

Pemodelan Kalkulasi Modulus Bulk Keramik Silikon Karbida 3C dengan Perangkat Lunak CP2K

Muhammad Syaifun Nizar*, Rifki Septawendar

Balai Besar Keramik, Jalan Ahmad Yani No. 392 Bandung

*Penulis korespondensi: nizar@kemenperin.go.id

DOI: <https://doi.org/10.24198/cna.v5.n3.16061>

Abstrak: Perkembangan penelitian material khususnya untuk keramik maju saat ini mulai menuju ke arah komputasi material dalam perancangan material baru atau untuk simulasi pemodelan material. Dalam penelitian ini digunakan perangkat lunak CP2K untuk kalkulasi energi suatu material dengan menggunakan prinsip pertama atau *ab initio*. Tulisan ini bertujuan untuk menghitung nilai *bulk* modulus kristal silikon karbida dengan menggunakan perangkat lunak CP2K. Energi material yang dihitung adalah kristal keramik SiC 3C, yang selanjutnya dihitung dengan menggunakan persamaan Birch-Murnaghan untuk mengetahui nilai *bulk* modulus dari data energi hasil kalkulasi. Hasil perhitungan didapat nilai *bulk* modulus 218,6 GPa, yang paling mendekati nilai hasil percobaan laboratorium adalah perhitungan dengan basis set PBE dengan interval kisi atom 0,001 Å dengan selisih 2,8 % dari hasil percobaan laboratorium. Nilai *bulk* modulus dipengaruhi oleh data hasil perhitungan DFT dan kerapatan jarak kisi atom dan basis set yang dipilih untuk perhitungan energi.

Kata kunci: pemodelan, CP2K, modulus bulk, SiC, Birch Murnaghan, DFT

Abstract: *The research development on materials today especially in the field of advanced ceramics begin towards to materials computation for new materials design or materials modeling simulation. In this research, CP2K software was used to calculate material energies using the first principles method or ab initio. The purpose of this study is to calculate silicon carbide ceramic crystal bulk modulus value. SiC 3C ceramic energies were calculated with Birch-Murnaghan equation to find bulk modulus value from the energy data. The obtained value of the bulk modulus are 218.6 GPa, which is close to experiment value with 2.8 % difference from PBE 0.001 Å lattice constant calculation. Modulus bulk value influenced by DFT calculation result and atom lattice constant interval also selected basis set for calculation.*

Keywords: *modelling, CP2K, bulk modulus, SiC, Birch Murnaghan, DFT*

PENDAHULUAN

Penelitian di bidang komputasi material sangat diperlukan dalam penelitian keramik maju untuk memahami perilaku material baik dalam skala atom ataupun skala makroskopis (Gates & Hinkley 2003) karena dengan bantuan komputer akan membantu memberikan percepatan penelitian. Teknologi keramik maju saat ini banyak mengadopsi teknik modifikasi karakteristik material dalam skala nano (Bandyopadhyay 2008) atau bisa dikatakan sifat material sangat ditentukan dengan karakteristik struktur mikro, untuk pengamatan skala nano dengan instrumen yang ada saat ini ada beberapa keterbatasan untuk mengamati sifat material tersebut. Komputasi dapat membantu dalam perancangan model material yang baru yang belum bisa dilakukan dengan percobaan laboratorium, dan juga dapat dilakukan simulasi yang bisa diamati dalam skala atom atau molekuler yang kemudian dilanjutkan dengan pendekatan teoritis, instrumental dan proses. Dengan kata lain pemodelan material adalah metode ilmiah merumuskan imitasi yang lebih sederhana dari keadaan nyata suatu material (Gates & Hinkley 2003).

Saat ini sudah banyak perangkat lunak pemodelan untuk komputasi material, salah satu perangkat lunak yang biasa digunakan untuk komputasi simulasi atomistik adalah CP2K, CP2K adalah paket perangkat lunak *open source* untuk menghitung teori fungsi kerapatan atau *density functional theory* (DFT) yang dibuat oleh Prof. Jurg Hutter dan kawan-kawan. Yang membedakan perangkat lunak CP2K dengan software DFT lainnya adalah adanya implementasi algoritma Quickstep yang menggunakan fungsi gaussian basis ganda yang berpusat di atom (VandeVondele *et al.* 2005). Perangkat lunak CP2K ini mempunyai banyak fungsi seperti untuk kalkulasi DFT, Classical, Hybrid-DFT, *Many-body correlation*, QM/MM, *Molecular Dynamics*, *Monte Carlo*, *Relaxation*, *Nudged Elastic Band*, *Free Energy* dan lain sebagainya (Hutter *et al.* 2014). Perkembangan trend penggunaan CP2K dalam penelitian dari tahun ketahun menunjukkan adanya peningkatan popularitas, dimana paling banyak digunakan ke 2 di supercomputer ARCHER dan ke 3 di HECToR. Dengan basis pengguna yang banyak diharapkan untuk kedepannya dapat membuat penelitian dengan menggunakan perangkat lunak ini

berkesinambungan. Khusus untuk material keramik, CP2K dapat digunakan untuk simulasi komputasi material zat padat atau material kristal dengan menggunakan metode perhitungan pemodelan quantum DFT (Parr & Wang 1989) yaitu menghitung energi total pada temperatur 0 K material tersebut atau disebut juga energi keadaan dasar atau ground state energy.

