

ポリマー絶縁体における電子トラップ

ロンドン・インペリアルカレッジおよびフランス電力庁において、分子動力学法および非局所(non-local)密度汎関数理論を併用して高圧電線用絶縁材料の絶縁破壊を解明しました。これは、分子の特性、空間電荷および絶縁破壊の間の相互関係に関する初めての直接的な研究です。

高圧電線のポリマー絶縁体における空間電荷の存在は、絶縁破壊と関係しています。トラップ内の電子の存在はポリマーの老化につながります。空間電荷の蓄積機構を理解することは、長期耐用年数を持った高圧電線用絶縁体の最適な材料を製造する場合において極めて重要です。

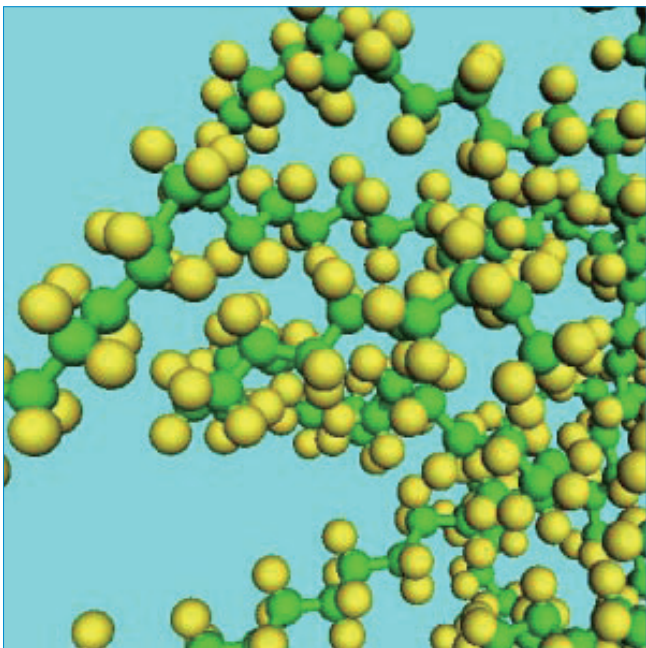


図1: ポリエチレンの非晶質構造のスナップショット

この研究は、非晶質高分子構造（図1）における物理欠陥（トポロジカルな乱れ）にその原因があるとされている浅いトラップに着目することから始まりました。乱れのあるポリマー分子は詳細な量子力学的計算には適しません。そのため、ポリマーの重要な鎖状配座特性を保持できる長さで、かつポリエチレンに類似した電子バンド構造を有するより短いオリゴマーがシミュレーションに用いられます。こうした研究における関連するモデル分子の使用には、長く輝かしい歴史があります。初期構造はCerius2 Amorphous Builderを用いて作成します。続いて、長時間の分子動力学計算により力場に基づいた最適化を実行し典型的な稠密非晶質構造を生成します。得られた構造に基づいて欠陥を解析し、これらの周辺領域を孤立させた後、DMol³パッケージを用いてトラッピングエネルギーを決定します。この手順を用いて、重要な鎖状配座特性および電子的特性を解析するのに適切な領域を分離した後、強力な量子力学計算を行うことができます。これらの欠陥の典型的なエネルギーは、0.2eV程度の範囲にあることが認められ、これは物理的トラップについての予想と一致します。一部の化学的トラップ（化学的不純物から生じると考えられる）は、より深く（数eV以下）にあることが予想されます。

化学的欠陥またはドーパント（図2）が空間電荷の蓄積に影響を及ぼす化学的トラップに関してさらに研究されます。こうしたトラップはバンドギャップを有意に狭めるのでより有害である可能性があります。けれども、物理的なトラップが

Products

BIOVIA Materials Studio DMol³

BIOVIA Materials Studio Amorphous Cell

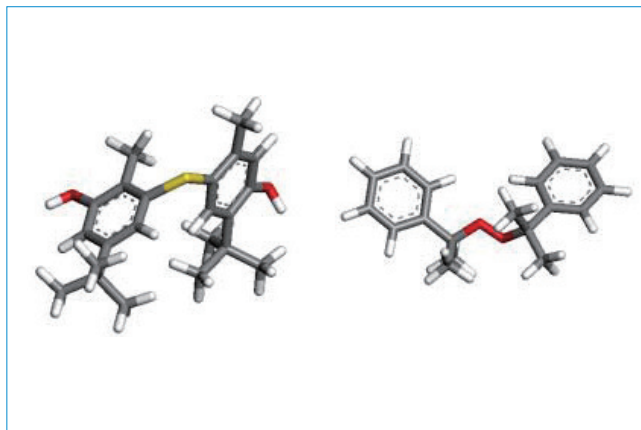


図2: 化学添加剤 (SantonoxおよびPeroxide Dicumyl)

非常に支配的であることが予想されるので、両方のタイプのトラップは等しく重要です。

得られた電子トラップのエネルギー分布は、インペリアルカレッジ（英国）において、新規モンテカルロ法を用いて移動度を計算するために利用されました。その後、フランス電力庁において、ポリエチレンにおける過剰電子の輸送特性のマクロ・シミュレーションに用いられました。マクロ・シミュレーションの目的は、(i) 高い電場の存在下での誘電材料の寿命の概算、および(ii) より良好な電線の設計です。

参考文献

1. M. Meunier, N. Quirke, and D. Binesti. *Molecular Simulation*, 23, 109 (1999)
2. M. Meunier, and N. Quirke. *Molecular modeling of electron trapping in polymer insulators*. *Journal of Chemical Physics*, 113, 369 (2000).
3. M. Meunier, N. Quirke, and A. Aslanides. *Characterisation of charge carrier traps in polymeric insulators*. 2000 IEEE CONFERENCE ON ELECTRICAL INSULATION AND DIELECTRIC PHENOMENA, Vancouver Oct. 2000.