

Роль сплавных эффектов в формировании электронной структуры неупорядоченных твердых растворов III-нитридов

© А.В. Возный[¶], В.Г. Дейбук^{¶¶}

Черновицкий национальный университет,
58012 Черновцы, Украина

(Получена 26 августа 2003 г. Принята к печати 28 августа 2003 г.)

Влияние композиционной и позиционной неупорядоченностей в расположении атомов в кристаллической решетке на электронные свойства твердых растворов III-нитридов структуры вюрцита исследовано методом модельного эмпирического псевдопотенциала с использованием 32-атомных суперячеек. Рассчитанные значения коэффициента прогиба композиционных зависимостей ширины запрещенной зоны равны 0.44, 2.72, 4.16 для AlGa_n, InGa_n и InAl_n соответственно. Показано, что наибольший вклад в коэффициент прогиба дает композиционная неупорядоченность, а релаксация длин связей уменьшает влияние композиционной неупорядоченности и эффектов деформации объема.

1. Введение

Разработка светодиодов, лазерных диодов и высокочастотных транзисторов на основе III-нитридов GaN, AlN и InN [1] привела к интенсивному теоретическому изучению их свойств. Изменение состава тройных твердых растворов позволяет плавно изменять физические свойства. Технологически важным примером является зонная инженерия, когда ширина запрещенной зоны регулируется составом твердого раствора.

Как теоретические [2–4], так и экспериментальные [5–11] значения коэффициента прогиба композиционных зависимостей ширины запрещенной зоны (band gap bowing parameter) твердых растворов III-нитридов имеют сильный разброс. Свойства бинарных соединений GaN, AlN, InN были детально исследованы как методом эмпирического псевдопотенциала [12–14], так и методами „из первых принципов“ [12,15]. Однако теоретические исследования свойств этих твердых растворов обычно основываются на приближениях виртуального кристалла (virtual crystal approximation) или когерентного потенциала (CPA), которые по существу сводятся к замене некоторой микроскопической конфигурации усредненной эффективной средой, поэтому они не способны объяснить наблюдаемые экспериментально композиционные зависимости ширины запрещенной зоны [2]. Для корректного теоретического описания электронных свойств твердых растворов перспективными являются метод рекурсий [16] и расчеты по теории функционала плотности, поскольку в них можно исследовать любые заданные атомные конфигурации [3,4,17,18].

В данной работе влияние сплавных эффектов на электронные свойства неупорядоченных тройных твердых растворов AlGa_n, InGa_n и InAl_n исследуется с использованием 32-атомных суперячеек, на основе атомных конфигураций, полученных в теории функционала плотности [19]. Расчеты проводились методом эмпирического псевдопотенциала, который хорошо себя

зарекомендовал для описания свойств квантовых точек, сверхрешеток и твердых растворов с пространственной модуляцией состава [20–22].

2. Методика расчетов

Методика расчетов детально описана в работах [5,23]. Использовалась функциональная форма псевдопотенциала, непрерывная в обратном пространстве и зависящая от локальной деформации ϵ , которая описывает перераспределение заряда и экранирование псевдопотенциала из-за изменений локального атомного окружения [21,22]:

$$v(\mathbf{k}, \epsilon) = a_0 \frac{(\mathbf{k}^2 - a_1)}{a_2 \exp(a_3 \mathbf{k}^2) - 1} [1 + a_4 \text{Tr}(\epsilon)]. \quad (1)$$

Начальные параметры a_i находились из процедуры аппроксимации нормосохраняющих псевдопотенциалов „из первых принципов“ Хаммана [24], экранированных диэлектрической функцией Левина–Луи [25]. Затем параметры модифицировались так, чтобы воспроизвести экспериментальные значения энергий межзонных переходов в высокосимметричных точках зоны Бриллюэна и оптические свойства чистых бинарных соединений [23,26] (табл. 1). Для правильного учета влияния локальных деформаций в процедуру подбора включались значения деформационных потенциалов:

$$a_g = V \frac{\partial E_g}{\partial V}. \quad (2)$$

Параметры a_4 были подобраны так, чтобы получить рекомендованные значения деформационных потенциалов [27]: $a_g(\text{GaN}) = -8.2$ эВ, $a_g(\text{AlN}) = -9$ эВ, $a_g(\text{InN}) = -4$ эВ. Окончательные значения параметров a_i приведены в табл. 2. Полученные таким образом псевдопотенциалы хорошо согласуются с псевдопотенциалами, рассчитанными в других работах [13,14].

