

# Новый метод численного решения уравнения Больцмана в задаче нелинейного электронного транспорта в полупроводниках

**Н. А. МАСЮКОВ, А. В. ДМИТРИЕВ**

*Московский государственный университет  
им. М. В. Ломоносова  
e-mail: dmitriev@lt.phys.msu.su*

УДК 538.935+517.958+537.84

**Ключевые слова:** уравнение Больцмана, кинетика, горячие электроны, нитрид индия, численный эксперимент.

## Аннотация

В работе проведено математическое моделирование нелинейного электронного транспорта в полупроводниковом нитриде индия и твёрдых растворах на его основе. Для этого разработан и использован простой и вычислительно эффективный итерационный метод численного решения уравнения Больцмана для носителей заряда в полупроводниках. Метод применён к модели однородного нитрида индия с электронной проводимостью, изучение электронного транспорта в котором важно для определения параметров этого материала и актуально в связи с перспективами его широкого применения в источниках света.

## Abstract

*N. A. Masyukov, A. V. Dmitriev, A new numerical method for the solution of the Boltzmann equation in the semiconductor nonlinear electron transport problem. Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 15 (2009), no. 6, pp. 77–97.*

A new iterative method for solving the Boltzmann transport equation in the space-uniform case is introduced. The method is based on the use of a mesh in the momentum space to represent the distribution function. In intermediate points the function is found with the help of interpolation. The method is used to study the hot-electron transport in bulk  $n$ -InN, which is a promising material for optoelectronic applications.

## 1. Введение

Кинетическое уравнение Больцмана, основное уравнение кинетики газов [9–11], является также основой квазиклассического описания транспорта электронов и фононов в твёрдых телах [1, 2, 4, 7, 8]. Эффективные методы его аналитического решения разработаны, однако, только для случая, когда неупругостью важнейших процессов рассеяния частиц можно пренебречь, а само уравнение удаётся линеаризовать по функции распределения или по её искомой части. На

*Фундаментальная и прикладная математика*, 2009, том 15, № 6, с. 77–97.

© 2009 *Центр новых информационных технологий МГУ,  
Издательский дом «Открытые системы»*

таким подходе, называемом  $\tau$ -приближением, основана, фактически, вся стандартная теория гальваномагнитных и термоэлектрических явлений в твёрдых телах [1, 2, 7, 8].

В задачах, к которым этот упрощённый метод неприменим, приходится иметь дело с нелинейным уравнением Больцмана и неупругими процессами столкновения частиц. Хотя в некоторых частных случаях нелинейное интегродифференциальное уравнение Больцмана удаётся упростить и свести к системе алгебраических уравнений, так называемых уравнений баланса [3], в общем случае решение уравнения приходится проводить численно и возникает задача построения простого и эффективного метода численного решения уравнения Больцмана в той или иной ситуации.

В данной работе мы решаем такую задачу применительно к электронному транспорту в полупроводниках в сильных электрических полях, которые существенно искажают вид функции распределения электронов по сравнению с равновесным фермиевским распределением. О подобной постановке говорят как о задаче горячих электронов, так как изменение функции распределения носителей заряда обычно сопровождается ростом их средней энергии, или как о проблеме нелинейного транспорта, поскольку искажение вида функции распределения электронов приводит к нарушению пропорциональности между током и электрическим полем, т. е. к отклонению от линейного закона Ома.

Подход к решению задачи горячих электронов существенно зависит от того, как устроен электронный энергетический спектр рассматриваемого вещества и какие механизмы рассеяния электронов играют в нём основную роль, и поэтому такая задача должна ставиться и решаться особо для каждого конкретного вещества или группы близких веществ, свойства которых различаются несильно. Мы в данной работе будем иметь в виду бинарное полупроводниковое соединение InN и его сплавы с родственными материалами GaN и AlN. Эта группа полупроводников-нитридов была синтезирована сравнительно недавно и имеет исключительно широкие перспективы применения в электронике и особенно в оптоэлектронике. Достаточно сказать, что, как ожидается, через пару десятилетий основанные на них светодиоды полностью вытеснят лампы накаливания и люминесцентные лампы в качестве источников света, поскольку они обеспечивают в несколько раз больший выход излучения при той же затраченной энергии [16]. Исследование свойств этих полупроводников в сильном электрическом поле имеет поэтому большое прикладное значение. В то же время предлагаемый численный метод сам по себе универсален и может быть успешно применён для решения задач кинетики в других веществах.

В пространственно однородном полупроводнике электронное уравнение Больцмана, о решении которого идёт речь, в электрическом поле  $\mathbf{E}$  имеет вид

$$\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \hat{S}t(f), \quad (1)$$

где  $\mathbf{k}$  — волновой вектор электрона. Функция распределения  $f$  подчиняется условию нормировки

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = NV, \quad (2)$$

где  $V$  — объём образца,  $N$  — концентрация электронов. Различные механизмы рассеяния учитываются в интеграле столкновений

$$\widehat{\text{St}}(f) = \sum_{\mathbf{k}'} \{W(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k})f(\mathbf{k}')[1 - f(\mathbf{k})] - W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')f(\mathbf{k})[1 - f(\mathbf{k}')]\}, \quad (3)$$

в котором  $W(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}')$  — вероятность перехода электрона из состояния  $\mathbf{k}$  в  $\mathbf{k}'$ . Основные механизмы рассеяния в полупроводниках-нитридах не изменяют спин электрона, поэтому суммирование по спину в интеграле столкновений отсутствует.

Решить это уравнение для поставленной задачи в полупроводниках-нитридах методами уравнений баланса не удаётся, поскольку не выполняются необходимые соотношения между интенсивностями важнейших механизмов электронного рассеяния.

Мощным методом численного решения задач нелинейного транспорта является хорошо известный метод Монте-Карло [17], который позволяет проводить вычисления для широкого класса систем с хорошей точностью. Однако при решении нелинейного уравнения Больцмана этот метод становится вычислительно громоздким, осложнения возникают и при исследовании с его помощью переходных процессов.

В последнее время активно развиваются детерминистические методы решения кинетического уравнения Больцмана [13, 15], основанные на линейной по функции распределения аппроксимации интеграла столкновений. Однако они не могут быть применены при исследовании веществ, в которых статистика электронного газа вырожденна, т. е. когда нельзя пренебречь заполнением электронами конечных состояний, т. е. заменить  $1 - f$  на единицу. Но в InN и родственных ему материалах концентрация электронов настолько высока, что электронное распределение вырожденно даже при комнатных температурах, поэтому данные методы также не подходят.

Задача нелинейного электронного транспорта в InN уже привлекала внимание исследователей. Так, в [12, 14, 19–22, 24] она решалась методом Монте-Карло, в [23] — методами неравновесной термодинамики. Однако почти во всех перечисленных работах (см. [12, 14, 20–24]) поставленная задача решалась для относительно небольших концентраций электронов  $N = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ , и ни в одной из этих работ не приводится сравнения полученных численно результатов с экспериментальными данными. Объяснить это можно отсутствием таких данных: современные технологии не позволяют получать кристаллы  $n$ -InN с концентрацией электронов меньше  $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$  [6]. Так, единственные известные нам экспериментальные данные были получены в [26] на образцах с плотностью носителей заряда  $N = 9 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  при температуре  $T = 77 \text{ K}$ . В этих

условиях электронный газ существенно вырожден и, как уже говорилось выше, упомянутые методы встречаются со сложностями.

