

# Оценки значений спонтанной поляризации и диэлектрических проницаемостей кристаллов AlN, GaN, InN и SiC

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei.Davydov@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 16 октября 2008 г.)

Методом связывающих орбиталей Харрисона рассчитаны значения спонтанной поляризации и диэлектрических проницаемостей нитридов алюминия, галлия и индия, а также карбида кремния, имеющих структуру вюрцита. Единственный подгоночный параметр  $\gamma$ , характеризующий поправки на локальное поле, определялся из подгонки расчетного значения высокочастотной диэлектрической проницаемости  $\epsilon_\infty$  для структуры сфалерита к данным эксперимента. Результаты расчета удовлетворительно согласуются с существующими экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Работа выполнена в рамках программы Президиума РАН „Квантовая физика конденсированных сред“, целевой программы „Развитие научного потенциала высшей школы (2009–2010)“ Минобрнауки РФ № 2.1.1/2503 и поддержана грантом РФФИ (проекты № 07-020063а).

PACS: 77.84.Bw, 77.22.Ej, 78.20.Ci

1. Карбид кремния и нитриды металлов группы III по-прежнему привлекают пристальное внимание исследователей, о чем свидетельствуют ежегодные международные конференции, посвященные этой тематике (см., например, работы [1,2] и ссылки в них). Одной из наименее изученных характеристик некубических политипов таких кристаллов является их спонтанная поляризация  $P_{sp}$ . В особенности это относится к карбиду кремния, для многообразных политипов которого, насколько известно автору, экспериментальные данные по  $P_{sp}$  вообще отсутствуют, а результаты расчетов имеют сильный разброс [3]. Более того, разброс данных (как теоретических, так и экспериментальных) наблюдается, хотя и в меньшей степени, и для диэлектрических проницаемостей [4–6].

Главной целью настоящей работы является оценка величины спонтанной поляризации для 2H-политипа SiC. В отличие, однако, от работ [3,7], в которых подобные оценки уже делались, в настоящей работе мы (в рамках той же расчетной схемы) рассчитаем значения  $P_{sp}$  для гексагональных кристаллов AlN, GaN и InN. При этом будем использовать лишь один подгоночный параметр, величину которого определим из высокочастотных диэлектрических проницаемостей  $\epsilon_\infty$  кубической фазы рассматриваемых кристаллов. Попутно вычисляются и значения диэлектрических проницаемостей для структур вюрцита.

2. В качестве расчетной схемы принимается метод связывающих орбиталей (МСО) Харрисона [8,9], достаточно хорошо зарекомендовавший себя для простых оценок полупроводниковых параметров. МСО оперирует всего тремя параметрами: расстоянием между ближайшими соседями (БС)  $d$  и энергиями  $s$ - и  $p$ -состояний  $\epsilon_s$  и  $\epsilon_p$ . Энергия гибридованной  $sp^3$ -орбитали определяется как  $\epsilon_h = (\epsilon_s + 3\epsilon_p)/4$ , где энергии отсчитываются

от уровня вакуума. Вводятся два матричных элемента: полярная энергия  $V_3 = |\epsilon_h^a - \epsilon_h^c|/2$ , где верхние индексы  $a$  и  $c$  относятся соответственно к аниону и катиону, и ковалентная энергия  $V_2 = \eta(\hbar^2/md^2)$ , где  $m$  — масса свободного электрона,  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка,  $\eta$  — безразмерный множитель, равный для  $sp^3$ -гибридизации 3.22 [9]. Эти матричные элементы позволяют построить характеристики  $sp^3$ -связей: полярность  $\alpha_p = V_3/(V_2^2 + V_3^2)^{1/2}$  и ковалентность  $\alpha_c = V_2/(V_2^2 + V_3^2)^{1/2}$  связи. Легко видеть, что  $\alpha_p^2 + \alpha_c^2 = 1$ .

Параметры МСО, представленные выше, описывают кристалл как двухатомную молекулу с  $\sigma$ -связью. Для того чтобы моделировать кристалл, необходимо ввести еще один матричный элемент  $V_1^{a,c} = |\epsilon_s^{a,c} - \epsilon_p^{a,c}|/4$ , описывающий переходы между состояниями одного и того же атома [8,9]. При этом удобно ввести еще одну характеристику  $\alpha_m = \sqrt{2}[(V_1^a)^2 + (V_1^c)^2]^{1/2}/V_2$ , называемую степенью металличности.

