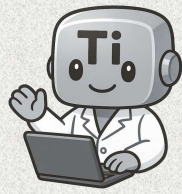




金属Ti表面における酸素原子の吸着と拡散： シミュレーションソフトウェアの開発と実行

浜松学芸中学校・高等学校 サイエンス部

○関本 蒼大 (1年) 大石 晴登 (1年) 洲崎 幸弥 (1年)



緒言|Introduction

- ◆ Tiとは？ 軽量 高強度 低環境負荷
不導体膜による安定した発色



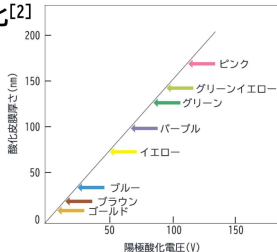
時間経過による色の変化が知られる^[1]
この変化は**表面酸素原子の吸着と拡散**から説明できる？

- ◆ Ti表面酸化膜厚の変化と表面色の変化^[2]

Tiの表面色は表面酸化膜厚で決まる

均一に酸化膜が成長するならば
Ti表面の不思議な色彩は現れない

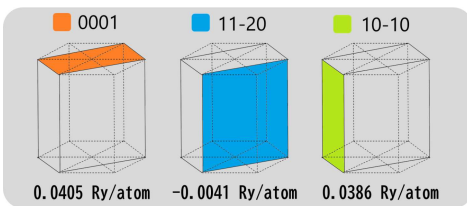
不均一な膜成長が起こるような
化学的なメカニズムが存在する？



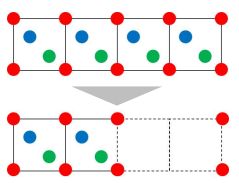
これまでの成果|Past Works



- ◆ 量子化学シミュレーションソフトウェア
Quantum Espresso^[3]を用いた純Ti結晶表面構造の特定



※ 直方構造のエネルギーとの比較

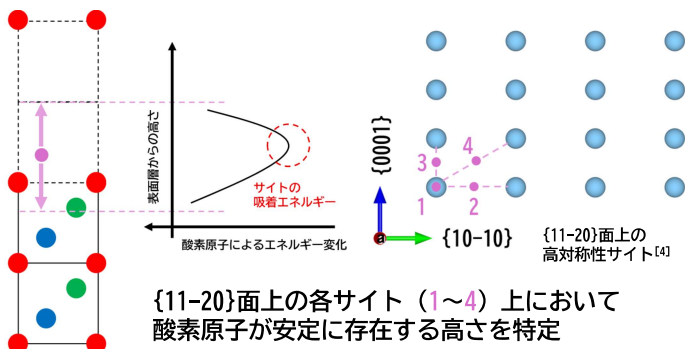
スラブモデルによる
表面エネルギーの検討

純Tiの典型的な結晶表面は{11-20}面である

今回の発表では{11-20}面上への酸素原子吸着位置を
量子化学シミュレーションと自作プログラムによる
動径分布関数 (RDF) の計算により検討する

計算方法|Methodology

- ◆ Quantum Espressoを用いた酸素原子吸着位置の特定



{11-20}面上の各サイト (1~4) 上において
酸素原子が安定に存在する高さを特定

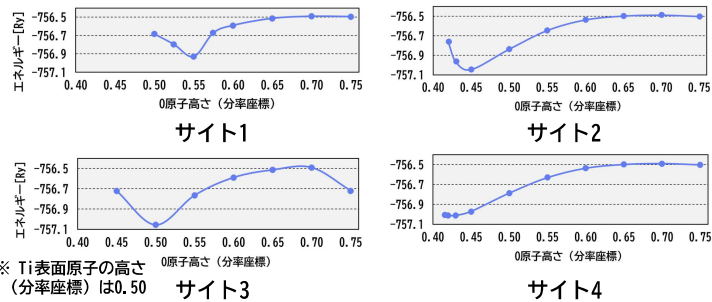
その高さにおけるエネルギー変化を
酸素原子の吸着エネルギーと定義

主要な計算条件^[5]
Pseudo GGA-PBE / Cut-off 35.0 Ry
収束条件 < 10⁻⁶ Ry / k点 4x2x4

吸着エネルギーから金属Ti表面酸化の機構を解明する！

結果と考察|Results & Discussions

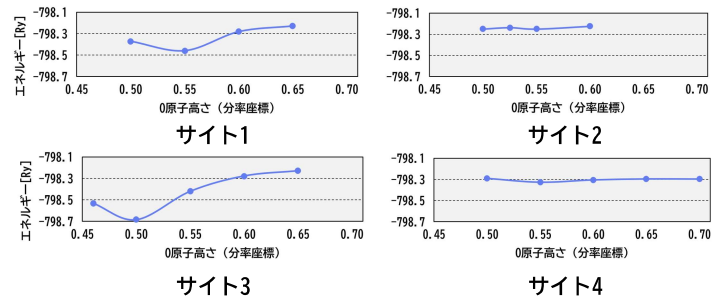
- ◆ Quantum Espressoを用いた酸素原子吸着位置の特定

※ Ti表面原子の高さ
(分率座標)は0.50

サイト2~4の場合にはいずれも**金属Ti結晶内部への
