)类石墨烯材料的热膨胀系数、格林乃森参量和弹性模量等热力学性质随温度的变化规律. 结果表明: ①简谐近似下, AlN 类石墨烯材料不发生热膨胀, 它的线膨胀系数为零, 格林乃森参量和弹性模量均为常量, 这些结果与实际不符, 因此必须考虑非简谐效应; ②考虑非简谐效应后, AlN 类石墨烯材料的格林乃森参量、线膨胀系数和弹性模量均随温度的升高而非线性增大, 变化范围分别为: $0.547 \sim 0.630$, $8.57 \times 10^{-5} \sim 3.60 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ 和 $58.54 \sim 500.00 \text{ N/m}$, 且温度愈高, 非简谐效应愈显著; ③AlN 类石墨烯材料的线膨胀系数和弹性模量在数值上虽与 AlN 块状晶体不同, 但它们随温度的变化规律相似.

关键词: AlN 类石墨烯材料; 线热膨胀系数; 格林乃森参量; 弹性模量; 非简谐效应

中图分类号: O469

文献标志码: A

文章编号: 1000-5471(2020)05-0058-06

石墨烯是构建其他维数碳材料如零维富勒烯、一维碳纳米管和三维石墨的基本单元^[1], 它具有高表面积比、高杨氏弹性模量和导热导电性好等很多非常优异的物理特性, 因而在自旋电子学、催化剂、生化传感器、大容量电容器和 DNA 测序等很多领域中的应用前景十分广阔^[2-4]. 但是, 石墨烯的零带隙和较小的开关比^[5], 不利于大规模集成电路的制作, 从而限制了石墨烯在电子器件中的应用. 因此, 探寻与石墨烯结构相似, 既能发挥石墨烯优点又能克服其缺点的类石墨烯等其他二维层状材料, 就成为当前材料研究的热点之一. 例如, 金属硫族化合物材料(TMDs)^[6-7]、过渡金属氧化物^[5]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(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成为一种极具吸引力的微电子封装材料^[8]. 2016 年, Turan S 等^[9]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. 由于它的非零隙特征使得人们对类石墨烯结构的 AlN 极为重视. 文献[10-12]基于密度泛函理论计算了 IV-IV 和 III-V 结构 ANB8-N 类石墨烯化合物, 结果表明这些类石墨烯化合物具有稳定的能量和结构. Ganji M D 等^[13]利用 vdW-DF 法研究了以石墨烯为基底的 AlN 的 DMMP 吸附, Camacho-Mojica D C 等^[14]通过密度泛函方法研究了 AlN 薄膜的线缺陷. 在实验方面, 已成功制备了各种 AlN 纳米级薄膜或者切片, 以及石墨烯与类石墨烯薄膜组成的复合薄膜, 并对相应热导率等性能进行了系统研究^[15-17]. 另外, 文献[18-19]利用哈里森键联轨道法研究了二维化合物 ANB8-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. 但是, 这些研究未考虑到原子振动的非简谐效应, 因而不能反映这些物理量随温度的变化规律, 而且未对 AlN 类石墨烯材料的热膨胀

① 收稿日期: 2018-10-15

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(1973—), 男, 中学高级教师, 主要是从事固体统计理论研究.

系数、弹性模量等极为重要的热力学量进行研究. 实际上, 非简谐振动无论对三维、二维甚至一维材料的热力学性质都有极为重要的影响, 因此近年来非简谐效应的研究已成为新材料研究的热点之一. 例如, 明庭尧等^[20-21]对石墨烯的非简谐效应及其热学、电学性能进行了研究; Ribeiro G A S 等^[22]基于第一性原理方法详细研究了 PbTe 和 SnTe 的非简谐效应及其对声子谱的影响. Kringhøj A 等^[23]从实验上对 Josephson 隧道结的非简谐效应进行了系统研究. 然而, 到目前为止, 还未发现对 AlN 类石墨烯材料的热力学性能进行研究. 因此, 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 AlN 类石墨烯材料的热膨胀系数、格林乃森参量和弹性模量等重要热力学量进行深入研究, 以期有助于研发具有稳定性能的电子器件.

