

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И УРОВЕНЬ ЛОКАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНЕЙТРАЛЬНОСТИ ПОЛИТИПОВ SiC ИЗ КВАЗИЧАСТИЧНЫХ РАСЧЕТОВ В РАМКАХ GW-ПРИБЛИЖЕНИЯ

В. Н. Брудный^{a}, А. В. Кособуцкий^b*

^a *Томский государственный университет
634050, Томск, Россия*

^b *Кемеровский государственный университет
650043, Кемерово, Россия*

Поступила в редакцию 13 июля 2011 г.

С использованием GW-приближения для собственной энергии квазичастиц рассчитаны важнейшие межзонные переходы и положение уровня локальной зарядовой нейтральности (CNL) для политипов карбида кремния 3C-SiC и n H-SiC ($n = 2-8$). Теоретические значения ширины E_g запрещенной зоны различных политипов, находящиеся в диапазоне 2.38 эВ(3C-SiC)–3.33 эВ(2H-SiC), очень близки экспериментальным данным в интервале 2.42–3.33 эВ. Квазичастичные поправки к величине E_g , определенной из расчетов DFT–LDA, почти не зависят от кристаллической структуры политипа и составляют около 1.1 эВ. Обнаружено, что положение CNL в различных политипах мало отличается друг от друга, при этом изменение величины CNL слабо коррелирует с изменением E_g , которая растет с увеличением степени гексагональности SiC. Рассчитанное значение CNL варьируется от 1.74 эВ в политипе 3C-SiC до 1.81 эВ в 4H-SiC.

1. ВВЕДЕНИЕ

В силу своих выдающихся электронных, тепловых и химических характеристик карбид кремния рассматривается как один из самых многообещающих материалов для силовой и высокотемпературной электроники. Вследствие низкой плотности и высокой пороговой энергии образования радиационных дефектов SiC является также перспективным материалом для производства детекторов ядерных излучений. Изучению влияния различных видов высокоэнергетических воздействий на свойства SiC посвящено огромное количество исследований, большая часть которых обобщена в обзоре [1]. В них показано, что облучение политипов карбида кремния различными видами высокоэнергетических излучений приводит к увеличению удельного сопротивления материала как n -, так и p -типа проводимости вследствие смещения уровня Ферми в глубь запрещенной зоны полупроводника. Однако большая ширина запрещенной зоны (2.4–3.3 эВ) карби-

дов кремния затрудняет экспериментальное определение предельных дозовых значений удельного сопротивления $\rho_{lim}(D)$ и соответственно предельного положения уровня Ферми F_{lim} в облученном материале из прямых измерений эффекта Холла или термоэдс. Между тем, известно, что величина F_{lim} в облученном полупроводнике тождественна точке ветвления комплексной зонной структуры («нейтральной» точке) кристалла, положение которой в зонном спектре полупроводника соответствует энергии, при которой меняется характер дефектных (щелевых) состояний кристалла от донорных состояний, построенных преимущественно из состояний валентных зон, к акцепторным состояниям, построенным преимущественно из состояний зон проводимости. Поскольку «нейтральная» точка соответствует условию электронно-дырочного равновесия для связанного на щелевых (дефектных) состояниях заряда без учета свободных носителей заряда, для ее обозначения в литературе также используется термин «уровень (локальной) зарядовой нейтральности» (CNL) [2–4]. Уровень CNL определяет не толь-

*E-mail: brudnyi@mail.tsu.ru

ко электронные свойства дефектного объемного материала, но и электронные свойства поверхности, а также задает высоту барьера Шоттки и разрывы зон в полупроводниковых гетеропарах. Для оценки положения CNL в зонном спектре полупроводника в настоящее время используются различные эвристические модели [2–4], основанные на расчетах зонной структуры объемного кристалла. Результаты расчетов величины CNL позволяют прогнозировать последствия воздействия жесткой радиации на электронные свойства материала и численно оценивать энергетическую диаграмму межфазной границы, что представляет большой практический интерес.