Для моделирования твердых растворов нитридов AlGa_n, InGa_n, InAl_n и учета композиционной неупорядоченности в них мы использовали 32-атомные суперячейки A_nB_{16-n}N (A = Al или In, B = Ga или Al), которые

[¶] E-mail: voznyy@elegance.cv.ua

^{¶¶} E-mail: vdei@chnu.cv.ua

Таблица 1. Энергии межзонных переходов ($T = 0$ К)

	Переход	Энергия, эВ	
		Данная работа	Другие расчеты и эксперименты
GaN	$\Gamma_{6V}-\Gamma_{1C}$ (E_g)	3.5	3.507 ^a , 3.5 ^b , 3.5 ^c
	$\Gamma_{3V}-\Gamma_{6V}$ (ширина верхней валентной зоны)	7.3	6.8 ^b , 7.4(8) ^d
	$\Gamma_{1V}-\Gamma_{6V}$ (Δ_{cr})	0.02	0.019 ^a , 0.02 ^b , 0.038 ^c
	$L_{2,4V}-L_{1,3C}$	7.76	7.57 ^b , 6.4(8.2) ^d
	$M_{4V}-M_{3C}$	8.11	7.7 ^b , 7.6(8.4) ^d
	$H_{3V}-H_{3C}$	8.47	9 ^b , 8.1(9.9) ^d
AlN	$\Gamma_{1V}-\Gamma_{1C}$ (E_g)	6.2	6.23 ^a , 6.24 ^c
	$\Gamma_{3V}-\Gamma_{1V}$ (ширина верхней валентной зоны)	7	6.1(6.9) ^d
	$\Gamma_{1V}-\Gamma_{6V}$ (Δ_{cr})	-0.22	-0.164 ^a , -0.17 ^c
	$L_{2,4V}-L_{1,3C}$	8.75	8.6 ^d
	$M_{4V}-M_{3C}$	9.4	8.5 ^d
	$H_{3V}-H_{3C}$	9.8	10.5 ^d
InN	$\Gamma_{6V}-\Gamma_{1C}$ (E_g)	0.7	0.7 ^c , 2.04 ^b
	$\Gamma_{3V}-\Gamma_{6V}$ (ширина верхней валентной зоны)	6	5.77 ^b
	$\Gamma_{1V}-\Gamma_{6V}$ (Δ_{cr})	0.04	0.041 ^a , 0.017 ^b , 0.06 ^c
	$L_{2,4V}-L_{1,3C}$	5.17	5.83 ^b
	$M_{4V}-M_{3C}$	5.21	5.8 ^b
	$H_{3V}-H_{3C}$	5.93	6.5 ^b

Примечание. ^a рекомендованные значения [27]; ^b эмпирический псевдопотенциал [13]; ^c расчеты „из первых принципов“ и эмпирического псевдопотенциала [12]; ^d расчеты „из первых принципов“ с учетом и без учета GW поправок [15]; ^e — экспериментальные данные для InN [7,31].

Таблица 2. Параметры экранированных атомных псевдопотенциалов в GaN, AlN, InN (в атомных единицах)

Атом	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
Ga	1500	1.88	104.7	0.27	0.3
N в GaN	1224	4.76	83.3	0.419	0
Al	9.42	1.79	1.49	0.245	0.7
N в AlN	18	5.08	2.7	0.236	0
In	11	1.173	1.358	0.264	2.5
N в InN	45.85	5.1	4.875	0.421	0

соответствуют удвоенной в трех направлениях примитивной элементарной ячейке структуры вюрцита [3,19]. Для заданного числа атомов А $n = 0, \dots, 16$ можно получить различные атомные конфигурации, в отличие от приближения виртуального кристалла, в котором неупорядоченный твердый раствор заменяется кристаллом с одинаковыми усредненными „виртуальными“ атомами в катионной подрешетке. Мы рассчитывали электронную структуру только для конфигураций, имеющих минимальную энергию, которая была рассчитана в теории функционала плотности (density functional theory) [19]. Пример такой структуры для $n = 4$ показан на рис. 1.

