

专题: 高压下的光电物性调控与原位表征

高压下三元半导体  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  结构、弹性及电子性质的第一性原理研究\*陈美娟<sup>1)</sup> 郭佳芯<sup>1)</sup> 吴浩<sup>1)</sup> 郑潇然<sup>1)</sup> 闵楠<sup>1)</sup>  
田辉<sup>1)†</sup> 李全军<sup>2)</sup> 都时禹<sup>3)4)5)</sup> 沈龙海<sup>1)‡</sup>

1) (沈阳理工大学理学院, 沈阳 100159)

2) (吉林大学, 超硬材料国家重点实验室, 长春 130012)

3) (哈尔滨工程大学材料科学与化学工程学院, 哈尔滨 150001)

4) (中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 宁波 315201)

5) (中国石油大学(华东)材料科学与工程学院, 青岛 266580)

(2025年3月7日收到; 2025年4月5日收到修改稿)

基于密度泛函理论的第一性原理, 系统研究了压力对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  晶体结构、弹性性能及电子性质的影响.  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  晶格常数随压力增加逐渐减小, 同时表现出各向异性的压缩特性, 沿  $c$  轴方向具有较高的压缩率. 在力学性能方面,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的体积模量随压力增加而增大, 表明材料抗压缩性显著增强. 值得一提的是,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的维氏硬度随压力升高逐渐降低, 表明高压可能引发  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  塑性变形. 弹性常数与声子谱计算结果表明,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 0—30 GPa 压力范围内具有良好的力学稳定性和动力学稳定性. 能带结构计算结果表明随着压力的增加,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的带隙几乎呈线性增长, 从 0 GPa 时的 3.35 eV 增加到 30 GPa 的 4.24 eV, 表明压力对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的电子结构具有显著的调控能力. 本研究对 Al-In-N 化合物的晶体结构、稳定性及高压下的能带结构和力学性质的深入研究, 不仅拓宽了 III 族氮化物材料的应用潜力, 还为开发新型功能材料提供了重要的理论参考.

关键词: 三元半导体, 高压, 第一性原理, 带隙

PACS: 71.20.Nr, 62.50.-p, 63.20.dk, 71.20.-b

DOI: 10.7498/aps.74.20250287

CSTR: 32037.14.aps.74.20250287

## 1 引言

III-V 族氮化物半导体材料因其在发光二极管(LED)、激光二极管(LD)、光电探测器以及分布式布拉格反射器(DBR)等领域的广泛应用而备受关

注<sup>[1-5]</sup>. 其中, AlN 凭借其宽带隙 (6.2 eV)、高热导率以及优异的化学稳定性, 在紫外光电器件和高温环境中表现出显著优势<sup>[6-8]</sup>. 与之相比, InN 以其窄带隙 (0.7 eV) 和高载流子迁移率在红外光电器件及高速电子器件中展现出独特的优势<sup>[9,10]</sup>. 然而, InN 的热力学稳定性较差, 在高温环境中容易发生

\* 国家自然科学基金(批准号: 12274304, 12404060)、辽宁省博士研究启动基金(批准号: 2024-BS-115)、辽宁省教育厅项目(自主选题项目)(批准号: LJ212410144038)、沈阳理工大学 2022 年引进高层次人才科研支持经费(批准号: 1010147001132) 和沈阳理工大学 2024 年引进高层次人才科研支持经费(批准号: 1010147001325) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: huitian2022syu@126.com

‡ 通信作者. E-mail: shenlonghai@163.com

分解,其化学稳定性和机械性能也较弱,限制了其在极端条件下的应用<sup>[11,12]</sup>.

AlN 和 InN 的互补特性为 III-V 族氮化物半导体材料性能的调控提供了潜在可能,研究人员通过在 AlN 中引入 In 原子构建三元化合物  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  体系,旨在获得更优异的材料特性.  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  材料的优势在于,In 原子的掺入不仅能够调节材料的晶格常数,还可以显著改变其带隙大小和光电性能<sup>[13]</sup>,实现从红外到紫外的宽带隙覆盖<sup>[14-17]</sup>.例如,Chen 等<sup>[18]</sup>通过射频磁控溅射法成功制备了  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  薄膜,发现随着 In 含量的增加, $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  带隙从 2.95 eV 减小到 2.20 eV. Moussa 等<sup>[19]</sup>通过第一性原理研究了  $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  的晶体结构、电子结构和光学性质,发现随着 Al 含量的增加,晶格常数减小而体积模量增大.此外, $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  还兼具 AlN 的高热稳定性和 InN 的高载流子迁移率.更为重要的是, $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  的多种优异性能进一步扩展了其在不同应用场景中的潜力<sup>[20-24]</sup>.例如,Dong 等<sup>[25]</sup>研究表明, $\text{Al}_{0.83}\text{In}_{0.17}\text{N}/\text{GaN}$  器件在水溶液中表现出比传统的 AlGaIn/GaN 具有更高的灵敏度、更快的响应时间、更低的退化和更好的稳定性,显示了其在传感器领域的巨大优势.此外,Li 等<sup>[26]</sup>的研究显示与 AlGaIn/GaN 异质结构相比 AlInN/GaN 异质结构构成的高电子迁移率晶体管 (HEMTs) 的片电阻显著降低了 51.2%,大幅提升了器件的电流驱动能力和输出性能. Robin Chang 等<sup>[27]</sup>研究表明, $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{N}$  在紫外光谱范围内表现出优异的吸收性能和较高的折射率,适用于光电探测器件.另据 Borovac 等<sup>[28]</sup>报道,AlInN 材料还具有优异的高温稳定性(可达 950—1050 °C),表明 Al-In-N 材料在高性能电子器件领域具有广阔的应用前景,进一步拓宽了其在极端条件下的应用范围.

力学性质在材料设计与优化中发挥着重要作用,尤其是在应力和压力作用下,材料的力学响应决定了其稳定性与应用前景.研究表明,氮化物半导体的力学性能(如弹性模量和硬度)在材料的性能优化过程中起到了至关重要的作用.例如,Yonenaga 等<sup>[29]</sup>通过纳米压痕法测量了生长在蓝宝石基底上的氮化铟(InN)薄膜,杨氏模量为  $(184 \pm 5)$  GPa,体积模量和剪切模量分别为  $(99 \pm 3)$  GPa 和  $(77 \pm 2)$  GPa. InN 薄膜的力学性能与其晶体结构密切相关,为理解氮化物半导体材料的力学行为提供了重要依据. Tan 等<sup>[30]</sup>通过第一

性原理计算研究了 AlN 的力学性质,发现纤锌矿(WZ)结构的 AlN 在抗压、抗剪切和弹性各向异性方面优于闪锌矿(ZB)结构,同时两者均表现出脆性.

压力作为一种重要的外部调控手段,能够通过改变原子间距、化学键合特性和电子云分布<sup>[31]</sup>,进而改变材料的晶体结构<sup>[32]</sup>、电子性质<sup>[33]</sup>和光学性质<sup>[34]</sup>.尽管 Al-In-N 体系材料展现了广泛的应用潜力<sup>[35]</sup>,但目前较多的是通过调节 Al 和 In 的组分比例来实现性能优化,用压力调控值得我们进一步探究. Robin Chang 等<sup>[36]</sup>在 2016 年通过 USPEX 结构搜索和 VASP(Vienna *ab initio* simulation package)<sup>[37-41]</sup>计算发现在众多 Al-In-N 体系中,在常压下正交相  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  为热力学最稳定结构,其形成焓为  $-0.0114$  eV/block.因此,本文基于此发现,对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在不同压力下的晶体结构、力学性质、电子特性进行系统研究.分析压力对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  晶格常数和弹性常数的影响,并探讨其各向异性.通过声子谱计算验证  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 0—30 GPa 压力范围内的动力学稳定性.探究了压力下  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  带隙的变化,并对其变化规律进行了系统分析.本研究不仅为优化  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料性能提供理论基础,还为新型高效器件的设计和开发指明了方向.

