

# Исследование поляризации нитридных соединений (Al,Ga,AlGa)N и зарядовой плотности различных интерфейсов на их основе

© И.А. Супрядкина\*<sup>†</sup>, К.К. Абгарян<sup>+</sup>, Д.И. Бажанов\*<sup>+</sup>, И.В. Мутигуллин<sup>+</sup>

\* Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет), 119991 Москва, Россия

<sup>+</sup> Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Российской академии наук, 119333 Москва, Россия

(Получена 29 октября 2012 г. Принята к печати 19 марта 2013 г.)

Представлены результаты теоретического исследования на основе расчетов из первых принципов поляризационных свойств полупроводников AlN, GaN и AlGaN со структурой вюрцита. Для данных нитридных соединений рассчитаны значения спонтанной, пьезоэлектрической поляризации и пьезоэлектрических констант. В целях дальнейшего рассмотрения перспективных гетероструктур на основе соединений (Al,Ga,AlGa)N были оценены значения зарядовых плотностей на интерфейсах AlN/GaN, AlGaN/AlN, AlGaN/GaN и концентрация носителей на гетерогранице AlGaN/GaN, приведено сравнение с экспериментальными данными.

## 1. Введение

Нитриды  $A^{III}B^V$  и их твердые растворы являются перспективными материалами для создания полупроводниковых устройств, таких как светодиоды, излучающие в оптическом и ультрафиолетовом диапазонах, и мощные высокочастотные транзисторы [1]. Во многих теоретических работах [2–5] показано, что значительное влияние на характеристики полупроводниковых гетероструктур оказывает значение макроскопической поляризации на различных интерфейсах. Наличие макроскопической поляризации приводит к возникновению на гетерограницах нитридных соединений встроенного электрического поля и накоплению зарядов, что в свою очередь вызывает ограничение движения электронов в одном направлении и образование двумерного электронного газа [3].

В структуре вюрцита нитриды  $A^{III}B^V$  обладают большими значениями спонтанной поляризации и пьезоэлектрических констант [2,4], что приводит к значительной макроскопической поляризации. Макроскопическая поляризация в отсутствие внешних полей определяется суммой спонтанной и пьезоэлектрической поляризации. Так, например, в гетероструктуре AlGaN/GaN пьезоэлектрическая поляризация деформированных слоев AlGaN более чем в 5 раз больше, чем в гетероструктуре AlGaAs/GaAs, что обеспечивает значительно более высокую концентрацию носителей тока на интерфейсе AlGaN/GaN [6–10]. Кроме этого, спонтанная поляризация, например, вюрцитной структуры AlN всего в 3–5 раз меньше, чем спонтанная поляризация сегнетоэлектриков со структурой перовскита [11].

На интерфейсах полупроводниковых нитридных гетероструктур зарядовая плотность достигает больших значений, что обусловлено большой по значению макроскопической поляризацией. Этот факт определяет преимущество использования в СВЧ устройствах нитридов

$A^{III}B^V$  перед другими полупроводниковыми структурами. В связи с этим является актуальным исследование спонтанной и пьезоэлектрической поляризации соединений (Al,Ga,AlGa)N, а также определение значений зарядовой плотности на различных интерфейсах AlN/GaN, AlGaN/AlN, AlGaN/GaN.

## 2. Теория

В структуре нитридных соединений (Al,Ga,AlGa)N каждая ковалентная связь между атомом металла и азота представляет собой диполь. В кристаллах со структурой сфалерита все связи имеют одинаковую длину и угол связи, что приводит к нулевому суммарному дипольному моменту на элементарную ячейку. В вюрцитной структуре вдоль направления [0001] диполи имеют различную длину и углы связи, вследствие этого суммарный дипольный момент, приходящийся на элементарную ячейку, оказывается нескомпенсированным. Наличие ненулевого дипольного момента приводит к возникновению спонтанной поляризации.