В данной работе предложен и применён к модели однородного нитрида индия  $n$ -типа эффективный итерационный метод решения уравнения Больцмана. Он позволяет не только находить стационарный вид функции распределения, но и изучать её временную эволюцию. Полученные численно результаты сравниваются с экспериментальными данными [26].

## 2. Физическая модель

Рассматривается массивный образец InN  $n$ -типа с концентрацией электронов в зоне проводимости  $N = 9 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , не меняющейся в электрическом поле, при температуре решётки  $T = 77 \text{ K}$ . Считается, что концентрация заряженных примесей  $N_i$  равна концентрации носителей заряда, т. е. дырки в валентной зоне не влияют на транспорт. Также считается, что нагревание электронного газа не вызывает заметного разогрева решётки (фононного газа) за время эксперимента из-за большой теплоёмкости решётки.

### 2.1. Параметры материала

Поскольку нитрид индия ещё недостаточно изучен, в литературе встречаются различные значения параметров этого материала. В численном эксперименте мы будем использовать параметры, рекомендованные в [25] (табл. 1).

Сложную структура зоны проводимости мы аппроксимируем двумя долинами. Дно зоны проводимости в InN находится в точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна. Закон дисперсии электронов в окрестности этой точки можно считать изотропным с хорошей степенью точности и взять в виде

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_\Gamma} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon), \quad (4)$$

фактор  $\alpha$  учитывает непараболичность спектра. В модели Кейна значение  $\alpha$  определяется формулой

$$\alpha = \frac{1}{\varepsilon_g} \left(1 - \frac{m_\Gamma}{m_0}\right)^2, \quad (5)$$

где  $m_0$  — масса свободного электрона.

Ближайший по энергии вышерасположенный минимум зоны проводимости находится в точке A зоны Бриллюэна. Закон дисперсии электронов в окрестности этой точки считается параболическим и сферически симметричным:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_A}, \quad (6)$$

здесь вектор  $\mathbf{k}$  отсчитывается от точки A, энергия — от дна A-долины.

Таблица 1. Параметры InN

Величина	Обозначение	Единицы	Значение
эффективная масса в $\Gamma$ -долине	$m_{\Gamma}$	$m_0$	0,12
эффективная масса в A-долине	$m_A$	$m_0$	1,0
ширина запрещённой зоны	$\varepsilon_g$	эВ	2,0
расстояние между минимумами $\Gamma$ -долины и A-долины	$\Delta_{\Gamma-A}$	эВ	2,2
энергия LO-фонона	$\hbar\omega_{LO}$	мэВ	73
энергия TO-фонона	$\hbar\omega_{TO}$	мэВ	57
высокочастотная диэлектрическая проницаемость	$\varepsilon_{\infty}$		8,4
статическая диэлектрическая проницаемость	$\varepsilon_0$		15,3
продольная скорость звука	$s_{LA}$	$10^5$ см/с	6,24
поперечная скорость звука	$s_{TA}$	$10^5$ см/с	2,55
акустический деформационный потенциал	$D_A$	эВ	7,1
оптический деформационный потенциал	$D_O$	эВ/см	$10^9$
пьезомодуль	$e_{14}$	$K/m^2$	0,375
плотность массы	$\rho$	г/см <sup>3</sup>	6,81

## 2.2. Механизмы рассеяния

Теория рассеяния носителей заряда в твёрдых телах подробно изложена в [5]. Здесь мы приведём необходимые нам основные результаты и представим вероятности рассеяния в том виде, в котором они будут использованы далее.

Рассеяние на заряженных примесях в твёрдых телах является практически упругим. Вероятность рассеяния для него имеет вид

$$W_i(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_i}{V} \left( \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0} \right)^2 \frac{\zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)}{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^4} \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')). \quad (7)$$

Интеграл перекрытия блоховских амплитуд волновых функций  $\zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  возникает вследствие непараболичности закона дисперсии. Для нормальных процессов (процессы переброса мы не рассматриваем, так как их вероятность значительно ниже из-за большой передачи импульса)

$$\zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left| \int_{\text{cell}} d^3r u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right|^2,$$

где  $u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$  и  $u_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r})$  — блоховские амплитуды электронных волновых функций начального и конечного состояния соответственно, интегрирование идёт по элементарной ячейке. Для внутридолинных переходов в  $\Gamma$ -долине с непараболическим законом дисперсии (4) интеграл перекрытия равен

$$\zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\left\{ \sqrt{[1 + \alpha\varepsilon(k)][1 + \alpha\varepsilon(k')] + \alpha\sqrt{\varepsilon(k)\varepsilon(k')}\frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{kk'}} \right\}^2}{[1 + 2\alpha\varepsilon(k)][1 + 2\alpha\varepsilon(k')]}, \quad (8)$$

для внутридолинных переходов в параболической  $A$ -долине и для междолинных переходов мы считаем интеграл перекрытия единичным.

Член  $S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|)$  в вероятности возникает при учёте дебаевского экранирования потенциала примеси:

$$S(q) = \left( \frac{\lambda^2 q^2}{1 + \lambda^2 q^2} \right)^2,$$

где  $\lambda$  — длина экранирования, которая может быть вычислена по формуле

$$\frac{1}{\lambda} = \sqrt{\frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0} \left| \sum_{\mathbf{k}} \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \varepsilon(\mathbf{k})} \right|}. \quad (9)$$

Заметим, что в предельных случаях вырожденной и невырожденной статистики формула (9) сводится к известным результатам теорий Томаса—Ферми и Дебая соответственно.

Для рассеяния на фононах (колебаниях решётки) вероятность переходов имеет вид

$$W_{\pm}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \times \\ \times \sum_j \left\{ B_j(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \left[ N_j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}') \mp \hbar\omega_j(\mathbf{k} - \mathbf{k}')) \right\},$$

где знак «+» относится к процессам рассеяния с испусканием, а знак «−» — с поглощением фонона, суммирование по  $j$  ведётся по всем типам и поляризациям фононов, с которыми взаимодействуют электроны.

Законы дисперсии продольных и поперечных акустических фононов для простоты считаются линейными по их волновому вектору  $\mathbf{q}$ :

$$\omega_{\text{LA}}(\mathbf{q}) = s_{\text{LA}}q, \quad \omega_{\text{TA}}(\mathbf{q}) = s_{\text{TA}}q,$$

а оптические фононы, как продольные, так и поперечные, полагаются бездисперсионными:

$$\omega_{\text{LO}}(\mathbf{q}) = \omega_{\text{LO}}, \quad \omega_{\text{TO}}(\mathbf{q}) = \omega_{\text{TO}}.$$

Число фононов  $j$ -й ветви  $N_j(\mathbf{q})$  определяется из распределения Бозе с температурой решётки  $T$ .