## 2 计算细节

密度泛函理论(DFT)计算使用 VASP 代码实现,通过广义梯度近似(GGA)中的 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)方法对电子间的相互作用和相关势进行校正<sup>[42,43]</sup>.优化过程中的总能量收敛标准  $1 \times 10^{-6}$  eV/atom,力的收敛标准为  $1 \times 10^{-4}$  eV/Å.其中,平面波截断能设置为 520 eV,采用  $5 \times 9 \times 10$  Monkhorst Pack 网格<sup>[44]</sup>进行布里渊区  $k$  点采样.声子谱计算使用 PHONOPY<sup>[45,46]</sup>程序包,超晶胞设置为  $2 \times 2 \times 2$ .本研究采用了 HSE06 杂化泛函(混合参数  $\alpha = 0.25$ )<sup>[47]</sup>计算了  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  原胞的能带结构,并在  $7 \times 7 \times 8$  的  $k$  点网格进行自洽迭代计算.该方法结合了 Hartree-Fock 和 DFT 的交换条件,能够有效描述材料的电子结构和动态行为,提高了带隙计算的准确性<sup>[48-50]</sup>.

## 3 结果与讨论

### 3.1 晶体结构

$\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 0 GPa 条件下优化后的晶胞结构

如图 1 所示,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的晶体结构为正交相, 所属空间群为  $Cmc2_1$  (No.36).  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的晶胞包含 24 个原子, 其中包含 8 个等价的 Al 原子, Wyckoff 位置为  $8b$  (0.329, 0.664, 0.560), 4 个等价的 In 原子, Wyckoff 位置  $4a$  (0, 0.678, 0.556); 8 个等价的  $\text{N}_1$  原子  $8b$  (0.815, 0.852, 0.424) 和 4 个等价的  $\text{N}_2$  原子  $4a$  (0, 0.298, 0.475).

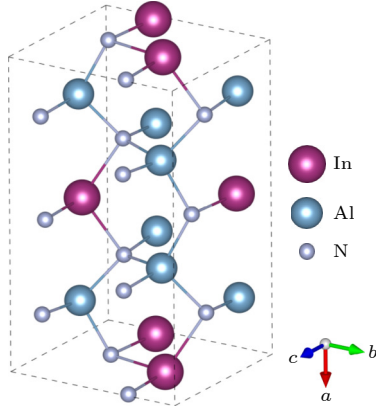


图 1  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的晶体结构  
Fig. 1. Crystal structure of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$ .

为了研究压力对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  晶体结构的影响, 计算了 0—30 GPa 下  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  晶格常数  $a$ ,  $b$ ,  $c$  的值, 结果如表 1 所列. 从表 1 可以看出, 随着压力的增加,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的晶格常数沿  $a$ ,  $b$  和  $c$  轴方向均呈现逐渐减小的趋势.

表 1  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在不同压力下的晶格参数  
Table 1. Lattice parameters of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  under different pressures.

Pressure/GPa	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$
0	9.832	5.654	5.250
5	9.749	5.603	5.195
10	9.669	5.557	5.149
15	9.600	5.516	5.107
20	9.535	5.478	5.068
25	9.477	5.445	5.032
30	9.422	5.413	4.999

图 2 给出计算得到的  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  相对晶格常数 ( $a/a_0$ ,  $b/b_0$ ,  $c/c_0$ ) 和相对体积 ( $V/V_0$ ) 随压力变化的关系图. 在给定压力范围内 (0—30 GPa),  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的晶格常数  $c$  的变化比  $a$  和  $b$  的变化更为显著, 这表明该材料具有各向异性的压缩特性. 这一现象可能与沿  $c$  轴方向的键合较弱, 使得压缩在此方向上更为显著.  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的相对体积 ( $V/V_0$ )

在 0—30 GPa 的压力范围内降低了 12.6%, 这表明外部压力对其晶体结构产生了显著影响. 另外, 随着压力的增加,  $V/V_0$  的变化逐渐趋于平稳, 这可能与高压下晶体化学键强度有关.

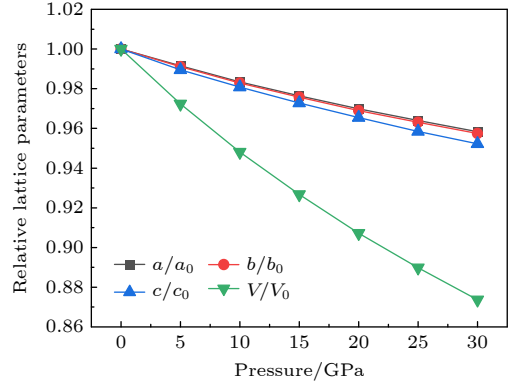


图 2  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的相对晶格参数和相对体积随压力的变化  
Fig. 2. Pressure dependence of relative lattice parameters and relative unit cell volume for  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$ .

为了分析高压下键合特性和电荷转移情况, 我们计算了  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 0, 15 和 30 GPa 的差分电荷密度如图 3. 图 3 中黄色表示得到电子, 青色表示失去电子. 从图 3(a) 可以看出, N 原子有很强的得电子能力, Al 原子有很强的失电子能力, In 原子则相对孤立. Al 原子和 N 原子形成较强的化学键, 而 In 原子和 N 原子形成相对较弱的化学键. 随着压力的增加, Al—N 键的强度逐渐增强, In—N 键也在一定程度上增强, 当压力达到 30 GPa 时 Al—N 和 In—N 键都明显增强. 同时, 电荷分布从不规则的各向异性逐渐过渡为椭球形分布, 极性减弱. 这是因为在高压条件下, 原子间距缩短, 原子间相互作用力增强, 从而使晶体进一步压缩变得更加困难.

为了确定  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在压力下的动力学稳定性, 我们计算了 0, 10, 20 和 30 GPa 声子色散曲线 (如图 4). 由图 4 可以看出, 在整个布里渊区中没有出现虚频, 且随着压力的增加曲线逐渐扩散, 更松散, 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  相在常压和高压下均为动力学稳定的. 这与 Robin Chang 等<sup>[51]</sup> 研究的不同配比的 Al-In-N 体系在所有亚稳相中的动力学稳定性是一致的.

### 3.2 力学性质

材料的弹性常数是描述晶体在外部应力作用下力学响应的关键物理参数, 对于深入理解和预测固体材料的力学性能至关重要. 通过系统研究材料

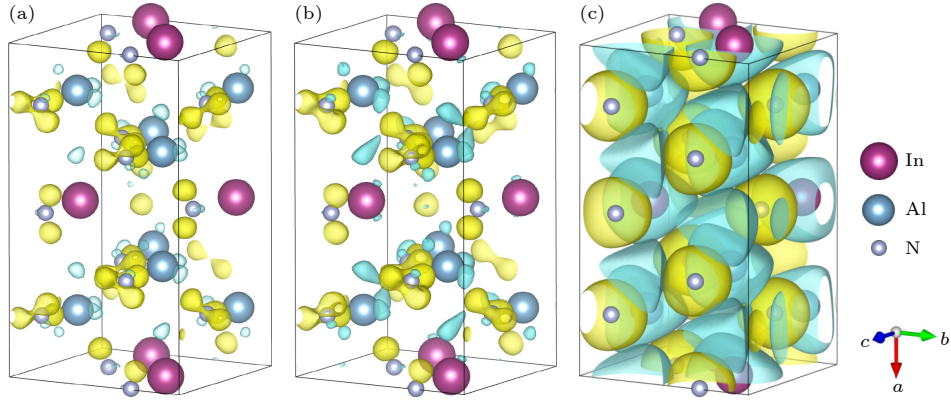

 图 3 不同压力下  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的差分电荷密度 (a) 0 GPa; (b) 15 GPa; (c) 30 GPa

