

## محاسبات ابتدا به ساکن خواص ساختاری، گذار فاز، خواص فونونی و خواص ترمودینامیکی AIAs

علی فاضلی کیسمی<sup>۱\*</sup>، سید جواد موسوی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>گروه فیزیک، واحد اردبیل، دانشگاه آزاد اسلامی، اردبیل، ایران

<sup>۲</sup>گروه فیزیک، واحد رشت، دانشگاه آزاد اسلامی، رشت، ایران

### چکیده

در این مقاله خواص ساختاری، گذار فاز و خواص فونونی و ترمودینامیکی AIAs مورد بررسی قرار گرفت. با کمک برنامه گیبس<sup>۲</sup> و مدل شبه هماهنگ دبای-اینشتین، داده‌های انرژی-حجم حاصل از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو با معادله حالت خطی بیرج-مورناگون برازش داده شد و در نتیجه ثابت شبکه، مدول کپای استاتیک و مشتق آن  $B_0'$  برای سه فاز  $B_3$  و  $B_8$  و  $B_1$  به دست آمد. گذارهای فاز از فاز  $B_3$  به  $B_8$  و نیز از فاز  $B_3$  به  $B_1$  به ترتیب برابر  $7.9\text{GPa}$  و  $11.2\text{GPa}$  به دست آمدند که با نتایج نظری و تجربی همخوانی خوبی دارند. به علاوه خواص فونونی فاز  $B_3$  با داده‌های تجربی مقایسه شد، که به ویژه در راستای گاما که مبنای محاسبات ترمودینامیکی است نتایج حاصل سازگاری خوبی با نتایج تجربی نشان می‌دهد. همچنین با بررسی نمودار ظرفیت گرمایی در حجم ثابت و داده‌های ظرفیت گرمایی در فشار ثابت برحسب دما برای فاز  $B_3$ ، سازگاری بسیار خوب نتایج با دیگر داده‌های نظری و تجربی نشان داده شد.

**کلیدواژگان:** مدل شبه‌هماهنگ دبای اینشتین، خواص ترمودینامیکی، گذار فاز، آلومینیوم آرسناید.

### مقدمه

ترانزیستورهای دو قطبی، ابر شبکه‌های بازتابنده براگ، لیزرهای حالت جامد و ترانزیستورهای دارای الکترون با تحرک پذیری بالا اشاره کرد [۱]. AIAs دارای فازهای متفاوتی است ولی در فشار طبیعی عموماً در فاز  $B_3$  و در ساختار بلند روی یافت می‌شود. فازهای  $B_8$  (NiAs) و  $B_1$  (NaCl) این ماده نیز مورد بررسی قرار خواهند گرفت. آنچه تاکنون کمتر مورد توجه محققین قرار گرفته خواص ترمودینامیکی AIAs پس از گذار فاز  $B_3$  به  $B_8$  است که در این مقاله با استفاده از برنامه گیبس<sup>۲</sup> [۸] و روش شبه‌هماهنگ دبای-اینشتین این خواص مورد بررسی قرار می‌گیرند.

نیم‌رساناهای گروه III-V به خاطر کاربردهایشان در صنعت و فناوری از اهمیت خاصی برای محققان برخوردارند. یکی از مهم‌ترین و پرکاربردترین ترکیبات این گروه AIAs است.

تاکنون بررسی‌های نظری و تجربی زیادی روی خواص ساختاری، گذار فاز و محاسبات فونونی AIAs انجام شده است [۷-۱]. اما به دلیل دشواری فراهم کردن مقدار زیادی AIAs خالص امکان بررسی تجربی خواص ترمودینامیکی آن دشوار می‌باشد، بنابراین محاسبه نظری خواص ترمودینامیکی این نیم‌رسانا، از اهمیت فراوانی برخوردار است. از کاربردهای این نیم‌رسانا می‌توان به استفاده آن در اتصال‌های غیر همونوع

\*نویسنده مسئول: alif1364@yahoo.com

$$\theta_{DE} = \frac{\theta_D}{n^3}, \quad 4$$

که فرمول محاسبه  $\theta_D$  به صورت زیر است:

$$\theta_D = \frac{\hbar}{k} [6\pi^2 V^{\frac{1}{2}} N]^{\frac{1}{3}} f(\sigma) \sqrt{\frac{B_s}{M}}, \quad 5$$

