

NIRIN



# 名工研ニース

1999 6 No.567



## セラミックスの変形力学 と計算科学

構造プロセス部長 桑原好孝

科学技術の使命は我々人類の生活環境を向上させるところにあり、確かにその発展に伴って我々に豊かな物質文明をもたらしてきた。ただ近年において技術に対する閉塞感が漂ってきていることも確かである。我々が享受したこの豊かな物質文明は、製品開発ならびに技術開発において大量生産による経済性を追求し、原料とエネルギーの限りある資源を大量に消費してきた。その結果として80年代に入ると、廃棄物処理の問題ならびに地球規模での各種の環境問題が派生的に生じたことは最早周知の事実である。生活環境の向上を使命とするはずの科学技術が、社会生活の利便性追求と地球環境保全との狭間に立ったのである。

当所のミッションについては、今年の本紙1月号の所長年頭所感の中で次のように紹介されている。即ち、「単に性能や経済性のみならず、省エネルギー、環境保全、あるいは我々を取り巻く人間・社会とも十分協奏した、多機能材料の創製技術（協奏プロセス技術と呼ぶ）、あるいはそれを普遍化する指導原理は何かという課題を無機系融合材料の中で追求すること」である。これも上記の社会的な状況を反映して策定されたものである。構造プロセス部ではこのミッションを基盤として、セラミックスの主として加工技術と材料機能高度化に関する研究も展開している。

硬くてもろいセラミックスでも、ある圧力・温度の下ではあたかもチューインガムのように伸びる現象を呈することを、当所が世界に先駆けて発見したのは凡そ15年前のことである。これをセラミックス超塑性と呼称し、それ以降このセラミックス超塑性に関する国際会議が開催されるようになるなど一つのブームを巻き起こした。当部には超変形機能研究室が置かれているが、この研究室はこの流れの中に誕生した研究室であり、当初においては、このセラミックス超塑性が幅広い材料系（組成）で、あるいは各種の微構造組織の下でも発現することを実証してきた。そして最近では、超塑性発現時に針状の焼結粒子を配向させながら塑性加工を行う新たな加工技術を視野に収めて研

究を進めている。これは組織制御技術による機能高度化と加工技術の同時操作であり、省エネルギー加工プロセスへの展開としても期待されている。また、構造評価研究室では材料の組成・微構造と変形力学及び非線形破壊力学との関係の明確化を研究対象としている。ここでは構造用セラミックスの実用化を図るために加工損傷と強度との関係の定式化を進めると共に、セラミックスの信頼性保証（寿命予測、破壊予測）に対して重要因子となる破壊靱性の解析に重点を置いた研究を進めている。具体的には電子顕微鏡による破壊の直接観察や現象のモデル化とその結果に基づく高靱化現象や破壊様式の数値解析などを通して、必要とする破壊靱性や破壊様式を実現するための材料構造制御指針を得ようとするものである。以上のように、これらの研究は材料科学と変形力学の融合による構造材料設計を目指している。

物質の状態は構成元素の種類と圧力・温度・時間によって基本的に決まる。セラミックス材料がこれらの時空間の下で如何なるメカニズムをもってマクロな変形挙動を示すのか、これを直接その場観察することはできない。この課題を解く鍵を握るのが計算科学である。ただ、結晶粒界を持つセラミックスバルク体を原子レベルで扱おうとする場合、計算領域内の全ての原子間相互作用を計算することは計算機能力を考えると実際には不可能である。それを解決する手法としては、第一原理分子軌道法などのミクロレベルから有限要素法などマクロ領域の手法を組み合わせたハイブリッドシミュレーションがある。現在、超変形機能研究室では計算科学を駆使して、圧力や温度の変化に応じた原子間結合力・物質移動・粒界挙動・超塑性発現機構等の解明を目指してこのハイブリッドシミュレーション手法の開発を行っている。

