

「電気電子・絶縁材料分野における量子化学計算の適用」調査専門委員会設置趣意書(案)

誘電・絶縁材料技術委員会

### 1. 目的

金属や半導体材料は、結晶構造中に原子の周期的な繰り返し配列を持ち、バンド理論によりその電子構造の理論的な解析が行われ、物性と電子構造との間をつなぐ理論体系が確立されている。一方、定型構造を持たない気体や液体などの低分子材料、あるいは非晶構造や化学的欠陥の存在により複雑な結晶構造を持つ高分子材料にはバンド理論が適用されず、これらの誘電・絶縁特性の電子構造の理論的な理解の妨げとなっている。近年、これらの材料の特異性を加味し、量子化学計算の手法を用いて分子レベルで誘電・絶縁材料の電子構造の解析・理解を行う研究が始まっており、我が国からも相当数の研究成果報告が行われ、一定の成果を上げつつある。そこで、量子化学計算の観点から誘電・絶縁材料に関する国内外の研究動向の調査及び最新の研究成果について調査・討論を行って量子化学計算の有用性を確認し、世界に対して当該領域の日本の研究プレゼンスの確保を図るとともに、我が国の誘電・絶縁材料分野における量子化学計算の利用を促進することを目的として、本委員会を立ち上げる。

### 2. 背景および内外機関における調査活動

誘電・絶縁材料は、インフラとしての電気エネルギーの流通や、種々の電力機器、家電機器における電気絶縁確保のため、幅広い分野で利用される材料群である。その用途によって、気体・液体・固体という物質の三態が使い分けられ、種々の創意工夫が加えられて電気エネルギーの普及に貢献している。

近年、環境負荷低減の要請に伴う、環境負荷の低い材料への転換、電気機器における使用効率や使用電界の向上、再生可能エネルギーの積極的導入への対応の他、宇宙環境や極低温環境のような極限状態への対応など、誘電・絶縁材料に求められる機能・性能の拡大・向上が不可欠となっている。これらの材料開発は、実験データによる性能検証を基本としているが、より本質的な理解が必要であると考えられる。

このような誘電・絶縁材料の置かれた状況をブレイクスルーする取り組みとして、量子化学計算の手法を用いて誘電・絶縁材料の電子構造を解析し、物性との関係を考察する研究が行われており、我が国の研究者からも多くの成果報告がなされている。

例えば、国内では、東大、東京都市大、九州工大、芝浦工大などから、気体・液体・固体の物性値の導出やマクロな電気物性値の推定を、量子化学計算を用いて実施し、実験的な測定値との比較を行った例が報告されている。また、関東学院大のグループが電気トリーの発生・進展機構の解析に挑戦している。

海外では ABB 等が高分子材料の結晶、非晶を含む三次元構造を模擬した大規模モデルを構築し、量子化学計算による添加剤や化学的欠陥の影響について評価を行っている。さらに、海外のある機関では量子化学計算による材料開発を **Horizon2020** と称するプロジェクトで進めようと活動しており、量子化学計算技術の利用は地域的・国家的な研究テーマの新しい潮流になりつつあることが窺える。

### 3. 調査検討事項

量子化学計算をベースに以下の項目を調査検討課題として挙げる。

- 量子化学計算の現状に関する調査
- 量子化学計算の誘電・絶縁材料への適用例の調査
- 世界的（地域的、国家的）に見た研究動向の調査
- 量子化学計算の今後の可能性について

## 4. 予想される効果

誘電・絶縁材料分野における量子化学計算は、検討開始からまだ日が浅く、まずは量子化学計算自体の確実な理解が必要である。その上で、最新研究について調査を行い、研究の狙いや検討内容を把握することにより、誘電・絶縁材料技術分野における量子化学計算の果たし得る役割を整理し、研究者・技術者に広く情報を提供する。これにより、分子レベルから現象を考える研究者・技術者が増え、誘電・絶縁材料技術の新しい分野が開かれるとともに、その本質的な理解へのアプローチが進展することが期待される。

## 5. 調査期間

平成30年(2018)12月～平成33年(2021)11月

## 6. 委員会の構成(職名別の五十音順に配列)

職名	氏名	(所属)	会員・非会員区分
委員長	松本 聡	(芝浦工業大学)	会員
委員	浅井 洋光	(株式会社デンソー)	会員
同	新井 大輔	(新電元工業株式会社)	会員
同	今井 隆浩	(東芝エネルギーシステムズ)	会員
同	岩田 晋弥	(大阪産業技術研究所)	会員
同	植原 弘明	(関東学院大学)	会員
同	梅本 貴弘	(三菱電機)	会員
同	岸 直哉	(日本 ZEON)	会員
同	熊田 亜紀子	(東京大学 大学院電気工学専攻)	会員
同	小迫 雅裕	(九州工業大学)	会員
同	佐藤 正寛	(東京大学 先端科学技術研究センター)	会員
同	鈴木 雄二	(東京大学 大学院機械工学専攻)	会員
同	高田 達雄	(東京都市大学 名誉教授)	会員
同	田中 康寛	(東京都市大学)	会員
同	平野 敏行	(東京大学 生産技術研究所)	非会員
同	布施 則一	(電力中央研究所)	会員
同	八木 正史	(古河電気工業)	会員
幹事	関口 洋逸	(住友電気工業)	会員
同	三宅 弘晃	(東京都市大学)	会員
幹事補佐	加藤 雅道	(ユカインダストリーズ)	会員

## 7. 活動予定

委員会 2回/年 小委員会 2回/年

幹事会 2回/年

\* 小委員会は、それぞれの分野を担当し、国内外の研究動向を調査し本委員会に報告することを目的として設置する。

## 8. 報告形態(調査専門委員会は必須)

技術報告書の作成をもって成果報告とする。