

Résumé :

Les semiconducteurs (III-V) à base de phosphore, tels que *AIP* présentent des performances exceptionnelles lorsqu'ils sont utilisés dans des dispositifs optoélectroniques et d'autres applications dans le développement de nouvelles technologies.

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales et élastiques du composé *AIP* dans sa phase zincblende. Pour l'étude des propriétés précédentes, nous avons utilisé un calcul ab-initio basé sur la DFT combinée avec la méthode de pseudopotentiel. Les équations de Kohn-Sham ont été résolues d'une manière auto-cohérente en utilisant une base d'ondes planes implantée dans le code CASTEP. Pour le traitement du terme d'échange et de corrélation, nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé GGA. Nos résultats des différentes propriétés étudiées sont analysés et comparés avec les autres de la littérature. Ils sont en général en accord avec les autres valeurs de la littérature.

Abstract:

The semiconductors(III-V) based on phosphorus, such as *AIP* compound have exceptional performance when they used in optoelectronic devices and other applications in developing new technologies.

In this work, we study the structural and elastic properties of *AIP* compound in its zincblende structure. For the study of the previous properties, we have used ab-initio calculations based on the density functional theory (DFT) combined with the pseudopotential method. The resolution of the Kohn-Sham equations is performed self-consistently by using a plane wave basis as implemented in the CASTEP software. For the exchange and correlation potential term, we have used the generalized gradient approximation (GGA) scheme. Our obtained results of different properties are analyzed and compared with available data of the literature. They are in general in agreement with other data of the literature.

ملخص:

تظهر أشباه النواقل القائمة على الفوسفور مثل *ALP* الأداء المتميز عند استخدامها في الأجهزة البصرية الإلكترونية والتطبيقات الأخرى في تطوير تقنيات جديدة.

في هذا العمل قدمنا بدراسة عامة حول الخواص البنيوية و المرونية للمركب *AIP* في شكله البلوري *ZnS*. في هذه الدراسة قمنا باستعمال حساب من المبدأ الأول الذي استخدمنا فيه نظرية *DFT* مركبة مع طريقة الكمون الكاذب . معادلات كوهن و شام حلت بطريقة التناسق الذاتي باستعمال الأمواج المستوية المدخلة في الشفرة *CASTEP*. لقد استعملنا في هذه الدراسة التقريب *GGA* من اجل تمثيل التفاعل التبادلي و التداخلي. حللنا النتائج المحصل عليها . تحصلنا على نتائج متفقة إلى حد كبير مع النتائج الأخرى .