

А.В. ЗІНОВЧУК,¹ Д.А. СТЕПАНЧИКОВ,¹ Р.Ю. ВАСИЛЬЄВА,¹
В.С. СЛІПОКУРОВ²

¹ Житомирський державний університет імені Івана Франка

(Вул. Велика Бердичівська, 40, Житомир 10008; e-mail: zinovchuk.a@zu.edu.ua)

² Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

(Проспект Науки, 45, Київ 03028)

ФЛУКТУАЦІЇ П'ЄЗОЕЛЕКТРИЧНОЇ ПОЛЯРИЗАЦІЇ В КВАНТОВИХ ЯМАХ НА ОСНОВІ ІІІ-НІТРИДІВ

УДК 546.711.49

В роботі змодельовано вплив атомної неупорядкованості на локальну п'єзоелектричну поляризацію в поляризованих квантових ямах на основі ІІІ-нітридів. Розрахунок проводився для структур GaN/InGaN/GaN з випадковим розподілом атомів In в області квантової ями. Ключовою складовою нашого дослідження є оптимізована для нітридів модель валентних силових полів, на основі якої ми отримували розподіл релаксованих атомних положень та локальний тензор напруг. Розрахунок показав сильну просторову неоднорідність п'єзоелектричної поляризації, при якій локальне значення поляризації може навіть змінювати свій знак, а розподіл поляризаційного потенціалу значно відрізняється від традиційної картини конденсаторного поля в умовах постійних векторів поляризації в ямі та бар'єрах.

Ключові слова: InGaN квантові ями, атомна неупорядкованість, п'єзоелектрична поляризація.

1. Вступ

Бінарні ІІІ-нітридні сполуки з кристалічною ґраткою типу вюріциту мають дуже сильні п'єзоелектричні властивості. Тому, під час вирощування квантових структур на основі гетеропереходів InGaN/GaN, навіть незначне розходження між постійними кристалічної ґратки призводить до виникнення сильних електричних полів. В роботі [1] показано, що причиною цих полів є як п'єзоелектричні ефекти, так і спонтанна поляризація, що є характерною особливістю матеріалів з кристалічною ґраткою типу вюріциту. На сьогодні відомо багато фізичних ефектів в квантових структурах на основі нітридів, які пов'язують з поляризацією. Так, в роботі [2] асиметричність валентних зон в гетеропереходах InN/GaN, псевдо-

морфно вирощених в напрямку (0001) (або як його ще називають *c*-напрямок), пов'язують із п'єзоелектричними полями. Було також виявлено, що поляризація в нітридах призводить до зміщення низькотемпературних спектрів фотолюмінесценції та збільшення часу життя носіїв заряду в квантових ямах [3, 4]. Ряд експериментальних робіт доводять, що поляризація в InGaN/GaN ямах може бути одним із фізичних механізмів, який є причиною нетермічного падіння ефективності світлодіодів видимого спектрального діапазону [5, 6]. Всі ці експериментальні факти вказують на необхідність врахування поляризаційних ефектів під час теоретичного моделювання властивостей нітридних наноструктур та приладів на їх основі. Теоретичні роботи в цьому напрямку можна розділити на дві групи. До першої групи відносяться розрахунки матеріальних констант спонтанної та п'єзоелектричної поляризації переважно із перших принципів [7–9]. До другої групи відносяться дослідження впливу поляризаційних ефектів на важливі для наноструктур характеристики, такі як структура енергетичних зон, перекриття хвильових функцій носіїв заряду, оптичні спектри та транспорт носіїв заряду [10–15]. В по-

Цитування: Зіновчук А.В., Степанчиков Д.А., Васильєва Р.Ю., Сліпокуров В.С. Флуктуації п'єзоелектричної поляризації в квантових ямах на основі ІІІ-нітридів. *Укр. фіз. журн.* **68**, № 1, 47 (2023).

Citation: Zinovchuk A.V., Stepanchikov D.A., Vasylijeva R.Yu., Slipokurov V.S. Fluctuations of piezoelectric polarization in III-nitride quantum wells. *Ukr. J. Phys.* **68**, No. 1, 47 (2023). <https://doi.org/10.15407/ujpe68.1.47>.

