

研究成果報告書

所属機関	職名	氏名
東京大学 大学院工学系研究科電気系工学専攻	准教授	佐藤 正寛

研究テーマ

次世代パワーモジュール用電気絶縁材料の開発

研究報告

1. 研究の背景と目的

脱炭素社会を実現するためには、直流・交流システムをスマートに連携する必要がある。直流あるいは交流/直流連携システムに用いる電力機器の絶縁には従来の交流用絶縁材料を使っても十分な性能を発揮しないことがわかっており、現在は新規直流用絶縁材料の開発が急がれている。本研究では、電子状態計算を基本とした多階層計算の知見に基づき説明変数の探索空間を絞り込み、「ポリマー物理に立脚した人工知能(AI)モデル」をたてることで「限られたデータ」から「ポリマーの電気物性」を見積もる方法を開発し、次世代電力用半導体デバイスに用いる高耐熱・高熱伝導・高耐電圧・低電気伝導率のポリマー絶縁材料を創成することを目的とする。なお、材料の複数の物性を適切に設計するためには材料のコンポジット化が広く用いられる。そこで、本研究ではポリマーコンポジット材料設計に関する検討も行った。

2. 研究成果および考察

本研究では大きく分けて2つの検討をおこなった。(1)ポリマーコンポジットの電気物性の第一原理的多階層計算手法の開発、(2)AIを用いたポリマーコンポジット材料の物性予測。

(1) ポリマーコンポジットの電気物性の第一原理的多階層計算手法の開発 [R1]

著者はこれまで、ポリマーの電気物性を計算するための第一原理的な多階層計算法を開発してきた。本研究ではさらにポリマー/無機フィラーコンポジットの電気物性を第一原理的に計算できないか検討した。電気物性としては非線形の誘電特性を扱うこととした。

強誘電体/ポリマー複合材料は、強誘電体の高い誘電率と非線形誘電率、ポリマーの高い絶縁破壊電界と優れた加工性から、高エネルギー密度キャパシタや電界緩和絶縁材料として有望な材料である。ここ数十年、強誘電体酸化物の物性は広範囲に研究され、第一原理的アプローチにより、さまざまな静的特性（静的誘電率、屈折率、フォノンモード、自発分極など）を原子レベルでシミュレートできるようになってきた。さらに、第一原理に基づく分子動力学 (MD) 法（経験的に調整可能なパラメータを持たないMD法）によって、強誘電体の動的特性を調べられ始めている[1]。第一原理に基づく2つのMD法はコア-シェルモデル（ボンド-シェルモデルを含む）と有効ハミルトニアン法である。本研究ではより高精度な有効ハミルトニアン法[2]を用いる。なお、動的特性とは具体的にはペロブスカイト型強誘電体の構造相転移、分極対電界曲線 (P - E ヒステリシスループ)、周波数依存比誘電率である。

強誘電体は自発的な電気分極を持ち、外部電界がある閾値に達するとその方向が切り替わる（抗電界 E_c ）。多くの研究は、不揮発性メモリ記憶装置 (FeRAM) への応用を目的とした強誘電体の設計指針を追求するものであるため、シミュレーション時に印加する電界は 10 kV/m 以上 (E_c と同等以上) である。強誘電体/高分子複合材料については、フィラーの電界は E_c より数桁小さい。これは電力機器の動作電界は 50 kV/mm 以下である可能性が高く、高分子マトリックスと強誘電体フィラーの比誘電率はそれぞれ1, 1000のオーダーであるからである。いくつかの研究で、実験的に示されているように、ポリマー/強誘電体複合材料

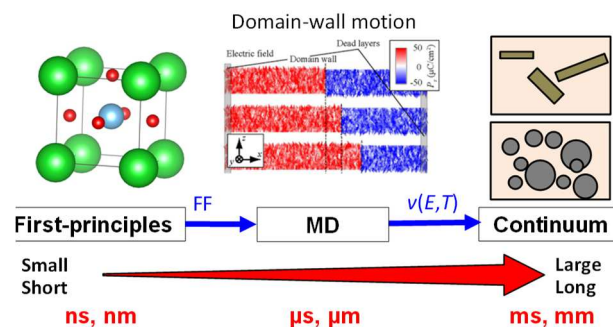


図 1. ポリマー/強誘電フィラーコンポジットの誘電特性を計算するための第一原理的多階層計算モデル

の場合、弱い電界下 (E_c 以下) でも、分極のヒステリシス挙動が依然として存在する[3]。このような状況では、ドメインウォール (分極方向が異なる2つのドメインの界面にある遷移層) の運動を介して分極の切り替えが起こると予測できる。

本研究ではこれらを踏まえて、図1のようなマルチスケールモデリング方法を開発した。図1の通り提案した計算方法では第一原理計算による原子間の変位と力の関係の取得、有効ハミルトニアン法のパラメータを決定し、MD計算を行い、ドメイン壁挙動をシミュレートした結果を連続体モデルに入れ込むことで従来シミュレーションよりも何桁も長い時間スケールでのシミュレーションを可能とした。(これまでのシミュレーションの典型的な時間スケールは、他の場所で報告されているデータから推測すると、単一ドメインのスイッチング (E_c 以上の電界下) のシミュレーションでは10 ns、ドメインウォール運動のシミュレーションでせいぜいは1 μ s程度であるが、本研究は1e0 sec以上のシミュレーションも可能である。)最後に本研究で開発したシミュレーション方法の妥当性をポリマーコンポジットを用いた実験によって検証した。