Dari komputasi DFT perhitungan energi suatu material dapat dihitung pendekatan sifat fisik material tersebut, salah satu sifat fisik yang dapat dihitung adalah modulus bulk (Gaudoin *et al.* 2002), yaitu modulus yang menunjukkan ketahanan perubahan volume suatu material terhadap tegangan hidrostatik. Dari modulus bulk dapat diturunkan menjadi sifat-sifat fisis yang lain seperti modulus geser, modulus young, poisson ratio. Sifat mekanik keramik dapat diperkirakan dari data hasil perhitungan pemodelan, perhitungan ini berguna untuk memberikan informasi validasi hasil percobaan laboratorium dengan hasil perhitungan komputasi atau untuk memperkirakan sifat mekanik material keramik yang belum ada data hasil percobaan.

Pada penelitian ini material yang akan dihitung nilai modulus bulk adalah material keramik silikon karbida tipe kristal 3C, SiC dipilih karena sudah ada data hasil percobaan untuk dibandingkan dan juga memiliki struktur kristal yang sederhana untuk dibuat model perhitungan. Tidak menutup kemungkinan untuk memodelkan struktur material keramik lain yang lebih kompleks. Perhitungan dilakukan dengan menghitung energi total (energi fermi, entropi, energi

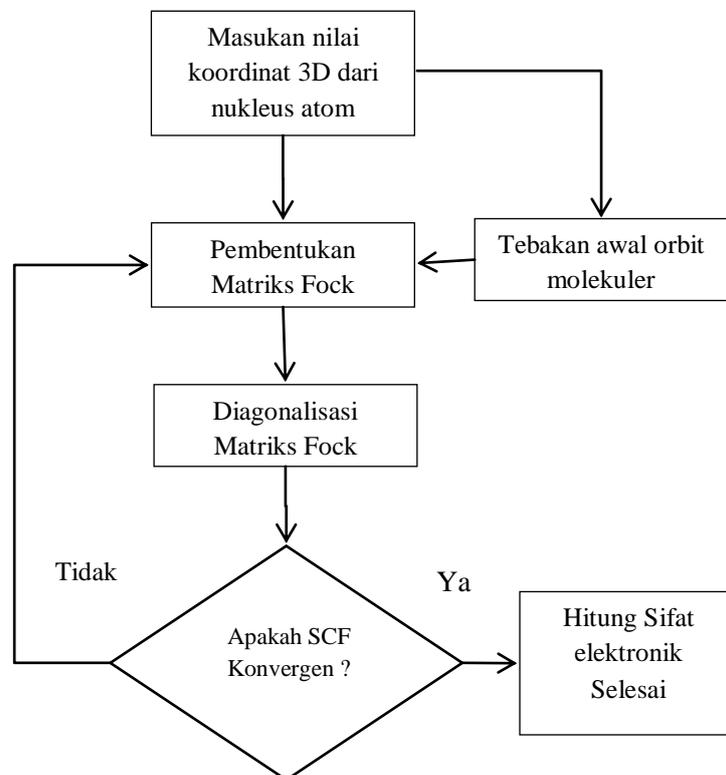
Hartree, dll) terhadap variasi volume sel satuan kristal yang kemudian dilanjutkan dengan pencocokan kurva dengan persamaan Birch-Murnhagan yang nanti dapat dihitung perkiraan nilai bulk modulus model material yang dikalkulasi (Ziambaras & Schröder 2003).

Maksud dan tujuan dari penelitian ini tidak lain adalah untuk menghitung bulk modulus kristal silikon karbida 3C dengan menggunakan perangkat lunak CP2K karena belum banyak tulisan ilmiah yang membahas tentang hal ini, dan juga untuk melihat faktor-faktor yang perlu diperhatikan dalam perhitungan, sehingga untuk penelitian selanjutnya dapat menjadi informasi dan landasan untuk meningkatkan kualitas hasil pemodelan dengan menggunakan perangkat lunak CP2K.

