

Термодинамическая стабильность и перераспределение зарядов в тройных твердых растворах нитридов элементов III группы

© В.Г. Дейбук[¶], А.В. Возный^{¶¶}

Черновицкий национальный университет им. Ю. Федьковича,
58012 Черновцы, Украина

(Получена 14 октября 2004 г. Принята к печати 10 ноября 2004 г.)

В модели дельта-параметра решетки исследована термодинамика твердых растворов AlGaN, InGaN и InAlN. Полученные фазовые диаграммы указывают на стабильность $Al_xGa_{1-x}N$ во всем диапазоне концентрации x , в то время как для $In_xGa_{1-x}N$ область спиноподобного распада составляет $0.2 < x < 0.69$, для $In_xAl_{1-x}N$ $0.16 < x < 0.7$ при 1000 К. Учет биаксиальных деформаций ведет к понижению критической температуры и сужению области нестабильности. Анализ распределения плотности заряда, проведенный методом псевдопотенциала в приближении 32-атомных суперячеек, показал, что стабильность твердого раствора определяется соотношением дестабилизирующего вклада деформаций, связанных с рассогласованием постоянных решетки, и стабилизирующего обмена зарядом между различными химическими связями. Биаксиальная деформация уменьшает перераспределение заряда, вызванное деформациями, таким образом повышая стабильность твердого раствора.

1. Введение

На протяжении последних лет значительный прогресс был достигнут в производстве оптических и электронных устройств на основе нитридов элементов III группы AlN, GaN и InN. Это в первую очередь активные оптоэлектронные приборы, которые работают в зеленой, голубой и ультрафиолетовой областях спектра, а также высокочастотные и высокотемпературные электронные устройства, такие как полевые транзисторы [1]. Общим для всех этих структур является использование тройных сплавов $In_xGa_{1-x}N$ или $Al_xGa_{1-x}N$. Формирование твердых растворов нитридов элементов III группы в принципе разрешает изменять ширину запрещенной зоны от 0.7 эВ в InN до 6.28 эВ в AlN с промежуточным значением 3.44 эВ в GaN (при 300 К) [2].

Однако получить твердые растворы на основе нитридов элементов III группы с произвольным составом компонент не позволяет наличие области несмешиваемости. В частности, в системе $Al_xGa_{1-x}N$ с небольшим рассогласованием постоянных решетки критическая температура распада является достаточно низкой, что позволяет получать более или менее правильный твердый раствор во всем диапазоне составов при нормальных условиях. В то же время в твердых растворах $In_xGa_{1-x}N$ и $In_xAl_{1-x}N$ недавно были экспериментально обнаружены довольно широкие области фазового разделения [3].

При нормальных условиях AlN, GaN и InN кристаллизуются в гексагональную структуру вюрцита. Тройные твердые растворы растут также в вюрцитной структуре независимо от техники осаждения: молекулярно-лучевая эпитаксия (MBE), газофазное химическое осаждение из металлоганических соединений (MOVPE), гибридная газофазная эпитаксия (HVPE) и т.п. Недавно было показано, что тонкие пленки AlN, GaN и InN могут быть получены с кубической структурой цинковой обманки [4]

на подложках GaAs (001) и 3C-Si (001) с помощью плазменного метода MBE. Более того, синтезированы слои тройных кубических соединений $Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$ и $In_xAl_{1-x}N$ [3]. Характерной особенностью нитридных сплавов является наличие внутренних напряжений, связанных с рассогласованием решеток и различием коэффициентов термического расширения. Так, рассогласование постоянных решетки GaN и AlN составляет 2.5 и 3.9% для гексагональных направлений a и c соответственно. Рассогласование решеток возрастает до 10.7 и 9% для InN и GaN, а для AlN и InN оно составляет уже 13.5 и 12.6%. Коэффициенты термического расширения изменяются от $5.6 \cdot 10^{-6}$ до $4.2 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ в направлении оси a и от $3.2 \cdot 10^{-6}$ до $5.3 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ в направлении оси c для гексагональных GaN и InN [5]. Большое различие приведенных параметров ведет к возникновению значительных внутренних напряжений и, как следствие, к фазовому разделению тройных твердых растворов нитридов. Напряжения и флуктуации состава влияют на большинство физических свойств, включая растворимость.

