

## 3C-SiC 的结构和热力学性质

胡燕飞<sup>1,\*</sup> 孔凡杰<sup>2</sup> 周春<sup>3</sup><sup>1</sup> 四川理工学院物理系, 四川 自贡 643000; <sup>2</sup> 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065;<sup>3</sup> 四川师范大学物理与电子工程学院, 成都 610068)

**摘要:** 利用第一性原理平面波模守恒赝势密度泛函理论研究了 3C-SiC 的结构, 其零温(0 K)零压下的晶格常数、体弹模量及其对压强的一阶导数、弹性常数的计算结果与实验值和其它理论计算结果相符合。通过准谐德拜模型, 得到了不同温度不同压强下的热容和德拜温度, 发现热容随着压强增加而减小, 德拜温度随压强增加而增加, 并成功地获得了相对晶格常数、相对体积、体弹模量、热膨胀系数与温度和压强的关系。

**关键词:** 密度泛函理论; 准谐德拜模型; 热力学性质

**中图分类号:** O641; O642

## Structures and Thermodynamic Properties of 3C-SiC Compound

HU Yan-Fei<sup>1,\*</sup> KONG Fan-Jie<sup>2</sup> ZHOU Chun<sup>3</sup><sup>1</sup>Department of Physics, Sichuan University of Science and Engineering, Zigong 643000, Sichuan Province, P. R. China;<sup>2</sup>Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, P. R. China;<sup>3</sup>College of Physics and Electronic Engineering, Sichuan Normal University, Chengdu 610068, P. R. China)

**Abstract:** By using first-principles plane-wave normconserving pseudopotential method of density functional theory, the structures and thermodynamic properties of 3C-SiC were investigated. The calculated lattice parameters, bulk modulus, the first order pressure derivative of bulk modulus, and elastic constants are consistent with the experimental data and those calculated by others. Through the quasi-harmonic Debye model, Debye temperature and heat capacity under different temperatures and pressures were successfully obtained. It is shown that when the temperature is constant, the Debye temperature increases almost linearly with applied pressures, while the heat capacity shows an opposite trend. The relative lattice parameters and relative volume, the bulk modulus, thermal expansion *versus* temperature and pressure were also investigated.

**Key Words:** Density functional theory; Quasi-harmonic Debye model; Thermodynamics properties

由于碳化硅(SiC)独特的物理性质和电子学特性, 使它成为极具潜力的第三代宽带隙半导体材料。SiC是由电负性相差较大的两种 IV 族元素组成, 具有较强离子性的共价键, 所以物理性质非常稳定。SiC 具有宽带隙、高临界击穿电场、高热导率、高载流子饱和漂移速度等优点, 在高温、高频、高压、高功率和抗辐射电子器件等方面具有重要应用<sup>[1-3]</sup>。

SiC 材料有多种同质多型体, 其具有代表性的有 3C-SiC、2H-SiC、4H-SiC、6H-SiC 等, 随着计算方

法和条件的进步, 对 SiC 体材料及其多型体结构的理论和实验研究<sup>[4-11]</sup>引起了人们极大的兴趣。最近对于 SiC 体材料及其多型体的表面结构、电子结构和光学性质研究得比较多<sup>[4-7]</sup>, 在热力学和弹性性质方面, Karch 等人<sup>[8,9]</sup>早在 1996 年就运用第一性原理研究了 3C-SiC 的结构, 晶格常数和热力学性质; Zywietz 等人<sup>[10]</sup>运用第一性原理对 SiC 多型体的热力学性质进行了研究, 成功地获得了自由能、热容、德拜温度等性质参数; 2004 年 Ding 等人<sup>[11]</sup>运用密度泛函理

Received: April 18, 2008; Revised: June 6, 2008; Published on Web: September 8, 2008.

\* Corresponding author. Email: hgylose@163.com; Tel: +8628-81770292

论(DFT)对3C-SiC的材料参数如表面能、杨氏模量、体弹模量、剪切模量等进行了计算;但有关3C-SiC在高温高压下的弹性性质和热力学性质的研究还很少.

