

直流絶縁技術のブレークスルーに向けた計算科学を活用した絶縁材料設計手法の創成 キーワード: 直流絶縁、機能性絶縁材料、量子化学計算

【代表者】 三宅 弘晃 准教授(東京都市大学)
 【共同研究者】 熊田 亜紀子 准教授(東京大学)
 小迫 雅裕 准教授(九州工業大学)
 佐藤 正寛 助教(東京大学)
 平野 敏行 助教(東京大学)
(所属・職位は採択当時のもの)

背景

- 再生可能エネルギーの導入に向けて直流送電手段の実現が求められるが、直流送電のシステム・機器設計に関する技術は未確立な点が多い。
- 絶縁材料の直流絶縁破壊、劣化現象の解明や、新機能材料としてのナノコンポジットの開発も手探り的な研究がおこなわれている段階である。
- 新薬開発など他分野では第一原理計算などの各種計算科学が必須のツールとなっており、物質・材料科学における原理解明が進んでいる。

目的

- 計算科学の活用が進んだ製薬・化学分野の知見を取り込み、大規模計算化を図る。
- 各分子レベルのミクロな特性から、絶縁破壊電界や導電特性など材料マクロの特性を推定・予言する手法を確立する。
- 計算科学の導入により、経験則に頼る点の多かった従来型材料開発手法から、その導電構造を制御した分子構造の材料設計手法へと革新的な変換を目指す。



研究概要

① 基礎絶縁材料における電気物性値の計算評価

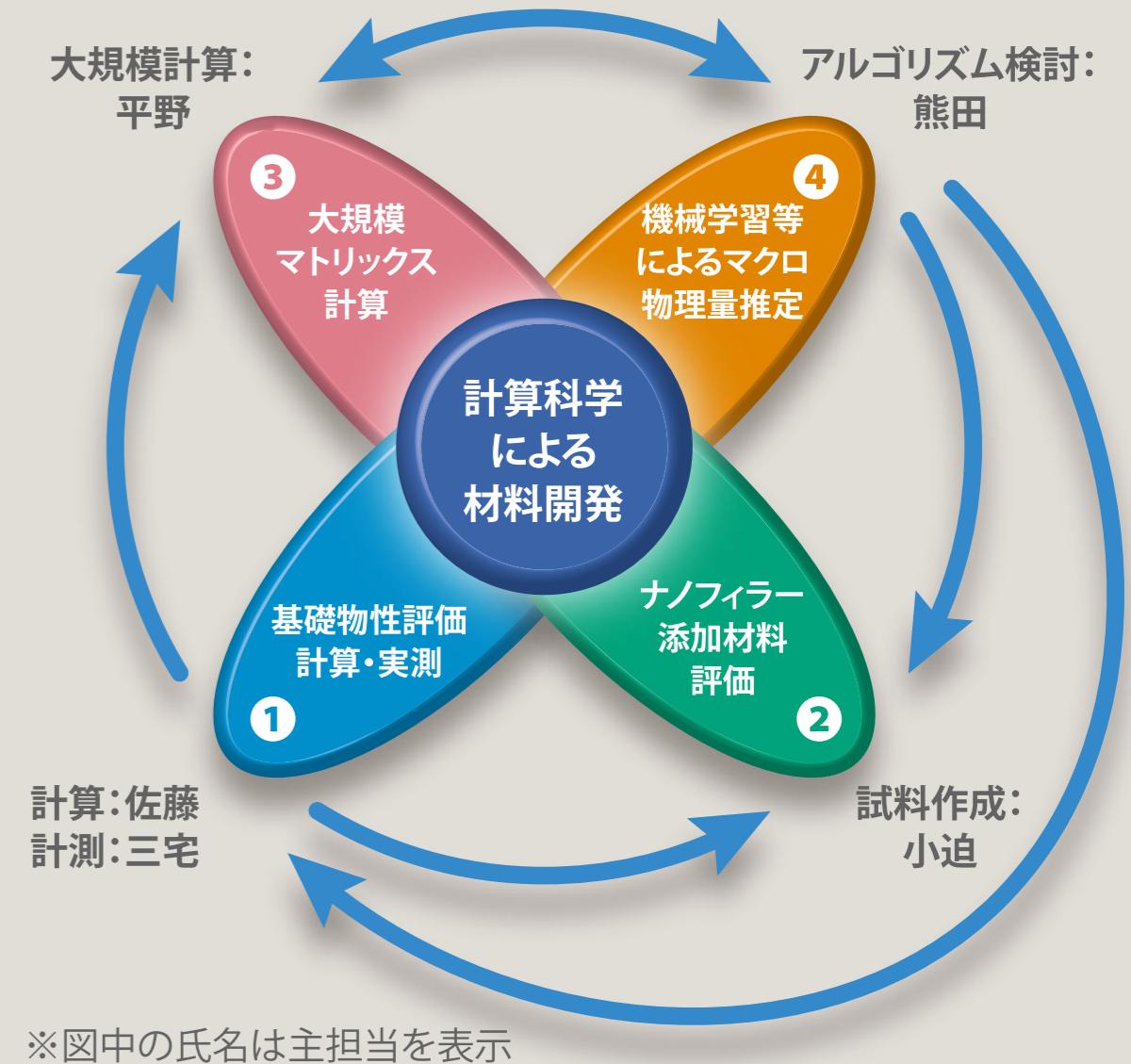
不純物が混入した状態を模擬した2～数十分子のマトリックスを構築・計算し、より実条件に近い状況で移動度等を評価。

