

## بررسی ویژگی‌های صوتی و گرمایی ایندیوم فسفید با استفاده از روش شبه پتانسیل

حمداله صالحی\*، حسین طولابی نژاد

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز

دریافت: ۱۳۹۹/۰۹/۱۳، پذیرش: ۱۴۰۰/۰۷/۱۱

### چکیده

در این مقاله با توجه به نظریه تابعی چگالی و تقریب شبه‌همانگ و حل معادلات کوهن شم با استفاده از پایه‌های موج تخت ساختار نواری، پاشندگی فونونی؛ تانسور دی‌الکتریک، بار مؤثر بورن، سطح مقطع رامان؛ فروسرخ و ظرفیت گرمای ویژه ایندیوم فسفید در دو ساختار بلند روی (Zb) و سنگ نمکی (Rs) محاسبه شد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهند که این ترکیب در فاز Zb متبلورتر و پایدارتر می‌باشد. بررسی مدهای فونونی وجود مدهای فروسرخ را در هر دو فاز نشان می‌دهد. همچنین مقادیر بارهای مؤثر بورن به مقادیر یونی اسمی نزدیک هستند که بیانگر پیوند یونی در این سامانه است. طیف فونونی محاسبه شده یک گاف بسامدی را در محدوده ۱۷۹ تا ۲۸۸  $\text{cm}^{-1}$  نشان می‌دهد که در این محدوده بازتاب کامل رخ می‌دهد. همچنین ظرفیت گرمایی ویژه در دماهای بالا به یک مقدار مجانبی نزدیک می‌شود که با واقعیات تجربی سازگاری خوبی دارد.

**کلیدواژه‌ها:** ایندیوم فسفید، تانسور دی‌الکتریک، طیف فونونی، تقریب شبه همانگ، گرمای ویژه.

### ۱. مقدمه

برق‌انوری (الکترواپتیک)، نانوفن‌آوری و سایر رشته‌ها تحقیقات تجربی فراوانی روی آن انجام شده است. به دلیل تحرک‌پذیری بالای الکترون‌های این ترکیب در الکترونیک بسامد بالا، توان بالا و همچنین به دلیل گاف نواری مستقیم آن برای وسایل اپتوالکترونیک مثل دیودهای لیزری، لیزرهای فروسرخ، ترانزیستورها و یاخته‌های خورشیدی آزمایشی برای ماهواره‌ها استفاده می‌شود. اخیراً تحقیقاتی روی ترکیبات ایندیوم فسفید برای جایگزینی با سیلیکون در ریزچیپ‌ها صورت گرفته است و می‌تواند در تولید قطعات با بسامدهای بالا، سرعت بالا و توان بالا مورد استفاده قرار گیرد. همچنین ویژگی‌های گرمایی مانند رسانندگی گرمایی و ناهمسانگردی آن نیز در صفحات مختلف با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته است [۳-۶]. نمری و همکاران در سال ۲۰۱۳ با استفاده از اصول اولیه ویژگی‌های ساختاری، الکترونی، ترمودینامیکی و ویژگی‌های گرمایی انبوهه InP و InAs را با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی

ایندیوم فسفید یک ترکیب غیر آلی با فرمول InP می‌باشد. جرم مولکولی این ترکیب ۱۴۵٫۸۰ گرم بر مول و نقطه ذوب آن ۱۰۷۰ درجه سلسیوس می‌باشد. این ترکیب در دمای ۳۰۰ کلوین در فاز مکعبی مرکز سطحی<sup>۱</sup> (fcc) و دارای ساختار بلند روی<sup>۲</sup> با گروه فضایی (۲۱۶)  $F\bar{4}3m$  و در فشار ۲۸ گیگاپاسکال در فاز مکعبی مرکز سطحی و دارای ساختار سنگ نمکی<sup>۳</sup> با گروه فضایی (۲۲۵)  $Fm\bar{3}m$  می‌باشد [۱-۲]. این ترکیب در فاز مکعبی در ساختار Zb نیم‌رسانا با گاف نواری ۱٫۳۴۴ الکترون‌ولت و در ساختار Rs رسانا و بدون گاف نواری می‌باشد. ضریب شکست تجربی این ترکیب ۳٫۱ است. به دلیل خواص عمده و کاربردهای فراوان این ماده در الکترونیک،

\* نویسنده پاسخگو: salehi\_h@scu.ac.ir

<sup>۲</sup> FCC; Face Centered Cubic

<sup>۳</sup> Zincblende

<sup>۴</sup> Rocksolt

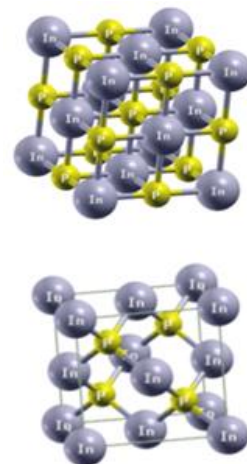
هم‌چنین بسیاری از کمیت‌ها نظیر ثابت دی‌الکتریک، بارهای مؤثر بورن و بسامدهای فونونی با مشتق‌های انرژی کل نسبت به اختلال‌های مختلف ارتباط دارند. بار مؤثر بورن، تعریف دینامیکی از بار اتمی است که توسط بورن ارائه شده است. بار مؤثر بورن، همراه با ثابت دی‌الکتریک الکترونی، حاکم بر برهم‌کنش بلند-برد کولنی مسئول جدایی بین فونون‌های نوری طولی (ل) و عرضی (تی) است [۱۱]. هم‌چنین بارهای مؤثر بورن طبیعت پیوندها از نظر یونی و یا کووالانسی بودن را آشکار می‌کند. تانسور بار مؤثر بورن  $Z_{k,\alpha\beta}^*$  در مرتبه خطی و در غیاب میدان برقی به صورت ضریب تناسب بین مؤلفه  $\beta$  قطبش در یاخته واحد و مؤلفه  $\alpha$  جابه‌جایی اتم‌های متعلق به زیر شبکه K تعریف می‌شود.

علاوه بر این امواج نوری ممکن است توسط فونون‌ها پراکنده شوند و از آن‌ها می‌توان برای مطالعه منحنی‌های پاشندگی جامدات استفاده کرد وقتی که فونون مربوطه صوتی است فرآیند، پراکندگی بریلوئن و وقتی که فونون نوری است فرآیند، پراکندگی رامان نامیده می‌شود. در سال‌های اخیر به‌ویژه پس از پیشرفت لیزر تحقیقات در زمینه پراکندگی رامان و بریلوئن گسترش یافته است. چنین چشمه‌های لیزری، باریکه‌های تکفام با شدت بسیار تولید می‌کنند. از آن‌جا که هر دو پراکندگی رامان و بریلوئن اثرهای غیرخطی هستند و عموماً بسیار ضعیف می‌باشند، باریکه‌های بسیار با شدت بالا نیاز است تا بتوان یک علامت نسبتاً قوی مشاهده کرد. همین‌طور باریکه‌های بسیار تکفام لازم است تا بتوان علامت‌های پراکنده را به خوبی از هم تفکیک کرد. هم‌چنین وقتی یک تابش نور فروسرخ بر یک بلور یونی می‌تابد، میدان برقی تابش سبب می‌شود تا یون‌های بار مخالف به جهت‌های مختلف کشیده شوند که همین سبب ارتعاش در ناحیه نوری می‌گردد یعنی تابش پرتوهای فروسرخ عامل انگیزش در سهم نوری بلور می‌شوند [۱۲].

