

Zincblende yapıdaki $Tl_xIn_{1-x}As$ 'ın örgü sabitleri ve eğilme parametrelerinin Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ile incelenmesi

Sinem ERDEN GÜLEBAĞLAN*

Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi, Elektrik ve Enerji Bölümü, 65080, Van, Türkiye

Geliş Tarihi (Received Date): 06.02.2018

Kabul Tarihi (Accepted Date): 15.05.2018

Özet

Bu çalışmada yarıiletken $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının yapısal ve elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyoneli teori ile lokal yoğunluk yaklaşımından yola çıkılarak minimum toplam enerjiden türetilmiştir. Üçlü $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımını modellemek için 16 atomlu süperhücre kullanılmıştır. Örgü parametreleri, band aralığı enerjileri ve band aralığı eğilme (bowing) parametresi incelenmiştir. Alaşımın örgü sabitleri, Vegard kanunuyla iyi uyum göstermektedir. Band aralığı eğilme parametreleri, Talyum'un konsantrasyonuna bağlılık açısından çok güçlüdür. $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının ortalama eğilme parametresinin $b = \sim 1.0396$ eV olduğu sonucuna varılmıştır. Ayrıca, $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının konsantrasyona bağlı eğilme parametresi üçüncü dereceden polinom denklemi olan $b(x) = -12.84817x^3 + 24.29015x^2 - 15.86767x + 4.17591$ eV ile ifade edilebileceğini göstermiştir.

Anahtar kelimeler: Yoğunluk fonksiyoneli teori, alaşım, elektronik özellikler.

Investigation of lattice constants and bowing parameters of $Tl_xIn_{1-x}As$ in zincblende structure by Density Functional Theory

Abstract

In this study, the structural and electronic properties of semiconducting $Tl_xIn_{1-x}As$ alloys were derived from the minimum total energy with density functional theory by approaching the local density approach. A 16 atom super cell was used to model the ternary $Tl_xIn_{1-x}As$ alloy. The lattice parameters, band gap energies and band gap bowing parameters were investigated. The lattice constants at different concentrations of the alloy are also well suited to Vegard's law. The band gap bowing parameters are

* Sinem ERDEN GÜLEBAĞLAN, sinemerden@gmail.com, <http://orcid.org/0000-0001-9446-2211>

very strong in terms of dependence on the concentration of Thallium. The average bowing parameter of the $Tl_xIn_{1-x}As$ alloys is $b = \sim 1.0396$ eV. The results also show that the concentration-dependent bowing parameter of the $Tl_xIn_{1-x}As$ alloys can be expressed by the third-order polynomial equation $b(x) = -12.84817x^3 + 24.29015x^2 - 15.86767x + 4.17591$ eV.

Keywords: Density functional theory, alloy, electronic properties.

1. Giriş

Günümüzde yapılan teorik ve deneysel çalışmalar teknolojiye uygulamalı olarak ele alınmaktadır. III-V bileşikler ve alaşımlardan Talyum (Tl) içerenler yeni yarıiletken malzemeler olarak birçok deneysel ve teorik çalışmada önerilmiştir. Yakın zamanda yapılan çalışmalarda Talyum-V temelli malzemeler mikro elektronik endüstrisinde detektörler, diyotlar, lazerler gibi optik iletişim sistemlerinde tavsiye edilmektedirler [1-5]. Krishna-murthy ve ark. [6] ve Schilfgaarde ve ark. [7] Talyum içeren III-V bileşiklerinin elektronik özelliklerini, epitaksiyel moleküler ışınli epitaksi (MBE) ile araştırmışlardır. Houat ve ark. [8] Wurtzite yapısındaki TlGaN alaşımlarının yapısal özelliklerini incelemişlerdir. Schilfgaarde ve ark. [7] kızılötesi detektörler için materyal olarak TlInP yeni bir üçlü alaşımı olarak önermişlerdir. Koh ve ark. [3] TlInP, TlGaP ve TlInGaP gibi üçlü ve dördü alaşımları araştırmışlardır. Takushima ve ark. [9] düşük sıcaklıklı epitaksiyel moleküler ışınli epitaksi (MBE) ile üçlü alaşım olan TlInAs'ı incelemişlerdir. Ayrıca, Erden Gulebaglan [10] yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) kullanarak zincblende yapısındaki $Tl_xAl_{1-x}As$ alaşımlarının elektronik özelliklerini hesaplamıştır. Mankefors ve Svensson [11] yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak Yerel Yoğunluk Yaklaşımı ile Zincblende yapıdaki $Ga_{1-x}Tl_xAs$ alaşımının elektronik ve geometrik özellikleri incelenmişlerdir. Schilfgaarde ve ark. [12] InTlP alaşımını kızılötesi detektörler için umut verici materyal olarak önermişlerdir. Souza Dantas ve ark. [13] Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisini kullanarak $Al_{1-x}Tl_xN$ alaşımının yapısal elektronik ve optik özelliklerini inceleyerek $Al_{1-x}Tl_xN$ alaşımının opto-elektronik uygulamalar için uygun olabileceği önerisinde bulunmuşlardır.