В данной работе исследованы термодинамика напряженных твердых растворов $Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$, $In_xAl_{1-x}N$ и влияние биаксиальных напряжений со стороны подложки на диаграммы спиноподобного распада в тонких пленках этих соединений. При проведении расчетов считается, что псевдобинарные нитридные сплавы кристаллизуются в тетраэдрически координированную кубическую решетку со структурой цинковой обманки. Результаты термодинамического рассматривания таких систем могут быть перенесены на тетрагональную систему. Предполагается также, что атомы Ga, Al, In неупорядоченно размещены по узлам катионной границирированной подрешетки, в то время как атомы азота занимают другую подрешетку. Хотя представленные далее расчеты проведены для кубической фазы, аналогичные результаты ожидаются и для вюрцитной фазы [6]. В работе также проведены расчеты пространственного

[¶] E-mail: vdei@chnu.cv.ua

^{¶¶} E-mail: vozny@elinity.com

распределения заряда с учетом сплавных эффектов в приближении 32-атомных суперячеек. Это позволило проанализировать процессы переноса заряда, которые происходят при формировании твердых растворов, а также глубже понять явление термодинамической неустойчивости тройных нитридных сплавов с микроскопической точки зрения.

2. Анализ термодинамической стабильности

2.1. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

Твердые растворы замещения $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ экспериментально получают для всех составов (для всех x) в виде как объемных кристаллов, так и эпитаксиальных слоев, поэтому проведенный нами термодинамический анализ будет своего рода контрольным.

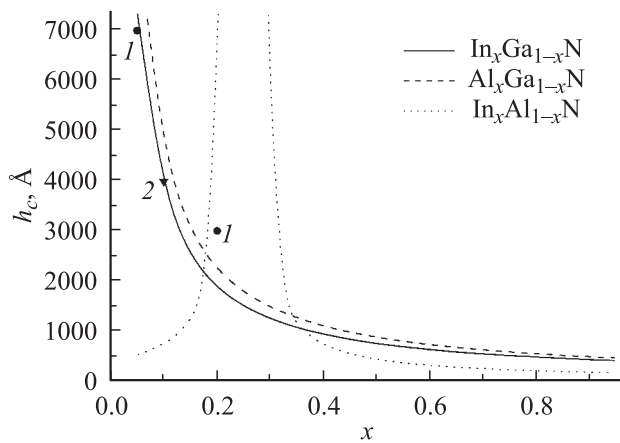


Рис. 1. Зависимость критической толщины h_c от состава для эпитаксиальных пленок: линии — расчет; 1 — эксперимент для $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ [11]; 2 — эксперимент для $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ [11].

Термодинамика стабильности $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ исследовалась теоретически в ряде работ различными методами [6–9]. В частности, в модели регулярного раствора [9] критическая температура спиноподобного распада составляет $T_c = 368$ К, в то время как оценка с помощью обобщенного квазихимического приближения (GQCA) дает явно заниженную величину $T_c = 87$ К [6]. В наших расчетах была принята модель „дельта-параметра решетки“ (DLP), которая хорошо работает для твердых растворов на основе соединений III–V, обобщена нами для эпитаксиальных пленок и детально описана в работе [10]. Рассчитанная в молифицированном приближении Мэттьюса–Блейкли критическая толщина (h_c) пленок $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ в зависимости от состава приведена на рис. 1 и хорошо согласуется с экспериментальными данными $300 < h_c < 700$ нм при $0.05 < x < 0.2$ [3,11].

Рассчитанная нами критическая температура составляет $T_c = 107$ К при $x = x_c = 0.53$, что объясняет отсутствие области несмешиваемости в данном твердом

растворе при характерных температурах выращивания. С уменьшением толщины пленки заметный вклад биаксиальных напряжений в энергию деформации приводит к понижению критической температуры распада и сужению области спиноподобного распада.