В данной работе спонтанная поляризация структуры рассчитывалась с помощью метода фаз Берри в рамках современной теории поляризации, предложенной Р.Д. Кинг-Смитом, Д. Вандербильтом и Р. Реста [12,13]. Согласно современной теории, спонтанная поляризация определяется не абсолютным значением дипольного момента, усредненного по объему, а разностью поляризаций двух различных состояний системы [14]. Таким образом, значение спонтанной поляризации структуры дается относительно некоторой опорной структуры, значение поляризации которой принимается за нуль. При выборе такой структуры использовалась модель точечных зарядов [2,15]. В данной модели атомы металла и азота в идеальной структуре вюрцита с внутренним параметром  $u = 3/8$ , который определяет относительное смещение подрешеток атомов разного сорта вдоль гексагональной

<sup>†</sup> E-mail: supryadkina@physics.msu.ru

**Таблица 1.** Результаты расчета параметра решетки в базисной плоскости ( $a$ ), отношение параметра решетки вдоль направления  $[0001]$  к параметру в базисной плоскости ( $c/a$ ), отклонение параметра  $u$  в относительных единицах от идеального значения ( $\Delta u$ ), спонтанной поляризации для структуры AlN

Система AlN	Наш расчет		Теория (LDA-US) [21]	Наш расчет		Теория (GGA-US) [21]	Эксперимент [22,23]
	LDA-US	LDA-PAW		GGA-US	GGA-PAW		
$a$ , Å	3.083	3.088	3.07	3.122	3.123	3.108	3.1106
$c/a$	1.6015	1.6002	1.5997	1.6041	1.6031	1.6033	1.6008
$\Delta u \cdot 10^{-3}$	7.0	7.0	7.1	6.6	6.5	6.4	7.1
$P_{sp}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.097	-0.097	-0.099	-0.090	-0.090	-0.090	-

оси  $c$ , заменялись точечными зарядами с величинами  $+3e$  и  $-3e$ . Поляризация в такой модели рассчитывается по формуле

$$P_{\text{model}} = -\frac{ec}{4V}, \quad (1)$$

где  $e$  — элементарный заряд электрона,  $c$  — параметр ячейки вдоль направления  $[0001]$ ,  $V$  — объем элементарной ячейки.

Поляризация структуры определяется ионными и электронными вкладами в суммарный дипольный момент. При первопринципном расчете структуры с идеальным параметром  $u = 3/8$ , электронный вклад в поляризацию будет относительно велик из-за нецентросимметричности структуры вюрцита. В модели же точечных зарядов не учитывается распределение электронной плотности, тем самым опускается электронный вклад в спонтанную поляризацию. Поэтому поляризацию такой структуры можно принять за нулевую.

Как было уже упомянуто выше, значение макроскопической поляризации определяет также пьезоэлектрическая поляризация, возникающая из-за несоответствия параметров решеток на гетерограницах. В данной работе пьезоэлектрическая поляризация определялась по формуле [2,16,17]

$$P_{pz} = e_{33}\epsilon_3 + e_{31}(\epsilon_1 + \epsilon_2), \quad (2)$$

где  $e_3$  и  $e_{31}$  — пьезоэлектрические константы,  $\epsilon_3 = (c - c_0)/c_0$  и  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = (a - a_0)/a_0$  — относительная деформация вдоль оси  $z$  и в базисной плоскости  $(x, y)$  соответственно. Поскольку при росте нитридов имеет место псевдоморфизм, т.е. сохранение величины периода решетки подложки в плоскости сопряжения при одинаковой симметрии, предполагается, что параметры деформированных решеток AlN и AlGaIn в базисной плоскости равны параметру сраlexированной структуры GaN ( $a(\text{AlN}) = a(\text{AlGaIn}) = a(\text{GaN})$ ) [16], образующей буферный слой.

В данной работе *ab initio* расчеты были реализованы в рамках теории функционала электронной плотности с использованием программного комплекса Vienna *ab initio* Simulation Package (VASP) [18,19]. Вычисления выполнены в приближении обобщенных градиентов (GGA) и в приближении локальной плотности (LDA)

для обменно-корреляционного потенциала. Для описания межатомного взаимодействия использовался метод проектированных присоединенных волн (метод Projector Augmented-Wave (PAW)) и метод ультрамягких псевдопотенциалов (метод US). Энергия обрезания по плоским волнам была выбрана равной 450 эВ. Релаксация атомной структуры проводилась до тех пор, пока силы, действующие на атом, не достигли значения меньше, чем 0.0001 эВ/Å.

