

東大工 星健夫, 下司雅章, 藤原毅夫

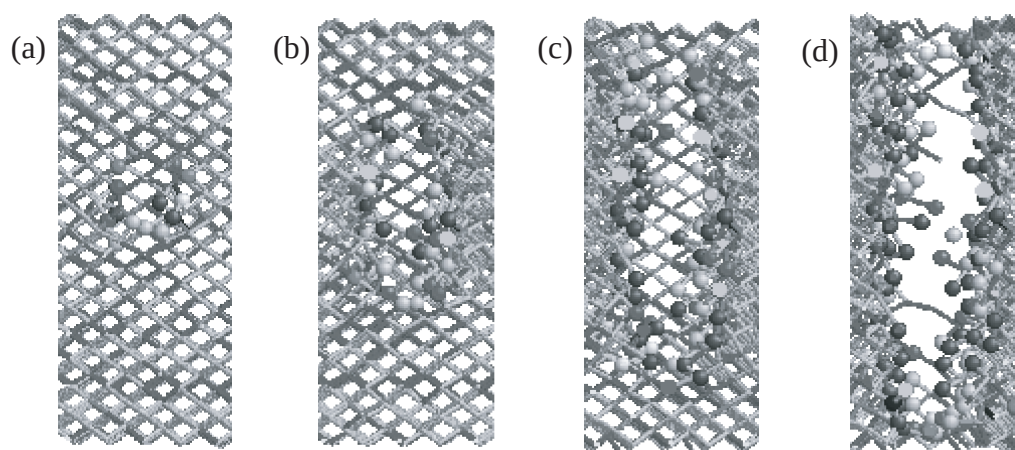
Order-N electronic-structure theory and brittle fracture of semiconductors

Dept. of Appl. Phys., Univ. of Tokyo, Ta keo Hoshi, Masaaki Geshi, Ta keo Fujiwara

オーダーN法とは、計算コストが粒子数に比例する計算手法の総称であり、大規模電子構造計算の基礎をなす。我々は変分法・摂動法を用いたオーダーN法を確立し[1]、それに基づく分子動力学プログラムを開発した。テストとして、最大約26万原子系に対する計算を標準的PC（1 x Pentium 4、2GBメモリ）と数種の並列計算機で行った。

応用として、半導体シリコン単結晶の脆性破壊をシミュレートし、内部変数である局在波動関数を解析した。特にsp混成比に着目した解析を行い[2]、以下の知見が得られた。シリコン脆性破壊プロセスにおいては、混成自由度が、各波動関数ごとに大きく変化している。これは、結合切断による、(a) 結合エネルギーの損失、と、(b) sp^3 混成を解消しs成分が増えることによるエネルギーの利得、とが競合していることによるものである。ハミルトニアン行列要素においても、両者の値は同程度（約6-8eV）であり、上記理論を支持している。両者の優劣は、局所的環境とくに配位数によって逆転しうるものであり、これが脆性破壊の原因となっている。ただし、波動関数の直交性により、上記性質は局所的であり、巨視的效果にはなりえない。従来から知られている脆性破壊の基礎理論（Griffith理論）は連続体描像に基づくものであったが、本理論はそれとは異なり、原子スケールの理論になっている。

[1] Hoshi and Fujiwara, JPSJ 69, 3773 (2000). [2] sp混成比の自由度は、周期律表の「縦」の自由度に相当するものとして、その重要性が古くから知られている。レビューとして、Phillips, RM P 42, 317 (1970).



図：破壊プロセスシミュレーションにおける断面（一部）。(001)方向（図では左右）に引っ張り試験をしている。(a)から(d)までの経過時間は約0.7ps。各局在波動関数をノルム分布によって、原子軌道（球）と結合軌道（棒）によって表現している。実際の図は、さらに混成自由度により色分けされており、結合切断にともない、混成比が大きく変化することが分かる。