$M$  جرم مولکولی هر سلول واحد و  $B_s$  مقدار مدول حجمی بی دررو است که مشخص کننده میزان فشردگی بلور بوده و از فرمول زیر به دست می آید:

$$B_s \cong B_{static} [V \frac{d^2 E}{dV^2}], \quad 6$$

$\sigma$  نسبت پواسون بوده و تابع  $f(\sigma)$  با عبارت زیر بیان می شود [۱۲ و ۱۱]:

$$f(\sigma) = \{3[2(\frac{2}{3} \frac{1+\sigma}{1-\sigma})^{\frac{3}{2}} + (\frac{1}{3} \frac{1+\sigma}{1-\sigma})^{\frac{3}{2}} - 1]^{\frac{1}{3}}, \quad 7$$

مقدار نسبت پواسون در حدود ۰٫۲۵ انتخاب می شود. در این صورت تابع غیر تعادلی گیبس را می توان نسبت به حجم کمینه نمود.

$$[\frac{\partial G^*(V; P, T)}{\partial V}] = 0, \quad 8$$

با حل معادله فوق ظرفیت گرمایی  $C_V$  و  $C_P$  از فرمول های زیر به دست می آیند:

$$C_V = 12Nk_B D(\frac{\theta_{DE}}{T}) + \underbrace{\frac{9Nk_B \frac{\theta_{DE}}{T}}{e^{\frac{\theta_{DE}}{T}} - 1}}_{C_{Vac}} \quad 9$$

$$\underbrace{nk_B \sum_{j=1}^{3N-3} \frac{(\frac{\omega_j}{T})^2 e^{\frac{\omega_j}{T}}}{(e^{\frac{\omega_j}{T}} - 1)^2}}_{C_{Vopt}}$$

$$C_p = (\frac{\partial H}{\partial T})_p. \quad 10$$

## روش نظری و جزئیات محاسبات

برای محاسبه گذار فاز و خواص ترمودینامیکی AIAs، داده های انرژی برحسب حجم باید محاسبه شوند. این داده ها با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۹] به دست آمدند. همچنین محاسبات فونونی مختلف روی فازهای AIAs با این کد محاسباتی انجام شده است. در تمام محاسبات ابتدا به ساکن، انرژی قطع برابر  $8.0 \text{ Ryd}$  و مش یکنواخت  $7 \times 7 \times 7$  در نظر گرفته شده و از تقریب چگالی موضعی (LDA) با شبه پتانسیل های  $\text{Al.pz-vbc.UPF}$  و  $\text{As.pz-UPF}$  استفاده گردیده است. انرژی آزاد غیر تعادلی گیبس از فرمول زیر به دست می آید [۸]:

$$G^*(V; P, T) = E(V) + PV + F_{vib}[\theta_{DE}(V), T] \quad 1$$

که  $E(V)$  انرژی کل هر سلول واحد و  $PV$  مربوط به وضعیت فشار هیدرو استاتیک است  $\theta_{DE}(V)$  دمای دمای-اینشتین و  $F_{vib}$  انرژی آزاد هلمهولتز می باشد که به شکل فرمول زیر نوشته می شود [۱۰]:

$$F_{vib} = E_{sta} + \frac{9}{8} k_B \theta_{DE} + 3Nk_B T \ln(1 - e^{-\frac{\theta_{DE}}{T}}) -$$

$$nk_B D(\frac{\theta_{DE}}{T}) + \sum_{j=1}^{3N-3} \frac{\omega_j}{2} + k_B T (1 - e^{-\frac{\omega_j}{k_B T}}),$$

$N$  تعداد اتم های موجود در فرمول شیمیایی،  $k_B$  ثابت بولتزمن و  $D(\frac{\theta_{DE}}{T})$  انتگرال دمای دمای است.

$\omega_i$  در واقع  $\omega_i(\Gamma)$  بوده که از فرمول زیر به دست می آید:

$$\omega_i(\Gamma) = \omega_i^0(\Gamma) (\frac{V}{V_0})^{\frac{1}{6}} (\frac{B_{sta}}{B_0})^{\frac{1}{2}} (1 - \frac{2P_{sta}}{3B_{sta}}), \quad 3$$

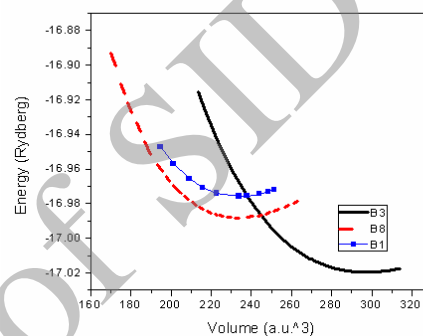
$\omega_i^0(\Gamma)$  بسامد مدهای اپتیکی در راستای  $\Gamma$  در حجم تعادلی است که با محاسبات فونونی به دست می آید.

