

---

**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. Даниляк<sup>1</sup>, И. В. Белов<sup>1</sup>, Н. К. Чумаков<sup>1</sup>, В. Г. Валеев<sup>1,\*</sup><sup>1</sup>Национальный 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<sub>n</sub>/AlN/GaN и транзисторы с высокой подвижностью элек- тронов (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 элек- тронного 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<sup>-2</sup> – существенно больше, чем в 2DEG других гетероструктур семейства A<sup>III</sup>–B<sup>V</sup> [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]. Мемристоры 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 10<sup>8</sup> циклах переключе- ния со временем хранения данных >10<sup>8</sup> 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,  $\mu_N$  – 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  $E_v$ ,  $E_{\text{corr}}$  – 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  $\mu_N$  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  $\mu_{\text{Al}}$  – химический потенциал атома Al. Поскольку идеальный кристалл Al и молекула  $\text{N}_2$  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-

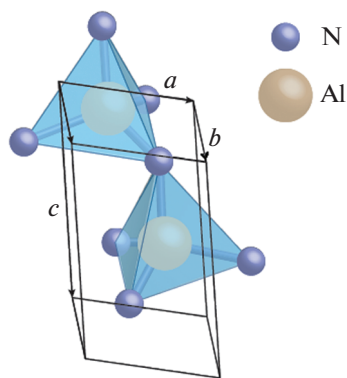


Рис. 1. Элементарная ячейка кристаллического AlN со структурой вюрцита.

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  $\Delta E_G$  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 а  $E_G[\text{N}_2] = -17.49$  эВ. Согласно соотношению (2) в расчетах методом PAW следует положить  $\mu_{\text{N}} = -10.49$  эВ  $\pm 1.74$  эВ.

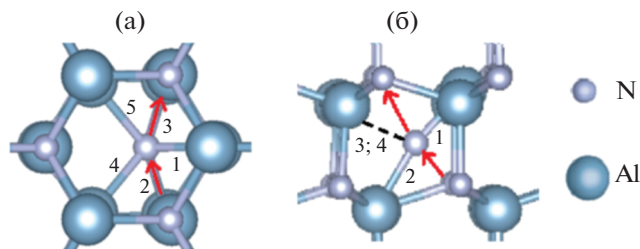


Рис. 2. Переходное состояние при диффузии вакансии в плоскости  $\alpha$  ( $a \parallel b$ ) (а) и  $\beta$  ( $a \parallel c$ ) (б).

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  $\pm 1.43$  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  $\alpha$  ( $a \parallel b$ ) и  $\beta$  ( $a \parallel c$ ) 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  $\omega_D$  – дебаевская частота,  $E_{\text{Diff}}^q$  – 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  $V_{\text{N}}^q$  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-

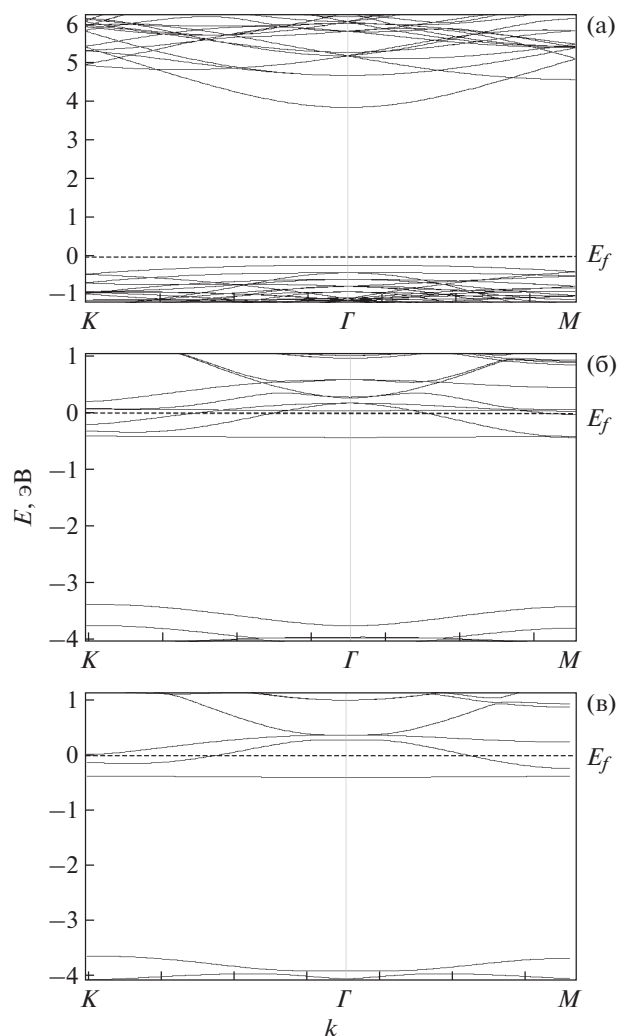


Рис. 3. Зонная структура кристаллического нитрида алюминия со структурой вюрцита: идеального (а) и с вакансией  $q = -1e$  (б),  $q = -2e$  (в); расчет в приближении РАО.

