

文章编号: 1000-7032(2018)04-0507-08

不同构型(In, Al) GaN合金发光机理的第一性原理研究

张玲玲¹, 张敏^{1*}, 史俊杰², 贺勇¹, 安婷¹

(1. 内蒙古师范大学 物理与电子信息学院, 内蒙古 呼和浩特 010022;

2. 北京大学 物理学院, 人工微结构与介观物理国家重点实验室, 北京 100871)

摘要: 基于第一性原理的密度泛函理论, 研究了纤锌矿(In, Al) GaN合金的4种构型(均匀、短链、小团簇、团簇-链共存模型)的电子结构和发光微观机理。结果表明, 在InGaN合金中, 短In-N链和小In-N团簇都局域电子在价带顶(VBM)态。当小团簇与短链共存时, 前者局域电子的能力明显强于后者, 是辐射复合发光中心。然而, 在AlGaN合金中, 电子在VBM态的局域受短Al-N链和小Al-N团簇的影响并不显著。合金微观结构的不同会引起电子局域的改变, 从而影响材料的发光性能, 并对带隙和弯曲系数有重要影响。

关键词: 第一性原理; (In, Al) GaN合金; In团簇

中图分类号: O472+.3 文献标识码: A DOI: 10.3788/fgxb20183904.0507

First-principles Study of The Light-emitting Mechanism on (In, Al) GaN Alloys with Different Configurations

ZHANG Ling-ling¹, ZHANG Min^{1*}, SHI Jun-jie², HE Yong¹, AN Ting¹

(1. College of Physics and Electron Information, Inner Mongolia Normal University, Hohhot 010022, China;

2. State Key Laboratory for Artificial Microstructures and Mesoscopic Physics, School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China)

* Corresponding Author, E-mail: smile_zm@126.com

Abstract: The electron structures and micromechanism of light emission on wurtzite (In, Al) GaN alloys with four configurations (uniform, short chain, small cluster and a combination of clusters and chains) were investigated based on first-principles density functional theory. The results show that the electrons of both short In-N-chain and small In-N clusters in InGaN alloy are localized at the valence band maximum (VBM) states. When the small cluster and the short chain coexist in the In-GaN alloy, the former is much stronger than the latter in terms of the ability of electrons localization, and the small cluster is the radiative recombination luminescence center. However, in AlGaN alloy, the effect of the short Al-N-chain and the small Al-N clusters on the valence electrons localization at the VBM states is not remarkable. Microstructure difference of alloy can cause the change of the electronic localization, which affects the luminescence performance of the material, and the difference also has significant influence on the band gap and the bowing parameter.

Key words: first principle; (In, Al) GaN alloys; In cluster

收稿日期: 2017-07-28; 修订日期: 2017-09-25

基金项目: 国家自然科学基金(11364030, 11474012); 内蒙古自然科学基金(2015MS0127)资助项目

Supported by National Natural Science Foundation of China(11364030, 11474012); Natural Science Foundation of Inner Mongolia Autonomous Region of China(2015MS0127)

1 引 言

Ⅲ 族氮化物三元合金中,通过改变阳离子(In, Al)的比例,可将其直接带隙从 InN 的 0.7 eV 调至 GaN 的 3.5 eV,直至 AlN 的 6.2 eV,波长覆盖了近红外到紫外波段光谱范围^[1-2]。相比其他材料,它们具有非常优越的电热力学和光学性质,具备击穿电压高、禁带宽、导热率高、电子饱和速率高、载流子迁移率高等特点^[3-4],一直以来受到人们的持续关注。基于氮化物半导体材料研制的高亮度蓝光发光二极管(LED)和激光二极管(LD)已被广泛应用于各个领域^[5-7]。

在 InGaN 合金中,通过改变 In 组分可将直接带隙从 0.7 eV 调至 3.5 eV,带隙变化对应的波长覆盖了红外到紫外波段,不仅是光学储存、固态照明的理想材料而且还为全光显示以及合成白光提供了蓝、绿光^[8-9]。同样,在 AlGaIn 合金中,通过调节 Al 组分可将直接带隙从 3.4 eV 调至 6.2 eV,带隙变化对应的波长恰好还覆盖了地球上被臭氧层所吸收的中紫外波段 220 ~ 290 nm(太阳光谱盲区),因此 AlGaIn 是制备日盲型紫外探测器结构的首选材料。AlGaIn 合金还具有发光光子能量高、电子漂移饱和速度高、介电常数小、导电性能好等优良特性,是高电子迁移率的 p 沟道晶体管和深紫外光电器件的理想材料^[10-11]。