лярних InGaN/GaN квантових ямах п'єзоелектричний відгук на виникнення деформації розтягу в c -напрямку враховується за допомогою відомих співвідношень [16]:

$$P_z = 2\epsilon_{xx} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right), \quad P_x = 0, \quad P_y = 0, \quad (1)$$

де P_z – компонента вектора п'єзоелектричної поляризації в c -напрямку; e_{31} , e_{33} – компоненти п'єзоелектричного тензора; C_{13} , C_{33} – компоненти тензора пружності; ϵ_{xx} – деформація в площині ями, яку, як правило, розраховують із різниці між постійними кристалічної ґратки для GaN та InGaN $\epsilon_{xx} = (a_{\text{GaN}} - a_{\text{InGaN}}) / a_{\text{InGaN}}$. В переважній більшості теоретичних досліджень напрямком і величина вектора п'єзоелектричної поляризації вважаються незалежними від координат, навіть якщо і приймаються до уваги флуктуації локальної деформації внаслідок випадкового розташування атомів в потрійній InGaN сполуці. Можлива роль атомної неупорядкованості на локальну п'єзоелектричну поляризацію почала вивчатися відносно нещодавно. Так, в роботах [17, 18] вперше показані значні флуктуації п'єзоелектричної поляризації в III-нітридних наноструктурах. В даній роботі ми продовжили дослідження атомної неупорядкованості на локальну поляризацію в полярних InGaN/GaN ямах. Ми розглянули квантові ями з різним стехіометричним складом. Для моделювання флуктуаційних ефектів нами була використана структура з ≈ 150000 атомами. Локальні деформації та поляризації розраховувалися на основі методу валентних силових полів, який був нами оптимізований під нітриди з кристалічною ґраткою типу вюрцититу. Ми показали, що локальні деформації, що виникають внаслідок атомної неупорядкованості, призводять до значних неоднорідностей у полях п'єзоелектричної поляризації та поляризаційного потенціалу. Такі неоднорідності можуть бути відповідальними за експериментальні ефекти в InGaN наноструктурах, що не знаходять свого пояснення в межах традиційних одновимірних моделей з постійною поляризацією.

2. Теоретична модель

Ключовою складовою нашого дослідження є оптимізована для нітридів модель валентних силових полів (ВСП), на основі якої отримується розпо-

діл релаксованих атомних положень та локальний тензор напруг. У класичному вигляді модель ВСП досить адекватно описує пружні властивості в кристалах кубічної симетрії. Декілька модифікацій цієї моделі було розроблено і для кристалів з ґраткою типу вюрцититу. Варіація довжини міжатомних зв'язків [19], рівноважна геометрія та пружні властивості бінарних III-нітридів та потрійних сполук [20, 21] розраховувалися по моделі ВСП з двома силовими константами. Однак, всі ці модифікації абсолютно не здатні адекватно відтворювати динамічні властивості кристалічної ґратки в нітридах, такі, наприклад, як фононні спектри. Саме тому, більш складніші, багатопараметричні підходи необхідні для того, щоб відтворити як статичні, так і динамічні ґраткові властивості нітридів. В цьому дослідженні ми використовуємо нашу оптимізовану модель ВСП для нітридів, що описана в роботі [22]. Потенціальна енергія ґратки включала в себе не тільки енергію взаємодії найближчих атомів, а також і енергію взаємодії з іншими найближчими атомами та компланарну взаємодію. Крім того, приймалася до уваги і анізотропія вюрцититної структури шляхом впровадження двох груп силових констант: перша описує міжатомну взаємодію в c -напрямку, друга – в перпендикулярному до c -напрямку. Кінцевий вираз для потенціальної енергії, що припадає на один атом має вигляд

$$U_i = \frac{3}{16} \sum_j^{fn(i)} \alpha_{ij} (\Delta r_{ij})^2 + \frac{3}{16} \sum_m^{sn(i)} \mu_{im} (\Delta r_{im})^2 + \frac{3}{8} \sum_j^{fn(i)} \sum_{k>j}^{fn(i)} \left(\beta_{jik} (\Delta \theta_{jik})^2 + \gamma_{jik} \Delta r_{ij} \Delta \theta_{jik} + \delta_{jik} \Delta r_{ij} r_{ik} + \sum_l^{\text{cop}(jikl)} \nu_{ijkl} \Delta \theta_{jik} \Delta \theta_{ikl} \right), \quad (2)$$