1 物理模型和原子相互作用能

本文主要研究单层 AlN 类石墨烯材料的热力学性质. 单层 AlN 类石墨烯材料的结构见图 1, 图 1 中黑色原子(A 原子)和白色原子(B 原子)构成的二维六角格子平面系统. 设 A 原子数和 B 原子数均为 N , 最近邻原子间距离为 d (称点阵常数), 取任一原子为坐标系原点, x 方向向右, y 方向竖直向上, z 方向垂直纸面向外.

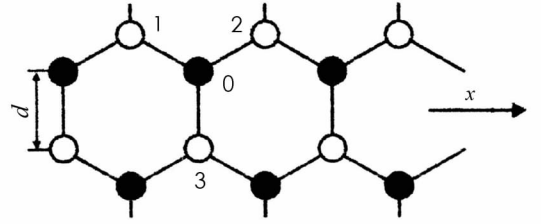


图 1 AlN 类石墨烯材料的结构示意图

图 1 中 AlN 类石墨烯材料的化学键与石墨烯相似, 即面内为 3 个 sp^2 杂化轨道形成的 σ 键, 每个 σ 键中填充 2 个电子, 分别由 Al 和 N 原子提供, 导致每个原子近邻分布 3 个异族原子; 垂直方向上是相邻原子的 p_z 轨道杂化形成 π 键, 该化学键的电子来自 N 原子提供的孤对电子. 原子的相互作用能包括: 金属化能、共价能、极化能. 其中, σ 键的金属化能为 $V_1 = \sqrt{\frac{1}{2}[(V_1^A)^2 + (V_1^B)^2]}$, 式中 $V_1^A = \frac{1}{3}(\epsilon_p^A - \epsilon_s^A)$, $V_1^B = \frac{1}{3}(\epsilon_p^B - \epsilon_s^B)$. 这里 ϵ_h^A 和 ϵ_h^B 分别是 A 和 B 原子的杂化轨道能, 由它们的杂化情况决定. 对 sp^2 杂化情况, 杂化能 $\epsilon_h^k = (\epsilon_s + k\epsilon_p)/(k+1)$, 这里的 ϵ_s 和 ϵ_p 分别是 s 和 p 轨道的能量. σ 键的共价能为 $V_2 = \eta_2 \hbar^2 / md^2$, d 是原子间距离, $\hbar$ 是普朗克常数, m 是自由电子质量. 对 sp^2 杂化, $\eta_2 = 3.26^{[20]}$. σ 键的极化能 $V_3 = |\epsilon_h^A - \epsilon_h^B|/2$. 而 π 键的共价能为 $\bar{V}_2 = \eta_{pp\pi}(\hbar^2 / md^2)$, $\eta_{pp\pi} = 0.63$; 极化能为 $\bar{V}_3 = |\epsilon_p^A - \epsilon_p^B|/2$.

为简化, 引入极性参量 α_p 和 α_p^* , 和共价参量 α_c 和 α_c^* , 定义为: 对 σ 键

$$\alpha_c = \frac{V_2}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \quad (1)$$

$$\alpha_p = \frac{V_3}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}}$$

对 π 键

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

$$\alpha_p^* = V_3^* / (V_2^{*2} + V_3^{*2})$$

此外, 还有短程相互作用能和交换能, 其中短程相互作用能 ΔE_{rep} 与键长 d 的关系为: $\Delta E_{rep} = C(a_0/d)^{12}$, 这里 a_0 是玻尔半径, 而 $C = 0.20$ eV. 交换能为 $2S(V_2 + V_2^*/\sqrt{3})$, S 为交换积分参量. 考虑到短程相互作用后, 可将相互作用能 φ 随原子间距离 d 的变化写为^[6]

$$\varphi(d) = -2R - \frac{2}{\sqrt{3}}R' - \frac{4}{3}\alpha_c^3 \frac{V_1^2}{V_2} + 2S\left(V_2 + \frac{V_2^*}{\sqrt{3}}\right) + \Delta E_{rep} \quad (3)$$

式中: $R = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$, $R' = \sqrt{V_2^2 + V_3^2}$; 第 1, 2 项分别是 σ 键和 π 键的贡献; 第 3 项是极化的贡献; 第 4 项是交换能; 第 5 项是短程相互作用的贡献.

