

## 二酸化スズナノリボンによる 二酸化窒素検出メカニズム

二酸化スズナノリボンによる二酸化窒素検出メカニズムが、BIOVIA Materials Studio のDMol<sup>3</sup>を活用し研究されました。

検出メカニズムの理解によって、ナノテクノロジーの重要な商業利用対象であるナノスケール化学センサーの効果的設計が可能になります。

合成コスト、キラリティおよび直径の制御、束状構造からの分離、官能基の付加などのカーボンナノチューブへの実用的な挑戦は、他のタイプの一次元ナノ構造を発見の競争に研究者達を駆り立てました。この点で最も将来性のある二つの候補はナノワイヤとナノリボンです。その名称が示しているように、ナノリボンはほぼ一様の長方形切断面をもった個体です（中空であるナノチューブとは異なります）。

これまで、ナノリボンは金属酸化物と半導体から主に合成されてきました。特に二酸化スズ(SnO<sub>2</sub>)および酸化亜鉛(ZnO)のナノリボンは、触媒や光電子デバイス、あるいは大気汚染ガスや生体分子の化学センサーとして有望な応用が考えられるため、現在非常に大きな関心を集めている材料系です。ナノリボンは数十マイクロンまで成長しますが、単結晶であり、転移がありません。したがってナノリボンは、電気的、熱的、光学のあるいは1次元半導体ナノ構造における輸送現象や、さまざまな外部プロセス条件への応答の点で理想的モデルを提供していると言えます。

SnO<sub>2</sub>ナノリボンを使用した最近の実験では[1]、非常に少量の二酸化窒素(NO<sub>2</sub>)のような有害ガスの検出についても非常に効果的であることを示しました。これらのガス吸着量に対して、試料の電気伝導率は1桁以上減少しました。さらに興味深いのは、紫外線を照射することによって吸着物を除去でき、電気伝導率が完全に初期値に戻るといった点です。このような単結晶検出エレメントは、従来の薄膜酸化物センサーよりもいくつかの利点があります。たとえば低い実用温度、明確に規定される粗粒界、高い表面体積比による高活性が挙げられます。

この可能性を成功裏に商業化するためには、このような系の検出メカニズムをよりよく理解することが重要になります。

この目標をもとに、Brookhaven National Laboratory、Lawrence Berkeley National Laboratory、BIOVIAの研究グループは、BIOVIA Materials StudioのDMol<sup>3</sup>を使用してSnO<sub>2</sub>ナノリボンの二酸化窒素センシング機構の研究を行いました。

Nano Letters[2]のレポートのなかで、SnO<sub>2</sub>ナノリボンの(10 $\bar{1}$ )および(010)露出表面でのNO<sub>2</sub>検出メカニズムについて検討しています。

密度汎関数法(DFT)による計算は以下を明らかにしました：

- 最安定の吸収化学種は、予期しなかった、Sn中心に二重結合したNO<sub>3</sub>基を含む。
- 電気伝導率の1桁の減少は、吸着原子への大きな電子移動によって説明される。
- 計算された結合エネルギーは、700Kまで達する吸着物の安定性および、大部分がナノリボン表面上のNO<sub>3</sub>種であることを示すX線吸収分光法の結果と一致。

O<sub>2</sub>およびCOを検出するナノリボンの可能性も検討されました。

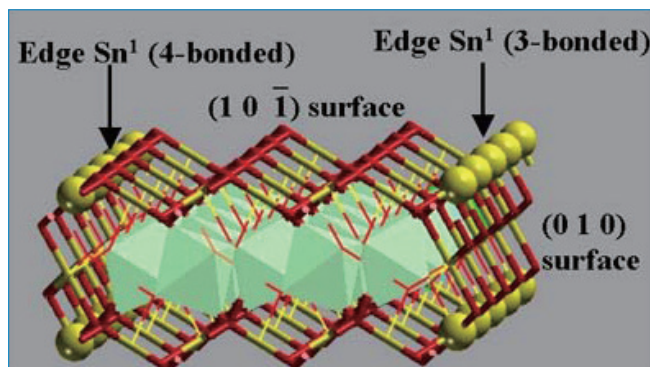
O<sub>2</sub>の場合、ナノリボンの反応は表面の酸素欠損の濃度に非常に敏感でした。そして、表面欠損が存在しないときは、電荷移動は無視できる程度であると計算は予測しました。しか

## Organization

Brookhaven & Lawrence Berkeley National Laboratories

## Products

BIOVIA Materials Studio DMol<sup>3</sup>



SnO<sub>2</sub>ナノリボンの分子モデルの露出面とエッジ。実際の計算では周期的境界条件が使用されました。参考文献[2]を参照。

し、表面欠損が存在すると、O<sub>2</sub>分子は過酸化物ブリッジとして吸着でき、ナノリボン表面からかなりの電子電荷を引き寄せ、電気伝導率を減少させることになります。

CO吸着の場合、COからナノリボン表面への正味電子移動が生じました。したがって計算からCO吸着によりナノリボンの電気伝導率は増加すると予測されましたが、このことは実験結果と一致しました。

## 参考文献

1. Law, M.; Kind, H.; Kim, F.; Messer, B.; Yang, P., *Angew. Chem., Int. Ed.*, 2002, 41, 2405.
2. Maiti, A.; Rodriguez, J.; Law, M.; Kung, P.; McKinney, J.; Yang, P., *Nano Letters*, 2003, 3(8), 1025.