Son yirmi yılda yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak malzemelerin yapısal, elektronik, optik, elastik, dinamik ve termodinamik özelliklerini inceleyen birçok çalışma yapılmıştır. [14-18] III-V tipi yarıiletken malzemelerin çoğu, uzun yıllar yoğun teorik ve deneysel araştırmalara konu olmuştur.

Bu çalışmada, ilk prensiplere dayanan sayısal hesaplamalar yoluyla üçlü $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımının örgü sabitleri, enerji band aralığı, eğilme (bowing) parametresi ve eğilme parametresinin bileşenlerinin konsantrasyon miktarına bağlı değişimleri araştırılmıştır. Bu araştırmalar sırasında değiş tokuş-korelasyon potansiyeli için Yerel Yoğunluk Yaklaşımını kullanılmıştır. TlInAs alaşımları için band aralığı enerjisinin Talyum konsantrasyonuna bağlı olarak değişiminden yola çıkarak eğilme parametresinin konsantrasyona bağlı üçüncü dereceden fonksiyonu $b(x)$ üretilmiştir.

2. Metod

Bu çalışma hazırlanırken, Quantum Espresso (PWSCF) [19] programı kullanılarak Zincblende yapısındaki $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımının taban durumundaki yapısal ve elektronik özellikleri yerel yoğunluk yaklaşımı [20] ile araştırılmıştır. Elektron-iyon etkileşimleri ultrasoft psödopotansiyeller ile tanımlanmıştır ve bu psödopotansiyeller ile kesme enerjisi test edilmiştir. TlAs ve InAs bileşikleri için farklı kesme enerjilerine karşılık taban durum enerjileri Tablo 1’de verilmiştir. Dalga fonksiyonları bir düzlem dalga temelinde 50 Ry’lik kesme enerjisi olarak seçilmiştir. Bu kesme enerjisi değeri $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımı içinde kullanılmıştır. Brillouin bölgesi incelemeleri, Monkhorst ve Pack’un [21] standart özel k-noktaları tekniği kullanılarak gerçekleştirilir. Bu incelemeler sırasında $12 \times 12 \times 12$ ’lik bir kafes kullanılmıştır. Seçilen düzlem-dalga kesme enerjisi ve k nokta sayısı, toplam enerjinin minimumunu sağlamak için dikkatlice kontrol edilmiştir. $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımları için 16 atom içeren süper hücre kullanılmıştır. 16 atomlu süper hücreye karşılık gelen $2 \times 2 \times 2$ klasik Zincblende kübik hücreler (rasgele $Tl_nIn_{8-n}As_8$ süper hücrelerini modellemek için) uygulanmıştır. $n = 0$ ’dan Tl atomları 8’e kadar, yapısal olarak en uygun hale getirilmesi gereken $\binom{8}{n}$ farklı atomik

konfigürasyonları vardır. Tüm konfigürasyon için band aralığı enerjisi ve band aralığı eğilme katsayıları hesaplanarak benzer sonuçlar elde edilmiştir. Bu şekilde, katkılama yaparak ortalama etki incelenmiş olmaktadır. Maksimum InAs kümelenmiş konfigürasyonu ile başlanarak, TlAs kümelenmiş bir alaşım üretmek için In atomları birer birer kümeden çıkarılmış ve Tl atomları birer birer eklenmiştir. Ek olarak, In ($4d^{10}5s^25p^1$), As ($3d^{10}4s^24p^3$) ve Tl ($4f^{14}5d^{10}6s^26p^1$) orbitalleri valans elektronları olarak ele alınmıştır. Hesaplamalarda spin-yörünge etkileşimleri dikkate alınmamıştır. Hesaplama sürecinde elde edilen enerjinin ortalama hata değeri $1.0 \cdot 10^{-8}$ Ry’den düşük alınmıştır. Bu durum yüksek doğrulukta sonuçlar elde edilmesini sağlamaktadır.

Tablo 1. TlAs ve InAs için kesme enerjilerine karşın taban durum enerjileri.