利用平衡态下能量极小的条件, 求出交换积分参量 S , 最后得到平衡态下一个原子的平均相互作用能为^[19]

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

2 AIN 类石墨烯材料热力学量随温度的变化

2.1 AIN 类石墨烯材料原子振动的简谐系数和非简谐系数

类石墨烯的原子会在沿键长方向作非简谐振动, 简谐系数 ϵ_0 、第 1, 2 阶非简谐振动系数分别为 ϵ_1 和 ϵ_2 , 它们与原子相互作用能关系为

$$\epsilon_0 = \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial d^2} \right)_{d_0} \quad \epsilon_1 = \frac{1}{6} \left(\frac{\partial^3 \varphi}{\partial d^3} \right)_{d_0} \quad \epsilon_2 = \frac{1}{24} \left(\frac{\partial^4 \varphi}{\partial d^4} \right)_{d_0} \quad (5)$$

将(3)式代入(4)式, 考虑到 π 键的贡献很小, 由(5)式求得:

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

$$\epsilon_1 = -\frac{4\alpha_c V_2}{d^3} \left\{ \left[1 - \frac{1}{3} \alpha_c^2 - 2\alpha_c \alpha_p \left(\frac{V_3}{V_2} \right) + 2\alpha_c^3 \alpha_p \left(\frac{V_3}{V_2} \right) \right] + \frac{18C}{\alpha_c V_2} + \left(-\frac{10}{3} \alpha_c + 2\alpha_c \alpha_p^2 + \frac{10}{3} \alpha_c^3 + 30\alpha_c^3 \alpha_p \right) \frac{V_1^2}{V_2 \sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \right\} \quad (7)$$

$$\epsilon_2 = -\frac{\alpha_c V_2}{d^4} \left\{ \left(-7 - \frac{17\alpha_c^2}{3} + 6\alpha_c^4 \right) + (-14\alpha_c + 34\alpha_c^3 - 20\alpha_c^5) \alpha_p \left(\frac{V_3}{V_2} \right) - \frac{54C}{\alpha_c V_2} + \left(-\frac{70}{3} \alpha_c + \frac{170}{3} \alpha_c^3 + \alpha_c \alpha_p - \frac{100}{3} \alpha_c^5 + 310\alpha_c^3 \alpha_p^2 - 420\alpha_c^5 \alpha_p^2 \right) \frac{V_1^2}{V_2 \sqrt{V_3^2 + V_2^2}} \right\} \quad (8)$$

2.2 AIN 类石墨烯材料的格林乃森参量和热膨胀系数随温度的变化

晶体中的原子各自在平衡位置作非简谐振动, 由于原子间相互作用势随原子间的距离而变化, 而振动频率 ω 取决于原子的质量和原子间相互作用势, 因而振动频率 ω 不为常量, 而与原子间的距离有关, 即与晶体的尺寸如体积 V (三维)、面积 S (二维) 和长度 L (一维) 有关. ω 随尺寸的变化程度反映了非简谐效应的大小, 可通过格林乃森参量 (γ_G) 来描述. AIN 类石墨烯材料为二维晶体, 定义 $\gamma_G = -\frac{\partial \ln \omega}{\partial \ln S}$, 它与温度 T 和简谐系数 ϵ_0 、第一、二阶非简谐系数 ϵ_1 和 ϵ_2 的关系为^[8]:

$$\gamma_G(T) = -\frac{\epsilon_1 r_0}{6\epsilon_0} \left\{ 1 - \frac{3\epsilon_1 k_B T}{r_0 \epsilon_0^2} \left[1 + \frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} + \left(\frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} \right)^2 \right] \right\} \quad (9)$$

式中: r_0 为平衡时原子间的距离, k_B 为玻尔兹曼常数. (9) 式表明, 简谐近似时, 即 $\epsilon_1 = 0$, $\epsilon_2 = 0$, 格林乃森参量为零. 非简谐情况下 γ_G 与温度有关. 温度越高, γ_G 值越大, 即非简谐效应越显著.