Множитель  $B(q)$  в вероятности рассеяния для различных типов фононов имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} B_{\text{DA}}(q) &= \frac{\hbar D_{\text{A}}^2}{2\rho s} q, \\ B_{\text{PA}}(q) &= \frac{\hbar e^2 D_{\text{PZ}}^2}{2\rho s q}, \\ B_{\text{DO}}(q) &= \frac{\hbar D_{\text{O}}^2}{2\omega\rho}, \\ B_{\text{PO}}(q) &= \frac{2\pi e^2}{\bar{\kappa}} \frac{\hbar\omega}{q^2}, \end{aligned}$$

где  $D_{\text{PZ}} = 4\pi e_{14}/\kappa_0$  — пьезоэлектрическая константа,

$$\frac{1}{\bar{\kappa}} = \frac{1}{\kappa_{\infty}} - \frac{1}{\kappa_0}.$$

Важно заметить, что DA- и PO-рассеяние возможны только на продольных фононах, а PA- и DO-рассеяние — и на продольных, и на поперечных.

Обычно рассеяние на акустических фононах можно считать упругим. В этом случае вероятность рассеяния на акустических фононах (AP) может быть записана в виде

$$\begin{aligned} W_{\text{AP}}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \zeta(\mathbf{k}, \mathbf{k}') S(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \delta(\varepsilon(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k}')) \times \\ &\quad \times \sum_j B_j(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) [2N_j(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + 1], \end{aligned}$$

суммирование ведётся по всем ветвям спектра акустических фононов.

В  $\Gamma$ -долине учтены механизмы рассеяния на заряженных примесях (i), деформационных (DA) и поляризационных (PA) акустических фононах, поляризационных (PO) оптических фононах. В  $A$ -долине к ним добавляется ещё рассеяние на DO-фононах.

Из междолинных механизмов только вероятности рассеяния на DO- и DA-фононах имеют ненулевую асимптотику вероятности при  $q \rightarrow \infty$ . Однако при температуре  $T = 77\text{ K}$  междолинное DA-рассеяние существенно слабее, чем DO-рассеяние, и поэтому им мы пренебрегаем. Для междолинных переходов можно не учитывать экранирование, так как  $S(q) \rightarrow 1$  при  $q \rightarrow \infty$ , что позволяет существенно упростить задачу при наличии нескольких эквивалентных долин.

Также заметим, что учёт зависимости длины экранирования от распределения электронов приводит к тому, что интеграл столкновений остаётся нелинейным по функции распределения даже в случае невырожденной статистики. Таким образом, известные методы не вполне удобны для решения поставленной задачи. Предлагаемый в работе метод требует лишь гладкости функции распределения.

### 3. Метод вычислений

Наличие нескольких долин в электронном спектре полупроводника приводит к тому, что надо решать систему связанных уравнений Больцмана для функций распределения во всех долинах:

$$\frac{\partial f_j(\mathbf{k})}{\partial t} = -\frac{e\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial f_j(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \widehat{\text{St}}(f_j) + \sum_{i \neq j}^l \widehat{\text{St}}_{\text{IV}}(f_j, f_i), \quad j = 1, \dots, l, \quad (10)$$

где  $l$  — число долин. Связь между уравнениями возникает за счёт междолинных переходов частиц.

Аналогичным образом меняется условие нормировки:

$$\sum_{i=0}^l \sum_{\mathbf{k}} f_i(\mathbf{k}) = NV. \quad (11)$$

В зоне проводимости нитрида индия есть основная  $\Gamma$ -долина и расположенная выше  $A$ -долина, так что в данном случае  $l = 2$ .

#### 3.1. Интеграл столкновений

Прежде чем приступить к описанию использованного численного метода, заметим, что суммы, стоящие в интеграле столкновений (3) в случае дискретного спектра электронов, в однородном макроскопическом образце с его непрерывным спектром электронов сводятся к интегралам по пространству электронных импульсов. В нашей системе имеется единственное выделенное направление, задаваемое приложенным полем, поэтому эти интегралы можно преобразовать, учитывая аксиальную симметрию функции распределения  $f(\mathbf{k}) = f(k_{\parallel}, k_{\perp})$ . Для удобства запишем интеграл столкновений для первой долины (для второй все будет аналогично) в виде суммы членов,

$$\widehat{\text{St}} = \widehat{\text{St}}_1 + \widehat{\text{St}}_{\text{OP}} + \widehat{\text{St}}_{\text{AP}} + \widehat{\text{St}}_{\text{IV}}(1), \quad (12)$$

и рассмотрим каждый член отдельно в сферической системе координат с полярной осью, параллельной полю.

Введём вспомогательные функции

$$\begin{aligned} \Psi(k_{\parallel}, k_{\perp}, \theta, \varphi) &= \frac{k_{\parallel} \cos \theta + k_{\perp} \sin \theta \cos \varphi}{k}, \\ q^2(k_{\parallel}, k_{\perp}, k', \theta, \varphi) &= k^2 + k'^2 - 2kk' \Psi(k_{\parallel}, k_{\perp}, \theta, \varphi), \\ D(k) &= \frac{1}{\pi^2} \int dk' k'^2 \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k)). \end{aligned}$$

Поясним смысл введённых функций и обозначений, использованных для их записи.



Состояние электрона до рассеяния  $\mathbf{k}$  задаётся в импульсном пространстве координатами  $(k_{\parallel}, k_{\perp})$ , при этом  $k^2 = k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2$ . Состояние после рассеяния  $\mathbf{k}'$  задаётся координатами  $(k', \theta, \varphi)$ ,  $k'$  — модуль вектора,  $\theta$  — угол между  $\mathbf{k}'$  и осью  $z$ ,  $\varphi$  — угол между проекциями векторов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  на плоскость, перпендикулярную оси  $z$ . Функция  $\Psi(k_{\parallel}, k_{\perp}, \theta, \varphi)$  определяет косинус угла между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ , функция  $q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k', \theta, \varphi)$  — расстояние между точками  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  в  $\mathbf{k}$ -пространстве, функция  $D(k)$  — плотность состояний. Для закона дисперсии (4) будем иметь

$$D(k) = \frac{m_{\Gamma} k}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{1 + \frac{2\alpha \hbar^2 k^2}{m_{\Gamma}}}.$$

Также удобно сразу записать в используемых координатах интеграл перекрытия (8):

$$\zeta(k_{\parallel}, k_{\perp}, k', \theta, \varphi) = \frac{\left\{ \sqrt{[1 + \alpha\varepsilon(k)][1 + \alpha\varepsilon(k')] + \alpha\sqrt{\varepsilon(k)\varepsilon(k')}\Psi(k_{\parallel}, k_{\perp}, \theta, \varphi)} \right\}^2}{[1 + 2\alpha\varepsilon(k)][1 + 2\alpha\varepsilon(k')]}.$$

Теперь для первого слагаемого будем иметь

$$\widehat{St}_i = \left( \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} \right)^2 \frac{ND(k)}{2\hbar} \int_{-1}^1 d \cos \theta [f(k \cos \theta, k \sin \theta) - f(k_{\parallel}, k_{\perp})] \times \\ \times \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\zeta(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi) S(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi))}{q^4(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)}.$$

В члене  $\widehat{St}_i$  остаётся интегрирование по двум переменным в конечных пределах, при этом по  $\varphi$  интегрирование может быть проведено в пределах от 0 до  $\pi$ , а результат умножен на два. Заметим также, что если фактор перекрытия  $\zeta$  тождественно равен единице, как в квадратичном спектре, то интегрирование по  $\varphi$  может быть проведено аналитически:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \frac{S(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi))}{q^4(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)} = 2\pi \frac{2k^2 - 2k_{\parallel}k' \cos \theta + \lambda^{-2}}{[(2k^2 - 2k_{\parallel}k' \cos \theta + \lambda^{-2})^2 - (2k_{\perp}k' \sin \theta)^2]^{3/2}}.$$

Таким образом, в члене в интеграле столкновений, описывающем внутримолекулярное рассеяние на заряженных примесях в побочной долине, остаётся только одно интегрирование в конечных пределах.