де Δr та $\Delta \theta$ – зміна довжини міжатомного зв'язку та величини кута між зв'язками внаслідок релаксації; α , μ , β , γ , δ , ν – силові константи, що визначають енергію стиску-розтягу міжатомних зв'язків з першими найближчими та другими найближчими атомами, енергію згинання міжатомних зв'язків та енергію компланарної взаємодії. Символи $fn(i)$, $sn(i)$ та $\text{cop}(jikl)$ позначають всі перші найближчі, другі найближчі сусідні атоми

до заданого атома та всі атоми, що задовольняють умови компланарності. Анізотропія міжатомної взаємодії призводить до набору із двадцяти незалежних силових констант. Силкові константи визначалися за допомогою нелінійної багатовимірної процедури оптимізації цільової функції, що являє собою середньоквадратичне відхилення між результатами розрахунку даної моделі та відомими експериментальними даними. За результатами такої оптимізації нам вдалося отримати набір параметрів, які досить точно відтворюють як статичні (постійні кристалічної ґратки, довжини міжатомних зв'язків, пружні константи, внутрішні деформаційні параметри), так і динамічні (фононні спектри) властивості кристалічної ґратки нітридів в рамках однієї моделі [22]. Ми застосували описану вище модель для структури, що складається з двох GaN бар'єрів та $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ями (рис. 1).

Атоми індію випадковим чином розміщувалися по катіонних позиціях. Повне число атомів в структурі було досить великим (порядку 150 000) для того, щоб не пропустити флуктуаційні ефекти. Початкові положення атомів в структурі визначалися паралельним перенесенням елементарної комірки, геометрія якої визначалася параметрами для GaN: постійні кристалічної ґратки $a = 3,189 \text{ \AA}$, $c = 5,185 \text{ \AA}$; та внутрішній параметр $u = 0,3768$ [23]. Далі проводилася процедура мінімізації (релаксації) потенціальної енергії ґратки по відношенню до атомних положень та розмірів структури, за результатами якої отримувалися рівноважні положення атомів. Із рівноважних положень атомів розраховувався тензор локальної деформації (ϵ_{ij}) для кожного атома [24]

$$\begin{pmatrix} 1 + \epsilon_{xx} & \epsilon_{yx} & \epsilon_{zx} \\ \epsilon_{xy} & 1 + \epsilon_{yy} & \epsilon_{zy} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & 1 + \epsilon_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{12,x} & R_{23,x} & R_{34,x} \\ R_{12,y} & R_{23,y} & R_{34,y} \\ R_{12,z} & R_{23,z} & R_{34,z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_{12,x}^0 & R_{23,x}^0 & R_{34,x}^0 \\ R_{12,y}^0 & R_{23,y}^0 & R_{34,y}^0 \\ R_{12,z}^0 & R_{23,z}^0 & R_{34,z}^0 \end{pmatrix}^{-1}, \quad (3)$$

де \mathbf{R}_{12}^0 , \mathbf{R}_{23}^0 , \mathbf{R}_{34}^0 та \mathbf{R}_{12} , \mathbf{R}_{23} , \mathbf{R}_{34} – вектори, що визначають геометрію тетраедра (рис. 1), у вершинах якого розміщені найближчі сусідні атоми до, та після процедури релаксації. Далі, векторне поле п'єзоелектричної поляризації ми отримували із

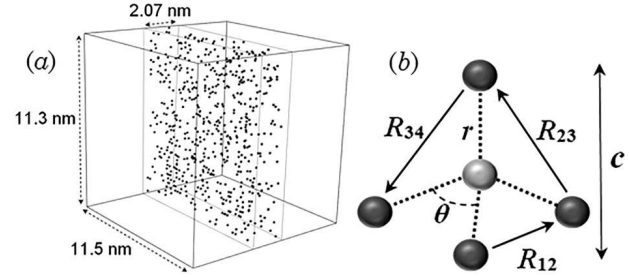


Рис. 1. Схематичний вигляд квантової ями товщиною 2,07 нм, для якої проводився розрахунок (точками позначений один із випадкових розподілів атомів індію всередині ями) (а). Розташування найближчих сусідніх атомів в гексагональній кристалічній структурі та вектори, що визначають геометрію такого розташування (б)

