

## مقایسه آنتروپی و گرمای ویژه در سیم‌های کوانتومی با سطح مقطع متوازی الاضلاع و مثلثی با استفاده از آمار تی سالیس

رضا خرداد\*، بهاره میرحسینی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

دریافت: ۱۳۹۵/۰۶/۰۹ ویرایش نهائی: ۱۳۹۶/۰۳/۰۳ پذیرش: ۱۳۹۶/۰۳/۰۸

### چکیده

در این تحقیق، آنتروپی و گرمای ویژه یک سیم کوانتومی GaAs با دو سطح مقطع متوازی الاضلاع و مثلثی بررسی می‌شود. در ابتدا، ویژه مقادیر انرژی و ویژه توابع سیستم با استفاده از حل معادله شرودینگر محاسبه می‌شوند. سپس، با استفاده از فرمول بندی تی سالیس، آنتروپی و گرمای ویژه هر دو سیم کوانتومی را به دست می‌آوریم. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که آنتروپی و گرمای ویژه توابع پیوسته‌ای نیستند. در این سیستم‌ها، برخلاف ترمودینامیک کلاسیک، آنتروپی و گرمای ویژه هر مقداری نخواهد داشت و توسط یک شرط (شرط قطع) تعیین می‌شود. در هر دو سیستم، با افزایش اندازه سیم کوانتومی، تعداد قله‌ها و اندازه قله‌ها در گرمای ویژه هر دو سیستم تغییر می‌کند. هر چقدر محدودیت کوانتومی قوی‌تر می‌شود، طبیعت گسسته خواص ترمودینامیکی بیشتر آشکار می‌شود.

کلیدواژگان: سیم کوانتومی، آنتروپی، گرمای ویژه

### مقدمه

افزایش چگالی حالت‌های انرژی و تغییر اساسی طیف جذب نوری می‌شود.

همان‌طور که می‌دانیم، امروزه کاربرد ساختارهای کوانتومی روز به روز بیشتر و گسترده‌تر می‌شود. سیم‌های کوانتومی به‌عنوان ساختارهایی با خواص ویژه، بسیار مورد توجه‌اند و در زمینه‌های مختلف و از جنبه‌هایی متفاوت مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. مطالعات بر روی این ساختارها شاخه‌های جدیدی را در فیزیک، شیمی و مهندسی ایجاد نموده و با توجه به کاربردهای گسترده آنها در دستگاه‌های اپتوالکترونیکی، مطالعات زیادی بر روی آنها انجام شده است [۵-۷]. لازم به ذکر

مطالعه ساختارهای نیم‌رسانا با بعد پایین اهمیت زیادی در علوم مختلف مانند شیمی، فیزیک، زیست، بیولوژی و مهندسی دارند. از این ساختارها می‌توان به ابرشبکه‌ها، سیم‌های کوانتومی، چاه‌های کوانتومی و نقطه‌های کوانتومی اشاره کرد. برخی از ویژگی فیزیکی این ساختارها مانند خواص الکترونی و خواص اپتیکی آنها از لحاظ آزمایشگاهی و نظری به‌طور گسترده مطالعه شده‌اند [۴-۱]. این ساختارها، حامل‌های بار را در ابعاد یک، دو و سه بعدی محدود می‌کنند که این محدودیت منجر به تشکیل ترازهای مجزای انرژی،

\* نویسنده مسئول: rezakh2025@yahoo.com

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

این مقاله تحت مجوز کپی‌رایت کامنز تعین ۴.۰ بین‌المللی می‌باشد.



است [۱۵-۱۳]. از آنجا که چنین سیستم‌هایی اغلب نافزونور هستند ما نیازمند یک مکانیک آماری نافزونور هستیم، که توانایی تفسیر این گونه سیستم‌ها را داشته باشد. در سال ۱۹۸۸ در یک مقاله تاریخی، تی سالیس یک مکانیک آماری نافزونوری یافت که تعمیمی از مکانیک آماری بولتزمن گیبس می‌باشد [۱۶].

در سال‌های اخیر، تحلیل‌های زیادی بر روی آنتروپی تی سالیس ارائه شده است. به‌عنوان مثال، لاوندا<sup>۱</sup> و همکاران [۱۷] اصل جمع‌پذیری آنتروپی را برای آنتروپی تی سالیس مورد مطالعه قرار دادند. همچنین اطلاعات و اندازه‌های آنتروپی تعمیم‌یافته در فیزیک توسط بک<sup>۲</sup> مطالعه شده است [۱۸]. او برخی از مثال‌های مربوط به اندازه‌گیری‌های اطلاعات که در سیستم‌های پیچیده مفید هستند را مورد بررسی قرار داد. اخیراً بیرو<sup>۳</sup> و همکاران آنتروپی تی سالیس را با کمک اصل استقلال ترموستاتیک کلی به‌دست آوردند. آنها توانستند تعبیر ترمودینامیکی رابطه آنتروپی و پارامترهای آن را توجیه کنند [۱۹]. لازم به‌ذکر است که برخی از محققان با کمک فرمول ابتدایی تی سالیس، خواص ترمودینامیکی برخی از سیستم‌های فیزیکی را مورد بررسی قرار داده‌اند. به‌عنوان مثال، ایتو<sup>۴</sup> و همکاران [۲۰] گرمای ویژه یک نوسانگر ساده یک بعدی را با کمک آنتروپی تی سالیس مورد بررسی قرار دادند. لوسنا<sup>۵</sup> و همکاران [۲۱] گرمای ویژه یک اتم هیدروژن را با استفاده از آمار تی سالیس مطالعه کردند.

