

2023 年度年次報告書

革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明

2019 年度採択研究代表者

吉田 英弘

東京大学 大学院工学系研究科
教授

セラミックス粒界・界面における強電界ナノダイナミクス

主たる共同研究者:

森田 孝治 (物質・材料研究機構 電子・光機能材料研究センター グループリーダー)

山本 剛久 (名古屋大学 大学院工学研究科 教授)

研究成果の概要

Y₂O₃ 安定化正方晶 ZrO₂ (YSZ) において明らかとなった強電界誘起点欠陥とその動的挙動についてさらに普遍的理解を図るべく、TiO₂ を対象としたナノインデンテーションによる局所領域の弾塑性特性の計測ならびに光学特性評価を実施した。TiO₂ 多結晶体のナノインデンテーション計測においては結晶方位に着目した弾塑性特性の整理を行い、強電界による弾性軟化が YSZ と同様に確認された。この結果は、強電界処理による酸化物内のイオン移動度の向上を直接的に示していると考えられる。また、高温・強電界下での粒界・粒内の拡散現象を定量評価すべく、YSZ ならびに Y₂O₃ をモデル材として強電界下拡散対実験を行い、強電界下でのカチオンの拡散係数を計測した。その結果、強電界下では非熱的に粒界ならびに粒内拡散が数桁加速されることが明らかとなり、これは強電界ナノダイナミクスの機序解明の上で重要な結果である。

先端ナノ計測に関しては、STEM 法による YSZ 単結晶の強電界微細亀裂修復挙動における電極位置依存性、EELS による SrTiO₃ の電界誘起点欠陥形成、強電界処理 TiO₂ 多結晶体の電子状態計測などにおいて進展があり、粒界拡散がこれら動的挙動に主要な役割を果たすこと、DC 電界と AC 電界で誘起される欠陥種が変化すること、TiO₂ 多結晶体における強電界下での欠陥種が明らかとなった。

理論計算に関しては、密度汎関数法 (DFT) に基づく第一原理計算と、比較的小規模な系に対する DFT 計算データを用いて作成した機械学習ポテンシャルを用いたシミュレーションを進め、特に強電界下での力学応答の鍵を握っている可能性が高い粒界近傍におけるボルン有効電荷を調べた。その結果、ボルン有効電荷に現れる電界への応答性は粒界や欠陥に顕著な影響を受けることが明らかになりつつある。これは新規且つこれまでの実験結果とも合致する結果である。

【代表的な原著論文情報】

- 1) A. Nakamoto, K. Nambu, H. Masuda, H. Yoshida, Chemical bonding and crystal structure in flash sintered Y₂O₃ under DC or AC field, *J. Eur. Ceram. Soc.*, **43** [8] (2023) 3516–3523.
- 2) S. Kawabata, S. Takahashi, K. Nambu, K. Morita, Effect of DC and AC electric fields on crack healing behavior in 8 mol% yttria stabilized cubic zirconia polycrystal, *J. Am. Ceram. Soc.*, **106** [10] (2023) 6163-6176.
- 3) S. Kayukawa, Y. Katsuyama, A. Kodaira, T. Tokunaga, K. Morita, A. Nakamura, T. Yamamoto, Flash healing of Vickers microcracks formed on the (001) surface of cubic zirconia single crystals, *J. Eur. Ceram. Soc.*, **43** [14] (2023) 6272–6278.
- 4) A. Dash, K. Morita, L. Balice, R. Mücke, O. Guillon, Creep and Superplasticity of Gadolinium-Doped Ceria Ceramics under AC Electric Current, *Adv. Eng. Mater.*, **25** [18] (2023) 2300057.
- 5) K. Shimizu, R. Otsuka, M. Hara, E. Minamitani, S. Watanabe, Prediction of Born effective charges using neural network to study ion migration under electric fields: applications to crystalline and amorphous Li₃PO₄, *Sci. Technol. Adv. Mater. Methods*, **3** (2023) 2253135.