03,11

Зонная структура графеноподобных 2D аллотропов карбида кремния

© Д.А. Жукалин, А.В. Тучин, А.В. Калашников, Я.С. Часовских, Е.Н. Бормонтов, И.И. Долгих

Воронежский государственный университет,
Воронеж, Россия

E-mail: zhukalin@vsu.ru

Поступила в Редакцию 5 ноября 2024 г.
В окончательной редакции 27 декабря 2024 г.
Принята к публикации 28 декабря 2024 г.

В работе проведено исследование энергетических характеристик низкоразмерных структур на основе монослоев 2D-карбида кремния (2D-SiC). Из всего многообразия возможных политипных форм выделен подкласс графеноподобных структур с числом слоев от 1 до 4. В результате анализа полученных данных выявлены зависимости ширины запрещенной зоны и расположения границ зон от типа упаковки. Установлено, что в исследованном диапазоне числа слоев, при неизменной стехиометрии, послойный рост структур приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны, а изменение взаимной ориентации слоев в структуре приводит к смещению экстремумов на зонной диаграмме и формированию как прямозонных, так и непрямозонных полупроводников. Результаты позволили обосновать причины возникших закономерностей с физической точки зрения. Дискретный ряд ширин запрещенных зон исследованного подмножества структур лежит в диапазоне от 0.82 до 2.15 eV, что охватывает область спектра от видимого до ИК-диапазона. Вызывает интерес изменение кристаллической решетки структуры *ABAB* и уменьшение ширины запрещенной зоны до околонулевой.

Ключевые слова: полупроводники, низкоразмерные материалы, карбид кремния, зонная структура, расчеты из первых принципов.

DOI: 10.61011/FTT.2025.01.59773.294

1. Введение

Одной из важных характеристик материала, которая определяет его структуру и функциональные свойства, является размерность. Например, привычный материал графит, при переходе к двумерному состоянию, приобретает уникальные электрофизические свойства и открывает целое поле для теоретических и экспериментальных исследований [1]. В настоящее время активно изучаются особенности двумерных и квазидвумерных полупроводниковых материалов, таких как графен, силицен, нитриды бора и галлия, карбиды кремния, бора и алюминия [2–4]. Особый интерес в этом ряде представляет карбид кремния (SiC). Материалы на его основе демонстрируют набор уникальных электронных и оптических свойств, открывающие новые возможности для практических применений в передовых конструкциях наноустройств [5,6]. Однако основное внимание других авторов сосредоточено на изучении различных стехиометрических составов монослоя карбида кремния и влияния внедренных примесей. Исследования, посвященные типам упаковки графеноподобных монослоев карбида кремния, встречаются крайне редко. Это создает пробел в понимании зависимости характеристик многослойных структур от типа упаковки монослоев.

Ранее, с использованием первопринципных методов квантовой химии, были исследованы структурозависимые свойства семейства мультислойных аллотропов карбида кремния, отличающихся числом и взаимной ориентацией слоев [7,8]. В результате было выявлено формирование ряда стабильных аллотропных модификаций с привлекательными для разработки устройств наноэлектроники электрофизическими характеристиками. Целью настоящей работы является определение зависимости зонной структуры и электрофизических свойств низкоразмерного SiC от топологии элементарной ячейки в диапазоне числа слоев от 1 до 4.

2. Объекты и методы исследования

Объектом исследования являются многослойные структуры на основе атомарно тонкого карбида кремния, являющиеся топологическими аналогами графена с числом слоев 1–4. Каждый слой такой структуры представляет собой графеноподобную подрешетку, составленную из последовательно чередующихся атомов кремния и углерода. Рассмотрены следующие конфигурации (рис. 1, проекция в плоскости, образованной векторами кристаллической решетки, представлено строение до проведения процесса оптимизации):

1. структура монослоя SiC (тип A);

2. структуры типа $A\bar{A}$, с инверсией атомов в четных слоях;

3. структуры типа AB, полученные смещением четных слоев относительно нечетных таким образом, что атомы углерода располагаются в центрах шестиугольных ячеек нечетных слоев.

Кроме вышеописанных типов структур, в предыдущей работе [7] также рассматривались другие возможные

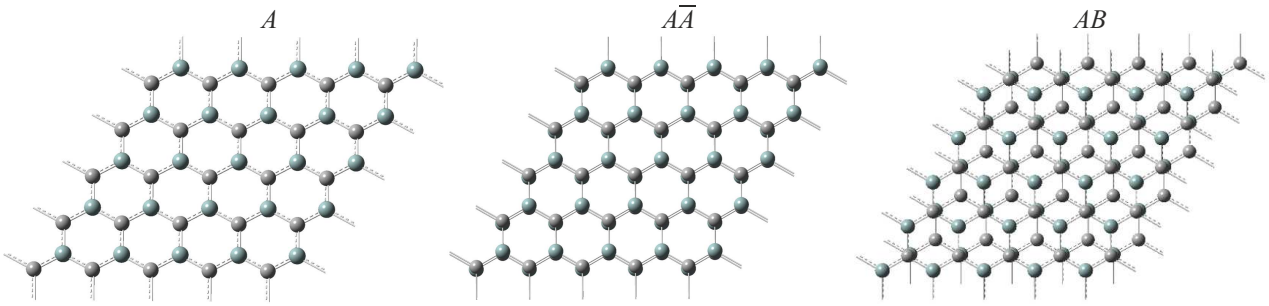


Рис. 1. Фрагменты рассмотренных 2D-аллотропов SiC до оптимизации структуры.