лінійного співвідношення між компонентами поляризації та деформації:

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{34} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

де компоненти тензора деформації записані в матричних позначеннях ($\epsilon_1 = \epsilon_{xx}$, $\epsilon_2 = \epsilon_{yy}$, $\epsilon_3 = \epsilon_{zz}$, $\epsilon_4 = 2\epsilon_{yz}$, $\epsilon_5 = 2\epsilon_{xz}$, $\epsilon_6 = 2\epsilon_{xy}$). П'єзоелектричні константи для $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ знаходилися за лінійною інтерполяцією між значеннями для GaN ($e_{33} = 0,75$, $e_{31} = -0,44$, $e_{15} = -0,31$ Кл/м² [9]) та InN ($e_{33} = 1,14$, $e_{31} = -0,59$, $e_{15} = -0,43$ Кл/м² [9]). Оскільки поляризація впливає на фізичні властивості систем через електричне поле, на останньому етапі нашого моделювання ми знаходили розподіл поляризаційного потенціалу. Для цього було використано метод точкових диполів. Кожний катіонний атом, зміщуючись внаслідок деформації відносно чотирьох своїх найближчих сусідніх аніонних атомів, порушує зарядову симетрію та створює електричне поле, подібне до дипольного. Тобто з кожним катіонним атомом, а точніше з кожним атомним тетраедром, що охоплює даний катіон, ми зв'язували дипольний момент, який визначався як $\mathbf{d}_i = \mathbf{P}_i V_i$, де V_i – об'єм атомного тетраедра і \mathbf{P}_i – вектор локальної поляризації в місці знаходження катіонного атома. Результируюче поле потенціалу знаходилося як сума всіх дипольних полів катіонів:

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \frac{\mathbf{d}_i \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|^3}, \quad (5)$$

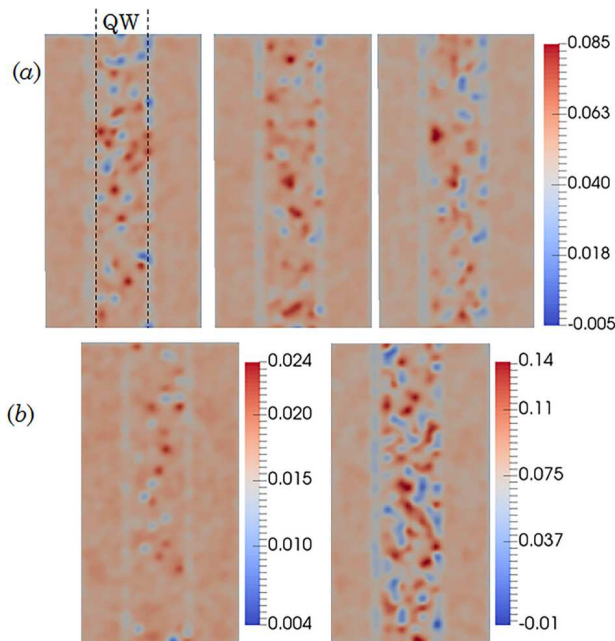


Рис. 2. Просторові розподіли проекції P_z п'єзоелектричної поляризації в квантових ямах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ вздовж площин, паралельних c -напрямку (штрихованими лініями на першому рисунку показані границі квантової ями): $x = 0,3$ (показані розподіли в трьох різних площинах) (а); $x = 0,1$ (b); $x = 0,5$. Величина P_z на шкалі справа подана в Кл/м² (с)

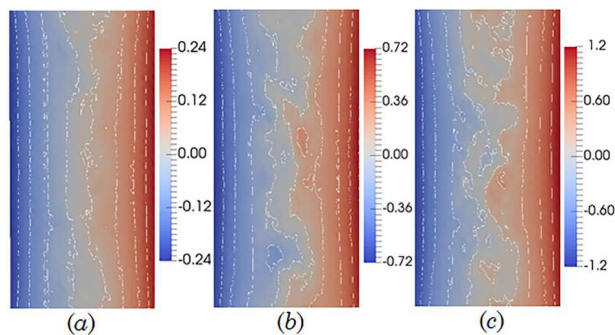


Рис. 3. Просторові розподіли поляризаційного потенціалу вздовж площини, паралельної c -напрямку в квантових ямах $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ при $x = 0,1$ (а), $x = 0,3$ (b), $x = 0,5$ (с). Білими лініями показана форма еквіпотенціальних поверхонь. Величини потенціалу на шкалі справа подані у Вольтах

де ϵ – діелектрична стала матеріалу ($\epsilon \approx 9,5$ для GaN [25]).

