

分子動力学法を用いたアルミナ焼結挙動の解析

○楠橋陽教、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アルミナの自形結晶である六角形の粒子を作成し接触面をずらしながら計算を行い、接触面の変化による影響を調べた。

[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。計算モデルは二つの六角柱状粒子を(0110)面同士が向かいあう様に接合したものを作製した。この計算セルを[0001]方向へ1Åずつずらしながら温度1500K、NVTアンサンブル、計算時間は時間刻み幅1[fs]×50000[step]=50[ps]で計算した。例として20Åずらした計算セルを図.1に示す。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]

六角柱状粒子の拡散係数は周期的な波型のグラフを示した。これは粒子間の原子のマッチングが影響していると考えられる。また、拡散係数はずれの刻み幅が広がるにつれて、つまり接触面積の減少に伴って高くなっていくことが分かった。これはずれることによって生じるネックの大きさが関係していると考えられる。ずれの刻み幅1Åでは原子間距離に対して大きいと考え、現在ずれの間隔を1Å以下で計算を行っている。

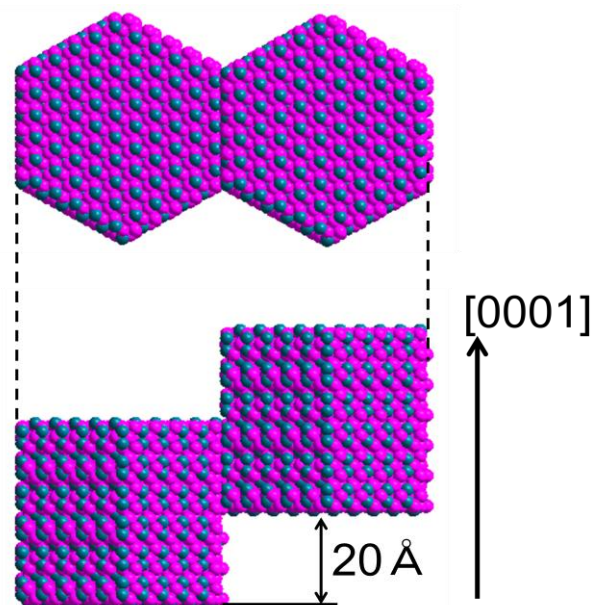


Fig.1 アルミナ六角柱クラスター計算セル(20Åずらし)