Для оптических фононов будем иметь

$$\widehat{St}_{OP} = \frac{1}{2\hbar} \sum_j (\widehat{St}_{OP,j}^+ + \widehat{St}_{OP,j}^-),$$

суммирование ведётся по ветвям оптических фононов,

$$\begin{aligned}
\widehat{\text{St}}_{\text{OP},j}^+ &= D(k'_{j,+}) \int_{-1}^1 d \cos \theta \{ f(k'_{j,+} \cos \theta, k'_{j,+} \sin \theta) [1 - f(k_{\parallel}, k_{\perp})] (N_j + 1) - \\
&\quad - f(k_{\parallel}, k_{\perp}) [1 - f(k'_{j,+} \cos \theta, k'_{j,+} \sin \theta)] N_j \} \times \\
&\quad \times \int_0^{2\pi} d\varphi \zeta(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,+}, \theta, \varphi) S(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,+}, \theta, \varphi)) B_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,+}, \theta, \varphi)), \\
\widehat{\text{St}}_{\text{OP},j}^- &= D(k'_{j,-}) \int_{-1}^1 d \cos \theta \{ f(k'_{j,-} \cos \theta, k'_{j,-} \sin \theta) [1 - f(k_{\parallel}, k_{\perp})] N_j - \\
&\quad - f(k_{\parallel}, k_{\perp}) [1 - f(k'_{j,-} \cos \theta, k'_{j,-} \sin \theta)] (N_j + 1) \} \times \\
&\quad \times \int_0^{2\pi} d\varphi \zeta(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,-}, \theta, \varphi) S(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,-}, \theta, \varphi)) B(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,-}, \theta, \varphi)),
\end{aligned}$$

$k'_{j,\pm}$  определяется для каждой ветви из уравнений

$$\varepsilon(k'_{j,\pm}) = \varepsilon(k) \pm \hbar\omega_j,$$

$N_j$  даётся распределением Бозе. Разумеется, при  $\varepsilon(k) - \hbar\omega_j < 0$  член  $\widehat{\text{St}}_{\text{OP},j}^-$  не учитывается. Интегрирование по  $\varphi$  может быть проведено в пределах от 0 до  $\pi$ , результат при этом должен быть удвоен. Нетрудно заметить, что в членах, описывающих рассеяние на оптических фононах, остаётся интегрирование по двум переменным в конечных пределах, которое должно быть проведено для всех ветвей оптических фононов, на которых идёт рассеяние.

Для акустических фононов в упругом приближении будем иметь

$$\begin{aligned}
\widehat{\text{St}}_{\text{qel AP}} &= \frac{D(k)}{2\hbar} \int_{-1}^1 d \cos \theta [f(k \cos \theta, k \sin \theta) - f(k_{\parallel}, k_{\perp})] \times \\
&\quad \times \int_0^{2\pi} d\varphi \zeta(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi) S(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) \times \\
&\quad \times \sum_j B_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) [2N_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) + 1],
\end{aligned}$$

суммирование ведётся по поляризациям акустических фононов, включённым в модель, интегрирование по  $\varphi$  следует проводить как в двух предыдущих случаях. Таким образом, и в членах, описывающих рассеяние на акустических фононах, в упругом приближении остаётся интегрирование по двум переменным в конечных пределах, которое должно быть проведено для акустических фононов всех тех ветвей, рассеяние на которых является важным.

В случае когда для рассеяния на акустических фононах недостаточно ограничиться упругим приближением, вычислительная сложность задачи существенно

повышается. Однако неупругость рассеяния на акустических фононах может быть легко учтена приближённо, если пренебречь её влиянием на величину импульса фонона, что обусловлено малостью его скорости по сравнению со скоростью электрона. Итак, используя ту же зависимость  $q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)$ , что и в упругом приближении, будем иметь

$$\widehat{St}_{\text{qel AP}} = \frac{1}{2\hbar} \sum_j (\widehat{St}_{\text{qel AP},j}^+ + \widehat{St}_{\text{qel AP},j}^-),$$

суммирование ведётся по поляризациям акустических фононов, включённым в модель,

$$\begin{aligned} \widehat{St}_{\text{qel AP},j}^+ &= D(k'_{j,+}) \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ &\times S(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) B_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) \zeta(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,+}, \theta, \varphi) \times \\ &\times \{ f(k'_{j,+} \cos \theta, k'_{j,+} \sin \theta) [1 - f(k_{\parallel}, k_{\perp})] [N_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) + 1] - \\ &- f(k_{\parallel}, k_{\perp}) [1 - f(k'_{j,+} \cos \theta, k'_{j,+} \sin \theta)] N_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) \}, \\ \widehat{St}_{\text{qel AP},j}^- &= D(k'_{j,-}) \int_{-1}^1 d \cos \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \times \\ &\times S(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) B_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) \zeta(k_{\parallel}, k_{\perp}, k'_{j,-}, \theta, \varphi) \times \\ &\times \{ f(k'_{j,-} \cos \theta, k'_{j,-} \sin \theta) [1 - f(k_{\parallel}, k_{\perp})] N_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) - \\ &- f(k_{\parallel}, k_{\perp}) [1 - f(k'_{j,-} \cos \theta, k'_{j,-} \sin \theta)] [N_j(q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi)) + 1] \}. \end{aligned}$$

$k'_{j,\pm}(k_{\parallel}, k_{\perp}, \theta, \varphi)$  для  $j$ -го типа акустических фононов определяется из разложения

$$k'_{j,\pm}(k_{\parallel}, k_{\perp}, \theta, \varphi) = k \pm \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^{-1} \hbar s_j q(k_{\parallel}, k_{\perp}, k, \theta, \varphi),$$

основанного на малости энергии фонона по сравнению с энергией электрона в тех точках  $\mathbf{k}$ -пространства, где будет вычисляться интеграл столкновений.

Нетрудно заметить, что члены, описывающие рассеяние на акустических фононах с приближённым учётом неупругости такого рассеяния, аналогичны членам в интеграле столкновений, описывающим рассеяние на оптических фононах. Однако проведение этого интегрирования для акустических фононов требует значительно больше вычислительного времени, так как под двойной интеграл попадают теперь все функции.