本文利用平面波赝势密度泛函理论<sup>[12,13]</sup>研究了3C-SiC的基本性质参数,获得了3C-SiC的平衡晶格常数 $a$ 、体弹模量 $B_0$ 及其对压强的一阶导数 $B'_0$ 和弹性常数( $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{44}$ ),另外,通过准谐德拜模型(quasi-harmonic Debye model)<sup>[14]</sup>计算了3C-SiC的热力学性质.

## 1 理论计算方法

在电子结构计算中,本文运用CASTEP程序<sup>[15,16]</sup>,采用了Kleinman-Bylander的模守恒(norm-conserving)赝势<sup>[17]</sup>方法进行第一性原理的计算,这种赝势是由Lin等人<sup>[18]</sup>为了减少平面波截断能提出的.我们使用的广义梯度近似(GGA)<sup>[19]</sup>交换相关函数为RPBE交换相关函数<sup>[20]</sup>,Si、C的价电子分别取为 $3s^23p^2$ 和 $2s^22p^2$ .使用 $k$ -空间Monkhorst-Pack格点<sup>[21,22]</sup>( $8 \times 8 \times 8$ )和平面波截止能量(500 eV)<sup>[23]</sup>来保证计算的精度.总能量差小于 $10^{-6}$  eV·atom<sup>-1</sup>时则认为自洽收敛.所有电子结构总能量的计算均通过平面波赝势密度泛函理论实现.

为了研究3C-SiC的热力学性质,使用了准谐德拜模型<sup>[24]</sup>.在此模型中,3C-SiC的非平衡Gibbs函数 $G^*(V, p, T)$ 形式如下:

$$G^*(V, p, T) = E(V) + pV + A_{\text{vib}}(\Theta(V), T) \quad (1)$$

在等式(1)的右边, $E(V)$ 表示SiC每个原胞的总能量, $p$ 、 $V$ 和 $T$ 分别表示压强、体积和温度, $A_{\text{vib}}$ 是振动的Helmholtz自由能,其中 $\Theta(V)$ 是德拜温度.考虑到准谐近似并使用声子态密度的德拜模型, $A_{\text{vib}}$ 可用如下形式表示<sup>[25,26]</sup>:

$$A_{\text{vib}}(\Theta, T) = nk_B T \left[ \frac{9\Theta}{8T} + 3 \ln(1 - e^{-\Theta/T}) - D(\Theta/T) \right] \quad (2)$$

$D(\Theta/T)$ 是德拜积分, $n$ 是每个原胞中包含的原子数, $k_B$ 是玻尔兹曼常数.对于各向同性的固体来说, $\Theta$ 可表达为<sup>[25]</sup>

$$\Theta = \frac{\hbar}{k_B} [6\pi^2 V^{1/2} n]^{1/3} f(\sigma) \sqrt{\frac{B_s}{M}} \quad (3)$$

$M$ 是每个原胞中分子的质量, $B_s$ 是用来表示晶体压缩率的绝热体弹模量, $B_s$ 可以表达为<sup>[24]</sup>

$$B_s \approx B(V) = V \left( \frac{d^2 E(V)}{dV^2} \right) \quad (4)$$

$\sigma$ 是泊松比率(Poisson ratio),其值取为0.25<sup>[27]</sup>, $f(\sigma)$ 表示式参阅文献[27,28].非平衡Gibbs函数 $G^*(V, p, T)$ 对体积求最小值,即

$$\left( \frac{\partial G^*(V, p, T)}{\partial V} \right)_{p,T} = 0 \quad (5)$$

通过(5)式就可以得到热状态方程,且等温体弹模量 $B_T$ 、热容 $C_v$ 和热膨胀系数 $\alpha$ 表示为

$$B_T(p, T) = V \left( \frac{\partial^2 G^*(V, p, T)}{\partial V^2} \right)_{p,T} \quad (6)$$

$$C_v = 3nk_B \left[ 4D(\Theta/T) - \frac{3\Theta/T}{e^{\Theta/T} - 1} \right] \quad (7)$$

$$\alpha = \frac{\gamma C_v}{B_T V} \quad (8)$$

其中 $\gamma$ 是格林爱森(Gruneisen)参数.

