

First-principles investigation of the structural, elastic, electronic, and optical properties of semiconducting $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ ($0 \leq x \leq 1$) ternary alloys in rock-salt and zinc blende structures

Authors: [H. Rekab-Djabri](#), [Mohamed Drief](#), [Manal M. Abdus Salam](#) manalab70@yahoo.com, [Salah Daoud](#), [F. El Haj Hassan](#), and [S. Louhibi-Fasla](#)
AUTHORS INFO & AFFILIATIONS

Publication: Canadian Journal of Physics • 23 October 2019 • <https://doi.org/10.1139/cjp-2019-0357>

26

Metrics

Total downloads **26**

- Last 6 Months 22
- Last 12 Months 23

[GET ACCESS](#)

Canadian Journal of Physics

Volume 98, Number 9
2020

[Previous](#)[Next](#)

- [Abstract](#)
- [Résumé](#)
- [References](#)

Abstract

In this work, first principle calculations of the structural, electronic, elastic, and optical properties of novel $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ ternary alloys in rock-salt (B1) and zinc-blende (B3) structures are presented. The calculations were performed using the full-potential linear muffin-tin orbital (FP-LMTO) method within the framework of the density functional theory (DFT). The exchange and correlation potentials were treated according to the local density approximation (LDA). The lattice constants for the B1 and B3 phases versus iodide concentration (x) were found to deviate slightly from the linear relationship of Vegard's law. The calculated electronic properties showed that $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ alloys in the B3 structure have a direct band gap ($\Gamma - \Gamma$) for all concentrations of x , which means that they can be used in long-wavelength optoelectronic applications, while in the B1 structure they have an indirect ($\Gamma - R$) band gap. The elastic constants C_{ij} , shear modulus G , Young's modulus E , Poisson's ratio ν , index of ductility B/G , sound velocities v_t , v_l , and v_m , and Debye temperature θ_D were also reported and analyzed. By incorporating the basic optical properties, we discussed the dielectric function, refractive index, optical reflectivity, absorption coefficient, and optical conductivity in terms

of incident photon energy up to 13.5 eV. The present results were found to be in good agreement with the available experimental and other theoretical results.

Résumé

Nous présentons des calculs, effectués à partir de principes premiers, sur les propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des nouveaux alliages ternaires $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ dans les structures sel Gemme (B1) et blende de zinc (B3). Les calculs sont faits en utilisant la méthode des orbitales du plein potentiel linéaire muffin tin (OPPLMT/FP-LMTO), dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité TFD/DFT). Les potentiels d'échange et de corrélation sont traités sous l'approximation de la densité locale (ADL/LDA). Nous trouvons que les constantes de réseau, pour les phases B1 et B3, dévient légèrement de la relation linéaire de la loi de Vegard. Les propriétés électroniques calculées montrent que les alliages $\text{AgBr}_{1-x}\text{I}_x$ en structure B3 ont une bande interdite directe ($\Gamma - \Gamma$) pour toutes les concentrations x , ce qui signifie qu'ils peuvent être utilisés dans des applications d'optoélectronique à grande longueur d'onde, alors que les alliages en phase B1 ont une bande interdite indirecte ($\Gamma - R$). Nous présentons et analysons également les constantes élastiques C_{ij} , le module de cisaillement G , le module de Young E , le rapport de Poisson ν , l'indice de ductilité B/G , les vitesses du son v_t , v_l , et v_m , et la température de Debye θ_D . En incorporant les propriétés optiques de base, nous examinons la fonction diélectrique, l'indice de réfraction, la réflectivité optique, le coefficient d'absorption et la conductivité optique en termes de l'énergie du photon incident jusqu'à 13.5 eV. Nous trouvons que nos résultats sont en bon accord avec les données expérimentales et les autres résultats théoriques disponibles. [Traduit par la Rédaction]