از فرمول زیر به دست آمده است [۸]:

## نتایج و بحث

## خواص ساختاری

مقادیر ثابت شبکه، مدول کپه‌ای استاتیک و  $B'_0$  از طریق برازش با معادله حالت خطی بیرج-مورناگان به کمک برنامه گیس ۲ به دست آمد. در شکل ۱ نمودار انرژی برحسب حجم سه فاز  $B_3$ ،  $B_8$  و  $B_1$  نشان داده شده است.



شکل ۱. نمودار انرژی برحسب حجم فازهای AIAs.

جدول ۱. خواص ساختاری AIAs در فازهای مختلف.

کارهای تجربی	کارهای نظری	کار حاضر		
				فاز B <sub>3</sub>
		۵,۶۱	a(A°)	
[۱۵] ۵,۶۲	[۱۳] ۵,۷۴۹ و [۱۴] ۵,۷۱۷			
[۲] ۷,۴ ± ۵	[۵] ۷,۶۲۹ و [۱۶] ۶,۴,۰۹	۷,۵۱۲	B <sub>0</sub> (GPa)	
[۲] ۵ ± ۱	[۱۶] ۴,۲۳۷	۴,۱۵	B' <sub>0</sub>	
				فاز B <sub>8</sub>
		۳,۶۸	a(A°)	
		۵,۸۹	c(A°)	
[۳] ۵,۹۵	[۵] ۵,۹۳۳ و [۱] ۵,۹۱۱			
[۳] ۱,۶	[۵] ۱,۵۹۲	۱,۶	c/a	
۱,۰۱ ± ۲,۶ [۳]	[۱] ۹۳,۳ و [۵] ۹۲,۵۹	۹۴,۵	B <sub>0</sub> (GPa)	
۴,۶ ± ۰,۷ [۲] و [۳]	[۵] ۴,۵۲	۴,۲	B' <sub>0</sub>	
-	[۱۷] ۵,۱۹۳	۵,۱۷	a(A°)	فاز B <sub>1</sub>
-	[۱] ۹۱,۵	۹۵	B <sub>0</sub> (GPa)	
-	[۱] ۴,۳	۴,۳	B' <sub>0</sub>	

بر این اساس فشار گذار فاز از فاز  $B_3$  (بلند روی) به فازهای  $B_8$  (NiAs) و  $B_1$  (NaCl) به ترتیب برابر با ۷,۹ GPa و ۱۱,۲ GPa به دست آمد. مقادیر تجربی گزارش شده برای گذار فاز  $B_3$  به  $B_8$  مقادیر مختلفی از ۷ تا ۱۴ گیگا پاسکال را شامل می‌شود [۲ و ۳] ولی برای گذار  $B_3$  به  $B_1$  مقدار تجربی خاصی گزارش نشده است. در جدول ۲ نتایج حاصل از کار حاضر و سایر کارهای نظری و تجربی آورده شده است.

جدول ۲. گذار فازهای AIAs در فازهای مختلف.

تجربی	نظریه‌های دیگر	کار حاضر	گذار فاز
[۲] ۷ ± ۵ [۳] ۱۴,۲	[۱۶] ۹,۱۵ و [۱۸] ۷	۷,۹	$B_3 \rightarrow B_8$ (GPa)
-	[۴] ۸,۸۷۱ و [۱۶] ۱۱,۸۸	۱۱,۲	$B_3 \rightarrow B_1$ (GPa)

مشاهده می‌شود که فاز  $B_3$  نسبت به دو فاز دیگر در سطح انرژی پایین تری قرار دارد این فاز با ساختار بلند روی پایدارتر از سایر فازهاست. در جدول ۱ نتایج حاصل از محاسبات ثابت شبکه، مدول کپه‌ای استاتیک و  $B'_0$  آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود نتایج به دست آمده از کار حاضر در مقایسه با سایر گزارشهای نظری، توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد.