② ナノフィラー添加材料の電気絶縁特性への応用

無機粒子表面とその近傍の高分子マトリックスのモデルを構築し、量子化学計算による電子構造の解析・評価。

③ 実材料を模擬した大規模計算への応用

並列計算機システムを用い、実際の構造(非晶質)を模擬した構造で大規模分子系での第一原理(QM)計算を実施。



※図中の氏名は主担当を表示

1 基礎絶縁材料における電気物性値の計算評価

【担当】 三宅、熊田、佐藤

① 物性値(移動度)計算

- ポリエチレンの結晶における電荷移動特性を第一原理計算によって計算することに成功。

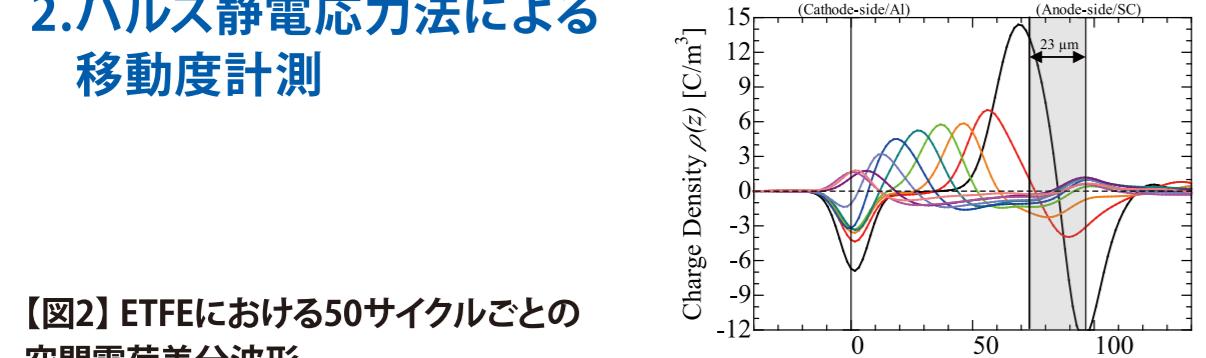
- 現在、非晶領域における移動度の計算に向け、分子動力学計算による高分子非晶構造の生成、第一原理計算による高分子非晶領域における電子状態の計算、kineticモンテカルロ計算による電荷のトラジェクトリのシミュレーションを基本とする計算方法を開発中。