В тройных твердых растворах структуры вюрцита атом азота может иметь окружение A_4B_{4-m} , где $m = 0, 1, 2, 3, 4$. Для учета изменения экранирования псевдопотенциала в зависимости от локального атомного окружения в твердом растворе псевдопотенциал азота V_N конструировался как линейная комбинация его псевдопотенциалов в чистых соединениях AN и BN [21]:

$$V_N(A_mB_{4-m}) = \frac{m}{4} V_N(AN) + \frac{4-m}{4} V_N(BN). \quad (3)$$

Хотя такая линейная комбинация псевдопотенциалов в анионной подрешетке отражает дух приближения виртуального кристалла, однако описание неупорядоченного твердого раствора базируется на явном рассмотрении каждого атома, а не на усреднении по всему кристаллу. С другой стороны, следует отметить, что для конфигураций с минимальной энергией [19] в суперячейке из 32 атомов и с концентрациями 25, 50 и 75% все атомы азота имеют одинаковое локальное атомное окружение, что соответствует приближению виртуального кристалла.

Кроме композиционной неупорядоченности в твердых растворах наблюдается отклонение от идеальной геометрии решетки. Атомы сдвигаются со своих идеальных положений, заданных правилом Вегарда, что связано с различием длины связей образующих раствор соединений (позиционная неупорядоченность) (рис. 2). Зависимости длины связей $R_{AN}(x)$ и $R_{BN}(x)$ от состава в $A_{1-x}B_xN$ можно охарактеризовать безразмерным параметром [28]:

$$e = \frac{R_{BN}^{[AN:B]} - R_{AN}^0}{R_{BN}^0 - R_{AN}^0}, \quad (4)$$

где $R_{BN}^{[AN:B]}$ — длина связи BN вокруг примеси В в кристалле AN; R_{BN}^0 и R_{AN}^0 — длины связей чистых соединений.

На основе расчетов методом поля валентных сил (VFF) [28] была выведена зависимость коэффициента релаксации длины связи e от характеристик составляющих

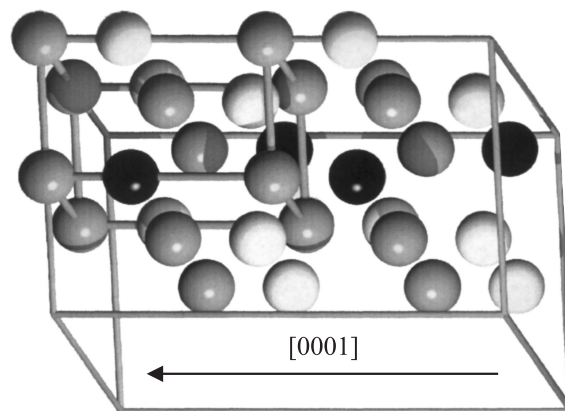


Рис. 1. Упорядоченная структура $A_{1-x}B_xN$ с $x = 0.25$. Ячейка $2 \times 2 \times 2$ структуры вюрцита содержит 12 атомов А (белые шарики), 4 атома В (черные шарики) и 16 атомов N (серые шарики).