با توجه به این‌که بررسی مدهای فونونی می‌تواند پایداری یا عدم‌پایداری ساختار را بیان کند و این پایداری به ما در مورد پیش‌بینی انتقال صوتی و گرما کمک می‌کند.

با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی مورد بررسی قرار دادند و وابستگی ثابت شبکه، مدول حجمی، گاف نواری، دمای دمای و ظرفیت گرمایی با درصد x مورد بررسی قرار گرفت [۷]. در سال ۲۰۲۰ جان جی و همکاران با استفاده از اصول اولیه و نرم‌افزار کاستپ<sup>۱</sup> و تقریب شیب تعمیم‌یافته برای محاسبه پتانسیل تبادل-همبستگی، ویژگی‌های مکانیکی، ساختاری، ناهمسانگردی کشسانی، پایداری، الکترونی و گرمایی ترکیبات  $XP(X=Al, Ga, In)$  را مورد مطالعه و بررسی قرار دادند. نتایج به‌دست آمده پژوهش آن‌ها با نتایج به‌دست آمده در این مقاله سازگاری دارد [۸].

علاوه بر این در سال ۲۰۱۸ باریا و همکاران ویژگی‌های الکترونی، ساختاری و نوری ایندیوم فسفید تحت فشار را با استفاده از روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل و تقریب‌های شیب تعمیم‌یافته و چگالی موضعی با کد محاسباتی وین۲کی<sup>۲</sup> مورد بررسی قرار دادند و گاف نواری را در تقریب شیب تعمیم‌یافته ۰/۳۹ الکترون‌ولت و در تقریب چگالی موضعی ۰/۵۱۶ الکترون‌ولت به‌دست آوردند که با مقدار تجربی ۱/۴ الکترون‌ولت اختلاف زیادی دارد [۹]. در شکل ۱ شکل بلوری ایندیوم فسفید توسط نرم‌افزار ایکس کریسندن<sup>۳</sup> رسم شده است [۱۰].



شکل ۱ بلور ایندیوم فسفید در فاز مکعبی، شکل سمت راست ساختار Rs و شکل سمت چپ ساختار Zb.

<sup>4</sup> LO  
<sup>5</sup> TO

<sup>1</sup> Castep  
<sup>2</sup> Wien2k  
<sup>3</sup> xcrystden

تخت بهبود یافته قابل تنظیم می‌باشد. شبیه‌سازی‌ها یا محاسباتی که کوانتوم اسپرسو می‌تواند انجام دهد موارد زیادی را شامل می‌شود.

برای شروع محاسبات اول باید فایل ورودی برنامه را که شامل اطلاعات اولیه مربوط به ساختار ترکیب، مانند شبه‌سنتج‌های شبکه، مشخصات اتم‌های ترکیب هم‌چون جرم اتمی و شبه پتانسیل مربوط به آن و نوع اتم از لحاظ مغناطیسی و غیرمغناطیسی بودن، نوع ساختار شبکه<sup>۲</sup> سامانه مورد بررسی و مکان اتم‌ها می‌باشد، آماده کرد.

هم‌چنین برای قسمت فونونی آن از دستور پی‌اچ.ایکس<sup>۲</sup> استفاده شده است؛ توسط این برنامه و با استفاده از ویژه حالت‌های هم‌گرا شده به‌دست آمده توسط پی‌دابلیو.ایکس<sup>۳</sup>، مدهای بسامد فونونی دستگاه در بردارهای  $q$  مختلف محاسبه می‌شوند.

از آن‌جا که در روش تابعی چگالی با روش موج تخت حجم محاسبات بالا است، شبه پتانسیلی که بتواند خواص بلور را توصیف نماید و هم‌چنین حجم محاسبات را نیز کاهش دهد، بسیار با اهمیت است. در این مطالعه برای ساخت شبه پتانسیل عناصر تشکیل دهنده این ترکیب از روش شبه پتانسیل بار پایسته استفاده می‌شود. الکترون‌های ظرفیت در این ترکیب برای اتم  $\text{In}$ ،  $(\delta s^2, \delta p^1)$  و برای اتم  $P$ ،  $(3s^2, 3p^2)$  می‌باشند. ثابت شبکه‌ای که در این محاسبات از آن استفاده شده است در ساختار  $Zb$  برابر با  $11,092(a.u.)$  و در ساختار  $Rs$  برابر با  $9,84(a.u.)$  می‌باشد [۱۴]. همگرایی بر مبنای انرژی قرار داده شد که در فاز  $Zb$  با هشت چرخه و با دقت  $2 \times 10^{-7}$  ریدبرگ و در فاز  $Rs$  با پنج چرخه و با دقت  $5 \times 10^{-8}$  همگرایی حاصل شد. برای رسیدن به این همگرایی در فاز  $Zb$ ،  $437$  موج تخت و در فاز  $Rs$ ،  $317$  موج تخت تولید شده است. نمونه برداری از منطقه بریلون با یک توزیع  $8 \times 8 \times 8$  و با روش مונخورست-پک صورت گرفته است [۱۵].

هم‌چنین در بسامدهای بالا، سرعت گروه و سرعت فاز مساوی نیستند اما هر دو سرعت تابعی از بسامد می‌باشند این پدیده زمانی رخ می‌دهد که نور به بلوری تابیده و

هم‌چنین با توجه به گاف فونونی می‌توان از آن به‌عنوان یک صافی (متغیر مکانیکی) استفاده نمود، لذا اهمیت این محاسبات پیش‌بینی پایداری ساختار و هم‌چنین توان استفاده از آن برای انتقال صوتی و گرما است. که این خود در راستای مباحث صوتی و انتقال آن است.

بنابر اطلاعات موجود تاکنون ویژگی‌های فونونی و گرمایی ترکیب ایندیوم فسفید با استفاده از روش شبه پتانسیل مورد بررسی قرار نگرفته است. لذا با توجه به این که این ترکیب کاربردهای زیادی در صنایع الکترونیکی و لیزرهای فروسرخ دارد، نویسندگان را بر این داشت که درباره خواص ساختاری، گرمایی و فونونی این ترکیب تحقیق و بررسی انجام شود. در این مقاله محاسبات روی خواص ساختاری، فونونی و گرمایی مانند ظرفیت گرمایی و آنتالپی ترکیب ایندیوم فسفید صورت گرفته است که شامل محاسبه ساختار نوارهای انرژی، مدهای فونونی، بار مؤثر بورن، ثابت دی‌الکتریک، آنتروپی و ظرفیت گرمایی ویژه می‌باشد. این محاسبات با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو و با روش شبه پتانسیل انجام شده است.

## ۲. مواد و روش‌ها

محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی و حل معادلات کوهن-شم با استفاده از پایه‌های موج تخت، توسط کد محاسباتی پی‌دابلیو.اس سی‌اف<sup>۱</sup> انجام می‌گیرد [۱۳]، که به زبان برنامه‌نویسی فورترن ۹۰ نوشته شده و تحت سامانه عامل لینوکس قابل اجرا می‌باشد. اساس نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو نظریه تابعی چگالی و حل خودسازگار معادلات کوهن-شم به روش موج تخت است. از طرفی به جای استفاده از پتانسیل از روش جدیدتر و سریع‌تر شبه پتانسیل استفاده می‌کند. این کد محاسباتی در سال ۲۰۰۲ توسط بارونی و همکاران تحت عنوان موج تخت معرفی شد. نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو می‌تواند برای هر ساختار بلوری یا آلیاژ و نیز برای ترکیبات فلزی، نیم‌رساناها و حتی عایق‌ها مورد استفاده قرار گیرد. در این بسته نرم‌افزاری، تفکیک توزیع هسته‌های اتمی به وسیله شبه پتانسیل‌های بار پایسته یا فوق نرم و یا به وسیله امواج

<sup>۲</sup> ph.x

<sup>۳</sup> pw.x

<sup>۱</sup> Pwscf

ثابت است.