② 移動度・界面測定

1.電子線照射 TOF法による移動度計測



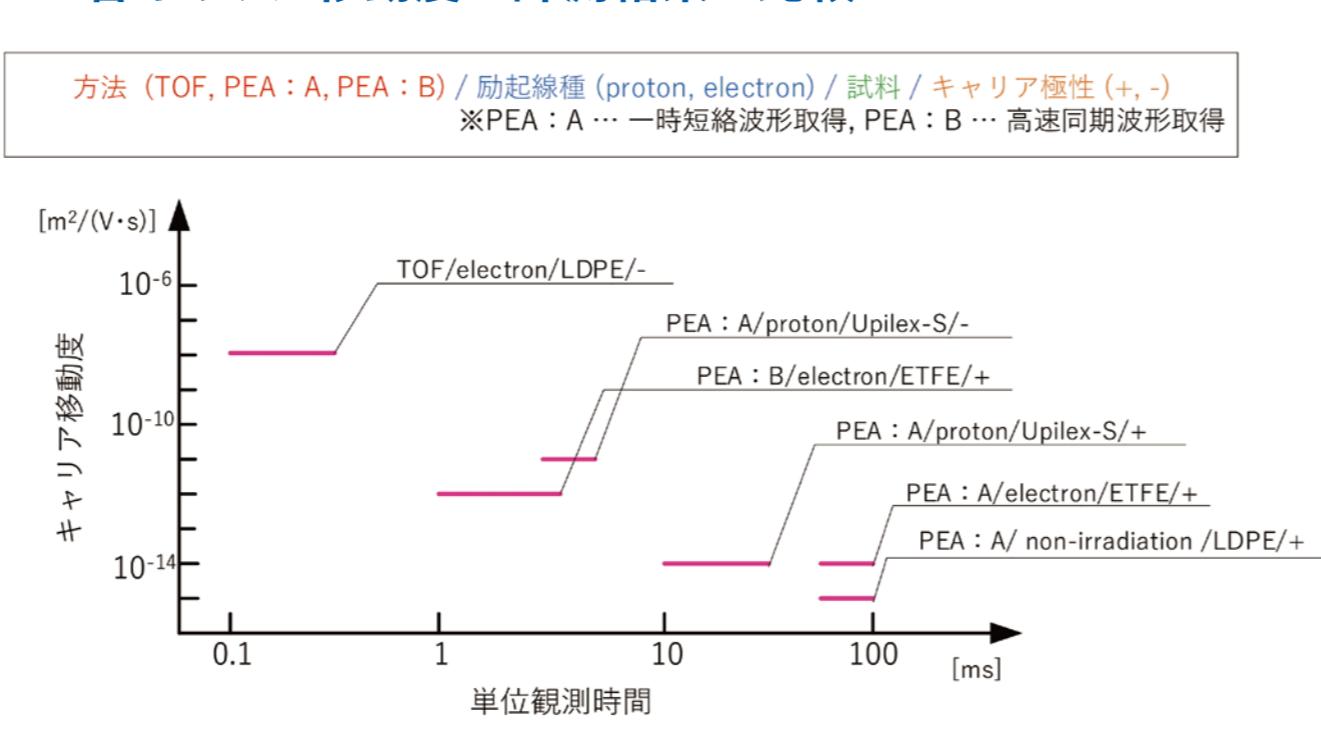
2.パルス静電応力法による移動度計測



【図1】LDPEにおけるパルス電子線照射時の外部回路電流波形

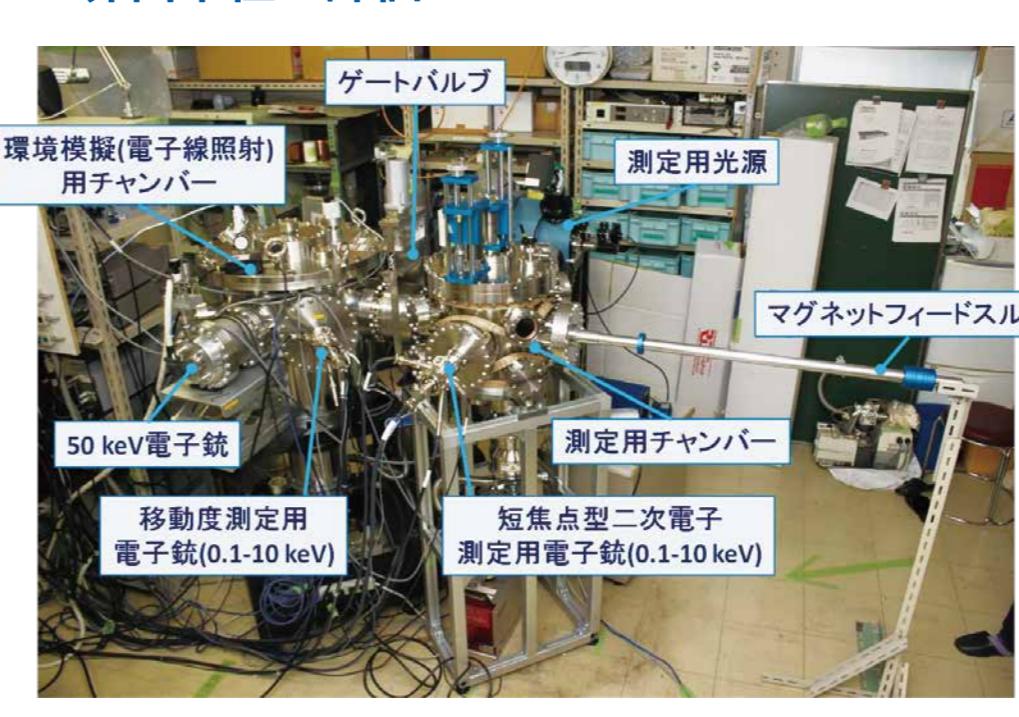
【図2】ETFEにおける50サイクルごとの空間電荷差分波形

3.各キャリア移動度の計測結果の比較