富 Ga 的 InGaIn 合金中光的来源一直是困扰 Ⅲ 族氮化物的重要问题。长期以来,人们曾普遍认为富 In 相(类量子点或纳米尺度的团簇)是主导 InGaIn 合金光发射的载流子局域中心^[12-14]。然而, Humphreys 等^[15]在实验上用三维原子探针分析发现 InGaIn 是一种随机合金,富 In 相结构是

由电子束损伤导致的 In 聚集。随后, Chichibu 和 kent 等^[8,16]研究表明 In-N-链是辐射复合中心及发光中心。然而,目前对几个原子的 In-N 团簇和 In-N-短链所构成的 InGaIn 合金的研究较少,且对于 AlGaIn 合金的发光微观机理的报道更少。为了更深层次地研究这一问题,我们对 4 种不同构型的(In, Al) GaN 合金进行计算,探讨了(In, Al) GaN 合金发光的微观机理。

2 模型构建与计算方法

基于密度泛函理论,选用了 Vienna ab initio simulation package(VASP)软件包^[17],使用平面波作为基组,用缀加平面波(PAW)赝势来描述离子实对价电子的作用,利用周期边界条件实现对合金基态几何结构、电子性质的计算。所有计算均采用 $3 \times 3 \times 2$ 的 72 个原子的 GaN 超原胞,用 In 或 Al 替代 GaN 中 Ga 的位置。平面波截断能设置为 550 eV,布里渊区 Monkhorst-Pack^[18] K-点网格选取 $2 \times 2 \times 3$ 。为了得到与实验更匹配的数据值,结构优化过程中我们选用了 AM05XC 的交换关联泛函,但计算电子与电子相互作用中的交换关联效应时我们采用了 GGA-PBE^[19] 泛函。结构优化中总能收敛于 10^{-5} eV,并确保在该平面波截断能以及 K 点网格下达到收敛精度。通过寻找能量和 $H-F$ 力的极小值得到最优化的 InGaIn 和 AlGaIn 合金结构,给出了优化后的晶格常数 a, c 的值。在原子结构弛豫优化中参数设置为:结构迟豫总能量收敛小于 10^{-2} meV,最大的压力 0.05 GPa,最大的原子位移小于 10^{-4} nm。

我们采用 LDA-1/2 方法对由于广义梯度近似(GGA)所导致的带隙低估问题进行了修正。在

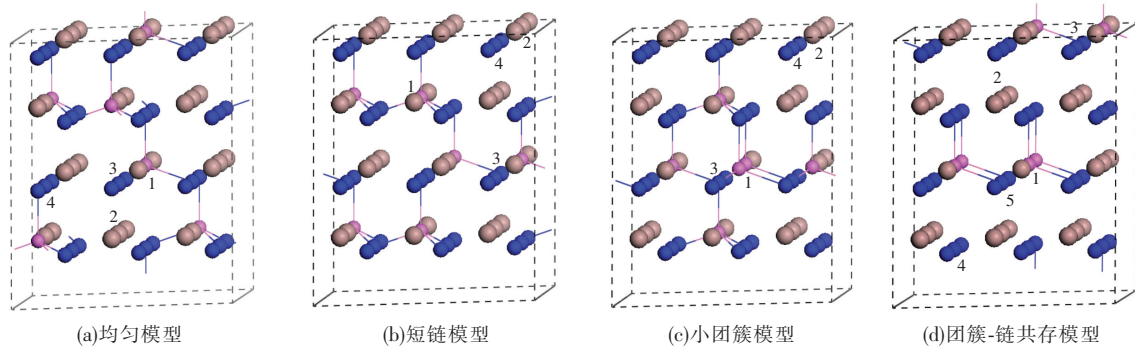


图 1 AlGaIn 和 InGaIn 两种合金的 4 种不同构型

Fig. 1 Four different structures of InGaIn and AlGaIn alloys

LDA-1/2 方法计算中,以 GaN, AlN, InN 带隙实验值为参考,分别选取 N, Al, Ga, In 原子的 n 参数值为 8, 8, 100, 100, CUT 值为 2.67, 3.33, 0.00, 1.23 进行带隙修正计算。