2.2. $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

В отличие от системы $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, сплавы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ характеризуются довольно широкой областью несмешиваемости. Данная система довольно интенсивно изучается в последние годы как экспериментально, так и теоретически [6–8,12–14]. Фазовое разделение, которое наблюдается при температурах роста, обусловлено внутренними деформациями, возникающими вследствие смешивания двух компонент GaN и InN с несогласованными постоянными решетки. Поэтому при типичной температуре роста твердого раствора $T = 1000$ К граница растворимости InN (GaN) в GaN (InN) составляет менее 5% (10%) [15]. Однако фазовая диаграмма также показывает, что в широкой области между биноподобной и спиноподобной кривыми несогласованный сплав может существовать в виде метастабильного твердого раствора. На рис. 1 приведена рассчитанная нами зависимость критической толщины тонкой пленки $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ от состава, которая хорошо согласуется с экспериментальным значением $h_c = 400$ нм при $x = 0.1$ [3]. В рамках модели DLP мы рассчитали кривые биноподобного и спиноподобного распада для пленок $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ разной толщины (рис. 2). Как можно видеть, при толщине $h = 1$ мкм пленка полностью релаксировала, причем $T_c = 1322$ К при $x_c = 0.44$, что хорошо согласуется с теоретическими расчетами в модели GQCA [6] ($T_c = 1295$ К) и в модели поля валентных сил [15] ($T_c = 1473$ К). При $T = 1000$ К из рассчитанной нами фазовой диаграммы для релаксированной пленки область биноподобного распада составляет $0.09 < x_b < 0.86$ ($0.05 < x_b < 0.90$ [6]), а спиноподобного $0.20 < x_s < 0.69$ ($0.16 < x_s < 0.75$ [6]).

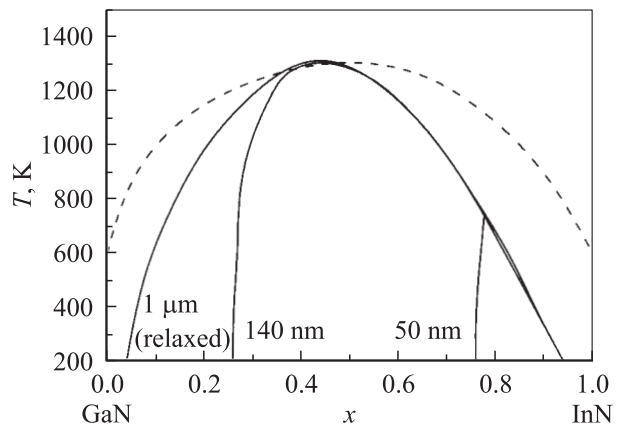


Рис. 2. Фазовые диаграммы спиноподобного распада эпитаксиальных пленок $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ различной толщины. Пленка толщиной 1 мкм — ненапряженная. Штриховая кривая — биноподобная, сплошные — спиноподобные.

Экспериментальные данные [3,16] показывают, что спинодальный распад начинается для концентраций In больше 30%. С уменьшением толщины пленки влияние биаксиальных напряжений со стороны подложки все более будет проявляться в форме кривых распада (рис. 2). В частности, критическая температура распада понижается, а область спинодального распада сдвигается в сторону более высоких концентраций индия. Так, для пленки толщиной 50 нм по нашим расчетам она составляет $0.76 < x_s < 0.83$, экспериментальные же данные показывают, что для таких пленок In может входить в раствор до 80% [17].

2.3. $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$

Система $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$, в отличие от $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, в литературе изучена намного меньше, и связано это с трудностями ее выращивания [18,19]. Большой интервал изменения ширины запрещенной зоны позволяет надеяться на широкое применение данного твердого раствора, в частности, в качестве диэлектрического барьера для приборов на основе GaN. Большое рассогласование решеток InN и AlN ведет к возникновению значительных внутренних напряжений, которые являются основной причиной термодинамической неустойчивости твердого раствора $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}$.