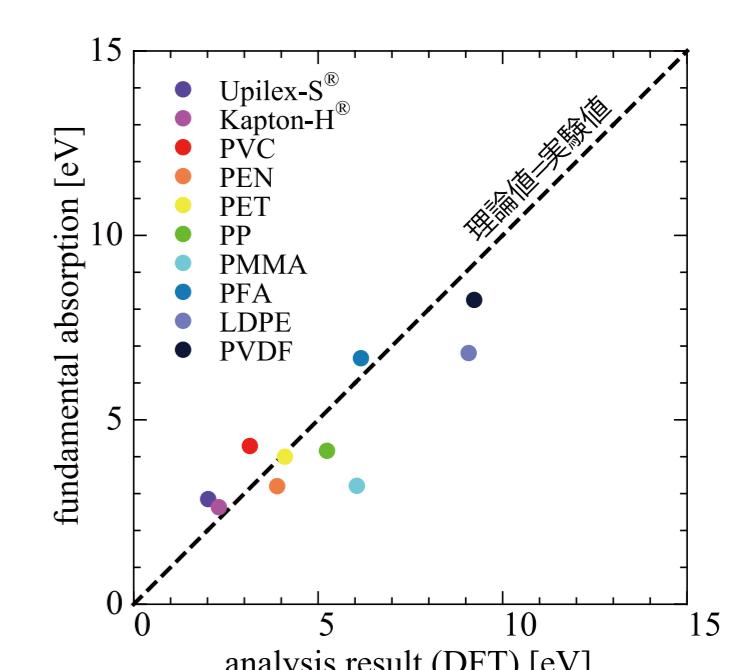


【図3】各種移動度測定結果の比較

4.界面準位の評価



【図4】光電子・吸光度測定装置



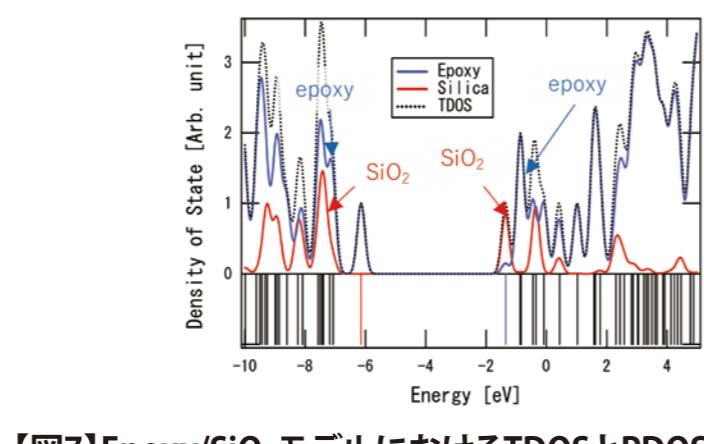
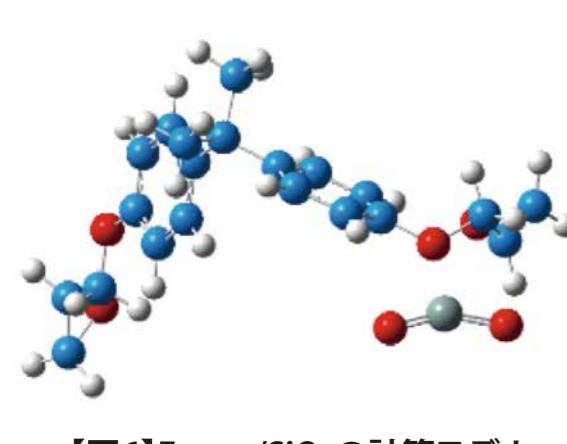
【図5】HOMO-LUMO間のエネルギーギャップ計測値とDFTによる計算値との比較