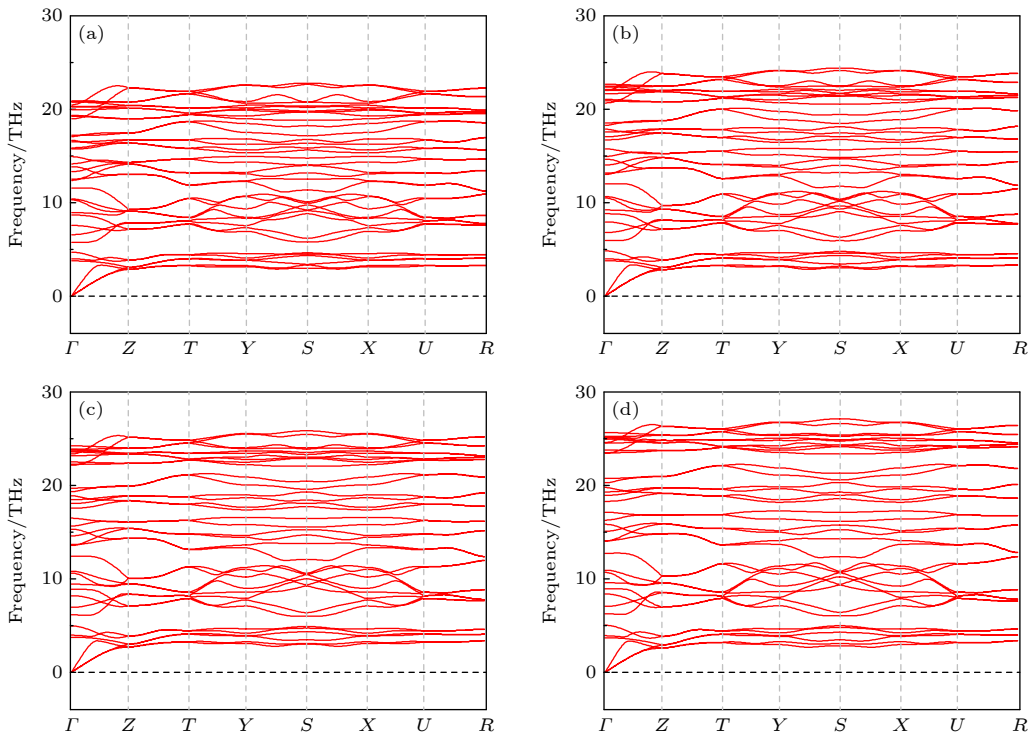
 Fig. 3. Differential charge density of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  under different pressures: (a) 0 GPa; (b) 15 GPa; (c) 30 GPa.

 图 4 不同压力下  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的声子色散曲线 (a) 0 GPa; (b) 10 GPa; (c) 20 GPa; (d) 30 GPa

 Fig. 4. Phonon dispersion curves for  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  at different pressures: (a) 0 GPa; (b) 10 GPa; (c) 20 GPa; (d) 30 GPa.

的弹性常数, 可以为材料的设计、优化以及新材料的开发提供科学依据和理论支持. 在正交晶系中, 由于材料在三个相互垂直的轴向上表现出不同的弹性性质, 因此具有显著的各向异性特征. 正交晶系的弹性常数矩阵是一个对角线对称的  $6 \times 6$  矩阵, 包含 9 个独立的弹性常数:  $C_{11}$ ,  $C_{22}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{44}$ ,  $C_{55}$ ,  $C_{66}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{23}$ . 在 0–30 GPa 的压力范围内, 计算得到的  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的弹性常数如表 2 所列.

根据 Born 提出的正交晶系的力学稳定性判据 [52], 应满足下列条件:

$$\begin{cases} C_{11} > 0; C_{11}C_{12} > C_{12}^2, \\ C_{11}C_{22}C_{33} + 2C_{12}C_{13}C_{23} - C_{11}C_{23}^2 \\ - C_{22}C_{13}^2 - C_{33}C_{12}^2 > 0, \\ C_{44} > 0; C_{55} > 0; C_{66} > 0. \end{cases} \quad (1)$$

根据正交晶系的力学稳定性判据可知研究的  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  满足力学稳定性判据.

弹性常数  $C_{11}$ ,  $C_{22}$ ,  $C_{33}$  分别对应晶格的  $a$ ,  $b$ ,  $c$  轴三个正交轴方向上的抗拉或抗压刚度. 图 5(a) 中可以看到  $C_{11}$ ,  $C_{22}$ ,  $C_{33}$  都随着压力的增加而逐

表 2 在 0—30 GPa 压力  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的弹性常数  
 Table 2. Elastic constant of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  under 0–30 GPa pressures.

Pressure/GPa	$C_{11}$ /GPa	$C_{12}$ /GPa	$C_{13}$ /GPa	$C_{22}$ /GPa	$C_{23}$ /GPa	$C_{33}$ /GPa	$C_{44}$ /GPa	$C_{55}$ /GPa	$C_{66}$ /GPa
0	318.606	113.886	89.017	305.200	92.444	311.408	84.739	84.903	95.602
5	330.169	126.317	103.218	327.053	105.181	326.999	86.887	88.385	96.321
10	340.077	143.266	118.822	337.579	124.623	338.138	85.186	87.028	94.397
15	359.171	163.187	130.986	352.270	135.623	357.799	88.682	87.873	95.539
20	375.952	175.971	146.621	363.912	151.179	361.684	89.566	86.445	93.548
25	389.382	192.252	161.374	370.366	171.460	363.533	88.451	87.052	91.683
30	402.037	207.158	171.490	379.130	181.476	381.927	86.653	84.002	90.021

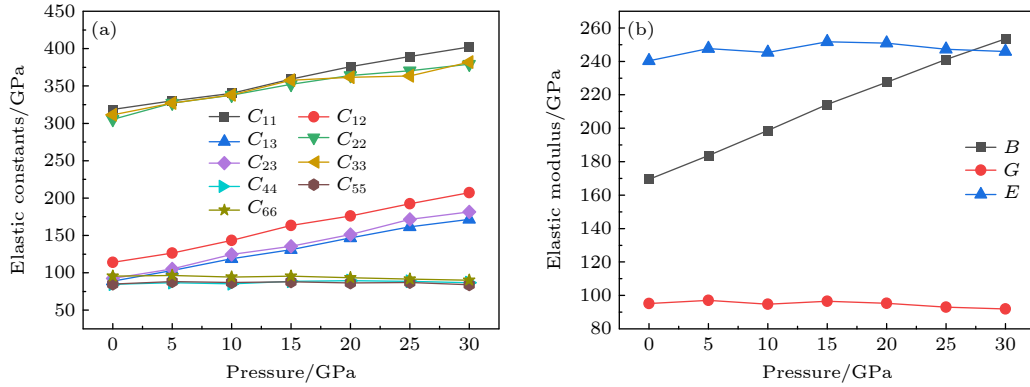

 图 5  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的弹性常数 (a) 和弹性模量 (b) 随压力的变化

 Fig. 5. The elastic constants (a) and elastic modulus (b) of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  change with pressure.

