

18aT G-5

# オーダー N 電子構造計算を用いた Si クラックのシミュレーション と局在 1 電子軌道描像

東大工 星健夫、藤原毅夫

Silicon crack simulation by order-N electronic-structure calculations  
and its microscopic picture with localized one-electron states

Dept of Appl. Phys, Univ. of Tokyo, Takeo Hoshi and Takeo Fujiwara

クラック先端は、物質の強度において本質的な役割を果たすが、その理解には連続体理論だけでは不十分である。とくにSiのような共有結合系では、電子構造論に基づいたミクロスコピックな描像が重要となる。

我々は、局在 1 電子軌道描像をもちいた大規模電子構造計算法(オーダー N 法)を開発した。この手法は、大規模計算の手段を提供するだけでなく、「化学結合軌道」というミクロスコピックな描像と、電子構造論とを直接つなぐ概念である (Hoshi and Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn, p.3773 (2000))。この理論の応用例として、熱運動している系を引っ張ることにより、Si クラックの動的シミュレーションを行った。シミュレーションの結果と、クラック先端における、局在 1 電子軌道の解析を行う。なお、本講演は、講演 18pTG-5に関連している。

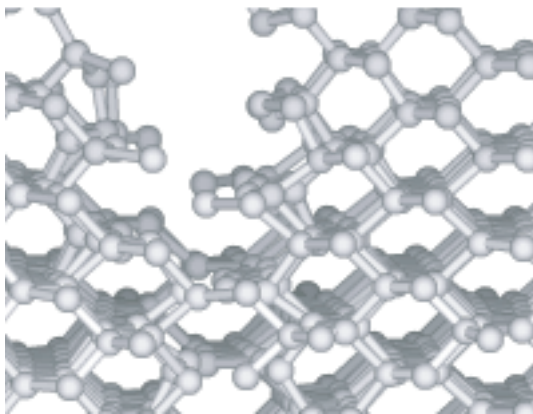


図1：引っ張り過程における、クラック先端。  
(クラックの発生する場所は、熱ゆらぎで決まる)

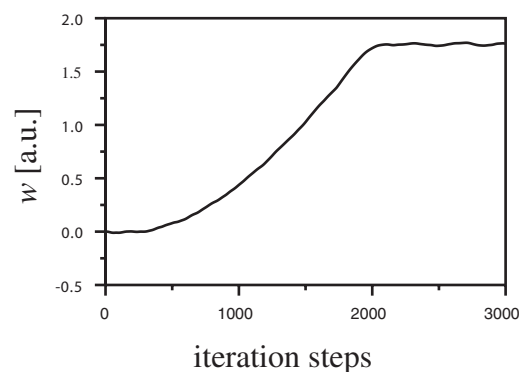


図2：引っ張り過程における、外部仕事。  
(完全に「切れた」後は、一定となる)

(注)我々の導いた「局在軌道に対する平均場方程式」は、摂動論で解くこともできる (Hoshi and Fujiwara, J. Phys. Soc. Jpn, p.3773 (2000); Hoshi and Fujiwara, Surface Science, to be published)。この場合、局在軌道の物理描像は、結合軌道に「反結合軌道の tail」がついたものであり、「26 体相互作用をもちいた古典分子動力学」と計算機上の手間は等価である。シミュレーションでは、クラック領域とバルク領域とに自動的に割り振り、後者を摂動論で解くことにより、全体の計算量を劇的に小さくできた。