Далее, для междолинных переходов

$$\widehat{St}_{\text{IV}}(1) = \frac{1}{2\hbar} 2\pi \sum_j B_{\text{DO},j} [\widehat{St}_j^+(1) + \widehat{St}_j^-(1)],$$

суммирование ведётся по ветвям DO-фононов,

$$\begin{aligned}\widehat{\text{St}}_j^+(1) &= D(k'_{j,+2}) \int_{-1}^1 d \cos \theta \{ f(k'_{j,+2} \cos \theta, k'_{j,+2} \sin \theta) [1 - f(k_{\parallel,1}, k_{\perp,1})] \times \\ &\quad \times (N_j + 1) - f(k_{\parallel,1}, k_{\perp,1}) [1 - f(k'_{j,+2} \cos \theta, k'_{j,+2} \sin \theta)] N_j \}, \\ \widehat{\text{St}}_j^-(1) &= D(k'_{j,-2}) \int_{-1}^1 d \cos \theta \{ f(k'_{j,-2} \cos \theta, k'_{j,-2} \sin \theta) [1 - f(k_{\parallel,1}, k_{\perp,1})] N_j - \\ &\quad - f(k_{\parallel,1}, k_{\perp,1}) [1 - f(k'_{j,-2} \cos \theta, k'_{j,-2} \sin \theta)] [N_j + 1] \},\end{aligned}$$

$k'_{j,\pm,2}$  определяется для каждого  $j$  из уравнений

$$\varepsilon(k'_{j,\pm,2}) = \varepsilon_1(k_1) - \Delta_{12} \pm \hbar \omega_j,$$

$N_j$  находится из распределения Бозе. Разумеется, если для  $j$ -го члена суммы справедливо  $\varepsilon_1(k_1) - \Delta_{12} \pm \hbar \omega_j < 0$ , соответствующий член в сумме полагается равным нулю.

Для долины вторая часть интеграла столкновений, отвечающая за междолинные переходы, будет иметь тот же вид, но с заменой индексов 1 и 2. Также меняются уравнения для определения  $k'_{j,\pm,1}$ :

$$\varepsilon(k'_{j,\pm,1}) = \varepsilon_2(k_2) + \Delta_{12} \pm \hbar \omega_j.$$

### 3.2. Описание численного метода

Рассмотрим сначала для простоты однодолинную модель  $l = 1$ . Задача нахождения функции распределения решается на двумерной сетке в пространстве волновых чисел

$$\begin{aligned}k_{\parallel}^i &= -k_{\max} + \left(i + \frac{1}{2}\right) \Delta_0, \quad i = 0, 1, \dots, \frac{2k_{\max}}{\Delta_0} - 1, \\ k_{\perp}^j &= j \Delta_0, \quad j = 0, 1, \dots, \frac{k_{\max}}{\Delta_0}.\end{aligned}$$

Выбор  $k_{\max}$  зависит от величины приложенного поля. С одной стороны, необходимо, чтобы основная часть функции распределения находилась в области симуляции. С другой стороны, при выборе слишком большого значения  $k_{\max}$  увеличиваются вычислительные затраты.

Разумеется, далекие экспоненциально малые «хвосты» распределения неизбежно окажутся за пределами области размером  $k_{\max}$ , но число описываемых ими носителей и их роль в транспорте тоже экспоненциально малы, так что ими можно пренебречь. Исключение могут составлять задачи типа ионизации, где важны именно электроны с большой энергией, но здесь мы такими проблемами не занимаемся.

Значения функции распределения между точками сетки находятся с помощью бикубической сплайн-интерполяции [18]. Отметим, что при гладкой функ-

ции распределения и хорошей её аппроксимации между точками сетки сама эта сетка может быть довольно редкой.

Интересующее нас стационарное решение уравнения Больцмана находится с помощью итерационного метода, построенного на основе зависящего от времени уравнения (10). На итерации можно с этой точки зрения смотреть как на временную эволюцию функции распределения в соответствии с уравнениями (10).

В момент времени  $t = 0$  задаётся некоторое начальное приближение  $f_{ij}^0 = f^0(k_{\parallel}^i, k_{\perp}^j)$ . Итерационный шаг с  $n$ -го на  $(n+1)$ -й временной слой организован следующим образом. Функция распределения интерполируется из узлов сетки в  $(k_{\parallel}, k_{\perp})$ -пространство. Интерполированные значения функции распределения  $f^n(k_{\parallel}, k_{\perp})$  подставляются в формулу (9) для вычисления длины экранирования  $\lambda^{(n)} = \lambda(f^n)$  и в интеграл столкновений. Значения интеграла столкновений  $\hat{S}t_{ij}$  вычисляются только для узлов сетки по формулам раздела 3.1. Заметим, что интегрирование может быть проведено с необходимым шагом, никак не связанным с шагом сетки. Переход на следующий временной слой осуществляется вычислением новых значений функции распределения в узлах сетки непосредственно из транспортного уравнения Больцмана (10),

$$f_{ij}^{n+1} = f^n \left( k_{\parallel} - \frac{eE}{\hbar} \Delta t, k_{\perp} \right) + \Delta t \hat{S}t_{ij},$$

и перенормировкой (11),  $\Delta t$  — шаг по времени. Затем определяются необходимые средние величины (волновой вектор, скорость, энергия и т. п.). Итерационная процедура повторяется до достижения сходимости.

Все сказанное в этом разделе пока относилось к однодолинной модели, однако без труда может быть обобщено на случай  $l$  долин. При этом должна решаться задача поиска  $l$  функций распределения на  $l$  сетках. Каждая из этих функций находится как описано выше, при этом к интегралу столкновений должны быть добавлены члены, описывающие междолинные переходы (см. раздел 3.1). Они зависят от функций распределения в других долинах. Таким образом, для всей системы должна быть проведена единая итерационная процедура, которая должна повторяться до достижения сходимости во всех долинах.

В качестве начального приближения мы для простоты использовали фермиевскую функцию  $F(k, T, \mu_0)$  с решёточной температурой и химическим потенциалом, соответствующим нулевой температуре, умноженную на коэффициент, определяемый из условия нормировки.

## 4. Некоторые результаты

### 4.1. Поля до 15 кВ/см

В экспериментальной работе [26] представлены результаты для полей менее 15 кВ/см при температуре решётки  $T = 77$  К. В этом разделе мы проведём расчёт

электронного транспорта в полях до  $15 \text{ кВ/см}$  при этой температуре и сравним полученные результаты с данными, полученными в [26].

Для рассматриваемого диапазона электрических полей мы пользовались однодолинным приближением, размер области симуляции брался  $k_{\text{max}} = 1,2 \times 10^7 \text{ см}^{-1}$ . Функция распределения при этом хорошо локализована в глубине области симуляции (рис. 1).