При моделировании структур AlN, GaN и AlGaIn использовались периодические суперъячейки. Для расчета AlN и GaN были взяты ячейки с 2 атомами металла и 2 атомами азота (размером  $(1 \times 1 \times 1)$ ), а для описания структуры AlGaIn с заданной концентрацией была взята суперъячейка, содержащая 16 атомов галлия, 8 атомов алюминия и 24 атома азота (размером  $(2 \times 2 \times 3)$ ). Расчеты в зоне Бриллюэна осуществлялись с использованием  $k$ -сетки размерностью  $8 \times 8 \times 8$  для ячеек AlN, GaN и  $4 \times 4 \times 2$  для ячейки AlGaIn, построенной по методу Монкхроста–Пака [20]. Данные параметры расчетной схемы позволяют описать свойства структур (Al,Ga,AlGa)N с достаточно хорошей точностью.

### 3. Результаты и обсуждение

Чаще всего нитриды типа  $\text{Al}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$  и их твердые растворы встречаются в природе в структуре вюрцита, представляющей собой гексагональную плотную упаковку. На первом шаге нами были рассмотрены бинарные нитриды GaN и AlN со структурой вюрцита. Для данных систем был проведен расчет в рамках двух приближений и методов (LDA-US, LDA-PAW, GGA-US, GGA-PAW) спонтанной поляризации и основных параметров структуры. Результаты для AlN представлены в табл. 1, а для GaN в табл. 2. В данных таблиц приведено сравнение полученных величин с теоретическими значениями [21] и с экспериментальными данными [22,23].

Как видно из таблиц, полученные значения для параметров структуры и спонтанной поляризации находятся в хорошем соответствии с результатами других теоретических расчетов [21]. Кроме того, значения параметров, описывающих структуру, близки к экспериментальным

**Таблица 2.** Результаты расчета параметра решетки в базисной плоскости ( $a$ ), отношение параметра решетки вдоль направления [0001] к параметру в базисной плоскости ( $c/a$ ), отклонение параметра  $u$  в относительных единицах от идеального значения ( $\Delta u$ ), спонтанной поляризации для структуры GaN

Система GaN	Наш расчет		Теория (LDA-US) [21]	Наш расчет		Теория (GGA-US) [21]	Эксперимент [23]
	LDA-US	LDA-PAW		GGA-US	GGA-PAW		
$a$ , Å	3.144	3.150	3.131	3.207	3.209	3.197	3.189
$c/a$	1.6302	1.6303	1.6301	1.6297	1.6296	1.6297	1.6263
$\Delta u \cdot 10^{-3}$	1.5	1.4	1.6	1.8	1.6	1.9	2
$P_{sp}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.031	-0.030	-0.032	-0.033	-0.032	-0.034	-

результатам работ [22,23]. Следовательно, использованные параметры расчетной схемы позволяют описать свойства атомной структуры данных нитридов с достаточно хорошей точностью. Также стоит отметить, что в приближении GGA значения периода решетки имеют меньшее отклонение от экспериментального значения, чем в приближении LDA. Таким образом, можно сделать вывод о том, что приближение GGA лучше воспроизводит структуру нитридов, чем приближение LDA. Поэтому при описании структуры AlGa<sub>1-x</sub>N использовалось приближение GGA.

В технологическом производстве гетероструктур AlGa<sub>1-x</sub>N/GaN используется тройной твердый раствор Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N с концентрацией  $x = 0.15-0.35$  [24]. При моделировании структуры была выбрана концентрация  $x = 0.33$ , лежащая в данном диапазоне концентраций. Для системы Al<sub>0.33</sub>Ga<sub>0.67</sub>N, используя приближение GGA, были рассчитаны параметры структуры и спонтанная поляризация. Результаты приведены в табл. 3. Кроме того, используя закон Вегарда:

$$\begin{aligned} a(A_xB_{1-x}N) &= xa(AN) + (1-x)a(BN), \\ c(A_xB_{1-x}N) &= xc(AN) + (1-x)c(BN), \end{aligned} \quad (3)$$

были оценены значения параметра решетки в базисной плоскости и отношения параметра решетки вдоль направления [0001] к параметру в базисной плоскости ( $c/a$ ). Используя данные из работы [25] и квадратичное приближение зависимости внутреннего параметра  $u$

