

「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

H28 年度
実績報告書

鈴木 雄二

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

- ① 研究代表者:鈴木 雄二 (東京大学・大学院工学系研究科、教授)
- ② 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

- ① 主たる共同研究者:田中 優実 (東京理科大学・工学部、准教授)
- ② 研究項目
 - ・水酸アパタイト系バルクセラミックスの帯電・電荷保持機構に関する系統評価
 - ・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分極メカニズムに関する解析・界面の電場印加計算の準備

(3)「東京都市大学」グループ

- ① 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)
- ② 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

① 主たる共同研究者:中川 活二(日本大学・理工学部、教授)

② 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、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検討のため、密度汎関数法を用い、CYTOP CTL4量体の解析を行った。末端基の違いによる過剰電子の安定性について評価を行い、アミノシランによって荷電性能が向上する実験結果と整合する結果を得た。高制御性の紫外線荷電法の開発を進め、真空パッケージされた櫛歯電極を持つエレクトレット発電器に適用した。680 Hz、1.75gにおいて最大 2.6 μ W の発電出力がえられ、大気圧に対して発電出力が 10 倍程度向上することを示した。また、異方性誘電率による発電量向上のため、インピーダンスアナライザ、顕微 FT-IR を導入し、微小領域において 5CB の誘電率、印加電圧による配向変化が従来のデータとほぼ一致することを確認し、今後異方性誘電率液体として用いる液晶の評価ができることを示した。回転型エレクトレット発電機のテストベンチを構築し、直径 40mm の発電機において、400 μ W 以上の電力が得られることを明らかにし、1次元静電場モデルをベースとした改良発電機モデルを提案した。さらに、昨年度に引き続き 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、誘電異方性を有する液晶の合成、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。東京理科大学と実験面での協力を進めるため、アパタイト薄膜の作製を行なった。

東京理科大学では、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)系バルクセラミックスを対象に、分極時の処理温度、電界強度および電界印加時間が表面電位に与える影響を調べた。結果、表面電位の発現に対して有効な温度範囲が存在し、低い場合には表面電位の発現に寄与するキャリアの分極や拡散が活性化されず、逆に高い場合にはキャリアの長距離拡散に基づいて電極界面での電荷移動反応が進行することで分極形成が阻害されることが示唆された。また、電界強度の増大が表面電位の向上をもたらす一方で、電荷移動反応の影響の増大にもつながること、処理時間については、表面電位に与える影響は小さいものの、表面電位に寄与する主たるキャリア種とその安定性に影響を与えていることを明らかにした。さらに、HA系セラミックエレクトレット(1000~3500 V)/空気層(0.1~1 mm)/電極系において、理論値比で 60~70%相当の電荷を実験的に取り出すことが可能であることを明らかにした。第一原理計算においては、昨年度見いだした分極メカニズム(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)について実験と比較するため、活性化エネルギーに加えて頻度因子(時定数)について検討した。また、電圧を印加した界面のシミュレーションを行うための予備的検討および予備計算を行った。

東京都市大学では、有機無機ハイブリッド・エレクトレットのモデル系として、CYTOPの重合体をアミノシラン由来のクラスタの周囲に配置したモデル系の電子状態を非経験的分子軌道法で考察した。その結果、CYTOP-アミノシラン結合体では、外部から注入された過剰な電子がCYTOPとアミノシランの結合部付近に局在化する傾向がみられた。また、この過剰な電子のエネルギー準位は、真空準位に対して-2~-3 eV程度であり、CYTOPのみの系よりも若干安定であることがわかった。このことは、CYTOP-アミノシラン系のハイブリッド・エレクトレットの荷電性能の高さに呼応す

るものであり、分子軌道法計算による電子状態計算によって、ハイブリッド・エレクトレットの荷電性能が考察可能であることが示唆された。さらに、無機クラスターの役割を考察するため、CYTOP と MgO などの金属酸化物を結合させたモデル系に対しても同様の計算を実施した。

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 5 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 28 年度は電極探針作製では、効率性、再現性を高めた探針試作が可能となった。一方、探針を被測定物と接触したときの破損が問題となり、コンタクト時のアプローチ方法の見直し、電極探針の耐衝撃性向上などの対策を平成 29 年度に行うこととした。