

## بررسی ویژگی‌های فونونی و گرمایی ترکیبات FeAl و Fe<sub>3</sub>Al با استفاده از شیوه شبه پتانسیل

حمدااله صالحی<sup>\*</sup>، پیمان امیری، حمید ذکوی مقدم

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز

دریافت: ۱۴۰۰/۰۲/۱۹، پذیرش: ۱۴۰۰/۱۰/۲۴

### چکیده

در این کار ویژگی‌های دینامیکی ترکیب FeAl از جمله ساختار فونونی و ویژگی‌های گرمایی در دو فاز منظم Do<sub>3</sub> و B<sub>2</sub> مورد بررسی و محاسبه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با بسته نرم‌افزاری کوانتوم-اسپرسو انجام شده است نتایج حاصل از بررسی ویژگی‌های گرمایی نشان می‌دهند که رفتار ظرفیت گرمایی ویژه فاز B<sub>2</sub> در دماهای پایین به صورت T<sup>3</sup> و در حد دماهای بالا به مقدار کلاسیکی قانون دولن-پتی همگرا می‌شود که با نتایج تجربی سازگار است.

**کلیدواژه‌ها:** آلومیناید آهن، خواص حرارتی، نظریه تابعی چگالی، کوانتوم-اسپرسو.

### ۱. مقدمه

سلسیوس)، دمای گذار ساختارهای منظم آلیاژهای آلومیناید آهن می‌باشد و علاوه بر این، افزایش ناخالصی به فاز Do<sub>3</sub> منجر به فاز نامنظم A<sub>2</sub> خواهد شد و در دماهای بالاتر از ۶۰۰ درجه سلسیوس استحکام آن‌ها افزایش پیدا می‌کند. FeAl - B<sub>2</sub> دارای ساختار مکعبی (سزیم کلراید) و گروه فضایی P<sub>3m1</sub> می‌باشد در حالی که Do<sub>3</sub> - Fe<sub>3</sub>Al دارای ساختار مکعبی مرکز سطحی<sup>۱</sup> و گروه فضایی F<sub>m3m</sub> می‌باشد. این ترکیب‌ها موادی مناسب جهت استفاده در صنایع مختلف هستند. آلومینایدهای آهن به دلیل هزینه کم و ویژگی‌های عالی آن‌ها یکی از بهترین ترکیبات بین فلزی هستند. طبق یک تعریف ساده ترکیب‌های بین فلزی، ترکیب‌هایی از فلزات هستند که ساختارهای بلوری آن‌ها با فلزات تشکیل دهنده‌شان متفاوت است که نتیجتاً فازهای بین فلزی و آلیاژهای منظم را شامل می‌شوند [۳]. این ترکیبات عمدتاً دارای ساختاری منظم می‌باشند. ساختار منظم در ترکیبات بین فلزی با کاهش درجه حرارت و در یک دمای بحرانی ایجاد می‌شود. ترکیبات بین

ترکیب آلومیناید آهن FeAl شاخه‌ای از ترکیبات بین فلزی است که از دو عنصر کاربردی و مهم آهن از گروه فلزات واسطه و آلومینیوم از گروه بورون جدول تناوبی تشکیل شده‌اند. این ترکیبات (آلومینایدهای فلزی) فلز هستند که آلیاژها به دلیل خواص فیزیکی و مکانیکی برجسته‌ای (مانند مقاومت عالی در برابر اکسیداسیون، سولفیداسیون و خوردگی، قدرت و دمای ذوب بالا، خزش مکانیکی عالی و غیره) که در بیش‌تر آن‌ها وجود دارد مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته‌اند [۱-۲]. آلومیناید آهن دارای دو فاز با ساختار منظم B<sub>2</sub> (CsCl) و Do<sub>3</sub> (Fe<sub>3</sub>Al) می‌باشد که بسیار مهم و کاربردی هستند. فاز منظم Do<sub>3</sub> - Fe<sub>3</sub>Al در دماهای پایین تشکیل می‌شود و در دماهای بالاتر (بالاتر از ۵۵۰ درجه سلسیوس) به فاز B<sub>2</sub> (CsCl) که بین ۵۵۰ و ۸۰۰ درجه سلسیوس پایدار است، تبدیل می‌شود. در واقع این دما (۵۵۰ درجه

