

单层 InN 在多向应变下的结构演化与电子性质*

陈军军¹⁾ 田辉¹⁾ 闵楠^{1)†} 沈龙海^{1)‡}

1) (沈阳理工大学理学院, 沈阳 110159)

摘要

二维氮化铟(InN)在柔性电子领域具有广阔的应用前景.在实际应用中,该材料会受到多种形式的应变作用,从而影响其性能.因此,理解其在各种应变条件下的结构和电子演化,对于推动其实际应用具有重要意义.利用第一性原理计算方法,系统研究了单层 InN 在不同应变模式下的力学与电子响应行为.研究表明,InN 的面内特性呈现显著的各向异性,这源于不同晶向的键合特性.大的应变可以减小带隙,直至发生半导体-金属转变.本研究揭示了变形单层 InN 在复杂应变下的结构演化机制与规律,为应变工程半导体器件的开发提供了重要的理论依据.

关键词: 单层氮化铟, 应变效应, 第一性原理计算, 电子性质

PACS: 73. 22. -f, 71. 30. +h, 62. 25. -g, 71. 15. Mb

1. 引言

石墨烯的发现^[1-3]激发了人们对二维材料的兴趣.这类材料以其原子级平坦的层状结构、高比表面积,以及可精准调控的电子、光学和机械性能而闻名.^[4-7]此后,二维材料家族从单质形式扩展到二元和三元化合物,包括磷烯^[8-10]、砷烯^[11]、过渡金属二硫化物^[12-15]、III-V 族化合物^[16-18]和 MXenes^[19,20]等.二维材料面内的强共价键与原子级厚度,使其能够承受显著的拉伸、弯折甚至卷曲形变,具备优异的柔韧性,^[21]因此成为柔性电子器件的基础材料,在柔性传感器、可穿戴光电器件及可折叠显示屏等领域展现出广阔的应用前景.^[22]在柔性器件的服役过程中,形变不可避免地会在材料内部引入应变,进而通过改变晶格常数和原子键长来调控其能带结构、载流子输运及光学跃迁行为.^[23]因此,应变既是导致器件性能退化的潜在因素,也为主动调控材料物性提供了新的自由度.^[22]

在二维材料中,氮化铟(InN)由于窄带隙与高电子迁移率等优异特性备受关注.^[24-28]这些特性也让二维 InN 在柔性光电器件、气体传感器及晶体管等领域展现重要应用价值.^[18]然而,目前对二维 InN 物理性质的理解仍相对有限,^[24]尤其是其在复杂应变条件下的结构与电子性质演化规律不够明确.此外,衬底与 InN 单层间的异质结特性也会影响应变的实际分布与传递.^[29,30]面内应变调控已被证实是揭示二维材料物理特性的有效手段.^[31-33]因此,系统研究二维 InN 在不同应变模式下的力学响应与电子结构调控机制,将有助于填补其复杂应变下的研究缺口,推动其在柔性电子领域的应用.

针对二维 InN 的应变效应,已有系列理论模拟研究展开: Xu 等人通过双轴应变工程在单层 InN 中

* 国家自然科学基金(批准号: 12274304, 12404060); 辽宁省博士启动基金(批准号: 2024-BS-115); 辽宁省教育厅科学研究经费(批准号: LJ212410144038); 沈阳理工大学 2024 年引进高层次人才科研支持经费(批准号: 1010147001325)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: minnan@sylu.edu.cn

‡ 通讯作者. E-mail: shenlonghai@163.com

实现了半导体-金属转变^[34]，并理论构建了具有超高开关比的纳米器件。^[27] 这一突破源于应变对 InN 电子结构的精确调控：施加 $\geq 4\%$ 的双轴拉伸应变会诱发能带交叉。^[27] Liang 等人研究表明，6%的双轴压应变可使二维 InN 从间接带隙(0.31 eV)转变为直接带隙(0.89 eV)，显著提升载流子辐射复合效率。^[24] Luo 等人进一步证实价带顶(VBM)对应变的敏感性高于导带底(CBM)，且双轴应变可调控 III 族氮化物的异质结类型——例如在 $>1\%$ 的压应变下，InN/GaN 会从 III 型转变为 II 型异质结。^[32] Ghasemzadeh 等人报道，施加高达 5%的剪切应变可诱导单层 InN 发生间接-直接带隙转变。^[35] Peng 等人发现 g-InN 单层具有优异的形变能力，其临界应变阈值为 0.13 - 0.21。^[36] 这些研究共同揭示了 InN 在特定应变下的物理性质，并强调需进一步探索更多应变条件下 InN 的性能响应。

本研究系统考察了二维 InN 在不同应变模式、不同晶向下的应力响应、电子响应及结构演化规律。研究发现，二维 InN 在应变作用下呈现的多样化物理响应揭示了其面内的各向异性特征；理想强度的显著变化与带隙的规律性演化充分印证了应变对材料性能的关键调控作用。此外，本研究还探讨了剪切与拉伸/压缩应变叠加加载下的材料响应特性，明确了该耦合机制对应力峰值与带隙演变规律的协同调控作用。