在非零温时, 原子作非简谐振动使最近邻原子间距离由 d_0 变为 $d(T) = d_0 + \bar{\delta}(T)$, 其中的原子平均位移 $\bar{\delta}(T)$ 由统计物理求得^[24]

$$\bar{\delta}(T) = -\frac{3\epsilon_1 k_B T}{\epsilon_0^2} \left[1 + \frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} + \left(\frac{3\epsilon_2 k_B T}{\epsilon_0^2} \right)^2 \right] \quad (10)$$

结合线膨胀系数 $\alpha_l = (1/d_0)(d\bar{\delta}/dT)$, 可求得

$$\alpha_l = -\frac{3\epsilon_1 k_B}{d_0 \epsilon_0^2} \left[1 + \frac{6\epsilon_2 k_B}{\epsilon_0^2} T + \frac{27\epsilon_2^2 k_B^2}{\epsilon_0^2} T^2 \right] \quad (11)$$

2.3 AIN 类石墨烯材料的弹性模量随温度的变化

考虑到原子非简谐振动后, 最近邻原子间距离为

$$d(T) = d_0(1 + \alpha_l T) \quad (12)$$

压缩系数 K_T 为弹性模量 B 的倒数, 文献[19]给出石墨烯的弹性模量 B 与原子间距离和原胞面积 $\Omega = (\sqrt{3}/2)d_0^2$ 的关系为 $B = \epsilon_0 d^2 / \Omega$. 将(11)式代入(12)式, 再代入 B , 可得到弹性模量随温度的变化为

$$B(T) = \frac{2\epsilon_0}{\sqrt{3}} [(1 + \alpha_l T)]^2 \quad (13)$$

3 计算结果与讨论

文献[19] 给出了 AlN 类石墨烯的 V_1 、 σ 键的共价能 V_2 、 σ 键的极化能 V_3 、 π 键的共价能 V_2^* 、 π 键的极化能 V_3^* 和最近邻原子间距离 d_0 等有关数据(表 1), 由此算出的极性参量 α_p 和共价参量 α_c 也列于表 1 中.

表 1 AlN 类石墨烯的有关参量

d_0/nm	V_1/eV	V_2/eV	V_3/eV	V_2^*/eV	V_3^*/eV	α_c	α_p
1.78	3.15	7.84	1.52	5.30	0.98	0.83	0.56

将表 1 的数据以及 $C = 0.20 \text{ eV}$, 代入(6)、(7)、(8) 式, 可求得 $\epsilon_0 = 0.507 \times 10^2 \text{ J/m}^2$, $\epsilon_1 = -0.947 \times 10^{12} \text{ J/m}^3$, $\epsilon_2 = -0.225 \times 10^{22} \text{ J/m}^4$. 将表 1 的数据和得到的 ϵ_0, ϵ_1 和 ϵ_2 代入(9) 式, 可得到 AlN 类石墨烯材料的格林乃森参量随温度的变化(图 2), 图 2 中虚线、点线和实线分别表示只考虑简谐近似, 考虑简谐项和第一非简谐项和同时考虑简谐项与第一、二非简谐项的结果.

由图 2 看出, 简谐近似下, 格林乃森参量几乎不变, 为 0.554; 考虑到非简谐项后, 格林乃森参量随温度的升高而增大, 在 0.554 ~ 0.650 间变化; 同时考虑第一、二非简谐项后, 温度不太高时, 格律乃森参量与只考虑第一非简谐项时相差很小, 即第二非简谐项对格林乃森参量的影响很小, 几乎可以忽略; 但是, 当温度较高时(例如高于 1 000 K), 影响比较明显, 且随温度的增加, 影响逐步增加; 考虑到非简谐项后的格林乃森参量与简谐近似的差 $\Delta\gamma_G = \gamma_G - \gamma_{G0}$ 随着温度升高而增大, 表明温度愈高, 非简谐效应愈显著. 例如, 在 $T = 300 \text{ K}$ 时, 差值约为 0.013; 而在温度 $T = 1\,000 \text{ K}$ 时, 差值约为 0.046.

将图 2 和 $\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2$ 等数据代入(11) 式, 可求得 AlN 类石墨烯材料的线膨胀系数随温度的变化(图 3), 图 3 中的虚线、实线和点线分别表示只考虑简谐近似, 考虑简谐近似和第一非简谐项, 同时考虑到简谐近似和第一、二非简谐项的结果.