Kesme Enejisi (Ry)	Taban Durum Enerjisi (Ry) TlAs	Taban Durum Enerjisi (Ry) InAs
20	-113.748	-16.937
30	-113.750	-16.943
40	-113.753	-16.945
50	-113.754	-16.946
60	-113.754	-16.946
70	-113.754	-16.946

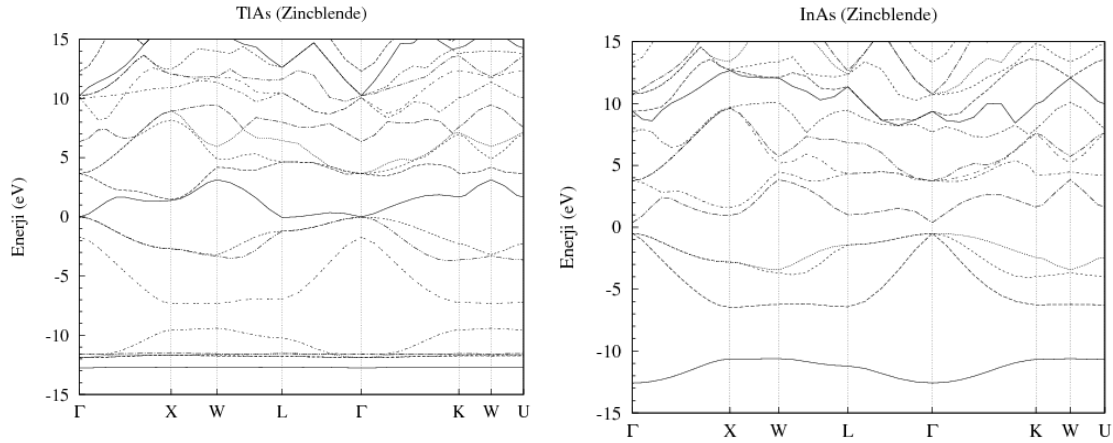
3. TlAs ve InAs’ın yapısal ve elektronik özellikleri

İlk olarak, TlAs ve InAs’in bileşiklerinin yapısal ve elektronik özelliklerini incelenmiştir. TlAs ve InAs ikili bileşiklerinin kararlı durumları Zincblende (B3) yapıdır ve uzay grubu $F43m(216)$ ’dır. TlAs ve InAs’ın toplam enerjileri, düzlem dalga psödopotansiyeller kullanılarak Zincblende fazındaki hacminin bir fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Enerji hacim eğrisi Vinet [22] denklemine fit edilerek örgü sabitleri ve bulk modulusü (yığın modülü) elde edilmiştir. Hesaplanan bütün değerler önceki hesaplamalar ile iyi uyum içindedir (Tablo 2). Zincblende (TlAs, InAs) taban durumu için hesaplanan değerler sırasıyla $a_{TlAs} = 6.052 \text{ \AA}$ ve $a_{InAs} = 5.9856 \text{ \AA}$ ’dır. InAs için, hesaplanan band aralığı 0.37 eV olup, deneysel değerlerden daha büyüktür. Diğer

bileşik olan TIAs'da, band aralığı neredeyse sıfır olup ve diğer teorik sonuçlarla çakışan yarı metal karakter göstermiştir. Hesaplanan elektronik band yapıları TIAs ve InAs için Şekil 1'de verilmiştir.

Tablo 2. TIAs ve InAs bileşikleri için örgü parametresi (a (Å)) ve bulk modulus (B (GPa)).

	a (Å)	B (GPa)
TIAs(Bu Çalış.)	6.052	45.2
TIAs[1]	6.382	44.37
TIAs[23]	5.946	49
InAs(Bu Çalış.)	5.9856	58.18
InAs [23]	6.031	60.32
InAs [24]	6.030	60.9



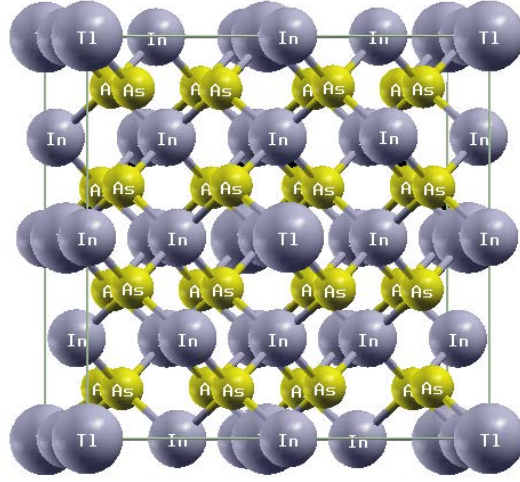
Şekil 1. TIIn ve InAs bileşiklerinin band yapıları.