**Таблица 3.** Результаты расчета и теоретической оценки параметра решетки в базисной плоскости ( $a$ ), отношение параметра решетки вдоль направления [0001] к параметру в базисной плоскости ( $c/a$ ), отклонение параметра  $u$  в относительных единицах от идеального значения ( $\Delta u$ ), спонтанной поляризации для структуры AlGa<sub>1-x</sub>N

Система AlGa <sub>1-x</sub> N	Теория (GGA-PAW)	Теоретическая оценка
$a$ , Å	3.178	3.181
$c/a$	1.6247	1.6210
$\Delta u \cdot 10^{-3}$	2	3
$P_{sp}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.0435	-0.0478

и спонтанной поляризации от мольного содержания алюминия в системе, предложенное в работе [26], была проведена оценка внутреннего параметра  $u$  и спонтанной поляризации. Все данные по оценке также представлены в табл. 3.

Приведенные в табл. 3 значения показывают, что результат первопринципного расчета близок к ожидаемым оценочным величинам. Поэтому полученные данные могут быть использованы при дальнейших расчетах зарядовой плотности на гетерограницах AlGa<sub>1-x</sub>N/AlN и AlGa<sub>1-x</sub>N/GaN.

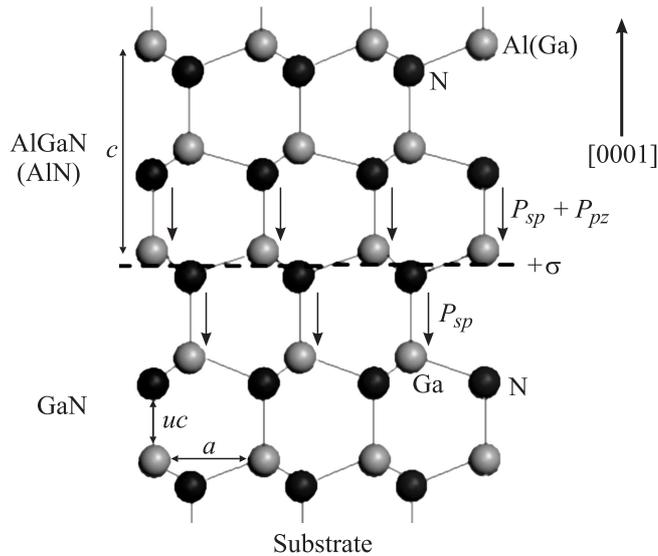
В отсутствие внешних полей общая макроскопическая поляризация твердого тела определяется суммой спонтанной поляризации равновесной структуры и пьезоэлектрической поляризации, вызванной деформацией на гетерогранице. Поэтому с целью определения суммарной макроскопической поляризации были рассмотрены структуры AlN и AlGa<sub>1-x</sub>N. Для данных нитридных соединений были проведены расчет пьезоэлектрических констант и расчет пьезоэлектрической поляризации по формуле (2). Результаты представлены в табл. 4 и 5. Как видно из табл. 4, значения пьезоэлектрических констант AlN очень близки к результатам других теоретических работ [27] и к экспериментальным величинам [28].

Кроме того, была проведена оценка пьезоэлектрической поляризации Al<sub>0.33</sub>Ga<sub>0.67</sub>N с использованием квадратичного приближения [25,26]. Оценочная величина составила  $P_{pz} = -0.011$  Кл/м<sup>2</sup>. Рассчитанное значение пьезоэлектрической поляризации для Al<sub>0.33</sub>Ga<sub>0.67</sub>N близко к оценочному. Сравнивая абсолютные значения спонтанной и пьезоэлектрической поляризации для данных систем, мы видим, что больший вклад в макроскопическую поляризацию вносит спонтанная поляризация. Поскольку пьезоэлектрическая поляризация совпадает по знаку со спонтанной поляризацией, вектора данных поляризаций сонаправлены (см. рисунок), поэтому наличие пьезоэлектрической поляризации приводит к увеличению макроскопической поляризации.