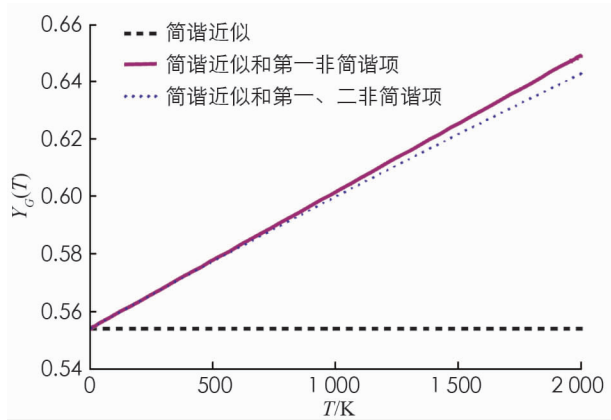


图 2 AlN 的格林乃森参量 γ_G 随温度的变化

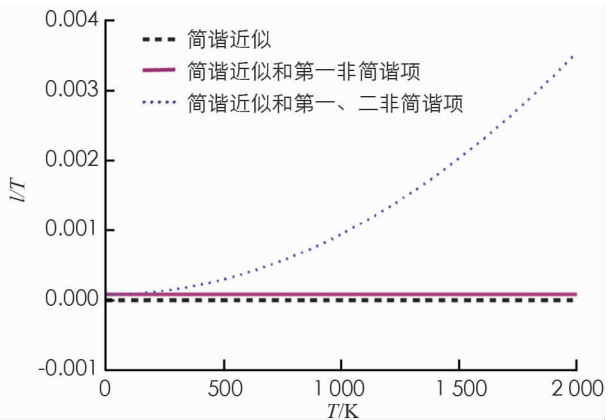


图 3 AlN 类石墨烯材料的线膨胀系数随温度的变化

由图 3 看出, 在简谐近似下, AlN 类石墨烯材料的热膨胀系数为零; 若只计及第一非简谐项, 则热膨胀系数为常数 $8.57 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$; 同时考虑到第一、第二非简谐项, 则热膨胀系数随温度升高而非线性增大, 变化范围在 $8.57 \times 10^{-5} \sim 3.6 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ 之间. 这表明, 热膨胀系数随温度变化主要由原子振动的第二阶非简谐项造成. 相反地, 简谐效应和第一非简谐效应的影响几乎为零. 非简谐项对热膨胀系数的影响随着温度升高而增大, 即温度愈高, 非简谐效应愈显著. 另外, 特别值得注意两点是: ① AlN 类石墨烯材料虽与石墨烯具有相似的二维平面六角格子结构(图 1), 但各格点上的原子不同, 导致它们的物理性能存在明显差异. 例如: 石墨烯热膨胀系数为负值 $-5.41 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, 而 AlN 类石墨烯材料的线膨胀系数为正. ② 热力学性能随维度不同也存在明显差异. 例如, $T = 500 \text{ K}$ 时, 第一性原理计算的六角 AlN 块体(三维晶体)热膨胀系数约为 $1.901 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ [24], 明显小于本文中 AlN 类石墨烯材料(二维晶体)热膨胀系数 $2.995 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$.

将表 1 和 $\epsilon_0, \epsilon_1, \epsilon_2$ 等数据代入(11)式后可求得线膨胀系数 α_l , 再代入(13)式, 可得到 AlN 类石墨烯材料弹性模量随温度的变化(图 4). 图 4 中的虚线、实线和点线分别表示只考虑简谐近似, 考虑简谐近似和第一非简谐项, 同时考虑简谐近似和第一、二非简谐项的结果.

