

酸素センサ電極表面上のガス挙動に関する量子化学的研究

○伊藤 みほ、長谷川 順、鈴木 康文

株式会社デンソー（〒448-8661 愛知県刈谷市昭和町 1-1）

【緒言】

酸素センサは、自動車の燃料噴射装置のフィードバック・コントロールシステムの 1 つとして使われおり、排気ガス中の酸素濃度を検出している。しかし、排気ガス共存下では、排気ガス成分 (NO、CO、HC) と酸素ガスが、燃焼反応 (副反応) を引き起こすため、排気ガスの酸素濃度を正確に測定できないという問題がある。この課題を解決するためには、電極表面上での排気ガス成分の吸脱着現象を系統的に明らかにする必要がある。本研究では、電極表面上における CO ガスの吸脱着現象について、電極表面の酸素被覆率に着目して検討した。その結果、CO ガスの電極表面上での挙動は、酸素被覆率によって異なることを明らかにした。

【方法】

計算方法としては、密度汎関数理論に基づく第一原理量子化学プログラム CASTEP (アクセルリス社) を使用した。構造最適化は局所密度近似 (LDA) レベルで行い、最適化された構造に対して PW-91 型の一般化密度勾配近似 (GGA) を用いてエネルギー計算を行った。さらに、第一原理量子分子動力学プログラム CASTEP (アクセルリス社) を使用して、センサ使用温度での挙動についても解析した。

【結果と考察】

図 1 に本研究で使用したモデルの初期構造とシミュレーションから得られた結果の一例を示す。金属表面には、0~1 モノレイヤの酸素被覆層を形成させた (111) 面を使用した。量子分子動力学計算は、センサ使用温度である 1073K で行い、酸素被覆率と CO 吸脱着現象の関係について検討した。その結果、電極表面の酸素被覆率が増加するに従い、CO ガスは、CO₂ ガスとして脱離し易いことが示された。さらに、電極材料を変更した場合の現象についても検討し、電極材料と CO ガスの吸脱着現象の関係についても考察した。

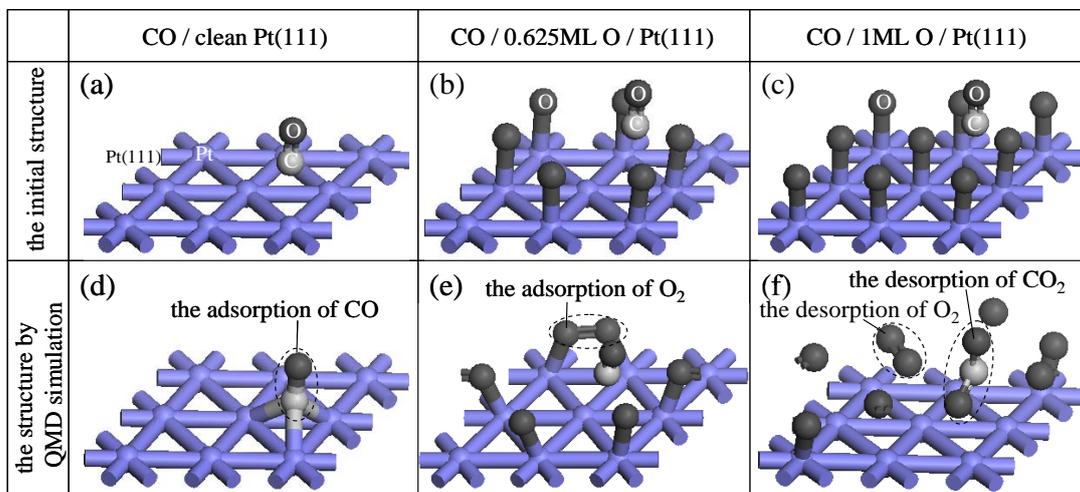


Fig. 1 The structure by QMD simulation for CO/ xML O /Pt(111) (x=0-1)