3 计算结果与讨论

为了证明计算的可靠性,在计算不同构型的

两种合金的电子结构性质之前,首先对纤锌矿 GaN、AlN 和 InN 的结构性质进行优化计算。表 1 给出晶格参数 a 、 c 、 c/a 的计算值,并与其他理论值与实验值进行了对照。可以看到,我们采用 AM05 XC 泛函优化计算的 GaN、AlN 和 InN 的晶格参数与其他理论计算及实验值基本吻合,说明用 AM05 XC 泛函计算的结果完全可靠。

表 1 本文用 AM05 XC 泛函计算的纤锌矿 GaN、AlN 和 InN 的晶格参量 a 、 c 、 c/a 与他人计算值和实验结果的对比

Tab. 1 Comparison of lattice constants a , c and c/a calculated with the AM05 XC functional with other calculation and experimental results for wurtzite GaN, AlN and InN

	a/nm	c/nm	c/a	计算或实验结果
GaN	0.317 9	0.517 8	1.628	本文
	0.322 7 ^[20]	0.526 0 ^[20]	1.630 ^[20]	他人计算值
	0.319 9 ^[21]	0.522 6 ^[21]	1.634 ^[21]	他人计算值
	0.318 9 ^[22]	0.518 5 ^[22]	1.626 ^[22]	实验值
AlN	0.311 4	0.498 1	1.600	本文
	0.313 4 ^[20]	0.500 1 ^[20]	1.596 ^[20]	他人计算值
	0.311 0 ^[21]	0.499 4 ^[21]	1.606 ^[21]	他人计算值
	0.311 2 ^[22]	0.498 2 ^[22]	1.601 ^[22]	实验值
InN	0.354 2	0.571 7	1.614	本文
	0.364 1 ^[23]	0.588 4 ^[23]	1.616 ^[23]	他人计算值
	0.358 5 ^[24]	0.578 ^[24]	1.612 ^[24]	他人计算值
	0.353 8 ^[25]	0.570 ^[25]	1.612 ^[25]	实验值

图 2 是以 GaN 和 AlN 为例,分别采用 GGA 和 LDA-1/2 所计算的能带修正对比图。如图所示,两种合金的导带底和价带顶均位于布里渊区的 r 点处,说明 GaN 和 AlN 都为直接带隙半导体材料,且光跃迁最可能出现在倒空间 r 点的位置,因此,合金光发射主要来自 VBM 和导带底

(CBM)态附近的电子空穴辐射复合产生。其中 (a)、(c) 图分别为 GaN、AlN 修正前的带隙图,(b)、(d) 图分别为 GaN、AlN 修正后的带隙图。由图可知采用 LDA-1/2 方法修正后的带隙值远大于 GGA 方法的计算值,与实验值吻合较好。具体计算数据在表 2 中列出。

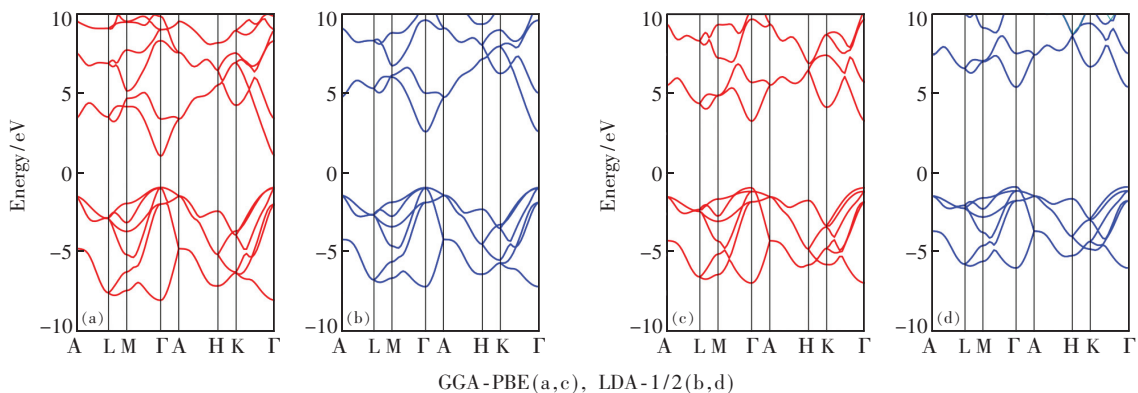


图 2 GaN(a,b) 和 AlN(c,d) 合金采用两种不同方法计算的能带结构图

Fig. 2 Band structures of GaN(a,b) and AlN(c,d) alloys with two different calculation methods