## گذار فاز

می‌دانیم که پایداری فاز زمانی اتفاق می‌افتد که انرژی آزاد گیس کمینه شود و گذار فاز زمانی رخ می‌دهد که انرژی‌های آزاد گیس معادل باشند. از آنجا که محاسبات ما در دمای صفر کلون انجام می‌شود در این صورت داریم  $G = H = E(V) + PV$  که  $H$  آنتالپی

$$\text{و } P = \frac{\partial E}{\partial V} \text{ می‌باشد.}$$

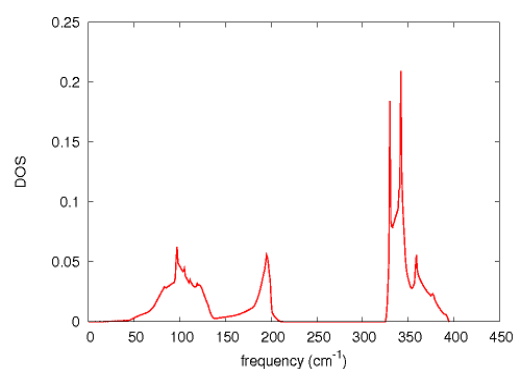
## خواص فونونی

همان‌طور که در بخش روش نظری دیدیم ما برای محاسبات خود به فرکانس مدهای اپتیکی در حجم تعادلی در راستای  $\Gamma$  نیاز داریم از این رو بر آن شدیم تا خواص فونونی  $\text{AlAs}$  در فاز  $B_3$  را بررسی کنیم. در جدول ۳ مقدار مدهای فونونی فاز  $B_3$  در راستاهای  $\Gamma$ ،  $X$  و  $L$  برای کار حاضر و سایر کارهای نظری به همراه نتایج تجربی آورده شده است.

جدول ۳. بسامد مدهای فونونی  $\text{AlAs}$  در فاز  $B_3$  برحسب  $(\text{cm}^{-1})$ .

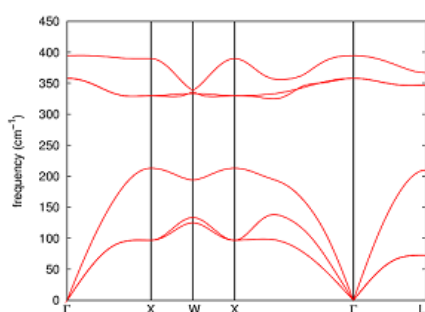
نظری [۱۹]	تجربی [۷۶]	کار حاضر	$\text{AlAs}(B_3)$
۳۶۳	۳۶۱	۳۵۸	$\Gamma_{TO}$
۴۰۰	۴۰۲	۳۹۵	$\Gamma_{TO}$
۹۵	۱۰۹	۹۶	$X_{TA}$
۲۱۶	۲۱۹	۲۱۳	$X_{TA}$
۳۳۷	۳۳۳	۳۳۰	$X_{TA}$
۳۹۳	۳۹۹	۳۹۰	$X_{TA}$
۷۱	-	۷۲	$L_{TA}$
۲۱۲	-	۲۱۲	$L_{LA}$
۳۵۲	-	۳۴۷	$L_{TO}$
۳۷۲	-	۳۶۶	$L_{LO}$

در شکل ۲ نمودار چگالی فونونی و پراکندگی حالت‌های فونونی  $\text{AlAs}$  رسم شده است. شکل الف نمودار چگالی حالت‌های فونونی و شکل ب نمودار پراکندگی فونونی را نشان می‌دهد.



شکل ۲. الف) نمودار چگالی حالت‌های فونونی  $\text{AlAs}$ .

تعداد شاخه‌ها در نمودار پراکندگی فونونی  $\text{AlAs}$  برابر ۶ شاخه می‌باشد که این موضوع با توجه به ساختار بلند روی این ماده و داشتن ۲ اتم در پایه قابل قبول می‌باشد. از طرفی بین شاخه‌های اپتیکی و آکوستیکی، گاف فونونی در محدوده ۲۳۵-۲۱۵  $\text{cm}^{-1}$  مشاهده می‌شود.