упаковки: типа *AA*, полученные путем наложения монослоев без инверсии атомов или смещения слоев; типа $A\bar{B}$, полученные из *AB* путем инверсии атомов в четных слоях; а также промежуточные варианты, полученные смещением четных слоев на другие расстояния. Результаты моделирования этих упаковок показали, что типу $A\bar{A}$ соответствуют структуры с наибольшей энергией связи между слоями (и поэтому они являются наиболее стабильными). К метастабильным структурам относятся упаковки *AA* и *AB*. Остальные упаковки монослоев стали обладать куда меньшей энергией, что свидетельствует об их нестабильности, и потому ограничивает возможность их синтеза и применения в проектировании устройств. Структуры *AA* в данной работе подробно не исследовались по причине большего интереса к типу упаковки *AB*, демонстрирующей прямозонный характер, и потому наиболее интересной для применения в оптических устройствах.

Расчеты были выполнены с использованием специализированного программного комплекса для решения квантово-химических задач Gaussian 9. Вычисления производились методом теории функционала плотности (DFT) в приближении локальной спиновой плотности (LSDA) с использованием валентно-расщепленного базиса 3-21G. Использовались периодические граничные условия двумерной кристаллической решетки. Количество точек в k-пространстве равно 80000. Выбор приближения LSDA опирается на данные из ряда теоретических работ по исследованию свойств похожих двумерных материалов (графен, силицен, различные изомеры SiC) [9–12]. Для подтверждения корректности выбранного метода было проведено моделирование однослойного карбида кремния с использованием различных базисов и приближений, доступных в пакете Gaussian. Критерием корректности было выбрано сходство значений длины связи ($R_{\mathrm{Si-C}}$) и приведенной энергии связи (E_b) структуры с экспериментальными и теоретическими данными из литературных источников. Согласно полученным результатам, приближение LSDA в базисе 3-21G дает результаты, наиболее близкие к данным из других работ. Так, полученные нами значения длины связи ($R_{\mathrm{Si-C}} = 1.805\,\text{Å}$) и энергии связи ($E_b \sim 8.3\,\text{eV/atom}$) подтверждаются проведенными ранее исследованиями [13–17]. При этом ширина запрещенной зоны монослоя E_g получилась равной 2 eV, что в среднем на 0.5 eV меньше, чем в других работах. Учитывая, что в приближении LSDA ширина запрещенной зоны материалов получается меньше реальных значений [18], величины ширины запрещенных зон в действительности должны быть выше на ~ 0.5 eV. Таким образом, результаты работы носят качественный характер, позволяя увидеть закономерности, возникающие при изменении параметров структур. Это может быть также полезно при рассмотрении, например, оптических свойств многослойного карбида кремния. Расчет остальных структур проходил в предположении, что, вследствие идентичности методов исследования и параметров структур (элементарная ячейка монослоя, стехиометрия), уровень доверия к результатам остается таким же, что и к данным для однослойной структуры.

Получение электрофизических характеристик рассматриваемого семейства структур проходил в два этапа. На первом этапе проводилась оптимизация геометрии исходных структур к минимуму поверхности потенциальной энергии. На втором этапе для полученных оптимальных конфигураций рассчитывались зонные структуры.

Для процесса оптимизации в качестве базовой элементарной ячейки использовалась элементарная ячейка графена, в которой один из атомов углерода был замещен атомом кремния. На основании результатов моделирования была получена геометрическая конфигурация, соответствующая решетке, в которой соблюдено условие баланса плотности зарядов (суммарный заряд равен нулю). Для подтверждения устойчивости полученного решения параметры исходной геометрии монослоя (постоянные решетки, межатомные связи и положение атомов относительно векторов трансляции при сохранении гексагональной структуры) варьировались в различных пределах. Повторное моделирование измененных структур показало, что все исходные топологические конфигурации приводят к одному и тому же решению, тем самым подтверждая устойчивость.

На основе полученных данных производился расчет основных энергетических характеристик 2D аллотропов SiC. Так как для построения зонных диаграмм использовалось ограниченное число точек в k-пространстве, то промежуточные значения на диаграмме получены в результате интерполяции. Результаты вычислений при-

ведены в таблице. Все расчеты были получены в Суперкомпьютерном центре Воронежского государственного университета.