تابع ترمودینامیکی آنتالپی با استفاده از رابطه زیر بیان می‌شود [۱۳]:

$$H = E + PV \quad (3)$$

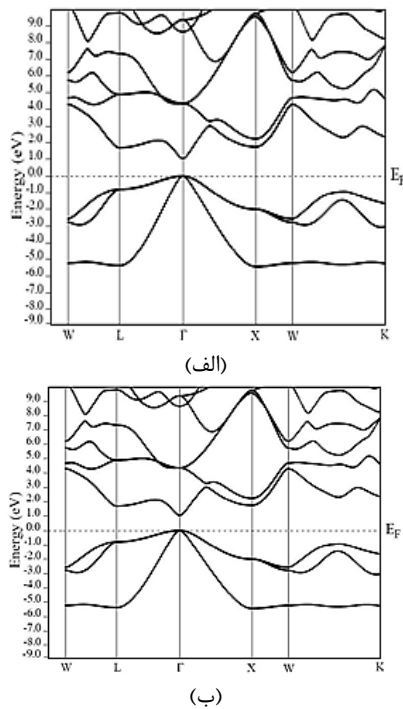
که در آن  $H$  آنتالپی،  $P$  فشار و  $V$  حجم یاخته می‌باشد. تانسور بار مؤثر بورن  $Z_{k,\alpha\beta}^*$  در مرتبه خطی و در غیاب میدان برقی به صورت ضرب تناسب بین مؤلفه  $\beta$  قطبش در یاخته واحد و مؤلفه  $\alpha$  جابه‌جایی اتم‌های متعلق به زیر شبکه  $K$  تعریف می‌شود. هم‌چنین این ضرب رابطه خطی بین نیروی وارد بر اتم و میدان برقی ماکروسکوپی را توصیف می‌نماید [۱۱].

$$Z_{k,\alpha\beta}^* = \Omega \cdot \frac{\partial P_{\text{mac},\beta}}{\partial \tau_{k\alpha}(q=0)} = \frac{\partial F_{k,\alpha}}{\partial \varepsilon_{\beta}} \quad (4)$$

### ۳. نتایج

#### ۳-۱. ساختار نواری

ساختار نواری ایندیوم فسفید در راستای خطوط تقارنی مختلف در شکل ۲ بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپینی و با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپینی رسم شده است.



شکل ۲ ساختار نواری ایندیوم فسفید؛ (الف) بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپینی و (ب) با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپینی.

ضریب شکست بلور تابعی از بسامد باشد این پدیده به پاشندگی معروف است. هم‌چنین تعداد مدهای ممکن در یک گستره  $\omega$  را چگالی حالت‌های  $\omega$  می‌نامند و آن را با  $d\omega$  نشان می‌دهند. علاوه بر این تعداد شاخه‌ها در منحنی پاشندگی بستگی به تعداد اتم‌های پایه دارد. اگر پایه  $p$  اتمی باشد تعداد کل شاخه‌ها  $3p$  است. از این تعداد تنها سه مورد صوتی و از این سه مورد همیشه دو شاخه عرضی و یک شاخه طولی است. تعداد شاخه‌های نوری نیز  $3(p-1)$  است که از این تعداد  $(p-1)$  شاخه طولی و  $2(p-1)$  عرضی می‌باشد. تعداد مدهای نوسان اتم‌ها برابر با تعداد درجات آزادی سامانه می‌باشد. هر مد نوسان با  $\omega(k)$  و نوع قطبش آن مشخص می‌شود. هم‌چنین نوع پاشندگی مدهای فونونی اطلاعات مفیدی در مورد پایداری ساختار مواد می‌دهند که از طریق محاسبات قابل دسترسی هستند.

هم‌چنین در تقریب شبه‌همانگ (کیواچ‌ای) انرژی آزاد هلمهولتز از رابطه (۱) به دست می‌آید [۱۶]:

$$F(V, T) = U(V) + \frac{1}{2} \sum_{q,j} \hbar \omega_j(q, V) + K_B T \sum_{q,j} \ln \{1 - \exp[\hbar \omega_j(q, V) / K_B T]\} \quad (1)$$

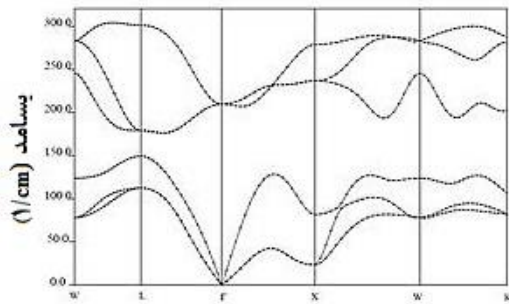
که در آن جمله اول انرژی شبکه، جمله دوم توزیع انرژی نقطه صفر و جمله سوم توزیع نوسانی می‌باشد. از رابطه (۱) و قوانین ترمودینامیکی می‌توان ویژگی‌های گرمایی از جمله انرژی نوسانی، آنتروپی، ظرفیت گرمایی و غیره را به دست آورد.

از طرف دیگر با توجه به این‌که اتم‌ها در یک جامد حول نقطه تعادل شبکه‌ای خود در حال ارتعاش هستند. این ارتعاشات در هر درجه حرارتی حتی نزدیک صفر مطلق نیز اتفاق می‌افتد و نقش عمده‌ای را در خواص گرمایی مواد ایفا می‌کنند. یکی از ویژگی‌های گرمایی جامدات ظرفیت گرمایی ویژه شبکه است. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۷]:

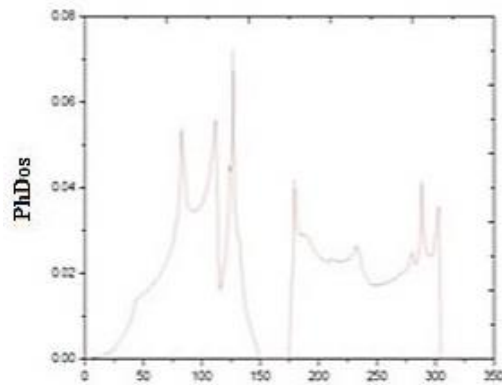
$$C_v = T \Sigma \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_v = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_v \quad (2)$$

که در آن  $T$  دمای مطلق،  $S$  آنتروپی و  $U$  انرژی در حجم

<sup>1</sup> QHA

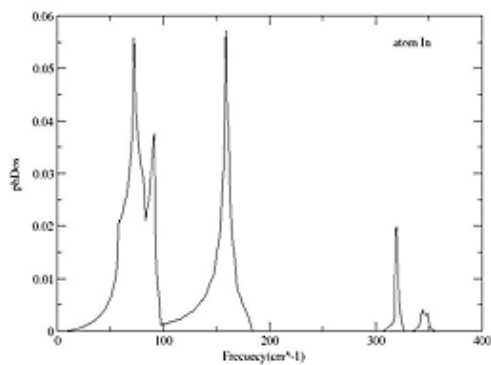


(الف)

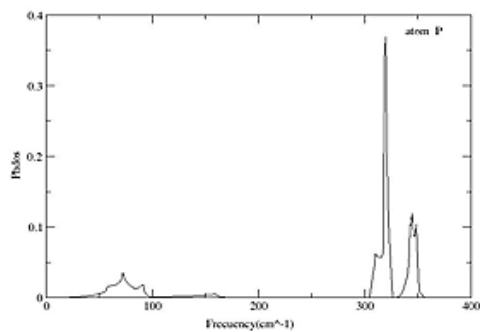


(ب)

شکل ۴ (الف) نمودار پاشندگی فونونی و (ب) چگالی مُدهای فونونی در فاز Rs.