<sup>۱</sup> FCC; Face Centered Cubic

<sup>\*</sup> نویسنده پاسخگو: salehi\_h@scu.ac.ir

فلزی منظم معمولاً نسبت استوکیومتری ساده‌ای دارند و در محدوده نسبتاً باریکی از ترکیب شیمیایی تشکیل می‌شوند. درجه نظم شبکه با افزایش انحراف از ترکیب استوکیومتری، کاهش می‌یابد [۴]. تقریباً تمامی مشاهدات تجربی بیانگر آن است که ترکیب آلومیناید آهن در حالت پایه غیرمغناطیسی و یا پارامغناطیس است [۵]. در حالی که اکثر محاسبات نظری به لحاظ انرژی ساختاری حالت فرومغناطیس را پایدارترین حالت در نظر گرفته‌اند [۶]. این اختلاف در ابتدا به نقص‌های نقطه‌ای و بی‌نظمی‌های بلوری موجود در نمونه‌های واقعی نسبت داده شد. در صورتی که بعداً مشخص شد که برخلاف انتظار، این گونه نقص‌ها خود سبب افزایش گشتاور مغناطیسی نمونه‌ها می‌گردند. اشتباه نتایج نظری ناشی از آن بود که محققان نظری تنها ویژگی‌های مکانیکی، الکترونی و انرژی‌های مربوط به نظم‌های مختلف مغناطیسی را در تحقیقات خود در نظر گرفته‌اند. در حالی که همبستگی میان این خواص و خواص دینامیکی شبکه را در نظر نگرفته‌اند. بنابر مطالعات محاسباتی انجام شده به لحاظ دینامیکی هر دو فاز فرومغناطیس و غیرمغناطیس می‌توانند پایدار باشند. اما تنها مقایسه خواص دینامیکی با نتایج تجربی است که می‌تواند سبب برتری فاز غیرمغناطیسی نسبت به فاز فرومغناطیسی و شباهت بیش‌تر نتایج این فاز به تجربه گردد [۷]. این آلیاژها به دلیل خواص فیزیکی و مکانیکی برجسته‌ای (مانند مقاومت عالی در برابر اکسیداسیون، دمای ذوب بالا، ۱۲۵۰ درجه سلسیوس) مورد توجه محققین و مهندسیین فیزیک و مواد قرار گرفته‌اند. این ترکیبها موادی مناسب جهت استفاده در صنایع مختلف از جمله خودروسازی و هوافضا هستند. آلومیناید آهن به دلیل هزینه کم و ویژگی‌های عالی یکی از بهترین ترکیبات بین‌فلزی هستند. هم‌چنین جایگزین مناسبی برای فولاد و ابرآلیاژها می‌باشند. این ترکیبات در مقایسه با بسیاری از آلیاژهای مورد استفاده کنونی چگالی پایین‌تر و خواص دمایی بالاتری دارند. علاوه بر این موارد، بنابر اطلاعات موجود با کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو روی ویژگی‌های این ترکیبات کار نشده است. در کار حاضر به بررسی خواص مختلف ترکیب آلومیناید آهن در دو فاز ساختاری B<sub>۲</sub> و

## ۲. مواد و روش‌ها

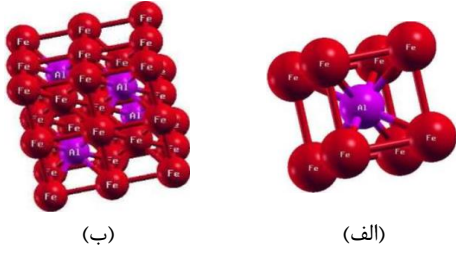
محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی<sup>۱</sup> با تقریب‌های جی‌جی‌ای+اس‌پی<sup>۲</sup> و ال‌اس‌دی‌ای<sup>۳</sup> و با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم-اسپرسو انجام شده است [۸]. در این بسته محاسباتی معادلات تک ذره کوهن-شم با استفاده از روش شبه پتانسیل و بسط توابع موج الکترون‌های ظرفیت بر حسب امواج تخت حل می‌گردد. در این کار انرژی قطع برای فاز B<sub>۲</sub> به ترتیب در تقریب شیب تعمیم یافته و چگالی موضعی ۸۵ و ۷۰ ریدبرگ انتخاب شده است. در تقریب‌های ذکر شده به ترتیب مش یکنواخت ۱۲×۱۲×۱۲ و ۱۰×۱۰×۱۰ نقطه از فضای k برای انتگرال‌گیری در ناحیه اول بریلوئن انتخاب گردید. مقادیر انرژی قطع برای فاز DO<sub>۲</sub> ترکیب آلومیناید آهن برای هر دو تقریب شیب تعمیم یافته و چگالی موضعی به ترتیب ۶۵ و ۶۰ ریدبرگ انتخاب شد. ثابت شبکه‌ای که به صورت تجربی برای فاز B<sub>۲</sub> و DO<sub>۲</sub> اندازه‌گیری شده است، به ترتیب a = ۵٫۴۹۶۱۹ a.u و a = ۱۰٫۹۵۰۸۵ a.u هستند که در محاسبات از همین مقادیر به عنوان مقادیر اولیه استفاده شده است [۹-۱۰]. در محاسبات از شبه پتانسیل‌های ساخته شده به روش فوق نرم استفاده شد. اوربیتال‌های ظرفیت (که محاسبات فقط برای آن‌ها انجام می‌شود) برای عنصر آهن و آلومینیوم به ترتیب s، d و s، p هستند. در این محاسبات همگرایی بر مبنای انرژی قرار داده شده است و در تمامی محاسبات دقت همگرایی انرژی ۱۰<sup>-۷</sup> ریدبرگ در نظر گرفته شده؛ که در هر دو تقریب بعد از یازده چرخه به همگرایی رسید. در تمامی تقریب‌ها از نقطه نظر انرژی ساختاری، نظم فرومغناطیس پایدارترین