Приведенная энергия связи рассчитывалась по формуле:

$$E_b = \frac{NE_{\text{tot}}(\text{Si}) + NE_{\text{tot}}(\text{C}) - E_{\text{tot}}(\text{Si}_N\text{C}_N)}{2N},$$

где $E_{\text{tot}}(\text{Si})$, $E_{\text{tot}}(\text{C})$, $E_{\text{tot}}(\text{Si}_N\text{C}_N)$ — полная энергия уединенного атома кремния, углерода и структуры, содержащей N атомов кремния и N атомов углерода.

Приведенная межплоскостная энергия связи рассчитывалась по формуле:

$$E_{bsh} = \frac{nE_{\text{tot}}(\text{SiC}) - E_{\text{tot}}(\text{Si}_N\text{C}_N)}{n},$$

где $E_{\text{tot}}(\text{SiC})$, $E_{\text{tot}}(\text{Si}_N\text{C}_N)$ — полная энергия однослойного карбида кремния и n-слойной структуры, содержащей N атомов кремния и N атомов углерода. Электрофизические свойства 2D аллотропов карбида кремния в зависимости от числа и конфигурации слоев ($R_{\text{Si}-\text{C}}$ — длина связи между атомами углерода и кремния в пределах слоя; R_{sh} — межслоевое расстояние, E_b — приведенная энергия связи; E_{bsh} — приведенная межплоскостная энергия связи; $E_{g(i)}$, $E'_{g(i)}$ — ширина запрещенной зоны при непрямозонном переходе в направлениях $M\Gamma K$ и $M'\Gamma K'$; $E_{g(d)}$, $E'_{g(d)}$ — ширина запрещенной зоны при прямозонном переходе в направлениях $M\Gamma K$ и $M'\Gamma K'$).

3. Результаты и обсуждение

Базовой структурой для анализа эволюции электрофизических свойств при послойном росте является монослой карбида кремния. Зонная диаграмма и распределения энергий орбиталей представлены на рис. 2. После релаксации атомы образовали планарную структуру с гексагональной симметрией $\bar{6}m2$. Длина химической связи $R_{\text{Si}-\text{C}} = 1.80$ Å, что на 0.38 Å больше длины связи в графене. Высшая занятая и низшая свободная орбитали, как и в случае графена, образованы π- и π^*-связанными p_z-орбиталями атомов кристаллической решетки [11]. В отличие от графена, карбид кремния является полупроводником с шириной межзонного перехода E_g порядка 2 eV (см. таблицу). Сравнительный анализ топологий, зонных структур и энергетических характеристик графена и однослойного карбида кремния позволяет выделить следующие особенности, характерные для последнего: наличие атомов с различной электроотрицательностью, увеличенная длина связи и постоянная решетки, более высокая плотность электронных орбиталей в атоме кремния. Эти особенности привели к устранению вырождения энергетических уровней в точке K и формированию запрещенной зоны. Высокая симметрия элементарной ячейки монослоя карбида кремния, схожая с ячейкой графена, приводит к локализации максимума валентной зоны и минимума зоны