3.1. $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımının yapısal ve elektronik özellikleri

Zincblende yapı olan InAs bileşiğin atomik koordinatları In (0.0 0.0 0.0) ve As (0.25 0.25 0.25) şeklindedir. InAs bileşiğini $2 \times 2 \times 2$ şeklinde büyütülürse 16 atomlu süper hücre elde edilir. Bu yapı Zincblende yapısını korumaya devam eder. InAs süper hücresine Tl katkılıandığında oluşan TIInAs alaşımının kristal yapısı Şekil 2 de verilmiştir. Malzemedeki In atomunun yerine Tl yerleştirildiğinde, yerleştirilen Tl atom sayısı oranında katkılama yapılmış olur. Bu durumda, Vegard yasasından yola çıkarsak, $Tl_xIn_{1-x}As$ 'ın örgü sabitleri Talyum katkılama oranı (x) ile ilişkili olarak ifade edilebilir. Bu sebeple, taban durumundaki $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımları için Vegard yasası temel alınarak hesaplamalar yapılmıştır. Üçlü Yüzey Merkezli Kübik (FCC) $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımının örgü parametresi Vegard yasası ile aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$a(x) = xa_{TIAs} + (1-x)a_{InAs} \quad (1)$$

burada $a(x)$, $Tl_xIn_{1-x}As$ 'ın örgü sabitidir, a_{TIAs} , TIAs'ın ve a_{InAs} , InAs'ın örgü sabitidir. Yüzde olarak Tl katkılamanın % 0, % 12.5, % 25, % 37.5, % 50, % 62.5, % 75, % 87.5 ve % 100 olduğu durum için hesaplama yapılmıştır. Zincblende $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının örgü sabitlerinin alaşıma olan katkılama miktarı (x) ile neredeyse doğru orantılı olduğu bulunmuş olup Şekil 3'de gösterilmiştir.

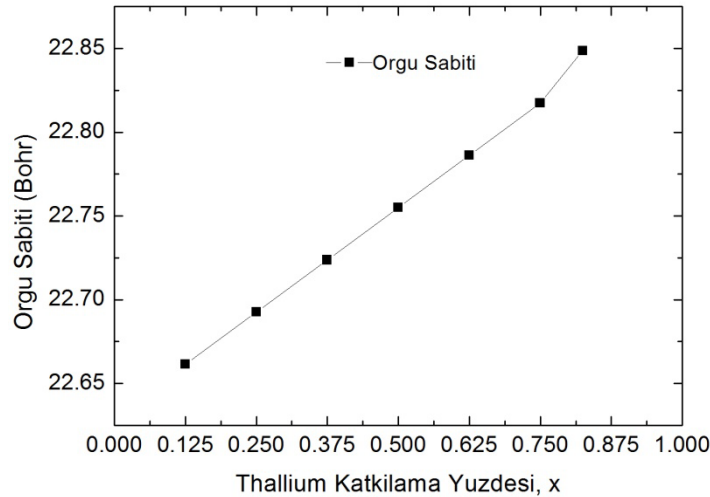


Şekil 2. TlInAs alaşımasının kristal yapısı.

$Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının band aralığını

$$E_g(x) = xE_{g,TlAs} + (1-x)E_{g,InAs} - bx(1-x) \quad (2)$$

ile ifade edilebilir. Burada, $E_g(x)$, $Tl_xIn_{1-x}As$, katkılama miktarına bağlı band aralığı enerjisidir; $E_{g,TlAs}$, TlAs'ın band aralığı enerjisidir; $E_{g,InAs}$ ise InAs'ın band aralığı enerjisidir ve b ise $Tl_xIn_{1-x}As$ 'ın band aralığı eğilme parametresidir. Her bir konsantrasyona bağlı olarak elde edilen band enerji aralığı değerleri Şekil 4'de gösterilmiştir ve eşitlik 2'den $0 < x < 1$ aralığında 1.0396 eV'lik bir ortalama band aralığı eğilme parametresi hesaplanmıştır.