Полученные значения спонтанной и пьезоэлектрической поляризации позволили рассчитать плотность заряда, определяемую макроскопической поляризацией, на поверхностях AlN(0001), GaN(0001) и AlGa<sub>1-x</sub>N(0001)

**Таблица 4.** Результаты расчета пьезоэлектрических констант и пьезоэлектрической поляризации для структуры AlN

Система AlN	Теория (GGA-PAW)	Теория (GGA-US) [27]	Теория (LDA-US) [27]	Эксперимент [28]
$e_{33}$ , Кл/м <sup>2</sup>	1.50	1.50	1.80	1.55
$e_{31}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.60	-0.53	-0.64	-0.58
$e_{15}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.31	-	-	-0.48
$P_{pz}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.0508	-	-	-



Кристаллическая структура, спонтанная и пьезоэлектрическая поляризации, плотность связанного заряда на интерфейсе гетероструктуры AlGaIn/GaN (AlN/GaN).

по формуле [25]

$$\sigma = P_{\text{macro}} = P_{sp} + P_{pz}, \quad (4)$$

где  $P_{\text{macro}}$  — макроскопическая поляризация,  $P_{sp}$  — спонтанная поляризация,  $P_{pz}$  — пьезоэлектрическая поляризация нитрида. Значения плотности заряда  $\sigma$  и удельной ее величины  $\sigma/e$  ( $e = 1.602 \cdot 10^{-19}$  Кл — заряд электрона) на поверхностях нитридных соединений  $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{AlGa})\text{N}$  с металлической полярностью приведены в табл. 6.

Как видно из табл. 6, значение плотности заряда на поверхности AlGaIn(0001) лежит в интервале между значениями плотностей заряда на AlN(0001) и на GaN(0001). Кроме этого, абсолютное значение плотности заряда на поверхности AlN(0001) принимает максимальное значение, а на поверхности GaN(0001) — минимальное. Поэтому мы можем предположить, что абсолютное значение плотности заряда на поверхности  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}(0001)$  возрастает с увеличением концентрации Al в структуре  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ .

Используя данные из табл. 6, были рассчитаны значения плотности связанного заряда на интерфейсах

AlN/GaN, AlGaIn/AlN, AlGaIn/GaN по формуле [29]

$$\begin{aligned} \sigma(\text{AN}/\text{BN}) &= P_{\text{macro}}(\text{BN}) - P_{\text{macro}}(\text{AN}) \\ &= \sigma(\text{BN}) - \sigma(\text{AN}). \end{aligned} \quad (5)$$

Удельные значения плотностей зарядов на различных интерфейсах составили:  $\sigma/e$  (AlN/GaN) =  $6.79 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>,  $\sigma/e$  (AlGaIn/AlN) =  $-5.44 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>,  $\sigma/e$  (AlGaIn/GaN) =  $1.35 \cdot 10^{13}$  см<sup>-2</sup>. Величины плотностей заряда на интерфейсах AlN/GaN и AlGaIn/GaN оказались положительными (рис. 1), что согласуется с результатами теоретической работы [25]. Эпитаксиальный рост AlN (так же как и AlGaIn с высоким молярным содержанием Al) на GaN сопровождается различными технологическими сложностями, связанными с тем, что гетероструктура AlN/GaN имеет большое рассогласование в параметре решетки, которое составляет порядка 2% [30]. Поэтому с практической точки зрения интерес представляет гетероструктура AlGaIn/GaN.

Для компенсации положительной зарядовой плотности в квантовой яме на гетерогранице AlGaIn/GaN собираются носители тока отрицательного знака — электроны. Их накопление приводит к формированию на данной гетерогранице электронного газа с концентрацией, близкой к концентрации связанных зарядов, определяемой плотностью заряда на интерфейсе. Следует

**Таблица 5.** Результаты расчета пьезоэлектрических констант и пьезоэлектрической поляризации для структуры AlGaIn

Система Al <sub>0.33</sub> Ga <sub>0.67</sub> N	Теория (GGA-PAW)
$e_{33}$ , Кл/м <sup>2</sup>	0.79
$e_{31}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.44
$e_{15}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.22
$P_{pz}$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.0098

**Таблица 6.** Результаты расчета плотности зарядов на поверхностях AlN(0001), GaN(0001) и AlGaIn(0001) и ее удельного значения

Величины	AlN(0001)	GaN(0001)	AlGaIn(0001)
$\sigma$ , Кл/м <sup>2</sup>	-0.141	-0.032	-0.053
$\sigma/e \cdot 10^{13}$ , см <sup>2</sup>	-8.77	-1.98	-3.33

отметить, что для формирования электронного газа нет необходимости в легировании данной структуры. Поэтому процесс производства гетероструктуры AlGaN/GaN упрощается, что обуславливает технологический интерес к данным системам.