渐增大, 表明材料在这些方向上的刚度随压力增大而增加. 0—30 GPa 的压力范围内  $C_{11}$  的增加值比  $C_{22}$  和  $C_{33}$  的增加值大. 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在  $a$  轴方向上的抵抗拉伸或压缩的能力增强得更明显. 这种现象通常与晶体结构在高压下的致密化有关, 即在更高的压力下, 原子间距减小, 导致材料刚度增加. 其中  $C_{12}$ ,  $C_{13}$  和  $C_{23}$  表示两个正交轴方向之间的耦合效应, 图 5(a) 显示它们也随着压力的增加而有所增长,  $C_{12}$  的值明显高于  $C_{13}$  和  $C_{23}$ , 表明  $x$  和  $y$  方向的耦合效应较强. 此外,  $C_{44}$ ,  $C_{55}$ ,  $C_{66}$  分别表示材料在  $xy$ ,  $yz$ ,  $zx$  平面上的剪切刚度. 图 5(a) 中可以看出,  $C_{44}$ ,  $C_{55}$ ,  $C_{66}$  随着压力的增大变化趋势非常相似, 变化幅度相对较小. 这意味着材料的剪切刚度对压力的敏感性较低, 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在这些方向上的力学性能保持稳定.

体积模量 ( $B$ )、剪切模量 ( $G$ ) 和杨氏模量 ( $E$ ) 可以测量材料的抗断裂性、抗塑性变形性和刚度, 这对理解材料的固态性能具有重要意义.  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  三元化合物的弹性模量 ( $B$ ,  $E$ ,  $G$ ) 采用 Voigt-Reuss-Hill (VRH) 近似方法计算 [53–55]:

$$B_V = \frac{1}{9}[(C_{11} + C_{22} + C_{33}) + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23})], \quad (2)$$

$$B_R = \Delta[C_{11}(C_{22} + C_{33} - 2C_{23}) + C_{22}(C_{33} - 2C_{13}) - 2C_{33}C_{12} + C_{12}(2C_{23} - C_{12}) + C_{13}(2C_{12} - C_{13}) + C_{23}(2C_{13} - C_{23})]^{-1}, \quad (3)$$

$$G_V = (1/15)[(C_{11} + C_{22} + C_{33}) + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}) - (C_{12} + C_{23} + C_{13})], \quad (4)$$

$$G_R = 15\{4[C_{11}(C_{22} + C_{33} + C_{23}) + C_{22}(C_{33} + C_{13}) + C_{33}C_{12} - C_{12}(C_{23} + C_{12}) - C_{13}(C_{12} + C_{13}) - C_{23}(C_{13} + C_{23})]/\Delta + 3[(1/C_{44}) + (1/C_{55}) + (1/C_{66})]\}^{-1}, \quad (5)$$

其中

$$\Delta = C_{13}(C_{12}C_{23} - C_{13}C_{22}) + C_{23}(C_{12}C_{13} - C_{23}C_{11}) + C_{33}(C_{11}C_{22} + C_{12}^2), \quad (6)$$

式中,  $B_V$  和  $B_R$  分别为  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的体积模量  $B$  的最大值和最小值,  $G_V$  和  $G_R$  分别为  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的剪切模量  $G$  的最大值和最小值.

对两种方法进行算术平均, 可以得到

$$B = 1/2(B_R + B_V), \quad (7)$$

$$G = 1/2(G_R + G_V). \quad (8)$$

根据计算得到的体积模量  $B$  和剪切模量  $G$ , 我们还可以计算得到杨氏模量  $E$ 、泊松比  $\mu$ <sup>[56]</sup>、维氏硬度  $H_V$ <sup>[57]</sup> 计算公式, 结果如表 3 所列.

$$E = 9BG/(3B + G), \quad (9)$$

$$\mu = (3B - 2G)/(6B + 2G), \quad (10)$$

$$H_V = 0.92(G/B)^{1.137} G^{0.708}. \quad (11)$$

根据上述公式我们计算得到了  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  弹性模量 ( $B, G, E$ ), 泊松比  $\mu$ 、维氏硬度  $H_V$  的结果如表 3 所列. 从图 5(b) 可以看出, 体积模量  $B$  随压力的升高呈线性增加趋势, 从约 169 GPa 增加到接近 220 GPa. 这表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在更高压力下表现出更大的抗压缩能力. 剪切模量  $G$  在整个压力范围内变化平缓, 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料的剪切刚度在不同压力下几乎保持不变. 杨氏模量  $E$  随着压力的增加, 出现轻微波动, 保持在 240—250 GPa 的范围内, 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料的轴向刚度在高压下略有增强, 但整体变化幅度较小.

泊松比  $\mu$  是在应力下横向应变与纵向应变的比值, 一般用来衡量晶体抗剪切应变的稳定性. Frantsevich 等<sup>[56]</sup> 提出了一个用泊松比判断材料韧性和脆性的标准, 即当材料的泊松比大于 0.26 时, 认为该材料为韧性, 反之则为脆性. 泊松比也可以用来强调共价键的强度. 如果合金的泊松比值小于 0.26, 则具有共价键. 从表 3 可以观察到  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的泊松比都大于 0.26, 说明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料是韧性的, 且随着压力的升高而增大. 通常认为材料在受拉伸时能够产生较大的横向变形, 表现出更好的应力分散能力, 能够在断裂之前经历更大的塑性变形, 从而吸收更多的能量. 因此,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料具有较好的抗断裂性能.

硬度是材料力学性能中的关键指标之一, 尤

其在评估材料在不同外部条件下的抗变形能力和稳定性时具有重要作用. 在高压环境下, 硬度的变化能够揭示材料的变形机制、潜在的相变行为以及材料的塑性与弹性特征. 从表 3 可以观察到,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料的维氏硬度随压力的增加逐渐降低, 在 0—30 GPa 范围内维氏硬度从 11.998 GPa 降至 7.123 GPa, 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料在受压过程中逐渐变软. 压力增加至 30 GPa 时, 材料表现出显著的硬度下降, 可能预示着  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料进入了塑性变形阶段.

了解弹性各向异性是提高机械耐久性的必要条件. 如前所述,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  化合物表现出显著的弹性各向异性. 为了进一步了解压力对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  各向异性的影响, 绘制了  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 0, 10, 20 和 30 GPa 时的体积模量、剪切模量和杨氏模量的三维曲面图, 结果如图 6 所示. 在图 6 中, 其中不同颜色区域代表了模量的大小, [001], [100], [010] 标示了晶体的晶轴方向, 三维曲面偏离球形的程度反映材料的各向异性程度. 为了便于观察分析, 体积模量图 6(a) 色阶为 160—210 GPa, 图 6(b)—(d) 色阶为 160—280 GPa, 剪切模量色阶统一为 85—100 GPa, 杨氏模量色阶统一为 230—280 GPa, 从而能够更直观地揭示模量随压力变化的趋势与各向异性演化特征.

从图 6(a)—(d) 可以观察到,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  体积模量随着外加压力的增加, 在 [001] 晶体方向上由深蓝色变为黄色, [100] 方向由青色变为深红色, [010] 方向上浅蓝变为红色, 可得出在各个方向上颜色变化不一样增长速度也不一样, 但总体在各方向上都增强, 表明材料在高压下的抗压缩性显著增强. 图 6(a)—(d) 的体积模量分布几乎为球形, 表明在 0—30 GPa 的压力范围内,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的体积模量各向异性变化不大.

表 3 0—30 GPa 压力下  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的弹性模量 ( $B, G, E, B/G$ )、硬度  $H_V$  和泊松比  $\mu$

Table 3. The elastic modulus ( $B, G, E, B/G$ ), hardness ( $H_V$ ), and Poisson's ratio ( $\mu$ ) of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  under pressures of 0–30 GPa.