BAHAN DAN METODE

Kalkulasi modulus bulk dilakukan dengan menghitung energi total kristal SiC 3C dengan metode perhitungan teori fungsi kerapatan DFT berdasarkan teori yang dikemukakan oleh Walter Kohn (Hohenberg & Kohn 1964), lalu kemudian dikembangkan menjadi persamaan Kohn-Sahm yang dapat ditulis secara eksplisit seperti persamaan (1) dimana persamaan tersebut bergantung pada kerapatan elektron.

$$E_{KS}[n] = 2 \sum_{j=1}^{N_{el}} \int \psi_j^*(r) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi_j(r) dr + E_{ext}[n] + E_{Coul}[n] + E_{xc}[n] \quad \dots (1)$$



Gambar 1. Diagram alir tahap penyelesaian perhitungan energi Kohn-Sam dengan metode SCF (Edsanville 2016)

Untuk dapat menyelesaikan persamaan Kohn Sam digunakan algoritma *self consistent function* (SCF) seperti pada diagram Gambar 1.

Untuk perhitungan ini digunakan basis fungsi Pade-Teter (PADE) (Geodecker *et al.* 1996) dengan pendekatan korelasi energi pertukaran *Local Density Approximation* (LDA) yaitu fungsi yang hanya bergantung pada kerapatan pada koordinat dengan fungsi yang telah dievaluasi, dan basis fungsi Perdew, Burke, dan Ernzerhof (PBE) dengan pendekatan *gradient approximations* (GGA) yaitu masih tetap pendekatan lokal, akan tetapi mempertimbangkan gradien dari kerapatan pada koordinat yang sama (Sholl & Steckel 2009). Untuk tingkat ketelitian perhitungan SCF, pada parameter petak ruang nyata atau realspace multigrigrid di perhitungan CP2K nilai pemotongan noise energi CUTOFF dan REL_CUTOFF pada penelitian ini dipilih dengan menghitung variasi CUTOFF yang kemudian dipilih pada nilai yang tidak lagi ada fluktuasi energi yang besar.

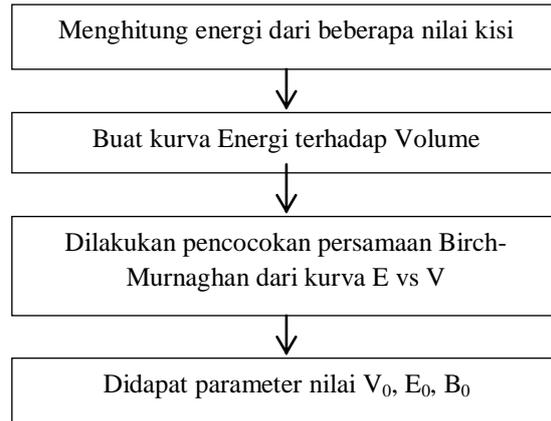
Untuk memeriksa model perhitungan sel kristal SiC 3C agar dapat konvergen, dilakukan perhitungan dengan duplikasi sel (Kubicki *et al.* 2009) hingga $6 \times 6 \times 6$ dan hasil komputasi model tersebut harus konvergen. Satu unit sel satuan kristal ini bisa merepresentasikan skala ukuran atom yang lebih besar.

Penghitungan energi dilakukan pada panjang kisi kristal yang di variasikan sehingga akan didapat kurva energi terhadap volume sel kristal. Variasi panjang kisi kristal dihitung dengan kerapatan interval $0,01 \text{ \AA}$, $0,005 \text{ \AA}$, dan $0,001 \text{ \AA}$, selain itu dibandingkan juga hasil perhitungan dari 3 segmen interval panjang kisi kristal yang berbeda yaitu segmen dari rentang panjang kisi $4,3 - 4,4 \text{ \AA}$, $4,4 - 4,5 \text{ \AA}$, dan $4,5 - 4,6 \text{ \AA}$. Dari kurva energi vs volume dapat dihitung nilai equilibrium V_0 dan E_0 lalu kurva tersebut dicocokkan dengan persamaan Birch-Murnaghan untuk dapat menghitung modulus bulk.

Untuk menghitung modulus bulk dari persamaan Birch-Murnaghan nilai parameter kisi energi terendah a_0 diambil dari data percobaan dari pencocokan kurva $E(a)$ atau $E(V)$, V_0 dan E_0 adalah volume dan energi pada keadaan equilibrium, berikut ini adalah persamaan Birch-Murnaghan bentuk ke 3 (persamaan 2).