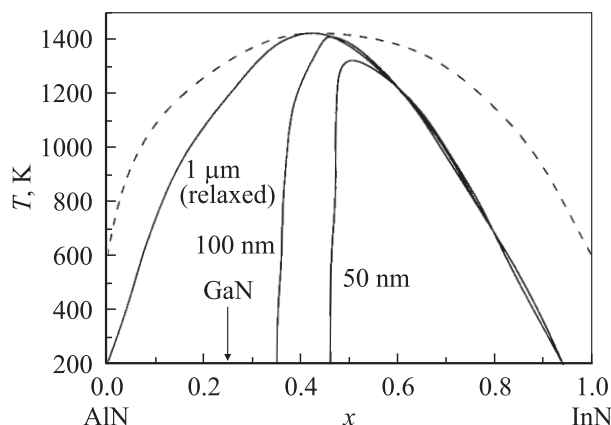


Рис. 3. Фазовые диаграммы спинодального распада эпитаксиальных пленок $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ различной толщины. Пленка толщиной 1 мкм — ненапряженная. Штриховая кривая — бинадаль, сплошные — спинодали.

Нами рассчитана свободная энергия Гельмгольца $\Delta F(x, T)$ сплава, что разрешило построить фазовую диаграмму $T-x$ и получить критическую температуру несмешиваемости $T_c = 1450$ К при $x_c = 0.42$. Теоретические оценки методом GQCA дают $T_c = 1485$ К [20]. Результаты наших расчетов приведены на рис. 3 и свидетельствуют, что для типичных температур выращивания будет наблюдаться фазовое разделение данного сплава в широкой области концентраций. Например, при $T = 1000$ К спинодальный распад для релаксированных пленок будет иметь место при содержании In от 16 до

70% (для сравнения: в методе GQCA данный интервал составляет 15–70% [20]), в то время как экспериментально фазовое разделение наблюдалось в релаксированных пленках $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ начиная с $x > 0.17$ [19].

Учет биаксиальных деформаций в тонких пленках $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ со стороны подложки ведет к понижению критической температуры, однако не такому сильному, как в пленках $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$. Кроме этого, область несмешиваемости уменьшается, в особенности быстро со стороны подложки на фазовой диаграмме, что находится в удовлетворительном согласии с данными экспериментальных исследований соответствующих пленок [18].

3. Перераспределение плотности заряда валентных электронов

Получить более точную информацию о стабильности твердых растворов можно на основе самосогласованных первопринципных расчетов полной энергии. Однако такие расчеты являются довольно трудоемкими, особенно для неупорядоченных твердых растворов, которые моделируют с помощью суперячеек с большим количеством атомов. Исследовать причины нестабильности твердых растворов на микроскопическом уровне можно на основе анализа распределения плотности заряда валентных электронов, поскольку полная энергия тесно с ним связана.

Расчеты проводились методом модельного эмпирического псевдопотенциала с учетом внутренних локальных деформаций, композиционной неупорядоченности и структурной релаксации, для моделирования которых использовались 32-атомные суперячейки. Процедура подбора псевдопотенциалов и методика расчетов в приближении суперячеек детально описана в [21,22].

Рассмотрим на примере InGaN процесс формирования твердого раствора, который можно разделить на несколько этапов. На рис. 4 приведено распределение плотности заряда ρ в чистых соединениях GaN и InN.

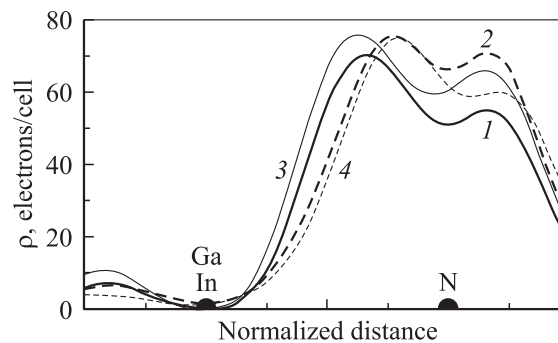


Рис. 4. Распределение плотности заряда между различными связями при формировании твердого раствора InGaN: 1, 2 — в чистых соединениях GaN и InN, 3, 4 — в твердом растворе $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$; 1, 3 — вдоль связи Ga–N, 2, 4 — вдоль связи In–N.

Максимум зарядовой плотности InN по сравнению с GaN выше и находится ближе к аниону, что соответствует его большей степени ионности.