表 2 GGA 和 LDA-1/2 方法计算 GaN, AlN 和 InN 带隙值与其他理论计算值以及实验值的对比

Tab. 2 Comparison of the band gaps by using GGA and LDA-1/2 methods with other calculations

	本文计算值		其他理论计算值		实验值
	GGA	LDA-1/2	GGA/LDA	HSE	
GaN	1.967	3.510 2	1.450 ^[23] 1.810 ^[20]	3.55 ^[26]	3.510 ^[22]
AlN	4.178	6.250 1	4.245 ^[23] 4.210 ^[20]	6.29 ^[26]	6.250 ^[22]
InN	-0.237	1.504	-0.37 ^[23] -0.27 ^[23]	1.11 ^[26]	0.59-2.3 ^[27]

表 3 InGaN 和 AlGaN 合金中的 4 种不同构型对总能、价带、带隙、弯曲系数、体积的影响

Tab. 3 Effect of the four structures on total energy, valence band width, band gap, bowing parameter and the supercell volume in InGaN and AlGaN alloys

	总能/eV	价带宽度/eV	带隙/eV	弯曲系数/eV	体积/nm ³
InGaN					
均匀模型	0	6.00	2.97	1.41	0.861 09
短链模型	0.56	6.05	2.90	1.90	0.861 32
小团簇模型	2.25	6.12	2.84	2.33	0.862 61
团簇-链共存模型	2.08	6.07	2.86	2.18	862 46
AlGaN					
均匀模型	0	6.05	3.92	0.40	0.805 26
短链模型	0.48	6.12	3.85	0.89	0.805 27
小团簇模型	1.34	6.15	3.81	1.18	0.805 20
团簇-链共存模型	1.82	6.13	3.83	1.03	0.805 30

我们对(In,Al)GaN 合金中 4 种不同构型的总能、价带、带隙、弯曲系数、体积影响进行了计算。如表 3 所示,4 种构型的合金中均匀模型的总能最低,我们记为 0 eV,其他值为相对均匀模型的总能差。结果表明,在 InGaN 合金中,均匀模型的总能最低,小 In-N 团簇的总能最高,差值为 2.25 eV。可以与 N 空位的缺陷形成能相比拟,同时低于在 InN 合金中的 In 空位的缺陷形成能^[29]。但是我们从实验上可以知道,尽管 In 空位具有较大的缺陷形成能,但它仍能高浓度地存在于 InN 合金中。在 AlGaN 合金中,均匀模型的总能最低,小 Al-N 团簇与短 Al-N-链共存模型的总能最高,其差值为 1.82 eV。同样,可以与 N 空位的缺陷形成能相比拟,同时低于在 AlN 合金中的 Al 空位的缺陷形成能^[30]。由此,我们可以确信小 In(Al)-N 团簇与短 In(Al)-N-链是可以大量存在于(In,Al)GaN 合金中。

同时,从表 3 中还可以看到,在 InGaN 合金中,

3.1 (In,Al) GaN 合金中不同原子分布对电子结构的影响

众所周知,合金的光发射与晶体微观结构紧密相关^[28]。几个原子的 In-N 团簇和短的 In-N-链由于具有小的形成能而可以在实际 InGaN 合金中大量存在。Chichibu 等^[14]提出 In-N-链作为电子局域中心,主导着 InGaN 合金的光发射。为了进一步研究这一问题,我们在富 Ga 的 InGaN 和 AlGaN 两种合金中选取了 4 种最可能存在的构型(均匀、短链、小团簇、团簇-链共存模型)进行计算。研究何种结构能有效地影响电子的局域并提高发光效率。

随着 In 原子的排列位置不同,其电子结构发生了明显变化。与均匀模型相比,其他 3 种模型价带宽度都明显变宽,其中小 In-N 团簇模型的价带宽度最宽。此外由于其他 3 种模型要比均匀模型的体积大(其中小团簇的体积最大),这样,前者的第一布里渊区体积比后者小,从而导致能带相对后者下移;导带底由于电子有效质量比价带顶的小,下移更明显,最终导致其他 3 种模型与均匀模型相比具有更小的带隙,其中 In-N 团簇模型的带隙最小,与均匀模型的带隙差为 0.12 eV。由于 In 原子的排列位置不同,弯曲系数也在 1.41 ~ 2.33 eV 范围内发生相应的变化。这表明,In 原子的分布方式明显影响 InGaN 合金的价带、带隙以及弯曲系数。在 AlGaN 合金中,随着 Al 原子的排列位置不同,其电子结构同样发生了变化。与均匀模型相比,其他 3 种模型价带宽度也都明显变宽,但其中小 Al-N 团簇与短 Al-N-链共存模型的价带宽度最宽。而且,由于其他 3 种模型相