2. 研究方法

本研究基于密度泛函理论(DFT)^[37-39]开展第一性原理计算，计算通过 Vienna Ab initio Simulation Package(VASP)软件包实现。交换关联泛函采用投影缀加波(PAW)方法和 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)广义梯度近似(GGA)。^[40,41] 平面波截断能设置为 700 eV。^[42] 为消除二维结构周期性镜像间的虚假相互作用，沿面外方向设置了 30 Å 的真空层。^[43] 选取 $8 \times 8 \times 1$ 的 Monkhorst-Pack k 点网格对布里渊区进行采样，用于焓变与应力响应的计算。所有结构均在无对称性约束条件下进行完全弛豫，同步优化晶胞形状和原子位置，直至能量和力的收敛标准分别达到 1×10^{-6} eV 和 0.001 eV/Å。^[44] 声子色散谱通过密度泛函微扰理论(DFPT)计算，使用 Phonopy 代码包实现。^[45,46] 本工作中应变 ϵ 与晶格常数的关系为： $(\epsilon + 1) \cdot L_0 = L$ ，其中 L_0 是晶格常数的初始量， L 是晶格常数在受到应变后的量。应变加载模拟过程中，沿特定晶向将晶格矢量以 0.01 的应变增量渐进变形。^[42] 保持加载方向及其面内垂直方向晶格矢量不变，对其余晶格矢量与所有原子位置进行完全优化。

3. 结果与讨论

首先构建了单层 InN 结构^[47](图 S1)，该结构呈现典型的二维六方晶格排列，镉原子与氮原子通过交替分布形成类蜂窝状平面构型。^[48] 每个镉原子通过 sp^2 杂化^[49]与三个相邻氮原子成键，形成稳定的平面三角形配位几何结构，计算得到的晶格常数为 $a = b = 3.64$ Å。随后计算了声子色散关系(图 S2)，布里渊区内无虚频存在，证实了单层 InN 结构的动力学稳定性。^[50]

采用第一性原理计算研究了单层 InN 沿高对称晶向[100]和[010]在拉伸应变下的力学响应与键长演化，结果汇总于图 1(a)。研究表明材料表现出显著的力学各向异性行为：[100]方向在应变 ϵ

$\epsilon=0.16$ 时达到最低峰值应力 2.52 GPa, 而[010]方向的力学强度更优异, 在 $\epsilon=0.19$ 时达到最大应力 3.51 GPa. 当应变达到临界值 $\epsilon=0.16$ 时, [100]方向发生结构失稳; 当应变超过该临界点至 $\epsilon=0.17$, 应力骤降, 同时代表性 In1-N2 键的键长从 2.23 Å 快速收缩至 2.15 Å. 这种涉及键断裂和应力突降的力学失效过程见图 1 (b). 在递增应变作用下代表性 In2-N2 键的依次断裂证实了应变诱导的结构相变. 相比之下, [010]方向表现出更强的力学韧性, 即使在高应变水平下也未观察到键断裂现象. 键长随应变增加逐步延伸至 $\epsilon=0.26$ 时的 3.11 Å, 较原始键长延长约 50%. 图 1 (c) 展示的特定应变间隔下结构演化过程, 进一步证实了该晶向的卓越韧性.

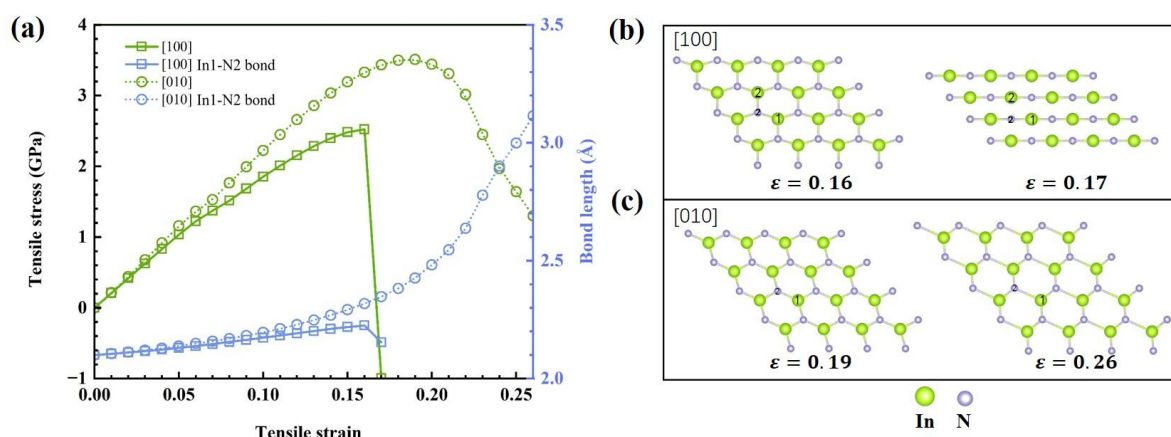


图 1 单层 InN 沿[100]和[010]方向的拉伸响应. (a) 应力-应变曲线与键长演化. (b) 沿[100]方向在 0.16 和 0.17 拉伸应变下的原子构型. (c) 沿[010]方向在 0.19 和 0.26 拉伸应变下的原子构型.