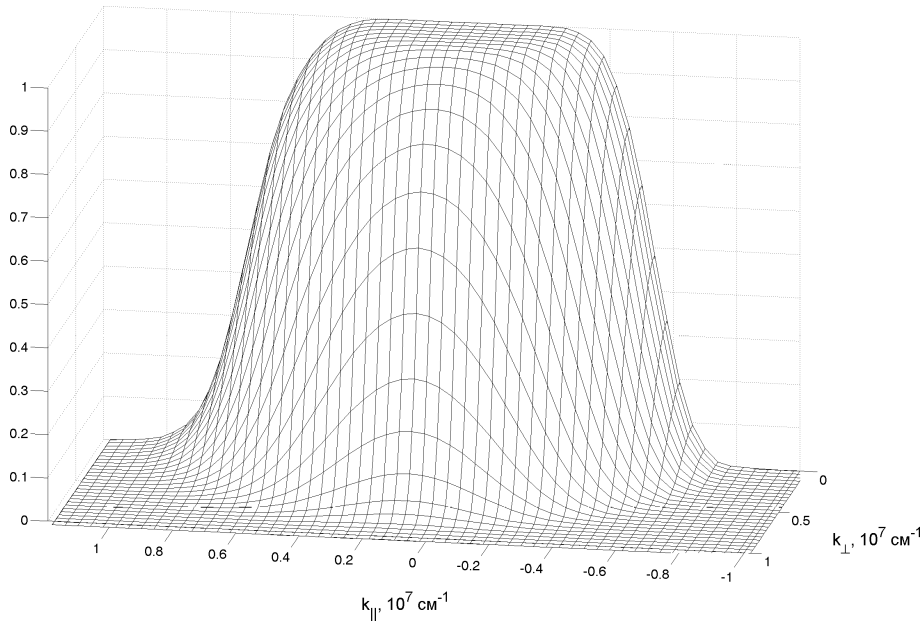


Рис. 1. Функция распределения,  $E = 15 \text{ кВ/см}$ ,  $T = 77 \text{ К}$ . Расчёт проводился на сетке размером  $15 \times 30$  с шагом по времени  $\Delta t = 10^{-15} \text{ с}$ . Время симуляции равно  $t_{\text{sim}} = 0,5 \times 10^{-12} \text{ с}$ . Видно, что поле смещает функцию распределения влево, в сторону увеличения  $k_{\parallel}$

Сходимость метода проверялась в следующих тестах (рис. 2). При фиксированном значении поля  $E = 15 \text{ кВ/см}$  проводились вычисления с различными  $\Delta t$  и числом узлов сетки. Оптимальным оказался шаг  $\Delta t = 10^{-15} \text{ с}$  и сетка размером  $15 \times 30$ . На рис. 2 хорошо видно, что при увеличении числа узлов сетки и при уменьшении шага по времени результат не меняется. В тестах также было проверено, что сходимость имеет место и для самой функции распределения, а не только для дрейфовой скорости. К сожалению, наглядно представить это на рисунке затруднительно. Взяв в качестве начального приближения функцию, отличную от фермиевской, например

$$F_{\text{n/eq}}(k) = F(k, T, \mu_0) + \cos(10^{-6}k),$$

можно убедиться, что результат не зависит от начального приближения (рис. 2, п/eq).

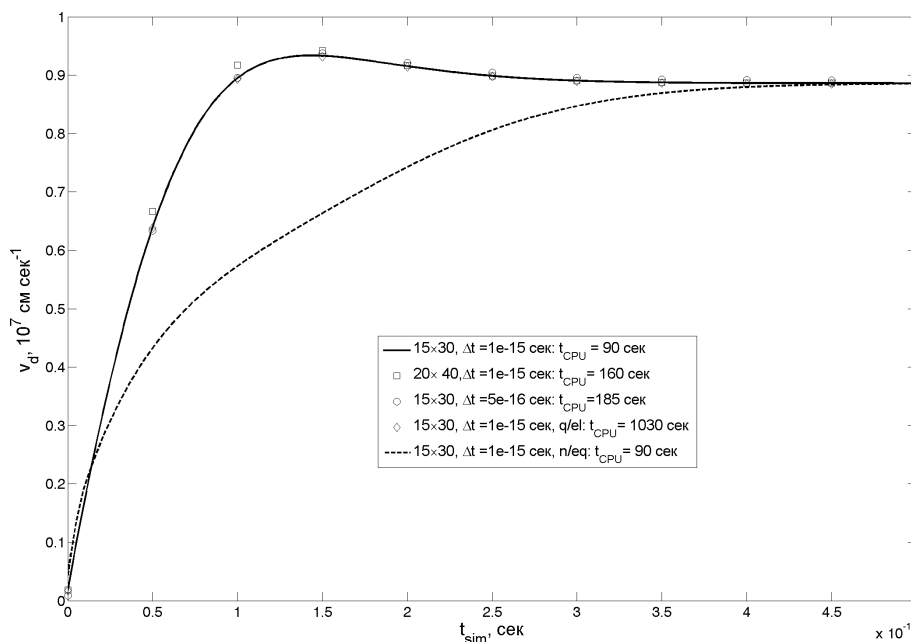


Рис. 2. Иллюстрация сходимости. Зависимость дрейфовой скорости  $v_d$  от числа шагов (условного времени вычислений) при различных параметрах численной схемы.  $E = 15 \text{ кВ/см}$ ,  $T = 77 \text{ К}$

На рис. 2 также можно видеть, что результат слабо зависит и от того, в упругом или неупругом ( $q/el$ ) приближении было учтено рассеяние на акустических фонах (в последнем случае имеется в виду приближённый учёт неупругости, описанный в разделе 3.1). Однако использование неупругого приближения сильно увеличивает время вычислений, так как под двойной интеграл попадают фактор перекрытия и интерполируемые функции. Поэтому в дальнейших расчётах акустическое рассеяние будет учитываться в упругом приближении.

На рис. 2 также показано, какому компьютерному времени  $t_{\text{CPU}}$  (Intel Core 2 Duo T72500, 2 GHz, использовалось одно ядро) соответствует время симуляции  $t_{\text{sim}} = 5 \cdot 10^{-13} \text{ с}$  при использовании различных параметров численного метода.

На рис. 3 представлено сравнение рассчитанной полевой зависимости дрейфовой скорости  $v_d$  и экспериментальных данных, полученных в [26]. Для расчёта использовались оптимальные параметры численного метода (сетка  $15 \times 30$ , шаг по времени  $\Delta t = 10^{-15} \text{ с}$ ), определённые на основе анализа сходимости (рис. 2). Видно, что результат моделирования очень хорошо согласуется с экспериментальными данными.

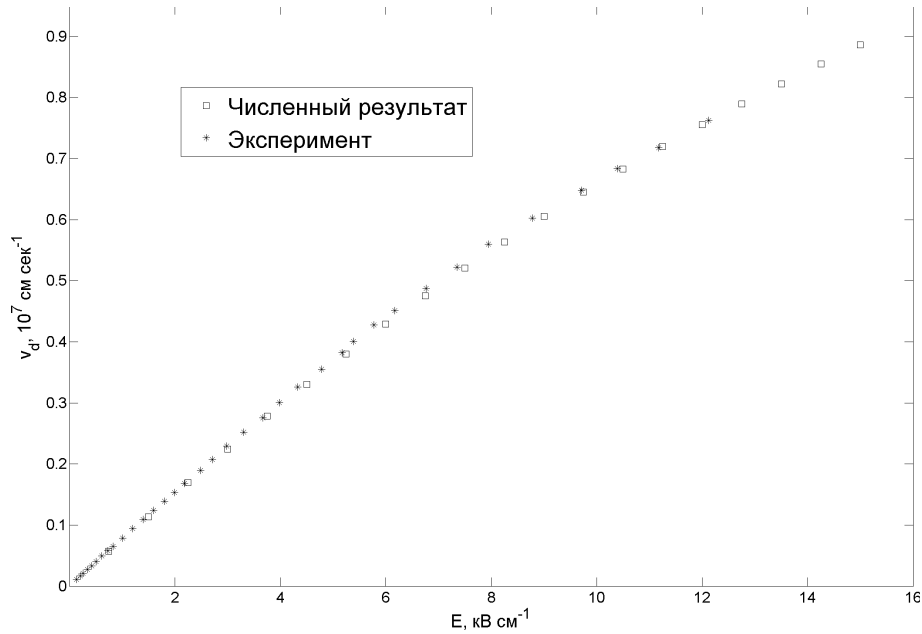


Рис. 3. Вычисленная полевая зависимость дрейфовой скорости  $v_d$  и экспериментальные данные [26]. Вычисления  $v_d$  проводились на сетке размером  $15 \times 30$ , время симуляции  $t_{\text{sim}} = 0,5 \times 10^{-12} \text{ c}$ , шаг по времени  $\Delta t = 10^{-15} \text{ c}$

## 4.2. Поля более $15 \text{ кВ/см}$

В этом разделе мы приведем результаты моделирования для сильных электрических полей. По-прежнему будем считать, что  $N = 9 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $T = 77 \text{ K}$ . Рассеяние на акустических фононах будем учитывать в упругом приближении.

