

令和元年6月25日現在

機関番号：53801

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K05007

研究課題名(和文) クラスタ計算によるガスセンサおよび湿度センサのセンサ表面での反応解析

研究課題名(英文) Analysis of Reactions at Surface of Gas and Humidity Sensors by Cluster Calculations

研究代表者

藤本 晶 (Fujimoto, Akira)

沼津工業高等専門学校・その他部局等・校長

研究者番号：10238610

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：Sr-Ca-Cu-O系超伝導材料の湿度センサへの応用可能性を、Sr-Ca-Cu-Oクラスタの(100)および(110)面にH₂O分子やH⁺、OH⁻を接近させた際の様子を、分子軌道計算で調べた。

計算から、H₂O分子およびH⁺を(110)面に垂直な方向から接近させた際には、吸着やインターカーレーションが生じること、また(100)面に垂直な方向から接近させた場合にはインターカーレーションが起きないことがわかった。

このことからSr-Ca-Cu-O系の(100)面は(110)面よりも活性度が低く、センサに应用する際は(110)面を外気に触れされる必要があることを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

Sr-Ca-Cu-O系超伝導材料のクラスタを計算機上に作成し、H₂O分子、H⁺、OH⁻との相互作用の様子の観測を、分子軌道計算によって可能にした。

この手法によってSr-Ca-Cu-O系超伝導材料とH₂O分子、H⁺およびOH⁻との相互作用を計算で予測可能とした。

計算結果から、Sr-Ca-Cu-O系超伝導材料を湿度センサや他のガスのセンサとしての可能性を見出し、超伝導体をそのまま湿度やガスなどの環境センサとしても利用できることを示せた。

研究成果の概要(英文)：Possibility of Sr-Ca-Cu-O superconducting system for humidity sensor materials was estimated by investigating adsorption behavior of H₂O molecular or H⁺ or OH⁻ species to Sr-Ca-Cu-O cluster with (100) or (110) plane by molecular orbital calculation. Calculating results shows that adsorption and intercalation occur in H₂O molecular and H⁺ specie to the cluster with direction of perpendicular to the (110) plane. No intercalation was observed in the case of the molecular or species closing to the cluster with direction of perpendicular to the (100) plane. It suggests that (100) plane has lower activity than (110) plane. The (110) plane of the Sr-Ca-Cu-O will have to arrange to expose an ambient for humidity sensor use.

研究分野：電子工学

キーワード：クラスタ計算 分子軌道法 ガスセンサ 湿度センサ

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

酸化第二錫で構成されたガスセンサは広く普及しているが、その表面での反応は解明されていないことも少なくなかった。本研究の代表者はこれまで分子軌道法を用いたシミュレーションを用いて、酸化第二錫で構成されたガスセンサと種々のアルコール等のガスが種々のガスとの相互作用を調べ、主にガスセンサのヒーター電流を変調した際のセンサの過渡応答を予測し、ガスの種類によるセンサの過渡応答の違いを調べてきた。

ガスセンサの過渡応答を調べる傍ら、水分が Sr-Ca-Cu-O 系超電導材料に与える影響を実験的に調べており、Sr-Ca-Cu-O 系超電導材料と H₂O 分子との相互作用のシミュレーションによる研究を始めようとしていた。

2. 研究の目的

これまでの酸化第二錫で用いてきたシミュレーションの手法を Sr-Ca-Cu-O 系超電導材料に応用し、H₂O や H₂O が分解して生成した H⁺ や OH⁻ と Sr-Ca-Cu-O 系超電導材料との相互作用を、分子軌道法を用いて調べ、Sr-Ca-Cu-O 系超電導材料の湿度やガスセンサへの応用を模索することを目的とした。

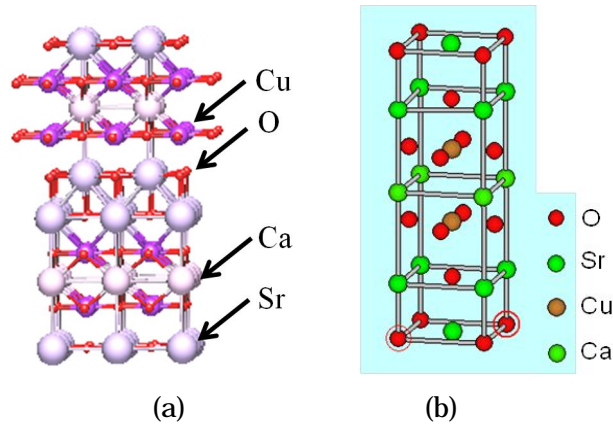


図1 Sr-Ca-Cu-O の構造 (a) と計算に用いた単純化したクラスター (b)。

3. 研究の方法

図 1 (a) に示すような Sr-Ca-Cu-O 系超電導材料の単位胞を、計算時間を考慮して図 1 (b) に示す単純化したクラスターを計算機上で作成し、このクラスターの (100) および (110) 面に垂直な方向から H₂O 分子やその分解物質である H⁺ や OH⁻ を接近させて、その際の系全体の生成熱の変化を分子軌道法によって算出し、クラスター表面での水分子等の吸着等の振る舞いを調べた。