Все параметры сведены в табл. 1. Значения  $d$  для нитридов брались из работы [10] (структуре сфалерита отвечают столбцы „ideal“ — см. табл. 1 работы [10]), для SiC значение  $d = 1.89 \text{ \AA}$  [3–5]. Атомные термы  $\epsilon_s$  и  $\epsilon_p$  брались из таблиц Хермана–Скиллмана [8].

3. В работе [11] было показано, что дипольный момент  $sp^3$ -связи определяется выражением

$$\mathbf{p}_b = \gamma e \alpha_p \left( 1 - \frac{9}{16} \alpha_m^2 \alpha_c^4 \right) \mathbf{d}, \quad (1)$$

где  $e$  — величина заряда электрона,  $\mathbf{d}$  — вектор, направленный от аниона к катиону и равный по модулю  $d$ ,  $\gamma$  — безразмерный множитель порядка единицы. Этот множитель был введен Харрисоном для описания тетраэдрических кристаллов и рассматривался просто как масштабный фактор (см. подробнее [8]). Легко

Таблица 1. Параметры МСО

Структура	Параметр	AlN	GaN	InN	SiC
Вюрцит	$d_{\parallel}, \text{Å}$	1.907	1.971	2.200	1.90
	$d_{\perp}, \text{Å}$	1.890	1.955	2.185	1.88
	$\vartheta, ^{\circ}$	108.19	109.17	108.69	109.47
	$V_2^{\parallel}, \text{eV}$	6.75	6.32	5.07	6.83
	$V_2^{\perp}, \text{eV}$	6.87	6.42	5.14	6.94
	$\alpha_c^{\parallel}$	0.86	0.85	0.77	0.98
	$\alpha_c^{\perp}$	0.86	0.85	0.78	0.98
	$\alpha_p^{\parallel}$	0.52	0.53	0.63	0.20
	$\alpha_p^{\perp}$	0.51	0.52	0.63	0.20
	$\alpha_m^{\parallel}$	0.67	0.74	0.89	0.59
$\alpha_m^{\perp}$	0.65	0.73	0.88	0.58	
Сфалерит	$d, \text{Å}$	1.904	1.959	2.195	1.89
	$V_3, \text{eV}$	4.09	3.92	4.16	1.415
	$V_2, \text{eV}$	6.77	6.39	5.10	6.87
	$\alpha_c$	0.86	0.86	0.80	0.98
	$\alpha_p$	0.51	0.52	0.59	0.20
	$\alpha_m$	0.66	0.735	0.885	0.585

Таблица 2. Расчетные значения диэлектрических проницаемостей (без учета металличности)

Структура	Величина	AlN	GaN	InN	SiC
Вюрцит	$\epsilon_{\infty}(\parallel)$	4.81	5.57	8.83	5.61
	$\epsilon_0(\parallel)$	7.04	8.52	18.44	6.18
	$\epsilon_{\infty}(\perp)$	4.75	4.51	8.77	5.50
	$\epsilon_0(\perp)$	6.99	8.43	18.40	6.03
Сфалерит	$\epsilon_{\infty}$	4.82	5.55	8.84	6.52
	$\epsilon_0$	7.16	8.68	18.05	6.88
	$\gamma$	1.42	1.53	2.19	1.40

показать, что сумма дипольных моментов  $\mathbf{p}_b$  по четырем связям тетраэдрического кубического кристалла равна нулю, откуда следует, что такой кристалл спонтанной поляризацией не обладает.