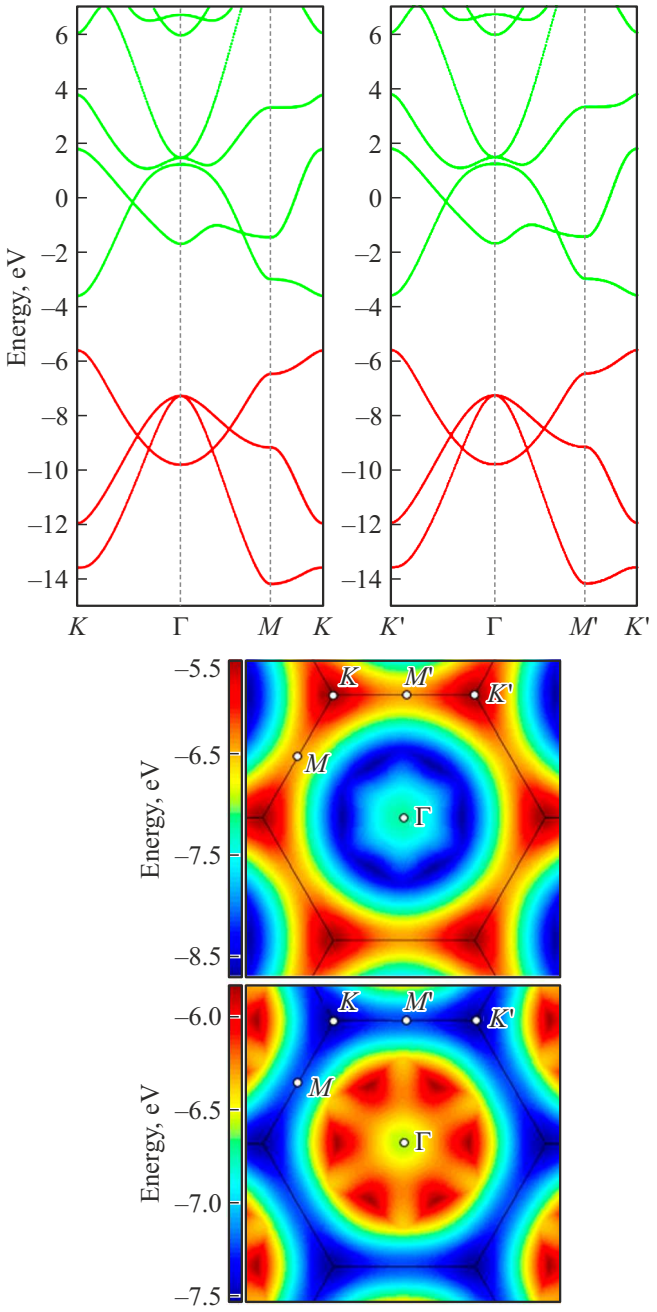


Рис. 2. Зонная структура монослоя SiC (слева), распределение энергий высшей занятой орбитали (HO-орбитали) (справа, сверху) и низшей свободной орбитали (LU-орбитали) (справа, снизу).

проводимости в одной точке k-пространства, то есть структура является прямозонным полупроводником.

Рассмотрим структуры типа AA, с инвертированными атомами на четных слоях. Трехслойная структура сохраняет симметрию $\bar{6}m2$, в то время как двух- и четырехслойная сменили группу симметрии на $3m$. Инверсия атомов, или идентичная операция сдвига, приводит к тому, что межслойная связь формируется за счет перекрытия всех $3p_z$-орбиталей кремния и

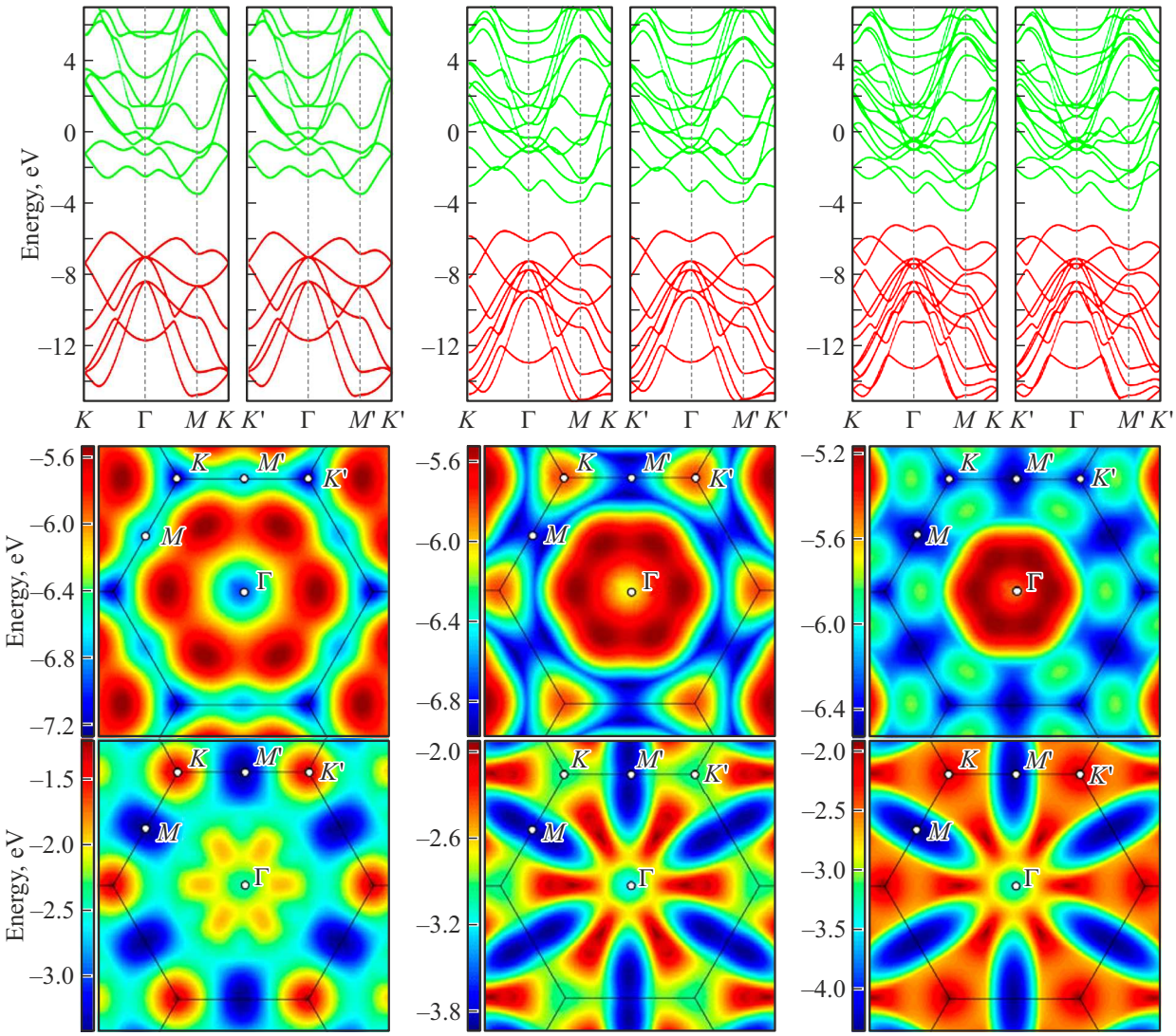


Рис. 3. Слева направо: данные для структур $A\bar{A}$, $A\bar{A}A$ и $A\bar{A}A\bar{A}$. Верхний ряд — зонные структуры, средний ряд — распределение энергии HO-орбитали, нижний ряд — распределение энергии LU-орбитали.

