

# SiC 結晶の積層欠陥エネルギーにファンデルワールス相互作用が与える影響の検討

## Comparative study of the effect of van der Waals interactions on the stacking fault energies of SiC

東大工 <sup>○</sup>櫛間 大輝, 波田野 明日可, 泉 聡志

Univ. Tokyo, <sup>○</sup>Hiroki Sakakima, Asuka Hatano, Satoshi Izumi

E-mail: sakakima.hiroki@fml.t.u-tokyo.ac.jp

### 概要

近年, SiC の結晶多形のエネルギー順序や積層欠陥エネルギーにはファンデルワールス (vdW) 相互作用が無視できない影響を与える可能性が指摘されている<sup>1,2)</sup>. しかしながら, 先行研究で使用されている第一原理計算に対する vdW 補正は, 初期に提案された多体の効果が含まれていない半経験的補正であり, 近年提案されている多体の効果を考慮した補正手法との比較は未だ行われていない. そのため, 本研究では SiC の積層欠陥エネルギーを対象に, 採用する vdW 補正手法の違いが得られる計算結果に与える影響について検討した.

### 解析手法および結果

対象とする積層欠陥は 4H-SiC のシングルショックレー型積層欠陥 (SSSF), ダブルショックレー型積層欠陥 (DSSF) および 3C-SiC の Intrinsic 積層欠陥 (ISF), Extrinsic 積層欠陥 (ESF) とした. 計算には第一原理計算ソフト Quantum Espresso を使用し, 擬ポテンシャルには PAW 法を有効にした GGAPBE 法を用いた. vdW 補正には, 経験的なパラメータに基づく手法として, 2 体間の距離依存性のみを考慮した DFT-D2 法, 原子の結合次数や配位数の影響を考慮した DFT-D3 法に加え, DFT-D3 のパラメータを変更した DFT-D3 (BJ)法, DFT-D3M (BJ)法を用いた. また, 比較のため非局所相関汎関数を用いて補正を行う非経験的な手法に基づく vdW-DF 法, rev-vdW-DF2 法を用いた計算も行った.

Table I にそれぞれの vdW 補正によって得られる積層欠陥エネルギーの比較を示す. 4H-SiC の SSSF を除いて, 用いる手法によって積層欠陥エネルギーが符号も含めて変化することがわかった. これは先行研究で示された結晶多形の安定順序が vdW 補正によって変化することに対応しているものと考えられる. 当日は, それぞれの vdW 補正によって得られた結果の違いについて, 結晶多形の安定性と関連づけて議論を行う.

**謝辞** 本研究は JSPS 科研費 JP20K22384 の助成を受けたものです.

1) Kawanishi et al., J. Appl. Phys. **119**, 175101 (2016). 2) Scalise et al., Phys. Rev. Appl. **12**, 021002 (2019). 3) Hong et al., Philo. Mag. A **80**, 919 (2000). 4) Ning et al., J. Phys. Condens. Matter **2**, 10223 (1990).

Table I. 各ファンデルワールス補正によって得られる積層欠陥エネルギーの比較

	4H-SiC		3C-SiC	
	SSSF	DSSF	ISF	ESF
bare-GGA	15.60	7.69	8.38	-10.51
DFT-D2	15.86	-26.96	43.36	24.02
DFT-D3	16.02	2.75	13.80	-5.55
DFT-D3 (BJ)	16.53	4.93	8.61	-11.03
DFT-D3M (BJ)	16.50	6.80	10.57	-10.97
vdW-DF	12.24	-26.77	40.90	26.26
rev-vdW-DF2	12.24	-7.41	23.54	4.89
experiment	14.7 <sup>3)</sup>	N. A.	34 <sup>4)</sup>	N. A.