由图 4 看出,在简谐近似下,AlN 类石墨烯材料的弹性模量为常量;考虑到非简谐项后,弹性模量随温度的升高而在 58.54~500.00 N/m 之间非线性增大。其中,当只计及到第一非简谐项时,弹性模量随温度升高线性增大,且变化极小,在 0~2 000 K 的温度范围内,只增大约 0.024%。计及到第一、二非简谐项时,弹性模量随温度升高而迅速增大;考虑到非简谐项时,弹性模量与简谐近似下的差值随着温度升高而增大,即温度愈高,非简谐效应愈显著。考虑到非简谐项后,本研究理论值与文献[25]在考虑到第一非简谐项情况下对石墨烯的计算结果非常接近,例如当 $T=1\ 000\text{ K}$ 时,本研究的 AlN 类石墨烯材料 $B=222\text{ N/m}$,接近于石墨烯的 $B=204\text{ N/m}$ 。

4 结 论

本研究基于量子固体理论,充分考虑了原子振动的非简谐效应,搭建了固体物理模型,对 AlN 类石墨烯材料的热力学性质随温度的变化进行了深入研究。研究发现,AlN 类石墨烯材料的格林乃森参量、线膨胀系数、弹性模量等热力学量均与第一、二阶非简谐系数密切相关。在简谐近似下,AlN 类石墨烯材料不发生热膨胀,即线膨胀系数为零;它的格林乃森参量和弹性模量均为常量。这明显与实验不符,因此研究热学性质必须考虑非简谐效应。考虑到原子振动的非简谐效应后,格林乃森参量、线膨胀系数和弹性模量均随温度的升高而非线性增大,相应的变化范围分别为 $0.547\sim0.630$, $8.57\times10^{-5}\sim3.60\times10^{-3}\text{ K}^{-1}$ 和 $58.54\sim500.00\text{ N/m}$,即温度愈高,非简谐效应愈显著。AlN 类石墨烯材料的线膨胀系数和弹性模量在数值上虽与 AlN 块状晶体不同,但它们随温度的变化规律相似。

参考文献:

- [1] CASTRO NETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The Electronic Properties of Graphene [J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(1): 109-162.
- [2] 李小平,梁丹丹,吴建洪,等. 石墨薄膜电阻开关特性的研究 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2018, 43(3): 21-25.
- [3] 高一文,周虹君. 吸附对外延石墨烯态密度和能隙的影响 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2017, 42(3): 27-33.
- [4] 申凤娟,唐可. 石墨烯基碱金属离子态密度变化规律研究 [J]. 西南师范大学学报(自然科学版), 2016, 41(7): 68-73.
- [5] LI D, KANER R B. MATERIALS SCIENCE: Graphene-Based Materials [J]. Science, 2008, 320(5880): 1170-1171.
- [6] LIU Y Y, BHOWMICK S, YAKOBSON B I. BN White Graphene with “Colorful” Edges: The Energies and Morphology [J]. Nano Letters, 2011, 11(8): 3113-3116.
- [7] RAMAKRISHNA MATTE H S, GOMATHI A, MANNA A, et al. MoS₂ and WS₂ Analogues of Graphene [J]. Angewandte Chemie International Edition, 2010, 49(24): 4059-4062.
- [8] 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.
- [9] TURAN S, CINAR A, KAYA P. Microstructure-Thermal Conductivity Relationship in Pressureless Sintered AlN Ceramics for Energy Applications. European Microscopy Congress 2016: Proceedings, 924-925.
- [10] GEIM A K, GRIGORIEVA I V. Van Der Waals Heterostructures [J]. Nature, 2013, 499(7459): 419-425.
- [11] TOPSAKAL M, CIRACI S. Elastic and Plastic Deformation of Graphene, Silicene, and Boron Nitride Honeycomb Nanoribbons under Uniaxial Tension: a First-principles Density-functional Theory Study [J]. Physical Review B, 2010, 81(2): 024107-1-024107-6.
- [12] 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.
- [13] GANJI M D, DALIRANDEH Z, KHOSRAVI A, et al. Aluminum Nitride Graphene for DMMP Nerve Agent Adsorption [J]. Journal of Materials Chemistry, 2015, 25(12): 6789-6795.