## 2 结果与讨论

### 2.1 3C-SiC的基本性质参数

3C-SiC又称为 $\beta$ -SiC,其晶格具有闪锌矿结构(立方相),每个原胞内有一个Si原子和一个C原子,空间群为 $f-43m$ <sup>[30]</sup>.为了确定3C-SiC体结构性质,我们计算了晶体体积与系统总能之间的关系,并用Birch-Murnaghan equation of state(EOS)<sup>[31]</sup>状态方程进行拟合,其关系式如下:

$$\Delta E(V) = E - E_0 = B_0 V_0 \left[ \frac{V_n}{B'_0} + \frac{1}{1 - B'_0} + \frac{V_n^{1-B'_0}}{B'_0 (B'_0 - 1)} \right] \quad (9)$$

其中, $E_0$ 是零压下的静态能量, $B_0$ 是零压下的体弹模量, $V_0$ 是零压下的静态体积, $V_n = V/V_0$ 是相对原胞体积,压强和相对体积的关系如下:

$$p = \frac{dE}{dV} = \frac{B_0}{B'_0} [V_n^{B'_0} - 1] \quad (10)$$

图1为总能量 $E$ 和原胞体积 $V_0$ 的关系,由图1知,

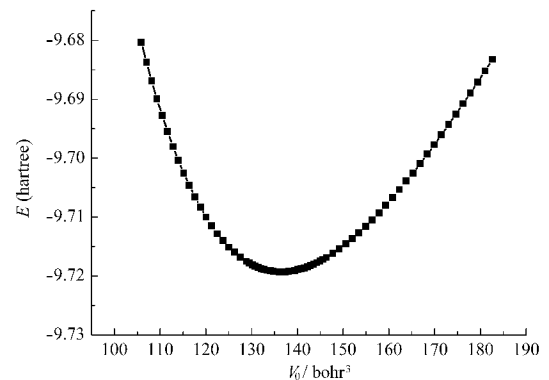


图1 总能量 $E$ 和原胞体积 $V_0$ 的关系  
Fig.1 The variation of total energy with primitive cell volume

表 1 零温零压下的晶格常数  $a$ 、体弹模量  $B_0$ 、体弹模量对压强的一阶导数  $B'_0$  和弹性常数  $C_{ij}$

Tabal 1 Calculated lattice parameters  $a$ , bulk modulus  $B_0$ , the first order pressure derivative of bulk modulus  $B'_0$  and elastic constants  $C_{ij}$  at the zero temperature and pressure

	$a/\text{nm}$	$B_0/\text{GPa}$	$B'_0$	$C_{11}/\text{GPa}$	$C_{12}/\text{GPa}$	$C_{44}/\text{GPa}$
Present work	0.30706	218	3.9	382	115	254
Calc.(Ref.[6])	0.30815					
Calc.(Ref.[8])	0.30718	221.8	3.3	390	134	253
Calc.(Ref.[32])	0.3040	232				
	0.3076	222				
Calc.(Ref.[7])	0.3816	219	3.3			
Calc.(Ref.[2])	0.308164	225.2		390	142.6	191.0
Calc.(Ref.[33])				395	123	236
Calc.(Ref.[34])	0.35117	223		420	126	287
Calc.(Ref.[35])	0.307167	219		390	134	253
Calc.(Ref.[36])	0.308299	210		384	132	241
Calc.(Ref.[37])	0.306651	218		385	135	257
Calc.(Ref.[38])	0.3034	222				
Expt.(Ref.[39])	0.3083	224				
Expt.(Ref.[34])	0.308270	225		390	142	256

SiC 的结构在零温 (0 K) 零压下,  $V=138.15 \text{ bohr}^3$  时最稳定, 由此, 我们可求出其零温零压下的晶格常数  $a=0.30706 \text{ nm}$ , 体弹模量  $B_0$  及其对压强的一阶导数  $B'_0$ , 以及在此稳定结构的零温零压下的弹性常数, 如表 1 所示. 所得结果与其它理论计算结果<sup>[2,6,7,32-38]</sup>和实验结果<sup>[34,39]</sup>相符合, 但由于文献值是常温常压下的计算值, 与本文零温零压下的计算值比较, 误差的存在是合理的.