3. Обговорення результатів

Розрахунок проводився для $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ структури розмірами $11,5 \times 11,3 \times 6,2$ нм з кванто-

вою ямою товщиною 2,07 нм (4 постійних кристалічної ґратки в c -напрямку). В рамках нашого дослідження найбільш складним і затратним по часу етапом є процедура мінімізації потенціальної енергії структури. Чисельне знаходження глобального мінімуму потенціальної енергії як функції положень атомів та розміру структури ускладнюється наявністю багатьох побічних локальних мінімумів. Крім того, у зв'язку з дуже великою кількістю ступенів вільності, класичний алгоритм спряжених градієнтів для мінімізації призводить до занадто великих часових затрат вже тоді, коли кількість атомів перевищує ≈ 50000 . Тому, для великих структур ми використовували підхід, що базується на політопному алгоритмі [26]. Цей алгоритм вимагає лише обчислення самої потенціальної енергії, але не її градієнта, що пришвидшує процедуру пошуку саме глобального мінімуму сильно нелінійних функціоналів. Після мінімізації ми обраховували картину полів деформації та п'єзоелектричної поляризації. Відзначимо, що для узгодження з експериментальними умовами псевдоморфного вирощування InGaN квантових ям в c -напрямку, під час розрахунку деформаційних полів враховувалася також і деформація, що виникає внаслідок розходження в постійних кристалічної ґратки між підкладкою та самою квантовою структурою. Цю деформацію можна назвати зовнішньою в тому змісті, що вона не має відношення до локальних ефектів атомної неупорядкованості всередині ями. Технічно, зовнішня деформація вводилася в нашу модель шляхом додавання постійної, незалежної від положення атомів, складової (матриці) в рівняння (3). Тобто, поля п'єзоелектричної поляризації є результатом як зовнішньої деформації, так і локальної деформації внаслідок атомної неупорядкованості. В рамках цієї роботи ми не враховували спонтанну поляризацію. Величина спонтанної поляризації в квантових ямах визначається різницею між константами спонтанної поляризації матеріалів самої ями та бар'єрів. Оскільки в бінарних GaN та InN константи поляризації є дуже близькими, це дає можливість допустити, що спонтанна поляризація в InGaN/GaN квантових ямах буде значно меншою за п'єзоелектричну [27].

На рис. 2, а показані картини поляризації, а точніше проекції вектора поляризації вздовж c -напрямку, в $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ квантових ямах з $x = 0,3$ в декількох різних площинах, паралель-

них до c -напрямку. Як видно із рисунка, звична картина однорідного поля п'єзоелектричної поляризації, яка передбачається формулою (1), в даному випадку не має місця. Натомість чітко помітні значні флуктуації поляризації, причому розмір областей просторової локалізації, як правило, не перевищує однієї кристалічної сталої ($<5 \text{ \AA}$). Така неоднорідність поля поляризації може бути пов'язана з локальними деформаціями, зумовленими випадковим розташуванням атомів індію в області квантової ями. Визначальна роль атомної неупорядкованості, зокрема, підтверджується порівнянням розподілів поляризації в квантових ямах з різною концентрацією атомів індію (рис. 2, b, c). Чим більша концентрація атомів індію, тим більші флуктуації, аж до зміни знака (напрямку) поляризації, виникають. Неоднорідність поляризації безпосередньо вздовж границі між бар'єрами та ямою може бути результатом поперечних деформацій, що виникають внаслідок розходження між постійними кристалічної ґратки в бар'єрах та ямі.