(الف)



(ب)

شکل ۵ نمودار چگالی حالت‌های فونونی (الف) اتم In و (ب) اتم P.

نتایج به دست آمده در این کار در جدول ۱ ارائه شده‌اند.

جدول ۱ گاف نواری به دست آمده در کار حاضر.

کار حاضر	کمیت محاسبه شده
۱٫۴	$E_g(\text{eV})$
مستقیم	نوع گاف در نقطه $\Gamma$

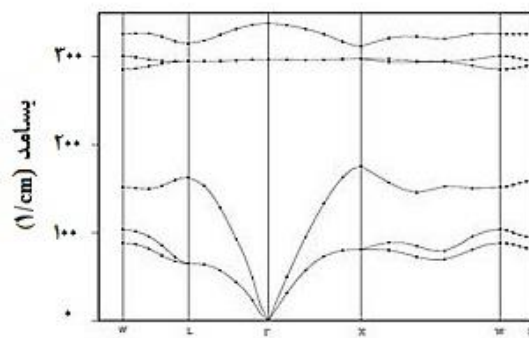
### ۳-۲. مُدهای فونونی

نمودار پاشندگی فونونی ایندیوم فسفید در فاز بلندروی در شکل ۳ و در فاز نمک سنگی در شکل ۴ در راستای خطوط تقارنی رسم شده‌اند.

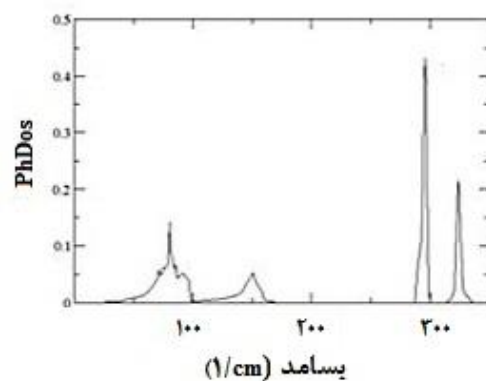
علاوه بر این نمودار ۵ چگالی حالت‌های فونونی اتم In و اتم P در بازه‌ی ۰ تا ۴۰۰  $\text{cm}^{-1}$  را نشان می‌دهد.

### ۳-۳. ویژگی‌های گرمایی

در نمودار ۶ رابطه بین آنتروپی و انرژی آزاد نوسانی بر حسب دما نشان داده شده است.



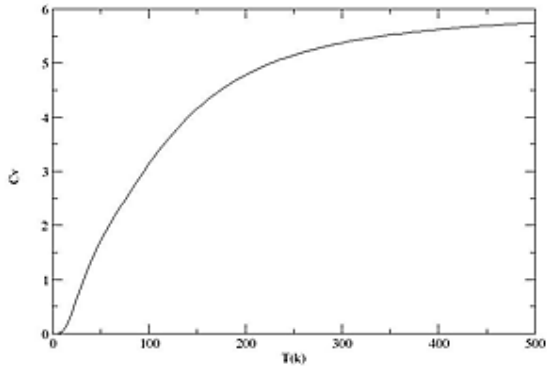
(الف)



(ب)

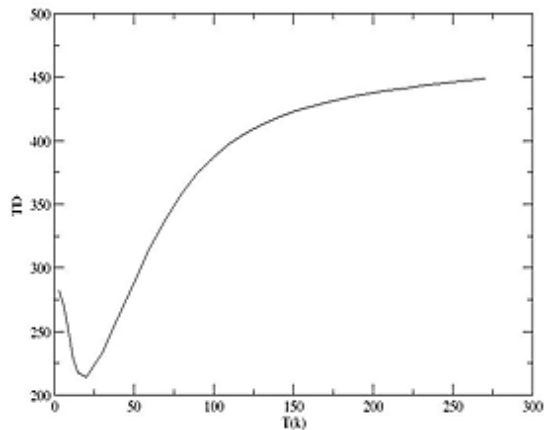
شکل ۳ (الف) نمودار پاشندگی فونونی و (ب) چگالی مُدهای فونونی در فاز ZnS.

نمودار ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت بر حسب دما در شکل ۸ نشان داده شده است.



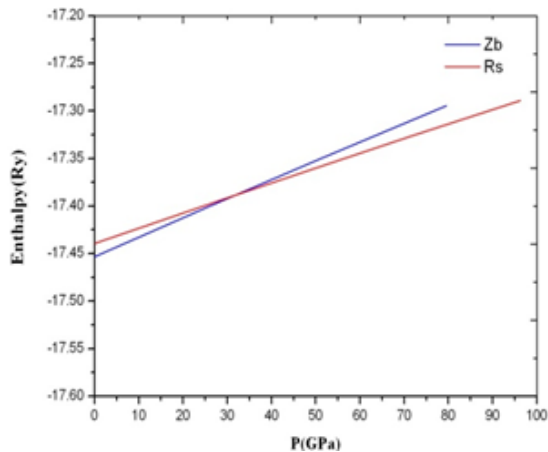
شکل ۸ نمودار ظرفیت گرمایی ویژه بر حسب دما در ایندیوم فسفید.

شکل ۹ دمای دمای،  $\theta_D$ ، را بر حسب دما نشان می‌دهد.

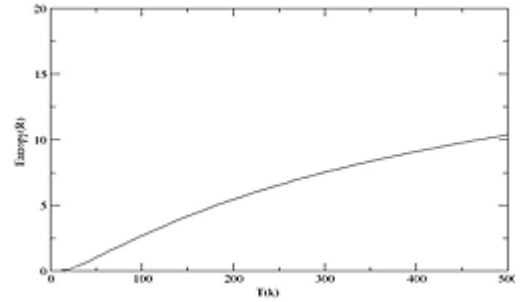


شکل ۹ نمودار دمای دمای بر حسب دما در ایندیوم فسفید.

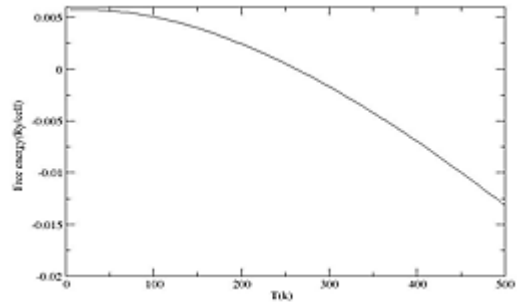
نمودار ۱۰ مقایسه آنتالپی دو فاز را نشان می‌دهد.



شکل ۱۰ مقایسه نمودار آنتالپی در ساختار Zb و Rs.



