

# アルミナ粒界での点欠陥挙動に関する量子力学計算

(ファインセラミックスセンター) ○小川貴史, 桑原彰秀, クレイグ・フィッシャー,

森分博紀, 北岡諭

(名古屋大学) 松永克志

(岡山大) 鶴田健二

多結晶アルミナ ( $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ) は優れた酸素遮蔽性を有する構造セラミックスであり、耐熱材料の酸化保護膜として利用されている。この酸素遮蔽性は粒界での原子移動に支配されており、Ln 系や 4 族元素の粒界修飾によって特性を向上させることができる。近年の酸素透過実験を含め様々な実験が行われているが、原子レベルの粒界拡散メカニズムはよくわかっていない。本研究では粒界の原子配列が欠陥生成へ与える影響を調べるため、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて粒界周囲での空孔形成の解析を行った。粒界モデルとして、Fig. 1 に示す  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$   $\Sigma$ 31 粒界を用いた。この構造は透過型電子顕微鏡 (TEM) によって観察された双晶サンプルの粒界構造と対応する。また、酸素透過実験により、この双晶サンプルが多結晶粒界と同程度の粒界拡散を示すことが知られている。Fig. 1 に示している粒界近傍の酸素サイトについて各々酸素空孔を作成し、エネルギー的に安定な状態を求めた結果を Fig. 2 に示す。これらの結果から、空孔サイトによって空孔形成エネルギーが大きく変化することがわかった。バルク部分 (Fig. 2 のエネルギーが高い部分) に比べ、粒界での空孔形成エネルギーはかなり低くなっており、酸素空孔は粒界に生成されやすい。これは粒界拡散が支配的であるという実験結果と矛盾しない。また、比較的能量が低いサイト (s1-s6) は粒界内の特に乱れが大きくなっている部分に集まっていることがわかった。酸素原子拡散への寄与はこのような部分で大きく、粒界面内で不均一な拡散が生じることを示していると考えられる。

謝辞：本研究は、(独)科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 (先端的低炭素化技術開発) の一環として実施したものである。

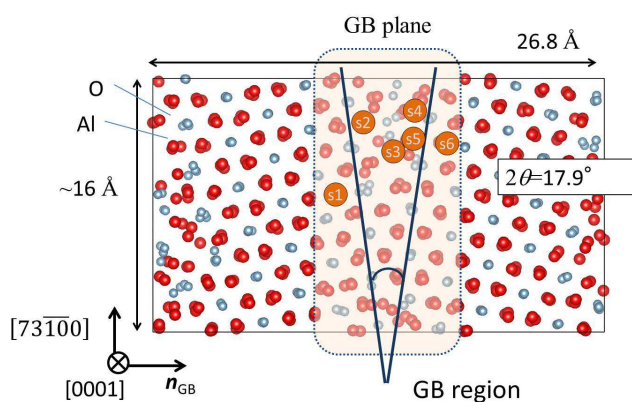


Fig. 1. Atomic structure of  $\Sigma$ 31 grain boundary. Red (large) and blue (small) spheres indicate O and Al, respectively.

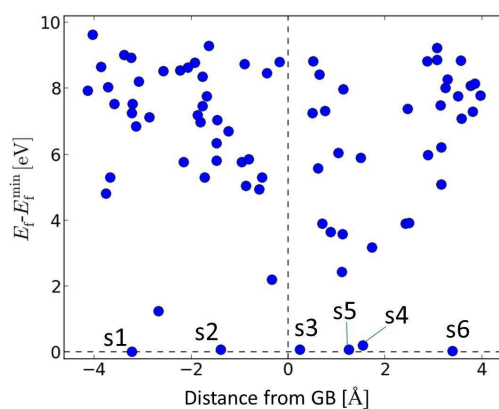


Fig. 2. Vacancy formation energies in  $\Sigma$  31 grain boundary.