

Ti粒界における溶質拡散の第一原理計算

大阪大学 接合科学研究所 設樂 一希

目的：

Ti粒界およびTi結晶中の溶質原子の固溶状態および拡散機構を第一原理計算により解明する

結果：

α -Ti中の酸素原子の安定および準安定サイトを基に拡散経路を構築し、遷移エネルギーを算出した。最も低い遷移エネルギーは約1.9 eVであり、この値は実験報告値とよく一致する。固溶酸素原子は八面体孔サイトから、六面体孔もしくはNon-basal crowdionサイトを經由して長距離拡散することを明らかにした。

