

K イオンエレクトレットの負電荷蓄積機構及び作製指針の理論的検討

Theoretical Study on The Negative Charge Storing Mechanism of K Ion Electret and its Fabrication Guidelines

名大院工¹, 名大未来研², 東大生産研³, 静大電子研⁴ ○中西 徹^{1,*}, 長川 健太², 洗平 昌晃², 年吉 洋³, 杉山 達彦⁴, 橋口 原⁴, 白石 賢二²

Nagoya Univ.¹, IMASS, Nagoya Univ.², The Univ. of Tokyo³, Shizuoka Univ.⁴

○Toru Nakanishi^{1,*}, Kenta Chokawa², Masaaki Araidai², Hiroshi Toshiyoshi³, Tatsuhiko Sugiyama⁴,

Gen Hashiguchi⁴, Kenji Shiraishi²

E-mail: nakanishitoru582@gmail.com

1. 研究背景

熱や振動など、自然環境に存在するエネルギーを電力へ変換するエネルギーハーベスティング技術の1つとして、K イオンエレクトレットを組み込んだ振動型 MEMS 発電デバイス^[1]が注目を集めている。K イオンエレクトレットはアモルファス SiO₂(a-SiO₂)中にカリウム原子を添加することで作製される材料であり、半永久的に負電荷を保持することができる。そのため、これを応用することでメンテナンスフリーな自立電源が実現可能となる。K イオンエレクトレットの負電荷蓄積の起源は不明瞭であったが、最近の我々の研究によりその物理的起源が明らかになりつつある。

本稿では最近我々が報告したK イオンエレクトレットの負電荷蓄積の起源^[2]について議論する。更に、その結果からより高性能なK イオンエレクトレット作製指針を示す。

2. 結果

実験を模擬した第一原理分子動力学計算によりK イオンエレクトレットモデルを作成した。得られた構造を解析したところ、5 配位 Si 構造や Si-Si 結合など、特徴的な局所構造が見られた。通常、a-SiO₂ 中の Si 原子は全て 4 配位構造を取るため、これらの局所構造は極めて特徴的である。Fig. 1 には各原子のイオン価数も併せて表記している。この結果より、5 配位 Si 構造は負に帯電し、Si-Si 結合は電氣的に中性であることが分かった。このことから、K イオンエレクトレットの負電荷蓄積の起源は 5 配位 Si 構造であると考えられる。

続いて、高い信頼性を有する K イオンエレクトレット作製指針を提案する。K イオンエレクトレット構造内の局所構造として Si-Si 結合が発見されたが、この結合は切れやすく、正に帯電した 3 配位 Si 構造が形成されやすいことが計算の結果明らかとなった。そのため、Si-Si 結合は K イオンエレクトレットの電荷保持性能の劣化を引き起こし、信頼性の低下に繋がる。よって、Si-Si 結合を無くすことが高信頼性 K イオンエレクトレットの作製には重要である。材料中の Si-Si 結合を無くす方法として、追酸化が有効である。実際に追酸化を再現した MD 計算を行ったところ、K イオンエレクトレット構造内に Si-Si 結合は存在せず、特徴的な局所構造は 5 配位 Si 構造のみであった。この結果

より、追酸化により K イオンエレクトレットの負電荷保持性能の信頼性が向上すると考えられる。

3. 結論

本研究では、第一原理計算に基づき K イオンエレクトレットの負電荷蓄積のメカニズム及び作製指針の考察を行った。作成した K イオンエレクトレット構造を解析したところ、負に帯電した 5 配位 Si 構造が確認され、この構造が負電荷蓄積の起源であることが分かった。また、K イオンエレクトレット作製後に追酸化することで負電荷保持性能の信頼性が向上するという作製指針を提案した。

References

- [1] G. Hashiguchi et al., AIP Advances 6, 035004 (2016).
- [2] T. Nakanishi et al., Appl. Phys. Lett. 117, 193902 (2020).

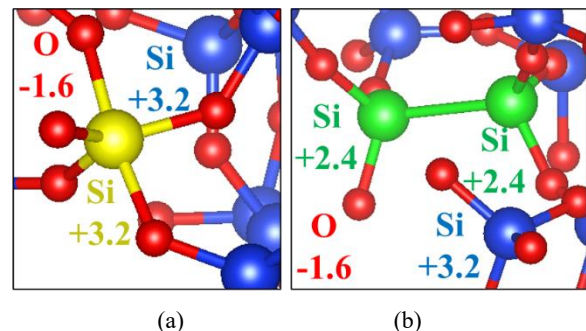


Fig. 1 (a) The fivefold-coordinated Si structure which is negatively charged. (b) The Si-Si bond which is electrically neutral.

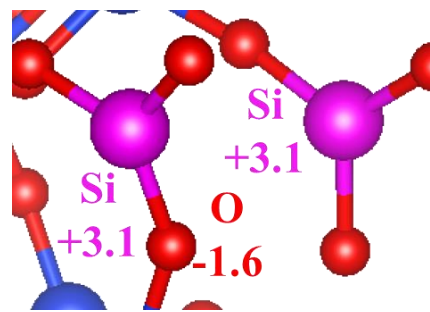


Fig. 2 The threefold-coordinated Si structure which is positively charged.

*現キオクシア株式会社