<sup>1</sup> DFT

<sup>2</sup> GGA+sp

<sup>3</sup> LSDA

نرم افزار ایکس کریسدين<sup>۲</sup> رسم شده است.

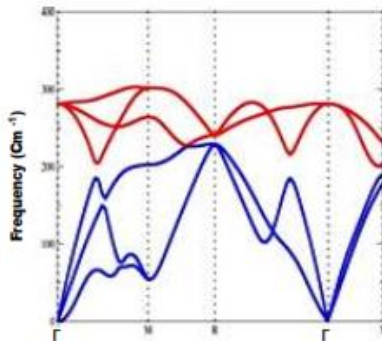


شکل ۱ بلور FeAl در فاز مکعبی (الف) ساختار B<sub>۲</sub> و (ب) ساختار Do<sub>۳</sub>.

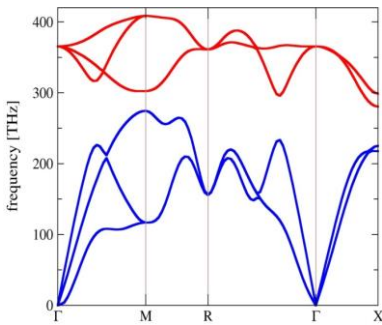
### ۳. نتایج

#### ۳-۱. بررسی ساختار فونونی

در شکل‌های ۲ و ۳ نمودارهای پراکندگی فونونی در راستای بیش‌ترین تقارن به همراه چگالی حالت‌های فونونی برای ترکیب آلومیناید آهن در فاز B<sub>۲</sub> با استفاده از تقریب‌های چگالی موضعی اسپینی و شیب تعمیم‌یافته با اسپین رسم شده‌اند.



(الف)



(ب)

شکل ۲ نمودار پاشندگی فونونی ترکیب FeAl در ساختار سزیم کلراید با استفاده از تقریب‌های (الف) جی‌جی‌ای+اس‌پی و (ب) ال‌اس‌دی‌ای.

حالت را نتیجه داد. به همین دلیل محاسبات ساختاری و الکترونی با تکیه بر همین نظم صورت گرفته است. این نتیجه در توافق با دیگر کارهای نظری است [۶].

در بسته محاسباتی کوانتوم-اسپرسو برای بررسی ویژگی‌های گرمایی از تقریب شبه هماهنگ (کیوچ‌ای<sup>۱</sup>) استفاده می‌شود. در تقریب شبه‌هماهنگ، انرژی آزاد هلمهولتز از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۱]:

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

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

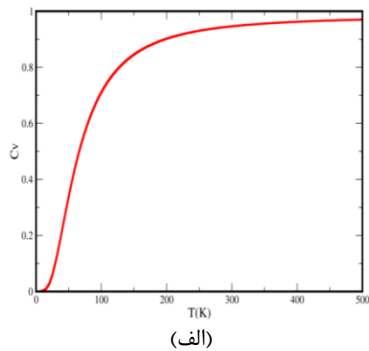
یکی از ویژگی‌های گرمایی جامدات ظرفیت گرمایی ویژه شبکه است. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت، C<sub>v</sub>، یک سامانه از نظر فیزیکی، میزان گرمایی است که سامانه در حجم ثابت با محیط مبادله می‌کند تا دمای آن ۱ درجه سلسیوس یا ۱ کلوین تغییر کند، از لحاظ ریاضی، به صورت نسبت گرمای مبادله‌شده به تغییرات دما تعریف می‌شود. ظرفیت گرمایی ویژه می‌تواند تحت شرایط فشار ثابت یا حجم ثابت اندازه‌گیری شود. اختلاف میان C<sub>p</sub> و C<sub>v</sub> برای جامدات و مایعات بسیار کوچک می‌باشند. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت نسبت به ظرفیت گرمایی در فشار ثابت کمیت مفیدتری است، زیرا از آن می‌توان انرژی سامانه را به دست آورد. ظرفیت گرمایی یکی از بارزترین ویژگی‌های گرمایی یک ترکیب در کاربرد آن می‌باشد. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت از رابطه زیر به دست می‌آید [۱۲]:

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

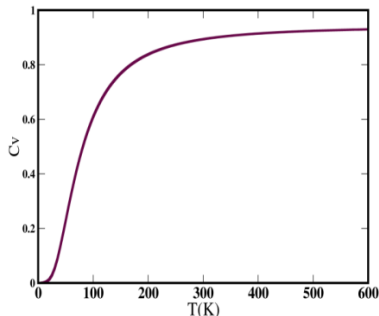
که در آن T دمای مطلق، S آنتروپی و U انرژی در حجم ثابت می‌باشد. شکل ۱، شکل بلوری FeAl در ساختار مکعبی برای فازهای B<sub>۲</sub> و Do<sub>۳</sub> را نشان می‌دهد که توسط

<sup>۲</sup> xcrsden

<sup>۱</sup> QHA

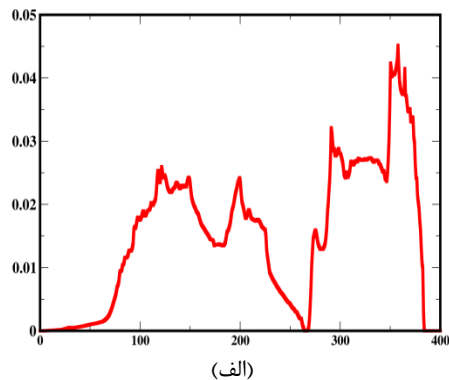


(الف)

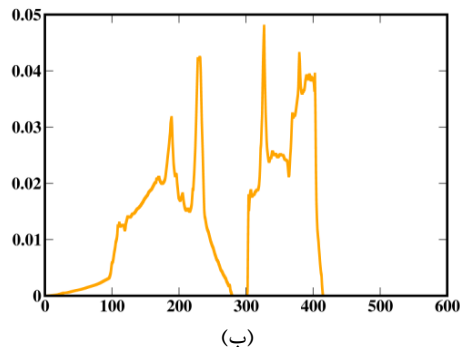


(ب)

شکل ۵ نمودار تغییرات ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت برای ترکیب آلومیناید آهن در ساختار سزیم کلراید با تقریب‌های (الف) جی‌جی‌ای+اس‌پی و (ب) ال‌اس‌دی‌ای. محور y بر عدد ۶R تقسیم شده است.



(الف)



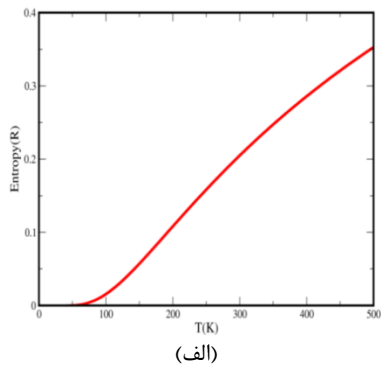
(ب)

شکل ۳ رسم نمودار چگالی حالت‌های فونونی ترکیب آلومیناید آهن در ساختار سزیم کلراید با استفاده از تقریب‌های (الف) جی‌جی‌ای+اس‌پی و (ب) ال‌اس‌دی‌ای.

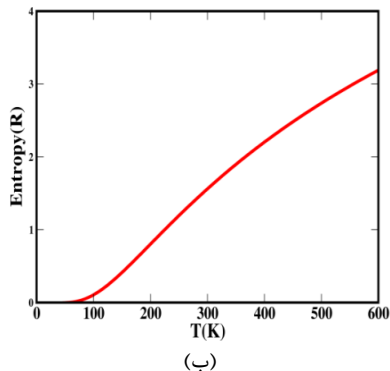
### ۲-۳. بررسی ویژگی‌های گرمایی ترکیب در فاز B<sub>۳</sub>

#### ۱-۲-۳. انرژی آزاد نوسانی

در شکل ۴ نمودار تغییرات انرژی آزاد نوسانی بر حسب دما با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار رسم شده است.

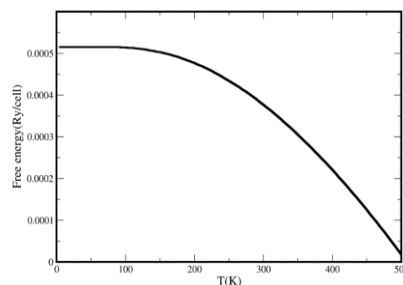


(الف)



(ب)

شکل ۴ تغییرات آنترپی بر حسب دما برای ترکیب آلومیناید آهن در ساختار سزیم کلراید با استفاده از تقریب‌های (الف) شیب تعمیم‌یافته و (ب) چگالی موضعی اسپینی.

