

結晶構造中の溶質原子の局所環境

ファインセラミックスセンター 設楽 一希

目的：

転位-溶質の相互作用について直接的に調査するために第一原理計算を実施し，会合エネルギーを評価した

内容：

転位対構造中に溶質原子を加えた構造モデルの第一原理計算を行った。

結果：

格子歪に基づく弾性相互作用はCの方が大きいにも関わらず，OおよびNの転位との会合エネルギーはCと比較して大きく，弾性相互作用以外の電気的な転位-溶質間相互作用力が働いていることを示した。

利用した計算機：

SQUID汎用CPUノード群