Первым этапом формирования твердого раствора при моделировании является приведение чистых бинарных соединений к постоянной решетке результирующего твердого раствора, в данном случае сжатие InN и растяжение GaN. В результате плотность заряда вдоль связи Ga–N значительно возрастает, что соответствует увеличению ионности, и становится больше, чем в InN, в котором под действием деформации плотность заряда вдоль связи и степень ионности уменьшаются.

На втором этапе объединим ячейки GaN и InN в твердый раствор без релаксации длин связей и углов. Поскольку связи Ga–N и In–N имеют различные электроотрицательности, между ними будет происходить обмен зарядом. Заряд перетекает от менее ионной связи Ga–N к более ионной In–N, что ведет к уменьшению различия в распределении заряда вдоль них. На последнем этапе учтем релаксацию длин связей, которая ведет к сдвигу атомов с идеальных позиций, заданных правилом Вегарда [22–24], что также является причиной перераспределения заряда вследствие возникших деформаций.

Таким образом, суммарное влияние всех рассмотренных эффектов ведет к выравниванию распределения заряда вдоль различных связей и приближению реального твердого раствора к „виртуальному кристаллу“ (рис. 4, кривые 3, 4). Влияние данных сплавных эффектов на электронный спектр твердых растворов, в частности на зависимости ширины запрещенной зоны от состава, детально исследовано нами в работе [22].

Суммарное изменение заряда ($\Delta\rho$) вдоль связи при переходе от чисто бинарного соединения к тройному твердому раствору изображено на рис. 5. Например,

$$\Delta\rho(\text{In–N}) = \rho(\text{InGaN вдоль связи In–N}) - \rho(\text{InN}).$$

Как показали первопринципные расчеты [24], перенос заряда с более сильной связи на более слабую приводит к дестабилизации системы. В нитридах элементов III группы деформация, вызванная приведением составляющих твердого раствора к усредненной постоянной решетке, сопровождается переносом заряда с более ионной связи на менее ионную, в то время как различие электроотрицательностей и структурная релаксация обуславливают перенос заряда с менее ионной связи на более ионную, т.е. стабилизируют систему. В AlGaN различие электроотрицательностей и структурная релаксация превалируют над деформационным вкладом, в результате чего суммарный перенос заряда происходит от менее ионной связи Ga–N к более ионной Al–N (рис. 5, *a*). В качестве характеристики ионности в данной работе используется коэффициент зарядовой асимметрии Гарсия–Козна [25], который, в отличие от других моделей ионности, указывает на большую ионность AlN по сравнению с GaN [22,25,26]: $g(\text{GaN}) = 0.54$, $g(\text{AlN}) = 0.61$, $g(\text{InN}) = 0.64$. В InGaN и InAlN (рис. 5, *b,c*) заряд перетекает от более ионной

связи к менее ионной, т.е. они нестабильны. Это связано с гораздо более сильным влиянием деформаций из-за рассогласования постоянных решетки, которое достигает 10–12%.

На рис. 5 штриховыми кривыми изображены аналогичные результаты для тонких псевдоморфных пленок твердых растворов нитридов элементов III группы, выращенных на подложках GaN. Как показали наши расчеты, возникающие в пленках биаксиальные деформации ведут к значительному уменьшению перераспределения заряда, вызванного деформациями, в то время как на химический перенос они практически не влияют. В $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (рис. 5, *a*) при переходе к псевдоморфным пленкам $\Delta\rho$ вдоль более ионной связи, т.е. вдоль Al–N, меняется незначительно и все еще