对均匀模型有价带顶上移,同时,导带底下移的特点,导致前者具有较小的带隙,其中 Al-N 团簇模型的带隙最小,与均匀模型的带隙差为 0.11 eV。由于 Al 原子的排列位置不同,弯曲系数也在 0.40 ~ 1.18 eV 范围内发生相应的变化。同样可以说明,Al 原子的分布方式明显影响 AlGaN 合金的价带、带隙以及弯曲系数。

3.2 (In,Al)GaN 合金的电子局域

为了探究电子局域情况,我们进一步研究了 InGaN 和 AlGaN 合金的 4 种不同构型中各类原子的分波态密度,其中 1 代表掺杂的 In 或 Al 原子,2 代表 Ga 原子,3 代表短链中与 In 或 Al 成键的 N 原子,4 代表不与 In 或 Al 成键的 N 原子,5 代表小团簇中与 In 或 Al 原子成键的 N 原子(参见图 1)。如图 3 所示,我们选取了在价带顶(VBM)和导带底(CBM)态附近对 PDOS 贡献较大的 N 的 2p 态、Ga 的 4s 和 4p 态、In 的 5s 和 5p 态、Al 的 3s 和 3p 态,略去了在 VBM(CBM)态附近对 PDOS 贡献较小的 In 的 4d 态、Ga 的 3d 态、N 的 2s 态。由于 VBM 态对于半导体发光具有重要的影响,所以我们主要研究 VBM 态。InGaN 合金的

分波态密度结果如图 3(a,b,c,d)所示。图 3(a)表示 InGaN 合金的均匀模型中电子均不局域;图 3(b)显示短 In-N-链模型中电子微弱地局域在短 In-N-链结构上;图 3(c)显示小 In-N 团簇结构上 N 原子的 2p 态在 VBM 态 DOS 图有一个峰值,则说明小 In-N 团簇模型中 VBM 态的电子主要来自于小 In-N 团簇结构上 N 原子的 2p 态;图 3(d)显示,在小 In-N 团簇与短 In-N-链共存模型中小 In-N 团簇结构上 N 原子的 2p 态在 VBM 态的电子局域能力比短 In-N-链结构上 N 原子的 2p 态在 VBM 态的电子局域能力强。AlGaN 合金的分波态密度结果如图 3(e,f,g,h)所示。图 3(e)显示,AlGaN 合金中的均匀模型与 InGaN 合金的均匀模型相同,电子并不局域;图 3(f)显示,在短 Al-N-链模型中 VBM 态的电子主要来自于短 Al-N-链结构外与 Ga 原子成键的 N 原子的 2p 态,说明短 Al-N-链模型中 VBM 态电子局域在短 Al-N-链以外的结构上;图 3(g)显示,在小 Al-N 团簇模型中 VBM 态电子主要局域在小 Al-N 团簇以外的结构上;图 3(h)显示,在小 Al-N 团簇与短 Al-N-链共存模型中,VBM 态电子主要局域在小 Al-N 团簇和