酸素原子の拡散**が生じる (特定のサイトへの選好は存在しない)

以下では**サイト2上へ酸素原子が吸着している**と仮定して
2個目の酸素原子の吸着位置をシミュレーションから求める

- ◆ 酸素原子が金属Ti内部にある場合の酸素原子吸着位置

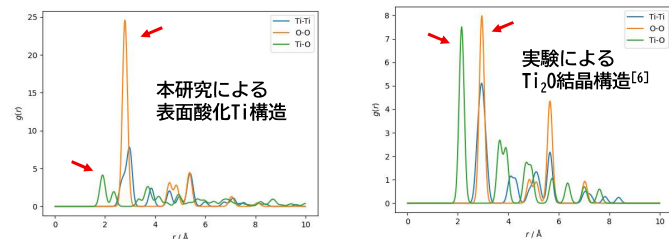


サイト2を酸素原子が占有している場合
サイト3上への**酸素原子の選択的な吸着**が生じる

Ti表面上での酸素原子吸着は内部拡散した酸素原子から
ある程度離れた位置でしか起こらないことが示唆される

酸素原子のTi内部拡散の多様性が不均一な酸化膜の
実現に寄与している可能性が示唆される ▶ 検証は今後の課題

- ◆ 動径分布関数によるシミュレーション結果の妥当性検証



本研究のシミュレーション結果は実験による観測結果を再現
(→のピーク位置の一致) ▶ 本計算結果の妥当性を強く支持！

まとめと展望|Summary & Future Work

- ・ 酸素原子は金属Ti表面のサイト2~4の**いずれかから内部拡散**する
- ・ Ti内部の酸素原子位置により**Ti表面での斥力が局所的に変化**し
各表面位置における酸素原子の選択的吸着が生じる
▶ これにより**不均一な酸化膜**が実現するのでは？ (検証は今後の課題)

参考文献|References

- [1] “デザイン金属ライブラリ”, <https://www.mako-metal.com/archives/1964> (2025年10月閲覧) .
- [2] “株式会社オーファ”, <https://www.ofa-titanium.com/colorTitanium/> (2025年10月閲覧) .
- [3] “Quantum Espresso”, <https://www.quantum-espresso.org> (2025年10月閲覧) .
- [4] K. Momma, F. Izumi, *J. Appl. Cryst.* 44, 1272-1276 (2011).
- [5] “Materials Cloud”, <https://www.materialscloud.org/discover/sssp/table/efficiency> (2025年10月閲覧) .
- [6] T. Novoselova et al., *Mater. Sci. and Eng. A*, 371, 103-112 (2004).

謝辞|Acknowledgement

本研究は公益財団法人 山崎自然科学教育振興会の研究助成を受けて実施された。また、本研究の実施に当たっては、本校サイエンス部顧問の伊藤信一先生、村上拓先生、火物瑠偉先生、杉浦享一先生の熱心なご指導があった。この場を借りて感謝申し上げます。