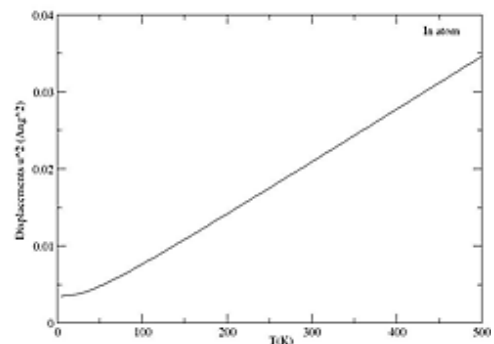
(الف)



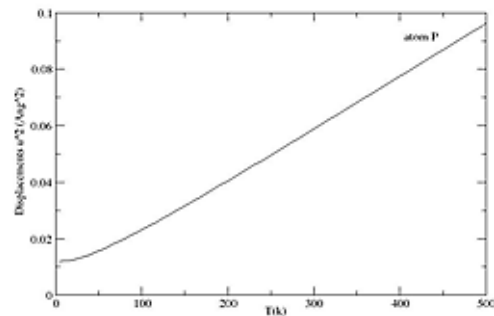
(ب)

شکل ۶ (الف) نمودار انرژی بر حسب دما و (ب) نمودار انرژی آزاد بر حسب دما در ترکیب ایندیوم فسفید.

شکل ۷ میانگین مربع جابه‌جایی را برای اتم In و اتم P نشان می‌دهد.



(الف)



(ب)

شکل ۷ (الف) نمودار میانگین مربع جابه‌جایی برای اتم In و (ب) نمودار میانگین مربع جابه‌جایی در اتم P بر حسب دما.

نتایج به دست آمده برای سطح مقطع رامان و سطح مقطع فروسرخ ترکیب ایندیوم فسفید در فاز بلندروی در جدول ۴ ارائه شده‌اند.

جدول ۴ نتایج به دست آمده برای سطح مقطع رامان و سطح مقطع فروسرخ در ترکیب ایندیوم فسفید.

بسامد $\omega$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	سطح مقطع رامان [ $(D/A)^2/\text{amu}$ ]	سطح مقطع فروسرخ ( $A^2/\text{amu}$ )
۷,۵۵	۰,۰۰۰۱	۰
۲۹۶,۴۹	۱۰۳,۰۹۳۹	۶,۲۲۱۱

#### ۴. بحث

در این مقاله ویژگی‌های ساختاری، فونونی و ترمودینامیکی ترکیب ایندیوم فسفید (InP) در فاز بلندروی و نمک سنگی با استفاده از نظریه تابعی چگالی اختلالی و نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو صورت گرفته است. از ساختار نواری می‌توان اطلاعاتی در مورد ماهیت بلور از لحاظ فلزی یا غیر فلز بودن، از اندازه گاف انرژی در صورت وجود خواص دیگر را می‌توان به دست آورد. ساختار نواری ایندیوم فسفید در شکل ۱ بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپینی و با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپینی رسم شده است. در این محاسبات از ۳۲۰ نقطه استفاده شده که با روش خود-سازگار به همگرایی رسیده‌اند. همگرایی بر مبنای انرژی قرار داده شده که با هشت چرخه و با اختلاف انرژی از مرتبه  $10^{-7} \times 2$  ریدبرگ همگرایی حاصل شد. در این شکل انرژی فرمی به عنوان مبدأ مختصات و مقیاس انرژی بر حسب الکترون ولت می‌باشد. همان‌طور که از شکل ۱ مشخص است نوارهای انرژی، تراز فرمی را قطع نکرده‌اند و دارای یک گاف مستقیم در نقطه  $\Gamma$  به اندازه  $1/4$  الکترون‌ولت هستند. هم‌چنین مشاهده می‌شود که تأثیر اسپین در محاسبات قابل ملاحظه نیست. علاوه بر این نتایج به دست آمده در این کار در جدول ۱ ارائه شده‌اند. نتایج نظری ناشی از کار دیگران گاف نواری را به صورت ۰,۶۷ الکترون‌ولت [۱۸]، ۰,۴۸ الکترون‌ولت [۱۹] و ۰,۳۹ الکترون‌ولت [۹] به دست آورده‌اند که نتایج ناشی از این کار سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارد. هم‌چنین نتایج ناشی از کار تجربی دیگران طبق مرجع [۲۰]، ۱,۳۴۴ الکترون‌ولت و طبق مرجع [۲۱]، ۱,۳۵ الکترون‌ولت

۳-۴. محاسبه تانسور دی‌الکتریک و بار مؤثر بورن  
تانسور دی‌الکتریک نقطه شروع مناسبی برای دستیابی به سایر خواص نوری است. نتایج به دست آمده از محاسبات برای بارهای مؤثر بورن دو اتم مستقل ایندیوم فسفید در جدول ۲ آورده شده است.

جدول ۲ بار مؤثر بورن و بار اسمی یونی در ایندیوم فسفید.

اتم	بار مؤثر بورن	بار اسمی یونی
In	۲,۵۶	+۳
P	-۲,۵۶۵۷	-۳

$$Z^*(\text{In}) = \begin{pmatrix} 2,56 & 0 & 0 \\ 0 & 2,56 & 0 \\ 0 & 0 & 2,56 \end{pmatrix},$$

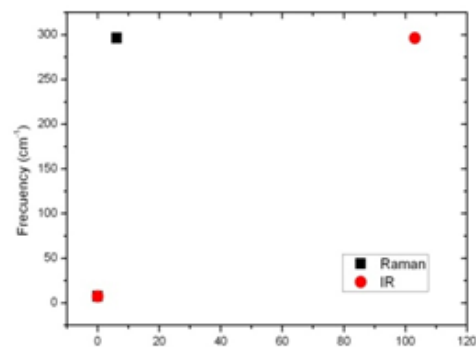
$$Z^*(\text{P}) = \begin{pmatrix} -2,56 & 0 & 0 \\ 0 & -2,56 & 0 \\ 0 & 0 & -2,56 \end{pmatrix}$$

#### ۳-۵. پراکندگی رامان و جذب فروسرخ

نتایج به دست آمده در جداول ۳ و ۴ آورده شده‌اند. هم‌چنین شکل ۱۱ بسامدهای مربوط به رامان و فروسرخ را نشان می‌دهد. نتایج به دست آمده برای پراکندگی رامان و قطبش‌پذیری ترکیب ایندیوم فسفید در فاز بلندروی در جدول ۳ آورده شده است.

جدول ۳ نتایج به دست آمده برای رامان و قطبش‌پذیری ترکیب ایندیوم فسفید.

اتم	رامان ( $\text{a.u}^{-1}$ )	قطبش‌پذیری ( $\text{A}^2$ )
In	۱,۴۳۹۹	۳۶,۳۱۷۰
P	-۱,۴۳۸۶	



شکل ۱۱ سطح مقطع رامان و فروسرخ.



گرفت به خاطر قرار گرفتن اتم‌های فسفر در وجوه شبکه مکعبی مرکز سطحی باشد. هم‌چنین عدم وجود مدهای بسامدی منفی در شکل‌های ۳ و ۴ بیانگر پایداری ساختار این ترکیب است که سازگار با دیگر نتایج هستند. هر چه نمودار پاشندگی فونونی ترکیب در بسامدهای خاص دارای خطوط مستقیم و با انحنای کم‌تری باشد، مشارکت فونون‌ها با آن بسامد کم‌تر خواهد بود و در نتیجه نقش مؤثری در انتقال امواج صوتی و گرما نخواهد داشت که مشاهده می‌شود در بسامدهای حدود ۳۰۰ به بالا برای فاز بلندروی این ترکیب اتفاق می‌افتد.