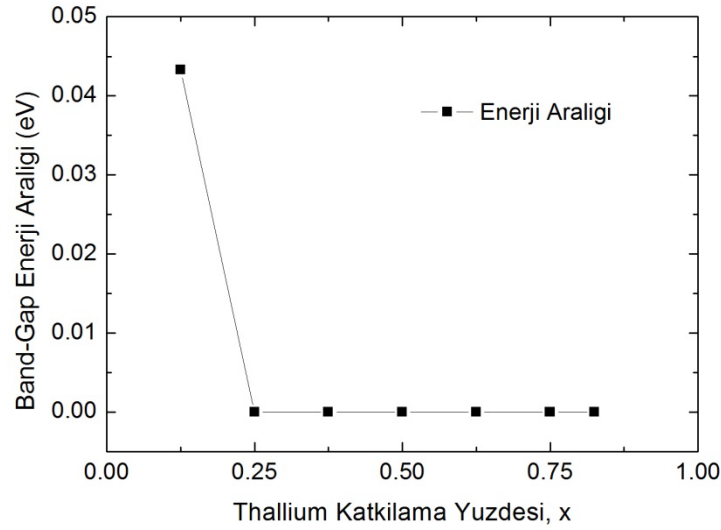


Şekil 3. TlInAs alaşımasının katkılama miktarına bağlı örgü sabiti değişimi.

Araştırmanın sonucu gösterdi ki, Tl konsantrasyonu attıkça, $Tl_xIn_{1-x}As$ 'ın band aralığı azalmaktadır. Tl yoğunluğunun yüksek olması halinde, alaşımda elektron konsantrasyonu daha yüksektir, bu da iletim bandının kenarını daha da düşürecektir. InAs ikili yapısının sahip olduğu band aralığı 0.37 eV iken %12.5 oranında Tl katkılandığında $Tl_{0.125}In_{0.875}As$ alaşımasının band aralığı 0.0433 eV'ye düşmektedir. Katkılama yüzdesi arttıkça enerji band aralığı 0.0 eV olarak hesaplanmıştır.

Şekil.4'de InAs'ların band aralığının büyük bir azalmasının fark edildiği, Talyum konsantrasyonuna bağlı olarak göstermektedir. Ayrıca $Tl_{0.125}In_{0.875}As$ enerji band diyagramı şekil 5 de ve toplam durum yoğunluğu (DOS) şekil 6'da çizilmiştir. TlAlAs'ın yapısında olduğu gibi band enerji aralığı değeri Tl katkılanması ile azalmaktadır yani benzer sonuçlar görülmüştür. [10] Bu alaşım malzemeleri kızılötesi optik cihazların yapımında oldukça faydalı olacağı düşünülmektedir.

Ayrıca, üçlü alaşımların band aralıkları için parabolik kompozisyon bir yapıya sahip olduğu kabul edilmektedir. Parabolik faktörün büyüklüğü eğilme parametresi olarak bilinmektedir. Doğrusal eğilme fonksiyonu, bu sonuçlarından yola çıkarak tanımlamak mümkündür. Bu eğrinin minimum değeri ve maksimum değeri vardır. Şekil 7 de konsantrasyon miktarına bağlı eğilme parametresinin değişimi çizilmiştir. Elde edilen sonuçlardan yola çıkarak, üçlü $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının konsantrasyona bağlı olarak eğilme parametresi üçüncü dereceden bir polinom denklemi ile temsil edilebilir ki bu polinom $b(x) = (-12.84817x^3 + 24.29015x^2 - 15.86767x + 4.17591)$ eV gibidir.

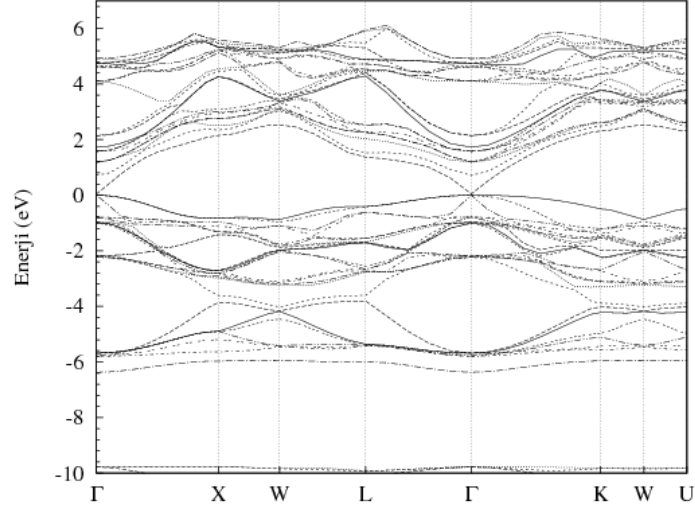


Şekil 4. TlInAs alaşımının katkılama miktarına bağlı enerji band aralığı değişimi.