Fig. 1. Tensile response of monolayer InN along [100] and [010] directions. (a) Stress-strain curves and bond length evolution. (b) Atomic configurations at tensile strains of 0.16 and 0.17 along [100]. (c) Atomic configurations at tensile strains of 0.19 and 0.26 along [010].

在完成拉伸测试后, 系统研究了单层 InN 沿不同晶向在双轴压缩应变下的力学行为. 见图 2 (a), 压应力-应变曲线呈现显著的各向异性: 沿[100]方向在 $\epsilon=0.20$ 时峰值应力达 4.14 GPa, 而沿[010]方向在 $\epsilon=0.14$ 时峰值应力为 1.5 GPa, [100]方向的压缩强度较[010]方向高出 64%. 材料在[100]方向压缩下表现出优异的结构稳定性, 其应力-应变响应在达到极限强度前基本保持线性关系. 对峰值应变前后的结构进行对比分析 (图 2b), 结果显示其构型变化微小, 这进一步证实了 [100] 方向具有优异的抗压性能. 与之相反, [010]方向压缩时, 应力超过峰值点后呈渐进式下降; 对该方向压缩过程的结构演化分析 (图 2c) 表明, 随着应变增大, 材料呈现从六方相向立方相转变的趋势, 但其基本键合网络保持完整.

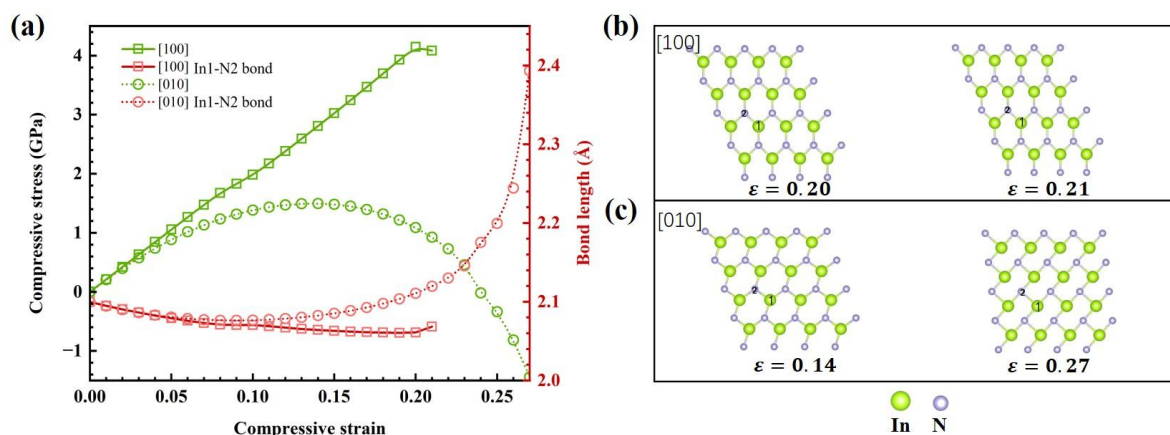


图 2 单层 InN 沿[100]及[010]方向的压缩响应. 其中: (a)应力-应变曲线及键长演化; (b)沿[100]方向在 0.20 与 0.21 压缩应变下的原子构型; (c)沿[010]方向在 0.14 和 0.27 压缩应变下的原子构型.

Fig. 2. Compressive response of monolayer InN along [100] and [010] directions. (a) Stress-strain curves and bond length evolution. (b) Atomic configurations at compressive strains of 0.20 and 0.21 along [100]. (c) Atomic configurations at compressive strains of 0.14 and 0.27 along [010].

综合结构在拉伸、压缩应变模式下的应力响应及键长响应行为,我们将拉伸和压缩两种应变下结构的响应行为结合在一起进行了进一步分析(如图 S5 所示,我们将拉伸应变设为正值).沿[100]方向:在拉伸应变 $\epsilon = -0.20$ (压缩)至 0.16 范围内,应力-应变曲线及键长-应变曲线呈准线性变化,应力值与键长均随应变增加而稳定增长.当应变超出该区间 ($\epsilon < -0.20$ 或 $\epsilon > 0.16$) 时,结构发生相变,表现为键长变化趋势逆转及应力值跳跃.值得注意的是,该方向在压缩下的应变临界点与应力峰值均高于拉伸的对应值,也高于[010]方向的压缩值,表明该方向具备更强的抵抗压缩形变的能力.沿[010]方向:拉伸与压缩的应力-应变曲线均呈现先升高后降低的趋势.两者在键长演化上存在明显差异,拉伸应变下键长随应变单调增加,而压缩应变下键长则先减少后增加.此外,拉伸应变在该方向下对应的应力峰值远高于压缩,也高于[100]方向在拉伸应变下的表现,表明该方向具备更强的抵抗拉伸形变的能力.