است که سیم‌های کوانتومی با سطح مقطع‌های گوناگون، با روش‌هایی مانند حکاکی شیمیایی و برآرایی باریکه مولکولی ساخته شده‌اند. به‌عنوان مثال، می‌توان سیم‌های کوانتومی با سطح مقطع مربعی، مثلثی، متوازی‌الاضلاع، T شکل و شیاری را نام برد [۸-۱۱]. اگرچه مطالعات زیادی بر روی خواص الکترونی و اپتیکی سیم‌های کوانتومی انجام شده است، اما اطلاعات کمی در مورد خواص ترمودینامیکی سیم‌های کوانتومی در دسترس می‌باشد.

مکانیک آماری یک تفسیر از سطح مولکولی از کمیت‌های ترمودینامیکی ماکروسکوپی مانند کار، گرما، انرژی آزاد و آنتروپی فراهم می‌کند. لازم به‌ذکر است آنتروپی در ترمودینامیک می‌تواند از طریق تجربی شناخته شود، در حالی که در مکانیک آماری آنتروپی یک تابع از توزیع سیستم بر روی حالت‌های میکروسکوپی است. بیش از یک قرن است که مکانیک آماری بولتزمن-گیبس در توصیف مشخصه‌های فیزیکی سیستم‌های در حال تعادل گرمایی نقش مهمی را بازی می‌کند. این نوع سیستم‌ها ساده هستند و به‌وضوح می‌توان نشان داد که انرژی و آنتروپی آنها فزونور است [۱۲]. در طول قرن گذشته این موضوع مورد توجه فیزیکدانان قرار داشته که در طبیعت، سیستم‌های آماری بسیاری وجود دارند که نمی‌توان آنها را با مکانیک آماری بولتزمن-گیبس توصیف کرد. این نظریه در تفسیر سیستم‌هایی کوچک و یا با برهم‌کنش‌های پیچیده و دارای همبستگی بلند برد ناکارا

<sup>1</sup> Lavenda

<sup>2</sup> Beck

<sup>3</sup> Biró

<sup>4</sup> Ito

<sup>5</sup> Lucena

## ویژه‌مقادیر انرژی سیم کوانتومی متوازی‌الاضلاع

هامیلتونی یک الکترون در یک سیم کوانتومی به صورت زیر می‌باشد:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(x, y) \quad ۱$$

در اینجا  $m^*$  جرم مؤثر الکترون و  $V(x, y)$  پتانسیل تحدید الکترون<sup>۱</sup> می‌باشد که از رابطه زیر تبعیت می‌کند

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{داخل سیم} \\ \infty & \text{بیرون سیم} \end{cases} \quad ۲$$

برای به دست آوردن ترازهای انرژی و تابع موج باید معادله شرودینگر را در دستگاه دکارتی حل کنیم. این معادله به شکل زیر است

۳

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \Psi(x, y) + V(x, y) \Psi(x, y) = E \Psi(x, y)$$

اکنون تابع موج را به صورت یک سری از امواج تخت بسط می‌دهیم. با جای‌گذاری این تابع در معادله شرودینگر، رابطه زیر به دست می‌آید.

$$\psi(x, y) = \sum_{s=1}^N c_s \exp(i\alpha_s x + i\beta_s y) \quad ۴$$

$$\alpha_s^2 + \beta_s^2 = \lambda, \quad s = 1, 2, \dots, N \quad ۵$$

عمار و همکاران از یک قضیه ریاضی برای به دست آوردن ضریب‌های  $\alpha_s$  و  $\beta_s$  و ترازهای انرژی  $\lambda$

اخیراً، توانستیم گرمای ویژه، آنتروپی و انرژی درونی یک شبه نقطه کوانتومی را مورد بررسی و مطالعه قرار دهیم [۲۳ و ۲۲]. برای اطلاعات بیشتر در زمینه کاربرد آمار تی سالیس در سیستم‌های فیزیکی، به مراجع [۲۶-۲۴] رجوع کنید.

اگرچه آمار تی سالیس در برخی سیستم‌های فیزیکی و برخی از نانوساختارهای کوانتومی مورد استفاده قرار گرفته است، اما خواص ترمودینامیکی سیم‌های کوانتومی تا کنون مورد بررسی و مطالعه قرار نگرفته است. به همین سبب، در این مقاله قصد داریم با کمک فرمول بندی تی سالیس، خواص ترمودینامیکی دو سیم کوانتومی با سطح مقطع متوازی‌الاضلاع و مثلثی را به دست آورده و مقایسه کنیم. در ابتدا، لازم است که ویژه مقادیر انرژی سیم‌های کوانتومی مربوطه را محاسبه کنیم.