Как уже было сказано выше, формирование положительных зарядов на границе раздела  $Al_xGa_{1-x}N/GaN$  приводит к скоплению электронов на данной гетерогранице и, следовательно, к образованию двумерного электронного газа. Концентрация носителей тока (электронов) двумерного электронного газа является немаловажной характеристикой данных полупроводниковых гетероструктур, определяющих актуальность их практического применения. Согласно модели, предложенной в работе [25], при псевдоморфном росте AlGaN на GaN с толщиной барьерного слоя AlGaN более 15 нм концентрация носителей имеет квадратичную зависимость от мольного содержания Al в AlGaN:

$$n_s = [-0.169 + 2.61x + 4.50x^2]10^{13} \text{ см}^{-2}, \quad x > 0.06, \quad (6)$$

где  $x$  — мольное содержание Al в AlGaN.

Для рассматриваемой гетероструктуры  $Al_{0.33}Ga_{0.67}N/GaN$  концентрация носителей заряда на интерфейсе, рассчитанная по формуле (6), составила  $1.18 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ .

Данная величина хорошо согласуется с экспериментальными значениями, полученными с помощью построения CV-кривых [25,31,32].

#### 4. Заключение

В данной работе было проведено теоретическое исследование из первых принципов пьезоэлектрических свойств нитридных соединений AlN, GaN,  $Al_{0.33}Ga_{0.67}N$  и различных интерфейсов на их основе. Приведены значения спонтанной и пьезоэлектрической поляризации, рассчитаны значения плотности связанных зарядов на гетерограницах AlN/GaN, AlGaN/AlN, AlGaN/GaN, проведена оценка концентрации электронов на границе раздела  $Al_{0.33}Ga_{0.67}N/GaN$ . Все полученные величины находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Кроме этого, рассмотрены физическая природа спонтанной и пьезоэлектрической поляризации и способы их расчета. Описанные модели могут быть применимы и к другим полупроводниковым структурам.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова [33].

Хотим выразить благодарность Дэвиду Вандербильту (Ратгерский университет, факультет физики и астрономии) и в особенности Андрею Малашевичу (Калифорнийский университет в Беркли, физический факультет) за неоценимую помощь в научном обсуждении проведенных исследований.