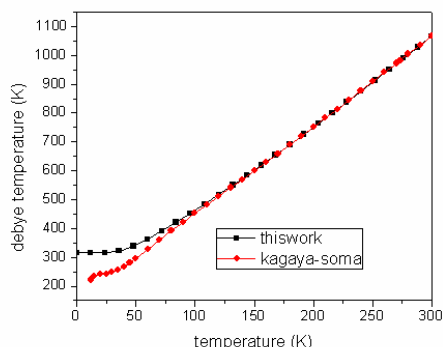
شکل ۲. ب) نمودار پراکندگی فونونی  $\text{AlAs}$ .

## خواص ترمودینامیکی

در شکل ۳ منحنی تغییرات ظرفیت گرمایی در حجم ثابت در بازه دمایی صفر تا ۸۰۰ K و در فشارهای صفر، ۷، ۹ و ۱۸ گیگا پاسکال رسم شده است. نمودار فاز  $B_3$  برای فشارهای صفر و ۷ و فاز  $B_8$  برای فشارهای ۹ و ۱۸ گیگا پاسکال می‌باشند. ظرفیت گرمایی حاصل ارتعاشات یونی است. همان‌طور که انتظار می‌رود در دماهای پایین، رفتار نمودار برای کلیه فشارها متناسب با توان سوم دما یعنی  $T^3$  می‌باشد و در دماهای بالا به حد دولون و پتی میل می‌کند. حد دولون و پتی  $6Nk_B$  بوده و مقدار آن برابر با  $49.9 \text{ J/molK}$  می‌شود که با مقدار اشباع نمودار، سازگاری خوبی دارد.

در شکل ۴ نتایج حاصل از کار حاضر با کمک مدل‌های دبای-اینشتین و دبای-اسلیتر رسم شده و جهت مقایسه، نتیجه گزارش نظری Kagaya Soma [۲۰] نیز آورده شده است. لازم به ذکر است که در مدل دبای-اسلیتر تنها مدهای آکوستیکی لحاظ می‌شود و این خود دلیلی است بر اینکه انتظار داشته باشیم نتایج مدل شبه

هماهنگ دمای-اینشتین نسبت به مدل دمای-اسلیتر بهتر باشد.



شکل ۵. مقایسه تغییرات دمای دمای حاصل از  $C_V$  برحسب دما در کار حاضر و کار Kagaya-Soma.

در جدول ۴ مقادیر ظرفیت گرمایی در فشار ثابت در دماهای ۱۰۰، ۳۰۰، ۶۰۰ و ۸۰۰ کلون آورده شده است. نتایج اندازه‌گیری نشان می‌دهد که با افزایش دما ظرفیت گرمایی در فشار ثابت سریعاً افزایش یافته ولی در دماهای بالاتر از ۵۰۰ کلون به سمت مقادیر حدی میل می‌نماید.

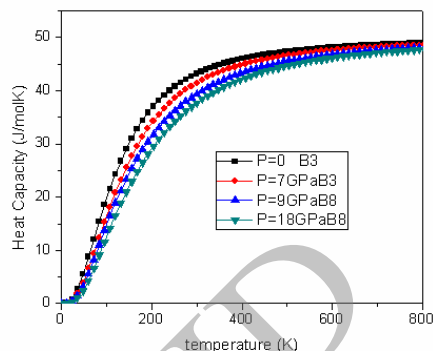
جدول ۴. مقادیر ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت در دماهای مختلف برحسب J/molK.

دما برحسب کلون	کار حاضر	نتایج نظری [۲۳]	نتایج تجربی [۲۴]
۱۰۰	۱۹/۶	-	-
۳۰۰	۴۴/۱	۴۳	۴۵/۸
۶۰۰	۵۰/۷	۵۰/۵	۴۷/۱
۸۰۰	۵۲/۷	۵۲/۵	۴۹

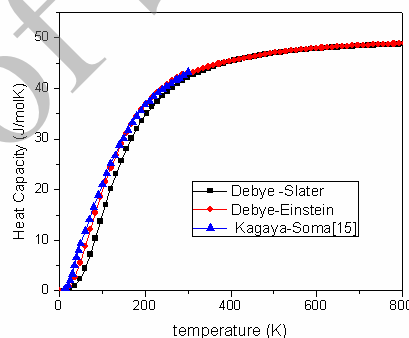
مقایسه نتایج کار حاضر با مقادیر تجربی نشان می‌دهد که با کمک اصول نظریه تابعی چگالی می‌توان خواص ترمودینامیکی مواد را به خوبی مورد بررسی قرارداد.