### محاسبه ویژه‌مقادیر انرژی

در این بخش روش محاسبه ویژه‌مقادیر انرژی دو سیم کوانتومی با سطح مقطع متوازی‌الاضلاع و مثلثی بررسی می‌شود. همان‌گونه که می‌دانیم، به منظور یافتن ویژه‌مقادیر انرژی باید معادله مستقل از زمان شرودینگر حل شود. با توجه به هندسه خاص و مشکل سیم‌های کوانتومی، یافتن ویژه‌مقادیر انرژی تلاش بسیاری را طلب می‌کند.

<sup>۱</sup> Confinement potential

و [۲۳]. در مختصات دکارتی  $y, x$ ، اگر  $\delta$  زاویه بین  $a_i$  و  $a_j$  باشد دو انتقال مستقل داریم.

$$\dot{x} = x + p_i L(a_i), \quad \dot{y} = y$$

$$\dot{x} = x + p_i L(a_i) \cos \delta, \quad \dot{y} = y \quad ۸$$

$$\dot{x} = x + p_i L(a_i) \cos \delta, \quad ۹$$

$$\dot{y} = y + p_i L(a_i) \sin \delta.$$

با توجه به معادلات ۸ تا ۹ توابع موج و ترازهای انرژی به صورت زیر نوشته می‌شوند.

$$\psi(x, y) = \exp(i\alpha x + i\beta y), \quad ۱۰$$

$$\alpha = 2n\pi p_i L(a_i), \quad ۱۱$$

$$\beta = \frac{2n\pi p_i L(a_i) - 2n\pi p_j L(a_j) \cos \delta}{p_i p_j L(a_i) L(a_j) \sin \delta}.$$

ویژه مقدار انرژی به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$E(n, m) = \alpha^2(n, m) + \beta^2(n, m). \quad ۱۲$$

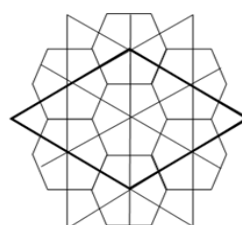
این ویژه توابع و ویژه مقادیر انرژی از بررسی‌های هندسی به دست می‌آیند. به منظور یافتن اطلاعات هندسی بیشتر، به مرجع [۳۰، ۳۱] رجوع کنید. با استفاده از نکات هندسی، داریم

۱۳

$$\begin{aligned} \psi_{n,m}(x, y) &= \\ &= \sin\left[\frac{2\pi\sqrt{3}}{3a}nx\right] \sin\left[\frac{2\pi}{3a}my\right] - (-1)^{\frac{m+2}{2}} \\ &\times \sin\left[\frac{2\pi\sqrt{3}}{3a}\frac{(m+n)}{2}x\right] \sin\left[\frac{2\pi}{3a}\frac{(3n-m)}{2}y\right] \\ &+ (-1)^{\frac{m+n}{2}} \sin\left[\frac{2\pi\sqrt{3}}{3a}\frac{(n-m)}{2}x\right] \sin\left[\frac{2\pi}{3a}\frac{(3n+m)}{2}y\right] \end{aligned}$$

$$E(n, m) = \left(\frac{4\pi^2}{9a^2}\right)(3n^2 + m^2). \quad ۱۴$$

استفاده کردند [۲۷]. روش آنها بر این پایه استوار است که هر شکل چند وجهی را می‌توان با کنار هم گذاردن اجزای کوچک به دست آورد.



ب



الف

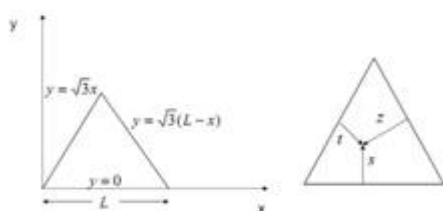
شکل ۱. سیم کوانتومی با مقطع متوازی الاضلاع. قسمت (الف) و (ب) به ترتیب نشان دهنده یک جزء کوچک از مقطع سیم و کل مقطع سیم را نشان می‌دهد.

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، در شکل ۱، جزء کوچک و شکل نهایی که از کنار هم گذاردن آنها به دست آمده است را می‌توان دید. لازم به ذکر است که در روش آنها، جزء کوچک باید با اعمال تقارنی مانند بازتاب‌های متوالی و تکرار شونده، انتقال و دوران ساختار اصلی را تولید کند. اگر  $a_i$  و  $a_j$  به ترتیب دو سطح مجاور به طول  $l(a_i)$  و  $l(a_j)$  باشند با معرفی مختصات  $\zeta$  و  $\eta$  در امتداد آنها انتقال زیر را داریم [۲۹ و ۲۸].

$$\dot{\eta} = \eta, \quad \dot{\zeta} = \zeta + p_i L(a_i) \quad ۶$$

$$\dot{\zeta} = \zeta, \quad \dot{\eta} = \eta + p_j L(a_j) \quad ۷$$

$p_i$  و  $p_j$  اعداد صحیح هستند. با در نظر گرفتن کمترین  $p_i$  و  $p_j$  در معادلات ۶ و ۷ کوچکترین متوازی الاضلاع منطبق با هر سطح مجاور به صورت ذاتی تشکیل می‌شود. از این روش گروهی از محققین برای تولید سطوح چند ضلعی محدب نیز استفاده کرده‌اند [۲۴]



الف ب

شکل ۲. سیم کوانتومی با سطح مقطع مثلثی.