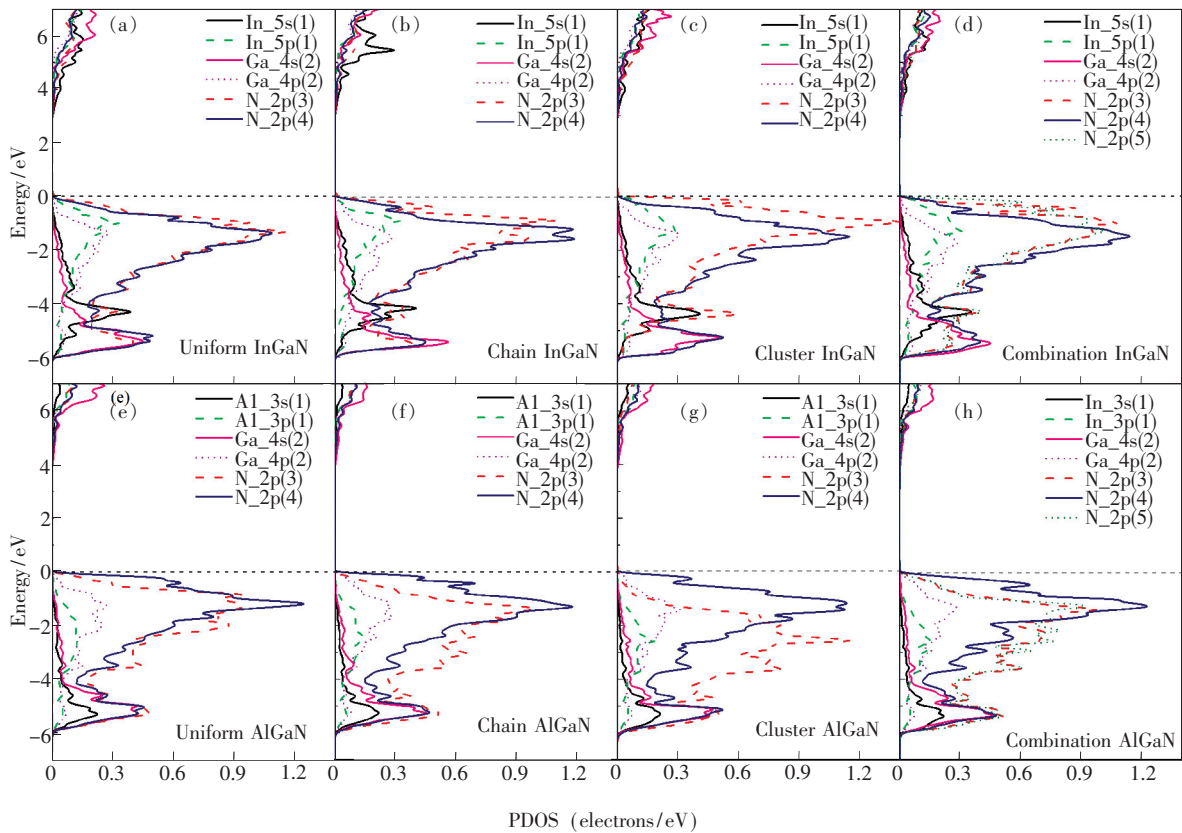


图 3 InGaN 和 AlGaN 两种合金中的 4 种构型的分波态密度图

Fig. 3 Electron PDOS of four different structures for InGaN and AlGaN alloys

短 Al-N 链以外的结构上。上述说明 In、Al 原子的分布影响 InGaN、AlGaN 合金的电子局域,但两种合金的电子局域情况不同,InGaN 合金电子主要局域在小 In-N 团簇和短 In-N-链结构上,且小 In-N 团簇结构在 VBM 态的电子局域能力比短 In-N-链结构在 VBM 态的电子局域能力强,而 AlGaN 合金电子主要局域在小 Al-N 团簇和短 Al-N-链以外的结构上。这表明,InGaN 合金能量的最高价态倾向于局域在小 In-N 团簇周围,这些小 In-N 团簇可以作为辐射复合中心从而主导发光。而 AlGaN 合金是显著的均匀合金,晶体的微观结构对光发射的影响并不显著。

为了更清晰地阐述电子局域能力,我们进一步绘制了两种合金不同构型的电荷局域密度图。以小 In-N 团簇与短 In-N-链共存模型为例,如图 4 所示。图 4(a)显示,在 InGaN 合金的小 In-N 团簇-短 In-N-链共存模型中,VBM 态的电子主要局

域在小 In-N 团簇结构上,少量电子局域在短 In-N-链结构上,说明小 In-N 团簇与短 In-N-链相比,前者局域 VBM 态的能力明显强于后者。图 4(b)显示,在 InGaN 合金的小 In-N 团簇-短 In-N-链共存模型中 CBM 态则表现出退局域类 Bloch 特性。图 4(c)显示,在 AlGaN 合金的小 Al-N 团簇-短 Al-N-链共存模型中,VBM 态的电子主要局域在小 Al-N 团簇和短 Al-N-链以外结构上,说明 Al 原子的分布基本不影响电子局域。图 4(d)显示,在 AlGaN 合金的小 Al-N 团簇-短 Al-N-链共存模型中,CBM 态同样也表现出退局域类 Bloch 特性。因此,对于 InGaN 合金而言,VBM 态的电子高度局域在几个原子的 In-N 团簇周围。另外,由于导带电子有效质量以及 In-N 团簇尺寸均较小,CBM 态很难有电子局域。但对于 AlGaN 合金,无论 VBM 态还是 CBM 态,电子局域状态对于结构的变化均不敏感。