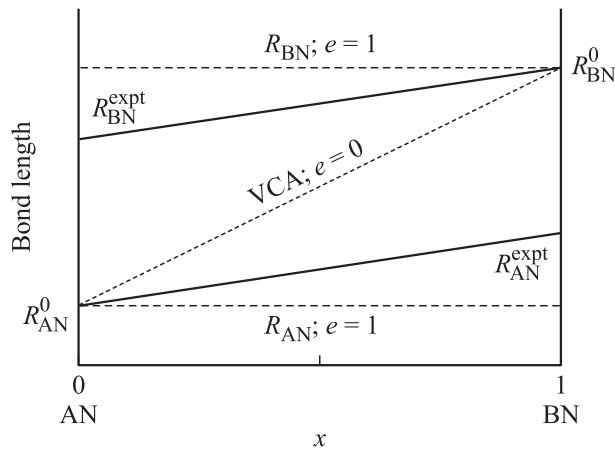


Рис. 2. Схематическое изменение длин связей $R_{AN}(x)$ и $R_{BN}(x)$ в зависимости от состава твердого раствора $A_{1-x}B_xN$. VCA — приближение виртуального кристалла.

твердого раствора:

$$e \approx \left[1 + \left(\frac{R_{BN}^0}{R_{AN}^0} \right)^3 \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{2} f_i \right) \right]^{-1}, \quad (5)$$

где f_i — ионность по Филлипсу. Используя значения $f_i(\text{AlN}) = 0.449$, $f_i(\text{GaN}) = 0.5$, $f_i(\text{InN}) = 0.578$ [29], для твердых растворов III-нитридов были получены значения коэффициента релаксации $e = 0.7-0.8$, что хорошо согласуется с экспериментальными данными и значениями, полученными в расчетах с помощью теории функционала плотности [30].

Для учета структурной релаксации атомы в 32-атомной суперячейке смещались от идеальных положений таким образом, чтобы длины всех связей соответствовали значениям, полученным из соотношения (5). Для каждого атома катиона рассчитывалась величина локальной деформации [22], которая входит в (1) как поправка к псевдопотенциалу

$$\text{Tr}(\varepsilon) = \frac{\Delta V}{V}, \quad (6)$$

где V — объем тетраэдра с ближайшими соседями катиона в вершинах для чистого бинарного соединения, ΔV — изменение объема за счет изменения постоянной решетки твердого раствора и структурной релаксации.

В расчетах использовался базис из 2055 плоских волн, что соответствует отсечению потенциала (energy cut-off) при 14 Ry.

3. Обсуждение результатов

Экспериментальные композиционные зависимости ширины запрещенной зоны описываются квадратным уравнением с коэффициентом прогиба b :

$$E_g(x) = E_{g1} + (E_{g2} - E_{g1})x - bx(1-x). \quad (7)$$

Для анализа влияния различных факторов на величину коэффициента прогиба разложим b на компоненты:

$$b = b_{VD} + b_{CE} + b_{SR}, \quad (8)$$

где b_{VD} — прогиб, вызванный эффектом деформации объема (volume deformation), b_{CE} — прогиб, вызванный перераспределением заряда между различными связями в неупорядоченном твердом растворе (charge exchange), b_{SR} — компонент коэффициента прогиба, связанный с релаксацией длин связей (structure relaxation).

Результаты наших расчетов представлены на рис. 3 и в табл. 3. Как видно, даже в расчетах в приближении виртуального кристалла присутствует отклонение от линейной зависимости $E_g(x)$, вызванное различием постоянных решетки соединений, составляющих раствор, и, как следствие, деформацией объема их элементарной ячейки при формировании раствора. Значение коэффициента прогиба в этом случае пропорционально разнице деформационных потенциалов (2) составляющих раствор соединений и относительному изменению постоянной решетки при формировании твердого раствора:

$$b_{VD} \propto \frac{\Delta a}{a} \Delta a_g. \quad (9)$$

Наименьшее значение коэффициента прогиба, вследствие эффекта деформации объема, наблюдается в AlGaN, где несогласованность постоянных решетки GaN и AlN составляет 2.5%, а деформационные потенциалы почти равны. Наибольший прогиб наблюдается в InAlN, где разница постоянных решетки достигает 12%, а деформационные потенциалы отличаются в 2 раза. Эффект деформации объема — единственный эффект, ведущий к появлению прогиба, который можно учесть в приближении виртуального кристалла. Однако, как видно из рис. 3 и табл. 3, его недостаточно для согласования расчетов и экспериментальных данных.

