Abstract

First principles calculations of the structural and electronic properties of AlAs, InAs and their alloy $Al_xIn_{1-x}As$ have been performed using the full-potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) method within density functional theory (DFT). We used the local density approximation (LDA) within the generalized gradient correction (GGA) to calculate the electronic structure at equilibrium volume. The effect of composition on lattice constants, bulk modulus and band gap were investigated. Deviations of the lattice constants from Vegard's law and the bulk modulus were observed for this alloy. The microscopic origins of the gap bowing were explained by using the approach of Zunger and co-workers.

Keywords FP-LMTO, DFT, arsenide compounds, band gap bowing, effective masses.

Résumé

Une étude du Premier principe des propriétés structurales et électroniques de AlAs, InAs et leur alliage $Al_xIn_{1-x}As$ a été effectuée en utilisant le potentiel total de la méthode linéaire des orbitales muffin-tin (FP-LMTO) avec la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). Nous avons utilisé l'approximation de densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour calculer la structure électronique à d'équilibre. L'effet de la composition sur les constantes de réseau, module de compressibilité et la bande interdite ont été étudiés. Déviations entre les constantes de réseau de la loi de Vegard et de meme pour le module de compressibilité ont été observés pour cet alliage. L'origine microscopique du terme de courbure a été effectuée par l'approche de Zunger et al.

Mots-clés : FP-LMTO, DFT, composés d'arséniure ; bande interdite, terme de courbure ; masses effectives.

الملخص

الهدف من هدا العمل هو دراسة الخواص البنيوية و الإلكترونية لأنصاف النواقل الثنائية AlAs، InAs ، على شكل بنيتها المستقرة ZB، بواسطة الطريقة الخطية لمدارات muffin-tin، FP-LMTO التي ترتكز على نظرية كثافة الدالية DFT، إعتمادا على تقريب كثافة الموصع LDA، و تقريب التدرج المعمم GGA، لأجل حساب كمون التبادل – الإرتباطE_{XC}، كل هذا طبقناه بإستعمال الرمز Lmtart. تطرقنا أيضا إلى تأثير التركيز x على مقدار الشبكة a، مقدار الإنضغاط B و الفجوة الطاقويEg على خليط. وضحنا الأضل المجهري للإضطراب الفجوي الملاحظ على الخليط و ذلك بإستعمال طريقة و زملائه

كلمات البحث : DFT، FP-LMTO ، ومركبات زرنيخيد، وذات فجوة الحزمة قيمة انحناء، كتلة فعالة