Имеющиеся в литературе данные по значению CNL в SiC являются фрагментарными и противоречивыми. В основном, оценки положения CNL ограничивались кубическим политипом SiC, при этом выполненные ранее вычисления опирались на зонные спектры, рассчитанные методами эмпирического псевдопотенциала, сильной связи и теории функционала плотности в локальном приближении. Представленная работа посвящена расчету энергетического положения уровня CNL в кубическом 3C-SiC и ряде гексагональных политипов n H-SiC с использованием данных о строении зонного спектра SiC, полученных на основе GW-приближения для расчета собственной энергии, что позволяет получить более надежную оценку положения CNL в рассматриваемых соединениях.

2. МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Для расчета уровня CNL в полупроводниках используются модели, в которых для одномерного случая CNL отождествляется с точкой ветвления комплексной зонной структуры кристалла [2], а в трехмерном случае используется как критерий для определения энергии, вблизи которой происходит смена донорно-акцепторного характера щелевых состояний полупроводника [2, 3].

Наибольшее распространение при оценках CNL в настоящее время получила модель изотропной энергетической щели $\langle E_g \rangle$ кристалла [2], в которой

$$\text{CNL} \equiv \langle E_g \rangle / 2, \quad (1)$$

где $\langle E_g \rangle = \langle E_c \rangle - \langle E_v \rangle$ — усредненная по зоне Бриллюэна энергетическая щель.

Выражение для расчета CNL также сформулировано как условие нейтральности на модельном амфотерном щелевом центре, выполняемое для поло-

жительных, связанных с валентной зоной, и отрицательных, связанных с зоной проводимости, зарядов [2]:

$$\partial G_0(E, \text{CNL}) / \partial E = 0, \quad (2)$$

где G_0 — усредненная по объему элементарной ячейки кристалла функция Грина.

При оценке разрывов зон в гетеропарах часто используются глубокие энергетические уровни остовных состояний атомов полупроводника или переходных металлов, при этом результаты оценок практически не зависят от природы глубоких состояний. Это позволяет отыскивать уровень CNL как наиболее глубокое (наиболее локализованное) щелевое состояние в энергетическом интервале вблизи запрещенной зоны кристалла [3]:

$$\partial^2 G_0(E, \text{CNL}) / \partial E^2 = 0. \quad (3)$$

Модели (1)–(3) использовались в настоящей работе для определения положения уровня CNL в кремнии (Si), алмазе (C), кубическом (3C-SiC) и гексагональных политипах карбида кремния n H-SiC с величиной параметра n в диапазоне 2–8. Для результатов расчетов введены обозначения $\langle E_g \rangle / 2$, E_{lnl} и E_b , которые отвечают величинам CNL, полученным соответственно с помощью выражений (1)–(3). Отметим, что наиболее важными с технологической точки зрения являются политипы 4H-SiC, 6H-SiC и 3C-SiC. Кремний и алмаз рассматривались нами как эталонные материалы, для которых имеются соответствующие экспериментальные значения F_{lim} , а также ранее полученные расчетные значения CNL.

Определение положения CNL требует знания расположения как валентных зон, так и достаточно большого количества зон проводимости данного соединения. Для вычисления CNL различных кристаллов *ab initio*, как правило, используются зонные спектры, рассчитанные в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием различных форм локального (LDA) или полулокального (GGA) приближений для обменно-корреляционного взаимодействия [5, 6]. При этом для коррекции заниженно-го в рамках DFT положения зон проводимости выполняется их жесткий сдвиг до достижения экспериментального значения запрещенной щели E_g . В принципе, данный метод позволяет получать для CNL результаты, неплохо согласующиеся с экспериментом [5, 6], однако представляет интерес оценить его точность с использованием более высокого уровня теории — квазичастичного подхода, позволяющего адекватно описывать возбужденные состояния системы взаимодействующих электронов. В первой части настоящей работы такая оценка была выполнена

для простейших и наименее требовательных к компьютерным ресурсам полупроводников из рассмотренных — кремния, алмаза и кубического SiC. Для определения энергий квазичастичных возбуждений мы использовали GW-приближение к расчету собственно-энергетической части Σ , описывающей все обменно-корреляционные взаимодействия в многоэлектронной системе [7]. Преимущество использования схемы вычислений в рамках GW-приближения определяется очень хорошим согласием теоретических и экспериментальных величин различных межзонных переходов, полученным для широкого круга соединений. При этом стартовой точкой для квазичастичных расчетов, как правило, являются волновые функции и энергии, определенные из решения уравнений Кона–Шэма.