### نتیجه‌گیری

در این مقاله خواص ساختاری و ترمودینامیکی فازهای  $B_3$ ،  $B_8$  و  $B_{11}$  آلومینیوم آرسناید با روش شبه هماهنگ دمای-اینشتین مورد بررسی قرار گرفت. گذار



شکل ۳. نمودار ظرفیت گرمایی در حجم ثابت برحسب دما برای فازهای  $B_3$  و  $B_8$ .



شکل ۴. تغییرات ظرفیت گرمایی در حجم ثابت با دما در مدل‌های دمای-اینشتین، دمای-اسلیتر و کار Kagaya-Soma.

می‌دانیم که تغییرات ظرفیت گرمایی در دماهای پایین به صورت  $\frac{12}{5} \pi^4 N K_B \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3$  است. ما با استفاده از این رابطه تغییرات دمای دمای برحسب دما را بین کار خود و Kagaya-Soma بررسی نمودیم، که نتایج آن در شکل ۵ مشاهده می‌شود. در دماهای پایین رفتار نمودار Kagaya-Soma رفتاری غیرمتعارف است [۲۱]. از طرفی مقدار دمای دمای حاصل از کار حاضر در نقطه صفر کلون به نتیجه گزارش شده توسط Adachi [۲۲] نزدیک‌تر است.

Massachusetts, 1970, edited by S. P. Keller, J. C. Heusel, F. Stern (U.S. Atomic Energy Commission) New York (1970) 10.

[7] B. Monemar, Fundamental Energy Gaps of AlAs and AlP from Photoluminescence Excitation Spectra *Physical Review B* 8 (1973) 5711.

[8] A. Otero-de-la-Roza, D. Abbasi-Perez, V. Luana, A new version of quasi-harmonic debye model code II models for solid- state thermodynamic, features and implementations, *Computer Physics Communication* 182 (2011) 2232.

[9] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougousis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch, QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials *Journal Physics Condensed Matter* 21 (2009) 395502.

[10] M. Flrez, J.M. Recio, E. Francisco, M. A. Blanco, A. M. Penda's, First-principles study of the rocksalt-cesium chloride relative phase stability in alkali halides, *Physical Review B* 66 (2002) 4112.

[11] E. Francisco, J.M. Recio, M.A. Blanco, A. Martín Penda's, Quantum-Mechanical Study of thermodynamic and bonding properties of MgF<sub>2</sub> *Journal of Physics Chemistry A* 102 (1998) 1595.

[12] E. Francisco, G. Sanjurjo, M.A. Blanco, Atomistic simulation of SrF<sub>2</sub> polymorphs *Physical Review B* 63 (2001) 094107.

[13] S. Rameshkumar, G. Jaiganesh, V. Jayalakshmi, Refractive index of AlAs and

فاز B<sub>3</sub> به B<sub>8</sub> برابر ۷٫۹ GPa و گذار فاز B<sub>3</sub> به B<sub>1</sub> برابر ۱۱٫۲ GPa به دست آمد که در توافق خوبی با دیگر کارهای نظری و تجربی است.

نمودار تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت در محدوده دمایی صفر تا ۸۰۰ کلوین برای فازهای B<sub>3</sub> و B<sub>8</sub> در دماهای پایین رفتاری متناسب با توان سوم دما از خود نشان می‌دهد و در حدود دماهای بالا به حد اشباع دولون و پتی میل می‌نماید. همچنین، مقادیر حاصل از ظرفیت گرمایی در فشار ثابت با مقادیر تجربی همخوانی خوبی نشان می‌دهد.

#### مرجع‌ها

[1] G.C. Liu, Z.W. Lu, B.M. Klein, Pressure-induced phase transformations in AlAs: Comparison between ab initio theory and Experiment, *Physical Review B* 51 (1995) 5678-5682.

[2] R.G. Greene, H. Luo, T. Li, A.L. Ruoff, Phase transformation of AlAs to NiAs structure at high Pressure, *Physical Review Letters* 72 (1994) 2045-2049.

[3] A. Onodera, M. Mimasaka, I. Sakamoto, J. Okumura, K. Sakamoto, Sh. Uehara, K. Takemura, O. Shimomura, T. Ohtani, Y. Fujii, Structural and Electrical Properties Of NiAs-type Compounds Under Pressure *Journal Of Physics And Chemistry Of Solids* 60 (1999) 167-179.