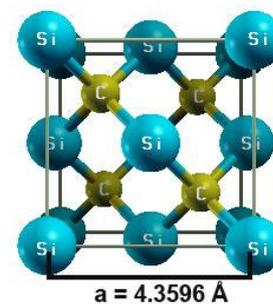
$$E(V) = E_0 + \frac{9}{8}BV_0 \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} - 1 \right]^2 \left[1 + \left(\frac{4-B}{2} \right) \left(1 - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \right) \right] \quad \dots (2)$$

Dari integrasi persamaan keadaan Birch Murnaghan bentuk ke 3 (Murnaghan, 1944) dapat dihitung modulus Bulk B_0 dengan mencocokkan kurva energi terhadap volume ke dalam persamaan Birch-Murnaghan. Langkah pengerjaan ditunjukkan pada Gambar 2.



Gambar 2. Diagram alir perhitungan modulus bulk dari kurva energi terhadap volume

Dari sekian banyak tipe susunan kristal SiC, tipe kristal SiC 3C (Gambar 3) memiliki struktur kisi atom yang sederhana untuk dibuat model karena satuan sel kristal yang sederhana berbentuk struktur kubik. SiC 3C memiliki bentuk kristal kubik *zinc-blend fcc* dimana bentuk ikatan atom SiC 3C ini berbentuk tetrahedral dengan panjang kisi menurut eksperimen adalah sekitar 4.3596 \AA . Karena SiC 3C bersifat isotropik (perubahan volume disegala arah sama) maka memudahkan perhitungan bulk modulus.



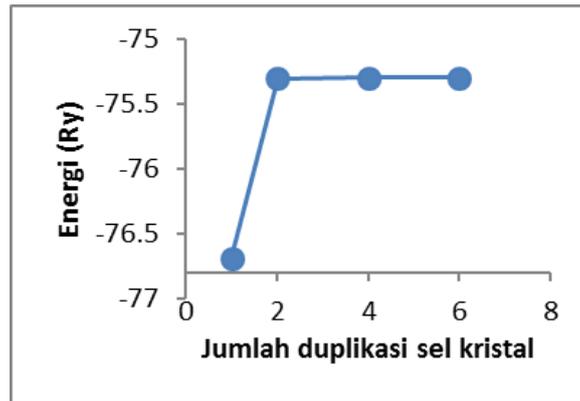
Gambar 3. Struktur kristal SiC 3C

HASIL DAN PEMBAHASAN

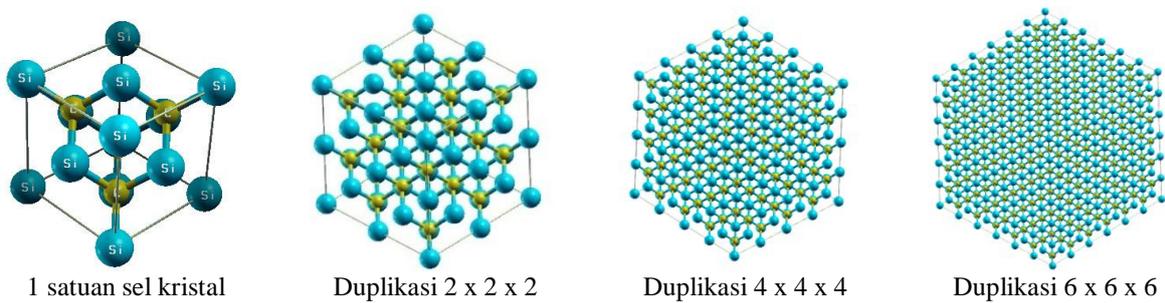
Perhitungan model kristal SiC yang akan dihitung diperiksa terlebih dahulu agar memungkinkan untuk dihitung dengan cara melakukan penghitungan satu unit sel yang di duplikasi hingga $6 \times 6 \times 6$, terlihat dari kurva hasil perhitungan Gambar 4 pada duplikasi ke 2 sudah konvergen sehingga model yang sudah dibuat dapat digunakan untuk perhitungan selanjutnya.

Kurva hasil perhitungan energi total untuk Gambar 5 ditunjukkan pada Gambar 6, Gambar 7, dan Gambar 8, dengan variasi duplikasi sel dari $1 \times 1 \times 1$ hingga $6 \times 6 \times 6$.

