

酸素吸着による Pt 薄膜抵抗率変化の原子論的解析

Atomistic Analysis of Resistivity Change by Oxygen Adsorption to Pt Nanosheets

東大工 ○田中 貴久, 内田 建

The Univ. of Tokyo, ○Takahisa Tanaka, Ken Uchida

E-mail: tanaka@ssn.t.u-tokyo.ac.jp

金属ナノ構造を用いたガスセンサは低消費電力動作や高湿度下でも安定した測定が可能なことから呼吸センシングに向けた応用が期待されている [1,2]. Pt ナノ構造を用いた水素センサの応答原理は, Pt 表面に吸着した酸素原子によるキャリア散乱増大が, 水素による酸素被覆率の低下で抑制されることに起因する [1]. このセンサ応答をモデル化するには Fuchs-Sondheimer (F-S) モデルが用いられてきた. F-S モデルにおける金属ナノ構造の抵抗率変化は, 表面キャリア散乱でキャリアが鏡面的に反射される割合である単一の鏡面性パラメータで経験的に説明される. そのため, センサ感度に対する面方位による影響を定量的に予測することは困難である. 本研究では, 反応力場に基づいて Pt 薄膜表面への酸素吸着を再現し, 第一原理計算に基づく非平衡グリーン関数法から原子論的に Pt 薄膜の抵抗率変化を計算した. そして異なる面方位に対する計算から, 酸素吸着による抵抗率変化の面方位依存性を定量的に解析した.

本研究で用いた構造と計算の模式図を Fig. 1 に示す. 薄膜の面方位として(110)面と(111)面を仮定した. まず, 分子動力学法シミュレータ LAMMPS を用いて反応力場に基づき [3,4], グランドカノニカルモンテカルロ法と分子動力学法を交互に行うことでガス吸着を再現した. 酸素 0.2 気圧, 300 K の条件下で平衡状態に達した酸素吸着 Pt 薄膜について, SIESTA と TranSIESTA から [5,6], 3 種類のガス吸着領域長さに対して各 5 通りの原子配置から透過率の平均を計算した. ガス吸着領域長さと透過率から計算した抵抗値から抵抗率を導出した.

酸素吸着した各面方位に対する抵抗率を Fig. 2 に示す. ガス吸着の無い清浄な Pt 薄膜では, (110)面と(111)面の抵抗率はバルク Pt の抵抗率 $1.03 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{cm}$ とおおむね一致した. 一方で酸素吸着 Pt 薄膜では, (110)面, (111)面ともにバルク Pt よりも抵抗率が上昇していることが確認された. これは先行研究で考慮していた酸素吸着によるキャリア散乱増大と整合する. (110)面の方が(111)面よりも酸素吸着による抵抗率変化が大きいことは, 酸素吸着量の面方位依存性によると考えられる. 本結果は Pt(110)面を用いたセンサで大きなセンサ応答が期待できることを示唆している.

本研究は科研費 19K15050, 18H05243 及び JST-PRESTO JPMJPR20B5, JST-CREST JPMJCR19I2 の助成を受けて行われた.

[1] T. Tanaka *et al.*, Sens. Actuators B **258**, 913 (2018). [2] T. Tanaka *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices **66**, 5393 (2019). [3] S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995). [4] Y. K. Shin *et al.*, J. Phys. Chem. A **120**, 8044 (2016). [5] J. M. Soler *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **14**, 2745 (2002). [6] M. Brandt *et al.*, Phys. Rev. B **65**, 165401 (2002).

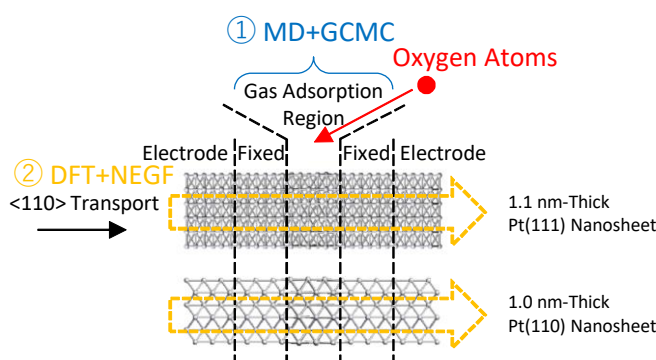


Fig. 1. Schematic of calculation methodology and calculated structures.

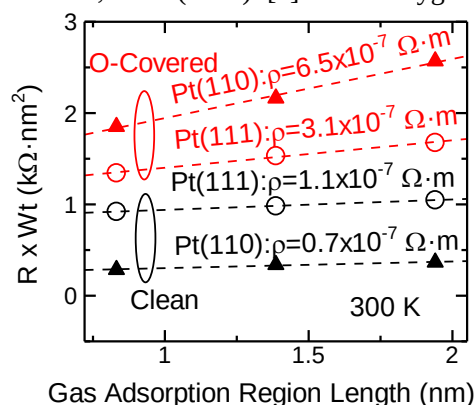


Fig. 2. Gas adsorption region length dependence of resistance. W and t are the width and thickness, respectively.