

「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」
平成27年度採択研究代表者

H27年度
実績報告書

鈴木 雄二

国立大学法人 東京大学
教授

高出力環境発電のための革新的エレクトレット材料の創成

§ 1. 研究実施体制

(1) 「東京大学」グループ(研究機関別)

研究代表者: 鈴木 雄二 (東京大学・大学院工学系研究科、教授)

研究項目

- ・分子レベルの議論に基づくエレクトレット荷電メカニズムの解明
- ・高制御性の紫外線荷電法の開発
- ・異方性誘電率による発電性能評価、3次元電場中に液晶の粗視化シミュレーション準備
- ・振動発電・熱発電におけるエレクトレット発電性能評価

(2) 「東京理科大学」グループ(研究機関別)

主たる共同研究者: 田中 優実 (東京理科大学・工学部、准教授)

研究項目

- ・水酸アパタイト系バルクセラミックスの帯電・電荷保持機構の解明
- ・第一原理計算を利用した水酸アパタイト系バルクセラミックスの欠陥種に関する解析

(3) 「東京都市大学」グループ(研究機関別)

主たる共同研究者: 吉田 真史 (東京都市大学・知識工学部、教授)

研究項目

- ・有機無機ハイブリッド・エレクトレットの荷電メカニズム解明のための計算法構築
- ・3次元電場中の液晶の粗視化シミュレーション準備

(4) 「日本大学」グループ(研究機関別)

主たる共同研究者: 中川 活二 (日本大学・理工学部、教授)

研究項目

- ・高空間分解能の表面電位計測のための電極探針試作

§ 2 . 研究実施の概要

東京大学では、革新的エレクトレット材料の創成とその応用に向け、材料、荷電方法、発電デバイスモデリングを行った。まず、エレクトレットを用いた振動発電器のモデル構築を行い、異方性誘電率液体導入の効果、および低圧パッケージの有効性を確認した。そして、低圧でのパッケージ後の荷電方法として、紫外線を照射して光電効果によって電子を叩き出し、エレクトレット膜の荷電を行う手法を提案した。アルミニウム薄膜により大きなイオン電流が得られることを示し、さらに櫛歯電極の側壁に均一な荷電ができることを明らかにした。また、エレクトレット熱発電の解析モデルを構築した。そして、大きな誘電率温度変化を有する KTN 結晶を用いて予備実験を行い、出力は小さいながらも発電できることを示し、誘電体としてネマチック液晶を用いた場合の有効性も示された。さらに、TSC 計測のための実験系の改良、東京理科大学と連携したセラミックス・エレクトレットのための水酸アパタイト・バルクモデルの第一原理計算、東京都市大学と連携した分子軌道法計算の検討も進めた。

東京理科大学では、革新的エレクトレット材料の創成に向けたモデル系の一つとして、これまでに 4000 V 超の表面電位を発現させることに成功している水酸アパタイト(HA)系セラミックスを対象に、セラミック内部の電荷担体の局所的な運動と、直流電界下における分極形成との関係について調べた。理論計算の結果、水酸アパタイト系セラミックス内における代表的な電荷担体の運動として、HA 結晶中で 1 列に配列している OH-イオンの向きの反転、水素の欠損部を介した H⁺イオンの移動、および OH-の欠損部を介した O²⁻イオンや OH-イオンの移動などが含まれていることが分かった。また、この結果を、HA 系セラミックスの導電特性、および HA 系セラミックエレクトレットの分極緩和特性に関する実験結果と対比させたところ、HA 系セラミックスの内部における分極形成には、特に、OH-イオンの向きの反転、および OH-空孔を介したイオンの移動が大きく寄与していることが示唆された。

東京都市大学では、アミノシラン由来のクラスターの周囲に CYTOP の低分子重合体を配置した系の電子状態を分子軌道法計算で求めるための初期条件(立体構造等)と計算条件(基底関数等)を検討した。まず、この系の構成要素である CYTOP、アミノシラン、CYTOP-アミノシラン結合体に対して荷電状態(1価の陰イオン)の立体構造と電子状態を分子軌道法により求めた。その結果、CYTOP は五員環の干渉をさせたジグザク状の立体構造となることがわかった。また、電子状態に関しては CYTOP-アミノシラン結合体において、過剰な電子に対応する最高被占軌道(HOMO)が1カ所に局在化する傾向がみられた、さらに、適切な計算条件を求めるため、数種類の基底関数を用いてエネルギーの収束挙動を比較したところ、基底関数としては 6-31++ G または 6-31++ G (d,p)が必要十分であると推測された。

日本大学では、高空間分解能と高精度・高確度の表面電位測定を可能にする測定系を実現するために、従来の 50 ミクロン程度の探針直径(探針幅)をサブミクロンサイズで実現することを目指している。平成 27 年度は電極探針作製では、探針試作効率化のために新たな加工用治具を作製して試作歩留まりをアップした。また a) 集束イオンビーム加工(エッチング手法)を用いて、1 ミクロン弱の探針幅実現の見通しを得た。今後、b) イオンビーム・アシステッド・デポジション形成(ボトムアップ形成手法)、c) ロッド電極付着法(電極接着手法)の手法の検討も行う。また、電極探針・試

料間ギャップ制御として温度ドリフトを考慮した装置構成の設計、カンチレバーの機械的共振振幅低減による S/N 低下の対策として信号増大のための光学系の設計に着手した。