Моделирование неупорядоченных твердых растворов с помощью заданных атомных конфигураций в 32-атомной суперячейке позволяет рассчитать величину дополнительного прогиба b_{CE} , связанного с различием атомов в катионной подрешетке. Как показали наши и другие расчеты [18] плотности заряда валентных электронов, в твердом растворе $A_xB_{1-x}N$ наблюдается перераспределение заряда между связями AN и BN:

Таблица 3. Экспериментальные и теоретические значения коэффициента прогиба и его компоненты

Твердый раствор	b_{VD} , эВ	b_{CE} , эВ	b_{SR} , эВ	b , эВ. Наши расчеты	b , эВ. DFT [3]	b_{expt} , эВ
AlGaN	0.37	0.28	-0.21	0.44	0.71	0.2–1 [5,6]
InGaN	0.92	2.28	-0.48	2.72	1.7	2.5 [7]
InAlN	1.84	4.04	-1.72	4.16	4.09	3 [31]

Примечание. b_{expt} — экспериментальные данные.

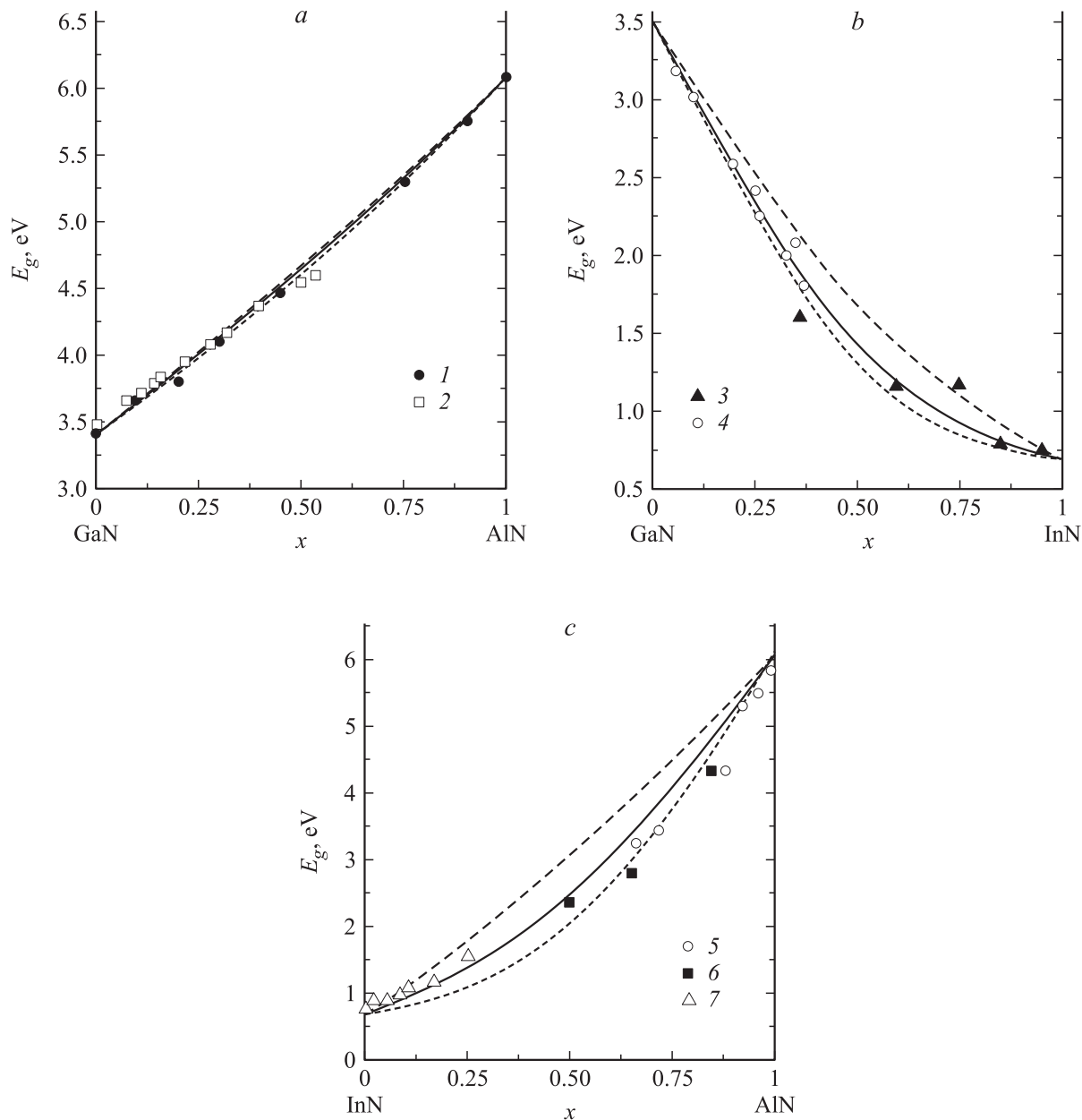


Рис. 3. Ширины запрещенной зоны в зависимости от состава твердых растворов III-нитридов. Экспериментальные данные представлены символами 1–7. *a* — AlGaN ($T = 300$ K): 1 — [15], 2 — [6]; *b* — InGaN ($T = 77$ K): 3 — [7], 4 — [9]; *c* — InAlN ($T = 77$ K): 5 — [10], 6 — [11], 7 — [31]. Расчетные зависимости представлены кривыми. Штриховые линии — приближение виртуального кристалла, пунктирные — с учетом композиционной неупорядоченности, сплошные — с учетом композиционной неупорядоченности и структурной релаксации.

заряд перетекает от менее ионной связи к более ионной. Таким образом, распределение заряда в такой системе отличается от полученного в приближении виртуального кристалла, что ведет к изменению зонной структуры и дополнительному прогибу b_{CE} . Разница ионностей бинарных соединений, составляющих раствор, определяет величину перераспределения заряда и соответственно коэффициент прогиба b_{CE} . В приближении виртуального кристалла этот эффект невозможно учесть, поскольку разные атомы в катионной подрешетке заменены оди-

наковыми во всех узлах „виртуальными“ усредненными атомами.

