

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 5 月 26 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560085

研究課題名(和文) 2次電池を有するチタバリ系電子複合材料の性能評価とワイドバンドギャップ化

研究課題名(英文) Performance evaluation and band gap improvement of barium titanate electronic composites with secondary batteries

研究代表者

成田 史生 (Narita, Fumio)

東北大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：10312604

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,200,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、次世代環境配慮型スマート電子複合材料のメゾ力学設計指針を提供することを目的に、チタバリ系電子複合材料の検知・応答機能及び発電特性をマルチフィジックス数値シミュレーション(電場・力学場相互干渉、マイクロ・ナノ構造、化学組成・添加元素、焼成・蒸着の時間・温度等を考慮)・実験両面から解明したものである。また、得られた電子複合材料の検知・応答機能及び発電特性を総合的に検討し、性能を解明・制御して、最適な材料・構造を見出している。

研究成果の概要(英文)：In order to provide meso-mechanical design criteria of novel eco-friendly smart electronic composite materials, we investigated the detection/response characteristics and power generation properties of barium titanate electronic composites from both a theoretical and experimental point of view using multi-physics approach. Electromechanical interactions, micro- and nano-structures, chemical composition, additive element, and fabrication time/temperature were considered. Based on the study on the detection/response characteristics and power generation properties of the electronic composites, optimal materials and structures were selected.

研究分野：材料システム設計学

キーワード：圧電強度・機能学 数値シミュレーション 材料試験 電子複合材料 2次電池 電場・力学場相互干渉
スマート材料システム マイクロ・ナノデバイス

1. 研究開始当初の背景

近年、マクロファイバコンポジット(ピエゾファイバとポリマーから構成)が開発され、軽量で柔軟なセンサ・アクチュエータとして注目を集めている。また、電子複合材料は、誘起電圧・分極変化のリアルタイム計測により内部損傷状態を自己検知・記憶するデバイスとしての応用も期待されている。さらに、無線送電で駆動可能な電子複合材料の実現可能性が調査・報告され、配線(自動車 3km, 旅客機 100km) 不要によるシステムの重量軽減・コスト低減・設計自由度増大等様々な利点が挙げられており、配線が難しい(1) 航空・宇宙デバイス等の機体内部搭載用検知・記憶システム、(2) 体内埋込・医療デバイス(血液採取・薬剤注入用マイクロポンプ, レーザー治療用マイクロスキャナー), (3) 一般家庭・病院内における生理情報(心拍・呼吸) 検知・記憶システムとしての利用が検討されている。

最近、検知・記憶機能を有するチタバリ(BaTiO₃)系電子複合材料が注目され、破壊の予兆を検知・記憶し、交換時期が予測(分極の変化を利用)できるメンテナンス容易なデバイスとして期待されている。また、許容範囲を超えた振動を検知・記憶し、診断・抑制して破壊を自ら防ぐ航空・宇宙・電気・情報通信デバイスや病気・感染症を早期に検知(共振周波数の変化を利用)し、治療(例えばカプセル内の薬剤を自動的に投与)を行なうバイオメディカルデバイス等の実現可能性も示唆されている。さらに、省エネ電子デバイスに関連して、チタバリ系半導体複合材料の開発も進められ、次世代の太陽光発電素子として注目を集めている。

上記チタバリ系電子複合材料は、電子ドープ(n型)挙動を容易に示すが、正孔ドープ(p型)化は困難で、エネルギーバンドギャップも低いのが現状である。また、作製時の分極処理や使用中に内在する欠陥・電極端か

らのき裂が緩やかに成長し、その後瞬時破壊に至ることも多く、負荷・入力パワーが時間的に変動する場合には、疲労破壊が問題となる。さらに、チタバリ系電子複合材料のマクロ性能は、マイクロ・ナノ構造(分域・分極、結晶構造、微視欠陥)に依存するため、スケール間の相互干渉を考慮して性能を解明する必要がある。マクロ構造の性能を評価するため、マイクロ・ナノ構造からボトムアップ的に解析する場合、膨大な計算量になることが予測される。また、マクロ構造に注目し、連続体力学に基づき解析する場合には、平均の結果しか得られず、実際の性能を説明できない場合も多い。

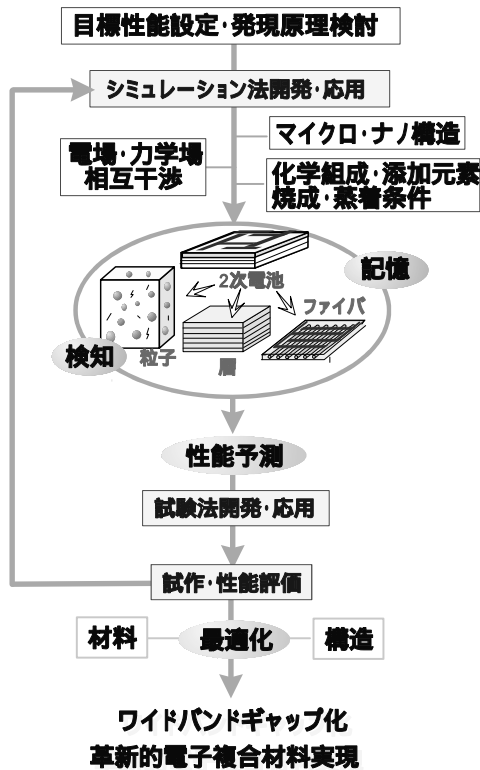
2. 研究の目的

本研究は、2次電池を有するチタバリ系電子複合材料を取り上げ、微視(マイクロ・ナノ)構造、化学組成・添加元素、焼成・蒸着の時間・温度等の影響を考慮して、電子複合材料設計のための数値シミュレーション・試験法を開発・応用するものである。また、自己・周囲における情報・環境の検知・記憶機能等を明らかにし、性能に及ぼす材料・構造の影響を解明・制御する。さらに、高効率・非電力化に関する検討を加え、ワイドバンドギャップ化を図ることを目的としている。