В работе [11] было также показано, что электронная (высокочастотная) диэлектрическая восприимчивость  $\chi_1^{\text{el}}$  кубического кристалла есть

$$\chi_1^{\text{el}} = \gamma^2 \frac{Ne^2\alpha_c^3 d^2}{12V_2} \left( 1 + \frac{9}{16} \alpha_m^2 \alpha_c^2 (1 - 5\alpha_p^2) \right), \quad (2)$$

где  $N = (3\sqrt{3}/2)d^{-3}$  — плотность валентных электронов. Така как высокочастотная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_{\infty} = 1 + 4\pi\chi_1^{\text{el}}$ , выражение (2) может быть использовано для определения множителя  $\gamma$ . Положим два ряда значений: 1)  $\epsilon_{\infty} = 4.84, 5.29$  и  $8.40$  для AlN, GaN и InN соответственно [12]; 2)  $4.8$  для AlN [8],  $5.8$  и  $9.3$  для GaN и InN [13]. Составляя среднее арифметическое из найденных таким образом значений  $\gamma$ , получим  $\gamma = 1.461, 1.591$  и  $2.577$  с учетом металличности и  $\gamma = 1.416, 1.530$  и  $2.193$  без учета металличности соответственно для AlN, GaN и InN.

Принимая для кубического 3С-политипа карбида кремния  $\epsilon_{\infty} = 6.52$  [14], получим  $\gamma = 1.304$  с учетом и  $1.396$  без учета металличности. Следует отметить, что для всех нитридов  $\gamma(\alpha_m \neq 0) > \gamma(\alpha_m = 0)$ , тогда как для SiC имеет место обратное неравенство. Такое различие объясняется тем обстоятельством, что поляриность связи в карбиде кремния очень мала (табл. 1). Поэтому значение  $(1 - 5\alpha_p^2)$ , входящее в выражение (2), положительно для SiC и отрицательно для нитридов.

Ионный (решеточный) вклад в диэлектрическую восприимчивость  $\chi_1^{\text{ion}}$  был вычислен в работе [15] без учета металличности. Этот вклад имеет вид

$$\chi_1^{\text{ion}} = \gamma^2 \frac{Ne^2\alpha_p^2(1 + 2\alpha_c^2)d^2}{24\alpha_c V_2}. \quad (3)$$

Тогда низкочастотная (статическая) диэлектрическая восприимчивость  $\chi_1 = \chi_1^{\text{el}} + \chi_1^{\text{ion}}$ , а соответствующая диэлектрическая проницаемость  $\epsilon_0 = 1 + 4\pi\chi_1$ .

Результаты расчета диэлектрических проницаемостей  $\epsilon_{\infty}$  и  $\epsilon_0$  для структуры сфалерита при  $\alpha_m = 0$  представлены в табл. 2. Здесь имеет смысл сопоставить полученные нами значения статической диэлектрической проницаемости  $\epsilon_0$  с имеющимися в литературе данными.

Начнем с рассмотрения нитридов. Так, в работе [16] приведены значения  $\epsilon_0 = 8.5, 10.0$  и  $15.3$  для AlN, GaN и InN соответственно,  $10.69$  [17],  $9.7$  [18] и  $12.2$  [13] для GaN. Сопоставление этих величин с результатами наших расчетов, представленных в табл. 2, показывает, что для AlN и GaN наши результаты несколько занижены, тогда как для InN они завышены. Что касается расчетных значений  $\epsilon_{\infty}$  (табл. 2), то они, естественно, лежат в интервале значений  $\epsilon_{\infty}$ , по которым проводилась подгонка множителя  $\gamma$ .

Перейдем к расчету для карбида кремния. По данным [13] для кубического 3С-политипа  $\epsilon_0 = 9.7$ ; в [19] приводится практически то же самое значение  $9.72$ ; оценки, приведенные в [8], дают значение  $10.50$ . Все эти величины приблизительно в  $1.5$  раза превышают полученное нами значение  $6.88$ , что связано с малостью значения  $\alpha_p^2$ . Согласие можно несколько улучшить, если в расчетах использовать значения атомных термов  $\epsilon_s$  и  $\epsilon_p$  из таблиц Манна, приведенных в [20] (см. далее).

4. Перейдем к расчету спонтанной поляризации. Введем дипольный момент  $p_b^{\parallel}$  для  $sp^3$ -связи, ориентированный вдоль гексагональной оси  $c$ , и дипольные моменты, соответствующие трем  $sp^3$ -связям, ориентированным под углом  $\vartheta$  к этому направлению, которые обозначим как  $p_b^{\perp}$ . При этом мы можем пользоваться выражением (1), приписав, однако, параметрам  $d, \alpha_c, \alpha_p$  и  $\alpha_m$  верхние индексы  $\parallel$  и  $\perp$ . Способ, которым эта трансформация осуществляется для степеней ковалентности

<sup>1</sup> В этой и некоторых других ссылках значения  $\epsilon_{\infty}$  и  $\epsilon_0$  приводятся для вюрцитной структуры, однако не оговаривается, о каком компоненте диэлектрического тензора идет речь, а именно параллельном  $\epsilon^{\parallel}$  или перпендикулярном  $\epsilon^{\perp}$  относительно оси  $c$  компоненте. Если различия между компонентами  $\epsilon^{\parallel}$  и  $\epsilon^{\perp}$  не делается, будем относить такую информацию к структуре сфалерита.