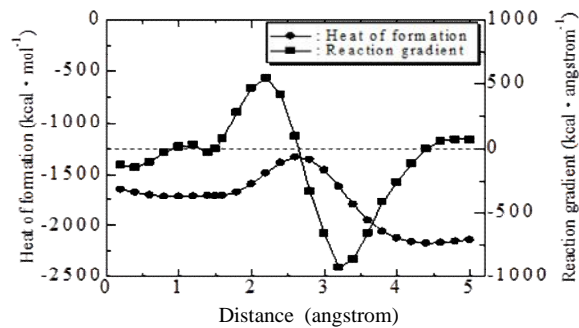


図2 OH-基を Sr-Ca-Cu-O クラスターの (110) 面に垂直な方向から接近させた際の全体の生成熱と反応傾斜の変化

4. 研究成果

Sr-Ca-Cu-O クラスターの (110) 面に垂直な方向から OH⁻ を接近させた場合の生成熱、反応傾斜の変化を図 2 に示す。

OH⁻ 基がクラスター表面から 2 付近に近づいた際に、生成熱の緩やかな窪みと反応傾斜の大きな変化が観測された。これらのことから OH⁻ 基は Sr-Ca-Cu-O クラスターの (110) 面から 2 付近で緩やかに吸着するものと考えられる。

これに対して図 3 に H₂O 分子を Sr-Ca-Cu-O クラスターの (100) 面に垂直な方向から接近させた際の系全体の生成熱と反応傾斜の変化を示す。

系全体の生成熱は H₂O 分子が Sr-Ca-Cu-O クラスターに接近するとに伴って単純に増加し、また反応傾斜の大きな変化も観測されなかった。このことから、H₂O 分子を Sr-Ca-Cu-O クラ

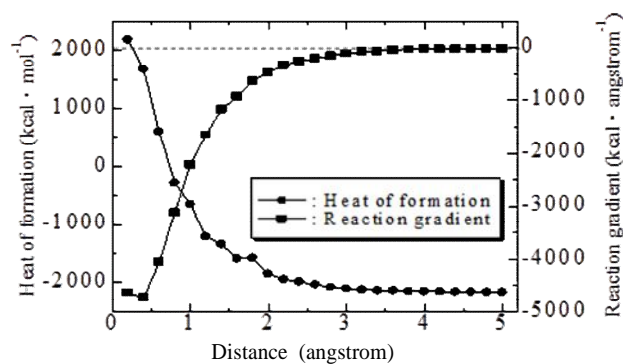


図3 OH-基を Sr-Ca-Cu-O クラスターの (110) 面に垂直な方向から接近させた際の全体の生成熱と反応傾斜の変化

スターの(100)面に垂直な方向から接近させた場合には、吸着等の反応をすることが無いと判断した。

表1にH₂O分子、およびOH⁻、H⁺基がSr-Ca-Cu-Oクラスタの(110)面および(100)面に接近した際の反応の有無を示す。この表からSr-Ca-Cu-Oクラスタの(100)面にはH₂O分子、およびOH⁻、H⁺基のいずれも反応しないこと、(110)面にはH₂O分子とOH⁻基が反応することが明らかとなった。

これらの結果、Sr-Ca-Cu-O超伝導材料はH₂O分子とその分解物質であるOH⁻基に対して相互作用をすることから、これらのセンサ材料としての可能性があること、また(110)面の活性度が(100)

面より大きいと考えられることから、センサ材料として用いる際には(110)面が雰囲気日晒されるように配向させる必要があること等が明らかとなった。

今後はより大きなサイズのクラスタを用いて、より正確なシミュレーションを試みるとともに、他の超伝導材料のクラスタ計算を手掛ける予定である。

表1 H₂O分子および、OH⁻、H⁺基をSr-Ca-Cu-Oクラスタの(100)面およびr(110)面に垂直な方向から接近させた際の吸着等のインターカレーションの有無

| Molecular Species | Plane | |
|-------------------|-------|-------|
| | (100) | (110) |
| H ₂ O | No | Yes |
| H ⁺ | No | No |
| OH ⁻ | No | Yes |

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計2件)

Akira Fujimoto, Tadachika Nakayama and Hisayuki Suematsu:” Possibility of Sr-Ca-Cu-O Superconducting System for Humidity Sensor Materials”, 2018 IEEE SENSORS Proceedings, pp. 889-891. (査読有)

Akira Fujimoto, Satoshi Shinoda, Tadachika Nakayama and Hisayuki Suematsu:” Adsorption Behavior of H₂O, OH and H to Sr-Ca-Cu-O Superconducting Materials”, Abstracts and Proceedings The 12th Asian Conference on Chemical Sensors ACCS 2017, pp. 263-266. (査読有)

〔学会発表〕(計5件)

河合健勝, 末松久幸, 藤本晶, 中山忠親, 新原浩一: “MOPACによるSr₂CaCu₂O_y派生相の水分子侵入シミュレーション”, 第66回応用物理学会春季学術講演会10a-PA5-11, 2019年. (査読無)

Akira Fujimoto, Tadachika Nakayama and Hisayuki Suematsu:” Possibility of Sr-Ca-Cu-O Superconducting System for Humidity Sensor Materials”, 2018 IEEE SENSORS, T-7-31, Oct. 30, 2018. (査読有)

Akira Fujimoto, Satoshi Shinoda, Tadachika Nakayama and Hisayuki Suematsu:” Adsorption Behavior of H₂O, OH and H to Sr-Ca-Cu-O Superconducting Materials”, Abstracts and Proceedings The 12th Asian Conference on Chemical Sensors, P008, Nov.14 2017. (査読有)

藤本晶, “半導体ガスセンサの過渡応答のモデル化 - 臭い識別センサの実現に向けて -”, 富士山麓アカデミック&サイエンスフェア, ふじさんメッセ, 2016年12月2日. (査読無)

藤本晶, “半導体ガスセンサの表面反応の解析”, 富士山麓アカデミック&サイエンスフェア, ふじさんメッセ, 2016年12月2日. (査読無)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

出願状況(計0件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

出願年：
国内外の別：

取得状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

6 . 研究組織
研究代表者 藤本 晶
FUJIMOTO Akira
沼津工業高等専門学校
校長
10238610

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。