با کمک معادله ۱۷، می‌توان شرایط مرزی در معادله ۱۶ را به شکل زیر نوشت.

$$\begin{cases} s = 0, t + z = 2\pi, \\ t = 0, s + z = 2\pi, \\ z = 0, s + t = 2\pi, \end{cases} \quad 19$$

باید توجه کرد که مثلث متوازی‌الاضلاع مورد بررسی در این تحقیق تحت گروه نقطه‌ای  $C_{3v}$  ناوردا می‌باشد [۲۸]. با توجه به شرایط مرزی معادله ۱۹، می‌توانیم جواب‌های معادله شرودینگر را به شکل  $(ps - qt)$  بنویسیم که  $p$  و  $q$  ثابت هستند [۲۸-۳۰]. با یک بررسی ساده می‌توان نشان داد که اگر تابع موج  $\psi(ps - qt)$  به شکل سینوسی یا کسینوسی در نظر گرفته شود، شرایط مرزی معادله‌های ۱۷ و ۱۹ ارضاء می‌شوند. اکنون می‌توانیم،  $\psi(ps - qt)$  را به صورت  $\psi(a_1x + a_2y)$  بنویسیم که  $a_1$  و  $a_2$  ثابت هستند. با توجه به تمام نکات گفته شده، تابع موج نهایی را می‌توان به شکل زیر نوشت.

۲۰

$$\begin{aligned} \psi_{(p,q)}(x,y) &= \cos\left[\frac{2\pi xq}{L}\right] \sin\left[\frac{(2p+q)2\pi y}{\sqrt{3}L}\right] \\ &- \cos\left[\frac{2\pi xp}{L}\right] \sin\left[(2q+p)2\pi y/\sqrt{3}L\right] \\ &- \cos\left[\frac{2\pi x(p+q)}{L}\right] \sin\left[\frac{(p-q)2\pi y}{\sqrt{3}L}\right], \end{aligned}$$

در اینجا  $a$  طول ضلع متوازی‌الاضلاع است و  $n, m$  اعداد صحیح می‌باشند که دارای شرایط زیر هستند.

$$n \neq 0, m \neq 0, m \neq \pm 3n, m \neq \pm n. \quad 15$$

### ویژه‌مقادیر انرژی سیم کوانتومی مثلثی

برای حل معادله شرودینگر در مختصات دکارتی از روش جداسازی متغیرها استفاده می‌کنیم. ابتدا باید به شرایط مرزی زیر دقت شود:

$$\begin{cases} y = 0, \\ y = \sqrt{3}x, \\ y = \sqrt{3}(L-x), \end{cases} \quad 16$$

این شرایط مرزی می‌باشد که در آنها داریم

$$\psi(x,y) = 0,$$

که  $L$  طول ضلع مثلث می‌باشد. حال سه متغیر جدید را به صورت زیر معرفی می‌کنیم.

۱۷

$$s = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)y,$$

$$t = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)\left(-\frac{y}{2} + \frac{\sqrt{3}x}{2}\right),$$

$$z = \left(\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\right)\left(-\frac{y}{2} - \frac{\sqrt{3}x}{2}\right) + 2\pi. \quad \text{دقت}$$

(با توجه به تسخّل ۱).

$$s + t + z = 2\pi \quad 18$$

که  $p$  و  $q$  به صورت زیر می‌باشند.

$$q = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad ۲۱$$

با توجه به  $p = q + 1, q + 2, q + 3, \dots$  داریم.

$$\begin{aligned} \psi_{p,0}(x,y) &= \sin \left[ \frac{4p\pi y}{\sqrt{3}L} \right] \\ &- 2 \sin \left[ \frac{2p\pi y}{\sqrt{3}L} \right] \cos \left[ \frac{2\pi x p}{L} \right], \end{aligned} \quad ۲۲$$

$$p = 1, 2, 3, \dots$$

لازم به ذکر است که تابع موج فوق بهنجار نیست. بنابراین برای محاسبه خواص فیزیکی حتماً باید آن را بهنجار کرد. در ضمن ویژه مقادیر انرژی یک سیم کوآنتومی با سطح مقطع مثلثی به صورت رابطه زیر نوشته می‌شود.

$$E_{p,q} = (p^2 + pq + q^2) \frac{4\hbar^2}{6m^*L^2}. \quad ۲۳$$

### آنتروپی و گرمای ویژه

همان‌طور که می‌دانیم، مکانیک آماری نافزونور، با پیشینه‌سازی آنتروپی تی سالیس (در سال ۱۹۸۸) به دست می‌آید که در آن آنتروپی تی سالیس به صورت زیر نوشته می‌شود [۱۶].