(2) AIを用いたポリマーコンポジット材料の物性予測

AIを用いたポリマーコンポジットの物性予測はまだあまり行われていない。本研究ではポリマーコンポジットに関して

様々な物性量を対象とした予測を行った。その結果、図2のようにポリマーやフィラーの情報に加え、ポリマーコンポジットを作成する条件あるいは測定条件を適切に扱うことで物性予測精度が上げられることが確認できた。また、熱物性や一部機械物性は比較的精度良く予測することができたが、予測していたとおり電気物性(特に絶縁ポリマーコンポジットの電荷移動に関する物性量)の予測精度は熱・機械物性と比べて低くなることが示された。

本研究では(1), (2)によって、多階層計算とAIを組み合わせた物性推定モデルがマテリアルズインフォマティクス(MI)において強力な手法であることを実証することができた。今回行った誘電特性の計算を例とすると具体的には以下ようになる。まず多階層計算を行うことで、ポリマー/強誘電フィラーコンポジットの物性発現メカニズムが明らかになる。これによって例えば、フィラー側に関しては、分子原子レベルのパラメータとして原子の変位があったときに原子間に働く力が重要であること、さらにそれを物理的な知見をもとに少数の重要なパラメータに落とし込めることがわかり、少数のデータのみを用いた高精度な物性予測が可能になる。

- [1] V. Boddu, F. Endres, and P. Steinmann, "Molecular dynamics study of ferroelectric domain nucleation and domain switching dynamics," *Sci. Rep.*, vol. 7, 806, 2017.
- [2] T. Nishimatsu, U. V. Waghmare, Y. Kawazoe, and D. Vanderbilt, "Fast molecular-dynamics simulation for ferroelectric thin-film capacitors using a first-principles effective Hamiltonian," *Phys. Rev. B*, vol. 78, 104104, 2008.
- [3] N. Wang, I. Cotton, J. Robertson, S. Follmann, K. Evans, and D. Newcombe, "Partial Discharge Control in a Power Electronic Module Using High Permittivity Non-linear Dielectrics," *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.*, vol. 17, No. 4, pp. 797-807, 2010.

3. 将来展望

本研究では、ポリマーコンポジット材料の多階層計算法を開発し、その電気物性(誘電率)を予測することに成功した。また、多階層計算法による知見を活かしたスマートなAIモデルが構築できることを示した。ポリマーコンポジットの物性を予測するAIモデルを開発した。ポリマーコンポジットの物性予想に関して、電気物性の推定精度、特に絶縁ポリマーコンポジットの電荷移動に関する物性量の予測精度は改善の余地が大きいことがわかった。現在はこの検討を行っており、ポリマーコンポジット

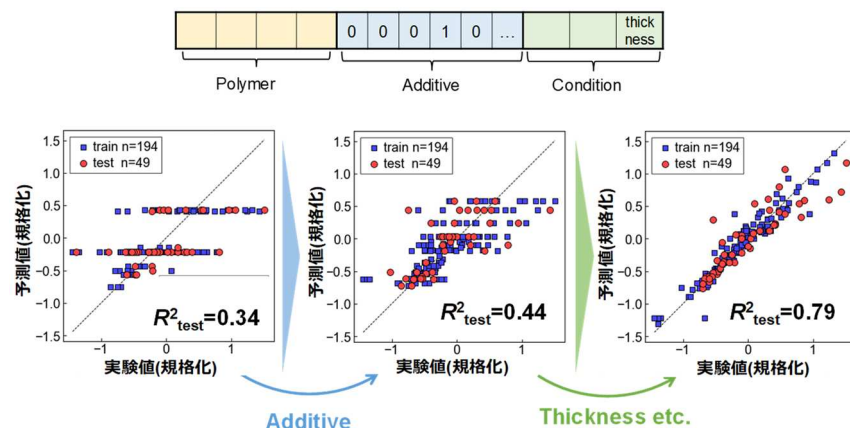


図1. ポリマー/無機フィラーコンポジット材料の物性予測を行うためのAIモデル。(熱物性の一つを予測している。)

トのプロセス情報などを取り入れたAIモデルによって推定精度が向上できることがわかってきた。これによってポリマーコンポジットの多様な熱・機械・電気特性が予測できるようになれば、計算機上での実用的なポリマー設計が、高精度に行えるようになると思う。

4. 研究発表

学術論文誌

- [R1] M. Sato, A. Kumada, K. Hidaka, T. Yasuoka, Y. Hoshina and M. Shiiki, “Multi-scale Modeling of Dielectric Polarization in Polymer/Ferroelectric Composites,” IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul., Vol. 30, Issue 2, pp.674-680, 2023.