Выполненные в настоящей работе расчеты зонной структуры в рамках DFT-LDA и DFT-GW (G_0W_0) основывались на базисе плоских волн и сохраняющих норму псевдопотенциалах [8], при использовании численной реализации данной расчетной техники в пакете Abinit [9]. Энергия обрезания плоских волн E_{cut} была выбрана на уровне 16 Ry для кремния и 48 Ry для алмаза и SiC, которые требуют большего количества плоских волн вследствие более жесткого псевдопотенциала углерода. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось на сетках $4 \times 4 \times 4$ (Si, C, 3C-SiC), $6 \times 6 \times 4$ (2H-SiC), $6 \times 6 \times 2$ (4H-SiC, 6H-SiC) и $6 \times 6 \times 1$ для 8H-SiC. Расчеты энергетических зон проводились после оптимизации атомных позиций при фиксированных параметрах решетки a и c , для которых были взяты экспериментальные значения, известные из рентгеноструктурных измерений.

Как известно, расчеты в приближении GW являются на несколько порядков более ресурсоемкими по сравнению с вычислениями в рамках DFT-LDA. При этом сходимость результатов GW-расчетов сильно зависит от числа незанятых состояний, учитываемых при вычислении поляризационной функции и собственной энергии. Для ускорения расчетов и сокращения вычислительных затрат в настоящей работе использовалась предложенная в работе [10] техника учета вклада высоко расположенных незанятых зон поправкой, зависящей только от некоторой средней энергии, что позволяет в несколько раз уменьшить число зон проводимости, учитываемых в явном виде.

При расчете экранированного кулоновского взаимодействия использовался метод нахождения диэлектрической функции в приближении хаотических фаз. С целью более точного воспроизведе-

ния энергий квазичастиц в широком энергетическом диапазоне диэлектрическая функция вычислялась без использования упрощенной модели плазмонного полюса (PPM), так как использование PPM приводит к большим ошибкам в определении энергетических уровней вдали от уровня Ферми.

Для определения положения CNL с использованием выражений (1)–(3) для кристаллов Si, C и 3C-SiC было рассчитано 100 энергетических зон на сетке $4 \times 4 \times 4$ (10 k -точек в неприводимой части зоны Бриллюэна). После нахождения квазичастичных поправок к энергиям Кона–Шэма мы рассматривали два способа конструирования зонного спектра: а) с полным учетом полученных поправок для всех зон в рамках GW-приближения и б) с учетом поправок только для нижней зоны проводимости. Способ б) заключался в жестком сдвиге на заданную величину всех зон проводимости, полученных из расчета DFT-LDA, до достижения теоретического значения E_g , определенного из наших DFT-GW-расчетов. Результаты вычислений CNL, выполненных с использованием полученных таким образом зонных спектров, приведены в табл. 1. Из представленных данных ясно, что различия между результатами полномасштабных GW-расчетов и скорректированных по схеме б) LDA-расчетов (LDA*) находятся для всех моделей CNL всего лишь в пределах 0.03 эВ. Таким образом, на основании проведенного сравнения можно сделать вывод о том, что традиционная схема вычислений LDA/GGA при учете коррекции ширины запрещенной зоны является достаточно точной для определения положения CNL. В первую очередь, данный факт обусловлен хорошей точностью воспроизведения в рамках LDA/GGA «правильной» формы дисперсионной зависимости, определяемой из экспериментов по фотоэмиссии.

