

## 誘電体上への水吸着量の分子軌道法による解析と沿面放電現象への応用 Application for Analysis of Discharge Phenomenon on Dielectrics Considering Water

### Adsorption by Molecular Orbital Analysis

日立製作所 日立研究所 °大嶽敦, 小林金也

Hitachi Ltd., Hitachi Research Lab., °Atsushi Ohtake and Kinya Kobayashi

E-mail: atsushi.otake.bg@hitachi.com

#### 緒言

誘電体表面など空気中から物質表面に吸着した水分は、空気中の水蒸気と吸着平衡状態にある。したがって、相対湿度が増大するに従い、誘電体上の水分吸着量は増大していく。通常は多層吸着であり、実験結果を BET(Brunauer, Emmett and Teller)式などによって表すことができる。水分の吸着量については、相対湿度のみならず誘電体の表面分子構造に依存する面が大きく、特に有機物では表面が疎水性か親水性か、すなわちどのような基が表面に露出しているかによりその吸着量は大きく変化する。有機物表面での放電においては、その表面に存在する基がどのような基であるかにより、吸着水量が変化することになる。誘電体表面で発生する放電現象においては、このような湿度の影響を顕著に受けることが知られているが、両者を結びつけた物理的原理に基づいた解析については研究が進んでいるとは言えない。

#### 解析手法

本研究では密度汎関数法に基づく分子軌道解析(LDA(Local Density Approximation)法およびGGA(Generalized Gradient Approximation)法、スレーター型原子価二重+分極基底を使用)によって、表面に吸着した水の電子構造を解析するとともに電子状態を実験と比較することで、表面導電率を導きだした。更に、表面導電率を取り込んだ移流拡散方程式によって誘電体表面に沿った電荷の流れを解析することで、表面での放電特性を再現することを試みた。本手法の特徴は、表面の導電率を誘電体バルク内部、および気相中とは別々に規定可能であり、3次元解析に対応していることである。

#### 結果

解析対象として、誘電体および空気からなる体系を用い、誘電体は絶縁体として工業的に多用される酸無水物硬化エポキシ樹脂(ビスフェノールA型)とした。この体系において以下の結果を得た。

- (1) 水は、硬化樹脂に残存するカルボキシル基に連鎖的に水素結合する。この時の発熱量は水分子1個あたり約20-30kJ/molである。
- (2) 表面の電子状態に影響を与える形態で吸着する水は三層である。
- (3) 移流拡散方程式により、高電界中で発生した正負荷電粒子の流れを解析し、水吸着表面でストリーマ進展が乾燥表面より速くなることを確認した。