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q-1} \quad (q \in \mathbb{R}), \quad ۲۴$$

در رابطه فوق  $W$  تعداد کل حالت‌های میکروسکوپی در دسترس سیستم،  $k$  ضریب تناسب و  $p_i$  احتمال

مربوط به هر میکروحالت است. کمیت جدید  $q$  که هر مقدار حقیقی می‌تواند باشد، نشان دهنده درجه نافزونوری سیستم است [۱۶،۳۲]. برای آنسامبل میکروکانونی ما تنها یک شرط  $\sum p_i = 1$  را داریم. آنتروپی تی سالیس خاصیت شبه-فزونوری دارد، به این معنی که اگر دو سیستم مستقل  $A$  و  $B$  داشته باشیم، در این صورت آنتروپی سیستم کل به صورت زیر به دست می‌آید [۳۳،۳۴]:

$$S_q \frac{A+B}{k} = \left[ S_q \frac{A}{k} \right] + \left[ S_q \frac{B}{k} \right] \quad ۲۵$$

$$+ (1 - q) [S_q (A)/k] [S_q (B)/k].$$

بنابراین نتیجه می‌گیریم که آنتروپی فزونور نیست، بلکه یک جمله اضافه متناسب با حاصلضرب آنتروپی زیر سیستم‌ها دارد و به خاطر همین جمله، کمیت  $q$  را درجه نافزونوری<sup>۱</sup> نام‌گذاری کرده‌اند همچنین می‌توان نشان داد که به ازای تمام مقادیر  $q$  همواره مثبت است (خاصیت نامنفی بودن آنتروپی). وضعیت‌های  $q > 1$ ،  $q = 1$  و  $q < 1$  به ترتیب به صورت ابر فزونوری<sup>۲</sup>، فزونوری<sup>۳</sup>، و زیرفزونوری<sup>۴</sup> توصیف می‌شوند.

شکل انرژی درونی به صورت زیر است

۲۶

$$\sum_{j=1}^W p_j^q \varepsilon_j = U_q,$$

$\varepsilon_i$  ویژه‌مقادیر هامیلتونی و  $p_i$  احتمالات مربوط به میکروحالت‌های در دسترس سیستم و  $W$  تعداد این

<sup>۱</sup> degree of intensivity

<sup>۲</sup> superextensivity

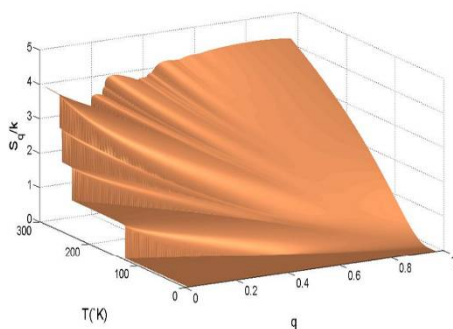
<sup>۳</sup> extensivity

<sup>۴</sup> subextensivity

گیس می‌شود، در این تحقیق نتایج خود را برای حالت  $q \neq 1$  مورد بررسی قرار می‌دهیم.

### بحث و نتیجه‌گیری

در این بخش آنتروپی و گرمای ویژه یک سیم کوانتومی با سطح مقطع متوازی‌الاضلاع و مثلث را به دست می‌آوریم و مورد مطالعه قرار می‌دهیم. نمودارهای ۳ و ۴، آنتروپی را در سه بعد برای سیم کوانتومی با سطح مقطع متوازی‌الاضلاع و مثلثی با  $a = 10nm$  نشان می‌دهند. این کمیت‌ها از یک مقدار خاص  $q$  شروع می‌شوند و در زیر آن مقدار برابر صفر هستند. در این نمودارها، تعدادی قله دیده می‌شود که نشان‌دهنده این نکته است که بر خلاف ترمودینامیک کلاسیک که در آن آنتروپی پیوسته است، در اینجا هر مقداری نخواهد داشت.



شکل ۳. آنتروپی برحسب  $q$  و  $T$  برای یک سیم کوانتومی متوازی‌الاضلاع شکل به‌ازای  $a = 10nm$

میکروحالات‌هاست و همچنین شرط بهنجارش برای  $p_i$  برقرار است. با استفاده از رابطه آنتروپی، بهنجارش احتمال و انرژی درونی و با کمک روش ضرایب لاگرانژ می‌توان تابع احتمال به‌صورت زیر به دست آورد.

۲۷

$$p_n(s_n) = \begin{cases} g_n [1 - \beta(1-q)s_n]^{1-q} & 1 - \beta(1-q)s_n > 0 \\ \frac{Z_q}{0} & otherwise \end{cases}$$

که  $Z_q$  تابع پارش می‌باشد که به‌صورت زیر نوشته می‌شود

$$Z_q = \sum_n g_n [1 - \beta(1-q)\varepsilon_n]^{1/(1-q)} \quad 28$$

که در رابطه فوق جمع روی ترازهای انرژی است که در معادله صدق می‌کند و  $g_n$  تبهگنی تراز  $n$ ام است. اکنون، با استفاده از روابط ترمودینامیکی، می‌توانیم گرمای ویژه تعمیم‌یافته را به‌صورت زیر بنویسیم

۲۹

$$\frac{C_q}{k} = \frac{qZ^{1-q} \langle (E_n - \langle E_n \rangle)^2 \rangle}{(kT)^2}$$