2 ナノフィラー添加材料の電気絶縁特性への応用

【担当】 小迫

① 量子化学計算によるトラップ準位の推定

- ナノコンポジット材料を対象に、量子化学計算を用いてトラップ準位の推定を実施。

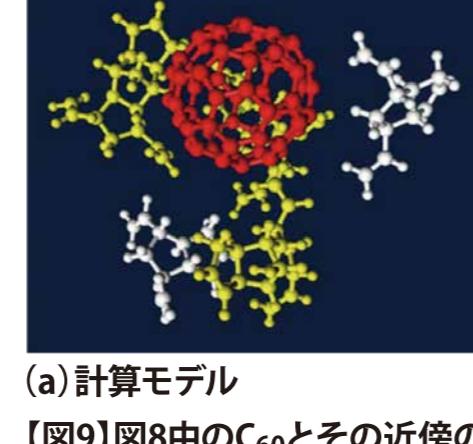
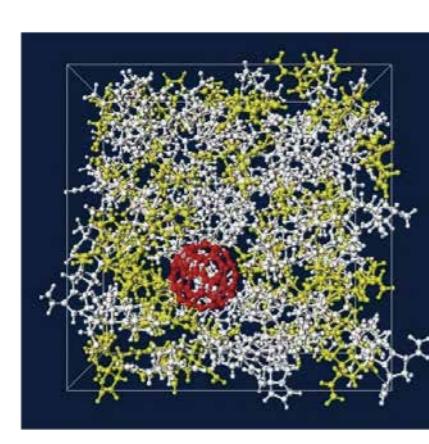


【図6】Epoxy/SiO₂の計算モデル

【図7】Epoxy/SiO₂モデルにおけるTDOSとPDOSの計算結果

② 量子化学計算による絶縁破壊強度の検討

- 炭化水素系熱硬化性樹脂にC₆₀を添加した試料系において量子化学計算を用いて絶縁破壊強度の検討が可能かを検討。



【図8】分子動力学計算後のモノマー/C₆₀モデル

【図9】(a) 計算モデル (b) エネルギー準位計算結果

3 実材料を模擬した大規模計算への応用

【担当】 平野、佐藤

① 大規模分子系での量子化学計算システムの構築

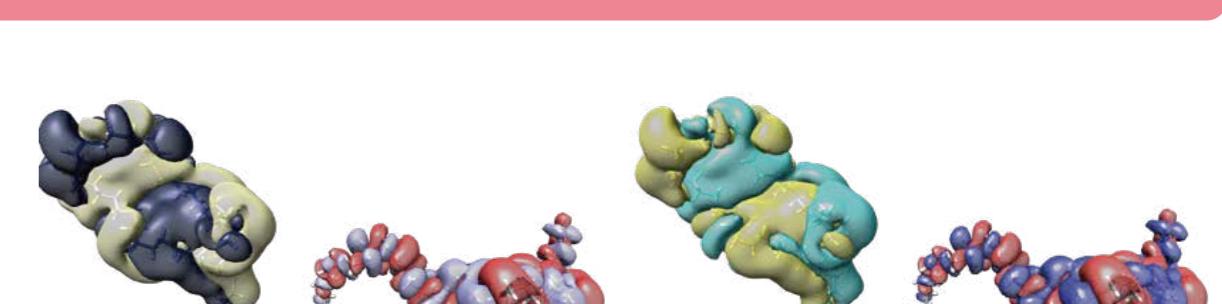
- ProteinDFとQCLObotを利用して材料系の大規模分子の量子化学計算システムを構築。GPUを搭載したワークステーション等での大規模カノニカル分子軌道計算を可能にした。