Pressure/GPa	$B$ /GPa	$E$ /GPa	$G$ /GPa	$B/G$	$\mu$	$H_V$ /GPa
0	169.443	240.336	95.099	1.782	0.264	11.998
5	183.649	247.651	97.099	1.891	0.275	11.377
10	198.718	245.38	94.800	2.096	0.294	9.952
15	214.192	251.75	96.522	2.219	0.304	9.447
20	227.465	250.967	95.344	2.386	0.316	8.625
25	241.177	247.277	93.023	2.593	0.329	7.711
30	253.426	245.888	91.866	2.759	0.338	7.123

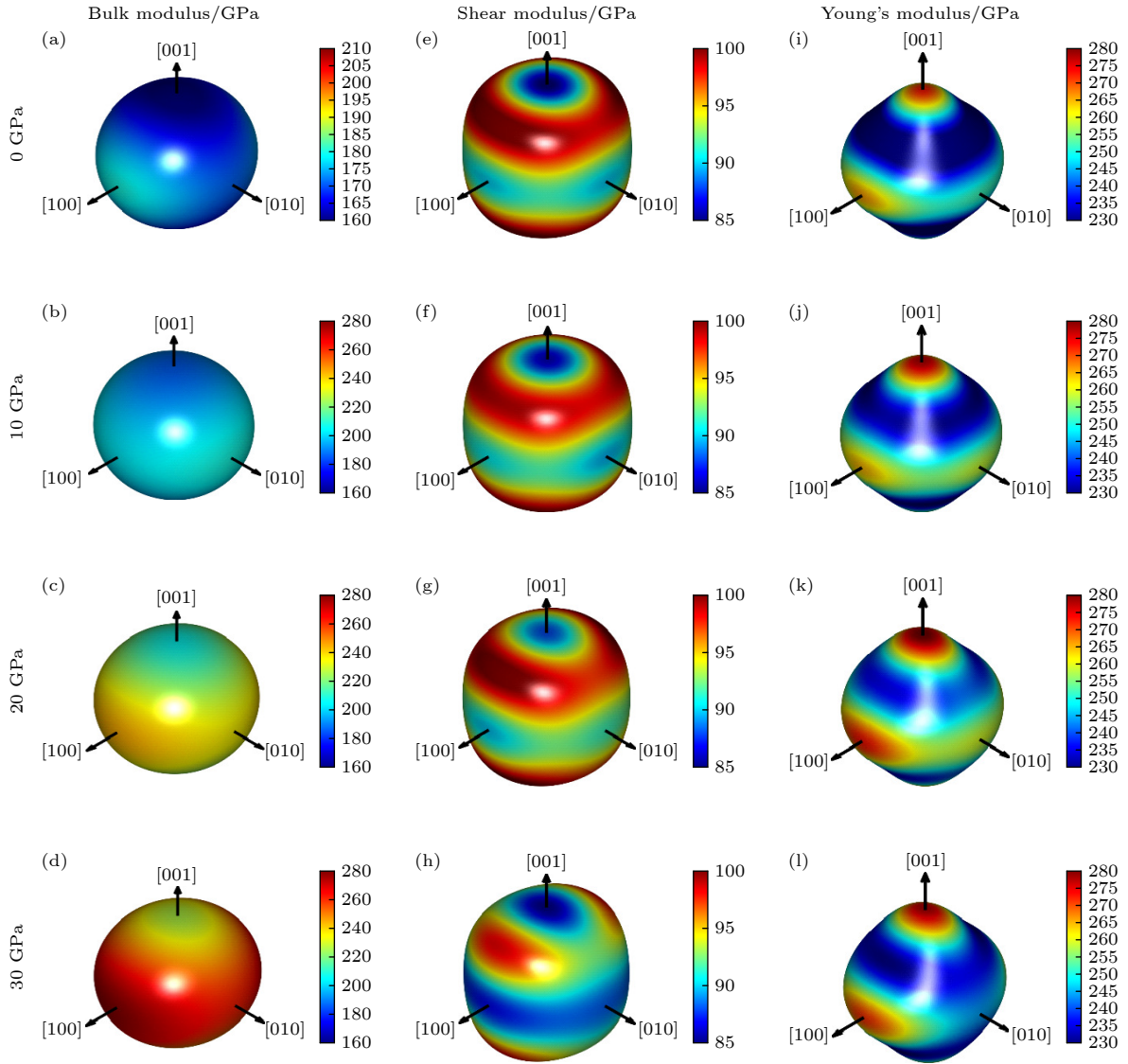


图 6 在 0, 10, 20, 30 GPa 压力下  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的三维体积模量 ((a)–(d)), 剪切模量 ((e)–(h)), 杨氏模量 ((i)–(l))

Fig. 6. The 3D plot of bulk modulus ((a)–(d)), shear modulus ((e)–(h)), and Young's modulus ((i)–(l)) of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  under pressures of 0, 10, 20, and 30 GPa.

相较之下, 剪切模量图 6(e)–(h) 呈现出明显的方向性差异. 在 0 GPa 图 6(e) 时, [001] 方向为最弱剪切模量区域, 表现为蓝色低值带, 随着压力升高, 该方向仍维持相对较低值, 但与 [100] 和 [010] 方向的剪切模量差异逐渐缩小, 表示  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  其各向异性略有减弱.

杨氏模量图 6(i)–(l), 明显得知在 [100] 方向上随压力增加杨氏模量逐渐增大. 在 0 GPa 图 6(i) [001] 方向对应最高杨氏模量且随压力增加变化不大, 而 [100] 和 [010] 方向则相对较低, [010] 方向随压力的变化先增大后减小. 图 6(i)–(l) 从球形偏离程度来看, 可知  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料的各向异性随压力的增加变化不大.

从整体来看,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  随压力的增加, 体积模量逐渐增加, 而剪切模量和杨氏模量则展现了更为显著的方向性演化.  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的剪切模量和杨氏模量, 随着压力的升高, 材料的各向异性整体变化不大但在不同晶向上的差异明显, 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的力学性质具有较强的方向性变化. 这为  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在高压应用中的潜力提供了重要的理论依据, 尤其是在要求高弹性模量和抗变形能力的领域 (如高压设备或半导体应用) 中,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  可能表现出更优异的性能.

### 3.3 电子性质

能带结构对于理解材料的物理性质至关重要.

为探究压力对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  电子性质的影响, 计算并讨论了  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 0, 5, 10, 15, 20, 25 和 30 GPa 压力下的能带结构, 结果如图 7 所示.

由图 7(a)—(g) 可以观察到, 在给定的压力范围内,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的导带和价带在费米能级处没有重叠, 费米能级附近存在带隙, 导带的最小值与价带的最大值均位于相同的  $k$  点 (布里渊区的  $\Gamma$  点, 即  $k = 0$ ) 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  是直接带隙的半导体材料. 此外, 导带底处色散曲线的曲率始终大于价带顶处的曲率, 这意味着电子的迁移率高于空穴, 且电子的有效质量较小, 上述特征对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  材料中电子和空穴的迁移行为产生重要影响.

图 7(h) 给出了  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  带隙与压力的关系曲线, 可以观察到随着压力的增加  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的带隙线性增加, 从 0 GPa 时的 3.35 eV 逐渐增大到 30 GPa 时的 4.24 eV, 其对应的吸收光子波长从 370 nm (接近紫外光谱的近紫外区域) 降低至 292 nm (属

于紫外光谱的中紫外区域). 在较低压力 (0 GPa) 时, 材料的带隙较小, 导带底和价带顶之间的能量差相对较小, 更适合吸收或发射低能量的光子, 使材料能够有效吸收或发射近紫外光. 这种性质表明其适用于低能量紫外光的发射器或探测器. 在较高压力 (30 GPa) 下, 带隙增大至 4.24 eV, 材料的光吸收范围进入中紫外区域<sup>[58]</sup>. 因此, 在高压条件下,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  能够吸收更高能量的光子, 光吸收波长逐渐缩短, 由近紫外区域进入中紫外区域.