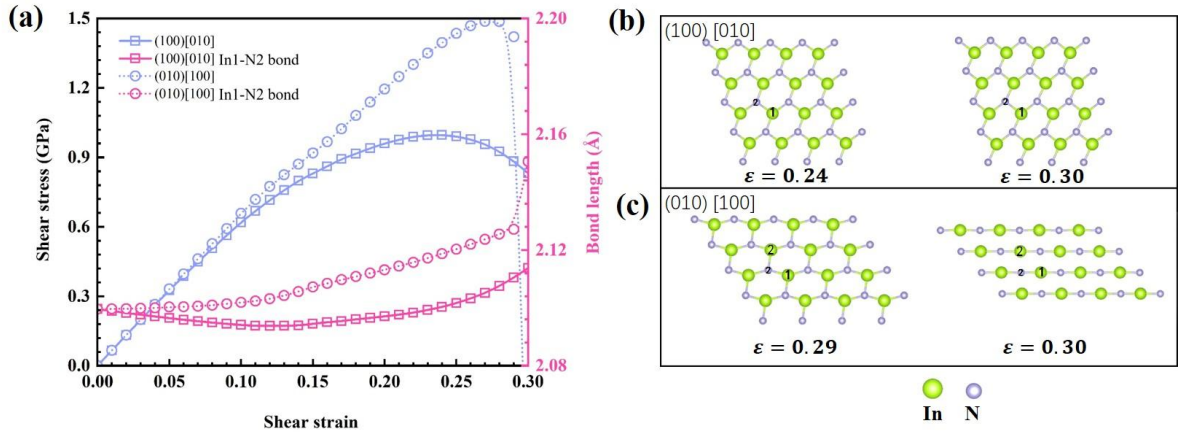


图 3 单层 InN 沿 (100) [010] 及 (010) [100] 方向的剪切响应. 其中: (a) 应力-应变曲线及键长演化; (b) 沿 (100) [010] 方向在 0.24 与 0.30 剪切应变下的原子构型; (c) 沿 (010) [100] 方向在 0.29 和 0.30 剪切应变下的原子构型.

Fig. 3. Shear response of monolayer InN along (100)[010] and (010)[100] directions. (a) Stress-strain curves and bond length evolution. (b) Atomic configurations at shear strains of 0.24 and 0.30 along (100)[010]. (c) Atomic configurations at shear strains of 0.29 and 0.30 along (010)[100].

单层 InN 的剪切响应在不同剪切方向上亦表现出显著的各向异性. 见图 3(a), 剪切应力-应变曲线显示, (100) [010] 方向在 $\epsilon=0.24$ 时达到最大应力 1.0 GPa, 而 (010) [100] 方向在 $\epsilon=0.27$ 时最大应力为 1.49 GPa. 这种强度各向异性直接体现在两者对比鲜明的结构演化中(图 3b 和 3c). 值得注意的是, 沿 (010) [100] 方向, 当应变超过峰值应变至 $\epsilon=0.30$ 时, 结构发生突发性失效, 具体表现为关键 In2-N2 键的断裂, 同时伴随 In1-N2 键的快速伸长 (如图 3 c 所示), 这也证实了剪切诱导的结构相变.

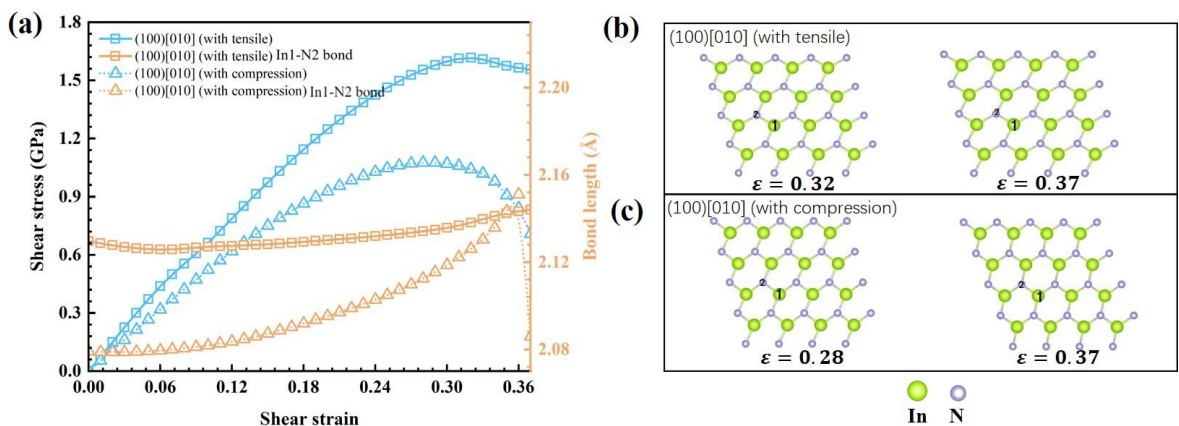


图 4 单层 InN 沿 (100) [010] 方向在 [100] 方向存在 5% 预应变时的剪切响应. 其中: (a) 应力-应变曲线及键长演化; (b) 在 5% 拉伸预应变条件下, 剪切应变为 0.32 与 0.37 时的原子构型; (c) 在 5% 压缩预应变条件下, 剪切应变为 0.28 和 0.37 时的原子构型.