**Таблица 3.** Расчетные значения спонтанной поляризации  $P_{sp}$  ( $10^{-2}$  C/m<sup>2</sup>) с учетом (строки 1 и 2) и без учета (строки 3 и 4) металличности

№ п/п	Величина	AlN	GaN	InN	SiC
1	$\gamma$	1.42	1.59	2.58	1.30
2	$ P_{sp} $	7.33	2.94	7.66	0.97
3	$\gamma$	1.42	1.53	2.19	1.40
4	$ P_{sp} $	8.70	3.73	7.93	1.47

$\alpha_c$  и полярности  $\alpha_p$ , описан в работе [5] для карбида кремния. Что же касается степени металличности  $\alpha_m$ , то для перехода к значениям  $\alpha_m^{\parallel}$  и  $\alpha_m^{\perp}$  нужно заменить ковалентную энергию  $V_2 \propto d^{-2}$  соответственно на  $V_2^{\parallel} \propto d_{\parallel}^{-2}$  и  $V_2^{\perp} \propto d_{\perp}^{-2}$ , где  $d_{\parallel}$  — расстояние между БС для связи, направленной вдоль оси  $c$ ;  $d_{\perp}$  — расстояние между БС вдоль трех других связей. Значения  $d_{\parallel}$ ,  $d_{\perp}$  и углов  $\vartheta$  брались для нитридов из работы [10]. Полученные значения сведены в табл. 1.

Процедура вычисления значения  $P_{sp}$  разработана в [3] и сводится к следующему. Вычислив значения  $p_b^{\parallel}$  и  $p_b^{\perp}$ , находим результирующий момент элементарной ячейки, равный (вдоль оси  $c$ )

$$\tilde{p}_b = p_b^{\parallel} + 3p_b^{\perp} \cos \vartheta. \quad (4)$$

В соответствии с классическим определением [21]

$$P_{sp} = \frac{\tilde{p}_b}{\Omega}, \quad (5)$$

где  $\Omega$  — объем элементарной ячейки. В наших расчетах мы принимаем  $\Omega = 16/3\sqrt{3}d^3$ , т.е. то же значение, что и для структуры сфалерита.<sup>2</sup>

Результаты расчетов представлены в табл. 3. Для нитридов (со структурой вюрцита) значения спонтанной поляризации вычислялись в работе [12], в которой было показано, что  $|P_{sp}| = (8.1, 2.9, 3.2) \cdot 10^{-2}$  C/m<sup>2</sup> для AlN, GaN и InN соответственно.<sup>3</sup> Вычисленные нами значения достаточно хорошо согласуются с расчетами [12] для AlN и GaN, но намного превышают поляризацию для InN. Причина малого значения спонтанной поляризации нитрида галлия состоит в первую очередь в том, что угол  $\vartheta = 109.17^\circ$  близок к идеальному углу  $109.47^\circ$ , вследствие чего результирующий дипольный момент элементарной ячейки мал.

Расчеты, выполненные для гексагонального 2H-политипа SiC в работе [22] (см. также [3]), дают значения

<sup>2</sup> Как следует из табл. 1, длина связи вдоль оси  $c$  увеличивается, тогда как для трех остальных связей уменьшается. Поэтому ошибка, вносимая различием объемов элементарных ячеек для структур вюрцита и сфалерита, проявляется только в третьем знаке после запятой и может игнорироваться.

<sup>3</sup> Обычно для значений  $P_{sp}$  приводят отрицательные величины. Дело в том, что в качестве стандартного направления оси  $c$  выбирается направление от катиона к аниону, тогда как момент соответствующей связи  $\mathbf{p}_b$ , наоборот, направлен от аниона к катиону. Отсюда принято приписывать  $P_{sp}$  отрицательные значения.