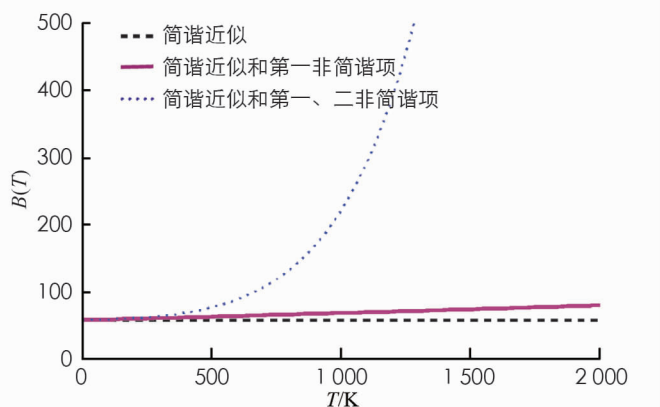


图 4 AlN 类石墨烯材料
弹性模量随温度的变化

- tion and Detection [J]. Materials Chemistry and Physics, 2014, 145(1-2): 260-267.
- [14] 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.
- [15] JANKOWSKI K, RUTKOWSKI P, KATA D, et al. Microstructural Analysis of Aluminum Nitride - GPLs Composites [J]. Ceramics International, 2016, 42(7): 9025-9031.
- [16] NARITA S, MEGURO K, TAKAMI T, et al. Formation of graphene/SiC/AlN Multilayers Synthesized by Pulsed Laser Deposition on Si(110) Substrates [J]. Journal of Crystal Growth, 2017, 460: 27-36.
- [17] YUAN W H, XIAO Q Q, LI L, et al. Thermal Conductivity of Epoxy Adhesive Enhanced by Hybrid Graphene oxide/AlN Particles [J]. Applied Thermal Engineering, 2016, 106: 1067-1074.
- [18] 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.
- [19] DAVYDOV S Y, Вклад π -связей в эффективные заряды, энергию когезии и силовые константы графеноподобных соединений [J]. Физика твердого тела. 2016, 58 (2): 392-399.
- [20] 明庭尧, 申凤娟, 唐海艳. 非简谐振动对 $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ 合金热力学性质的影响 [J]. 西南大学学报(自然科学版), 2018, 40(3): 121-126.
- [21] 杜一帅, 康 维, 郑瑞伦. 外延石墨烯电导率和费米速度随温度变化规律研究 [J]. 物理学报, 2017, 66(1): 209-217.
- [22] RIBEIRO G A S, PAULATTO L, BIANCO R, et al. Strong Anharmonicity in the Phonon Spectra of PbTe and SnTe from First Principles [J]. Physical Review B, 2018, 97: 014306.
- [23] KRINGHØJ A, CASPARIS L, HELL M, et al. Anharmonicity of a Superconducting Qubit with a Few-mode Josephson Junction [J]. Physical Review B, 2018, 97(6): 060508.
- [24] DAVYDOV S Y. Estimating Anharmonic Characteristics of Single-sheet Graphene at High Temperatures [J]. Technical Physics Letters, 2011, 37(12): 1161-1164.
- [25] 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.

Temperature Dependence of Thermo Dynamic Properties of Graphene-Like AlN 2D Materials

HE Yong-Jun¹, ZHOU Ting-Yan², MA Chao-Ke³

1. Chongqing No. 1 Middle School, Chongqing 400030, China;

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

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

Abstract: Considering the non-harmonic effect of atomic vibration, a solid-state physical model has been established, and then thermodynamic properties of Graphene-like AlN 2D materials, including the thermal expansion coefficient, the Gruneisen parameter and the elastic modulus, been studied in detail. It is concluded that: Firstly, if only the harmonic approximation is considered, there is no thermal expansion for AlN 2D materials. Their linear expansion coefficient is zero, and their Gruneisen parameter and elastic modulus are both constant. These results are not consistent with the reality. Therefore, the non-harmonic effect must be considered. Secondly, if the non-harmonic effect is considered, the Gruneisen parameter, the linear expansion system and the elastic modulus of AlN 2D materials increase nonlinearly with the increasing temperature, in the range of $0.547-0.630$, $8.57 \times 10^{-5}-3.60 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ and $58.54-500.00 \text{ N/m}$, respectively. Moreover, the non-harmonic effect is more evident if the temperature is higher. And thirdly, the linear expansion coefficient, the Gruneisen parameter and elastic modulus of AlN 2D materials are different from those of AlN bulks, but their variation tendencies with the temperature are similar to those of AlN bulks.

Key words: Graphene-like AlN 2D materials; linear thermal expansion coefficient; Gruneisen parameter; elastic modulus; anharmonic effect

责任编辑 潘春燕