変形力学の実験と計算科学とが融合して進展すれば、所のミッションの云うところの、協奏プロセス技術を普遍化する指導原理の探求になるものと信ずる。

# ダイヤモンドの破壊のタイトバインディング分子動力学シミュレーション

構造プロセス部超変形機能研究室 橋本 保

分子動力学 (MD) シミュレーションには大きくわけて古典MD, タイトバインディングMD, 第一原理MDがある。古典MDは原子間の相互作用を仮定したポテンシャル・モデルを用いる計算で, 計算が高速に行なえるという特徴があり, 大規模な計算が行われている。第一原理MDは人為的なパラメータを用いない方法で, 高精度であるが扱う原子数が制限される。タイトバインディングMDはモデルを用いる計算方法であるが信頼性は古典MDよりも高いと考えられており, 第一原理計算よりも高速である。ここでのタイトバインディング法では, 原子軌道を基底にとってその線形結合で電子状態を表し, ハミルトニアン行列要素を計算する際とび移り積分の原子間距離依存性などをパラメータで与える (タイトバインディング・モデル) などの近似を行う。MD計算の結果を実験と比較する場合, 圧力をコントロールして実験と同じ圧力の条件で計算することが望ましい。圧力をコントロールしたMD計算は古典と第一原理計算で行われているが, 著者の知る限りではタイトバインディングMDではあまり行われていない。

構造プロセス部超変形機能研究室では, 原子電子レベルからの多結晶材料特性のシミュレーションを行っている。そのような研究をするにあたり, 新しいシミュレーション技術の開発は非常に重要である。そこで, 我々は, 圧力や応力をコントロール可能なタイトバインディングMDプログラムを開発した。このプログラムを信頼性の高いモデルがあるダイヤモンドに適用し, その破壊のメカニズムを調べた。

図に点欠陥がユニットセル当たり1個ある場合の, ダイヤモンドの[111]方向への引っ張りによる, 破壊に至るまでのシミュレーション結果を示す。図には, 応力をかけてから (a) 10 t秒後, (b) 160 t秒後, (c) 180 t秒後の原子配置を示す ( t = 0.7 × 10<sup>-15</sup>s)。灰色の円は炭素原子を表し, 距離が典型的な炭素原子間結合距離の2つの原子を線で結んでいる。オレンジ色の円は点欠陥を表す。ユニットセルを引っ張り方向に3周期分描いている。

欠陥の無い場合は原子間距離が一様に長くなり破壊に至ったのに対し, 欠陥のある場合は t = 160 tでは, 点欠陥の上側2層めからの4層は炭素原子の層が秩序を持っているが, それ以外の欠陥位置を含む層では原子位置が大きく乱れている。点欠陥がある場合は, その付近から破壊が始まるであろうという結果がこのシミュレーションで得られた。

現在, タイトバインディング計算の高速化手法が提案されている。また, カーボン以外の様々な物質についてもタイトバインディングモデルが作られている。これらは, 計算が大規模に行なえるようになりつつあり, 計算する対象も広がっていることを意味する。将来的には, 信頼性が比較的高くて第一原理よりも高速であるという特性を生かして, タイトバインディング計算を材料開発に役立てていきたい。

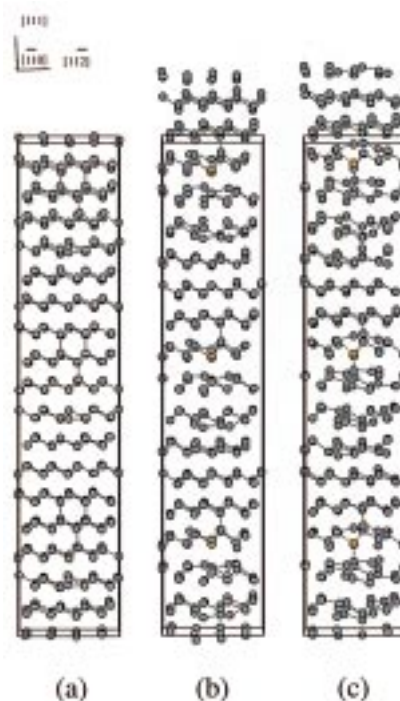


図 点欠陥のあるダイヤモンドの [111] 方向への引っ張りにおける原子配置。応力をかけてから (a) 10 t秒後, (b) 160 t秒後, (c) 180 t秒後。