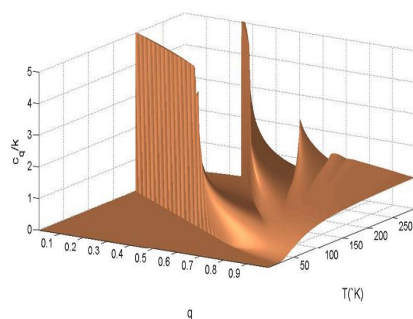
که در آن

$$E_n = \frac{\varepsilon_n}{[1 - \beta(1-q)\varepsilon_n]} \quad 30$$

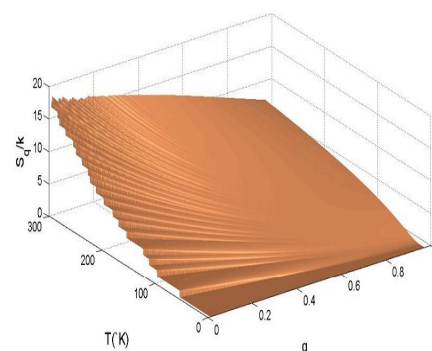
و  $\langle f_n \rangle$  به‌صورت زیر می‌باشد که  $f_n$  یک تابع اختیاری است.

$$\langle f(\varepsilon_n) \rangle = \sum_{levels} p_n f(\varepsilon_n) \quad 31$$

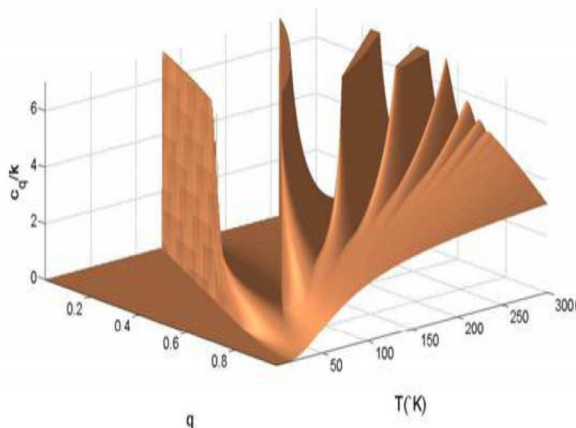
باید توجه کرد که علامت  $C_q$  توسط  $q$  تعیین می‌شود. این بدین معناست که برای  $q > 0$  داریم  $C_q \geq 0$ . با توجه به اینکه حالت  $q = 1$  منجر به آمار بولتزمن-



شکل ۵. گرمای ویژه تعمیم یافته برحسب  $q$  و  $T$  برای یک سیم کوانتومی متوازی الاضلاع شکل به ازای  $a = 10\text{nm}$



شکل ۴. آنتروپی برحسب  $q$  و  $T$  برای یک سیم کوانتومی مثلثی شکل به ازای  $L = 10\text{nm}$



شکل ۶. گرمای ویژه تعمیم یافته برحسب  $q$  و  $T$  برای یک سیم کوانتومی مثلثی شکل به ازای  $L = 10\text{nm}$

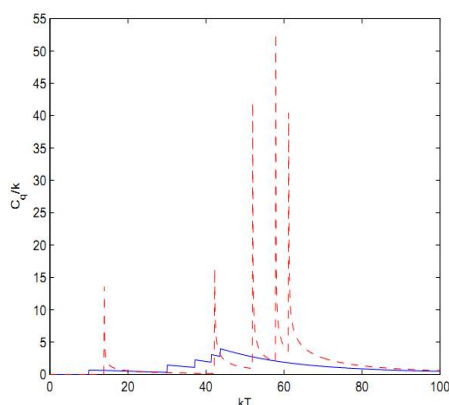
در این تابع یک شرط قطع وجود دارد:  $1 - \beta(1 - q)\epsilon_n > 0$ . همان‌طور که می‌توان دید اعمال این شرط باعث می‌شود که تمام ترازهای انرژی در محاسبات وارد نشوند. فقط ترازهایی در آنتروپی و گرمای ویژه مورد استفاده قرار می‌گیرند که شرط قطع را ارضا کنند. به‌وضوح می‌بینیم که این شرط به‌دما و پارامتر  $q$  بستگی دارد.

به‌منظور نشان دادن تأثیر سطح مقطع سیم کوانتومی بر خواص ترمودینامیکی، گرمای ویژه هر دو سیم کوانتومی را به‌ازای دو مقدار متفاوت  $a$  و  $L$  برحسب

به‌ازای یک مقدار خاص  $q$ ، آنتروپی با افزایش دما زیاد می‌شود. همان‌طور که می‌بینیم، تعداد قله‌ها در آنتروپی سیم کوانتومی مثلثی بیشتر است هرچند که برای هر دو سیم کوانتومی مقدار  $a$  یکسان است. علت این رفتار این است که محدودیت کوانتومی در سیم مثلثی بیشتر سیم متوازی الاضلاع است.