### 2.2 3C-SiC 的热力学性质及状态方程

由于实验<sup>[40]</sup>测得 SiC 在压力为 100 GPa 时发生相变, 所以选用压力在 0 到 80 GPa 时测量了 3C-SiC 在不同温度下的体积变化情况. 3C-SiC 在不同

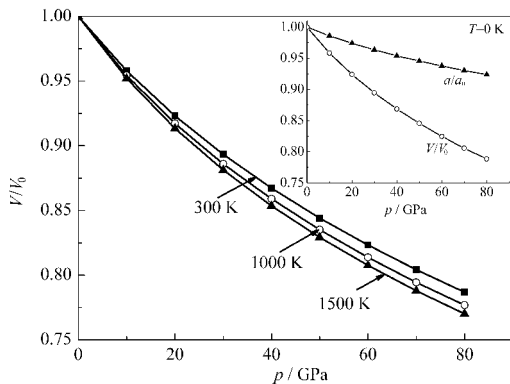


图 2 相对体积  $V/V_0$  与压强  $p$  的关系

Fig.2 The variation of relative volume  $V/V_0$  with pressure  $p$

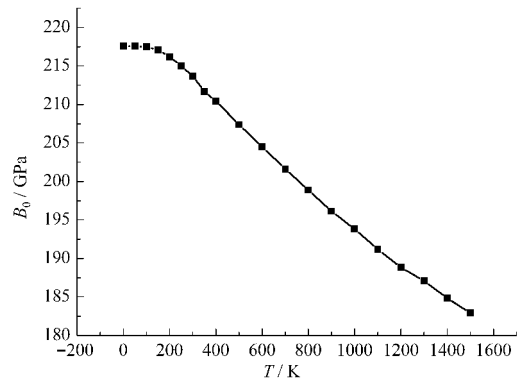


图 3 零压下体弹模量  $B_0$  跟温度  $T$  的关系

Fig.3 Bulk modulus  $B_0$  as a function of temperature  $T$  at  $p=0 \text{ GPa}$

温度下的相对体积与压强的关系如图 2 所示, 由图可得, 相同温度下, 相对体积  $V/V_0$  随压强  $p$  的增加而减小; 压强一定时, 高温的相对体积要小于低温的相对体积, 这意味着固体中的粒子在高温时热运动加快从而导致此固体就更容易压缩. 从图 2 的内嵌图中, 我们作出了在  $T=0 \text{ K}$  时, 相对晶格常数  $a/a_0$  (其中  $a_0$  是零温零压下的静态晶格常数)、相对体积  $V/V_0$  (其中  $V_0$  为零温零压下的体积) 与压强  $p$  的关系, 通过拟合可以得到它们关于压强的三阶多项式:

$T=0 \text{ K}$  时,

$$V/V_0 = 0.99964 - 0.00436p + 3.23793 \times 10^{-5}p^2 - 1.36162 \times 10^{-7}p^3 \quad (11)$$

$$a/a_0 = 0.9999 - 0.00147p + 9.58325 \times 10^{-6}p^2 - 3.92672 \times 10^{-8}p^3 \quad (12)$$

从图 3 中, 得到了零压下体弹模量  $B_0$  跟温度的关系(13)式. 从  $T=0$  到 1600 K 过程中, 当  $T < 100 \text{ K}$  时,  $B_0$  几乎保持不变, 而当  $T > 100 \text{ K}$  时, 随着温度的增加,  $B_0$  急剧减小. 由此可以推断, 当  $T < 100 \text{ K}$  时,

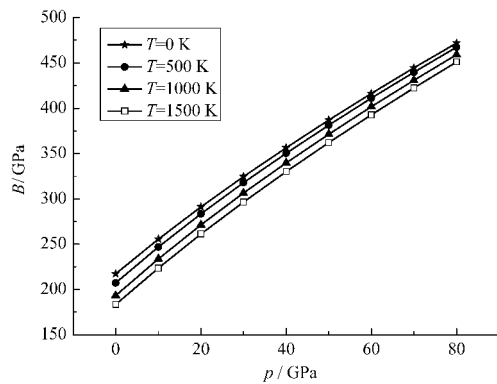


图 4 不同温度下  $B$  随压强的变化

Fig.4 Bulk modulus  $B$  as a function of pressure at various temperatures

表 2 在不同压强和温度下的热容  $C_V(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$  和德拜温度  $\Theta_D(\text{K})$ Table 2 The heat capacity  $C_V(\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$  and the Debye temperature  $\Theta_D(\text{K})$  at various temperatures and pressures