В математичних моделях вплив поляризації в квантових структурах на електронні стани носіїв заряду можна врахувати шляхом додавання потенціалу поляризації до періодичного потенціалу кристалічної ґратки та потенціалу квантового обмеження в рівнянні Шредінґера. Очевидно, що виявлені флуктуації поляризації будуть відображатися і на полі поляризаційного потенціалу. Наш розрахунок на основі моделі точкових диполів показав результати, що наведені на рис. 3. Зауважимо, що на рис. 3 показаний розподіл потенціалу, що виникає внаслідок лише п'єзоелектричної поляризації без врахування потенціалу від області об'ємного заряду. Загальні висновки, які можна зробити із цих результатів такі. Навіть при малих концентраціях атомів індію в квантовій ямі еквіпотенціальні поверхні не є площинами, паралельними до c -напрямку, як це приймається в переважній більшості математичних моделей для InGaN/GaN наноструктур. Із рис. 3 також видно, що чим більше концентрація атомів індію, тим більше розподіл поляризаційного потенціалу відрізняється від традиційної картини конденсаторного поля в умовах постійних векторів поляризації в ямі та бар'єрах.

4. Висновки

Отримані результати показують, що атомна неупорядкованість у квантових ямах на основі по-

лярних структур InGaN/GaN приводить до виникнення локальних деформацій. Такі деформації викликають значні флуктуації поля п'єзоелектричної поляризації. Розрахунок показує, що у квантових ямах з великою концентрацією атомів індію локальна поляризація може навіть змінювати свій напрямок. Флуктуації поляризації відповідним чином відображаються і на розподілі поляризаційного потенціалу. Одновимірне наближення, яке часто використовують при моделюванні фізичних властивостей InGaN/GaN квантових структур в умовах поляризації, не враховує жодного із флуктуаційних ефектів. Саме тому, великий інтерес становить побудова більш складних тривимірних моделей для того, щоб проаналізувати вплив флуктуацій поляризації на рекомбінаційні та транспортні властивості носіїв заряду в квантових ямах та наноструктурах взагалі. В даній роботі ми не враховували можливі флуктуації спонтанної поляризації. Однак включення в запропоновану модель локальної спонтанної поляризації становить значний інтерес об'ємних сполук або в одновимірних квантових структурах на основі III-нітридів і може бути предметом дослідження подальших робіт.

1. F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt. Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. *Phys. Rev. B* **56**, R10024(R) (1997).
2. G. Martin, A. Botchkarev, A. Rockett, H. Morkoc. Valence-band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by x-ray photoemission spectroscopy. *Appl. Phys. Lett.* **74**, 2541 (1996).
3. R. Langer, J. Simon, V. Ortiz, N.T. Pelekanos, A. Barski, R. Andre, M. Godlewski. Giant electric fields in unstrained GaN single quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3827 (1999).
4. M. Leroux, N. Grandjean, J. Massies, B. Gil, P. Lefebvre, P. Bigenwald. Barrier-width dependence of group-III nitrides quantum-well transition energies. *Phys. Rev. B* **60**, 1496 (1999).
5. M.H. Kim, M.F. Schubert, Q. Dai, J.K. Kim, E.F. Schubert, J. Piprek, Y. Park. Origin of efficiency droop in GaN-based light-emitting diodes. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 183507 (2007).
6. K.S. Kim, J.H. Kim, Y.M. Park, S.J. Jung, Y.J. Park, S.N. Cho. Investigation of dominant effect on efficiency droop in InGaN light emitting device. *Appl. Phys. Lett.* **97**, 031113 (2010).
7. V. Fiorentini, F. Bernardini, F.D. Sala, A. Di Carlo, P. Lugli. Effects of macroscopic polarization in III-V nitride multiple quantum wells. *Phys. Rev. B* **60**, 8849 (1999).