نمودارهای ۵ و ۶، گرمای ویژه را در سه بعد برای سیم کوانتومی با سطح مقطع متوازی الاضلاع و مثلثی با  $a = L = 10\text{nm}$  نشان می‌دهند. همان‌گونه که دیده می‌شود گرمای ویژه نیز مانند آنتروپی دارای تعدادی قله می‌باشد که تعداد آنها در سیم کوانتومی مثلثی بیشتر از سیم متوازی الاضلاع است. با توجه به نمودارهای ۳ تا ۶ می‌توان گفت که رفتار آنتروپی و گرمای ویژه در فرمول بندی تی سالیس کاملاً متفاوت با آمار بولتزمن-گیس است. دلیل این رفتار را می‌توانیم به این صورت توضیح دهیم که احتمال به‌دست آمده در رابطه ۲۷ تابع بسیار ویژه‌ای است.





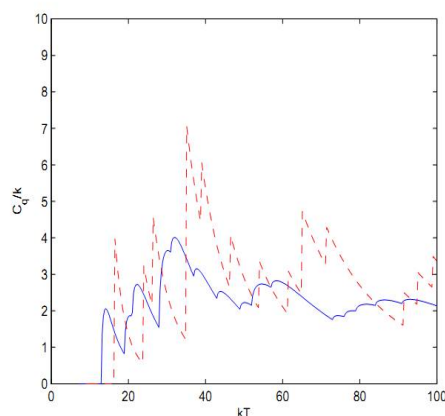
شکل ۸. گرمای ویژه برحسب دما به‌ازای  $q = 0.5$  و  $a = L = 8 \text{ nm}$  خط ممتد و نقطه چین به‌ترتیب مربوط به سیم متوازی‌الاضلاع و سیم کوآتومی است.

با توجه به نمودارهای ۷ و ۸ در می‌یابیم که افزایش  $a$  و  $L$  از ۴ نانومتر به ۸ نانومتر سبب تغییر رفتار قابل توجه در گرمای ویژه می‌شود. همان‌طور که می‌دانیم با افزایش  $a$  و  $L$ ، محدودیت کوآتومی کمتر می‌شود و ترازهای انرژی سیم‌ها به یکدیگر نزدیکتر می‌شوند. این امر سبب می‌شود که شرط قطع کمتر ارضاء شود و تعداد قله‌ها کمتر می‌شوند.

### مرجع‌ها

- [1] D. Bimberg, M. Grudmann, N.N. Ledentsov, Quantum Dot Heterostructures, John Wiley, New York, (1999).
- [2] S. Adachi, GaAs and Related Materials: Bulk Semiconducting and Superlattices Properties, World Scientific, Singapore, (1994).
- [3] D. Ferry, S. Goodnick, Transport in Nanostructures, Cambridge University press Cambridge, (1997).
- [4] L. Guo, Structural, energetic, and electronic properties of hydrogenated aluminum arsenide

دما محاسبه و رسم نموده‌ایم. نمودارهای ۷ و ۸، گرمای ویژه را برحسب دما به‌ازای  $q = 0.5$  و دو مقدار متفاوت  $a$  و  $L$  نشان می‌دهند. نمودارها به‌ترتیب به‌ازای ۴ و ۸ نانومتر رسم شده‌اند. خط ممتد و نقطه‌چین به‌ترتیب مربوط به سیم متوازی‌الاضلاع و مثلی می‌باشند. با توجه به نمودار ۷، می‌توان دریافت که گرمای ویژه سیم کوآتومی مثلی دارای قله‌های تیزتر است و مقدار این قله‌ها در سیم مثلی بیشتر از سیم متوازی‌الاضلاع می‌باشد. این رفتار در نمودار ۸ نیز دیده می‌شود. دلیل فیزیکی این رفتار این است که به‌ازای یک مقدار خاص  $a$ ، حرکت الکترون در سیم کوآتومی مثلی دارای محدودیت بیشتری می‌باشد. این امر سبب می‌شود که متوسط انرژی دارای مقدار بیشتری باشد. همچنین شرط قطع در این سیم بیشتر برقرار می‌شود.



شکل ۷. گرمای ویژه برحسب دما به‌ازای  $q = 0.5$  و  $a = L = 4 \text{ nm}$  خط ممتد و نقطه‌چین به‌ترتیب مربوط به سیم متوازی‌الاضلاع و سیم کوآتومی است.