3. 研究の方法

本研究は、チタバリ系電子複合材料の性能を解明し、エネルギーバンドギャップのワイド化を行うものである。具体的には、チタバリ積層材料やチタバリ系ファイバ・粒子コンポジットを取り上げ、数値シミュレーション(電場・力学場相互干渉、マイクロ・ナノ構造、化学組成・添加元素、焼成・蒸着の時間・温度等を考慮)・実験を実施する。また、電位・電力及び分極・電池容量等を解明し、自己・周囲における情報・環境の検知・記憶機能等に関する検討を加えて、性能に及ぼす材料・構造の影響を解明・制御す

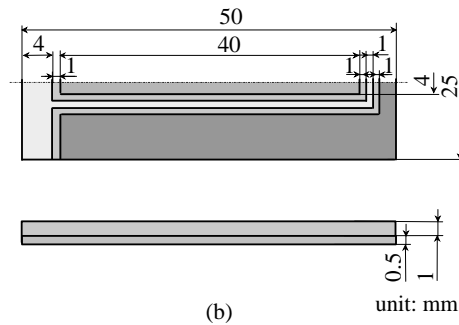
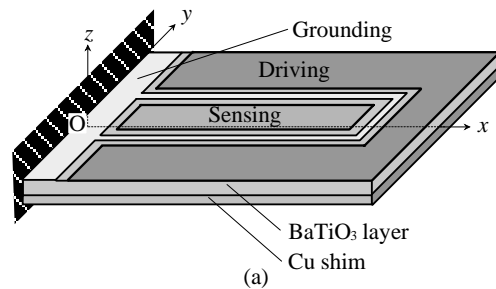
る．さらに，高効率・非電力化に関する検討を加え，チタバリ系電子複合材料のワイドバンドギャップ化を図って，革新的電子複合材料の実現を目指す（下図）．



4. 研究成果

本研究は，電子複合材料のワイドバンドギャップ化（高効率・非電力化）を目指し，チタバリ系電子複合材料の性能に及ぼす材料・構造の影響を数値シミュレーション・実験両面から解明したものである．得られた成果を要約すると以下の通りである．

(1) 検知・駆動用電極を有するチタン酸バリウム（ BaTiO_3 ）層と銅（Cu）板からなる BaTiO_3/Cu 積層カンチレバー（右上図）を作製し，交流電場を負荷して，先端たわみおよび出力電圧を計測した．また，有限要素解析を行い，先端たわみおよび出力電圧を求めて，実験結果に理論的検討を加えた．さらに， BaTiO_3/Cu 積層カンチレバーのたわみ・応力及び出力電圧・電力の交流電場・負荷抵抗依存性について検討した．



検知・駆動用電極を有するチタン酸バリウム層と銅板からなるチタン酸バリウム積層カンチレバーを作製し，曲げ振動による出力電圧を計測した．また，有限要素解析を行い，出力電圧・応力を求めて実験結果に理論的検討を加えて，検知電極形状・配置依存性についても考察した．

検知・駆動用電極を有するチタン酸バリウム積層カンチレバーの繰返し集中荷重による出力電圧・電力を解明・考察した．

- (2) チタン酸バリウムを取り上げ，微視構造の適切なモデル化を行い，Ginzburg-Landau 理論および酸素拡散に基づく結晶粒成長フェーズフィールド解析プログラムを開発・応用して，結晶粒微細化及び酸素欠陥導入による高効率・非電力化について解明・考察した．
- (3) 検知・駆動用電極を有するチタン酸バリウム層と 2 次電池薄膜からなるチタン酸バリウム積層カンチレバーの圧電検知・応答及び発電・蓄電挙動解明を目指し，基礎的研究を進めた．

5. 主な発表論文等
(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計1件)

E. Narita and Y. Shindo, Piezoelectric Detection and Response Characteristics of Barium Titanate Unimorph Cantilevers under AC Electric Fields, International Journal of Metallurgical & Materials Engineering, 査読有, in press.

〔学会発表〕(計5件)

成田史生, 進藤裕英, フェーズフィールド法によるチタン酸バリウム多結晶の圧電力学特性評価, 日本金属学会 2015 年春期大会(第156回), 2015年3月18日-20日, 東京大学駒場1地区キャンパス(東京都・目黒区)

成田史生, 進藤裕英, 交流電場下におけるチタン酸バリウムカンチレバーの動的電気力学挙動, 第63回理論応用力学講演会, 2014年9月26日-28日, 東京工業大学大岡山キャンパス(東京都・目黒区)

成田史生, 進藤裕英, 交流電場下におけるチタン酸バリウム積層材料の圧電検知・応答特性, 日本金属学会 2014 年春期大会(第154回), 2014年3月21日-23日, 東京工業大学大岡山キャンパス(東京都・目黒区)

成田史生, 電子複合材料システムの圧電力学特性に関する研究, 日本金属学会 2014 年春期大会(第154回), 2014年3月21日-23日, 東京工業大学大岡山キャンパス(東京都・目黒区)

E. Narita and Y. Shindo, Dynamic Electromechanical Behavior of Barium Titanate Cantilevers under AC Electric Fields, SPIE 21st Annual International Symposium on Smart Structures/NDE,

March 9-13, 2014 (San Diego・U.S.A.)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

取得状況(計0件)

〔その他〕

ホームページ等

6. 研究組織

(1)研究代表者

成田 史生 (NARITA, Fumio)

東北大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 10312604