Что же касается размера области моделирования  $k_{\text{max}}$  и размера сетки, то они будут корректироваться каждые  $15 \text{ кВ/см}$  на основе анализа сходимости для различных размеров сетки и требования локализации функции распределения в области импульсного пространства, охватываемой сеткой, подобно тому, как это было сделано в предыдущем разделе. Критерием выбора  $k_{\text{max}}$  для каждой из долин является хорошая локализация соответствующей функции распределения в глубине области симуляции. Число узлов сетки для каждой из долин выбирается таким, чтобы при его увеличении результат моделирования не изменялся. Шаг по времени выбирается таким, чтобы при его уменьшении результат моделирования не изменялся.

Дополнительно каждые  $15 \text{ кВ/см}$  проверялась возможность ограничиться однодолинным приближением. Другими словами, если включение побочной долины в модель не меняло результата для какого-то поля, то в полях, меньших указанного, можно было ограничиться однодолинным приближением. Разуме-



ется, можно было пользоваться многодолинной моделью во всем диапазоне рассматриваемых полей, но это потребовало бы намного большего вычислительного времени. Дело в том, что эффективная масса электрона в побочной долине, величина которой точно не известна, в наших вычислениях была принята равной массе свободного электрона. Это существенно уменьшает времена релаксации в ней, поскольку они обратно пропорциональны плотности состояний, которая тем больше, чем больше эффективная масса. Пробные расчёты показали, что из-за этого приходится уменьшать шаг по времени, к тому же время сходимости увеличивается.

В таблице 2 приведены параметры численного метода, которые мы использовали в различных интервалах полей.

Таблица 2. Параметры численного метода, использованные в различных интервалах полей.  
 $t_{sim}$  — время, достаточное для достижения сходимости

$E, \text{кВ/см}$	$\leq 15$	$\leq 30$	$\leq 50$	$> 50$
$k_{\max}, \text{см}^{-1}$	1,2	1,7	2,5	4,4
$\varepsilon(k_{\max}), \text{эВ}$	0,4	0,72	1,32	2,89
$k_{\max_A}, \text{см}^{-1}$	—			4,0
$\varepsilon_A(k_{\max_A}) + \Delta_{\Gamma-A}, \text{эВ}$	—			2,80
размер сетки в $\Gamma$ -долине	15 × 30			20 × 40
размер сетки в А-долине	—			10 × 20
$\Delta t, 10^{-15} \text{с}$	1,0			0,5
$t_{sim}, 10^{-12} \text{с}$	0,5			8,0

На рис. 4 показано, как изменяется вид проинтегрированной по  $k_{\perp}$  функции распределения

$$f(k_{\parallel}) = 2\pi \int dk_{\perp} k_{\perp} f(k_{\parallel}, k_{\perp})$$

при увеличении приложенного к образцу поля. Несмотря на то что функция распределения  $f(k_{\parallel})$  несёт в себе меньше информации, чем  $f(k_{\parallel}, k_{\perp})$ , её изменение в поле более наглядно. Отчётливо видно, что максимум этой функции смещается в направлении действующей на электроны силы, а её форма тем сильнее отличается от равновесной, чем сильнее приложенное поле.

На рис. 5 представлены полевые зависимости дрейфовой скорости и относительной заселённости электронами долин зоны проводимости в полях до 70 кВ/см. Уменьшение дрейфовой скорости с ростом поля, т. е. отрицательная дифференциальная подвижность, наблюдается в области полей, где начинают играть роль междолинные переходы. Действительно, при этом носители заряда переходят из центральной  $\Gamma$ -долины, где масса их невелика, а подвижность и

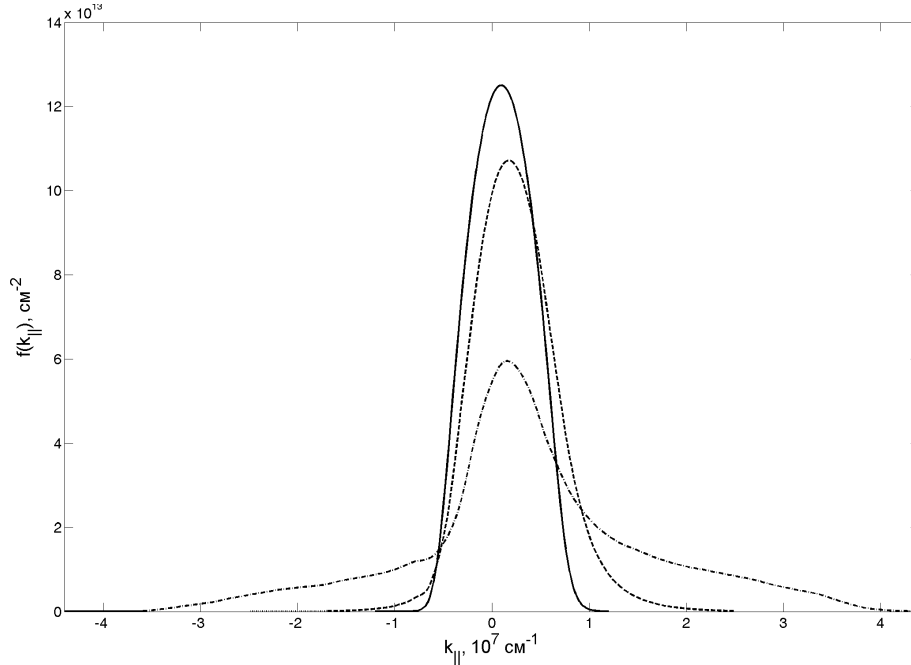


Рис. 4. Функция распределения электронов  $f(k_{\parallel})$  в различных полях. Сплошная линия соответствует полю  $E = 15 \text{ кВ/см}$ , штриховая линия —  $45 \text{ кВ/см}$ , штрихпунктирная линия —  $70 \text{ кВ/см}$ . Вычисления для каждого из полей проводились с параметрами метода, рекомендованными для этого поля в табл. 2

дрейфовая скорость высоки, в расположенную выше А-долину, где масса электронов значительно больше, а их подвижность и скорость меньше.

## Основные выводы

В работе проведено численное моделирование нелинейного электронного транспорта в InN с концентрацией электронов  $N = 9 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$  при температуре решётки  $T = 77 \text{ К}$ . Расчётная полевая зависимость дрейфовой скорости очень хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными данными.