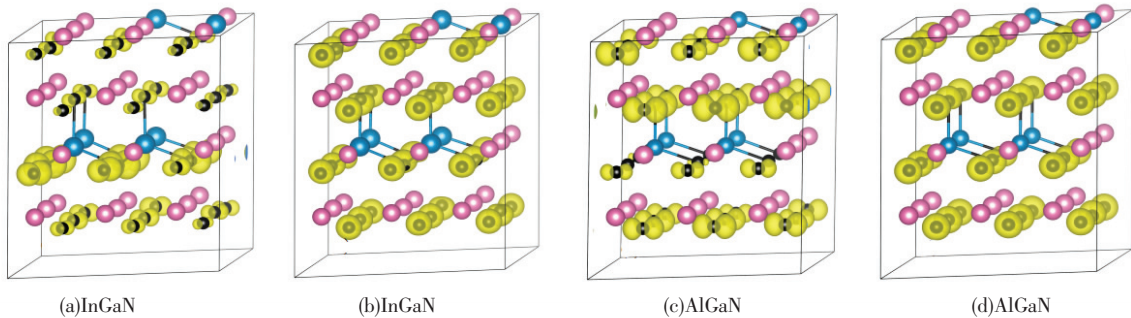


图 4 InGaN (a,b) 和 AlGaN (c,d) 两种合金的团簇-短链共存模型的 VBM(a,c) 态和 CBM(b,d) 态电荷局域密度图
Fig. 4 Charge localization density of VBM(a, c) and CBM (b, d) states in InGaN(a,b) and AlGaN(c,d) alloys with a small cluster and a chain

4 结 论

本文采用基于第一性原理的密度泛函理论下的 VASP 软件包对(In,Al)GaN 合金的 4 种具有代表性的构型(均匀、短链、小团簇、团簇-链结合模型)的电子结构和发光微观机理作了详细的研究。结果表明,短 In(Al)-N 链和小 In(Al)-N 团簇由于小的形

成能可以大量存在富 Ga 的 In(Al)GaN 合金中。在合金中,In(Al)原子的分布明显影响合金的价带宽度、带隙值以及带隙弯曲系数。而且 In 原子的分布对于 VBM 态的电子局域能力影响很大,几个原子的 In-N 团簇与 In-N-短链相比,前者对局域 VBM 能力的影响明显强于后者,强烈影响合金的发光,可以作为辐射复合中心,并高度局域激子。

参 考 文 献:

- [1] AMBACHER O. Growth and applications of Group III-nitrides [J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 1998, 31(20):2653-2710.
- [2] JAIN S C, WILLANDER M, NARAYAN J, *et al.*. III-nitrides: growth, characterization, and properties [J]. *J. Appl. Phys.*, 2000, 87(3):965-1006.
- [3] SIMON J, CAO Y, JENA D. Short-period AlN/GaN p-type superlattices: hole transport use in p-n junctions [J]. *Phys. Stat. Sol.*, 2010, 7(10):2386-2389.