#### Список литературы

- [1] O. Ambacher. J. Phys. D, **31**, 2653 (1988).
- [2] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt. Phys. Rev. B, **56**, R10024 (1997).
- [3] F. Bernardini, V. Fiorentini. Phys. Rev. B, **57**, R9427 (1998).
- [4] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, V. Fiorentini. Phys. Rev. B, **64**, 045 208 (2001).
- [5] V. Fiorentini, F. Bernardini, F. Della Sala, A. Di Carlo, P. Lugli. Phys. Rev. B, **60**, 8849 (1999).
- [6] A. Bykhovski, B.L. Gelmont, M.S. Shur. J. Appl. Phys., **81**, 6332 (1997).
- [7] P.M. Asbeck, E.T. Yu, S.S. Lau, G.J. Sullivan, J. Van Hove, J.M. Redwing. Electron. Lett., **33**, 1230 (1997).
- [8] E.T. Yu, G.J. Sullivan, P.M. Asbeck, C.D. Wang, D. Qiao, S.S. Lau. Appl. Phys. Lett., **71**, 2794 (1997).
- [9] M.B. Nardelli, K. Rapcewicz, J. Bernholc. Appl. Phys. Lett., **71**, 3135 (1997).
- [10] T. Takeuchi, H. Takeuchi, S. Sota, H. Sakai, H. Amano, I. Akasaki. Jpn. J. Appl. Phys., **36**, L177 (1997) pt 2.
- [11] W. Zhong, R.D. King-Smith, D. Vanderbilt. Phys. Rev. Lett., **72**, 3618 (1994).
- [12] R.D. King-Smith, D. Vanderbilt. Phys. Rev. B, **47**, 1651 (1993).
- [13] R. Resta. Rev. Mod. Phys., **66**, 899 (1994).
- [14] R. Resta. Ferroelectrics, **136**, 51 (1992).
- [15] A. Malashevich. Abstract of the dissertation (New Brunswick, New Jersey, The Graduate School-New Brunswick Rutgers, The State University of New Jersey, 2009).
- [16] O. Ambacher. J. Phys. D. Appl. Phys., **31**, 2653 (1998).
- [17] O. Ambacher, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W.J. Schaff, L.F. Eastman. J. Appl. Phys., **85**, 3222 (1999).
- [18] G. Kresse, J. Furthmuller. Phys. Rev. B, **54**, 11 169 (1996).
- [19] G. Kresse, D. Joubert. Phys. Rev. B, **59**, 1758 (1999).
- [20] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B, **13**, 5188 (1976).
- [21] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt. Phys. Rev. B, **63**, 193 201 (2001).
- [22] M. Tanaka, S. Nakahata, K. Sogabe, H. Nakata. Jpn. J. Appl. Phys., **36**, L1062 (1997) pt 2.
- [23] M. Leszczynski, H. Teisseyre, T. Suski, I. Grzegory, M. Bockowski, J. Jun, S. Porowski, K. Pakula, J.M. Baranowski, C.T. Foxon, T.S. Chen. Appl. Phys. Lett., **69**, 73 (1996).
- [24] А. Алексеев, Д. Красовицкий, С. Петров, В. Чалый. Компоненты и технологии, № 2 (2008).
- [25] O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, L.F. Eastman. Condens. Matter, **14** 3399 (2002).
- [26] F. Bernardini, V. Fiorentini. Phys. Rev. B, **64**, 085 207 (2001).
- [27] A. Zoroddu, F. Bernardini, P. Ruggerone, V. Fiorentini. Phys. Rev. B, **64**, 045 208 (2001).
- [28] K. Tsubouchi, K. Sugai, N. Mikoshiba. IEEE Ultrason. Symp., **90**, 375 (1981).
- [29] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann. J. Appl. Phys., **87**, 334 (2000).
- [30] X. Wang, A. Yoshikawa. Progr. Cryst. Growth and Characterization of Mater. **48/49**, 42 (2004).
- [31] P.M. Asbeck, E.T. Yu, S.S. Lau, G.J. Sullivan, J. Van Hove, J.M. Redwing. Electron Lett., **33** 1230 (1997).
- [32] Z. Bougrioua, J.L. Farvacque, I. Moerman, F. Carosella. Phys. Status Solidi B, **228** (2), 625 (2001).

- [33] Вл.В. Воеводин, С.А. Жуматий, С.И. Соболев, А.С. Антонов, П.А. Брызгалов, Д.А. Никитенко, К.С. Стефанов, Вад.В. Воеводин. Открытые системы, № 7 (2012).

Редактор Т.А. Полянская

## Investigation of polarization of nitride compounds (Al,Ga,AlGa)N and charge density of their various interfaces

*I.A. Supryadkina*<sup>\*+</sup>, *K.K. Abgaryan*<sup>+</sup>, *D.I. Bazhanov*<sup>\*+</sup>, *I.V. Mutigullin*<sup>+</sup>

\* Lomonosov Moscow State University  
(Faculty of Physics),  
119991 Moscow, Russia

+ Dorodnicyn Computer Center,  
Russian Academy of Sciences,  
119333 Moscow, Russia

**Abstract** In this work we report the results of theoretical study based on first-principles calculation polarization properties of semiconductors AlN, GaN and AlGaN with wurtzite structure. For these nitride compounds are calculated values of spontaneous and piezoelectric polarization and piezoelectric constants. In order to further consideration of promising heterostructures based on compounds (Al,Ga,AlGa)N values of charge densities at the interfaces AlN/GaN, AlGaN/AlN, AlGaN/GaN and sheet carrier concentration were estimated and compared with experimental data.