Некубические политипы SiC, имеющие большие элементарные ячейки, представляют значительные сложности при осуществлении вычислений по методу GW. Основываясь на полученных результатах для простых кристаллов (табл. 1), для рассмотренных гексагональных политипов SiC мы в дальнейшем применяли только схему расчетов б), что позволило резко сократить компьютерные затраты. При этом для дополнительного повышения точности вычисления CNL корректировке подвергалась не минимальная ширина запрещенной щели E_g , а среднее значение энергетической щели кристалла $\langle E_g \rangle$, на которое накладывалось требование $\langle E_g \rangle^{LDA} = \langle E_g \rangle^{GW}$, где GW-данные брались из наших собственных вычислений для рассмотренных политипов. Ранее подобная схема (но с опорой на

Таблица 1. Ширина запрещенной зоны E_g и положение уровня CNL относительно потолка валентной зоны в Si, C и 3C-SiC из расчетов GW, а также положение CNL с учетом коррекции зон проводимости, полученных в рамках LDA (LDA*)

П/п	E_g	$E_g/2$, эВ		E_{lnl} , эВ		$\langle E_b \rangle$, эВ	
		GW	LDA*	GW	LDA*	GW	LDA*
Si	1.10	0.38	0.38	0.42	0.41	0.52	0.51
C	5.66	2.20	2.17	2.02	2.01	2.52	2.49
3C-SiC	2.38	1.86	1.87	1.64	1.66	1.73	1.74

Таблица 2. Межзонные переходы из вершины валентной зоны Γ_v на уровни нижней зоны проводимости в указанных точках высокой симметрии, рассчитанные в рамках GW-приближения

П/п	Обозначения Жданова	$\Gamma_c - \Gamma_v$, эВ	$A_c - \Gamma_v$, эВ	$K_c - \Gamma_v$, эВ	$H_c - \Gamma_v$, эВ	$L_c - \Gamma_v$, эВ	$M_c - \Gamma_v$, эВ
2H-SiC	11	5.70	6.80	3.33	6.09	4.27	3.77
4H-SiC	22	6.03	6.24	5.08	4.33	3.66	3.26
6H-SiC	33	6.11	6.18	4.56	4.75	3.09	3.05
8H-SiC	44	6.14	6.16	4.32	4.62	2.88	2.77

сторонние теоретические и экспериментальные данные по величинам межзонных переходов) с успехом применялась нами для определения положения CNL в нитридных полупроводниках [5].

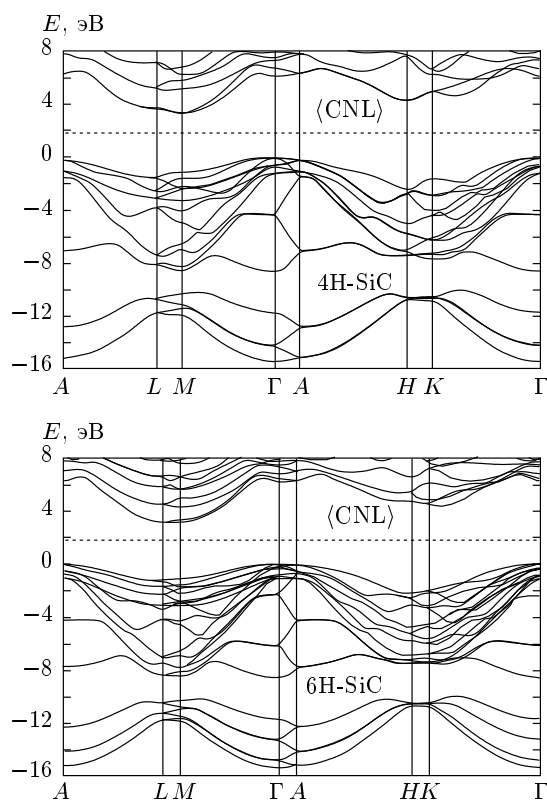
3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Приведенные в табл. 1 расчетные значения CNL в рамках метода GW для кремния близки к соответствующим величинам $E_v + (0.36-0.47)$ эВ, полученным ранее с использованием модельных псевдопотенциалов, а также к экспериментальному значению $F_{lim}(\text{Si}) = E_v + 0.39$ эВ [2, 3], где E_v — энергия потолка валентной зоны. Для алмаза соответствующие более ранние расчетные значения CNL находятся в пределах $E_v + (1.96-2.22)$ эВ. Согласно этим данным, облученные кристаллы кремния и алмаза должны приобретать высокоомный тип проводимости, что соответствует имеющимся экспериментальным результатам [2, 3]. Для карбида кремния наши данные также показывают, что в результате воздействия жесткой радиации должен происходить переход в высокоомное состояние. Этот вывод подтверждается многочисленными исследованиями