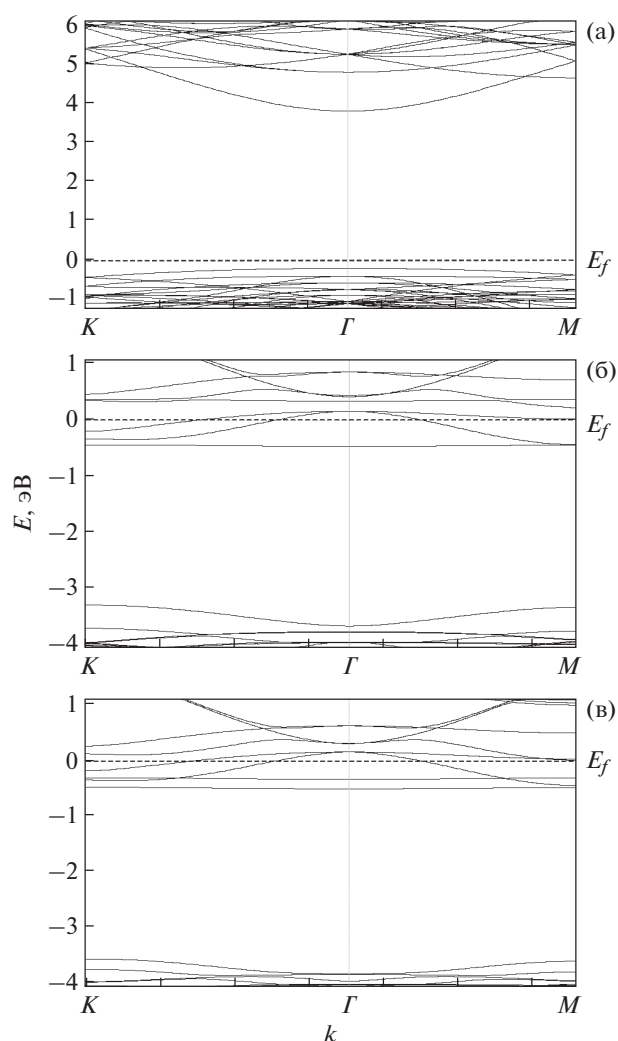


Рис. 4. Зонная структура кристаллического нитрида алюминия со структурой вюрцита: идеального (а) и с вакансией  $q = -1e$  (б),  $q = -2e$  (в); расчет в приближении РВЕ.

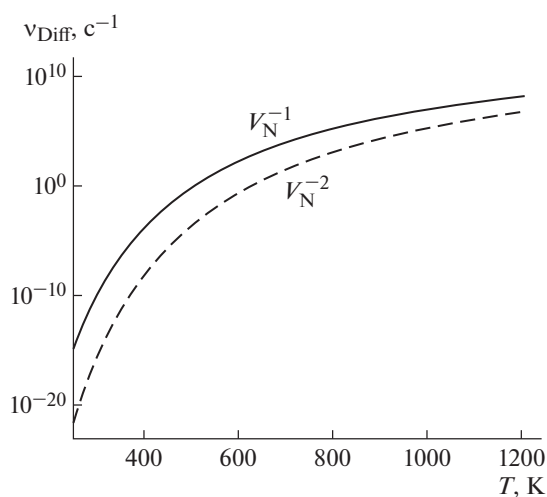


Рис. 5. Температурные зависимости частот перехода вакансий азота на соседний узел, расчет методом РАО.

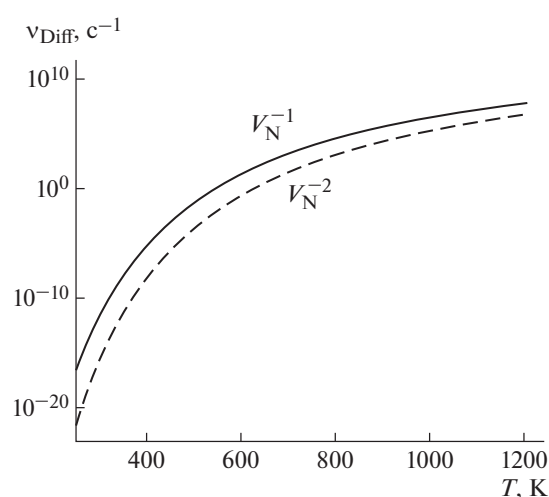


Рис. 6. Температурные зависимости частот перехода вакансий азота на соседний узел, расчет методом РВЕ.

**Таблица 1.** Результаты расчета полной энергии структуры с вакансией, положения ее уровня Ферми относительно уровня вакуума и величины барьера диффузии  $E_{\text{Diff}}^q$  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 $E_{\text{Diff}}^q$ , 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  $E_{\text{Diff}}^q$  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 $E_{\text{Diff}}^q$ , 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  $10^{19}$   $\text{см}^{-3}$  [38]. Отметим, что размеры сверхъячеек, которые позволяют исследовать доступные вычислительные средства, соответствуют плотности вакансий  $\sim 2.5 \times 10^{20}$   $\text{см}^{-3}$ . 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. // CrystEngCommun. 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., Furthmüller 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>