امواج نوری ممکن است توسط فونون‌ها پراکنده شوند و از آن‌ها می‌توان برای مطالعه منحنی‌های پاشندگی جامدات استفاده کرد وقتی که فونون مربوطه صوتی است فرآیند، پراکندگی بریلونن و وقتی که فونون نوری است فرآیند، پراکندگی رامان نامیده می‌شود. در سال‌های اخیر به ویژه پس از پیشرفت لیزر تحقیقات در زمینه پراکندگی رامان و بریلونن گسترش یافته است. چنین چشمه‌های لیزری، باریکه‌های تکفام با شدت بسیار تولید می‌کنند. از آن‌جا که هر دو پراکندگی رامان و بریلونن اثرهای غیرخطی هستند و عموماً بسیار ضعیف می‌باشند، باریکه‌های بسیار با شدت بالا نیاز است تا بتوان یک علامت نسبتاً قوی مشاهده کرد. همین‌طور باریکه‌های بسیار تکفام لازم است تا بتوان علامت‌های پراکنده را به خوبی از هم تفکیک کرد. هم‌چنین وقتی یک تابش نور فروسرخ بر یک بلور یونی می‌تابد، میدان الکتریکی تابش سبب می‌شود تا یون‌های بار مخالف به جهت‌های مختلف کشیده شوند که همین سبب ارتعاش در ناحیه نوری می‌گردد یعنی تابش پرتوهای فروسرخ عامل انگیزش در بخش نوری بلور می‌شوند.

نتایج برای فاز Zb نشان می‌دهند در نقطه  $\Gamma$  سه مد  $T_2$ ،  $G_{15}$  و  $P_4$  در بسامدهای  $7/55$  و  $296/49$   $cm^{-1}$  هم‌زمان فعال فروسرخ و رامان می‌باشند. این مدها مربوط به گروه نقطه‌ای ( $43m$ )  $T_d$  هستند. از این نتایج می‌توان نتیجه گرفت که ترکیب ایندیوم فسفید در فاز Zb دارای پیوند کووالانسی می‌باشد. زیرا تابش پرتوهای فروسرخ عامل برانگیختگی در بخش نوری بلور می‌شوند. تقریباً تمامی ترکیباتی که پیوند کووالانسی دارند، اعم از آلی یا

می‌باشد که معمولاً در بیش‌تر مراجع مقدار تجربی گاف نواری  $1/344$  الکترون‌ولت به‌دست آمده است و کار حاضر با این مقدار مقایسه شده و درصد اختلاف با مقدار تجربی  $4/1$  می‌باشد. در این جدول مشهود است که محاسبات با استفاده از شبه پتانسیل به نتایج تجربی نزدیک‌تر هستند. در شکل‌های ۳ و ۴ که نمودار پاشندگی فونونی در فاز بلندروی و نمک سنگی رسم شده است نشان می‌دهد که این ترکیب در محدوده بسامدی  $179$  تا  $288$   $cm^{-1}$  دارای یک منطقه ممنوعه است که یک گاف بسامدی می‌باشد. امواج در این ناحیه به شدت تنکش (ضعیف) می‌شوند و نور نمی‌تواند از بلور عبور کند و بلور در این محدوده بازتاب کامل دارد. بنابراین ایندیوم فسفید به‌عنوان صافی مکانیکی گذر عمل می‌کند. هم‌چنین چگالی مدهای فونونی در شکل ۳ صحت نمودار پاشندگی فونونی را تأیید می‌کند. در نمودار چگالی حالت‌های فونونی در بسامدهای  $288$ ،  $77$  و  $312$   $cm^{-1}$  نقاط تکین وان-هوف مشاهده می‌شوند که در این محدوده بسامدها، سرعت گروه صفر و موج بازتابی در بیشینه حالت خود می‌باشد. از طرف دیگر با توجه به شکل‌های ۳ و ۴ که منحنی پراکندگی فونونی ساختار بلندروی و نمک سنگی را نشان می‌دهد و این که تعداد مدهای نوسان اتم‌ها برابر با تعداد درجات آزادی سامانه می‌باشند. در این ترکیب با داشتن دو اتم در یاخته واحد، شش مد نوسان وجود دارد. از این تعداد سه مد صوتی و سه مد نوری هستند. از سه مد صوتی دو شاخه آن عرضی و یک شاخه آن طولی و مدهای نوری نیز به دو شاخه عرضی و یک شاخه طولی تقسیم می‌شوند.

نتایج به‌دست آمده نشان می‌دهند در فاز Zb در محدوده کم‌تر از  $182$   $cm^{-1}$  اتم In بیش‌ترین سهم مربوط به مدهای صوتی را دارا می‌باشد اما اتم P در بازه بسامدهای بیش‌تر از  $303$   $cm^{-1}$  بیش‌ترین سهم مربوط به مدهای نوری را شامل می‌شود و در فاز Rs در محدوده کم‌تر از  $150$   $cm^{-1}$  اتم In بیش‌ترین سهم مربوط به مدهای صوتی را دارا می‌باشد اما اتم P در بازه بسامدهای بیش‌تر از  $175$   $cm^{-1}$  بیش‌ترین سهم مربوط به مدهای نوری را شامل می‌شود. هم‌چنین با مقایسه نتایج به‌دست آمده برای هر دو فاز مشاهده می‌شود که در فاز Rs سهم اتم P در مدهای صوتی بیش‌تر شده است که می‌توان نتیجه



میانگین مربع جابه‌جایی در ۳۰۰ کلوین برای In و P به ترتیب ۰٫۰۵۸، ۰٫۱۹۵ (Ang<sup>۲</sup>) می‌باشند.

هم‌چنین با توجه به شکل ۸ همان‌طور که انتظار می‌رود با افزایش دما آنتروپی در حال افزایش است و در نتیجه ظرفیت گرمایی ویژه نیز باید افزایش یابد. در دماهای پایین‌تر ظرفیت گرمایی به‌طور قابل ملاحظه‌ای افت می‌کند و با نسبت  $T^3$  رفتار می‌کند که با واقعیات تجربی سازگاری دارد و به ازای مقادیر بزرگ T مقدار مجانبی برابر با ۵٫۷ ژول بر مول در کلوین است. این مقدار با نتایج تجربی در دماهای بالا یعنی مقدار  $C_V = 3R = 6$  سازگاری خوبی دارد. مقدار ظرفیت گرمایی ویژه در ۶ کلوین به سرعت در حال افزایش می‌باشد. شکل ۹ دمای دبی،  $\theta_D$ ، را بر حسب دما نشان می‌دهد. کم‌ترین مقدار در ۱۸ کلوین رخ می‌دهد که نسبت به مقدار محاسبه شده توسط (پیسبرگن)<sup>۱</sup>، ۱۷ کلوین، حدود ۵٫۸ درصد اختلاف دارد. مقدار  $\theta_D$  در ۳۰۰ کلوین برابر ۴۰۳٫۶۴ به دست آمد [۲۲]. این کمیت با بسامد بیشینه ارتعاشی اتم‌ها متناسب است، از مقایسه با یک سامانه ارتعاشی ساده مشخص می‌شود که بسامد بالا و در نتیجه  $\theta_D$  زیاد، حاکی از آن است که شبکه‌ای موجود است که در آن نیروهای اتمی بسیار قوی و اتم‌ها سبک‌اند.  $\theta_D$  را می‌توان به منزله دمای دانست که به ازای آن تمام نوسانگرهای با بسامد بیشینه برانگیخته می‌شوند.