SiC, облученного электронами, протонами и нейтронами [1].

В табл. 2 приведены важнейшие межзонные переходы из расчетов DFT-GW для рассмотренных в настоящей работе политипов SiC. Собственно-энергетические поправки к величинам рассмотренных в табл. 2 межзонных переходов из расчетов LDA варьируются от 1.01 до 1.17 эВ, при этом минимальные значения были получены для перехода $\Gamma_c - \Gamma_v$ (1.01–1.02 эВ) и максимальные — для перехода $K_c - \Gamma_v$ (1.14–1.17 эВ). Поправки для перехода $M_c - \Gamma_v$, который отвечает минимальной величине E_g в политипах 4H, 6H, 8H, составляют 1.05–1.07 эВ. Таким образом, в целом подтверждается справедливость рассматривавшейся ранее коррекции величины запрещенной щели SiC на 1–1.1 эВ из упрощенного анализа квазичастичных эффектов [11] или из сравнения экспериментальных и теоретических (DFT-LDA) спектров отражения [12].

На рисунке на примере 4H-SiC и 6H-SiC показан характер перестройки зонного спектра при переходе к политипам с более вытянутой элементарной ячейкой. Отметим, что в первом приближении зонный спектр $n\text{H-SiC}$ ($n > 2$) можно рассматривать как результат свертки спектра 2H-SiC, поскольку с увеличением n происходит пропорциональное сжатие



Зонные спектры политипов 4H-SiC и 6H-SiC с учетом GW-поправок для уровней нижней зоны проводимости. Отсчет энергии ведется от потолка валентной зоны. Пунктирной линией обозначено положение уровня локальной зарядовой нейтральности (CNL) (табл. 3)

зоны Бриллюэна вдоль гексагональной оси, что и приводит к появлению в спектре множества близко расположенных ветвей. Так, для самого сложного из рассмотренных гексагональных политипов, кристалла 8H-SiC, содержащего 16 атомов в элементарной ячейке, зона Бриллюэна сжимается вдоль оси c в 4 раза по отношению к 2H-SiC. Чтобы при вычислениях CNL не происходило потери точности, и полученные результаты для разных политипов позволяли выполнять их сравнение, в выражениях для CNL требуется учитывать зоны, расположенные в одинаковых энергетических интервалах. Это определяет необходимость увеличивать количество рассматриваемых состояний при увеличении числа слоев Si-C в элементарной ячейке n H- или n R-SiC, которое пропорционально величине n . Поскольку в случае 3C-SiC в настоящей работе для нахождения CNL было рассчитано 100 энергетических зон, исходя из требования пропорциональности для остальных по-

литипов число требуемых зон задавалось как $n \times 100$. Таким образом, для 8H-SiC число учтенных состояний валентной зоны и зоны проводимости было доведено до 800.

Результаты расчетов положения уровня CNL для рассмотренных политипов представлены в табл. 3. Сопоставление рассчитанных нами в рамках GW-приближения значений ширины запрещенной зоны SiC с результатами измерений, выполненными при температуре до 5 K [13,14], показывает очень хорошее согласие. Видно, что с увеличением степени гексагональности η материала в целом происходит увеличение E_g , при этом наиболее равномерный рост величины E_g происходит в диапазоне изменений η до 50 %.