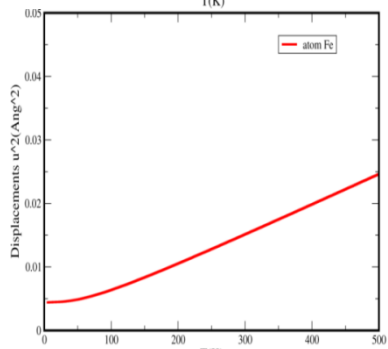
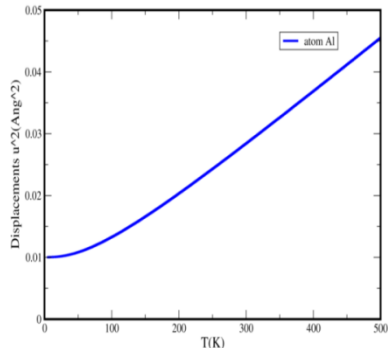


شکل ۴ تغییرات انرژی آزاد نوسانی بر حسب دما برای ترکیب آلومیناید آهن در ساختار سزیم کلراید با تقریب شیب تعمیم‌یافته.

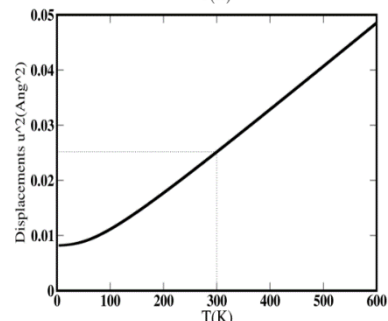
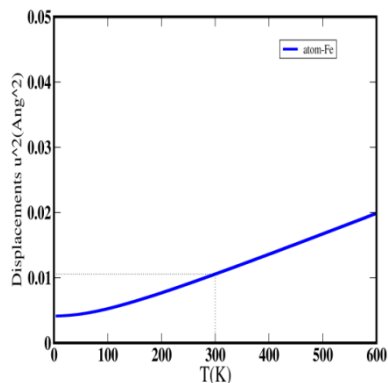
### ۲-۲-۳. ظرفیت گرمایی در حجم ثابت

نمودار ظرفیت گرمایی ویژه برای ترکیب آلومیناید آهن در فاز منظم B<sub>۳</sub> با استفاده از تقریب‌های ال‌اس‌دی‌ای و جی‌جی‌ای+اس‌پی در شکل ۵ ارائه شده است.

این‌که معمولاً برش دادن یک بلور راحت‌تر از فشرده کردن آن است، فونون‌های صوتی عرضی با سرعت پایین‌تری نسبت به فونون‌های صوتی طولی حرکت می‌کنند.



(الف)



(ب)

شکل ۷ نمودار میانگین مربعی برای اتم‌های آلومینیوم و آهن با استفاده از تقریب‌های، (الف) جی‌جی‌ای+اس‌پی و (ب) ال‌اس‌دی‌ای.

### ۳-۲-۳. آنترپی

در شکل ۶ با استفاده از هر دو تقریب جی‌جی‌ای+اس‌پی و ال‌اس‌دی‌ای نمودار تغییرات آنترپی بر حسب دما رسم شده است.

### ۳-۲-۴. میانگین مربع جابه‌جایی

شکل ۷ میانگین مربع جابه‌جایی نسبت به حالت تعادل ( $T=0$ ) را برای اتم آهن و اتم آلومینیوم در فاز سزیم کلراید با استفاده از هر دو تقریب جی‌جی‌ای+اس‌پی و ال‌اس‌دی‌ای نشان می‌دهد.

### ۴. بحث

در این مقاله ویژگی‌های فونونی و گرمایی ترکیب آلومینید آهن با استفاده از نظریه تابعی چگالی اختلالی و نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو صورت گرفته است. در شکل‌های ۲ و ۳ نمودارهای پراکندگی فونونی در راستای بیش‌ترین تقارن به همراه چگالی حالت‌های فونونی برای ترکیب آلومینید آهن در فاز B<sub>۲</sub> با استفاده از تقریب‌های چگالی موضعی اسپینی و شیب تعمیم‌یافته با اسپین رسم شده‌اند. تعداد شاخه‌های نمودار پراکندگی این ترکیب به دلیل داشتن دو اتم در حالت پایه برابر شش می‌باشد که با توجه به نتایج به دست آمده این تعداد شاخه‌ها مشاهده می‌شود. سه شاخه پایینی که در نقطه  $\Gamma$  مقدار صفر به خود می‌گیرند، شاخه‌های صوتی هستند. از این شاخه‌های صوتی شاخه‌ای که بالاترین بسامد را نسبت به دو شاخه دیگر دارد، شاخه طولی و دو شاخه دیگر عرضی هستند.

