

НАНОМАТЕРИАЛЫ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО И КОНСТРУКЦИОННОГО НАЗНАЧЕНИЯ

УДК 541.67+537.312.6+544.034

ДИФФУЗИЯ ВАКАНСИЙ АЗОТА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ НИТРИДЕ АЛЮМИНИЯ СО СТРУКТУРОЙ ВЮРЦИТА: РАСЧЕТ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

© 2023 г. М. А. Даниляк¹, И. В. Белов¹, Н. К. Чумаков¹, В. Г. Валеев^{1,*}¹Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, Россия

*E-mail: valeev_yg@nrcki.ru

Поступила в редакцию 06.12.2022 г.

После доработки 12.05.2023 г.

Принята к публикации 12.05.2023 г.

Исследованы особенности диффузии вакансий азота в кристаллическом нитриде алюминия со структурой вюрцита, определяющей кинетику формирования и эволюции филаментов в мемри- стивных структурах на его основе. В частности, из первых принципов рассчитаны величины энер- гий образования и барьеров диффузии вакансий в зарядовых состояниях $q = 0, \pm 1e, \pm 2e$, где q – за- ряд вакансии, и найдены температурные зависимости частот перескоков вакансий на соседние узлы кристаллической решетки, которые необходимы для построения численных моделей, описываю- щих функционирование нитридных структур с резистивным переключением.

DOI: 10.56304/S1992722323060055

ВВЕДЕНИЕ

Нитридные гетероструктуры AlGa_N/AlN/GaN и транзисторы с высокой подвижностью элект- ронов (HEMT) на их основе активно исследу- ются в последние десятилетия с целью создания нового поколения мощной высокотемператур- ной микроволновой электроники. Причина в том, что достигнутые в этих структурах плотно- сти тока, рабочие температуры, напряжения пробоя и частоты отсечки значительно превос- ходят аналогичные характеристики всех суще- ствующих систем на основе GaAs, Si и Ge [1]. Уникальный набор свойств нитридных структур обусловлен наличием в них двумерного элект- ронного газа (2DEG), локализованного в слое GaN на границе раздела фаз AlN/GaN без спе- циального легирования. Концентрация носите- лей такого 2DEG имеет порядок величины 10^{13} см⁻² – существенно больше, чем в 2DEG других гетероструктур семейства A^{III}–B^V [2]. В этом контексте, однако, особую актуальность приобретает задача расширения элементной ба- зы нитридной электроники, которая пока отно- сительно скромна [3].

Разработка нитридных структур с резистив- ным переключением – мемристоров – одно из актуальных направлений. Как известно, мемри- сторы открывают широкие перспективы разра- ботки нового типа энергонезависимой памяти (RRAM) и нейроморфных вычислительных си-

стем. В сравнении с развивающимися альтерна- тивами (phase change memory, spin-transfer torque RAM) технология RRAM позволяет создавать легко масштабируемые, экономичные и прин- ципиально простые низковольтные двухкон- тактные структуры со сверхнизким энергопо- треблением, многоуровневостью и высокой ско- ростью резистивного переключения, большой износостойкостью, длительным сроком хране- ния данных и возможностью трехмерной инте- грации в наноструктуры с высокой плотностью размещения структурных элементов. Все это позволяет использовать их в качестве искус- ственных синапсов (весовых модулей) нейро- процессоров и искусственных нейросетей [4, 5]. Мемристорные структуры на основе нитрида алюминия [6] имеют и целый ряд других преимущ- еств [7].

Эффекты резистивного переключения в тон- ких слоях AlN низкого структурного совершенства (аморфных и поликристаллических), помещен- ных между слоями проводящих материалов, были установлены в [8, 9]. В последней из этих работ продемонстрирован мемристор Ti/AlN(002)/Pt, устойчивый к деградации в 10⁸ циклах переключе- ния со временем хранения данных >10⁸ с. Известно также, что AlN-структуры с преимущ- ественной пространственной ориентацией кристаллитов имеют значительно лучшую сово- купность мемристорных свойств по сравнению с системами на основе аморфных пленок AlN [10,

11] и что допирование рабочей области структуры кремнием на 2 порядка увеличивает отношение on/off сопротивлений, на четверть уменьшая величину напряжения переключения [12].