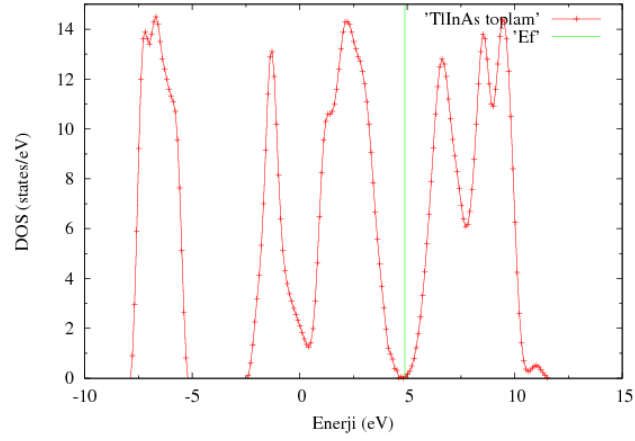
Katkılama miktarına bağlı eğilme fonksiyonu $b(x)$,

$$b(x) = \frac{x E_{g,TlAs} + (1-x) E_{g,InAs} - E_g(x)}{x(1-x)} \quad (3)$$

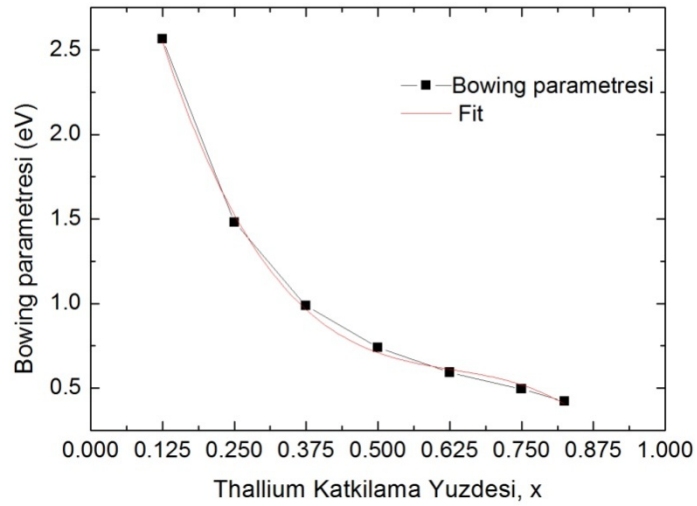
şeklinde ifade edilebilir.



Şekil 5. $Tl_{0.125}In_{0.875}As$ alaşımının enerji band yapısı.



Şekil 6. $Tl_{0.125}In_{0.875}As$ alaşımının toplam durum yoğunluğu (DOS).



Şekil 7. $TlInAs$ alaşımının katkilama miktarına bağlı bowling parametresi değişimi

Katkılama miktarına bağlı band aralığı ($E_g(x)$) ve eğilme ($b(x)$) parametresinin fiziksel kökenlerini anlamak için, b 'yi fiziksel olarak üç parçaya ayırmak gerekir. Eğilme parametresi bu üç parçanın toplamı olarak tanımlanır [25];

$$b = b_{VD} + b_{CE} + b_{SR} \quad (4)$$

Bu parametrenin bileşenleri ise hacim deformasyonu (b_{VD}), yük değişimi (b_{CE}) ve yapısal gevşeme (b_{SR}) olarak adlandırılmaktadır. b_{VD} terimi, InAs (TIAs) 'nın denge örgü sabiti a_{GaN} (a_{TIAs})' dan alaşım değerine $a(x)$ hidrostatik basınca göreli tepkisini ifade eder. İkinci terim b_{CE} , $a = a(x)$ 'da InAs ve TIAs'da yük transferine temsil etmektedir. Üçüncü terim b_{SR} , relax olamayan alaşım durumdan relax alaşım durumuna geçişteki band aralığının değişimini tanımlar, $a(x) \rightarrow a_{eq}$ $a(x)$. $b(x)$ 'in bileşenlerinin katkılama miktarına bağlı hesaplamak için

$$b_{VD} = \frac{E_{TIAs}(a_{TIAs}) - E_{TIAs}(a)}{1-x} + \frac{E_{InAs}(a_{InAs}) - E_{InAs}(a)}{x} \quad (5)$$

$$b_{CE} = \frac{E_{TIAs}(a)}{1-x} + \frac{E_{InAs}(a)}{x} - \frac{E_{TlInAs}(a)}{x(1-x)} \quad (6)$$

$$b_{SR} = \frac{E_{TlInAs}(a) - E_{TlInAs}(a_{eq})}{x(1-x)} \quad (7)$$

formülleri kullanılır.