T/K	$C_V$		$\Theta_D$		$C_V$		$\Theta_D$		$C_V$		$\Theta_D$	
	$p=0$ GPa		$p=10$ GPa		$p=20$ GPa		$p=30$ GPa		$p=40$ GPa			
300	31.39169	960.61	29.35999	1035.42	27.67151	1099.08	26.23253	1154.80	24.98351	1204.55		
600	44.13627	951.54	43.26702	1028.12	42.49886	1093.01	42.80572	1149.76	41.17471	1200.20		
900	47.25508	942.52	46.82231	1020.39	46.43386	1086.34	46.07911	1143.88	45.75134	1195.11		
1200	48.40517	934.94	48.15184	1013.59	47.92279	1080.25	47.71236	1138.42	47.51689	1190.22		
1500	48.94121	930.02	48.77744	1008.53	48.62791	1075.51	48.49049	1133.82	48.36196	1185.97		

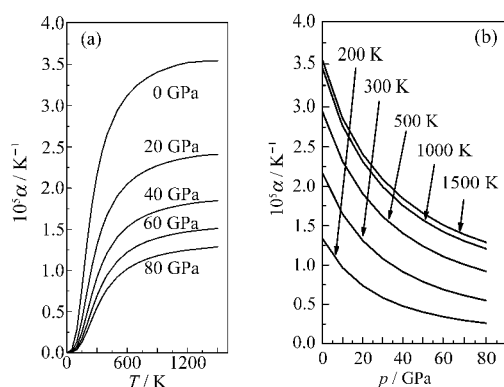
图 5 热膨胀系数  $\alpha$  随压强和温度的变化

Fig.5 The thermal expansion versus temperature and pressure

晶格常数  $a$  几乎保持不变, 这使得体积变化很小, 而一旦  $T > 100$  K, 晶格常数  $a$  随温度的增加而快速增加, 因此体积也跟着变化, 体积的急剧增加导致了体弹模量  $B_0$  的快速减小. 把  $B_0$  和  $T$  拟合成一个四阶多项式, 得到了如下关系:

$$B_0 = 217.82819 + 0.0014T - 6.88590 \times 10^{-5}T^2 + 5.95555 \times 10^{-9}T^3 - 1.64560 \times 10^{-11}T^4 \quad (13)$$

同时, 图4为体弹模量  $B$  在温度分别为 0, 500, 1000 和 1500 K 时, 压强从 0 变化到 80 GPa 的变化情况, 从图中可知, 在某一温度下体弹模量  $B$  随压强的增加而增加, 同一压强下体弹模量  $B$  随温度的增加而减小, 这是由于对材料增加压强和降低温度的效应几乎是相同的.

另外, 通过准谐德拜模型, 得到了 3C-SiC 的热膨胀系数  $\alpha$  随压强和温度的变化关系. 如图 5(a), 我们注意到在零压下, 温度较低时热膨胀系数  $\alpha$  呈指数形式增加, 而温度较高时逐渐接近于线性增加; 随着压强的增加, 热膨胀系数  $\alpha$  随温度的变化变得平缓, 尤其在高温情况下. 另一方面如图 5(b) 所示, 在给定的温度下, 热膨胀系数随压强的增加而显著减小. 我们还发现, 当  $T$  为 1000 和 1500 K 时的热膨胀

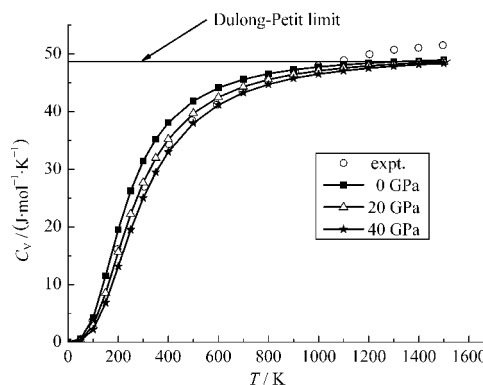


图 6 热容随温度的变化关系

Fig.6 The heat capacity at various temperatures

系数非常接近, 这意味着在压强相同的情况下, 高温区域热膨胀系数  $\alpha$  受温度的影响很小.

