

分子動力学法を用いたアルミナ焼結挙動の解析

○長島啓、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】

本研究では、結晶面の違いによるアルミナセラミックスの焼結挙動の変化、及び結晶面が与える影響を調べるために計算モデルを作成し、古典的分子動力学法を用いてコンピュータシミュレーションを行った。焼結は結晶面同士が接触する事で生じる反応であり、一般的に結晶はその面や方向によって物性が違うという事が知られている。そのため、焼結や粒成長においても結晶面の接合の仕方により、挙動が異なると予測される。しかしながら、結晶面の接合仕方が焼結、粒成長へ与える影響のシミュレーションや実験による報告例がない。本研究では、古典的分子動力学法を用いて結晶面のマッチングが焼結、粒成長へ与える影響の解析を目的としている。

【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 Fig.1 のように 6 つの無限平面の大粒子に球状の小粒子をのせて作製した。

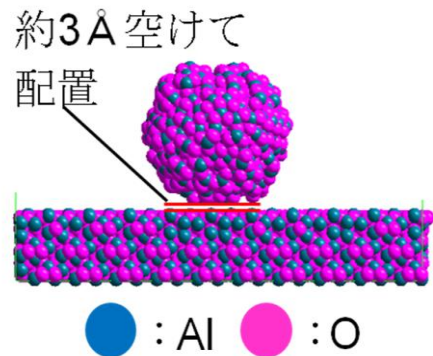


Fig.1 大粒子と小粒子モデル

【結果】

Fig.2 のようにそれぞれの 6 つの面の温度変化による拡散係数、表面エネルギー、そして、大粒子への小粒子の原子の広がり度を計算することができた。その結果、接合面と拡散係数、表面エネルギー変化から結晶面によって焼結性の違い、その結晶面の拡散係数によって表面拡散機構、体積拡散機構に影響を与えることがわかった。また、結晶面の有する初期表面エネルギーの大きさが焼結時の表面エネルギー低下の大きさに影響を与える。これらの結果から、過去の研究で明らかにされてきた結晶面と焼結性の関係を明確にすることができた。今回の研究結果は、シミュレーションのみの結果であり、実際の実験結果が存在しないため、このような焼結性の差が出るかどうか確認することができないが、原子レベルで焼結メカニズムを考える第一歩となる結果であると考えられる。

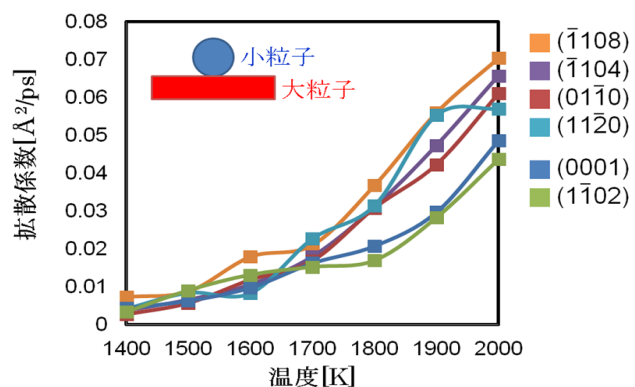


Fig. 2 拡散係数の温度変化