سه شاخه اول که به ازای بسامدهای کوچک رفتار بسامد بر حسب نقاط k در آنها خطی است شاخه‌های صوتی و مابقی شاخه‌های نوری هستند. با استفاده از تقریب ال‌اس‌دی‌ای مشخص است که این ترکیب در محدوده بسامد ۲۷۰ تا ۳۰۰ تراهرتز دارای یک منطقه ممنوعه یا گاف بسامدی می‌باشد. امواج در این ناحیه به شدت تضعیف می‌شوند و نور نمی‌تواند از بلور عبور کند و بلور در این محدوده بازتاب کامل دارد.

در یک جامد، فونون‌های صوتی عرضی با طول‌موج بلند امواج صوتی برشی هستند، در حالی که فونون‌های صوتی طولی مربوط به موج‌های صوتی تراکمی می‌باشند. به دلیل

حدود دمای ۱۰۰ کلوین به سرعت کاهش می‌یابد و در ۴۵۰ کلوین برابر با (Ry/Cell) ۰/۱۰۰۰۱ می‌شود. همچنین در دماهای پایین، مقدار ظرفیت گرمایی در هر سه تقریب به‌طور قابل ملاحظه‌ای افت می‌کند و با نسبت  $T^3$  رفتار می‌کند، تا جایی که در دمای صفر مطلق مقدار آن به صفر میل می‌کند که با واقعیات تجربی سازگاری خوبی دارد و به‌ازای مقادیر بزرگ  $T$  مقدار مجانبی برابر با  $47/36$  ژول بر مول در کلوین است. این مقدار در حالت حد دماهای بالا با نتیجه کلاسیکی قانون دولن-پتی یعنی مقدار  $c_v = 6R$  برای یک جامد دو اتمی سازگار می‌باشد که  $R$  ثابت جهانی گازها است. علاوه بر این آنتروپی (S) کمیتهی ترمودینامیکی است که معیاری از درجه بی‌نظمی در هر سامانه است و همان‌طور که انتظار می‌رود، مقدار آنتروپی با افزایش دما، افزایش می‌یابد. از این نمودارها چنین برداشت می‌شود که مقدار آنتروپی از دمای حدود ۱۰۰ کلوین به سرعت افزایش می‌یابد و در دمای ۳۰۰ کلوین که دمای اتاق در نظر گرفته می‌شود، به مقدار  $R/2$  می‌رسد. با توجه به این که اتم‌ها درون جامد، حول مکان تعادلی خود در حال نوسان هستند. در الگوهای فیزیکی، نیروی موجود در این حرکت نوسانی از قانون هوک پیروی می‌کند و بر طبق این قانون، نیروی نوسانی با مربع جابه‌جایی متناسب است. شکل ۷ میانگین مربع جابه‌جایی نسبت به حالت تعادل ( $T=0$ ) را برای اتم آهن و اتم آلومنیوم در فاز سزیم کلراید با استفاده از هر دو تقریب جی‌جی‌ای+اس‌پی و ال‌اس‌دی‌ای نشان می‌دهد. این جابه‌جایی‌ها ناشی از اندرکنش نزدیک‌ترین همسایه‌ها است و از آن‌جا که اتم آهن از اتم آلومنیوم سنگین‌تر است و فاصله بین همسایه‌های آهن بیش‌تر از همسایه‌های آلومنیوم می‌باشد، جابه‌جایی اتم آهن کم‌تر از اتم آلومنیوم است که در این شکل نیز مشاهده می‌شود.

جدول ۱ نقاط تکین وان-هوف در بسامدهای مختلف (بر حسب  $cm^{-1}$ ).

فاز	تقریب	نقاط تکین وان-هوف
B <sub>2</sub>	ال‌اس‌دی‌ای	۱۸۹۷۰۶، ۲۳۰۷۶، ۳۲۷۵۷۴، ۴۰۲۳۲۸
	جی‌جی‌ای+اس‌پی	۱۲۱۰۷۸، ۱۹۹۵۱، ۲۹۱۴۲۲، ۳۵۷۲۱۱

شاخه باقی‌مانده شاخه‌های نوری می‌باشند؛ که در این‌جا نیز شاخه‌ای که بالاترین بسامد را نسبت به دو شاخه دیگر دارد شاخه طولی و دو شاخه دیگر عرضی هستند. همچنین تعداد این شاخه‌ها در راستای برخی مسیرها مانند  $\Gamma \rightarrow L$  به چهار شاخه تقلیل می‌یابند؛ که می‌توان به این موضوع پی برد که جمله اختلالی مرتبه اول اسپین-مدار نمی‌تواند برای این ترکیب تمامی تبهگنی‌ها را ببرد. در حالی که در تقریب جی‌جی‌ای+اس‌پی ناحیه گاف بسامدی مشاهده نمی‌شود. نمودار چگالی حالت‌های فونونی در شکل ۳ با استفاده از تقریب‌های ال‌اس‌دی‌ای و جی‌جی‌ای+اس‌پی رسم شده است، این نمودار نتایج حاصل از نمودار پاشندگی فونونی را تأیید می‌کند. در نمودار چگالی حالت‌های فونونی در بسامدهای مختلف نقاط تکین وان-هوف مشاهده می‌شود که مقادیر این بسامدها در جدول ۱ ارائه شده است. لازم به توضیح است که در این محدوده بسامدها سرعت گروه صفر و موج بازتابی در بیشینه حالت خود می‌باشد.