Естественным итогом этой активности мог бы стать синтез нитридных НЕМТ и AlN-мемристоров с целью создания структур типа “memory on chip”. Ориентируясь на такую перспективу, сосредоточимся на исследовании физического механизма резистивного переключения в кристаллическом нитриде алюминия со структурой вюрцита. Основой этого механизма, который в виду его сложности может быть описан лишь численно, служат, как известно, формирование и эволюция проводящих филаментов, образующихся в рабочей области мемристора в результате термополевой диффузии вакансий азота в матрице AlN. Поэтому ключевыми элементами его численной модели являются физические параметры системы, характеризующие этот диффузионный процесс, – величины энергий образования вакансии азота, высоты соответствующих диффузионных барьеров и частоты перескоков вакансий на соседние узлы кристаллической решетки.

В литературе, посвященной исследованию точечных дефектов в нитридных системах, существует богатая традиция численного анализа свойств вакансий азота в кристаллическом нитриде алюминия (например, [13–16] и литература в них). Цель этих работ состояла в изучении влияния собственных точечных дефектов кристаллической решетки AlN на его зонную структуру, а также электрическую прочность и механические свойства. Из близких по кругу вопросов, рассмотренных здесь, можно сослаться на работу [17], где обсуждается роль вакансий азота в кристаллах GaN со структурой вюрцита в диффузии примесных атомов и в процессах деградации материала матрицы, изучены возможные траектории миграции анионов азота и на основе первых принципов рассчитаны величины возникающих при такой миграции потенциальных барьеров, работу [18] о диффузии вакансии азота в нитриде галлия, допированном магнием, и аналогичную по постановке задачи работу [19], посвященную свойствам собственных дефектов в термодинамически равновесном кристаллическом AlN.

В настоящей работе сосредоточимся на расчете энергий образования и барьеров диффузии для всех зарядовых состояний вакансии азота (V_N^q , $q = 0, \pm 1, \pm 2$, где q – заряд вакансии) в нитриде алюминия, а также найдем температурные зависимости частот перескоков вакансионных состо-

яний азота, которые определяют кинетику филаментов в AlN-мемристорах и необходимы для построения численных моделей, описывающих их функционирование.

МЕТОДЫ

Энергия образования структуры с вакансией азота с зарядом q в матрице AlN определяется соотношением [20, 21]:

$$E_f[V_N^q] = E_{\text{tot}}[V_N^q] - E_{\text{tot}}[\text{bulk}] + \mu_N + q(E_F + E_v) + E_{\text{corr}}, \quad (1)$$

где $E_f[V_N^q]$ – энергия образования структуры с вакансией, $E_{\text{tot}}[V_N^q]$ – полная энергия кристаллического AlN, полученная в результате расчета сверхъядчейки с вакансией азота, $E_{\text{tot}}[\text{bulk}]$ – полная энергия идеального кристалла AlN, вычисленная с использованием эквивалентной сверхъядчейки, μ_N – химический потенциал нейтрального атома азота, отвечающий энергии резервуара таких атомов, с которым исследуемая система может ими обмениваться, E_F – аналогичный ему химический потенциал электронов, отсчитываемый от вершины валентной зоны E_v , E_{corr} – в данном случае поправка для учета ошибки из-за дискретизации \mathbf{k} -пространства и ограниченности размеров сверхъядчейки [22, 23] (эта поправка, как известно, имеет порядок величины 0.05 эВ [24]). Химический потенциал μ_N может варьироваться в пределах, определяемых энтальпией образования AlN, равной 3.36 эВ [25], что обуславливает необходимость рассмотрения нестехиометрических реализаций исследуемой системы. Точнее, поскольку свободная энергия Гиббса пары атомов Al и N в идеальном кристалле $E_G[\text{AlN}]$ есть сумма химических потенциалов атомов N и Al, то $\mu_N = E_G[\text{AlN}] - \mu_{\text{Al}}$, где μ_{Al} – химический потенциал атома Al. Поскольку идеальный кристалл Al и молекула N_2 термодинамически стабильны, то $\mu_{\text{Al}} \leq \mu_{\text{Al}}[\text{bulk}]$ и $\mu_N \leq 0.5E_G[\text{N}_2]$, где $\mu_{\text{Al}}[\text{bulk}]$ – энергия атома Al в идеальном кристалле Al, $E_G[\text{N}_2]$ – свободная энергия Гиббса молекулы азота. Поэтому для интервала изменения химического потенциала атома азота имеем