$4.32 \cdot 10^{-2}$  и  $3.35 \cdot 10^{-2}$  C/m<sup>2</sup> без учета и с учетом релаксации решетки соответственно, что в 3–4 раза превышает полученные нами результаты. Видимо, справедливость тех или иных результатов может определить только эксперимент.

5. Значения диэлектрических проницаемостей (без учета металличности) для гексагональных структур нитридов и карбида кремния (2H-политип) представлены в табл. 2. Приведем некоторые (известные нам) экспериментальные данные. Нитрид алюминия:  $\epsilon_0(\parallel) = 10.2$  и  $11.9$  [23];  $\epsilon_0(\parallel) = 9.14$  [24];  $\epsilon_0(\parallel) = 10.7$  и  $\epsilon_0(\perp) = 9.0$  [25]; нитрид галлия:  $\epsilon_0(\parallel) = 10.4$  и  $\epsilon_0(\perp) = 9.5$  [26]; нитрид индия:  $\epsilon_0(\parallel) = 14.6$  [27]; карбид кремния:  $\epsilon_{\infty}(\parallel) = 4.618$  и  $\epsilon_{\infty}(\perp) = 4.379$  [28]. Сравнение с результатами нашего расчета (табл. 3) показывает, что для высокочастотных диэлектрических проницаемостей согласие вполне удовлетворительное, тогда как полученные нами значения статических диэлектрических проницаемостей (за исключением InN) значительно ниже данных других авторов.

Так как в расчетные формулы (1)–(3) характеристики связи  $\alpha_c$ ,  $\alpha_p$  и  $\alpha_m$  входят в сравнительно высоких степенях (особенно это относится к  $\alpha_c$ ), ясно, что использование различных таблиц атомных термов  $\epsilon_s$  и  $\epsilon_p$  приведет к заметно различающимся результатам. При использовании термов Манна [20] получим значения параметров, представленные в табл. 4 и 5, там же приведены и величины, найденные по данным Хермана–Скиллмана.

Из сравнения табл. 5 и 1 следует, что значения характеристик связи, рассчитанные по термам Манна,

**Таблица 4.** Исходные данные, вычисленные по данным Манна (верхний ряд чисел) и Хермана–Скиллмана (нижний ряд чисел). Величины  $\epsilon_s$ ,  $\epsilon_p$ ,  $\epsilon_h$  и  $V_1$  даны в eV

Величина	N	C	Si	Al	Ga	In
$\epsilon_s$	26.32	19.38	14.79	10.71	11.55	10.14
	23.04	17.52	13.55	10.11	11.37	10.12
$\epsilon_p$	13.84	11.07	7.59	5.71	5.67	5.37
	11.47	8.97	6.52	4.86	4.90	4.69
$\epsilon_h$	16.96	13.15	9.39	6.96	7.14	6.56
	14.36	11.11	8.28	6.17	6.52	6.05
$V_1$	3.12	2.08	1.80	1.25	1.47	1.19
	2.89	2.14	1.76	1.31	1.62	2.715

**Таблица 5.** Параметры MCO для структуры сфалерита

Величина	AlN	GaN	InN	SiC
$V_3$ , eV	5.00	4.91	5.20	1.88
$V_2$ , eV	6.77	6.39	5.10	6.87
$\alpha_c$	0.80	0.79	0.70	0.96
$\alpha_p$	0.59	0.61	0.71	0.26
$\alpha_m$	0.70	0.76	0.93	0.57

заметно отличаются от вычисленных с помощью таблиц Хермана–Скиллмана:  $\alpha_c$  уменьшаются, а  $\alpha_p$  и  $\alpha_m$  увеличиваются. Тогда, выполняя, как и выше, подгонку параметра  $\gamma$  по значениям  $\varepsilon_\infty$ , получаем, например, для статических диэлектрических проницаемостей структуры сфелерита:  $\varepsilon_0 = 8.54, 10.35, 25.45$  и  $7.16$  для AlN ( $\gamma = 1.56$ ), GaN ( $\gamma = 1.71$ ), InN ( $\gamma = 2.56$ ) и SiC ( $\gamma = 1.43$ ) соответственно. Для нитридов алюминия и галлия, а также для карбида кремния найденные значения  $\varepsilon_0$  лучше согласуются с экспериментальными данными [16], чем результаты расчетов по Херману–Скиллману, приведенные в табл. 2. Что же касается нитрида индия, то здесь ситуация обратная: расчет по таблицам Манна дает завышенное значение  $\varepsilon_0$ .