برای این محدوده بسامدها سرعت گروه صفر و موج بازتابی در بیشینه حالت خود می‌باشد. ساختار فونونی آلومیناید آهن در هر دو تقریب گویای وجود دو تبهگنی سه‌گانه می‌باشد که برای تقریب ال‌اس‌دی‌ای یکی در بسامد صفر و دیگری در محدوده بسامدی ۳۵۰ تا ۴۰۰ تراهرتز اتفاق می‌افتد، در حالی که برای تقریب جی‌جی‌ای+اس‌پی این تبهگنی‌ها در محدوده بسامدی صفر و ۲۵۰ تا ۳۰۰ تراهرتز اتفاق می‌افتد. در جدول ۲ بسامدهای متناظر با مدهای فونونی صوتی طولی (LA) و صوتی عرضی (TA) و همین‌طور مدهای نوری طولی (LO) و نوری عرضی (TO) برای هر یک از نقاط پرتقارن  $k$  واقع در منطقه اول بریلوئن ذکر و با دیگر داده‌های موجود مقایسه شده است.

اندازه انرژی آزاد نوسانی نقطه صفر برای آلومیناید آهن در فاز پایدار سزیم کلراید (B<sub>2</sub>) در فشار صفر با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته برابر با (Ry/Cell) ۰/۱۰۰۰۵ می‌باشد. در شکل ۴ نمودار تغییرات انرژی آزاد نوسانی بر حسب دما با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپین-مدار رسم شده است. همان‌طور که در این نمودار مشاهده می‌شود، مقدار این انرژی از

جدول ۲. مدهای فونونی صوتی و نوری برای ترکیب آلومیناید آهن با استفاده از تقریب‌های مختلف.

مدهای فونونی	l s دی ای	جی جی ای +s پی	نتایج نظری [۱۳]	نتایج تجربی [۱۴]	درصد خطا نسبت به مقدار تجربی	
					جی جی ای +s پی	l s دی ای
M <sub>TA</sub>	۱۱۸,۰۵	۵۴,۹۵۲	۲۹۶,۴	۲۸۴,۷	۰,۵۸۵	۰,۸۰۶
M <sub>LA</sub>	۲۵۳,۶۰	۲۲۵,۲۶	۱۲۰,۹	۱۱۳,۱	۱,۲۴۵	۰,۹۹۱
M <sub>TO</sub>	۳۰۲,۶۱	۲۶۵,۰۹	۳۰۸,۱	۳۲۳,۷	۰,۰۶۵	۰,۱۸۱
M <sub>LO</sub>	۴۰۹,۶۳	۳۰۱,۵۲	۴۰۹,۵	۳۷۸,۳	۰,۰۷۴	۰,۲۰۲
R <sub>A</sub>	۱۵۸,۴۷	۲۲۵,۹۷	۲۲۶,۲	۲۳۴	۰,۳۲۲	۰,۰۳۴
R <sub>O</sub>	۳۶۱,۴۹	۲۴۱,۲۸	۳۷۸,۳	۳۷۸,۳	۰,۰۴۴	۰,۳۶۲
Γ <sub>O</sub>	۳۶۵,۰۰	۲۶۱,۲۰	۳۷۰,۵	۳۷۸,۳	۰,۰۳۵	۰,۳۰۹
X <sub>TA</sub>	۲۱۷,۳۶	۱۹۱,۵۵	۲۴۵,۷	۲۴۵,۷	۰,۱۱۵	۰,۲۲۰
X <sub>LA</sub>	۲۲۴,۳۹	۱۹۷,۲۵	۲۵۳,۵	۲۴۵,۷	۰,۰۸۶	۰,۱۹۷
X <sub>TO</sub>	۲۸۰,۶۳	۲۱۰,۴۶	۳۱۲	۳۱۵,۹	۰,۱۱۱	۰,۳۳۳
X <sub>LO</sub>	۲۹۹,۹۷	۲۲۵,۸۷	۳۵۴,۹	۳۳۵,۴	۰,۱۰۵	۰,۳۲۶

#### ۶. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه شهید چمران اهواز، ایران [آی‌سی‌سی‌یو.اس‌پی.۹۹.۴۹۰]<sup>۱</sup> پشتیبانی شد.

#### ۷. تضاد منافع

این مطالعه تضاد منافع ندارد.