态密度 (DOS) 的研究对于理解晶体的键合特性和电学行为至关重要. 我们进一步计算了不同压力下  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  的态密度结果如图 8 所示, 图 8 中的横轴表示能量 (单位: eV), 纵轴表示态密度 (单位: states/eV). 选取了费米能级附近 -6—16 eV 的态密度范围, 虚线标示的  $E = 0$  eV 为费米能级. 在费米能级处, 电子态密度值为零, 表明  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  具有半导体特性. 通过分析总态密度 (TDOS) 发现,

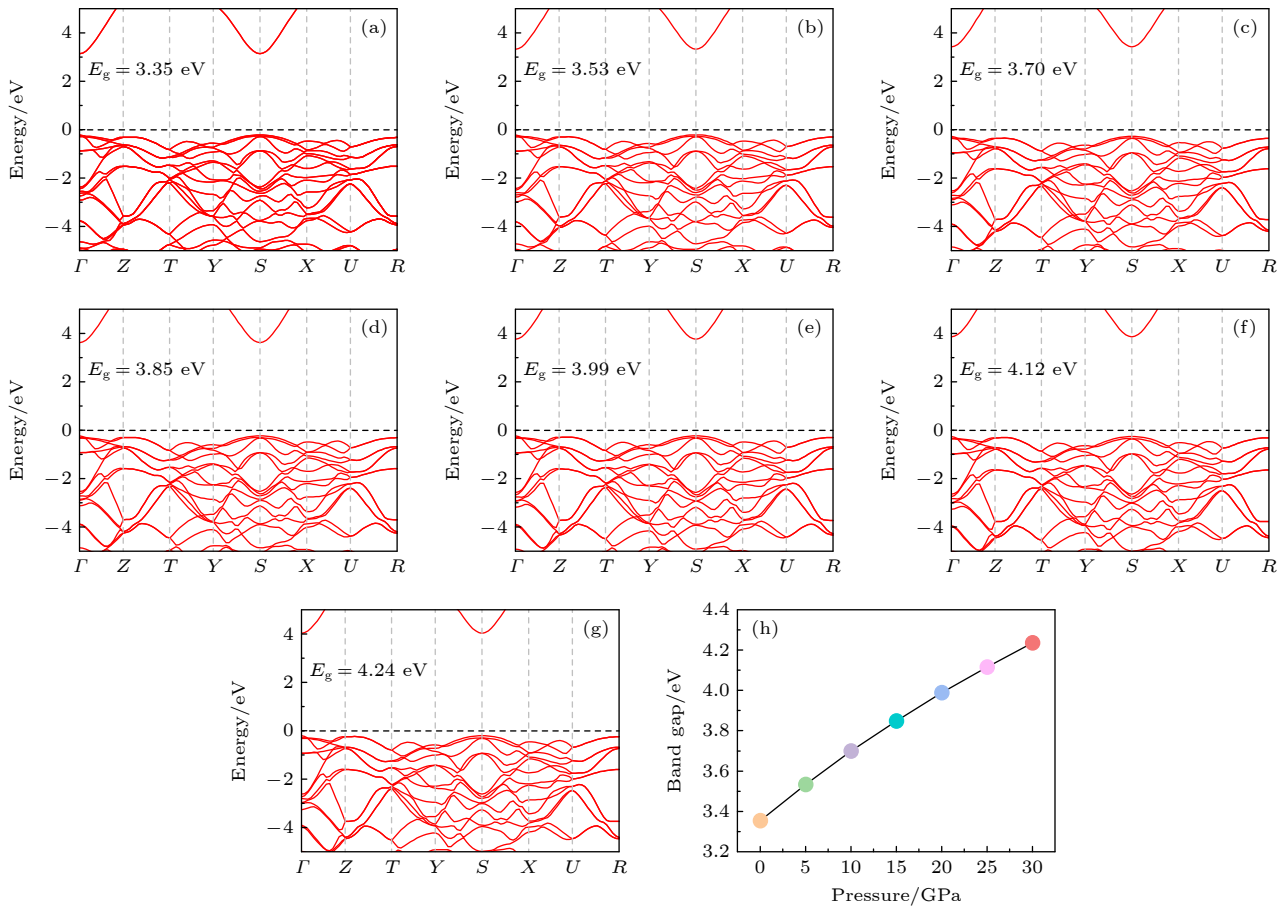


图 7  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 (a) 0 GPa, (b) 5 GPa, (c) 10 GPa, (d) 15 GPa, (e) 20 GPa, (f) 25 GPa, (g) 30 GPa 下的能带结构和 (h) 带隙随压强的变化趋势

Fig. 7. The band structures of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  at (a) 0 GPa, (b) 5 GPa, (c) 10 GPa, (d) 15 GPa, (e) 20 GPa, (f) 25 GPa, (g) 30 GPa, and (h) the variation trend of the band gap with pressure.

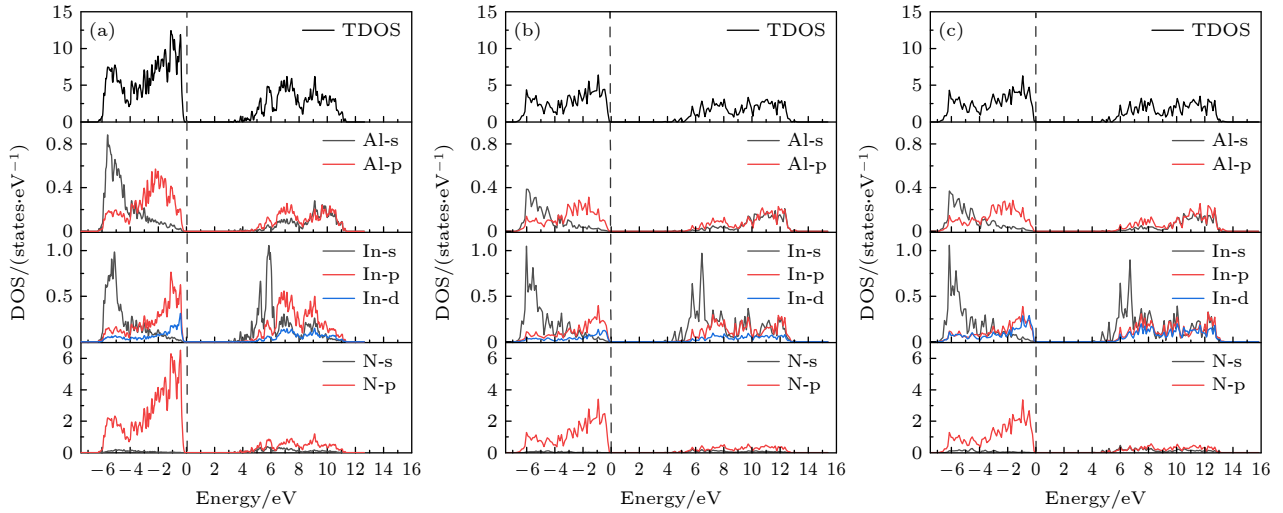


图 8  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在 (a) 0, (b) 20 和 (c) 30 GPa 下的总态密度和分波态密度

Fig. 8. The total density of states and partial density of states of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  at (a) 0, (b) 20, and (c) 30 GPa.

该材料的总态密度主要由 Al-p, In-p 和 N-p 轨道贡献. 进一步研究表明, 费米能级附近的导电性主要由 Al 和 In 原子的 p 轨道电子贡献, 其中 Al-p 和 In-p 是影响  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  电子传导行为的主要因素, Al-s, In-s 和 N-s 在费米能级附近的态密度中也有所贡献, 但总体影响较小.