Eğilme ($b(x)$) parametresi ve bileşenleri (b_{VD} , b_{CE} , b_{SR}) Tablo 3'de listelenmiştir.

Tablo 3. Talyum konsantrasyonuna bağlı olarak b , b_{VD} , b_{CE} ve b_{SR} 'nin (eV) değişimleri.

Katkılama (x)	% 12.5	% 25	% 32.5	% 50	% 62.5	% 75	% 82.5
b_{VD} (eV)	0.0600	0.2228	0.2219	0.2218	0.2211	0.2204	0.2200
b_{CE} (eV)	2.5680	1.2892	0.7860	0.5342	0.3837	0.2836	0.2120
b_{SR} (eV)	-0.0640	-0.0320	-0.0219	-0.0160	-0.0128	-0.0110	-0.0100
b (eV)	2.5640	1.4800	0.9860	0.7400	0.5920	0.4930	0.4220

b_{VD} 'nin önemi, üçlü alaşımı oluşturan ikili bileşiklerin örgü sabitlerinin uyumsuzluğuyla ilişkilendirilebilir. Yük transfer katkısı b_{CE} , her konsantrasyon değeri için b_{VD} 'den büyük bulunmuştur. Bu katkı, Tl ve In veya As atomlarının diğer elektron olumsuzluklarından kaynaklanmaktadır. Yapısal gevşeme b_{SR} 'nin katkısı zayıftır ve bu, dengedeki alaşımların örgü sabit uyumsuzluğundan veya Vegard'ın kuralı kullanılarak hesaplandığından kaynaklanmaktadır.

4. Sonuçlar ve tartışma

İlk prensipler hesaplamaları kullanan sayısal simülasyon programı ile Zincblende yapıdaki TIAs ve InAs ikili bileşiklerinin ve $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının örgü sabitleri hesaplanmıştır. TIAs ve InAs için bulunan sonuçlar literatürdeki diğer sonuçlar ile uyum içindedir. Farklı konsantrasyondaki $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının elektronik band yapısı hesaplanmıştır. Alaşımın örgü sabitlerinin Vegard yasasına uyumlu olduğu tespit edilmiştir olup, Yerel Yoğunluk Yaklaşımı kullanılarak, Zincblende yapısı için band

aralığı eğilme parametresi elde edilmiştir. Enerji band aralığı eğilme parametresi katkılama miktarına kuvvetli olarak bağlı olduğu bulunmuştur. $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının ortalama eğilme parametresi ~ 1.0396 eV olduğunu hesaplanmıştır. Simülasyon sonuçlarına göre, $Tl_xIn_{1-x}As$ alaşımlarının katkılama miktarına bağlı enerji aralığı eğilme parametresinin $b(x) = -12.84817x^3 + 24.29015x^2 - 15.86767x + 4.17591$ eV üçüncü derece polinom denklemi ile hesaplanabileceği ileri sürülmektedir. Bu sonuçların deneysel ve teorik çalışmaları yönlendireceğine inanılmaktadır.