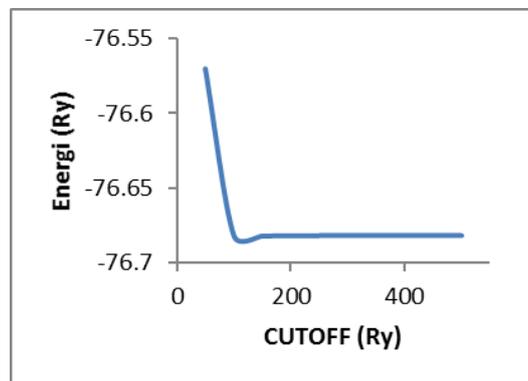
Untuk mengoptimalkan model dilakukan perhitungan beberapa nilai pemotongan energi CUTOFF, REL_CUTOFF dan EPS (kode variabel dalam input program CP2K untuk mengatur tingkat



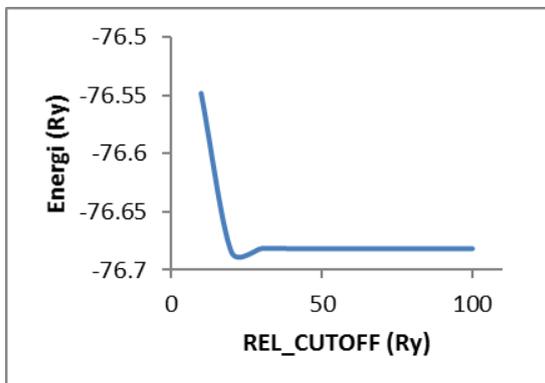
Gambar 4. Kurva energi total terhadap jumlah sel yang diduplikasi



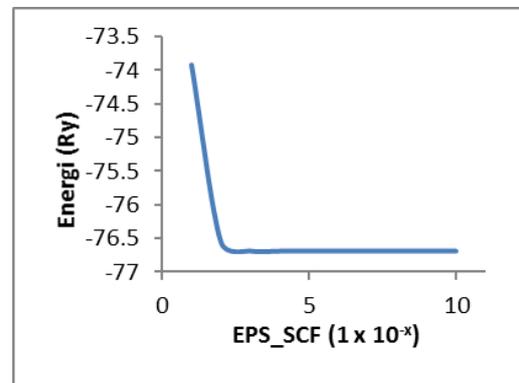
Gambar 5. sel kristal SiC 3C dan duplikasinya



(A)



(B)



(C)

Gambar 6. Kurva energi total terhadap pemotongan energi parameter (A) CUTOFF (B) REL_CUTOFF dan (C) EPS SCF

akurasi perhitungan energi) dan hasilnya ditunjukkan pada Gambar 6.

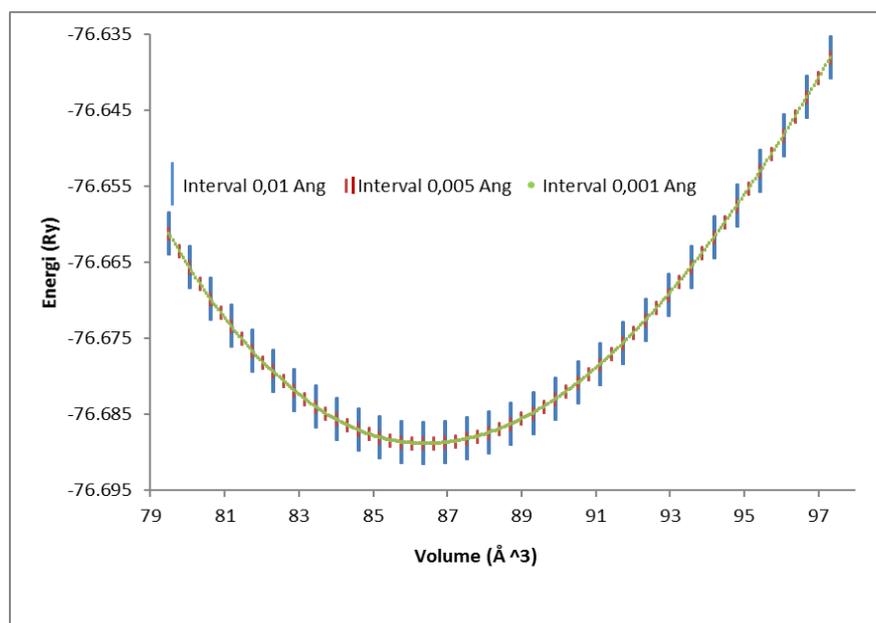
Dari hasil perhitungan CUTOFF, REL_CUTOFF, dan EPS yang berbeda pada Gambar 6, maka dipilih CUTOFF sebesar 250 Ry, REL_CUTOFF 50 Ry dan EPS 10^{-6} karena terlihat di kurva pada nilai tersebut sudah tidak ada lagi perubahan energi yang signifikan, sehingga model perhitungan dapat dilakukan dengan lebih cepat atau memerlukan kemampuan komputasi yang lebih sedikit dengan tetap menjaga ketelitian yang baik (www.cp2k.org/howto:converging_cutoff, 2015).