# 超電導限流素子の研究開発

セラミックス基礎部電子セラミックス研究室 村山宣光

近年、電気エネルギーの需要は年々増加し続けており、それに伴い電力系統は大容量化をたどっている。その結果、短絡事故時の過電流は増大する傾向にある。このような背景のもと、過電流によるパワーエレクトロニクス機器の損傷を防ぐため、過電流を速やかに抑制する限流器の開発・導入が切望されている。限流器としてはいくつかの方式が提案されているが、その内の一つとして超電導材料を利用した限流器の検討が行われている。その基本的な動作原理は、過電流が超電導体の臨界電流を越えると同時に超電導 - 常電導転移（電気抵抗発生）が起こり、それにより過電流が抑制されるというものである（図1）。超電導限流器の利点としては、物質の相転移を利用しているため、動作速度が高速、リレーなどの付加装置が不要、繰り返し使用が可能、等が挙げられる。

セラミックス基礎部電子セラミックス研究室では、名古屋大学との連携のもと、酸化物高温超電導体を使った限流素子の研究開発を進めている。材料として  $(\text{Bi,Pb})_2\text{Sr}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}$  超電導体を採用し、一軸加圧焼結の一種であるシンターフォーミングにより、焼結体密度が理論密度に近く、良好な粒子配向性を示す試料を作製した（本紙No.519）。得られた板状の試料をジグザク状に加工し、銀電極と加圧接合することにより、図2に示すような限流素子を作製した。この素子の臨界温度は107K、液体窒素温度（77K）・ゼロ磁場中の臨界電流は110A、通電10サイクル後の電圧 - 電流曲線から求めた限

流抵抗値は0.12 Ωであった。

次に、得られた素子特性値を用いて、6.6kV配電系統（系統周波数：60Hz，最大負荷電流：300A，最大短絡電流：14.1kA，系統インピーダンス： $j0.38 \Omega$ ）用の限流器に必要な上記素子の総数を計算した（図3）。なお、本計算では、複数の素子を直並列接続することにより、必要な通電容量と限流抵抗を得た。限流後の電流と固有短絡電流との比で定義される限流率と素子の総数との関係を図3に示す。事故電流を15%まで限流する場合、素子が占有する体積は、各素子間の適当な隙間も考慮して約  $10^4 \text{cm}^3$  と計算された。この体積は、配電用柱上設置機器の1/10以下であり、装置外壁、断熱設備、絶縁などを考慮しても、限流器全体の大きさは実現可能な範囲であるとの結論が得られた。

今後は、超電導限流器をより現実的なものにするため、素子の臨界電流の向上及び超電導 - 常電導転移の急峻化により、素子の総数を少なくすることが第一の課題である。また、電磁力あるいはクエンチ時に発生する熱応力によって素子が破損することを防ぐため、素子の機械的強度を高める必要がある。これらの課題は、素子の微細構造に大きく依存しており、セラミックプロセッシングが果たす役割は大きい。また、超電導限流器の開発には、材料研究とシステム研究の連携が重要である。今後は、積極的に大学、企業との共同研究を進めていく予定である。