$$E_G[\text{AlN}] - \mu_{\text{Al}}[\text{bulk}] \leq \mu_N \leq 0.5E_G[\text{N}_2]. \quad (2)$$

Расчеты из первых принципов выполнены в двух приближениях – методом проекций присоединенных волн (PAW) [26] с функционалом LDA в параметризации Ceperly-Alder [27] с ультрамягкими псевдопотенциалами (US-PP) [28] и с применением GGA-функционала Perdew-Burke-Ern-

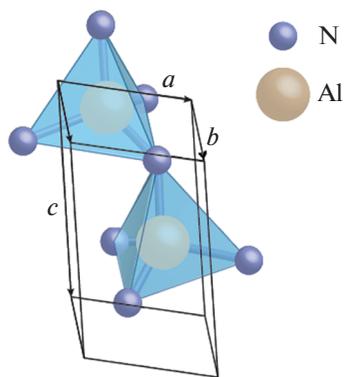


Рис. 1. Элементарная ячейка кристаллического AlN со структурой вюрцита.

zerhof (PBE) [29], оба в версиях, реализованных в программном комплексе VASP [30]. Во всех расчетах учтена спиновая степень свободы электронов в коллинеарном приближении. Релаксация ионных степеней свободы останавливалась, если изменение свободной энергии Гельмгольца между двумя шагами итераций ΔE_G было меньше 10^{-2} эВ. Энергия системы найдена из вариационного принципа, записанного в терминах электронной плотности, процесс расчета был прекращен при условии, что $\Delta E_G \leq 10^{-16}$ эВ.

Элементарная ячейка кристаллического AlN со структурой вюрцита состоит из двух атомов алюминия и двух атомов азота (рис. 1) с длиной связи между атомами Al и N, равной 1.90 Å. Результат расчета параметров решетки $a = 3.129$, $b = 3.129$, $c = 5.017$ Å удовлетворительно согласуется с данными эксперимента ($a = 3.11$, $b = 3.11$, $c = 4.98$ Å [31, 32]). Однако расчетная величина ширины запрещенной зоны, $E_g = 4.05$ эВ, заметно отличается от ее фактического значения ($E_g^{\text{exp}} = 6.1$ эВ [33]).

Расчеты электронной структуры кристаллического AlN со структурой вюрцита проведены с энергией отсечки в разложении по плоским волнам $E_{\text{cut}} = 400$ эВ для сверхъячейки из $3 \times 3 \times 3$ элементарных ячеек AlN, в совокупности содержащей 108 атомов; при интегрировании по зоне Бриллюэна использована сетка Монкхорста–Пака $5 \times 5 \times 5$.

Расчитанная методом PAW полная энергия идеальной структуры AlN из 108 атомов без вакансии $E_{\text{tot}}[\text{bulk}] = -886.07$ эВ; кроме того, $\mu_{\text{Al}}[\text{bulk}] = -4.18$ эВ и $E_G[\text{N}_2] = -17.49$ эВ. Согласно соотношению (2) в расчетах методом PAW следует положить $\mu_{\text{N}} = -10.49$ эВ ± 1.74 эВ.