$2p_z$-орбиталей углерода. В данных структурах межслоевая длина связи больше ($R_{sh} = 2.2$ Å), чем межатомное расстояние в политипе SiC-3C в состоянии гибридизации sp^3 ($R_{\text{Si–C–3C}} = 1.89$ Å) [19]. При этом длина связи в пределах слоя незначительно увеличилась $R_{\text{Si–C}-A\bar{A}}) = 1.864$ Å). Значения этих величин хорошо согласуются с результатами ранее проведенных работ [20–22]. Однако, в работе [20] авторы показали, что атомы слоев перестали находиться в одной плоскости. Это показывает преобладание вклада sp^3-гибридизации в межслойную связь. Наши результаты показывают, что планарность слоев не была нарушена, то есть предпочтение отдается больше sp^2-гибридизации. Такое расхождение в результатах не является необычным, так как в подобных структурах наблюдается конкуренция между типами гибридизации [23].

Высокая энергия связи слоев ($E_{bsh-A\bar{A}} = 0.242$ eV/atom, $E_{bsh-A\bar{A}A} = 0.403$ eV/atom) (см. таблицу) показывает, что слои оказывают друг на друга сильное влияние. Зонные диаграммы претерпели значительные изменения (рис. 3). За счет образовавшегося частичного σ-взаимодействия высшая занятая (HOMO) и низшая свободная (LUMO) орбитали изменили расположение экстремумов. На диаграмме однослойной структуры видно, что высшие σ-связанные орбитали имеют максимум в точке Γ. Так как в π-связанных орбиталях в этой точке был минимум, то комбинация σ- и π-взаимодействий смещает потолок валентной зоны в середину направления Γ–K, приближаясь к точке Γ с ростом числа слоев. По аналогичному механизму дно зоны проводимости сместилось из положения K в положение M. Таким образом, в отличие от монослоя, структуры $A\bar{A}$ являются непрямозонными полупроводниками. Увеличение количества слоев приводит к увеличению плотности состояний, что в свою очередь приводит к уменьшению ширины межзонного перехода. Значения для двух-, трех-