Согласно имеющимся в литературе теоретическим данным, значение CNL в SiC находится на уровне 1.40 эВ [2], 1.53 эВ [3] и 1.26–1.61 эВ [6,15] относительно вершины валентной зоны для кубического политипа 3C-SiC и 1.9 эВ для 6H-SiC [6]. Приведенные результаты получены с использованием методов эмпирического псевдопотенциала [2,3], сильной связи [15] и DFT-LDA [6] (с последующей коррекцией теоретического значения E_g под экспериментальное значение). Как видно из приведенных значений, литературные данные имеют значительный разброс, при этом результаты различных работ трудно сравнивать друг с другом вследствие различия в применявшихся методах расчета и введения эмпирических параметров. Выполненные нами расчеты положения CNL с использованием величин межзонных переходов из GW-расчетов не содержали каких-либо подгоночных параметров и в этом смысле являются полностью расчетами *ab initio*, что дает более прочную основу для последующего анализа и сравнений.

Как следует из табл. 3, рассчитанные в настоящей работе значения $\langle \text{CNL} \rangle$ различных политипов близки друг другу и варьируются от 1.74 эВ в 3C-SiC до 1.81 эВ в 4H-SiC. С учетом результатов для всех рассмотренных политипов SiC, среднее значение $\langle \text{CNL} \rangle$ данного материала составляет $\langle \text{CNL} \rangle = E_v + 1.77$ эВ. Полученные оценки CNL существенно выше данных большинства сторонних теоретических источников и близки к экспериментальному среднему энергетическому положению поверхностного уровня Ферми $E_v + (2.15 \pm 0.20)$ эВ, определенному для политипов (3C, 6H, 4H)-SiC в работе [16], а также косвенно согласуются с результатами работ [17,18]. Действительно, в работах [17,18] из измерений слоевого сопротивления эпитаксиальных пленок политипов n -6H и n -4H карбида крем-

Таблица 3. Теоретическая ширина запрещенной зоны политипов SiC, определенная из квазичастичных расчетов в рамках GW-приближения, и положение уровня локальной электронной нейтральности относительно потолка валентной зоны, рассчитанное в трех моделях $\langle E_g \rangle/2$ (1), E_{lnt} (2), E_b (3) (со средним значением $\langle \text{CNL} \rangle$). Звездочкой отмечена величина полученной в эксперименте экситонной энергии E_g

П/п	Обозначения Жданова	Гексаго- нальность η , %	E_g , эВ теория (GW)	E_g , эВ эксп. [13, 14]	$\langle E_g \rangle/2$, эВ	E_{lnt} , эВ	E_b , эВ	$\langle \text{CNL} \rangle$, эВ
3C-SiC	∞	0	2.38	2.40, 2.42, 2.39*	1.86	1.64	1.73	1.74
2H-SiC	11	100	3.33	3.33*	1.76	1.65	1.87	1.76
4H-SiC	22	50	3.26	3.29, 3.27*	1.85	1.71	1.88	1.81
6H-SiC	33	33.3	3.05	3.10, 3.02*	1.81	1.70	1.84	1.78
8H-SiC	44	25	2.77	2.80*	1.78	1.68	1.79	1.75

ния, выращенных методом Лели и облученных протонами, получены значения сопротивления примерно до 10^{10} Ом вблизи комнатных температур, а из температурных измерений слоевого сопротивления таких образцов найдено максимальное значение энергии активации сопротивления на уровне порядка (1.1–1.25) эВ, что можно сопоставить с положением уровня Ферми $F_{lim} \approx E_v + (1.8-2)$ эВ. Таким образом, полученные из этих измерений оценочные значения F_{lim} в облученном карбиде кремния в целом неплохо соответствуют расчетному положению $\langle \text{CNL} \rangle = E_v + 1.81$ эВ (4H-SiC) и $\langle \text{CNL} \rangle = E_v + 1.78$ эВ (6H-SiC).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием квазичастичных поправок к одноэлектронным энергиям Кона–Шэма, рассчитанным в рамках GW-приближения, найдены величины различных межзонных переходов, ширина запрещенной зоны и положение уровня локальной зарядовой нейтральности CNL в политипах карбида кремния 3C-SiC и n H-SiC ($n = 2-8$). Развита схема расчета *ab initio* положения уровня CNL кристалла с использованием энергетических зон, вычисленных методами DFT–LDA и GW. На примере Si, C, 3C-SiC показано, что различия между результатами расчетов CNL с использованием зонных спектров, полученных с учетом GW-поправок ко всем энерге-