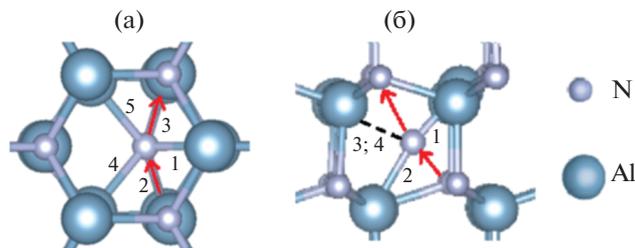


Рис. 2. Переходное состояние при диффузии вакансии в плоскости α ($a \parallel b$) (а) и β ($a \parallel c$) (б).

Полная энергия идеальной структуры AlN из 108 атомов без вакансии, рассчитанная методом PBE, $E_{\text{tot}}[\text{bulk}] = -804.13$ эВ; химический потенциал идеального кристаллического Al в этом расчете $\mu_{\text{Al}}[\text{bulk}] = -3.74$ эВ, а $E_G[\text{N}_2] = -16.61$ эВ. Так что в этом приближении $\mu_{\text{N}} = -9.73$ эВ ± 1.43 эВ.

Переходные состояния при диффузии вакансии азота на соседние узлы найдены посредством метода упругой ленты (Nudged Elastic Band Method [34–36]). Переходные состояния при диффузии вакансии в плоскостях α ($a \parallel b$) и β ($a \parallel c$) изображены на рис. 2.

Для оценки частоты переходов вакансии азота с зарядом q на соседние узлы использовано приближение

$$v_{\text{Diff}} = \omega_D \exp(-E_{\text{Diff}}^q/kT), \quad (3)$$

где ω_D – дебаевская частота, E_{Diff}^q – барьер диффузии. Для AlN со структурой вюрцита $\omega_D \approx 15.06 \times 10^{13} \text{c}^{-1}$ [37].

РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты расчета зонной структуры кристаллического нитрида алюминия со структурой вюрцита – идеального и с вакансией с зарядом $q = -1e$ и $-2e$ методом PAW приведены на рис. 3. Соответствующие расчеты в приближении PBE показаны на рис. 4.

Результаты расчета параметров структур AlN с вакансией V_{N}^q методом PAW представлены в табл. 1.

Соответствующие результаты расчета для структур AlN с вакансией азота методом PBE представлены в табл. 2.

Графики температурных зависимостей частот перехода вакансий азота на соседний узел, рассчитанных на основе данных, полученных методами PAW и PBE в интервале температур $300 < T < 1200$ К, приведены на рис. 5 и 6 соответственно. При этом ограничились анализом результатов только для вакансий азота в зарядовых состояниях $q = -1e$ и $q = -2e$, диффузия которых, по-види-