Учет релаксации длин связей также ведет к изменению композиционных зависимостей ширины запрещенной зоны, что можно описать дополнительным компонентом b_{SR} коэффициента прогиба. Как показали наши расчеты (см. также [18]), релаксация длин связей ведет к уменьшению неоднородности распределения заряда, вызванной наличием различных атомов в катионной подрешетке. Таким образом, распределение заряда ста-

новится более близким к полученному в приближении виртуального кристалла. Структурная релаксация также уменьшает влияние эффекта объемной деформации, поскольку длины связей в твердом растворе становятся более близкими к соответствующим значениям в чистых соединениях. Соответственно это ведет к уменьшению общего коэффициента прогиба, а b_{SR} является отрицательной величиной.

Полученные результаты хорошо согласуются с известными экспериментальными данными (табл. 3, рис. 3). Расчет для AlGaN дает почти линейную зависимость ширины запрещенной зоны от состава раствора ($b = 0.44$ эВ), что объясняется небольшим различием постоянных решетки, деформационных потенциалов и ионностей GaN и AlN. Для InGaN и InAlN экспериментально наблюдаются аномально большие значения b : 3.2 эВ [8,9] и 6.76 эВ [10,11] соответственно. Приведенные экспериментальные коэффициенты прогиба получены исходя из того, что ширина запрещенной зоны InN принималась равной 2 эВ, при этом измерения проводились только на образцах с малым содержанием InN. Однако в последнее время в литературе появились сообщения о том, что ширина запрещенной зоны InN составляет 0.7 эВ [7,31]. Соответственно для аппроксимации имеющихся экспериментальных данных необходимо использовать значительно меньшие значения коэффициента прогиба. В наших расчетах методом эмпирического псевдопотенциала мы принимали $E_g(\text{InN}) = 0.7$ эВ (табл. 1). На рис. 3, b, c приведены рассчитанные нами кривые $E_g(x)$ для InGaN и InAlN с коэффициентами прогиба 2.72 и 4.16 эВ, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными [10,11,31]. Большие значения коэффициента прогиба для InGaN и InAlN связаны с большой несогласованностью постоянных решеток (10 и 12% соответственно), большой разницей деформационных потенциалов и ионностей бинарных соединений, составляющих раствор.

