エネルギーハーベスティングデバイスに用いるカリウムイオンエレクト レットにおける電荷蓄積機構の理論的研究 Charge Storage Mechanism of the Potassium Ion Electret Used for Energy Harvesting Devices

名大院工¹, 名大未来研² ^o宮島 岳史¹, 洗平 昌晃^{2,1}, 白石 賢二^{2,1}

Graduate School of Engineering, Nagoya Univ.¹, IMaSS, Nagoya Univ.², [°]Takeshi Miyajima¹, Masaaki Araidai^{2,1}, Kenji Shiraishi^{2,1} E-mail: miyajima@fluid.cse.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

IoT(Internet of Things)の普及に伴い小型化され た様々なデバイスが身の回りに膨大に溢れる社 会が訪れる。しかし、現在これらの膨大なデバイ ス個々への電力供給は大きな課題であり、電池不 要でメンテナンスフリーなデバイス作成に自立 電源が注目されている。近年、自立電源のために 環境発電デバイス[1]である MEMS(Micro Electro Mechanical Systems)技術を利用した振動発電デバ イスが研究されており、そこにカリウムイオンエ レクトレットが使われている[2]。エレクトレッ トとは電荷を半永久的に蓄積する物質であり、イ オンエレクトレットではSiO₂中に電荷を蓄える。 しかし、その電荷蓄積の機構は未だ分かってない。 そこで本研究では、密度汎関数理論に基づく第

一原理計算を用いて、カリウム(K)原子の混入と 除去によるSiO₂の構造変化と荷電状態を解析し、 イオンエレクトレットの原理を明らかにする。

2. モデル及び計算手法

モデル作成に際して、計算での系の全エネルギ ーや電子状態は、密度汎関数法に基づく第一原理 計算コードである Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)[3]を用いた。カリウムイオンエレ クトレット作成の実験では SiO,への K 原子混入 と除去により、SiO2が負電荷を蓄積すると報告さ れている[2]。そこで計算では K 原子混入による 影響と、その後の K 原子除去による影響を調べ るために以下の手順を経てエレクトレットのモ デルを作成した。①.まず分子動力学(MD)計算に より1個の K 原子を含んだ 145 原子からなるア モルファス SiO2のモデルを作り、荷電状態: q=0, ±1 で構造最適化した。②.次に①のモデルより K 原子除去、水素原子挿入を行い、荷電状態: q=0, ±1 で MD 計算し、K 除去後の SiO₂のモデルを 得た。

3. 計算結果と考察

計算手順①の K 原子を挿入した結果、荷電状 態:q=0,±1 いずれの場合もアモルファス SiO₂中 に3 配位 Si 原子と5 配位 Si 原子が現れ、K 原子 は1 価の陽イオンとなった。q=-1 では余分な電 子が3 配位 Si 原子のダングリングボンドを終端 しており、q=+1 では5 配位 Si 原子周辺の酸素原 子が少し正に帯電していることで余分な正孔を 蓄えることがわかった。次に計算手順②の K 原 子除去と水素原子挿入による結果を示す。まず、 q=0,+1ではSiO₂の構造の変化は見られなかった。 一方 q=-1ではSi-Si結合が見られた(Fig.1)。これ は3配位Si原子周辺のSi-O結合が水素原子によ り切断されることで新たに3配位Si原子が形成 され、それにより2つの3配位SiがSi-Si結合を 形成されたと考えられる。これらの構造について、 電荷中性状態を基準とし $q=\pm 1$ へ変化する際の 形成エネルギーを用いて安定な荷電状態の見積 もりを行った。その結果をFig.2に示す。系の Fermi EnergyがSiO₂の価電子帯上端から4.5eVま では正の荷電状態が安定、4.5eV以上では負の荷 電状態が安定であり、電荷を有する方が安定化す ることがわかった。

先行研究の実験では電圧印可した際、K 含有 SiO₂のK原子が移動し、それにより発生するSiO₂ のカリウム低密度領域は負に帯電していると報 告されている[2]。電圧印可により系のフェルミ エネルギーは高くなるので、q=-1 での計算で得 られた構造がエレクトレットの電荷蓄積の要因 であると考えられる。

Reference

- [1] Y. Suzuki, JSAEM 22.3, 339 (2014).
- [2] G. Hashiguchi, et al., AIP advances 6, 035004 (2016).
- [3] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558 (1993).



Fig.1: SiO_2 models at q=-1 after the potassium removal and a hydrogen insertion. The left figure is An Si-Si bond and the right figure is five-fold coordinated Si atom.



Fig.2: The formation energy of SiO_2 models after the potassium removal and a hydrogen insertion in each charged state. It shows charged state is more stable.