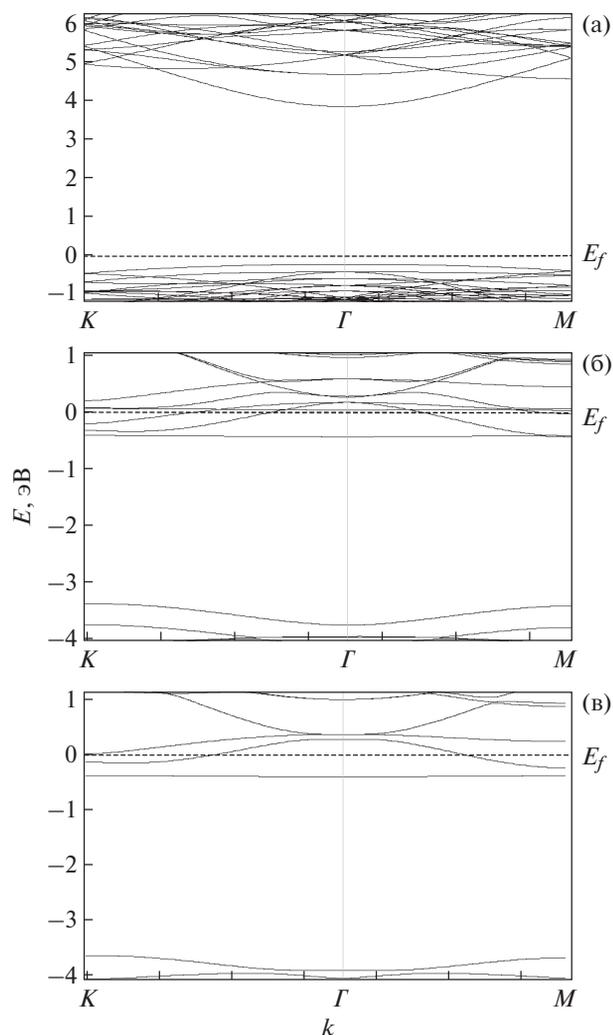


Рис. 3. Зонная структура кристаллического нитрида алюминия со структурой вюрцита: идеального (а) и с вакансией $q = -1e$ (б), $q = -2e$ (в); расчет в приближении PAW.

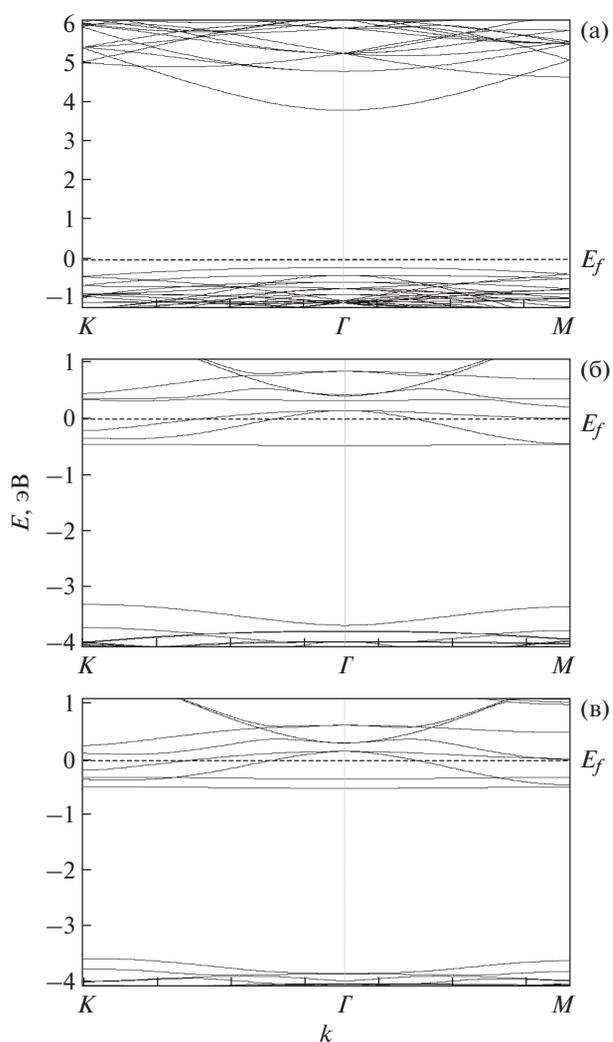


Рис. 4. Зонная структура кристаллического нитрида алюминия со структурой вюрцита: идеального (а) и с вакансией $q = -1e$ (б), $q = -2e$ (в); расчет в приближении PBE.

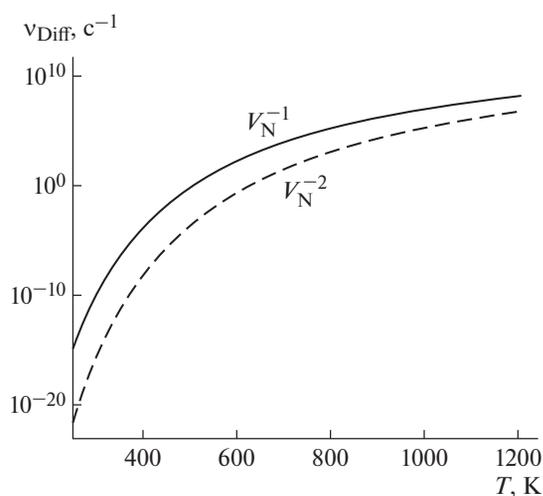


Рис. 5. Температурные зависимости частот перехода вакансий азота на соседний узел, расчет методом PAW.