Подводя итоги, следует отметить, что весьма простой способ оценки спонтанной поляризации и диэлектрических проницаемостей нитридов, основанный на МСО, дает, в сущности, те же результаты, что и сложные расчеты из первых принципов. Для того чтобы судить о справедливости той или иной оценки, требуются соответствующие экспериментальные данные.

Автор признателен С.Ю. Карпову из интерес к работе и полезные обсуждения.

## Список литературы

- [1] Proc. 6th Eur. Conf. on silicon carbide and related materials. Newcastle upon Tyne, U.K. (2006). Mater. Sci. Forum **556–557** (2007).
- [2] Int. Conf. on silicon carbide and related materials (ICSCRM). Otsu, Japan (2007). Technical Digest.
- [3] С.Ю. Давыдов, А.В. Трошин. ФТТ **49**, 723 (2007).
- [4] С.Ю. Давыдов. ФТП **36**, 45 (2002).
- [5] С.Ю. Давыдов. ФТП **48**, 1748 (2006).
- [6] S.Yu. Karpov. In: Nitride semiconductor devices: principles and simulation / Ed. J. Piprek. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2007). Ch. 14. P. 303.
- [7] С.Ю. Давыдов. ФТТ **48**, 1407 (2006).
- [8] У. Харрисон. Электронная структура твердых тел. Мир, М. (1983). Т. 1. 381 с.
- [9] W.A. Harrison. Phys. Rev. B **27**, 3592 (1983).
- [10] O. Ambacher, J. Majewski, C. Miskys, A. Link, M. Hermann, M. Eickhoff, M. Stutzmann, F. Bernardini, V. Fiorentini, V. Tilak, B. Schaff, L.F. Eastman. J. Phys.: Cond. Matter **14**, 3399 (2002).
- [11] С.Ю. Давыдов, Е.И. Леонов. ФТТ **29**, 2890 (1987).
- [12] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt. Phys. Rev. B **56**, R 10 024 (1997).
- [13] Физические величины. Справочник / Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Энергоатомиздат, М. (1991). 1232 с.
- [14] K. Karch, F. Bechstedt, P. Pavone, D. Strauch. Phys. Rev. B **53**, 13 400 (1996).
- [15] С.Ю. Давыдов, Е.И. Леонов. ФТТ **30**, 1326 (1988).
- [16] V.W.L. Chin, T.L. Tansley, T. Osotchan. J. Appl. Phys. **75**, 7365 (1994).
- [17] W.W. Chow, A.F. Wright, J.S. Nelson. Appl. Phys. Lett. **68**, 296 (1996).
- [18] V.M. Polyakov, F. Schwierz. J. Appl. Phys. **98**, 023 709 (2005).
- [19] В.И. Гавриленко, А.М. Грехов, Д.В. Корбутяк, В.Г. Литовченко. Оптические свойства полупроводников. Справочник. Наук. думка, Киев (1987). 608 с.
- [20] W.A. Harrison. Phys. Rev. B **31**, 2121 (1985).
- [21] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Электродинамика сплошных сред. Наука, М. (1982). 624 с.
- [22] A. Qteq, V. Heine, R.J. Needs. Phys. Rev. B **45**, 6534 (1992).
- [23] T. Kamiya. J. Appl. Phys. **35**, 4421 (1996).
- [24] A.T. Collins, E.C. Lightowers, P.J. Dean. Phys. Rev. **158**, 833 (1967).
- [25] R. Dingle, H.L. Stormer, A.C. Gossar, W. Weigmann. Appl. Phys. Lett. **33**, 665 (1978).
- [26] A.S. Barker, jr., M. Piegems. Phys. Rev. B **7**, 743 (1973).
- [27] F. Bernardini, V. Fiorentini. Phys. Rev. Lett. **79**, 3958 (1997).
- [28] K. Karch, G. Portisch, F. Bechstedt, P. Pavone, D. Strauch. Inst. Phys. Conf. Ser. N 142 (1996). Ch. 3. P. 967.