Dari hasil perhitungan DFT didapat kurva energi terhadap volume, rentang volume yang diukur diambil nilai yang dekat dengan nilai konstanta kisi

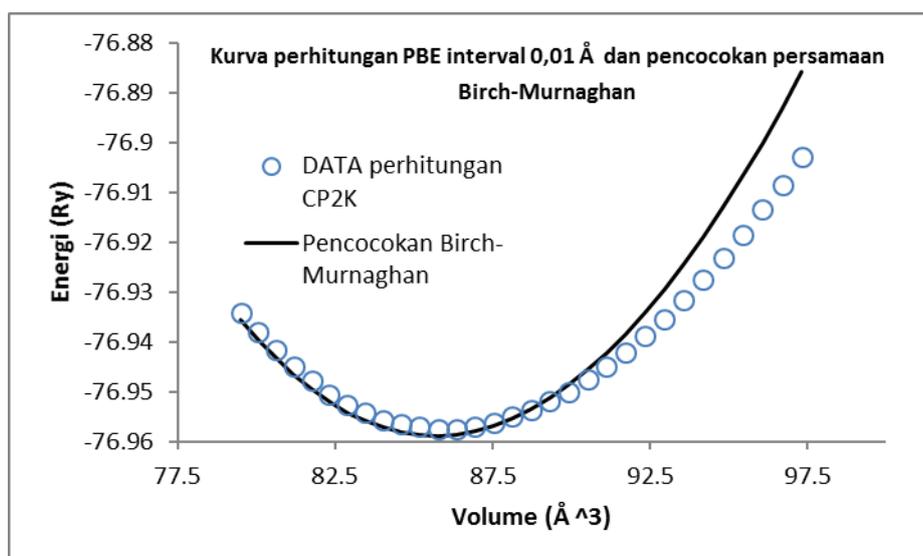
hasil percobaan, yaitu berada dekat di sekitar $4,3596 \text{ \AA}$ atau volume kisi $82,8590 \text{ \AA}^3$.

Dari data hasil perhitungan pada Gambar 7, terlihat bentuk kurva parabola yang selanjutnya data tersebut digunakan untuk menghitung nilai modulus *bulk* dengan pendekatan persamaan kuadrat atau juga polinomial derajat 3, tapi dalam penelitian ini dipakai pendekatan pencocokan kurva dengan persamaan Birch-Murnaghan.

Setelah itu dilakukan pencocokan kurva energi terhadap volume dengan persamaan Birch-Murnaghan seperti pada contoh salah satu perhitungan pada Gambar 8 yaitu mencocokkan nilai data perhitungan PBE pada interval $0,01 \text{ \AA}$ dengan persamaan Birch-Murnaghan.



Gambar 7. Kurva hasil perhitungan energi terhadap volume dari interval $0,01 \text{ \AA}$ – $0,001 \text{ \AA}$



Gambar 8. Kurva data hasil perhitungan dengan pencocokan persamaan Birch-Murnaghan

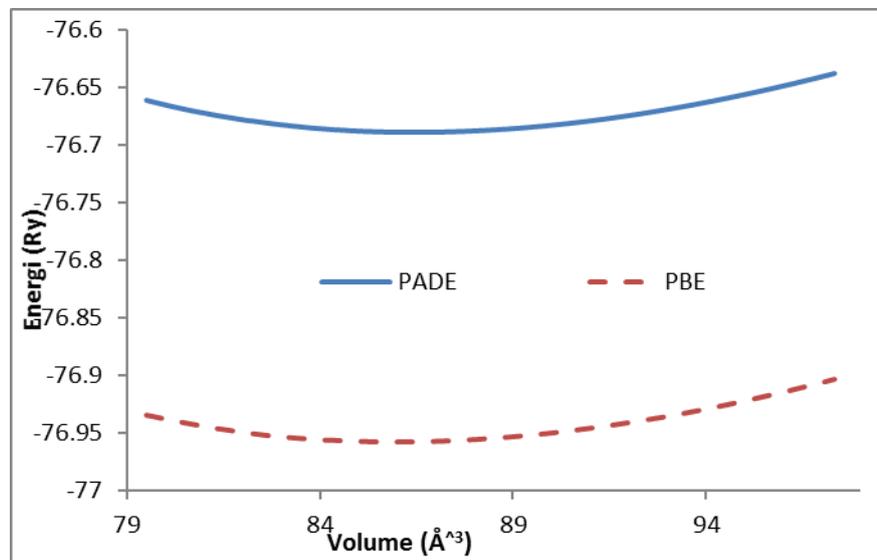
Tabel 1. Hasil perhitungan bulk modulus dengan interval panjang kisi yang berbeda dibandingkan dengan data modulus bulk pada penelitian yang lain