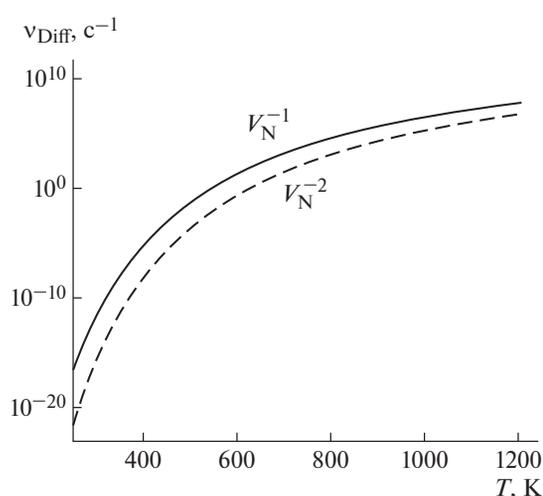


Рис. 6. Температурные зависимости частот перехода вакансий азота на соседний узел, расчет методом PBE.

Таблица 1. Результаты расчета полной энергии структуры с вакансией, положения ее уровня Ферми относительно уровня вакуума и величины барьера диффузии E_{Diff}^q вакансии азота с зарядом q в кристаллическом нитриде алюминия со структурой вюрцита методом raw (сверхъячейка $3 \times 3 \times 3$)

Заряд вакансии V_N^q в AlN	$E_{\text{tot}}[V_N^q]$, эВ	Положение уровня Ферми структуры с вакансией относительно уровня вакуума, эВ	$E_f[V_N^q]$, эВ	Барьер диффузии вакансии E_{Diff}^q , эВ
$-3e$	-842.27	-5.82	15.08	2.01
$-2e$	-851.87	-6.10	11.59	1.77
$-1e$	-861.24	-6.04	8.25	1.43
0	-870.59	-6.10	5.00	2.73
$1e$	-879.98	-9.08	1.72	4.31
$2e$	-886.37	-8.88	4.4	3.51
$3e$	-893.23	-9.65	6.42	3.35

Таблица 2. Результаты расчета полной энергии структуры с вакансией, положения ее уровня Ферми относительно уровня вакуума и величины барьера диффузии E_{Diff}^q вакансии азота в кристаллическом нитриде алюминия со структурой вюрцита методом PBE (сверхъячейка $3 \times 3 \times 3$)

Заряд вакансии V_N^q в AlN	$E_{\text{tot}}[V_N^q]$, эВ	Положение уровня Ферми структуры с вакансией относительно уровня вакуума, эВ	$E_f[V_N^q]$, эВ	Барьер диффузии вакансии E_{Diff}^q , эВ
$-3e$	-760.84	-5.64	15.71	2.05
$-2e$	-770.64	-5.92	11.83	1.78
$-1e$	-780.34	-5.97	8.09	1.55
0	-789.80	-5.97	4.61	2.77
$1e$	-799.36	-8.97	1.02	4.31
$2e$	-805.81	-8.84	3.54	3.42
$3e$	-812.79	-9.36	5.39	3.21

тому, и определяет кинетику формирования и эволюции проводящих филаментарных структур в исследуемой системе.

ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчетов энергий образования вакансий и барьеров диффузии вакансий согласуются с данными, полученными другими авторами в рамках тех же приближений, и подтверждаются в эксперименте. Это обстоятельство позволяет полагать, что и величины частоты переходов вакансий на соседние узлы кристаллической решетки AlN со структурой вюрцита, которые были рассчитаны впервые, также вполне достоверны.

