フェーズフィールド法による焼結粒界形成の拡散機構依存性の検討

The Study of the Effect of Diffusion Mechanisms on Grain-Boundary Formation in Solid-State Sintering using Phase-field Method

○(M1)岡田 雄輝，山中 晃徳，石井 秋光，山本 明保

Tokyo Univ. of Agri. & Tech., JST-CREST

○Yuki Okada, Akinori Yamanaka, Akimitsu Ishii, Akiyasu Yamamoto

E-mail: s191214s@st.go.tuat.ac.jp

多結晶超伝導材料の製法の一つとして、超伝導化合物粉末を焼結する *ex situ* 法があり、鉄ニクタイド系や MgB_2 超伝導体等の作製に用いられている。焼結過程で形成する粒界が、多結晶超伝導材料の特性に大きく影響するため、焼結中の粒界形成機構を理解することは重要な課題である。しかし、実験的な粒界形成の *in situ* 観察は容易ではなく、数値シミュレーションを用いて、粒界形成機構を明らかにすることが有効である。とくに、フェーズフィールド(PF: Phase-Field)法は移動界面問題の強力なソルバーであり[1]、Wang により、焼結に寄与する拡散機構として、体積、気相、表面、粒界拡散を考慮した固相焼結の PF モデルが提案された[2]。著者らは、この PF モデルを用いて、拡散機構に依存して粒界形成速度が異なることを報告した [3]。

固相焼結の PF モデル[3]において、物質の密度場ρの流束ベクトル$\boldsymbol{J}_\rho$は、拡散による流束ベクトル$\boldsymbol{J}_{diff}$と剛体運動による流束ベクトル$\boldsymbol{J}_{rigid}$の和で表される: $\boldsymbol{J}_\rho = \boldsymbol{J}_{diff} + \boldsymbol{J}_{rigid}$。本研究では、$\boldsymbol{J}_\rho$と$\boldsymbol{J}_{rigid}$を可視化することで粒界形成に寄与する物質の流れを解析した。図 1 に拡散機構として体積拡散のみ（(a),(b)）、粒界拡散のみ（(c),(d)）を考慮した場合の流束$\boldsymbol{J}_{diff}$（(a),(c)）と$\boldsymbol{J}_{rigid}$（(b),(d)）の大きさをそれぞれ示す。粒界への物質移動に対しては、体積拡散においては拡散による寄与が大きく、一方、粒界拡散においては剛体運動による寄与が大きかった。

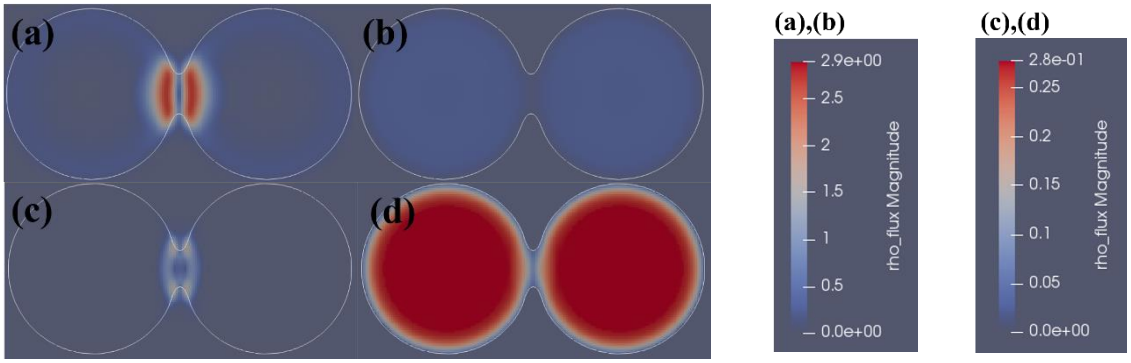

Fig. 1 Distribution of the magnitude of diffusion flux of density-field: (a) $\boldsymbol{J}_{diff}$ for volume diffusion, (b) $\boldsymbol{J}_{rigid}$ for volume diffusion, (c) $\boldsymbol{J}_{diff}$ for grain-boundary diffusion, and (d) $\boldsymbol{J}_{rigid}$ for grain-boundary diffusion and white line shows the morphology of sintered two particles.

[1] 高木知弘,山中晃徳,「フェーズフィールド法 –数値シミュレーションによる材料組織設計–」,養賢堂 (2012)

[2] Yu U. Wang, *Acta Materialia,* **54**, 953-961 (2006).

[3] 岡田雄輝ら, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 11p-S423-18, (2019).

© 2019年 応用物理学会