随着压力的增加, 导带逐渐向远离费米能级的方向移动, 同时在 4—10 eV 能量范围内的态密度显著降低. 从图 8(a) 和图 8(b) 中可以看出, 在 0—20 GPa 压力范围内, 态密度明显下降, 相比较 20—30 GPa 范围内, 态密度的变化不明显, 是因为在较低压力下, 原子间距离的压缩较为显著, 导致成键状态发生较大改变, 从而引起态密度的明显变化. 然而, 当压力进一步增加至 20—30 GPa 时, 原子间作用力增强, 材料变得难以压缩, 成键状态的变化趋于平缓, 因此态密度的变化也相对较小. 此外, 随着压力的持续增加, 原子间距离进一步减小, 电荷分布逐渐离域化. 这一现象表明高压下电子结构的重新分布和相互作用增强的趋势.

## 4 结 论

本研究通过第一性原理计算, 系统分析了  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  在不同压力下的结构、力学性质和电子性质, 揭示了压力对其性能的显著调控作用. 晶格压缩和弹性常数的变化表明, 材料在高压下具有良好的力学稳定性和抗变形能力. 电子结构计算显示,  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  为直接带隙半导体, 带隙随压力线性增

加, 使其具备紫外光电器件所需的可调光学响应特性. 此外, 高压条件下态密度的变化进一步揭示了化学键性质的调控机制. 本研究不仅深化了对  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  高压物性的理解, 还为其在紫外光电领域的实际应用提供了理论指导. 未来研究可以结合实验验证该材料在极端条件下的稳定性与功能特性, 为新型光电器件的开发提供支持.

## 参考文献

- [1] Liu B, Chen D, Lu H, Tao T, Zhuang Z, Shao Z, Xu W, Ge H, Zhi T, Ren F, Ye J, Xie Z, Zhang R 2020 *Adv. Mater.* **32** 1904354
- [2] Hahn C, Zhang Z, Fu A, Wu C H, Hwang Y J, Gargas D J, Yang P 2011 *ACS Nano* **5** 3970
- [3] Yu J, Wang L, Hao Z, Luo Y, Sun C, Wang J, Han Y, Xiong B, Li H 2020 *Adv. Mater.* **32** 1903407
- [4] Chen K, Kapadia R, Harker A, Desai S, Javey A 2016 *Nat. Commun.* **7** 10502
- [5] Qiu P, Liu H, Zhu X L, Tian F, Du M C, Qiu H Y, Chen G L, Hu Y Y, Kong D L, Yang J, Wei H Y, Peng M Z, Zheng X H 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 038102 (in Chinese) [仇鹏, 刘恒, 朱晓丽, 田丰, 杜梦超, 邱洪宇, 陈冠良, 胡王玉, 孔德林, 杨晋, 卫会云, 彭铭曾, 郑新和 2024 *物理学报* **73** 038102]
- [6] Manjón F J, Errandonea D, Garro N, Romero A H, Serrano J, Kuball M 2007 *Phys. Status Solidi B* **244** 42
- [7] E Abid A, Bensalem R, Sealy B J 1986 *J. Mater. Sci.* **21** 1301
- [8] Yu R, Liu G, Wang G, Chen C, Xu M, Zhou H, Wang T, Yu J, Zhao G, Zhang L 2021 *J. Mater. Chem. C* **9** 1852
- [9] Ibáñez J, Segura A, García-Domene B, Oliva R, Manjón F J, Yamaguchi T, Nanishi Y, Artús L 2012 *Phys. Rev. B* **86** 035210
- [10] Khan N, Sedhain A, Li J, Lin J Y, Jiang H X 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 172101
- [11] Davydov V Y, Klochikhin A, Seisyan R, Emtsev V, Ivanov S, Bechstedt F, Furthmüller J, Harima H, Mudryi A, Aderhold J 2002 *Phys. Status Solidi B* **229** r1

- [12] Tansley T L, Foley C P 1986 *J. Appl. Phys.* **59** 3241
- [13] Liu X K, Lin Z C, Lin Y H, Chen J J, Zou P, Zhou J, Li B, Shen L H, Zhu D L, Liu Q, Yu W J, Li X H, Zhu H, Wang X Z, Huang S W 2023 *Chin. Phys. B* **32** 117701
- [14] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, Ager J W, Haller E E, Lu H, Schaff W J, Saito Y, Nanishi Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3967
- [15] Beladjal K, Kadri A, Zitouni K, Mimouni K 2021 *Superlattices Microstruct.* **155** 106901
- [16] Guo Q G Q, Yoshida A Y A 1994 *Jpn. J. Appl. Phys.* **33** 2453
- [17] Zhao F, Yao G R, Song J J, Ding B B, Xiong J Y, Su C, Zheng S W, Zhang T, Fan G H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 058503
- [18] Chen J J, Shen L H, Qi D L, Wu L J, Li X, Song J Y, Zhang X L 2022 *Ceram. Int.* **48** 2802
- [19] Moussa R, Abdiche A, Khenata R, Wang X, Varshney D, Sun X W, Omran S B, Bouhemadou A, Rai D 2018 *J. Phys. Chem. Solids* **119** 36
- [20] Mao W, Zhang J C, Xue J S, Hao Y, Ma X H, Wang C, Liu H X, Xu S R, Yang L A, Bi Z W, Liang X Z, Zhang J F, Kuang X W 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 128501
- [21] Wen X X, Yang X D, He M, Li Y, Wang G, Lu P Y, Qian W N, Li Y, Zhang W W, Wu W B, Chen F S, Ding L Z 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 097304
- [22] Zhang X F, Wang L, Liu J, Wei L, Xu J 2013 *Chin. Phys. B* **22** 017202
- [23] Han T C, Zhao H D, Yang L, Wang Y 2017 *Chin. Phys. B* **26** 107301
- [24] Zhan X M, Hao M L, Wang Q, Li W, Xiao H L, Feng C, Jiang L J, Wang C M, Wang X L, Wang Z G 2017 *Chin. Phys. Lett.* **34** 047301
- [25] Dong Y, Son D H, Dai Q, Lee J H, Won C H, Kim J G, Chen D, Lee J H, Lu H, Zhang R, Zheng Y 2018 *Sensors* **18** 1314
- [26] Li A, Wang C, Xu S, Zheng X, He Y, Ma X, Lu X, Zhang J, Liu K, Zhao Y Hao Y 2021 *Appl. Phys. Lett.* **119** 122104
- [27] Robin Chang Y H, Yoon T L, Lim T L 2016 *Curr. Appl. Phys.* **16** 1277
- [28] Borovac D, Sun W, Song R, Wierer J J, Tansu N 2020 *J. Cryst. Growth* **533** 125469
- [29] Yonenaga I, Ohkubo Y, Deura M, Kutsukake K, Tokumoto Y, Ohno Y, Yoshikawa A, Wang X Q 2015 *AIP Adv.* **5** 077131
- [30] Tan X, Xin Z Y, Liu X J, Mu Q G 2013 *Adv. Mater. Res.* **821–822** 841
- [31] Chen M, Guo G C, He L 2010 *J. Phys. Condens. Matter* **22** 445501
- [32] Al-Khatatbeh Y, Lee K K M, Kiefer B 2009 *Phys. Rev. B* **79** 134114
- [33] Man X X, Gong B C, Sun P H, Liu K, Lu Z Y 2022 *Phys. Rev. B* **106** 035136
- [34] Yu F, Liu Y 2019 *Computation* **7** 57
- [35] Velpula R T, Jain B, Philip M R, Nguyen H D, Wang R, Nguyen H P T 2020 *Sci. Rep.* **10** 2547
- [36] Robin Chang Y H, Yoon T L, Lim T L, Rakitin M 2016 *J. Alloys Compd.* **682** 338
- [37] Glass C W, Oganov A R, Hansen N 2006 *Comput. Phys. Commun.* **175** 713
- [38] Oganov A R, Lyakhov A O, Valle M 2011 *Acc. Chem. Res.* **44** 227
- [39] Lyakhov A O, Oganov A R, Stokes H T, Zhu Q 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 1172
- [40] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [41] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [42] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [43] Wu Z, Cohen R E 2006 *Phys. Rev. B* **73** 235116
- [44] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [45] Togo A, Oba F, Tanaka I 2008 *Phys. Rev. B* **78** 134106
- [46] Togo A, Tanaka I 2015 *Scr. Mater.* **108** 1
- [47] Heyd J, Scuseria G E, Ernzerhof M 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 8207
- [48] Muscat J, Wander A, Harrison N M 2001 *Chem. Phys. Lett.* **342** 397
- [49] Garza A J, Scuseria G E 2016 *J. Phys. Chem. Lett.* **7** 4165
- [50] Sugita Y, Miyake T, Motome Y 2018 *Phys. Rev. B* **97** 035125
- [51] Robin Chang Y H, Yoon T L, Lim T L, Tuh M H 2017 *J. Alloys Compd.* **704** 160
- [52] Mouhat F, Coudert F X 2014 *Phys. Rev. B* **90** 224104
- [53] Voigt W 1889 *Ann. Phys.* **274** 573
- [54] Reuss A 1929 *ZAMM - J. Appl. Math. Mech. Z. Für Angew. Math. Mech.* **9** 49
- [55] Hill R 1952 *Proc. Phys. Soc. London, Sect. A* **65** 349
- [56] Frantsevich I N, Voronov F F and Bokuta S A 1983 *Elastic Constants and Elastic Moduli of Metals and Insulators Handbook* (Kiev: Naukova Dumka) pp60–180
- [57] Tian Y, Xu B, Zhao Z 2012 *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.* **33** 93
- [58] Meng J, Sun L, Zhang Y, Xue F, Chu C, Bai J 2020 *Materials* **13** 427