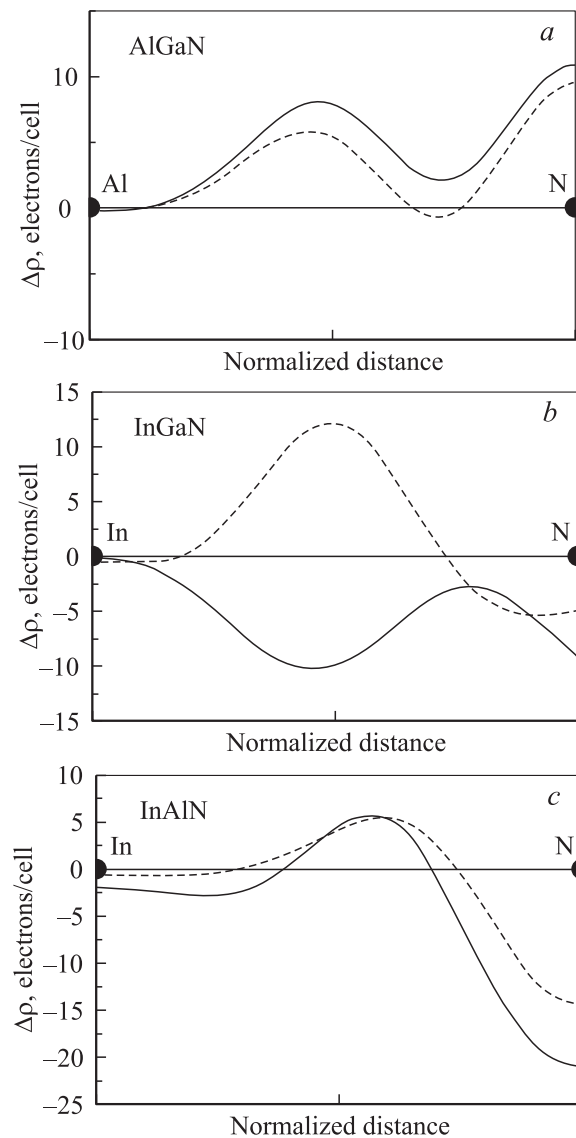


Рис. 5. Перераспределение плотности заряда вдоль более ионной связи при переходе от чистых бинарных соединений к твердому раствору: *a* — $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, *b* — $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, *c* — $\text{In}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N}$. Сплошные кривые — объемные образцы, штриховые — псевдоморфные пленки на подложке GaN.

остается положительной величиной, что свидетельствует о стабильности данного твердого раствора. В $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (рис. 5, *b*) картина меняется наиболее существенно: при формировании твердого раствора в пленочном варианте суммарное перераспределение заряда происходит от менее ионной связи Ga–N к более ионной In–N, причем $\Delta\rho > 0$ практически вдоль всей связи In–N, что свидетельствует о стабильности раствора при данной концентрации. В пленках $\text{In}_{0.5}\text{Al}_{0.5}\text{N}$ (рис. 5, *c*), как и в объемном материале, наблюдается суммарное перераспределение заряда от более ионной связи In–N к менее ионной Al–N. Таким образом, даже в виде пленки твердый раствор остается нестабильным при данных концентрациях. Однако абсолютная величина $\Delta\rho$ уменьшилась, что дает основания полагать, что область концентраций, где раствор может стать стабильным, расширяется.

Таким образом, область концентраций, при которых химический перенос заряда преобладает над деформационным вкладом, расширяется и можно говорить о повышении стабильности тонких пленок указанных твердых растворов.

4. Заключение

В работе исследована термодинамика стабильности твердых растворов нитридов элементов III группы. Проведенные расчеты в модели дельта-параметра решетки указывают на стабильность твердых растворов AlGaN во всем диапазоне концентраций при типичных температурах выращивания, в то время как InGaN и InAlN имеют области несмешиваемости, что хорошо согласуется с известными экспериментальными данными. Показано, что биаксиальные деформации, возникающие в тонких пленках, ведут к сужению областей несмешиваемости и понижению критических температур.

Анализ перераспределения зарядовой плотности вдоль различных связей в твердых растворах позволил исследовать на микроскопическом уровне процессы, которые происходят при формировании твердых растворов. Установлено, что стабильность твердых растворов определяется не только различием постоянных решетки бинарных соединений, но и обменом заряда между связями с разной степенью ионности.

Список литературы

- [1] S. Nakamura. *Introduction to Nitride Semiconductor Blue Lasers and Light Emitting Diodes* (London, Taylor & Francis, 2000).
- [2] J. Wu, W. Walukiewicz, K.M. Yu. *Sol. St. Commun.*, **127**, 411 (2003).
- [3] S.C. Jain, M. Willander, J. Narayan, R. Van Overstraeten. *J. Appl. Phys.*, **87**, 965 (2000).
- [4] M.J. Paisley, Z. Sitar, J.B. Posthil, R.F. Davis. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **7**, 701 (1989).
- [5] A. Chen, A. Sher. *Semiconductor Alloys: Physics and Material Engineering* (N.Y., Plenum Press, 1995).

