

ジルコニアセラミックスにおける 結晶粒界への偏析のシミュレーション

○ 澤口直哉、岡寄正治

産業技術総合研究所 計測フロンティア研究部門

(〒463-8560 名古屋市守山区下志段味穴ヶ洞 2266-98)

【緒言】 セラミックス材料には単結晶を用いるものと焼結によって得られる多結晶体を用いるものがあるが、汎用に供される材料としては多結晶体の方が多い。しかし、同一の材料組成であっても、単結晶とその多結晶体では材料特性が等しくなるとは限らない。単結晶とは異なり、多結晶体ではそれを得る焼成条件や焼結助剤の種類などが材料特性を左右するパラメータとして加わるからである。このことが多くの場合で新材料の探索を困難にしている。よって、新材料探索の立場からは、多結晶体に存在する粒界の原子構造や組成、粒界における化学反応速度等について知見を得ることが重要であると考えられている。粒界で生じる様々な現象の中でも、粒界偏析は材料特性に影響を及ぼす重要な現象と考えられている。そこで本研究では、ジルコニアセラミックスの結晶粒界をモデル化し、イットリア安定化ジルコニア (YSZ) について知られているイットリウムの粒界偏析の再現、解析を目的とした分子シミュレーションを行った。

【手法】 ジルコニアの粒界については $\Sigma 5$ 対応粒界の構造が調べられている¹⁾。そこで $\Sigma 5$ の粒界構造を作成した(図1)。YSZ ($0.2\text{Y}_2\text{O}_3-0.8\text{ZrO}_2$) 中のイットリウムとジルコニウムはランダムに配置した。メトロポリスの方法に従って選択した2つのイオンの位置を交換する試行を繰り返すモンテカルロ法を実行し、位置エネルギーがほぼ一定となった次点でイットリウムの分布を調べた。イオン間相互作用は2体間ポテンシャル²⁾を用い、5429原子を基本セルに含むシミュレーションを行った。

【結果】 基本セルを粒界に平行に12等分し、それぞれにおける陽イオンサイトに占めるイットリウムイオンの割合、 R_Y を調べると図2のようになった。この結果は初期設定でほぼ均質であったイットリウムの空間分布が、モンテカルロシミュレーションの結果、粒界近傍に集まったことを示している。これは粒界偏析に相当すると考えられる。さらに、モンテカルロ法で得られた元素分布を用いて分子動力学法によりイオンの挙動を解析した結果について報告する。

【参考文献】

- 1) E. Dickey *et al.*, *J. Am. Ceram. Soc.*, 84 (2001) 1361.
- 2) N. Sawaguchi, H. Ogawa, *Solid State Ionics*, 128 (2000) 183.

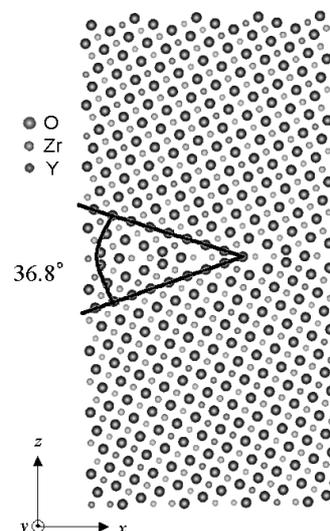


図1: $\Sigma 5$ 粒界モデル

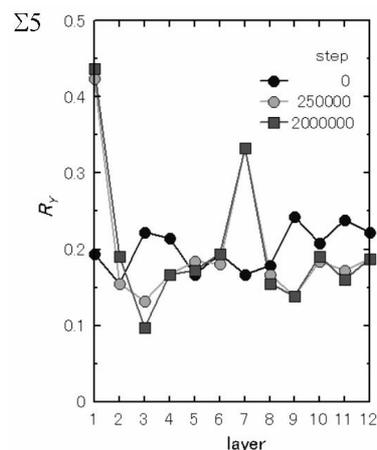


図2: Y濃度分布($\Sigma 5$)。1,7層に粒界領域が含まれる。