Fig. 4. Shear response of monolayer InN along (100)[010] with 5% pre-strain along [100]. (a) Stress-strain curve and bond length evolution. (b) Atomic configurations at shear strains of 0.32 and 0.37 with 5% tensile pre-strain. (c) Atomic configurations at shear strains of 0.28 and 0.37 with 5% compressive pre-strain.

为探究更复杂应变状态的影响，进一步研究了拉伸/压缩与剪切复合加载下的应力-应变关系。本研究沿[100]方向预设 0.05 的拉伸应变，再沿(100)[010]方向施加剪切变形(示意图见图 4a)。值得注意的是，拉-剪复合载荷模式的峰值应力显著提升至 1.62 GPa，相较于图 3(a)纯剪切条件下提高 62%。该复合载荷条件下的对应结构演化见图 4(b)所示，展现出显著的强化效应。

相比之下，压-剪复合载荷的应力演化与纯剪切相似，但仍存在可观测的增强效应：达到峰值应力所需应变略有增加，且峰值强度适度提高。具体而言，压-剪载荷下峰值应力在 $\epsilon=0.28$ 时增至 1.08 GPa，而纯剪切在 $\epsilon=0.24$ 时峰值应力为 1.0 GPa。图 4(c)展示了这些临界应变阶段的原子构型。综合研究表明，单层 InN 在超越简单剪切的复杂应变条件下表现出优异的抗变形能力，揭示了复杂应变状态下材料力学响应的协同增强机制。

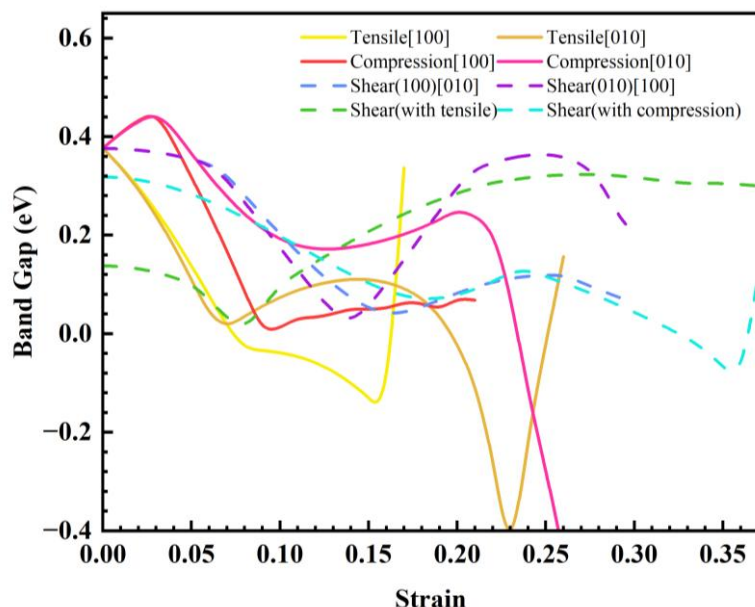


图 5 单层 InN 在多种应变条件下的带隙演化与对比。应变条件包括：[100]及[010]方向的拉伸与压缩，(100)[010]与(010)[100]方向的纯剪切，以及沿(100)[010]剪切并叠加[100]方向 5%拉伸/压缩预应变。

Fig. 5. Bandgap evolution and comparison in monolayer InN under: tensile/compressive strains along [100] and [010]; pure shear along (100)[010] and (010)[100]; and (100)[010] shear with 5% [100] tensile/compressive pre-strain.

单层 InN 在上述应变条件下展现出异常丰富的力学与结构变化。为深入研究这些外部应变对其电子性质的影响，计算了三种不同应变模式及复合载荷条件下 InN 的带隙演化(结果汇总于图 5)。通过区分应变的取向依赖性，本研究更精确地捕捉了材料电子性质的各向异性响应。分晶向的研究结果表明，沿[100]拉伸方向时，带隙在 $\epsilon=0.08$ 时完全闭合(图 5)，诱导材料发生金属化转变。当应变达到 $\epsilon=0.17$ 时发生键断裂，如图 1(b)，断键产生的未成对电子形成局域态，进而使带隙重新打开，材料恢复半导体特性。类似地，沿[010]拉伸方向也发生金属化现象——带隙在 $\epsilon=0.07$ 时急剧收缩至接近

闭合的 0.016 eV，随后重新开启并在 $\epsilon=0.14$ 达到最大值 0.11 eV，最终于 $\epsilon=0.20$ 再次闭合. 金属态持续至 $\epsilon=0.25$ ，此后材料恢复半导体特性. 通过绘制不同晶向拉伸应变下的带隙演化图谱，本研究证实了拉伸应变作为 InN 带隙工程有效工具的潜力.

