

合金系表面偏析の酸素環境下における相関解析

大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻応用物理学コースナノ理論領域

笠井 秀明, 中西 寛, Saputro Adhitya Gandaryus, Febdian Rusydi,

岡 耕平, Alaydrus Musa, Fadjat Fathurrahman, 岸田 良, 土谷 亮

目的: 大気環境中におかれた材料は表面上での化学反応によって腐食される。その一端を担う酸素分子による酸化反応は、最も基本的で重要な反応の一つである。そこで本研究では、反応活性の低い金原子を含む合金系材料における、酸化反応の進行と表面偏析の相関の解明を目的とする。

手法: 第一原理電子状態計算を援用して系の自由エネルギーを算出。さらに表面エネルギーを計算し、表面組成を決定する。

結果: 銅-金系合金の清浄表面においては、金原子が表面第一層に偏析した。酸素分圧の上昇に伴い、酸素が吸着し、銅原子の表面析出が起こった。これらはXPSによる実験結果と良い一致を示す。また、銅原子が表面に析出することで、材料が安定化することが示された。

利用した計算機: SX-8, SX-9, PC クラスタ, 汎用コンクラスタ
使用メモリ: 120GB
並列化: 16並列

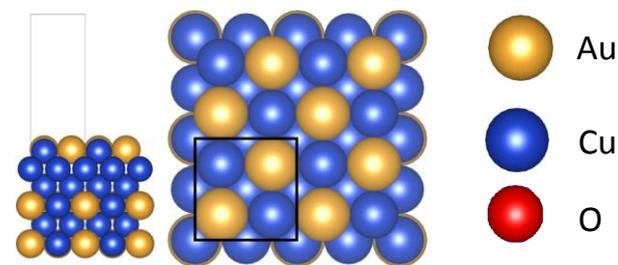


図1. 銅-金系合金表面の計算モデル

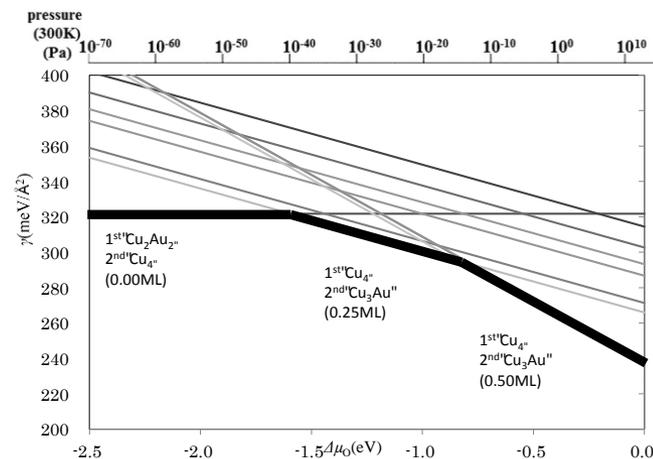


図2. 酸素分子の化学ポテンシャルに対する自由エネルギーの変化