

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

2022 年度
年次報告書

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 機能性材料研究拠点 主席研究員)

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室温～高温計測を実施した。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。併せて、強電界印加下でのナノインデンテーションその場計測の準備を進めた。

マクロスコピックな強電界下力学応答の計測を継続し、YSZ において DC および AC 強電界によって高温クリープ変形が促進されること、特に AC 強電界により粒界すべりが加速され、支配的な変形メカニズムが拡散クリープから粒界すべりに遷移することを確定した。併せて DC および AC 強電界下亀裂修復試験を進め、高温クリープ同様 AC 強電界の亀裂修復効果が DC のそれよりも大きいことを明確に示した。さらに Zr のトレーサーとして Hf を用いた拡散対実験を実施し、特に AC 強電界の印加によってカチオンの粒界拡散の促進が顕著に現れることが示された。

先端ナノ計測による強電界下での微細構造の動的挙動に関する解析も進み、特にこれまで検討を行っていなかったカチオン空孔形成に及ぼす強電界の影響を初めて捉えることができた。

また 4 年次途中から、強電界下での力学応答の原子論的素過程を理解することを目的として、渡邊・清水グループによる理論計算に着手した。粒界等の考慮も重要であることを踏まえると、第一原理計算のみでの実施は計算量の点で現実的ではないことから、比較的小規模な系に対する第一原理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実施するべく、ZrO₂ を対象として準備を進めた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) K. Morita, B.-N. Kim, “Effect of electric current on high temperature flow behavior of 8Y-CSZ ceramics”, *Journal of the European Ceramic Society*, **42** (2022) 2341-2348.
- 2) H. Motomura, Daiki Tamao, Kohta Nambu, Hiroshi Masuda, Hidehiro Yoshida, “Athermal effect of flash event on high-temperature plastic deformation in Y₂O₃-stabilized tetragonal ZrO₂ polycrystal”, *Journal of the European Ceramic Society*, **42** (2022) 5045-5052.
- 3) A. Itoh, T. Tokunaga, A. Kodaira, H. Yoshida, T. Yamamoto, “Variation of photoluminescence intensity depending on the timing of electric field application during isothermal flash sintering for 3mol%Y₂O₃-ZrO₂ polycrystal”, *Ceramics International*, **48** (2022) 28712-28717.
- 4) S. Kayukawa, Y. Katsuyama, A. Kodaira, T. Tokunaga, K. Morita, A. Nakamura, K. Higuchi, T. Yamamoto, “Microcrack healing in single-crystal cubic zirconia by thermal annealing”, *Journal of the European Ceramic Society*, **43** (2023) 1078-1086.
- 5) R. Ono, A. Itoh, T. Tokunaga, H. Yoshida, T. Yamamoto, “A technique to modify the photoluminescence intensity of β-Ga₂O₃ polycrystals using an electric field during sintering”, *Journal of Luminescence*, **254** (2023) 119508.