8. F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt. First-principles calculation of the piezoelectric tensor of III-V nitrides. *Appl. Phys. Lett.* **80**, 4145 (2002).
9. P.Y. Prodhomme, A. Beya-Wakata, G. Bester. Nonlinear piezoelectricity in wurtzite semiconductors. *Phys. Rev. B* **88**, 121304(R) (2013).
10. M. Feneberg, K. Thonke, T. Wunderer, F. Lipski, F. Scholz. Piezoelectric polarization of semipolar and polar GaInN quantum wells grown on strained GaN templates. *J. Appl. Phys.* **107**, 103517 (2010).
11. S.H. Park. Piezoelectric and spontaneous polarization effects on many-body optical gain of wurtzite InGaN/GaN quantum well with arbitrary crystal orientation. *Jpn. J. Appl. Phys.* **42**, 5052 (2003).
12. M. Lopez, F. Sacconi, M. Auf der Maur, A. Pecchia, A. Di Carlo. Atomistic simulation of InGaN/GaN quantum disk LEDs. *Opt. Quant. Electron.* **44**, 89 (2012).
13. M. Auf der Maur. Multiscale approaches for the simulation of InGaN/GaN LEDs. *J. Comput. Electron.* **14**, 989 (2015).
14. M. Auf der Maur, F. Sacconi, A. Pecchia, A. Di Carlo. The multiscale paradigm in electronic device simulation. *IEEE Trans. Electron. Dev.* **58**, 1425 (2011).
15. R. Cingolani, A. Botchkarev, H. Tang, H. Morkoc, G. Traetta, G. Coli, M. Lomascolo, A. Di Carlo, F. Della Sala, P. Lugli. Spontaneous polarization and piezoelectric field in GaN/Al_{0.15}Ga_{0.85}N quantum wells: Impact on the optical spectra. *Phys. Rev. B* **61**, 2711 (2000).
16. Q.Y. Wei, T. Li, Z.H. Wu, F.A. Ponce. In-plane polarization of GaN-based heterostructures with arbitrary crystal orientation. *Phys. Stat. Sol. B* **207**, 2226 (2010).
17. M.A. Caro, S. Schulz, E.P. O'Reilly. Effect of alloy fluctuations on the local polarization in nitride nanostructures. *Phys. Stat. Sol. B* **249**, 526 (2012).
18. M.A. Caro, S. Schulz, E.P. O'Reilly. Theory of local electric polarization and its relation to internal strain: Impact on polarization potential and electronic properties of group-III nitrides. *Phys. Rev. B* **88**, 214103 (2013).
19. F. Grosse, J. Neugebauer. Limits and accuracy of valence force field models for In_xGa_{1-x}N alloys. *Phys. Rev. B* **63**, 085207 (2001).
20. M. Lopuszynski, J.A. Majewski. Composition dependence of elastic constants in wurtzite AlGaInN alloys. *J. Appl. Phys.* **111**, 033502 (2012).
21. D. Camacho, Y.M. Niquet. Application of Keating's valence force field model to non-ideal wurtzite materials. *Physica E* **42**, 1361 (2010).
22. A.V. Zinovchuk, E.A. Sevost'yanov. Optimized valence force field model for the lattice properties of non-ideal III-nitride wurtzite materials. *Physica E* **574**, 411682 (2019).
23. I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
24. C. Pryor, J. Kim, L.W. Wang, A.J. Williamson, A. Zunger. Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots. *J. Appl. Phys.* **83**, 2548 (1998).
25. J.M. Wagner, F. Bechstedt. Properties of strained wurtzite GaN and AlN: *Abinitio* studies. *Phys. Rev. B* **66**, 115202 (2002).
26. Ph.E. Gill, W. Murray, M.H. Wright. *Practical optimization* (Academic press, 1981).
27. F. Bernardini, V. Fiorentini. Spontaneous versus piezoelectric polarization in III-V nitrides: Conceptual aspects and practical consequences. *Phys. Stat. Sol. B* **216**, 391 (1999).

Received 15.11.22

A. V. Zinovchuk, D. A. Stepanchikova,
R. Yu. Vasylyeva, V. S. Slipokurov

FLUCTUATIONS OF PIEZOELECTRIC POLARIZATION IN III-NITRIDE QUANTUM WELLS

In this work, the influence of the atomic disorder on a local piezoelectric polarization in polar II-nitride quantum wells is simulated. The calculation is performed for GaN/InGaN/GaN structures with a random distribution of In atoms in the quantum well region. The key component of the research is the valence force field model optimized for nitrides, which is used to obtain the distribution of relaxed atomic positions and the local strain tensor. The calculation showed a strong spatial non-uniformity of the piezoelectric polarization, which can even change the sign of the local polarization value and makes the distribution of a polarization potential substantially different from the standard capacitor-like picture that is observed in the case of constant polarization vectors in the quantum well and barriers.

Keywords: InGaN quantum wells, atomic disorder, piezoelectric polarization.