

分子動力学計算を用いたアルミナ焼結過程の研究

○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Matsui(CMAS94)を用いた。計算モデルとして、周期境界条件による無限平面(大粒子)と平行六面体状セル(小粒子)を構築し、(001), (010), (100)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】

単結晶のように面同士を接合させた場合とマッチングをずらして接合させた場合では、マッチングをずらした場合の方が計算開始時の表面エネルギーは高くなり、直方体セルが平面に融合して平衡状態になるまでの表面エネルギー低下分は大きくなる。また同時に拡散係数は高い値を取った。

対応格子理論の考えに基づき、粒界を挟む両結晶の相対的方位関係と焼結性の関係について考察を行い結晶軸がずれている方が焼結が進行しやすいことが示唆された。

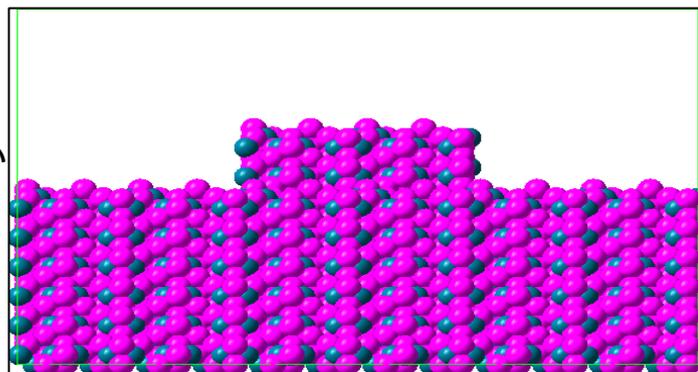


図1 モデルアルミナ小粒子(上)と大粒子(下)

