

高分子絶縁材料中における 電荷輸送機構の解明

東京大学 工学系研究科 氏名 鈴木遥登 嶋川肇 好永るり佳 佐藤正寛

目的 近年、高分子絶縁材料に無機ナノフィラーを添加したポリマーナノコンポジット材料について、高分子/フィラー界面の電子状態を第一原理計算によって明らかにすることで、界面での電子/正孔の挙動を説明し、フィラーによる機能発現メカニズムを解明することが目的である。

内容 Quantum Espressoを用いて、高分子/フィラー界面モデルの第一原理計算を行った。

結果 フィラーの表面修飾を変化させることで、界面での正孔トラップ深さを変化させられることを明らかにした。

利用した計算機

ノード時間
使用メモリ
並列化

SQUID

1500時間
50GB
144並列

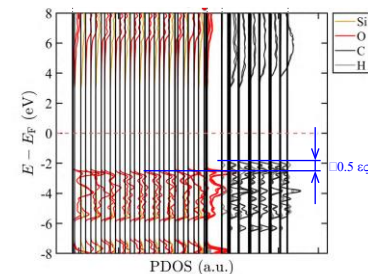


図 PE/SiO₂界面の電子状態