- [6] L.K. Teles, J. Furthmuller, L.M. Solfaro, J.R. Leite, F. Bechstedt. *Phys. Rev. B*, **62**, 2475 (2000).
- [7] T. Ito. *Phys. Status Solidi B*, **217**, R7 (2000).
- [8] D. Doppalapudi, S.N. Basu, K.F. Ludwig, T.D. Moustakas. *J. Appl. Phys.*, **84**, 1389 (1998).
- [9] V.A. Elyukhin, S.A. Nikishin. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 917 (1996).
- [10] В.Г. Дейбук. *ФТП*, **37**, 1179 (2003).
- [11] I. Akasaki, H. Amano. In: GaN, ed. by J.I. Pankove, T.D. Moustakas (Academic, N.Y., 1998) v. 1, p. 459.
- [12] A.N. Wistmeyer, S. Mahajan. *Phys. Status Solidi B*, **228**, 161 (2001).
- [13] A. Kashner, A. Hoffmann, C. Thomsen, T. Bottcher, S. Einfeldt, D. Hommel. *Phys. Status Solidi, A*, **179**, R4 (2000).
- [14] Y.-T. Moon, D.J. Kim, K.-M. Song. *Phys. Status Solidi B*, **210**, 167 (1999).
- [15] I. Ho, G.B. Stringfellow. *Appl. Phys. Lett.*, **69**, 2701 (1996).
- [16] T. Matsuoka. *J. Cryst. Growth*, **189**, 19 (1998).
- [17] R. Singh, T.D. Moustakas. *First Int. Symp. „Gallium Nitride and Related Materials“* [Mater. Res. Soc. Symp. Proc. (Pittsburgh, PA, 1996)] p. 163
- [18] K. Murano, T. Inushima, Y. Ono, T. Shiraishi, S. Ohoya, S. Yasaka. *Phys. Status Solidi B*, **228**, 31 (2001).
- [19] S. Yamaguchi, M. Kariya, S. Nitta. *J. Cryst. Growth*, **195**, 309 (1998).
- [20] L.K. Teles, L.M.R. Solfaro, J. Furthmuller, F. Bechstedt, J.R. Leite. *Phys. Status Solidi B*, **234**, 956 (2002).
- [21] В.Г. Дейбук, А.В. Возный, М.М. Слетов, А.М. Слетов. *ФТП*, **36**, 420 (2002).
- [22] А.В. Возный, В.Г. Дейбук. *ФТП*, **38**, 316 (2004).
- [23] J.L. Martins, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **30**, 6217 (1984).
- [24] G.P. Srivastava, J.L. Martins, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **31**, 2561 (1985).
- [25] A. Garcia, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **47**, 4215 (1993).
- [26] K. Karch, J.-M. Wagner, F. Bechstedt. *Phys. Rev. B*, **57**, 7043 (1998).

Редактор Л.В. Шаронова

Thermodynamic stability and charge redistribution in ternary III-nitride alloys

V.G. Deibuk, A.V. Voznyy

Yu. Fedkovich Chernovtsy National University,
58012 Chernovtsy, Ukraine

Abstract Thermodynamics of AlGaN, InGaN and InAlN alloys was investigated in a delta lattice parameter model. Obtained phase diagrams show stability of AlGaN in the whole range of concentrations, while miscibility gap for InGaN $0.2 < x(\text{In}) < 0.69$, and $0.16 < x(\text{In}) < 0.7$ for InAlN at $T = 1000$ K. The biaxial strain lowers the critical temperatures and narrows the miscibility gap. Analysis of charge density distribution made using pseudopotential method 32-atom supercells approach showed that alloy stability is determined by destabilizing charge redistribution under lattice mismatch strain and stabilizing charge transfer between different bonds due to different electronegativities and structure relaxation effect. Biaxial strain decreases the deformation induced charge redistribution thus stabilizing the alloy.