Эти результаты показывают, что основной вклад в динамику филаментов, ответственных за процессы резистивного переключения в исследуемой системе, вносят вакансии азота с зарядом $q = -1e$. Судя по характеру соответствующей зонной структуры AlN, состояние с высокой проводимостью возникает в тех областях кристалла, где плотность V_N^{-1} превышает порог фазового перехода диэлектрик–металл по вакансионной зоне, который, как известно, лежит в области концентраций дефектов от 10^{17} до 10^{19} см^{-3} [38]. Отметим, что размеры сверхъячеек, которые позволяют исследовать доступные вычислительные средства, соответствуют плотности вакансий $\sim 2.5 \times 10^{20}$ см^{-3} . Поэтому зонные структуры AlN с дефектами на

рис. 3б, 3в и 4б, 4в отвечают состояниям системы, в которых этот фазовый переход уже состоялся: электронные состояния на вакансиях азота в них уширены в зоны, частично гибридные с зоной проводимости идеального AlN.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитаны из первых принципов величины энергий образования и барьеров диффузии для всех зарядовых состояний вакансии азота в кристаллическом нитриде алюминия со структурой вюрцита, а также найдены температурные зависимости частот перескоков этих вакансий на соседние узлы. Именно эти частоты определяют кинетику филаментов в AlN-мемристорах и необходимы для построения численных моделей, описывающих их функционирование.

Приближение (3), использованное в работе, дает лишь верхнюю оценку искомых зависимостей. Более аккуратный расчет, требующий исследования фононного спектра системы на основе первых принципов, будет представлен в следующей работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-29-00535). Квантовохимические расчеты выполнены на ресурсах Федерального центра коллективного пользования научным оборудованием “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Gallium nitride (GaN): physics, devices, and technology / Eds. Medjdoub A.F., Iniewski K. New York: CRC Press, 2016. 372 p.
- Gurusinghe M.N., Davidsson S.K., Andersson T.G.* // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. № 4. P. 045316. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.045316>
- Wide bandgap semiconductors for power electronics: materials, devices, applications / Eds. Wellmann P. et al. 2 volumes. Wiley-VCH, 2022. 736 p.
- Banerjee W.* // Electronics. 2020. V. 9. № 6. P. 1029. <https://doi.org/10.3390/electronics9061029>
- Zhu J., Zhang T., Yang Y. et al.* // Appl. Phys. Rev. 2020. V. 7. № 1. P. 011312. <https://doi.org/10.1063/1.5118217>
- Guo Y., Hu W., Zhang Ch. et al.* // J. Phys. D. 2020. V. 53. № 19. P. 195101. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/ab7517>
- Ho C.H., Retamal J.R., Yang P.K. et al.* // Sci. Rep.-UK. 2017. V. 7. № 1. P. 1. <https://doi.org/10.1038/srep44429>
- Chen C., Yang Y.C., Zeng F. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2010. V. 97. № 8. P. 083502. <https://doi.org/10.1063/1.3483158>
- Kim H.D., An H.M., Lee E.B. et al.* // IEEE Trans. Electron Devices. 2011. V. 58. № 10. P. 3566. <https://doi.org/10.1109/TED.2011.2162518>
- Lin C.C., Liou H.Y., Chu S.-Y. et al.* // CrystEngComm. 2018. V. 20. № 40. P. 6230. <https://doi.org/10.1039/C8CE00966J>
- Lin C.-C., Liou H.-Y., Hung P.H. et al.* // IEEE Trans. Electron Devices. 2019. V. 66. № 11. P. 4716. <https://doi.org/10.1109/TED.2019.2939365>
- Min K.-P., Li Ch.-Y., Chang T.-J. et al.* // ACS Appl. Electron. Mater. 2021. V. 3. № 12. P. 5327. <https://doi.org/10.1021/acsaelm.1c00823>
- Stampfl C., Van de Walle C.G.* // Phys. Rev. B. 2002. V. 65. № 15. P. 155212. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.155212>
- Freysoldt Ch., Grabowski B., Hickel T. et al.* // Rev. Mod. Phys. 2014. V. 86. № 1. P. 253. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.86.253>
- Gao Y., Sun D., Jiang X. et al.* // J. Appl. Phys. 2019. V. 125. № 21. P. 215705. <https://doi.org/10.1063/1.5094356>
- Hrytsak R., Kempisty P., Grzanka E. et al.* // Materials. 2022. V. 15. № 2. P. 478. <https://doi.org/10.3390/ma15020478>
- Limpijumnonng S., Van de Walle C.G.* // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. № 3. P. 035207. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.035207>
- Wright A.F., Mattsson T.R.* // J. Appl. Phys. 2004. V. 96. № 4. P. 2015. <https://doi.org/10.1063/1.1767981>
- Chen Y., Wu L., Liang D. et al.* // Comput. Mater. Sci. 2021. V. 188. P. 110169. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110169>
- Zhang S.B., Northrup J.E.* // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 67. № 17. P. 2339. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.67.2339>
- Van de Walle C.G., Neugebauer J.* // Appl. Phys. Rev. 2004. V. 95. № 8. P. 3851. <https://doi.org/10.1063/1.1682673>
- Freysoldt C., Neugebauer J., Van de Walle C.G.* // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. № 1. P. 016402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.016402>
- Freysoldt C., Neugebauer J., Van de Walle C.G.* // Phys. Status. Solidi. B. 2011. V. 248. № 5. P. 1067. <https://doi.org/10.1002/pssb.201046289>
- Gordon L., Varley J.B., Lyons J.L. et al.* // Phys. Status. Solidi. RRL. 2015. V. 9. № 8. P. 1067. <https://doi.org/10.1002/pssr.201510165>
- CRC Handbook of chemistry and physics, 2016-2017 / Ed. Haynes W.M. 97th edn. Ann Arbor, Michigan: CRC Press, 2014. 2638 p.
- Bloch P.E.* // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. № 24. P. 17953. <https://doi.org/10.1103/physrevb.50.17953>
- Ceperley D.M., Alder B.J.* // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. № 7. P. 566. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.45.566>
- Kresse G., Hafner J.* // J. Phys: Condens. Mater. 1994. V. 6. № 40. P. 8245. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/6/40/015>
- Kresse G., Furthmuller J.* // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. № 11. P. 169. <https://doi.org/10.1103/physrevb.54.11169>

30. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. № 18. P. 3865.
<https://doi.org/10.1103/physrevlett.77.3865>
31. *Vurgaftman I., Meyer J.R.* // J. Appl. Phys. 2003. V. 94. № 11. P. 3675.
<https://doi.org/10.1063/1.1368156>
32. *Ranade M.R., Tessier F., Navrotsky A., Marchand R.* // J. Mater. Res. 2001. V. 16. № 10. P. 2824.
<https://doi.org/10.1557/JMR.2001.0389>
33. *Feneberg M., Leute R.A.R., Neuschl B. et al.* // Phys. Rev. B. 2010. V. 82. № 7. P. 075208.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.82.075208>
34. *Jónsson H., Mills G., Jacobsen K.W.* // Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations / Eds. Berne B.J. et al. World Scientific, 1998. P. 385.
35. *Mills G., Jónsson H.* // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. № 7. P. 1124.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.1124>
36. *Mills G., Jónsson H., Schenter G.K.* // Surf. Sci. 1995. V. 324. № 2–3. P. 305.
[https://doi.org/10.1016/0039-6028\(94\)00731-4](https://doi.org/10.1016/0039-6028(94)00731-4)
37. *Goldberg Yu.* // Properties of advanced semiconductor materials. GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe / Eds. Levinshtein M.E. et al. New York: Wiley, 2001. P. 31.
38. *Mott N.F.* // Rev. Mod. Phys. 1968. V. 40 № 4. P. 677.
<https://doi.org/10.1103/revmodphys.40.677>