با مقایسه نمودار آنتالپی با دیگر ساختارهای احتمالی این ترکیب می‌توان فشاری که در آن گذار فاز رخ می‌دهد را تعیین کرد. نتایج به دست آمده برای آنتالپی در این ترکیب و مقایسه دو فاز بیانگر آن است که در یک فشار مشخص گذار فازی، رخ می‌دهد. با توجه به شکل ۱۰ مشاهده می‌شود که در فشار ۲۹٫۲ گیگاپاسکال، ترکیب ایندیوم فسفید از فاز Zb به فاز Rs گذار می‌کند و فشار گذار ( $P_T$ ) برابر با ۲۹٫۲ گیگاپاسکال می‌باشد. در حالی که نتایج به دست آمده در کارهای نظری برابر با ۱۰٫۲۱ گیگاپاسکال [۱۰]، ۷٫۳۵ و ۱۲٫۸ گیگاپاسکال [۱۷] می‌باشند. اما نتایج تجربی در این حالت بیانگر ۹٫۸ و ۲۸ گیگاپاسکال [۱۷] می‌باشد و مشاهده می‌شود که نتایج

معدنی، بسامدهای متفاوتی از پرتو الکترومغناطیسی را در ناحیه فرسرخ، جذب می‌کنند.

هم‌چنین شرط ظهور طیف رامان این است که ترکیب دارای قابلیت قطبی شدن باشد. علاوه بر این نتایج برای فاز Rs بیانگر آن است که در نقطه  $\Gamma$  سه مُد فعال  $G_{15}$ ،  $T_{1u}$  و  $G_4$  در بسامدهای ۰٫۵ و ۲۰۹٫۸  $cm^{-1}$  فعال فرسرخ می‌باشند. این مُدها مربوط به گروه نقطه‌ای  $O_h (m-3m)$  هستند. از این نتایج می‌توان نتیجه گرفت که ترکیب ایندیوم فسفید در این فاز دارای پیوند کووالانسی می‌باشد و در مقایسه با فاز Zb که علاوه بر مُدهای فرسرخ، مُد رامان نیز دارد از پایداری کم‌تری برخوردار است و فاز Zb متبلورتر می‌باشد. هم‌چنین بسامدهای منفی نشان داده در شکل بیانگر بسامدهای موهومی وابسته به مُدهای ناپایدار است. علاوه بر این نمودار چگالی حالت‌های فونونی اتم In و اتم P در بازه ۰ تا ۴۰۰  $cm^{-1}$  در شکل ۵ نشان می‌دهد که در محدوده کم‌تر از ۸۲  $cm^{-1}$ ، اتم In بیش‌ترین سهم مربوط به مُدهای صوتی را دارا می‌باشد اما اتم P در بازه بسامدهای بیش‌تر از ۳۰۳  $cm^{-1}$  بیش‌ترین سهم مربوط به مُدهای نوری را شامل می‌شود.

هم‌چنین انرژی نوسانی نقطه صفر برای ایندیوم فسفید در فشار صفر مقدار ۰٫۰۰۵ (Ry/Cell) به دست آمد. با توجه به نمودار ۶ که رابطه بین آنتروپی و انرژی آزاد نوسانی بر حسب دما است؛ مشاهده می‌شود که مقدار انرژی آزاد از ۶۰ کلوین به سرعت کاهش یافته در حالی که مقدار آنتروپی در ۱۷ کلوین به سرعت افزایش می‌یابد. مقدار آنتروپی در ۳۰۰ کلوین برابر ۷ کالری بر مول در کلوین و مقدار انرژی آزاد نوسانی در ۳۰۰ کلوین برابر (Ry/Cell) ۰٫۰۱۳- می‌باشد. هیچ‌گونه مقدار تجربی در این مورد یافت نشده است که بتوان با آن داده‌ها و ویژگی‌های گرمایی را مقایسه نمود اما مقادیر با چارچوب مفاهیم اولیه سازگاری دارند.

علاوه بر این در شکل ۷ مشاهده می‌شود جابه‌جایی اتم P بیش‌تر از اتم In می‌باشد. این جابه‌جایی‌ها ناشی از اندرکنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها می‌باشد و فاصله بین همسایه‌های In بیش‌تر از همسایه‌های P می‌باشد. مقدار

<sup>1</sup> Piesbergen

دامنه عناصر غیرقطری صفر است که این امر نشان دهنده طبیعت یونی ایندیوم فسفید است. هم‌چنین بسامدهای مربوط به رامان و فروسرخ نیز محاسبه و به دلیل در دست نبودن مقادیر تجربی و یا نظری مقایسه این سامانه امکان پذیر نمی‌باشد.

### ۵. نتیجه‌گیری

با استفاده از نظریه تابعی چگالی و با انتخاب شبه پتانسیل مناسب، ساختار نواری، طیف پاشندگی فونونی، ضریب شکست نوری، تانسور بار مؤثر بورن، چگالی حالت‌های فونونی و تانسور رامان در دو فاز Zb و Rs به دست می‌آیند. هم‌چنین وجود هم‌زمان مدهای فعال فروسرخ و رامان در فاز Zb نشان دهنده پایداری بیش تر این فاز نسبت به فاز Rs است.

نتایج نشان می‌دهند پیوندهای کووالانسی In-P در وجوه ساختار Rs باعث سخت تر شدن این ساختار نسبت به Zb شده است. بارهای مؤثر بورن به مقادیر یونی اسمی نزدیک هستند که بیانگر پیوند یونی در این سامانه است. هم‌چنین ضریب شکست به دست آمده سازگاری خوبی با نتایج تجربی دارند. علاوه بر این نتایج نشان می‌دهند که ایندیوم فسفید مانند یک صافی مکانیکی نوار گذر عمل می‌کند. هم‌چنین انرژی آزاد نوسانی با افزایش دما کاهش می‌یابد و مقدار ظرفیت گرمایی ویژه به مقدار مجانبی ۵/۷ ژول بر مول در کلون نزدیک می‌شود که با واقعیات تجربی سازگاری عالی دارد.

### ۶. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران [اس‌سی‌یو، اس‌پی ۹۹، ۴۹۰] پشتیبانی شد.

### ۷. تضاد منافع

این مطالعه تضاد منافع ندارد.

### فهرست منابع

[1] F. Kalarasse, B. Benecer, A. Mellouki, L. Kalarasse, "Electronic structure of the filled

به دست آمده در این کار (۲۹/۲ گیگا پاسکال) با مقدار تجربی (۲۸ گیگا پاسکال) سازگاری خوبی دارد و اختلاف با مقدار تجربی ۴/۲ درصد می‌باشد.