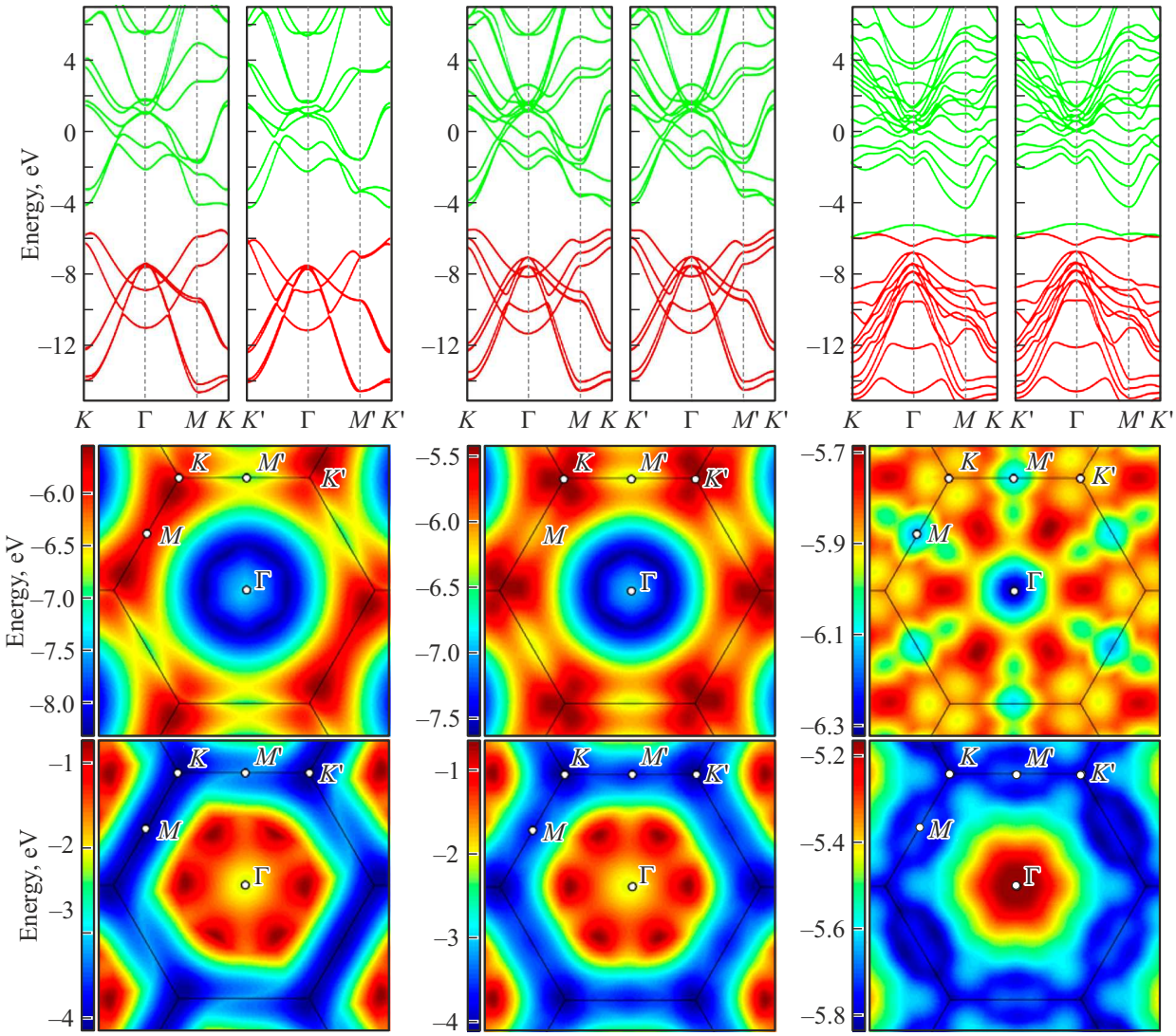


Рис. 4. Слева направо: данные для структур *AB*, *ABA*, *ABAB*. Верхний ряд — зонные структуры, средний ряд — распределение энергии HO-орбитали, нижний ряд — распределение энергии LU-орбитали.

и четырехслойной конфигураций E_g равно 2.15, 1.57 и 0.82 eV соответственно, различия в направлениях ΓMK и $\Gamma M'K'$ не превышают 0.01 eV (см. таблицу). Полученная зависимость контрастирует с результатами работы [24]. Авторы продемонстрировали, что в этих структурах ширина запрещенной зоны не зависит от количества слоев и остается практически постоянной величиной.

В структурах типа *AB* (со смещенными решетками на четных слоях) наблюдается обратная ситуация. Смещение слоев привело к тому, что в формировании межслоевой связи участвует только половина атомов — углерода четных слоев и кремния нечетных слоев. Остальные атомы располагаются в центре гексагонов, образованных атомами соседних слоев и принимают опосредованное участие в формировании межслоевой связи. При этом негибридизованные орбитали стали иметь меньшую область перекрытия между слоями. Поэтому межслойное взаимодействие в этих структурах в среднем в 1.6–1.8 раз меньше, чем в структурах типа $A\bar{A}$ ($E_{bsh-A\bar{A}} = 0.242$ eV/atom и $E_{bsh-AB} = 0.156$ eV/atom). Отсюда вытекает увеличение длины межслойной связи ($E_{sh-A\bar{A}} = 2.2$ Å и $E_{sh-AB} = 3.243$ Å) (см. таблицу). Это значение в среднем меньше на 0.5 Å, чем значения, которые были получены в аналогичных исследованиях [21,24–26].

Диаграммы двухслойной и трехслойной структур имеют вид, аналогичный однослойной конфигурации. Смещение экстремумов отсутствует, произошло только увеличение плотности состояний, которое вызвало уменьшение ширины межзонных переходов относительно монослоя (рис. 4). Таким образом, структуры обладают прямозонным характером. Отметим, что после оптимизации двухслойной конфигурации атомы верхнего слоя сместились относительно неоптимизированной структуры на небольшое расстояние, понизив симметрию до группы *m* (рис. 5). Такое расположение привело к

Структура	R_{Si-C}, Å	R_{sh}, Å	E_b, eV/atom	E_{bsh}, eV/atom	$E_{g(i)}$, eV	$E'_{g(i)}$, eV	$E_{g(d)}$, eV	$E'_{g(d)}$, eV
$A_$	1.805	–	8.322	–	2	2	2	2
$A\bar{A}$	1.846	2.200	8.444	0.242	2.15	2.15	3.08	3.08
$A\bar{A}A_$	1.837	2.334	8.524	0.403	1.57	1.582	2.176	2.188
$A\bar{A}A\bar{A}$	1.843	2.362	8.558	0.463	0.82	0.838	1.996	2
AB	1.805	3.243	8.401	0.156	1.403	1.715	1.483	1.725
ABA	1.804	3.174	8.433	0.223	1.326	1.364	1.346	1.364
$ABAB$	1.89	3.106	8.473	0.293	0.04	0.04	0.04	0.04

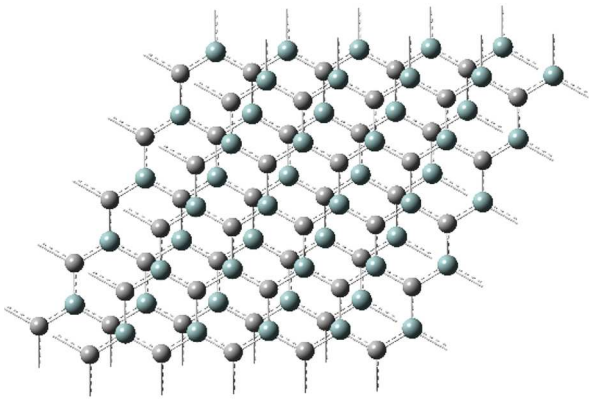


Рис. 5. Двуслойная структура AB до и после оптимизации.