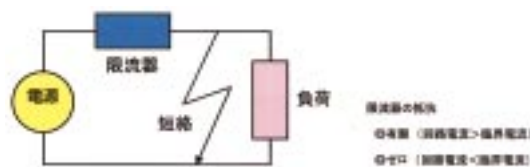


図1 超電導限流器の原理

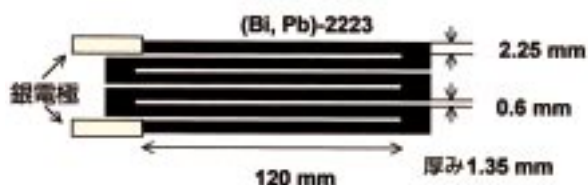


図2 超電導限流器素子の形状

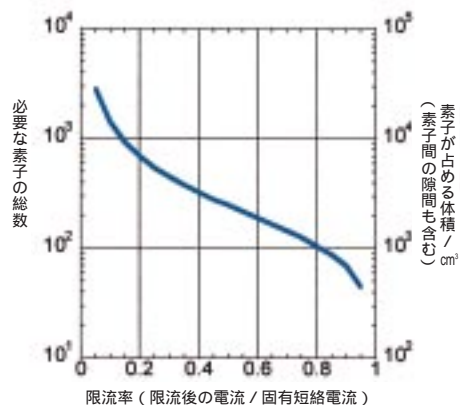


図3 素子の総数と限流率（限流後の電流 / 固有短絡電流）との関係

# ナノサイズ界面におけるすべり摩擦現象の解明・制御へ向けての基盤研究

融合材料部メソスコピック材料研究室 丸山 豊

すべり摩擦現象は、工学的には熱損失の低減（省エネルギー）化、摩耗・潤滑の問題として非常に重要であり、古くから盛んに研究が行われているが、原理的にはいまだよく分かっていないことも多い。加えて近年の走査型トンネル電子顕微鏡（STM）、原子間力顕微鏡（AFM）や摩擦力顕微鏡（FFM）などの原子領域の操作・観測技術の開発と共に、マイクロマシンやナノ構造制御技術を応用した精密加工などの実用上の要請から、これまで考えられてこなかったようなナノサイズ領域における摩擦現象が重要となり、マクロ領域での摩擦との違いや、そもそもよく分かっていない原子レベルでの摩擦発現機構を明らかにすることが求められている。

原子レベルでの摩擦発現機構を明らかにするためには、固体接触面における原子の配列状態や数を原子単位で自由に制御することが求められているが、実験的には困難であると考えられる。そこで、融合材料部メソスコピック材料研究室では理論モデルと計算機シミュレーションを用いることにより、ナノサイズ固体界面での滑り摩擦現象を明らかにし、その制御技術に関する理論的枠組みを与えることを目指した研究を行っている。

すべり摩擦においては界面原子の配列状態が重要であると考えられることから、図1に示される下部基板と上部バルクとの界面のみを考慮したモデルを考案した。上部バルクに属する原子は、リジッドな六角形の接触界面（単原子層）を構成し、各原子は下部三角格子基板上的ポテンシャルエネルギー（赤の波線）を感じる。従って、界面全体のポテンシャルエネルギーは各原子のポテンシャルエネルギーの和で与えられ、中心原子の位置と基板格子とのミスフィット角（ $\theta$ ）の関数として評価される。

以上のモデルに基づきポテンシャルエネルギー計算を行った。その結果、 $\alpha$ が変化すると、上部バルクと下部基板間との界面格子のずれの程度が変化して、上部バルク全体が感じるポテンシャルエネルギー面の形状が、図2のように反転することが分かった。ポテンシャル面の勾配が（静）摩擦力に相当するため、 $\alpha$ に依存してすべり摩擦力が大きく変化する事を意味している。このことは、 $\alpha$ の選択による摩擦力制御の可能性を示唆するものである。

このほかにも、界面サイズによりポテンシャル障壁の高さが大きく変化する事も見出し、巨視

レベルには無い、微小界面特有のすべり摩擦挙動の存在が予見される結果が得られている。今後はモデルの精密化とともに、実験による検証と制御方法の検討を進めたい。

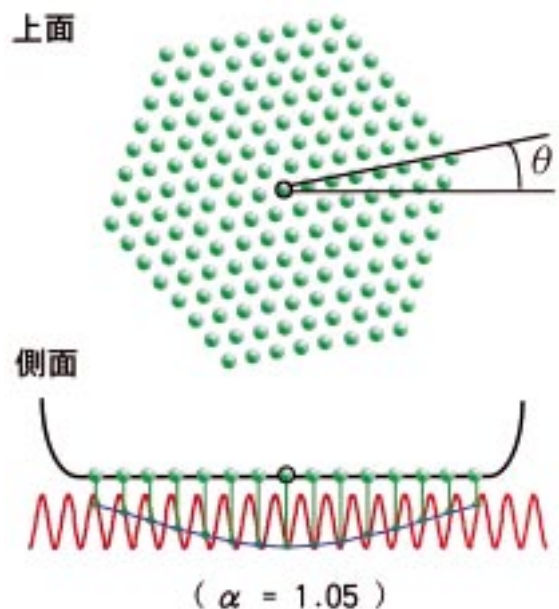


図1 2次元すべり界面モデル。緑球は原子を表し、赤の波線で示される基板のポテンシャルエネルギーを感じる。 $\alpha$ は下部格子に対する上部格子間隔の割合である。