Perhitungan (Å)	E_0 (Ry)	a_0 (Ry)	B_0 (GPa)
PADE interval 0,01	-76,68879	4,42145	191,8
PADE interval 0,005	-76,95738	4,41288	188,9
PADE Interval 0,001	-76,68850	4,41773	215,6
PBE interval 0,01	-76,95738	4,41290	188,7
PBE interval 0,005	-76,95738	4,41288	188,9
PBE interval 0,001	-76,95708	4,40806	218,6
Hasil perhitungan DFT publikasi lain	-	4,36100 *	212,0 *
Hasil percobaan laboratorium	-	4,35960 **	225,0 ***

*(Chang & Cohen, 1987); **(Taylor & Jones, 1960); ***(Camaham, 1968)

Tabel 2. Hasil perhitungan bulk modulus dengan segemen panjang kisi yang berbeda

Perhitungan (Å)	E_0 (Ry)	a_0 (Ry)	B_0 (GPa)
PADE segmen 4,3 - 4,4	-76,68850	4,41770	215,8
PADE segmen 4,4 - 4,5	-76,68830	4,42136	189,5
PADE segmen 4,5 - 4,6	-76,68147	4,46581	381,8



Gambar 9. Kurva perbedaan energi hasil perhitungan PADE dan PBE

Untuk mempermudah pencocokan kurva dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak bawaan dari Quantum Espresso yaitu *ev.x* (http://www.quantum-espresso.org/wpcontent/uploads/Doc/pw_user_guide.pdf, 2015) yang berguna untuk menghitung modulus *bulk* dari data kurva energi terhadap volume dengan metoda pencocokan dengan persamaan Birch-Murnaghan. Hasil nilai

modulus bulk yang didapat berdasarkan asumsi pada $T=0$ dan $p=0$.

Hasil perhitungan modulus bulk B_0 dengan prosedur yang sudah dijelaskan sebelumnya dapat dilihat pada Tabel 1 dan Tabel 2.

Nilai bulk modulus perhitungan PADE kurang dapat diandalkan karena terlihat perbedaan energi di tiap interval perhitungan yang jauh berbeda dengan satu sama lainnya, sedangkan hasil perhitungan PBE

terlihat lebih seragam dan terlihat lebih mendekati nilai percobaan laboratorium dengan nilai interval perhitungan yang lebih rapat. Dari tabel hasil perhitungan bulk modulus, PBE memberikan nilai yang lebih baik dibandingkan dengan PADE karena pada model dimasukan faktor koreksi dispersi. Dengan membandingkan data-data hasil kalkulasi penelitian yang lain dan hasil percobaan, akurasi perhitungan fungsi pertukaran LDA (PADE) untuk struktur dan sifat elektronik rata-rata mencapai -1 - 3% untuk a_0 , 10 - 40% untuk B_0 , dan 15% untuk E_0 , sedangkan untuk GGA (PBE) rata-rata 1% untuk a_0 , -20 - 10% untuk B_0 , dan -5% untuk E_0 (Madelung *et al.* 2001; Junquera *et al.* 2001).

Untuk perhitungan dengan segmen nilai kisi panjang kristal dibagi menjadi tiga segmen, dari Tabel 2 terlihat bahwa nilai modulus ketiga segmen berbeda-beda, ini menunjukkan bahwa data yang dipakai untuk perhitungan bulk modulus harus mendekati daerah titik minimum seperti terlihat di kurva parabola, dengan kata lain nilai bulk modulus dari perhitungan pencocokan persamaan kurva Birch Murnaghan sensitif terhadap kurva persamaan dari data yang diperoleh.

Perbedaan nilai total energi hasil perhitungan LDA (PADE) dan GGA (PBE) pada percobaan ini dilihat dari Gambar 9 rata-rata sekitar -0,26809 Ry atau perbedaan relatif rata-rata 0,34842% dimana nilai energi total PBE lebih rendah dan lebih mendekati nilai bulk modulus percobaan bila dimasukan dalam perhitungan.

Nilai perhitungan modulus bulk dari persamaan Murnaghan sensitif terhadap rentang nilai dan interval volume yang dipilih untuk perhitungan, selain itu nilai rentang volume yang dipilih untuk perhitungan tidak bisa terlalu kecil dibandingkan dengan volume hasil percobaan laboratorium karena menyebabkan perhitungan energi tidak bisa konvergen.