Расчеты показали, что композиционная неупорядоченность и структурная релаксация сильно влияют не только на ширину запрещенной зоны, но и на зонную структуру в целом. Наличие разных атомов в катионной подрешетке и их смещение от идеальных положений ведет к понижению симметрии кристалла, что проявляется в расщеплении зон вдоль основных направлений зоны Бриллюэна. Кроме того, учет композиционной и позиционной неупорядоченностей ведет к значительному изменению ширины зон твердых растворов по сравнению с приближением виртуального кристалла — расширению валентной зоны и уменьшению асимметричной щели, которая является основным параметром в шкале ионности, предложенной в [32]. Наши расчеты композиционных зависимостей коэффициента зарядовой асимметрии g_i , предложенного в [29] как мера ионности, показали наличие прогиба, а для твердого раствора InAlN значение коэффициента зарядовой асимметрии при $x = 0.5$ становится меньше, чем для чистых AlN

и InN. Аппроксимация данных расчета приводит к соотношениям:

$$g_i(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 0.542 + (0.615 - 0.542)x, \quad (10)$$

$$g_i(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 0.542 + (0.638 - 0.542)x - 0.019x(1 - x), \quad (11)$$

$$g_i(\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}) = 0.615 + (0.638 - 0.615)x - 0.145x(1 - x). \quad (12)$$

4. Заключение

Изучены электронные свойства твердых растворов III-нитридов методом модельного эмпирического псевдопотенциала с использованием суперячеек. Показано, что учет внутренних локальных деформаций в твердых растворах, а также композиционной и позиционной неупорядоченностей ведет к прогибу композиционных зависимостей ширины запрещенной зоны $E_g(x)$, что удовлетворительно объясняет имеющиеся экспериментальные данные. Наибольший вклад в коэффициент прогиба дает композиционная неупорядоченность. Релаксация длин связей уменьшает влияние композиционной неупорядоченности и эффектов деформации объема. Выбранная модель способна разумно описывать электронные свойства твердых растворов и дает возможность понять причины возникновения прогиба зависимости $E_g(x)$.

Список литературы

- [1] S. Nakamura. *Introduction to Nitride Semiconductor Blue Lasers and Light Emitting Diodes* (London, Taylor & Francis, 2000).
- [2] M. Goano, E. Bellotti, E. Ghillino, G. Ghione, K.F. Brennan. *J. Appl. Phys.*, **88** (11), 6467 (2000).
- [3] Z. Dridi, B. Bouhafs, P. Ruterana. *Phys. St. Sol. (c)*, **0** (1), 315 (2002).
- [4] L.K. Teles, L.M.R. Scolfaro, J. Furthmuller, F. Bechstedt, J.R. Leite. *Phys. St. Sol. (b)*, **234** (3), 956 (2002).
- [5] В.Г. Дейбук, А.В. Возный, М.М. Слетов. *ФТП*, **34** (1), 35 (2000).
- [6] M. Leroux, S. Dalmaso, F. Natali, S. Helin, C. Touzi, S. Laugt, M. Passerel, F. Omnes, F. Semond, J. Massies, P. Gibart. *Phys. St. Sol. (b)*, **234** (3), 887 (2002).
- [7] V. Davydov, A. Klochikhin, V. Emtsev, D. Kurdyukov, S. Ivanov, V. Vekshin, F. Bechstedt, F. Furtmuller, J. Aderhold, J. Graul, A. Mudryi, H. Harima, A. Hashimoto, A. Yamamoto, E. Haller. *Phys. St. Sol. (b)*, **234** (3), 787 (2002).
- [8] S. Stepanov, W.N. Wang, B. Yavich, V. Bougrov, Y. Rebane, Y. Shreter. *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.*, **6**, 6 (2001).
- [9] K.P. O'Donnel, J.F.W. Mosselmanns, R.W. Martin, S. Pereira, M.E. White. *J. Phys.: Condens. Matter*, **13**, 6977 (2001).
- [10] M.J. Lukitsch, Y.V. Danylyuk, V.M. Naik, C. Huang, G.W. Auner, L. Rimai, R. Naik. *Appl. Phys. Lett.*, **79**, 632 (2001).