Kaynaklar

- [1] Saidi-Houat, N., Zaoui, A. and Ferhat, M., Structural stability of thallium-V compounds, **Journal of Physics:Condensed Matter**, 19, 106221/1–18 (2007).
- [2] Chandvankar, S.S., Sharma, T.K., Shah, A.P., Chandrasekaran, K.S., Arora, B.M., Kapoor, A.K., Verma, D. and Sharma, B.B., Indium thallium phosphide: experiments versus predictions, **Journal of Crystal Growth** 213, 3, 250-258 (2000).
- [3] Koh, H., Asahi, H., Fushida, M., Yamamoto, K., Takenaka, K., Asami, K., Gonda, S. and Oe, K., Photoconductance measurement on TlInGaP grown by gas source MBE, **Journal of Crystal Growth**, 188, 107-112, (1998).
- [4] Berding, M.A., van Schilfgaarde, M., Sher, A., Antonell, M.J. and Abernathy, C.R., Thermodynamical properties of thallium-based III-V materials, **Journal of Electronic Materials**, 26, 6, 683-687, (1997).
- [5] Ferhat, M. and Zaoui, A., Do all III-V compounds have the zinc-blende or wurtzite ground state structure?, **Applied Physics Letters**, 88, 161902, (2006).
- [6] Krishnamurthy, S., Chen A., B. and Sher, A., Near band edge absorption spectra of narrow-gap III–V semiconductor alloys, **Applied Physics Letters**, 80, 7, 4045-4048, (1996).
- [7] Schilfgaarde, M.V., Chen, A.B., Krishnamurthy, S. and Sher, A., InTIP – a proposed infrared detector, **Applied Physics Letters**, 65, 2714-2716, (1994).
- [8] Saidi-Houata, N., Zaoui, A., Belabbes, A., and Ferhat, M., Ab initio study of the fundamental properties of novel III–V nitride alloys $Ga_{1-x}Tl_xN$, **Materials Science and Engineering B**, 162, 1, 26-31, (2009).
- [9] Takushima, M., Kobayashi, N., Yamashita, Y., Kajikawa, Y., Satou, Y., Tanaka, Y. and Sumida, N., Thallium incorporation during TlInAs growth by low-temperature MBE, **Journal of Crystal Growth**, 301-302, 117-120, (2007).
- [10] Erden Gulebaglan, S., The composition effect on the bowing parameter in the cubic $Tl_xAl_{1-x}As$, **Modern Physics Letters B**, 26, 30, 1250199-8, (2012).
- [11] Mankefos S. and Svensson S.P., Ab initio investigation of the electronic and geometric structure of Zincblende $Ga_{1-x}Tl_xAs$ alloys, **Journal of Physics: Condensed Matter**, 12, 1223-1237, (2000).
- [12] Van Schilfgaarde M., Chen An-Ben, Krishnamurthy S. and Sher A., InTIP – a proposed infrared detector material, **Applied Physics Letters**, 65(12) (1994).
- [13] Souza Dantas N., de Almeida J.S., Ahuja R., Persson C. and Ferreira da Silva A., Novel semiconducting materials for optoelectronic applications: $Al_{1-x}Tl_xN$ alloys, **Applied Physics Letters**, 92, 121914, (2008).
- [14] Milman, V., Winkler, B., White, J.A., Pickard, C.J., Payne, M.C., Akhmatkaya, E.V. and Nobes, R.H., Electronic structure, properties, and phase stability of inorganic crystals: A pseudopotential plane-wave study, **International Journal of Quantum Chemistry**, 77, 5, 895-910, (2000).

- [15] Cheng, D.Y., Wang, S.Q. and Ye, H.Q., Calculations showing a correlation between electronic density and bulk modulus in fcc and bcc metals, **Physical Review B**, 64, 024107, (2001) .
- [16] Geller, C.B., Wolf, W., Picozzi, S., Continenza, A., Asahi, R., Mannstadt, W., Freeman, A.J. and Wimmer, E., Computational band-structure engineering of III-V semiconductor alloys, **Applied Physics Letters**, 79, 368-370, (2001).
- [17] Ciftci, Y.O., Colakoglu, K. and Deligoz, E., A first-principles studies on TIX (X=P, As), **Central European Journal of Physics**, 6, 4, 802-806, (2008).
- [18] Liou, B.T., Yen, S.H. and Kuo, Y.K., First-principles calculation for bowing parameter of wurtzite $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, **Applied Physics A**, 81, 7, 1459-1463, (2005).
- [19] Baroni, S., Dal Corso, A., de Gironcoli S. and Giannozzi, P., (<http://www.pwscf.org>)
- [20] Hohenberg, P. and Kohn, W., Inhomogeneous electron gas, **Physical Review**, 136, 3, 864-871, (1964).
- [21] Monkhorst, H.J. and Pack, J.D., Special points for Brillouin-zone integrations, **Physical Review B**, 13, 5188-5192, (1976).
- [22] Vinet, P., Ferrante, J., Smith, J.R. and Rose, J.H., A universal equation of state for solids, **Journal of Physics C**, 19, 467, (1986).
- [23] Wang, S.Q. and Ye, H.Q., Plane-wave pseudopotential study on mechanical and electronic properties for IV and III-V crystalline phases with zinc-blende structure, **Physical Review B**, 66, 235111-235118, (2002).
- [24] Mendoza-Estrada, V., Romero-Baños, M., Dovale-Farelo, V., López-Pérez, W., González-García, A. and González-Hernández, R., Structural, elastic, electronic and thermal properties of InAs: A study of functional density, **Revista Facultad de Ingeniería**, 26, 46, 81-91, (2017).
- [25] Ahmed, R., Hashemifar, S.J., Akbarzadeh, H., Ahmed, M., and e-Aleem, F., Ab initio study of structural and electronic properties of III-arsenide binary compounds, **Computational Material Science**, 39, 3, 580-586,(2007).