SPECIAL TOPIC—High-pressure modulation and in situ characterization of optoelectronic properties

# First-principles study of structure, elasticity, and electronic properties of ternary semiconductor $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$ under high pressure\*

CHEN Meijuan<sup>1)</sup> GUO Jiaxin<sup>1)</sup> WU Hao<sup>1)</sup> ZHENG Xiaoran<sup>1)</sup> MIN Nan<sup>1)</sup>  
TIAN Hui<sup>1)†</sup> LI Quanjun<sup>2)</sup> DU Shiyu<sup>3)4)5)</sup> SHEN Longhai<sup>1)‡</sup>

1) (*School of Science, Shenyang Ligong University, Shenyang 100159, China*)

2) (*State Key Laboratory of Superhard Materials, Jilin University, Changchun 130012, China*)

3) (*College of Materials Science and Chemical Engineering, Harbin Engineering University, Harbin 150001, China*)

4) (*Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo 315201, China*)

5) (*School of Materials Science and Engineering, China University of Petroleum (East China), Qingdao 266580, China*)

( Received 7 March 2025; revised manuscript received 5 April 2025 )

## Abstract

The effects of pressure on the crystal structure, elastic properties, and electronic characteristics of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  are systematically studied using first-principles density functional theory. The lattice constants of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  decrease with the increase of pressure, exhibiting anisotropic compression with greater compressibility along the *c*-axis. In terms of mechanical properties, the bulk modulus increases with the increase of pressure, indicating enhanced compressive resistance. Notably, the Vickers hardness decreases with the increase of pressure, indicating that high pressure can induce plastic deformation in  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$ . The calculations of elastic constants and phonon spectra confirm that  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  retains mechanical and dynamical stability in the pressure range of 0–30 GPa. Electronic structure calculations reveal that  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  possesses a direct band gap, and non-overlapping conduction and valence bands at the Fermi level. The conduction band has a higher carrier mobility than the valence band. The band gap increases almost linearly with pressure rising from 3.35 eV at 0 GPa to 4.24 eV at 30 GPa, demonstrating significant pressure-induced modulation of the electronic structure. Furthermore, the analysis of differential charge densities reveals that increasing pressure can strengthen the Al-N and In-N bonds in  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  through shortened interatomic distances and stronger atomic interactions, increasing its compression resistance. In summary, this study not only deepens our understanding of the high-pressure properties of  $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$  but also provides theoretical guidance for its application in UV optoelectronics. Pressure-driven modulation of its mechanical and electronic characteristics highlights its potential in efficient high-pressure optoelectronic devices and materials.

**Keywords:** ternary semiconductor, high pressure, first-principles, band gap

**PACS:** 71.20.Nr, 62.50.-p, 63.20.dk, 71.20.-b

**DOI:** [10.7498/aps.74.20250287](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250287)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250287](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250287)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12274304, 12404060), the Liaoning Provincial Doctoral Research Initiation Fund of China (Grant No. 2024-BS-115), the Liaoning Provincial Department of Education Project (Independent Selection Project) of China (Grant No. LJ212410144038), the Shenyang Ligong University Introduced High-level Talents for Scientific Research Support Funds in 2022, China (Grant No. 1010147001132), and the Shenyang Ligong University Introduced High-Level Talents for Scientific Research Support Funds in 2024, China (Grant No. 1010147001325).

† Corresponding author. E-mail: [huitian2022sylyu@126.com](mailto:huitian2022sylyu@126.com)

‡ Corresponding author. E-mail: [shenlonghai@163.com](mailto:shenlonghai@163.com)



## 高压下三元半导体 $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$ 结构、弹性及电子性质的第一性原理研究

陈美娟 郭佳芯 吴浩 郑潇然 闵楠 田辉 李全军 都时禹 沈龙海

### First-principles study of structure, elasticity, and electronic properties of ternary semiconductor $\text{Al}_4\text{In}_2\text{N}_6$ under high pressure

CHEN Meijuan GUO Jiaxin WU Hao ZHENG Xiaoran MIN Nan TIAN Hui LI Quanjun DU Shiyu SHEN Longhai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 177102 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250287

CSTR: 32037.14.aps.74.20250287

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250287>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

### 您可能感兴趣的其他文章

#### Articles you may be interested in

#### 扭转单壁碳纳米管的第一性原理研究

First-principles study of torsional single-walled carbon nanotubes

物理学报. 2023, 72(19): 197302 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230566>

#### CuBiI三元化合物晶体结构预测及光电性能第一性原理研究

Structure prediction of CuBiI ternary compound and first-principles study of photoelectric properties

物理学报. 2021, 70(20): 207305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210145>

#### $\text{BaF}_2$ 高压相变行为的第一性原理研究

First-principles study of phase transition of  $\text{BaF}_2$  under high pressure

物理学报. 2022, 71(1): 017102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211163>

#### 三元Hf-C-N体系的空位有序结构及其力学性质和电子性质的第一性原理研究

First-principles study of vacancy ordered structures, mechanical properties and electronic properties of ternary Hf-C-N system

物理学报. 2021, 70(21): 216101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210244>

#### 第一性原理计算研究Cr掺杂 $\text{CuZr}_2$ 的电子结构、弹性性质和硬度

First-principles study of electronic structure, elastic properties and hardness of Cr-doped  $\text{CuZr}_2$

物理学报. 2025, 74(13): 137101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250264>

#### 金刚石(111)/Al界面形成及性能的第一性原理研究

First-principles study of formation and performance of diamond (111)/Al interface

物理学报. 2021, 70(18): 188101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210572>