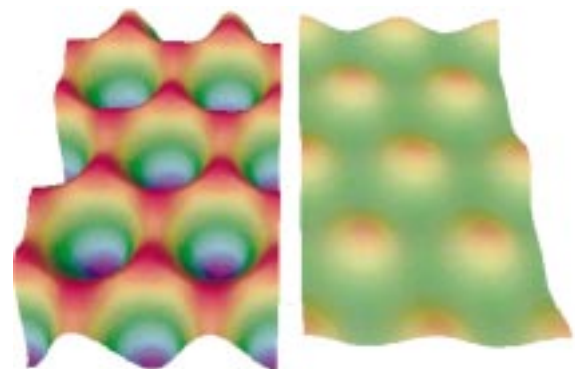


図2 上部バルクの感じるポテンシャルエネルギー面。（左  $\theta = 0^\circ$ ，右  $\theta = 5^\circ$ ）

## 第64回 名古屋工業技術研究所研究発表会 - エネルギー・環境・構造材料研究の最前線 -

開催日時 : 平成11年7月14日(水) 9:20 ~ 17:00  
 会場 : 工業技術院名古屋工業技術研究所 講堂及び第4会議室  
 参加費 : 無料

### プログラム

開会の辞	9:20 ~ 9:30
シナジーセラミックスの研究開発(3テーマ 各20分)	9:30 ~ 10:30
ニューサンシャイン	
・太陽エネルギー	10:30 ~ 11:10
・セラミックガスタービン	11:10 ~ 11:40
・水素エネルギー	11:40 ~ 12:00
一般発表(パネル・ポスター発表)	13:30 ~ 14:30
特別講演「これからの科学と産業」	14:30 ~ 15:30
株式会社デンソー 取締役社長 石丸典生氏	
重要地域技術研究開発	15:40 ~ 16:10
官民連帯共同研究	16:10 ~ 16:30
環境研究総合推進	16:30 ~ 16:50
閉会の辞	16:50 ~ 17:00

問合せ先 : 名古屋工業技術研究所 研究企画官室

研究発表

### 誌上発表

題名	Microstructural Evolution and Plastic Stability During Superplastic Flow in A7475 Aluminum Alloy
掲載誌名	Materials Science and Technology Vol.15 p.180 ~ p.185
キーワード	アルミニウム合金, 超塑性, 組織変化, 塑性安定性
発表者	岩崎 源 <sup>1</sup> , 森 隆資 <sup>1</sup> , 馬淵 守, 東 健司 <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> 姫路工業大学 ) ( <sup>2</sup> 大阪府立大学 )
題名	Behavior of Implanted Nitrogen in Zr/C Bilayer
掲載誌名	Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interaction Vol.148 p.863 ~ p.867
キーワード	Nitrogen Implantation, Zr/C Bilayer, Monte-Carlo Simulation, NRA, RBS
発表者	宮川佳子, 池山雅美, 中尾節男, 宮川草児, 馬場恒明 <sup>1</sup> , 畑田留理子 <sup>1</sup> ( <sup>1</sup> 長崎県工業技術センター )
題名	Superplasticity of Magnesium Alloys
掲載誌名	まてりあ Vol.38 No.4 p.301 ~ p.304
キーワード	マグネシウム合金, 高速超塑性, 低温超塑性, 超塑性成形
発表者	馬淵 守, 中村 守, 相澤龍彦 <sup>1</sup> , 東 健司 <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> 東京大学 ) ( <sup>2</sup> 大阪府立大学 )
題名	Fabrication of Piezoelectric Particle Dispersed Ceramic Nanocomposite
掲載誌名	Journal of The European Ceramic Society Vol.19 No.6-7 p.993 ~ p.997
キーワード	ナノコンポジット, 圧電粒子, パルス通電焼結, ナノ粒子
発表者	黄 海鎮, 永井 徹 <sup>1</sup> , 鳥山素弘, 山東睦夫, 新原皓一 <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> 新日本製鉄(株) ) ( <sup>2</sup> 大阪大学 )
題名	Effect of A-Phase on Superplastic Behavior of Silicon Nitride
掲載誌名	Journal of The Ceramic Society of Japan Vol.107 No.4 p.388 ~ p.390
キーワード	窒化ケイ素, 超塑性, 変形応力, 相, 相
発表者	近藤直樹, 大司達樹, 鈴木義和, 永野孝幸 <sup>1</sup> ( <sup>1</sup> 科学技術振興事業団 )
題名	Proposal of Reliability Based on Degree of Fuzziness for Evaluating Sensor Fusion
掲載誌名	日本ファジィ学会誌 Vol.11 No.2 p.320 ~ p.327
キーワード	センサ融合, 情報処理, 知能化
発表者	小林 太 <sup>1</sup> , 新井史人 <sup>1</sup> , 下島康嗣, 福田敏男 <sup>1</sup> , 小野田誠 <sup>2</sup> , 堀田祐三 <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> 名古屋大学 ) ( <sup>2</sup> NTN(株) )
題名	The Effect of Deformation Temperature on Microstructure and Superplastic Flow in Al-Cu-Mg/Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> Composites
掲載誌名	Materials Transactions JIM Vol.40 No.4 p.358 ~ p.361
キーワード	アルミニウム基複合材料, 高速超塑性, 微視組織
発表者	Ha-Guk Jeong <sup>1</sup> , 平賀賢二 <sup>1</sup> , 馬淵 守, 東 健司 <sup>2</sup> ( <sup>1</sup> 東北大学 ) ( <sup>2</sup> 大阪府立大学 )
題名	Superplastic Sinter-Forging of Silicon Nitride with Anisotropic Microstructure Formation
掲載誌名	Journal of The American Ceramic Society Vol.82 No.4 p.1067 ~ p.1069
キーワード	窒化ケイ素, 超塑性鍛造焼結, 配向組織, 高強度
発表者	近藤直樹, 鈴木義和, 大司達樹