- [13] Y. Okamoto, Nonextensive Statistical Mechanics, Application, Springer, (2001).
- [14] A.H. Darooneh, Insurance pricing in small size markets, *Physica A* **380** (2007) 411-417.
- [15] A.H. Darooneh, C. Dadashinia, Analysis of the spatial and temporal distributions between successive earthquakes: Nanextensive statistical mechanics viewpoint, *Physica A* **387** (2008) 3647-3654.
- [16] C. Tsallis, Possible generalization of Boltzmann-Gibbs Statistics, *Journal of Statistical Physics* **52** (1988) 479-487.
- [17] B.H. Lavenda, J.D. Davies, Additive Entropies of degree-q and the Tsallis Entropy, *Journal of Applied Sciences* **5** (2005) 315-322.
- [18] C. Beck, Generalised information and entropy measures in physics, *Contemporary Physics* **50** (2009) 495-510.
- [19] T.S. Biro, G.G. Barnafoldi, P. Ván, Quark-gluon plasma connected to finite heat bath, *The European Physical Journal A* **49** (2013) 110-116.
- [20] N. Ito, C. Tsallis, Specific heat of the harmonic oscillator within generalized equilibrium statistics, *Il Nuovo Cimento D* **11** (1989) 907-911.
- [21] L.S. Lucena, L.R. da Silva, C. Tsallis, Departure from Boltzmann-Gibbs statistics makes the hydrogen-atom specific heat a computable quantity, *Physical Review E* **51** (1995) 6247-6251.
- [22] R. Khordad, Study of specific heat of quantum pseudodot under magnetic field, clusters, *Journal of Nanoparticle Research* **13** (2011) 2029-2039.
- [5] J. Weiner, D. Chemla, D. Miller, H. Haus, A. Gossard, W. Wiegmann, C. Burrus, Highly anisotropic optical properties of single quantum well waveguides, *Applied Physics Letters* **47** (1985) 664-669.
- [6] L. Pfeiffer, K. West, H. Stormer, J. Eisenstein, K. Baldwin, D. Gershoni, J. Spector, Formation of high quality two-dimensional electron gas on cleaved GaAs, *Applied Physics Letters* **56** (1990) 1697-1701.
- [7] M. Yoshita, H. Akiyama, L. Pfeiffer, K. West, Quantum wells with atomically smooth interfaces, *Applied Physics Letters* **81** (2002) 49-56.
- [8] R. Khordad, Quantum wire with parallelogram cross section: optical properties, *Journal of Theoretical and Applied Physics* **6** (2012) 19-25.
- [9] R. Khordad, Second and third-harmonic generation of parallelogram quantum wires: electric field, *Indian Journal of Physics* **88** (2014) 275-281.
- [10] W. Xie, S. Liang, Optical properties of a donor impurity in a two-dimensional quantum pseudodot, *Physica B* **406** (2011) 4657-4660.
- [11] Y. Hayamizu, M. Yoshita, S. Watanabe, H. Akiyama, L. Pfeiffer, K. West, Lasing from a single-quantum wire, *Applied Physics Letters* **81** (2002) 4937-4941.
- [12] L. Mayants, The Enigma of Probability and Physics, Springer, (1984).

- [30] P.J. Richens, M.V. Berry, Pseudointegrable systems in classical and quantum mechanics, *Physica D* **2** (1981) 495-512.
- [31] V.I. Arnold, A. Avez, Ergodic Problems of Classical Mechanics, Benjamin, New York, (1968).
- [32] R. Khordad, *Continuum Mechanics and Thermodynamics* **28** (2016) 947-956.
- [33] M. Gell-Mann, C. Tsallis, Nonextensive Entropy Interdisciplinary Application, Oxford University Press, New York, (2004).
- [34] S. Abe, Y. Okamoto, Nonextensive Statistical Mechanics and its Application, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, (2001).
- [23] R. Khordad, B. Mirhosseini, Internal energy and entropy of a quantum pseudodot, *Physica B* **420** (2013) 10-14.
- [24] M. Barati, N. Moradi, Study of the specific heat of a hydrogenic donor impurity at the center of a spherical quantum dot in contact with a heat reservoir, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* **6** (2009) 1709-1713.
- [25] R. Khordad, M.A. Sadeghzadeh, A. Mohamadian Jahan-Abad, Effect of magnetic field on internal energy and entropy of a parabolic cylindrical quantum dot, *Communications in Theoretical Physics* **59** (2013) 655-660.
- [26] R. Khordad, M.A. Sadeghzadeh, A. Mohamadian Jahan-Abad, Specific heat of a parabolic cylindrical quantum dot in the presence of magnetic field, *Superlattices and Microstructures* **58** (2013) 11-19.
- [27] V. Amar, M. Pauri, A. Scotti, Schrodinger equation for convex plane polygons: A tiling method for the derivation of eigenvalues and eigenfunctions, *Journal of Mathematical Physics* **32** (1991) 2442-2432.
- [28] W.K. Li, S.M. Blinder, Solution of Schrodinger equation for a particle in an equilateral triangle, *Journal of Mathematical Physics* **26** (1985) 2784-2792.
- [29] P.N. Gorley, Y.V. Vorobiev, J.G. Hernández, P.P. Horley, Analytical solution of the Schrodinger equation for an electron confined in a triangle-shaped quantum well, *Microelectronic Engineering* **66** (2003) 39-45.

# Comparison of entropy and specific heat in quantum wires with cross sections of parallelograms and triangles using Tsallis statistics

Reza Khordad , Bahare Mirhosseini

Department of Physics, College of Science, Yasouj University, Yasouj, Iran

Received: 30.08.2016    Final revised: 24.05.2017    Accepted: 29.05.2017

## Abstract

In this paper, entropy and specific heat of a GaAs quantum wire with two different cross sections is studied. First, using the solution of Schrodinger equation, the eigenvalues and eigenfunctions are calculated analytically. Then, we have obtained entropy and specific heat of two quantum wires using Tsallis formalism. The results show that entropy and specific heat are continuous functions. Unlike classical thermodynamics, entropy and specific heat will not have any value and by a condition (cut off) is determined. For both wire, with increasing wire size the peak numbers in specific heat are changed. The stronger the quantum confinement, the thermodynamic properties of the discrete nature becomes more apparent.

**Keyword:** Quantum wire, Entropy, Specific heat