② 非晶質分子モデリング環境の構築

- OpenBabel、Gromacs、AmberTools等のソフトウェアを連携することにより、分子力学法および分子動力学法を用いたモデリング環境を構築。

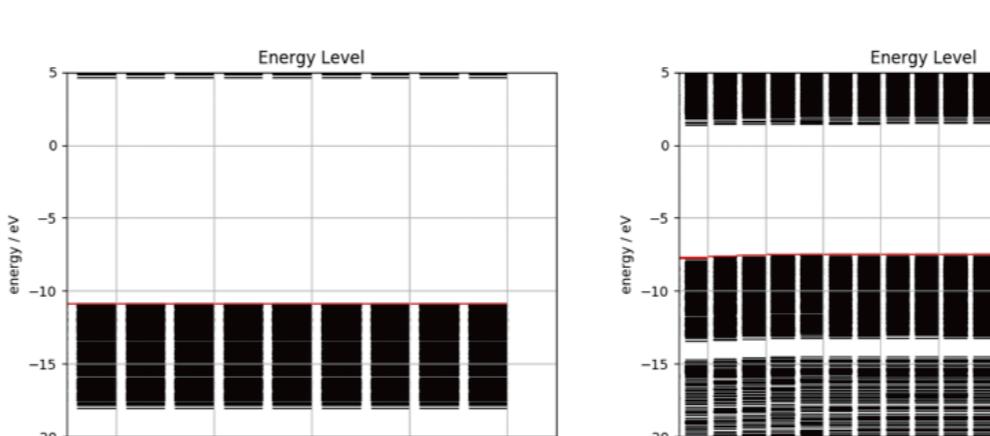
③ ポリエチレンの電子状態計算

- 実証計算としてC₁₀₀H₂₀₂の計算を実施。HF法、B3LYP法とともに良好な収束を示し、占有軌道・空軌道ともに、分子軌道がエネルギー的に密に存在していることを確認。



【図10】C₁₀₀H₂₀₂の分子軌道図

左はHF法、右はB3LYP法による計算結果。
赤色・青色はHOMOを、黄色・緑色はLUMOを示す。

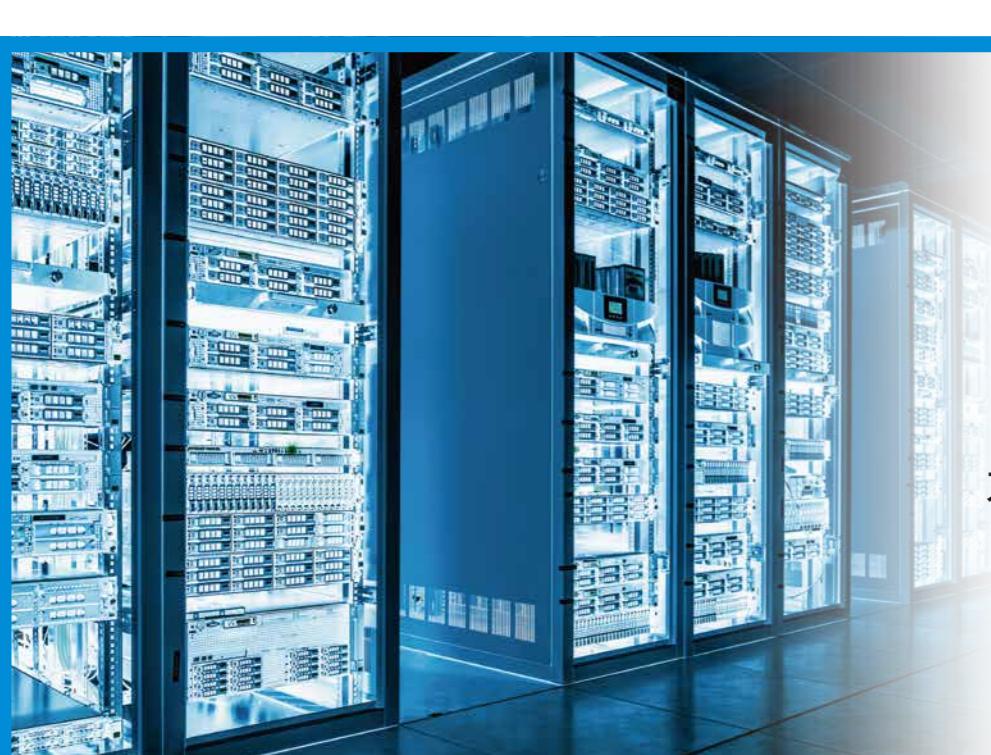


【図11】C₁₀₀H₂₀₂のエネルギー準位図

左はHF法、右はB3LYP法による計算結果。

黒色の横線は一つの分子軌道を示し、赤色はHOMOを示す。

今後の成果活用



計算科学を活用した機能性材料開発手法により、直流送電技術の確立、低炭素化社会の実現へ

本研究により、量子化学計算を用いて物性値の評価において、小規模計算でも評価できる可能性を示唆できたが、異種材料界面と材料の相互作用を含む現象に関しては大きな分子構造による計算が必要であり、今後は、大規模マトリックスの計算結果を追求し、新規材料開発等に応用していく。

