

ナノコンポジット絶縁材料中における電荷輸送機構の解明

東京大学大学院 工学系研究科 氏名 片瀬大祐 嶋川肇 RuanHaou 梅本貴弘 佐藤正寛

目的 高分子絶縁材料の電気的特性の向上のため、無機ナノフィラーを添加したナノコンポジット絶縁材料が近年注目を集めている。本研究では第一原理計算によって高分子/無機フィラー界面における電荷の挙動を明らかにし、コンポジット化による電気的特性発現のメカニズムを解明することを目的としている。

内容 Quantum Espresso, BerkeleyGWを用いて複数の無機フィラー/高分子界面モデルについて第一原理計算を行った

結果 界面での正孔トラップ深さの計算結果は実験的に得られた既存の各種コンポジット材料の電気的特性と整合が取れていた。またフィラーの表面修飾基の変化によって正孔トラップ深さを変化させられることが明らかとなった

利用した計算機 SQUID汎用CPUノード群
ノード時間 6500時間
使用メモリ 100GB
並列化 48並列

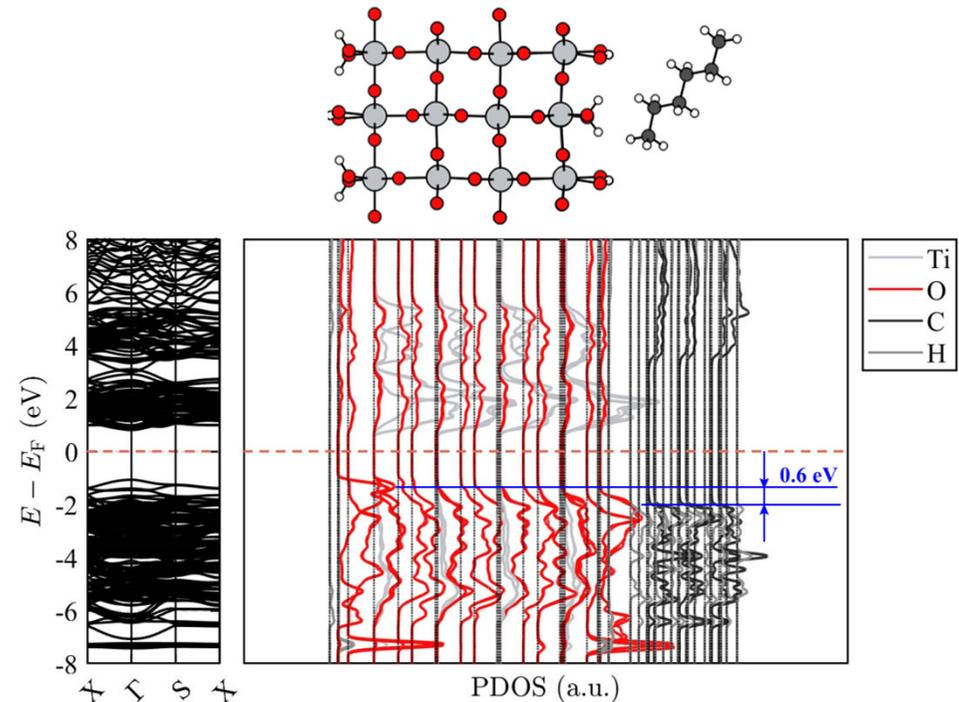


図 PE/TiO₂界面の電子状態