

3P17

分子動力学法を用いたアルミナ焼結過程の研究 2 一粒成長—

○楠橋陽教、菅野理雲、内田希

長岡技術科学大学（〒940-2188 新潟県長岡市上富岡町1603-1）

[緒言]

セラミックスの焼結は原料粉体を融点近くの高温で加熱した際に構成粒子同士が融合していく現象である。焼結は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、構成原子が拡散等のプロセスによって粒子間の凹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が決まれば一義的に決まるとされてきたが、一方で結晶方位によって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わるものと期待される。本研究では粒子間のマッチングと焼結性の関係を調べるために、古典的分子動力学法を用いてアルミナセラミックスの焼結挙動を研究した。今回は計算モデルとして無元平面上に球状粒子を置き、大粒子が小粒子を吸収する粒成長過程の研究を行った。

[計算]

計算には古典的分子動力学法（Materials Explorer4.0 ultra<富士通>）、ポテンシャル関数は構造緩和ではkawamura(CIM)を、焼結ではMatsui(CMAS94)を用いた。計算モデルは大粒子として周期境界条件により無元平面を作り、その上に球状小粒子を(0001)面同士、(0110)面同士、(0001)-(0110)面、(0110)-(0001)面が向かいあう様に置いたものを出発構造とした。(0110)面同士を合わせた計算モデルの図をFig. 1に示す。温度は1300~2000Kの間で変化させ、NVTアンサンブルを使用した。計算時間は時間刻み幅1[fs]を50000[step]行い50[ps]とした。粒成長の進行は平均自乗変位から求めた拡散係数により評価した。

[結果]

温度が高い領域においては、大粒子が(0110)面のモデルの方が大粒子(0001)面のモデルに比べ拡散係数が大きいことから、アルミナの(0110)面の方が(0001)面よりも原子が動きやすく、また、大粒子側の面が拡散係数の値により大きな影響を与えていることが分かった。

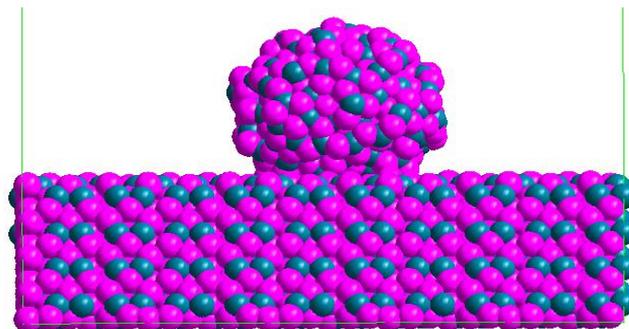


Fig. 1 (0110)面接合の計算モデル