- [11] T. Peng, J. Piprek, G. Qiu, J.O. Olowafe, K.M. Unruh, C.P. Swann, E.F. Schubert. *Appl. Phys. Lett.*, **71**, 234 (1997).
- [12] S. Pugh, D. Dugdale, S. Brand, R. Abram. *Semicond. Sci. Technol.*, **14** (1), 23 (1999).
- [13] Y. Yeo, T. Chong, M. Li. *J. Appl. Phys.*, **83** (3), 1429 (1998).
- [14] M. Goano, E. Bellotti, E. Ghillino, C. Garetto, G. Ghione, K.F. Brennan. *J. Appl. Phys.*, **88** (11), 6476 (2000).
- [15] A. Rubio, J.L. Corkill, M.L. Cohen, E.L. Shirley, S.G. Louie. *Phys. Rev. B*, **48** (16), 11 810 (1993).
- [16] R. Haydoc, W. Heine, M.J. Kelly. *J. Phys. C*, **15** (13), 2891 (1982).
- [17] A. Zaoui. *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**, 4025 (2002).
- [18] G. Srivastava, J. Martins, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **31** (4), 2561 (1985).
- [19] F. Grosse, J. Neugebauer. *Phys. Rev. B*, **63**, 085 207 (2001).
- [20] P.R.C. Kent, L. Bellaiche, A. Zunger. *Semicond. Sci. Technol.*, **17** (6), 851 (2002).
- [21] T. Matilla, L.-W. Wang, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **59**, 15 270 (1999).
- [22] C. Pryor, J. Kim, L.W. Wang, A.J. Williamson, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **83** (5), 2548 (1998).
- [23] В.Г. Дейбук, А.В. Возный, М.М. Слетов, А.М. Слетов. *ФТП*, **36** (4), 398 (2002).
- [24] D.R. Hamman. *Phys. Rev. B*, **40** (5), 2980 (1989).
- [25] Z.H. Levine, S.G. Louie. *Phys. Rev. B*, **25** (10), 6310 (1982).
- [26] W.R.L. Lambrecht, M. Prikhodko. *Sol. St. Commun.*, **121**, 549 (2002).
- [27] I. Vurgaftman, J. Meyer. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
- [28] J.L. Martins, A. Zunger. *Phys. Rev. B*, **30** (10), 6217 (1984).
- [29] A. Garcia, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **47** (8), 4215 (1992).
- [30] 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. *J. Phys.: Condens. Matter*, **14**, 3399 (2002).
- [31] J. Wu, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager, E.E. Haller, H. Lu, W.J. Schaff. *Appl. Phys. Lett.*, **80** (25), (2002).
- [32] A. Wall, Y. Gao, A. Raisanen, A. Franciosi, J.R. Chelikowsky. *Phys. Rev. B*, **43** (6), 4988 (1991).

Редактор Т.А. Полянская

Influence of alloying on electronic structure of III-nitride disordered alloys

A.V. Voznyy, V.G. Deibuk

Chernivtsi National University,
58012 Chernovtsy, Ukraine

Abstract Influence of compositional and positional disorder on electronic properties of III-nitride random alloys in the wurtzite structure was studied using the model empirical pseudopotential and the 32-atoms supercell approach. The calculated band structures exhibit a downward bowing of 0.44, 2.72 and 4.16 for AlGa_{1-x}In_xN, InGa_{1-x}N and InAlN respectively. The bowing is mainly caused by compositional disorder while structure relaxation decreases the effect of compositional disorder and volume deformation.