KESIMPULAN

Nilai modulus *bulk* hasil perhitungan dengan perangkat lunak CP2K dipengaruhi oleh beberapa faktor yang menyangkut dengan parameter ketelitian perhitungan, yaitu nilai ketelitian pemotongan *noise* energi dan ketelitian perhitungan SCF. Selain itu rentang nilai kisi yang terlalu jauh dari nilai hasil percobaan menyebabkan perhitungan tidak konvergen. Agar menghasilkan nilai pencocokan kurva yang baik, kurva data hasil perhitungan harus berbentuk parabola yang ada nilai minimum. Kerapatan panjang kisi yang dimasukan kedalam perhitungan berpengaruh pada kualitas kurva, semakin rapat semakin mendekati nilai modulus *bulk* hasil percobaan. Nilai modulus *bulk* hasil perhitungan PBE lebih mendekati nilai percobaan laboratorium dibandingkan dengan PADE karena ada faktor koreksi dispersi akan tetapi membutuhkan kemampuan komputasi yang lebih tinggi sehingga membuat perhitungan lebih lama, sedangkan PADE

merupakan perhitungan pendekatan kasar dengan kebutuhan kemampuan komputasi yang lebih sedikit dibandingkan dengan perhitungan menggunakan basis set PBE. Nilai modulus bulk hasil perhitungan PADE Interval 0,001 Å sebesar 215,6 GPa dan hasil perhitungan PBE interval 0,001 Å sebesar 218,6 GPa bila membandingkan dengan hasil percobaan memiliki selisih 3 - 4%.

DAFTAR PUSTAKA

- Anonim, https://www.cp2k.org/howto:converging_cutoff, 2015, diunduh tanggal 15 November 2016.
- Anonim, http://www.quantum-espresso.org/wpcontent/uploads/Doc/pw_user_guide.pdf, diunduh tanggal 25 Oktober 2016.
- Bandyopadhyay, A.K.(2008). *Nano Materials*. New Age International. New Delhi.
- Carnahan, R.D. (1968). Elastic properties of silicon carbide. *Journal of the American Ceramic Society*. 51(4): 223-224.
- Chang, K.J. & Cohen, M.L. (1987). Ab initio Pseudopotential Study of Structural and High-Pressure Properties of SiC. *Physical Review B*. 35(15): 8196-8201.
- Edsanville, https://en.wikipedia.org/wiki/Hartree%E2%80%93Fock_method#/media/File:Hartree-Fock.png diunduh tanggal 1 November 2016.
- Gates, T. & Hinkley, J. (2003). Computational materials: Modeling and Simulation of Nanostructured Materials and Systems. In 44th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference. p. 1534.
- Gaudoin, R., Foulkes, W.M.C. & Rajagopal, G. (2002). *Ab Initio* Calculations of the Cohesive Energy and the Bulk Modulus of Aluminium. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 14(38): 8787.
- Goedecker, S., Teter, M. & Hutter, J. (1996). Separable Dual-space Gaussian Pseudopotentials. *Physical Review B*. 54(3): 1703.
- Hohenberg, P. & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*. 136(3B): B864-B871.
- Hutter, J., Iannuzzi, M., Schiffmann, F. & VandeVondele, J. (2014). CP2K: Atomistic Simulations of Condensed Matter Systems. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*. 4(1): 15-25.
- Junquera, J., Paz, Ó., Sánchez-Portal, D. & Artacho, E. (2001). Numerical Atomic Orbitals for Linear-Scaling Calculations. *Physical Review B*. 64(23): 235111-235119.
- Kubicki, J.D., Paul, K.W. & Sparks, D.L. (2008). Periodic Density Functional Theory Calculations of Bulk and the (010) Surface of Goethite. *Geochemical Transactions*. 9(1): 4-16.
- Madelung, O., Rössler, U. & Schulz, M. (eds.) (2001). Silicon Carbide (SiC) Bulk Modulus,

-
- Youngs Modulus, Shear Modulus. In: *Semiconductors: Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part A - Lattice Properties*. Springer. Heidelberg.
- Murnaghan, F.D. (1944). The Compressibility of Media under Extreme Pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 30(9): 244-247.
- Parr, R.G. & Yang, W. (1989). *Density-functional Theory of Atoms and Molecules*. Oxford University Press. New York.
- Sholl, D. & Steckel, J.A. (2011). *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. John Wiley & Sons. New Jersey.
- Taylor, A. & Jones, R. M. (1960.) Silicon Carbide – A High Temperature Semiconductor. In J.R. O'Connor & J. Smiltens (eds). Pergamon Press, Oxford. p. 147.
- Taylor, A. & Jones, R.M. (1960). *Silicon Carbide - A High Temperature Semiconductor*. Oxford Press. London.
- VandeVondele, J., Krack, M., Mohamed, F., Parrinello, M., Chassaing, T. & Hutter, J. (2005) Quickstep: Fast and Accurate Density Functional Calculations Using a Mixed Gaussian and Plane Waves Approach. *Computer Physics Communications*. 167(2): 103-128.
- Ziambaras, E. & Schröder, E. (2003). Theory for Structure and Bulk Modulus Determination. *Physical Review B*. 68(6): 064112.
-