تابع دی‌الکتریک  $\epsilon(\omega, k)$  گاز الکترونی که در آن وابستگی به بسامد و بردار موج قوی است پیامدهای چشمگیری در مورد ویژگی‌های فیزیکی جامدات در بردارد. تابع دی‌الکتریک  $\epsilon(\omega, k)$  برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار برده می‌شود. طیف نمایی نوری در دهه اخیر به عنوان مهم‌ترین وسیله تجربی برای تعیین ساختار نواری گسترش یافته است. از نظریه تابعی چگالی برای به دست آوردن داده‌های اولیه و از تبدیلات کرامرز-کرونیگ برای محاسبه ثابت‌های نوری استفاده شده است. علاوه بر این با استفاده از نظریه تابعی اختلال، تانسور دی‌الکتریک نوری به صورت زیر محاسبه شد. این تانسور به دلیل وجود تقارن مؤلفه‌های تانسور تابع دی‌الکتریک مساوی و قطری است و در آن  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$  است. این رفتار با گروه نقطه‌ای بلور، مطابقت دارد؛ که مقادیر محاسبه شده در رابطه زیر آورده شده است.

$$\epsilon_{\infty} = \begin{pmatrix} 10.04 & 0 & 0 \\ 0 & 10.04 & 0 \\ 0 & 0 & 10.04 \end{pmatrix} \quad (5)$$

مقدار به دست آمده در کارهای نظری دیگران [۸]، [۹] می‌باشد اما مقدار به دست آمده در این کار ۱۰/۰۴ با مقدار تجربی آن، ۹/۶ [۲۳] سازگاری خوبی دارد. با استفاده از نظریه تابعی اختلالی و تانسور دی‌الکتریک محاسبه شده می‌توان ضریب شکست را نیز محاسبه کرد [۲۳]:

$$n = \sqrt{\epsilon_{\infty}} = \sqrt{10.04} = 3.16 \quad (6)$$

که ضریب شکست محاسبه شده با مقدار تجربی، ۳/۱ [۲۴] سازگاری خوبی دارد و درصد اختلاف ناچیزی (۲/۲ درصد) دارد در حالی که در محاسبات نظری دیگران این مقدار برابر ۳/۵۴۸ [۲۲] و ۲/۹۸ [۹] گزارش شده است که اختلافی حدود ۱۴/۵ درصد با مقدار تجربی دارد.

دینامیکی بودن بار مؤثر بورن به این خاطر است که پاسخ جابجایی اتمی را در نظر می‌گیرد. این محاسبات بیانگر این هستند که عناصر قطری بار مؤثر بورن به دست آمده برای دو اتم کم‌تر از ظرفیت یونی اسمی آن‌ها است و

<sup>1</sup> SCU.SP99.490

- [14] M.Z. Huang, W.Y. Ching, "Calculation of optical excitations in cubic semiconductors. I. Electronic structure and linear response," *Physical Review B*, vol. 47, pp. 9449, 1993.
- [15] M. Hendrik, P. James, "Special points for Brillouin-zone integrations," *Physical Review B*, vol. 13, pp. 5188-5192, 1998.
- [16] S. Wei, A. Zunger, "Predicted band-gap pressure coefficients of all diamond and zincblende semiconductors: Chemical trends," *Physical Review B*, vol. 60, pp. 5404, 1999.
- [17] O. Arbouche, B. Belgoumène, B. Soudini, Y. Azzaz, H. Bendaoud, K. Amara, "First-principles study on structural properties and phase stability of III-phosphide (BP, GaP, AlP and InP)," *Computational Materials science*, vol. 47, pp. 658-692, 2010.
- [18] S.S. Parashari, S. Kumar, S.S. Auluck, "Pressure induced, electronic and optical properties of zincblende InP," *Solid-State Electronics*, vol. 52, pp. 749-755, 2008.
- [19] I. Gorczyca, N. Christensen, M. Alouani, "Calculated optical and structural properties of InP under pressure," *Physical Review B*, vol. 39, pp. 7705-12, 1989.
- [20] U. Sahr, I. Grant, G. Muller, "On Indium Phosphid and Related Materials," IEEE, Japan, ISBN: 0-7803-6700-6, pp. 533-536, 2001.
- [21] S. Adachi, "Band gaps and refractive indices of AlGaAsSb, GaInAsSb, and InPAsSb: Key properties for a variety of the 2-4- $\mu$ m optoelectronic device applications," *Journal of Applied Physics*, vol. 61, pp. 4869, 1987.
- [22] C. Michel, J.M. Guillot, B. Lepley, N. Dupont-Pavlovsky, K. Karnicka-Moscicka, "Plasma and chemical oxides on (n)InP: Optical and electrical characterization," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 16, pp. 2229-2237, 1983.
- [23] C. Kittel, "Introduction to solid state physics," pp. 978-964-01-0387-6, 1983.
- [24] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InP.html>
- [2] B. Branicio, P. Rino, "High-pressure of InP: An ab initio and molecular-dynamics Study," *Applied Physics Letters*, vol. 88, pp. 161919, 2006.
- [3] J.D. Werking, C. Bolognesi, L.D. Change, C. Nguyenand, H. Kroemer, "High-transconductance InAs/AlSb heterojunction field-effect transistors with delta -doped AlSb upper barriers," *IEEE Electron Device Letters*, vol. 13, pp. 164, 1992.
- [4] J.R. Soderstrom, D.H. Chow, T.C. McGill, "New negative differential resistance device based on resonant interband tunneling," *Applied Physics Letters*, vol. 55, pp. 1094, 1989.
- [5] J.P. Rino, P. Branicio, "Physica Status Solidi (B)," vol. 244, pp. 239-43, 2006.
- [6] K.Y. Choi, C.C. Shen, "p/n InP homojunction solar cells with a modified contacting scheme by liquid phase epitaxy," *Journal of Applied Physics*, vol. 63, pp. 1198, 1988.
- [7] O. Nemiri, G. Sebti, Z. Chouahda, H. Meradji, "Structural, electronic, thermodynamic and thermal properties of zinc-blende InP, InAs and their InAs<sub>x</sub>P<sub>1-x</sub> ternary alloys via first principles calculations," *International Journal of Modern Physics B*, vol. 27, 2013.
- [8] J. Miao, C. Chai, W. Zhang, Y. Songand, Y. Yang, "First-principles study on structural, mechanical, anisotropic, electronic and thermal properties of III-phosphides: XP (X = Al, Ga, or In) in the P<sub>6</sub>22," *Phase Materials*, vol. 13, no. 3, pp. 686, 2020.
- [9] A. Baida, M. Ghezali, "Structural, electronic and optical properties of InP under pressure: An ab-initio study," *Computational Condensed Matter*, vol. 18, pp. e00333, 2018.
- [10] <http://www.xcrysden.org>.
- [11] H. Salehi, "Fundamentals of Density Functional Theory," Kerdegar Publication, 2008, (In Persian).
- [12] A.J. Novin Rooz, "Solid State Physics I," pp. 964, Sarafraz Publication, 2002, (In Persian).
- [13] [www.pwscf.org](http://www.pwscf.org).

(Research Article)  
**Investigation of phononic and thermal properties of InP by using pseudopotential method**

**H. Salehi\*, H. Toulabi Nejad**

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz

Received: 2020/12/03, Accepted: 2021/10/03

**Abstract**

In this paper, according to the density functional theory and semiharmonic approximation and solving kohen's equations using plane wave, band structure, phonon scattering; Dielectric tensor, Bourne effective charge, Raman cross-section; We calculated the infrared and specific heat capacity of indium phosphide in two-phase structures on zincblend (ZB) and salt rock (Rs). The results show that this compound is more crystalline and stable in the Zb phase. Examination of phonon modes shows the existence of IR modes in both phases. Also, the effective boron charge values are close to the nominal ion values, which indicates the ion bond in this system. The calculated phonon spectrum shows a frequency gap in the range of  $1179$  to  $288\text{ cm}^{-1}$ , which will be fully reflected in this range. Also, the specific heat capacity at high temperatures is close to an asymptotic value that is highly consistent with experimental results.

**Keywords:** InP, Dielectric tensor, Phonon spectrum, Semi-harmonic approximation, Specific heat.

pp. 41-51 (In Persian)

---

\* Corresponding author E-mail: salehi\_h@scu.ac.ir