несимметричному перекрытию орбиталей атомов обоих слоев. Поэтому ширина запрещенной зоны в этом аллотропе в направлениях ΓK и ΓK' сильно различаются: $E_{g(i)} = 1.4$ eV и $E'_{g(i)} = 1.71$ eV соответственно (см. таблицу).

При дальнейшем увеличении числа слоев структуры симметрия упаковки восстанавливается, трехслойная структура обладает группой симметрии $\bar{6}m2$. Тенденция на уменьшение ширины запрещенной зоны при увеличении числа слоев также сохраняется. В направлении Γ$M'K'$ образовался прямой переход $E'_{g(d)} = 1.364$ eV (см. таблицу). В направлении ГМК значения ширины запрещенной зоны составили $E_{g(i)} = 1.326$ eV и $E_{g(d)} = 1.346$ eV для непрямого и прямого переходов соответственно (см. таблицу). Видно смещение потолка валентной зоны из точки K в сторону точки Γ. Разница между прямым и непрямым переходом составляет всего около 0.02 eV, что указывает на высокую чувствительность свойств данной структуры к внешним воздействиям, таким как температура или давление. В частности, в работе [27] показано, что в материале с аналогичной разницей между ширинами прямого и непрямого переходов преобладают прямозонные переходы при температурах от 300 K и выше. Поэтому данная структура обладает перспективой для применения в оптоэлектронных устройствах. Длины волн, соответствующие межзонным переходам структур, находятся в пределах 723–935 nm, что охватывает видимую красную и ближнюю инфракрасную части спектра. Для количественной оценки влияния внешних факторов на смещение потолка валентной зоны требуется более глубокий анализ структур с данной упаковкой слоев.

Приведем также сравнение полученных результатов с данными из других исследований. Авторы работ [21,25,28] продемонстрировали непрямозонный характер этих структур. Ширины запрещенных зон при этом показали слабую зависимость от количества слоев. В работе [24] напротив, структуры обладают прямозонным характером, и увеличение количества слоев приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны. Кроме того, в этой работе подчеркивается, что в данной упаковке зонные структуры в отдельных участках k-пространства имеют почти бездисперсионный характер. Такое свойство открыло бы возможность проектирования приборов с уникальными характеристиками, например, с аномальными магнитными свойствами [29]. Наши расчеты не подтверждают этот вывод. На графиках рис. 4 видно, что HOMO- и LUMO-орбитали действительно имеют меньшую дисперсию в направлениях $M-K$ и $M'-K'$. Тем не менее, нельзя говорить о полностью бездисперсионном характере этих участков. Следовательно, ожидать проявления необычных свойств не приходится.

Особый интерес вызывает четырехслойная структура этого семейства. Ячейка квазикристалла стала аналогичной кубическому политипу 3C, группа симметрии сменилась на 3m. Из анализа топологии и электрофизических свойств следует, что трансформация исходной топологии привела к формированию квазикристалла образованного из подрешеток графена и силицена. Орбитали соседних атомов изменили тип гибридизации на sp^3, исходная планарность слоев была нарушена. Тем не менее, рассматриваемая структура имеет существенное различие в ширине запрещенной зоны. Карбид кремния модификации 3C имеет межзонный переход величиной около 2.4 eV [30]. В четырехслойной структуре установлено асимптотическое стремление ширины межзонного перехода к нулю. Даже учитывая недооценивание ширины запрещенной зоны приближением LSDA, разница значительна. В литературе (см., например, [24,25,28]) не встречается аналогичных результатов, что делает данный вывод особенно заслуживающим внимания. Можно предположить, что структура стала щелевым полупро-

водником в результате перекрытия электронных спектров графена и силицена в подрешетке. Более точные выводы получится сделать в отдельном исследовании.

4. Заключение

В настоящей работе проведено исследование зонных структур двух семейств многослойных материалов на основе монослоев карбида кремния в приближении LSDA. При изучении структурных изменений установлено, что количество слоев и их взаимное расположение позволяют изменять положение экстремумов зон валентности и проводимости, а также управлять шириной запрещенной зоны. Показано, что структуры семейства $A\overline{A}$ являются непрямозонными полупроводниками. Структуры упаковки типа AB демонстрируют прямозонный характер. При этом сильное влияние на их свойства будут оказывать внешние условия, например, такие как температура. Установлено, что увеличение числа слоев в обоих семействах приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны. Модифицируя эти параметры, можно достичь формирования на основе двумерного карбида кремния приборов широкого спектра применения с заданными характеристиками. Дискретный ряд ширин запрещенных зон находится в диапазоне от 0.82 до 2.15 eV, что охватывает область спектра от видимого красного до ближнего инфракрасного диапазона. Также установлено, что в структурах типа AB ширина запрещенной зоны резко уменьшается при числе слоев равном четырем, что является следствием преобразования структуры к квазикристаллической. Это позволяет еще больше расширить область применения многослойных структур карбида кремния.