在压缩应变作用下，两个晶向均呈现带隙初始增强现象，在 $\epsilon=0.03$ 时达到最大值 0.45 eV. 超过此应变点后，两方向均表现出带隙抑制效应，其中[100]方向在 $\epsilon=0.03-0.09$ 区间内显示出更强的抑制特性. 值得注意的是，[010]压缩方向在高应变下展现出独特的电子行为：在 $\epsilon=0.20$ 处出现 0.25 eV 的次级带隙峰值，随后带隙快速抑制直至 $\epsilon=0.24$ 时完全闭合并实现金属化转变. 这一发现不仅揭示了本质的电子各向异性，同时表明[010]压缩可作为 InN 带隙调控的潜在途径.

单层 InN 的带隙对低剪切应变响应微弱，这与前期研究结果一致.^[32] 即使达到 $\epsilon=0.06$ 的剪切应变阈值，带隙减小幅度仍仅为 0.03 eV. 观测到的带隙演化规律表明，要实现显著调控需要超越该阈值的应变条件. 在复合载荷条件下， $\epsilon=0.05$ 的拉伸预应变导致初始带隙降至 0.14 eV. 值得注意的是，在整个应变过程中带隙不仅保持开放，超过 0.08 应变后还呈现渐进展宽趋势，在 $\epsilon=0.27$ 时达到 0.32 eV. 相比之下，压-剪复合载荷的带隙演化与纯剪切相似，在 $\epsilon=0.33$ 时发生带隙闭合. 但需特别说明的是，该金属态具有瞬态特性，带隙会快速重新打开.

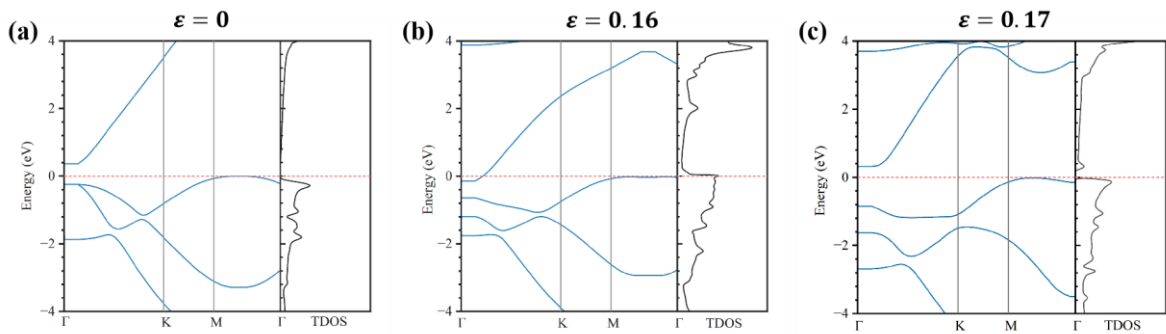


图 6 单层 InN 在(a)平衡状态，(b) 0.16 及(c) 0.17 的[100]方向拉伸应变下的能带结构与总态密度.

Fig. 6. Calculated electronic band structures and total density of states (TDOS) of monolayer InN under (a) equilibrium, (b) 0.16, and (c) 0.17 tensile strain along the [100] direction.

单层 InN 在[100]拉伸应变作用下经历了从半导体到金属^[27, 34]、再回归半导体的电子态转变. 为揭示这一可逆转变的电子机制，我们分析了平衡态 ($\epsilon=0$) 及[100]拉伸方向两个临界应变点 ($\epsilon=0.16$ 和 0.17) 的能带结构与总态密度(TDOS)，结果如图 6 所示. 在三个关键应变点处，单层 InN 在平衡态呈现 0.38 eV 的间接带隙，如图 6(a) 所示，与先前报道相近^[25, 27]，证实其窄带隙半导体本质. 如图 5 所示，InN 在[100]拉伸方向的 0.08 - 0.16 应变区间内表现出金属特性. 图 6(b) 展示了金属性终止前瞬间 ($\epsilon=0.16$) 的电子态——可观察到价带顶 (VBM) 与导带底 (CBM) 在费米能级处存在轻微交叠，同时费米能级附近呈现较高的电子态密度. 当应变增至 0.17 时，图 6(c) 所示，VBM-CBM 交叠消失，对应前述键断裂诱导的局域态形成，导致 0.34 eV 带隙重新开启并恢复半导体行为. 这一结果揭示了[100]拉伸应变诱导 InN 电子结构发生上述可逆转变的电子机制，为应变可调柔性电子器件设计提供理论参

考.