公開特許情報

国内登録

登録番号 登録日 出願番号	名称 / 発明者
* 特 2140403 H 11.3.5 特願平 3-325333	積層状カオリナイトとその製造法及びそれを用いたセラミック多孔体 / 芝崎靖雄 外 4 名
* 特 2889778 H 11.2.19 特願平 4-335083	水浄化法 / 埜田博史 外 5 名
特 2896498 H 11.3.12 特願平 8-219232	a 面を成長させた板状水酸アパタイトの製造方法 / 永田夫久江 外 4 名
特 2899691 H 11.3.19 特願平 9-287953	非接触マイクロマニピュレーション方法 / 小塚晃透 外 2 名

\* 共同出願

お知らせ

表彰・受賞

氏名	受賞名	研究題目	受賞日
首席研究官 神崎修三	(社)日本セラミック協会 学術賞	機能共生をめざしたアルミナおよび窒化ケイ素系セラミックの高次構造制御の研究	5/21

人事異動

氏名	新	旧
林 国貴	計量研究所	総務部庶務課長補佐(瀬戸分室)
井口 孝	総務部庶務課長補佐(瀬戸分室)	総務部業務課長補佐
青木正一	総務部業務課長補佐	総務部庶務課庶務第1係長
益子 健	総務部業務課	資源環境技術総合研究所 (平成11年5月1日)

平成11年度  
名古屋工業技術研究所一般公開

21世紀の君たちへ科学する心を伝えたい。

当所では、工業技術院研究所全国統一公開の一環として、「21世紀の君たちへ、科学する心を伝えたい。」をテーマに、下記の日程で研究所を皆様に公開し、研究の一端をご紹介します。

お誘い合わせの上ご来場ください。

記

日 時 : 平成11年7月29日(木), 30日(金)  
両日とも受付時間 10:00 ~ 16:30  
場 所 : 工業技術院名古屋工業技術研究所  
対 象 : 小学生以上  
備 考 : 入場無料  
問合せ先 : 名古屋工業技術研究所 総務部業務課  
TEL 052(911)2117



発行所  工業技術院 名古屋工業技術研究所

本 所: 〒462-8510 名古屋市北区平手町1-1 TEL

瀬戸分室: 〒489-0884 瀬戸市西茨町110番地 TEL(0561)82-2141-2

U R L <http://www.nirin.go.jp/>

編集発行 総務部業務課

印 刷 マツモト印刷株式会社