[4] N. Munjal, G. sharma, V. Vyas, K. B. Joshi and B. K. Sharma, Ab-initio Study of Structural and Electronic Properties of AlAs *Philosophical Magazine* 192 (2012) 3101-3112.

[5] L. Xing-Xiu, T. Xiao-Ma, C. Hong-Mei, O. Yi-Fang, D. Yong, The pressure dependences of elastic and lattice dynamic properties of AlAs from ab initio calculations, *Chinese Physics B* 22 (2013) 026201.

[6] A. Onton, In Proceedings of the 10th International Conference on the Physics of Semiconductors, Cambridge,

- phonon dispersion semiconductors, *Physical Review B* 43 (1991) 7231-7242.
- [20] H.M. Kagaya, T. Soma, Specific heat and thermal expansion coefficient of Al<sub>p</sub>Al<sub>s</sub> and Al<sub>s</sub>, *Solid State Communications* 62 (1987) 707-709.
- [21] J.P. Rino, H. Tsuzuki, An interatomic potential for aluminum arsenide: A molecular dynamics study, *Computational Materials Science* 49 (2010) 270–275.
- [22] S. Adachi, GaAs, AlAs and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As: Material parameters for use in research and device applications *Journal of Applied Physics* 58 (1985) 1-26.
- [23] S. Adachi, GaAs and Related Materials, Bulk semiconducting and superlattice properties, World Scientific Publishing, Co. Pte. Ltd. (1999).
- [24] I. Barin, O. Knacke, O. Kubaschewski, Thermochemical Properties of Inorganic Substances, Springer, Berlin-Heidelberg-New York, (1977).
- AlSb compounds: An *ab-initio* study *Indian Journal of Science* 14 (2015) 29-34.
- [14] Y. Mao, X.X. Liang, G.J. Zhao, T.L. Song, Lattice parameters and band structure of ternary mixed crystals Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As from first-principle calculations *Journal of Physics: Conference Series* 490 (2014) 012172.
- [15] W.G. Wyckoff, Crystal Structures 2nd Edition, Krieger, Malabar (1986)
- [16] J. Cai, N. Chen, Theoretical study of pressure-induced phase transition in AlAs: from zinc-blende to NiAs structure *Physical Review B* 75 (2007) 174116.
- [17] S. Froyen, M.L. Cohen, Structural properties of III-V zinc-blende semiconductors under pressure, *Physical Review B* 28 (1983) 3258-3265.
- [18] A. Mujica, R.J. Needs, A. Munoz, First-principles pseudo potential study of the phase stability of the III-V semiconductors GaAs and AlAs, *Physical Review B* 52 (1995) 8881-8892.
- [19] P. Giannozzi, S.D. Gironcoli, P. Pavone, S. Baroni, Ab initio calculation of

Archive

## Ab initio calculations of structural, phase transition, phonon and thermodynamic properties of AlAs

Ali Fazeli Kisomi<sup>1,\*</sup>, Seyed Javad Mousavi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Department Of Physics, Ardabil Branch, Islamic Azad University, Ardabil, Iran

<sup>2</sup>Department Of Physics, Rasht Branch, Islamic Azad University, Rasht, Iran

### Abstract

This paper is an attempt to investigate the structural properties, phase transition, and thermodynamic and phonon properties of AlAs. Quasi-harmonic Debye-Einstein model was used to obtain lattice constant and static Bulk modulus  $B_0$  for  $B_3$ ,  $B_8$  and  $B_1$  phases. These results showed good consistency with experimental results and other theoretical data. Afterwards, the phase transitions of  $B_3$  to  $B_1$  and  $B_3$  to  $B_8$  obtained were equal to 7.9 GPa and 11.2 GPa respectively, which also indicated a good consistency with the theoretical and experimental results. In addition, phonon properties of  $B_3$  phase were compared with experimental data, and the results demonstrated a good consistency with experimental results especially in the gamma point that is the basis of thermodynamic calculations. Furthermore, the diagrams of heat capacity at constant volume and heat capacity at constant pressure were investigated in terms of temperature for  $B_3$  phase, and the results showed their significant consistency with theoretical and experimental results.

**Keywords:** Quasi-harmonic Debye-Einstein model, Thermodynamic properties, Phase transition, Aluminum Arsenide

---

\*Corresponding Author: alif1364@yahoo.com