4. 结论

本研究揭示了单层 InN 在拉伸、压缩、剪切及复合应变等多向应变模式下的结构演化与电子响应,发现了该材料在应变调控下的系列物理现象.研究表明,单层 InN 的面内力学响应与电子性质均呈现显著的各向异性;纯剪切应变需超过 0.06 的阈值才能显著改变材料的电子性质;在剪切应变基础上叠加拉伸/压缩应变最高可使峰值应力提升 62%;相对于其他应变形式,拉伸能更有效地调控材料性能.本工作深化了对复杂应变下二维半导体性质演变规律的理解,为应变工程在 InN 基柔性光电器件的设计与制备中提供了理论依据.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Katsnelson M I, Grigorieva I V, Dubonos S V, Firsov A A 2005 *Nature* **438** 197
- [3] Geim A K, Novoselov K S 2007 *Nat. Mater.* **6** 183
- [4] Chen F, Ji X H, Lau S P 2020 *Mater. Sci. Eng. R* **142** 100578
- [5] Zhang Q, Ying H T, Li X, Xiang R, Zheng Y J, Wang H M, Su J, Xu M X, Zheng X, Maruyama S, Zhang X F 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 31861
- [6] Wang S K, Shi K, Li J, Lyu J, Li F Y 2024 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **57** 425301
- [7] Chen F, Tang Q, Ma T, Zhu B H, Wang L Y, He C, Luo X L, Cao S J, Ma L, Cheng C 2022 *InfoMat* **4** e12299
- [8] Batmunkh M, Bat-Erdene M, Shapter J G 2016 *Adv. Mater.* **28** 8586
- [9] Yang S, Hu Z P, Wang W H, Cheng P, Chen L, Wu K H 2020 *Chin. Phys. Lett.* **37** 096803
- [10] Li L K, Yu Y J, Ye G J, Ge Q Q, Ou X D, Wu H, Feng D L, Chen X H, Zhang Y B 2014 *Nat. Nanotechnol.* **9** 372
- [11] Kekic D, Durgun E, Ciraci S 2016 *Phys. Rev. B* **94** 205409
- [12] Xiong L W, Wang K, Li D L, Liu X G, Wen J, Liu Z T, Zhang H 2020 *FlatChem* **21** 100161
- [13] Chen Y T, Liu J Y, Zhou L Y, Yu H, Li T, Guan Q, Li N, Chai Y, Zhang G Y 2026 *Chin. Phys. B* **35** 016803
- [14] Li Z S, Cao X R, Wu S Q, Wu J Y, Wen Y H, Zhu Z Z 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 166201 (in Chinese) [李祗烁, 曹欣睿, 吴顺情, 吴建洋, 文玉华, 朱梓忠 2025 *物理学报* **74** 166201]
- [15] Choi W, Choudhary N, Han G H, Park J, Akinwande D, Lee Y H 2017 *Mater. Today* **20** 116

- [16] Miao N H, Xu B, Bristowe N C, Zhou J, Sun Z M 2017 *J. Am. Chem. Soc.* **139** 11125
- [17] Zhao G, Liang H P, Duan Y F 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 096301 (in Chinese) [赵罡, 梁汉普, 段益峰 2023 *物理学报* **72** 096301]
- [18] Wang W L, Jiang H S, Li L H, Li G Q 2021 *Rep. Prog. Phys.* **84** 086501
- [19] Dhamodharan D, Dhinakaran V, Byun H S 2022 *Carbon* **192** 366
- [20] Yin X Z, Wang H, Wang Q H, Jiao N, Ni M Y, Zheng M M, Lu H Y, Zhang P 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 097404
- [21] Blundo E, Cappelluti E, Felici M, Pettinari G, Polimeni A 2021 *Appl. Phys. Rev.* **8** 021318
- [22] Du J L, Yu H H, Liu B S, Hong M Y, Liao Q L, Zhang Z, Zhang Y 2021 *Small Methods* **5** 2000919
- [23] Roldán R, Castellanos-Gomez A, Cappelluti E, Guinea F 2015 *J. Phys.: Condens. Matter* **27** 313201
- [24] Liang D, Quhe R, Chen Y J, Wu L Y, Wang Q, Guan P, Wang S M, Lu P F 2017 *RSC Adv.* **7** 42455
- [25] Kumar V, Roy D R 2018 *J. Mater. Sci.* **53** 8302
- [26] Sun H, Liu J, Chen J J, Shen L H 2021 *Journal of Shenyang Ligong University* **40** 49 (in Chinese) [孙辉, 刘俊, 陈建金, 沈龙海 2021 *沈阳理工大学学报* **40** 49]
- [27] Xu Z H, Wang Z Y, Jiang J L, Wei K Y, Liu G G, Ke S H, Luo B 2025 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **58** 045104
- [28] Syed N, Stacey A, Zavabeti A, Nguyen C K, Haas B, Koch C T, Creedon D L, Della Gaspera E, Reineck P, Jannat A, Wurdack M, Bamford S E, Pigram P J, Tawfik S A, Russo S P, Murdoch B J, Kalantar-zadeh K, McConville C F, Daeneke T 2022 *ACS Nano* **16** 5476
- [29] Wang K J, Cao Y, Simon J, Zhang J, Mintairov A, Merz J, Hall D, Kosel T, Jena D 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 162110
- [30] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, Ager J W III, Haller E E, Lu H, Schaff W J, Saito Y, Nanishi Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3967
- [31] Dai Z H, Liu L Q, Zhang Z 2019 *Adv. Mater.* **31** 1805417
- [32] Luo Z J, Yang Y Y, Yang X Z, Liu B, Liu X F 2019 *Mater. Res. Express* **6** 115915
- [33] Thanh V V, Van N D, Truong D V, Hung N T 2022 *Appl. Surf. Sci.* **582** 152321
- [34] Kumar N, Chaurasiya R, Dixit A 2022 *Nanotechnology* **33** 045202
- [35] Ghasemzadeh F, Kanjouri F 2018 *Sci. China Technol. Sci.* **61** 535
- [36] Peng Q, Sun X, Wang H, Yang Y B, Wen X D, Huang C, Liu S, De S 2017 *Appl. Mater. Today* **7** 169
- [37] Zhao H X, Yang Y, Shu X, Wang Y W, Ran Q P 2018 *Adv. Colloid Interface Sci.* **256** 230
- [38] Verma A K, Modak P, Sharma S M 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 325215
- [39] Wei C, Chen L M, Yang C, Liu C S, Xie Q G, Geng Z X 2024 *J. Mol. Struct.* **1296** 136923