### 2.3 3C-SiC 的热容和德拜温度

根据德拜模型还计算出在不同温度不同压强下的热容和德拜温度, 如表 2. 根据计算数据我们做出了压强分别为 0, 20, 40 GPa 时热容随温度的变化, 与常温常压下的实验值<sup>[2]</sup>相比较, 见图 6. 从图中可以看出, 当  $T < 1500$  K 时, 由于非谐德拜模型近似, 热容受到温度和压强的影响, 当温度升高时热容增加, 当压强增加时热容减小. 然而, 在较高压强和较高温度时, 热容几乎不随压强和温度的变化而变化, 由于非谐效应的影响, 热容几乎接近 Dulong-Petit 值, 即  $6N_A k_B (\approx 49.90 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$ , 这里  $N_A$  为阿伏伽德罗常数,  $k_B$  为玻尔兹曼常数.

## 3 结论

利用第一性原理平面波赝势密度泛函理论计算了 3C-SiC 的基本性质参数, 得到 SiC 的结构在零温零压下当晶格常数  $a = 0.30706$  nm 时最稳定. 由状态方程拟合得到相对体积随压强增加而减小, 随温度升高而减小; 体弹模量随压强增加而增加, 随温度

升高而减小. 通过准谐德拜模型, 得到了不同温度和不同压强下的热容和德拜温度, 发现热容随着压强增加而减小, 德拜温度随压强增加而增加的变化规律. 这些理论数据对于在高温高压下更好的利用 3C-SiC 材料有重要的指导意义.