- [4] AKIYAMA T, AMMI D, NAKAMURA K, *et al.*. Surface reconstruction and magnesium incorporation on semipolar GaN (110) surfaces [J]. *Phys. Rev. B*, 2010, 81(24):245317.
- [5] DENBAARS S P, FEEZELL D, KELCHNER K, *et al.*. Development of gallium-nitride-based light-emitting diodes (LEDs) and laser diodes for energy-efficient lighting and displays [J]. *Acta Mater.*, 2013, 61(3):945-951.
- [6] HURNI C A, DAVID A, CICH M J, *et al.*. Bulk GaN flip-chip violet light-emitting diodes with optimized efficiency for high-power operation [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2015, 106(3):031101.
- [7] AKASAKI I, AMANO H. Breakthroughs in improving crystal quality of GaN and invention of the p-n junction blue-light-emitting diode [J]. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 2006, 45(12R):9001.
- [8] CHICHIBU S F, UEDONO A, ONUMA T, *et al.*. Origin of defect-insensitive emission probability in In-containing (Al, In, Ga)N alloy semiconductors [J]. *Nat. Mater.*, 2006, 5(10):810-1-6.
- [9] KANETA A, FUNATO M, KAWAKAMI Y. Nanoscopic recombination processes in InGaN/GaN quantum wells emitting violet, blue, and green spectra [J]. *Phys. Rev. B*, 2008, 78(12):125317.
- [10] ZHANG J P, WU S, RAI S, *et al.*. AlGaIn multiple-quantum-well-based, deep ultraviolet light-emitting diodes with significantly reduced long-wave emission [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2003, 83(17):3456-3458.
- [11] COLLINS C J, SAMPATH A V, GARRETT G A, *et al.*. Enhanced room-temperature luminescence efficiency through carrier localization in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alloy [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2005, 86(3):031916.
- [12] 朱有章, 陈光德, 谢伦军, 等. MOCVD 生长的 InGaIn 合金的发光特 [J]. *发光学报*, 2005, 26(5):602-606.
ZHU Y Z, CHEN G D, XIE L J, *et al.*. Optical properties of InGaIn film grown by MOCVD [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2005, 26(5):602-606. (in Chinese)
- [13] 李忠辉, 杨志坚, 于彤军, 等. MOCVD 生长 InGaIn/GaN MQW 紫光 LED [J]. *发光学报*, 2003, 24(1):107-109.
LI Z H, YANG Z J, YU T J, *et al.*. InGaIn/GaN violet-LED grown by LP-MOCVD [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2003, 24(1):107-109. (in Chinese)
- [14] CHICHIBU S, WADA K, NAKAMURA S. Spatially resolved cathodoluminescence spectra of InGaIn quantum wells [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 1997, 71(26):2346-2348.
- [15] HUMPHREYS C J. Does In form In-rich clusters in InGaIn quantum wells? [J]. *Philos. Mag.*, 2007, 87(13):1971-1982.
- [16] KENT P R C, ZUNGER A. Carrier localization and the origin of luminescence in cubic InGaIn alloys [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, 79(13):1977-1979.
- [17] KRESSE G, JOUBERT D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, 59(3):1758.
- [18] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 77(18):3865-3868.
- [19] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. *Phys. Rev. B*, 1976, 13(12):5188-5192.
- [20] CUI X Y, DELLEY B, STAMPFL C. Band gap engineering of wurtzite and zinc-blende GaN/AlN superlattices from first principles [J]. *J. Appl. Phys.*, 2010, 108(10):103701.
- [21] ZORODDU A, BERNARDINI F, RUGGERONE P, *et al.*. First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: comparison of local and gradient-corrected density-functional theory [J]. *Phys. Rev. B*, 2001, 64(4):045208.
- [22] KIM K, LAMBRECHT W R L, SEGALL B. Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN [J]. *Phys. Rev. B*, 1996, 53(24):16310.
- [23] STAMPFL C, VAN DE WALLE C G. Density-functional calculations for III-V nitrides using the local-density approximation and the generalized gradient approximation [J]. *Phys. Rev. B*, 1999, 59(8):5521.
- [24] LITIMEIN F, BOUHAFS B, NOUET G, *et al.*. Meta-GGA calculation of the electronic structure of group III-V nitrides [J]. *Phys. Stat. Sol. (b)*, 2006, 243(7):1577-1582.
- [25] PASZKOWICZ W, ADAMCZYK J, KRUKOWSKI S, *et al.*. Lattice parameters, density and thermal expansion of InN microcrystals grown by the reaction of nitrogen plasma with liquid indium [J]. *Philos. Mag. A*, 1999, 79(5):1145-1154.

- [26] MOSES P G, MIAO M, YAN Q, *et al.*. Hybrid functional investigations of band gaps and band alignments for AlN, GaN, InN, and InGaN [J]. *J. Chem. Phys.*, 2011, 134(8):084703.
- [27] BUTCHER K S A, TANSLEY T L. InN, latest development and a review of the band-gap controversy [J]. *Superlatt. Microstruct.*, 2005, 38(1):1-37.
- [28] OLIVER R A, BENNETT S E, ZHU T, *et al.*. Microstructural origins of localization in InGaN quantum wells [J]. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2010, 43(35):354003.
- [29] VAN DE WALLE C G, LYONS J L, JANOTTI A. Controlling the conductivity of InN [J]. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 2010, 207(5):1024-1036.
- [30] LAAKSONEN K, GANCHENKOVA M G, NIEMINEN R M. Vacancies in wurtzite GaN and AlN [J]. *J. Phys: Cond. Matt.*, 2008, 21(1):015803.



张玲玲(1992 -),女,内蒙古赤峰人,硕士研究生,2016年于集宁师范学院获得学士学位,主要从事氮化物半导体材料的电学及光学性质的研究。

E-mail: 932341576@qq.com



张敏(1973 -),女,山西忻州人,博士,教授,2010年于内蒙古大学获得博士学位,主要从事低维半导体材料的电学、磁学及光学性质的第一性原理的研究。

E-mail: smile_zm@126.com