- [40] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** A1133
- [41] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [42] Min N, Wang D, Liu Z H, Song X Q, Meng X, Li Q 2024 *J. Phys. Chem. Lett.* **15** 2904
- [43] Qiu D C, Zhang Z L, Li J, Cheng S H, Li H D 2018 *Diam. Relat. Mater.* **84** 55
- [44] Kumar P, Roy D R 2023 *Synth. Met.* **293** 117281
- [45] Kempa K A, Karch J, Wrona I A, Durajski A P 2025 *Comput. Mater. Sci.* **246** 113343
- [46] Zeng X Y, Chen Y T, Jiang Y F, Sui L Z, Chen A M, Jin M X 2024 *J. Appl. Phys.* **136** 065101
- [47] Ye C, Peng Q 2023 *Crystals* **13** 12
- [48] Sakharova N A, Pereira A F G, Antunes J M, Chaparro B M, Fernandes J V 2023 *Metals* **13** 73
- [49] Ben J W, Liu X K, Wang C, Zhang Y P, Shi Z M, Jia Y P, Zhang S L, Zhang H, Wang Y, Li D B, Sun X J 2021 *Adv. Mater.* **33** 2006761
- [50] Faraji M, Bafekry A, Fadlallah M M, Jappor H R, Nguyen C V, Ghergherehchi M 2022 *Appl. Surf. Sci.* **590** 152998

录用稿件，非最终出版稿

Structural Evolution and Electronic Properties of Monolayer InN under Multidirectional Strain*

Chen Junjun¹⁾ Tian Hui¹⁾ Min Nan^{1)†} Shen Longhai^{1)‡}

1) (School of Science, Shenyang Ligong University, Shenyang 110159, China)

ABSTRACT

Two-dimensional indium nitride (InN) exhibits promising application prospects in flexible electronics owing to its attractive intrinsic properties. In practical applications, materials are inevitably subjected to various types of strain induced by substrates, defects, and other factors, which significantly modifies their properties. Therefore, elucidating the structural and electronic evolution of InN under diverse strain conditions is critical for promoting its practical applications. Using first-principles calculations, we systematically investigate the mechanical and electronic responses of monolayer InN under complex strain conditions, including various strain modes and combined strain configurations along different crystallographic directions. Our results demonstrate that the in-plane properties of InN show pronounced anisotropy, originating from the orientation-dependent bonding characteristics along different in-plane crystallographic directions. Strain can effectively modulate the bandgap of the structure while deforming its crystal geometry. With increasing strain, the bandgap gradually decreases, and sufficiently large strain along specific directions induces a semiconductor-to-metal transition. By combining different strain loading schemes, we identify mechanical and electronic responses distinct from those under pure strain, implying the complexity and tunability of strain-governed behaviors. This work reveals the structural evolution mechanisms of monolayer InN under complex strain conditions, providing significant theoretical guidance for the design and development of InN-based strain-engineered semiconductor devices.

Keywords: monolayer InN, strain effect, first-principles calculations, electronic properties

PACS: 73.22.-f, 71.30.+h, 62.25.-g, 71.15.Mb

非最终出版稿

* This research was supported by the National Natural Science Foundations of China (Grant 12274304 and 12404060); Liaoning Province Doctoral Start-up Foundation (Grant 2024-BS-115); Scientific Research Fund of Liaoning Provincial Education Department (Grant LJ212410144038) and Shenyang Ligong University 2024 introduced high-level talent research support funds (Grant 1010147001325).

† Corresponding author. E-mail: minnan@sylu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: shenlonghai@163.com