## References

- Xiang, Y. P.; Peter, K.; Johannes, P. *Phys. Rev. B*, **2005**, **72**: 245320
- Priya, V.; Rajiv, K. K.; Aiichiro, N. *J. Appl. Phys.*, **2007**, **101**(10): 103515
- Xie, C. K.; Xu, P. S.; Xu, F. Q.; Pan, H. B. *Chin. Sci. Bull.*, **2002**, **47**(5): 336 [谢长坤, 徐彭寿, 徐法强, 潘海斌. 科学通报, **2002**, **47**(5): 336]
- Xie, C. K.; Xu, P. S.; Xu, F. Q.; Pan, H. B. *Acta Phys. Sin.*, **2002**, **51**(12): 2804 [谢长坤, 徐彭寿, 徐法强, 潘海斌. 物理学报, **2002**, **51**(12): 2804]
- Jiang, Z. Y.; Xu, X. H.; Wu, H. S.; Zhang, F. Q.; Jin, Z. H. *Acta Phys. Sin.*, **2002**, **51**(7): 1586 [姜振益, 许小红, 武海顺, 张富强, 金志浩. 物理学报, **2002**, **51**(7): 1586]
- Ching, W. Y.; Xu, Y. N.; Paul, R.; Ouyang, L. Z. *Mater. Sci. Eng. A*, **2006**, **422**: 147
- Park, C. H.; Byoung, H. C.; Keun, H. L.; Chang, K. J. *Phys. Rev. B*, **1993**, **49**(7): 4485
- Karch, K.; Pavone, P.; Windl, W.; Strauch, D.; Bechstedt, F. *Int. J. Quantum Chem.*, **1995**, **56**(6): 801
- Karch, K.; Pavone, P.; Mayer, A. P.; Bechstedt, F.; Strauch, D. *Physica B*, **1996**, **220**: 448
- Zywietz, A.; Karch, K.; Bechstedt, F. *Phys. Rev. B*, **1996**, **54**(3): 1791
- Ding, Z. N.; Zhou, S. J.; Zhao, Y. S. *Phys. Rev. B*, **2004**, **70**(18): 184117
- Hohenberg, P.; Kohn, W. *Phys. Rev. B*, **1964**, **136**: 864
- Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev.*, **1965**, **140**: A1133
- Grimvall, G. *Thermophysical properties of materials*. Amsterdam: Elsevier, 1999
- Payne, M. C.; Teter, M. P.; Allen, D. C.; Arias, T. A.; Joannopoulos, J. D. *Rev. Mod. Phys.*, **1992**, **64**: 1045
- Milman, V.; Winkler, B.; White, J. A.; Packard, C. J.; Payne, M. C.; Akhmatkaya, E. V.; Nobes, R. H. *Int. J. Quantum Chem.*, **2000**, **77**: 895
- Trail, J. R.; Needs, R. J. *J. Chem. Phys.*, **2005**, **122**(1): 014112
- Lin, J. S.; Qteish, A.; Payne, M. C.; Heine, V. *Phys. Rev. B*, **1993**, **47**(8): 4174
- Hammer, B.; Hansen, L. B.; Norskov, J. K. *Phys. Rev. B*, **1999**, **59**: 7413
- Ho, K. M.; Fu, C. L.; Harmon, B. N. *Phys. Rev. B*, **1984**, **29**: 1575
- James, D. P.; Hendrik, J. M. *Phys. Rev. B*, **1977**, **16**(4): 1748
- Hendrik, J. M.; James, D. P. *Phys. Rev. B*, **1976**, **13**(12): 5188
- Lü, M. Y.; Chen, Z. W.; Li, L. X.; Liu, R. P.; Wang, W. K. *Acta Phys. Sin.*, **2006**, **55**(7): 3576 [吕梦雅, 陈洲文, 李立新, 刘日平, 王文魁. 物理学报, **2006**, **55**(7): 3576]
- Blanco, M. A.; Francisco, E.; Luana, V. *Comput. Phys. Commun.*, **2004**, **158**: 57
- Blanco, M. A.; Pendas, A. M.; Francisco, E.; Recio, J. M.; Ranco, R. *J. Mol. Struct. -Theochem*, **1996**, **368**: 245
- Florez, M.; Recio, J. M.; Francisco, E.; Blanco, M. A.; Martin, P. A. *Phys. Rev. B*, **2002**, **66**: 144112
- Poirer, J. P. *Introduction to the physics of the earth's interior*. England: Cambridge University Press, 1991
- Liu, Z. L.; Cheng, Y.; Tan, L. N.; Gou, Q. Q. *Commun. Theor. Phys.*, **2006**, **46**: 573
- Li, X. F.; Chen, X. R.; Meng, C. M.; Ji, G. F. *Solid State Commun.*, **2006**, **139**: 197
- Han, R. J.; Wang, J. Y.; Xu, X. G.; Hu, X. B.; Dong, J.; Li, X. X.; Li, J.; Jiang, S. Z.; Wang, L.; Jiang, M. H. *Journal of Synthetic Crystals*, **2004**, **33**(6): 877 [韩荣江, 王继扬, 徐现刚, 胡小波, 董捷, 李现祥, 李娟, 姜守振, 王丽, 蒋民华. 人工晶体学报, **2004**, **33**(6): 877]
- Murnaghan, F. D. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **1994**, **30**: 244
- Bjorn, B.; Peter, K.; Johannes, P. *Phys. Rev. B*, **2006**, **73**(19): 195205
- Philippe, D.; Yves, R.; Guy, F. D. *J. Appl. Phys.*, **2004**, **95**(5): 2324
- Lambrech, W. R. L.; Segall, B.; Methfessel, M.; Vanschilfgaarde, M. *Phys. Rev. B*, **1991**, **44**: 3685
- Karch, K.; Pavone, W. W. P.; Schutt, O.; Strauch, D. *Phys. Rev. B*, **2002**, **66**: 064107
- Wang, C. Z.; Yu, R.; Krakauer, H. *Phys. Rev. B*, **1996**, **53**: 5430
- Margarita, P.; Miao, M. S.; Walter, R. L. L. *Phys. Rev. B*, **2002**, **66**(12): 125201
- Kackell, P.; Wenzien, B.; Bechstedt, F. *Phys. Rev. B*, **1994**, **50**(23): 17037
- Harris, G. L. *Properties of silicon carbide*. London: EMIS Datareviews No.13, INSPEC, 1995
- Sekine, T.; Kobayashi, T. *Phys. Rev. B*, **1997**, **55**: 8034