Финансирование работы

Работа была выполнена при поддержке Воронежского Государственного Университета.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. Nature **499**, *7459*, 419 (2013).
[2] A. Rubio, J.L. Corkill, M.L. Cohen. Phys. Rev. B **49**, 5081 (1994).
[3] X. Zhang, L. Jin, X. Dai, G. Chen, G. Liu. ACS Appl. Mater. Interfaces **10**, *45*, 38978 (2018).
[4] D. Chodvadiya, U. Jha, P. Spiewak, K.J. Kurzydłowski, P.K. Jha. Appl. Surf. Sci. **593**, 153424 (2022).
[5] Z. Shi, Zhimingand Zhang, A. Kutana, B.I. Yakobson. ACS Nano **9**, *10*, 9802 (2015).
[6] Q. Wei, Y. Yang, G. Yang, X. Peng. J. Alloys Compd. **868**, 159201 (2021).
[7] А. Калашников, А. Тучин, Л. Битюцкая. Письма о материалах **9**, *2*, 173 (2019).
[8] A.V. Kalashnikov, A.V. Tuchin, L.A. Bityutskaya, T.V. Kulikova. J. Phys. Conf. Ser. **1199**, *1*, 012009 (2019).
[9] T.H. Osborn, A.A. Farajian. J. Phys. Chem. C **116**, *43*, 22916 (2012).
[10] I.J. Wu, G.Y. Guo. Phys. Rev. B **76**, 035343 (2007).
[11] S. Chabi, K. Kadel. Nanomaterials **10**, *11*, (2020).
[12] H.C. Hsueh, G.Y. Guo, S.G. Louie. Phys. Rev. B **84**, 085404 (2011).
[13] X. Chen, J. Jiang, Q. Liang, R. Meng, C. Tan, Q. Yang, S. Zhang, H. Zeng. J. Mater. Chem. C **4**, 7406 (2016).
[14] X. Lin, S. Lin, Y. Xu, A.A. Hakro, T. Hasan, B. Zhang, B. Yu, J. Luo, E. Li, H. Chen. J. Mater. Chem. C **1**, 2131 (2013).
[15] R. Gutzler, J. Schon. Z. Anorg. Allg. Chem. **643**, *21*, 1368 (2017).
[16] H. Sahin, S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Bekaroglu, E. Akturk, R.T. Senger, S. Ciraci. Phys. Rev. B **80**, 155453 (2009).
[17] M. Zhao, R. Zhang. Phys. Rev. B **89**, 195427 (2014).
[18] J. Heyd, J. Peralta, G. Scuseria, R. Martin. J. Chem. Phys. **123**, 174101 (2005).
[19] J. O'Connor, J. Smiltens. Silicon Carbide, a High Temperature Semiconductor: Proceedings of the Conference on Silicon Carbide, Boston, Massachusetts, April 2–3, 1959 (Pergamon Press, 1960).
[20] M. Huda, Y. Yan, M. Al-Jassim. Chem. Phys. Lett. **479**, 255 (2009).
[21] Y.-Z. Lan. Comput. Mater. Sci. **151**, 231 (2018).
[22] V. Susi, Tomaand Skakalova, A. Mittelberger, P. Kotrusz, M. Hulman, T.J. Pennycook, C. Mangler, J. Kotakoski, J.C. Meyer. Sci. Rep. **7**, *1*, 4399 (2017).
[23] J. Guan, D. Liu, Z. Zhu, D. Tomanek. Nano Lett. **16**, *5*, 3247 (2016).
[24] A. Yaghoubi, K. Masenelli-Varlot, O. Boisron, S. Ramesh, P. Melinon. Chem. Mater. **30**, *20*, 7234 (2018).
[25] Z. Xu, Y. Li, Z. Liu, C. Li. Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostructures **79**, 198 (2016).
[26] G. Gao, N.W. Ashcroft, R. Hoffmann. J. Am. Chem. Soc. **135**, *31*, 11651 (2013).
[27] W. Du, S.A. Ghetmiri, B.R. Conley, A. Mosleh, A. Nazzal, R.A. Soref, G. Sun, J. Tolle, J. Margetis, H.A. Naseem, S.-Q. Yu. Appl. Phys. Lett. **105**, *5*, 051104 (2014).
[28] Zh. Xu, Ya. Li, Zh. Liu. Mater. Des. **108**, 333 (2016).
[29] Z. Liu, F. Liu, Y.-S. Wu. Chin. Phys. B **23**, *7*, 077308 (2014).
[30] D. Bimberg, M. Altarelli, N. Lipari. Solid State Commun. **40**, *4*, 437 (1981).

Редактор А.Н. Смирнов