

## 2P14 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

○菅野理雲、岡田智宏、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、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等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、種々のマッチングで張り合わせたものを出発構造とした。計算条件は時間刻み幅0.1fs、50000steps、温度1300~2000K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]

接合面と拡散係数の関係から、焼結温度は接合面の違いにより異なり、特に大粒子側の接合面が(0001)面の場合と(0110)面の場合で異なることを確認した。計算モデルの例として、小粒子が完全に拡散した図をFig.1に示す。

また、温度ごとの拡散係数に対する、大粒子側接合面、小粒子側接合面、結晶軸のマッチングそれぞれの影響を比較した場合、低温域では、大粒子側接合>マッチング>小粒子側接合面、高温域では大粒子側接合面>小粒子側接合面>マッチングの結果となり、拡散係数に対する影響が最も大きい因子は大粒子側の接合面だとわかった。

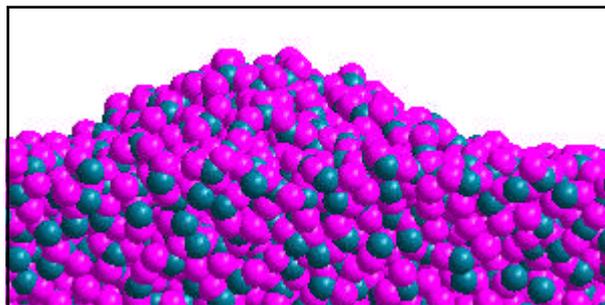


Fig.1 大粒子(0001)面-小粒子(0110)面1900K