тическим уровням и только к уровням нижней зоны проводимости, находятся в пределах нескольких сотых долей эВ. Таким образом, применение метода DFT–LDA с последующей коррекцией заниженного положения зон проводимости путем их жесткого сдвига по энергетической шкале в большинстве случаев является вполне оправданным и дает эффективный метод оценки положения CNL в сложных кристаллах, для которых затруднительно проведение ресурсоемких квазичастичных расчетов.

Полученные значения энергетического положения уровня CNL со средним значением $\langle \text{CNL} \rangle \approx E_v + 1.8$ эВ для рассмотренных политипов SiC хорошо описывают электронные свойства материала, подвергнутого воздействию жесткой радиации, электронные свойства поверхности SiC, а также дают возможность построения энергетических диаграмм межфазных границ металл/SiC, гетеропара SiC/SiC.

Работа выполнена в рамках программы «Развитие научного потенциала высшей школы» 2009–2011 гг. (№ 2.1.1/1230). Расчеты проводились на суперкомпьютере СКИФ Cyberia Томского государственного университета.

ЛИТЕРАТУРА

1. Е. В. Калинина, ФТП 41, 769 (2007).

2. V. N. Brudnyi, S. N. Grinyaev, and V. E. Stepanov, *Physica B* **212**, 429 (1995).
3. V. N. Brudnyi, S. N. Grinyaev, and N. G. Kolin, *Physica B* **348**, 213 (2004).
4. J. Tersoff, *J. Vac. Sci. Technol. B* **4**, 1066 (1986).
5. В. Н. Брудный, А. В. Кособуцкий, Н. Г. Колин, *ФТП* **43**, 1312 (2009).
6. J. Robertson and B. Falabretti, *J. Appl. Phys.* **100**, 014111 (2006).
7. W. G. Aulbur, L. Jönsson, and J. W. Wilkins, in: *Sol. St. Phys.*, ed. by H. Ehrenreich and F. Saepen, New York, Academic Press (2000), Vol. 54, p. 1.
8. N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev. B* **43**, 1993 (1991).
9. X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade et al., *Computer Phys. Comm.* **180**, 2582 (2009).
10. F. Bruneval and X. Gonze, *Phys. Rev. B* **78**, 085125 (2008).
11. P. Käckell, B. Wenzien, and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* **50**, 10761 (1994).
12. W. R. L. Lambrecht, S. Limpijumnong, S. N. Rashkeev et al., *Phys. Stat. Sol. B* **202**, 5 (1997).
13. *Landolt-Börnstein — Group III Condensed Matter Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology*, v. 41A1b: *Group IV Elements. IV-IV and III-V Compounds*, ed. by O. Madelung, U. Rössler, and M. Schulz [chapter: DOI 10.1007/10832182_596].
14. J. A. Freitas, in *Properties of Silicon Carbide*, ed. by G. L. Harris, London, INSPEC (1995), p. 29.
15. W. Monch, *J. Appl. Phys.* **80**, 5076 (1996).
16. M. Wiets, M. Weinelt, and T. Fauster, *Phys. Rev. B* **68**, 125321 (2003).
17. А. А. Лебедев, А. И. Вейнгер, Д. В. Давыдов и др., *ФТП* **34**, 897 (2000).
18. А. А. Лебедев, А. И. Вейнгер, Д. В. Давыдов и др., *ФТП* **34**, 1058 (2000).