#### فهرست منابع

- [1] G. Sauthoff, "Intermetallics," VCH, New York, pp. 1-5, 1995.
- [2] C.L. Fu, "Origin of ordering in B2-type transition-metal aluminides: Comparative study of the defect properties of PdAl, NiAl, and FeAl," Physical Review B, vol. 52, pp. 3151, 1995.
- [3] H. Bakar, A.S.M. Handbook, "Alloy Phase Diagrams, in, ASM international, Materials Park," Ohio, vol. 3, 1992.
- [4] P. Mohn, C. Persson, P. Blaha, K. Schwarz, P. Novák, H. Eschrig, "Correlation induced paramagnetic ground state in FeAl," Phys Rev Lett, vol. 87, pp. 196401, 2001.
- [5] K. Miyatani, S. Iida, Journal of the Physical Society of Japan, vol. 25, pp. 1008, 1968.
- [6] P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S. B. Trickey, Computer Physics Communications, vol. 59, pp. 399, 1990.

مقدار میانگین مربع جابه‌جایی در دمای ۳۰۰ کلین برای آهن و آلومینیوم با استفاده از تقریب جی جی ای و با در نظر گرفتن برهم‌کنش اسپینی به ترتیب  $A^+$  و  $A^-$  و  $0.15$  می‌باشند.

#### ۵. نتیجه‌گیری

در این کار محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی و کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. نتایج حاصل از بررسی منحنی پاشندگی فونونی نشان می‌دهند که فاز B<sub>2</sub> دارای یک گاف بسامدی می‌باشد که این امر بیان می‌کند که هیچ مد فونونی صوتی و نوری با چنین بسامدی در این محدوده نمی‌توانند انتشار یابند. از مطالعه خواص ترمودینامیکی در تقریب شبه‌همانگ این نتیجه حاصل شد که افت ظرفیت گرمایی در حد دماهای پایین، به صورت T<sup>۲</sup> است. در حالی که در دماهای بالا ظرفیت گرمایی به مقدار کلاسیکی قانون دولن-پتی برای یک جامد دو اتمی نزدیک می‌شود. با افزایش دما هم چنین آنتروپی سامانه افزایش می‌یابد. بررسی نمودار میانگین مربعی جابه‌جایی بیانگر جابه‌جایی بیش‌تر اتم‌های آلومینیوم در مقایسه با اتم‌های آهن در ترکیب آلومیناید آهن است.

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

- [7] Q.Q. Ren, H.R. Gong, "Solid State," Communications, vol. 169, pp. 57-61, 2013.
- [8] <http://www.pwscf.org>.
- [9] J.Y. Rhee, B. Harmon, "Metamagnetic behavior of Fe<sub>3</sub> M (M= Al and Si) alloys at high pressure," Physical Review B, vol. 70, pp. 094411, 2004.
- [10] C. Koenig, M.A. Khan, "Self-consistent electronic structure of FeAl," Phys Rev B, vol. 27, pp. 6129, 1983.
- [11] M. Catti, C. Pisani, "Quantum-mechanical ab initio Calculation of the properties of crystalline materials," Lecture Notes in Chemistry, vol. 67, Springer, pp. 209, 1996.
- [12] N. Ashcroft, "Solid State Physics," Harcourt College Publishers, 1976.
- [13] B. Meyer, V. Schott, M. Fähnle, "Phonon spectrum of B2-FeAl: Ab initio calculation and comparison with data from inelastic neutron scattering," Physical Review B, vol. 58, pp. R14673, 1998.
- [14] Y. Pithawalla, M. El-Shall, S. Deevi, V. Strom, K. Rao, "Synthesis of magnetic intermetallic FeAl nanoparticles from a non-magnetic bulk alloy," The Journal of Physical Chemistry B, vol. 105, pp. 2085-2090, 2001.



(Research Article)  
**Investigation of phononic and thermal properties of the compound FeAl  
and Fe<sub>3</sub>Al using pseudopotentials method**

**H. Salehi \***, P. Amiri, H. Zakavi Moghadam

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

Received: 2021/05/09, Accepted: 2022/01/14

**Abstract**

Iron aluminide intermetallic compound, including compounds that have great features is that it's so great properties, due to its increasing use in industry is different. In this work, structural and dynamic properties of FeAl compounds including the structure of energy bands, density of states, phonon and thermal properties in two-phase structures regularly evaluated and calculated. Calculations using a Pseudopotential, within the framework of density functional theory have been studied PWscf code. The study found that the combination of these features in your base has a metal in ferromagnetic order, the results of the electronic structure of this compound are indicative of metal and the structure of the electron cloud indicates the ionic bond-covalent for two phases results in good agreement with the experimental results are available.

**Keywords:** FeAl, Thermal properties, Density functional theory, PWscf.

pp. 90-97 (In Persian)

---

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