

## 分子動力学計算を用いたアルミナセラミックスの焼結挙動の研究

○岡田 智宏、内田 希（長岡技術科学大学）

## 【緒言】

セラミックスの焼結は、高温において成形体中を形成する粉体の表面張力と表面の曲率半径から発生する表面エネルギーを極小化しようとする傾向を駆動力とし、構成原子が表面拡散、体積拡散、蒸発凝縮などのプロセスによって粒子接触部に移動するプロセスによって成り立つとされている。これまで拡散係数は物質定数として物質が決まれば一義的に決まるものとされていたが、一方で結晶方位により物性が異なることが知られており、焼結においても結晶面の接合の仕方（マッチング）によって焼結性が変化することが期待される。本研究では、粒子間の結晶軸のマッチングと焼結性の関係に着目し、古典的分子動力学法によりアルミナセラミックスの焼結挙動を解析する。今回は特に大粒子が小粒子を吸収する「粒成長」過程を追跡した。

## 【計算】

計算には古典的分子動力学法（Materials Explorer〈富士通〉）、ポテンシャル関数 Kawamura (CIM)を用いた。計算モデルとして、周期境界条件により無限平面（大粒子）と平行六面体状セル（小粒子）を構築し、(0001)、(01 $\bar{1}$ 0)面同士マッチングで貼り合わせたものを出発構造とした（図1）。また、平行六面体状セルを無限平面上で 10° -180° 回転させたものも作製した。計算条件は時間刻み幅 0.1fs、50000steps、温度 1300K とした。内部エネルギーから求めた表面エネルギーと、平均自乗変位から求めた拡散係数により粒成長の進行を評価した。

## 【結果】

表面エネルギーの低下量に、貼り合わせる面による大きな差はなかった。しかし(0001)と(01 $\bar{1}$ 0)では回転角度による表面エネルギー低下の様子が異なる。一方、原子のみかけの拡散係数は(0001)においては、アルミ原子、酸素原子ともに計算初期(0~1ps)で最大となり、以後ほぼ0であった。それに対し、(01 $\bar{1}$ 0)ではアルミ原子、酸素原子ともに計算時間にかかわらず同程度の値をとった。計算後構造は(0001)では出発構造から大きな変化は見られなかったが、(01 $\bar{1}$ 0)では小セルが大きく崩れた構造となった。

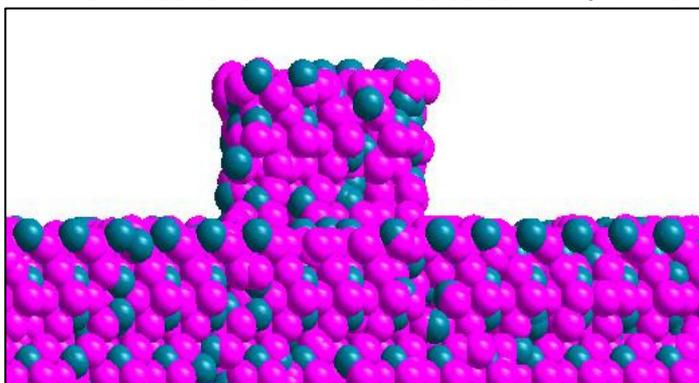


図1 計算モデル 小粒子(上)大粒子(下)