Все результаты, представленные в работе, получены с помощью нового численного метода решения кинетического уравнения Больцмана в пространственно однородном случае. Предложенный нами метод основан на введении в импульсном пространстве сетки, на которой находится функция распределения, значения которой в точках сетки последовательно уточняются с помощью итерационной схемы, построенной на базе самого уравнения Больцмана.

Определены оптимальные вычислительные параметры разработанного метода, которые и использованы при моделировании. Предлагаемый метод пред-

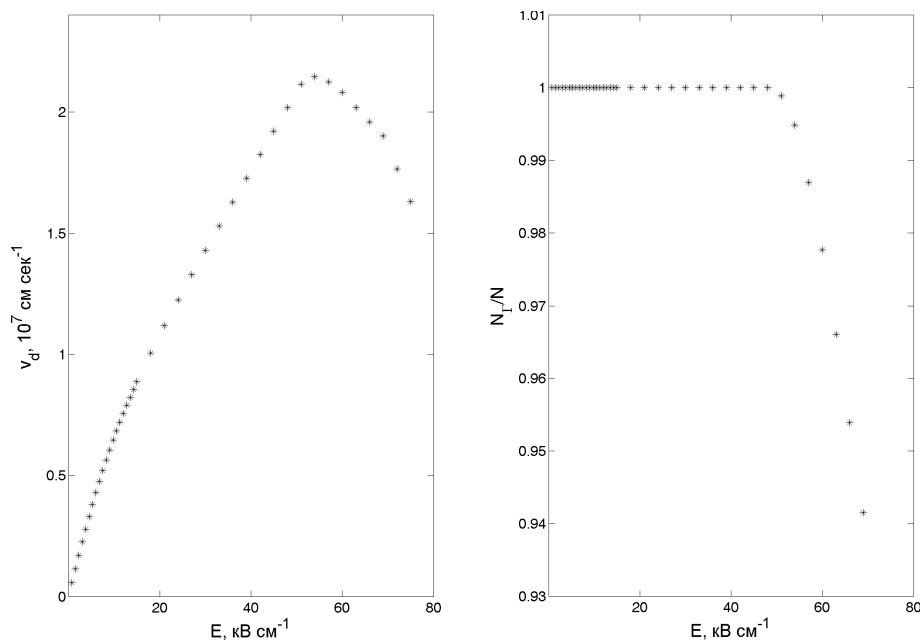


Рис. 5. Слева: полевая зависимость дрейфовой скорости электронов.  
 Справа: полевая зависимость относительной населённости основной долины.  
 Концентрация электронов  $N = 9 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ , температура решётки  $T = 77 \text{ K}$ . Параметры численного метода для различных диапазонов полей брались в соответствии с табл. 2

ставляется удобным средством для исследования кинетики носителей заряда в твёрдых телах, поскольку он не содержит подгоночных параметров, позволяет легко учитывать основные механизмы рассеяния, а также является довольно эффективным с вычислительной точки зрения. К тому же при его использовании не возникает никаких сложностей при исследовании переходных процессов, а также при изучении транспортных явлений в веществе с вырожденной статистикой носителей заряда.

Работа выполнена при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009—2013 годы» (контракт № П-2312).

## Литература

- [1] Абрикосов А. А. Основы теории металлов. — М.: Наука, 1987.
- [2] Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твёрдого тела. — М.: Мир, 1979.
- [3] Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г. Горячие электроны и сильные электромагнитные волны в плазме полупроводников и газового разряда. — М.: Наука, 1975.

- [4] Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. — М.: Наука, 1990.
- [5] Гантмахер В. Ф., Левинсон И. Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. — М.: Мир, 1984.
- [6] Давыдов В. Ю., Клочихин А. А. Электронные и колебательные состояния InN и твёрдых растворов  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  // Физика и техника полупроводников. — 2004. — Т. 38, № 8. — С. 897—936.
- [7] Займан Дж. Принципы теории твёрдого тела. — М.: Мир, 1974.
- [8] Киттель Ч. Введение в физику твёрдого тела. — М.: Наука, 1978.
- [9] Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах. — М.: Мир, 1976.
- [10] Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов. — М.: ИЛ, 1960.
- [11] Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. — М.: Мир, 1978.
- [12] Bellotti E., et al. Ensemble Monte Carlo study of electron transport in wurtzite InN // J. Appl. Phys. — 1999. — Vol. 85, no. 2. — P. 916—923.
- [13] Ertler C., Schruerrer F. A multicell matrix solution to the Boltzmann equation applied to the anisotropic electron transport in silicon // J. Phys. A. — 2003. — Vol. 36. — P. 8759—8774.
- [14] Foutz B. E., O'Leary S. K., Shur M. S., Eastman L. F. Transient electron transport in wurtzite GaN, InN, and AlN // J. Appl. Phys. — 1999. — Vol. 85, no. 11. — P. 7727—7734.
- [15] Galler M., Schruerrer F. A deterministic solution method for the coupled system of transport equations for the electrons and phonons in polar semiconductors // J. Phys. A. — 2004. — Vol. 37. — P. 1479—1497.
- [16] Humphreys C. J. Solid-state lighting // MRS Bulletin — 2008. — Vol. 33. — P. 459—470.
- [17] Jacoboni C., Reggiani L. The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials // Rev. Modern Phys. — 1983. — Vol. 55, no. 3. — P. 645—698.
- [18] Keys R. Cubic convolution interpolation for digital image processing // IEEE Trans. Acoust. Speech Signal Process. — 1981 — Vol. 29. — P. 1153.
- [19] O'Leary S. K., Foutz B. E., Shur M. S., Bhapkar U. V., Eastman L. F. Electron transport in wurtzite indium nitride // J. Appl. Phys. — 1998. — Vol. 83, no. 2. — P. 826—829.
- [20] O'Leary S. K., Foutz B. E., Shur M. S., Eastman L. F. Steady-state and transient electron transport within bulk wurtzite indium nitride: An updated semiclassical three-valley Monte Carlo simulation analysis // Appl. Phys. Lett. — 2005. — Vol. 87. — P. 222103.
- [21] Polyakov V. M., Schwierz F. Low-field electron mobility in wurtzite InN // Appl. Phys. Lett. — 2006. — Vol. 88. — P. 032101.
- [22] Polyakov V. M., Schwierz F. Nonparabolicity effect on bulk transport properties in wurtzite InN // J. Appl. Phys. — 2006. — Vol. 99. — P. 113705.
- [23] Rodrigues C. G., et al. Nonlinear transport properties of III-nitrides in electric field // J. Appl. Phys. — 2005. — Vol. 98. — P. 043702.

- [24] Starikov E., et al. Monte Carlo calculations of static and dynamic electron transport in nitrides // J. Appl. Phys. — 2005. — Vol. 98. — P. 083701.
- [25] Vurgaftman I., Meyer J. R., Ram-Mohan L. R. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys // J. Appl. Phys. — 2001. — Vol. 89, no. 11. — P. 5815–5875.
- [26] Zanato D., Balkan N., Ridley B. K., Hill G., Schaff W. J. Hot electron cooling rates via the emission of LO-phonons in InN // Semicond. Sci. Technol. — 2004. — Vol. 19 — P. 1024–1028.

