

Bayreuther Beiträge zur Sensorik und Messtechnik

Band 1

Kathy Sahner

**Modeling of *p*-type semiconducting perovskites
for gas sensor applications**

Shaker Verlag
Aachen 2006

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: Bayreuth, Univ., Diss., 2006

Copyright Shaker Verlag 2006

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN-10: 3-8322-5538-9

ISBN-13: 978-3-8322-5538-1

ISSN 1862-9466

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

ZUSAMMENFASSUNG: Modeling of *p*-type semiconducting perovskites for gas sensor applications

Im Rahmen des vorliegenden Beitrags wurde die Funktionskeramik $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$, ein perovskitischer *p*-Halbleiter, für den Einsatz als resistiver Kohlenwasserstoffsensoren im mittleren Temperaturbereich von 350 °C bis 450 °C untersucht. Die Arbeit ist in vier Teile untergliedert: Sensorcharakterisierung, Optimierung des Werkstoffs, Modellierung des zugrunde liegenden Mechanismus sowie Weiterentwicklung des gesamten Sensorsystems.

Während der Charakterisierung des Sensormaterials konzentrierten sich die Untersuchungen auf Ausgangsmaterialien, die über Festkörperreaktionen nach dem Mischoxidverfahren hergestellt wurden, und auf siebgedruckte Sensorschichten. Eine umfassende Erforschung der Sensoreigenschaften umfasste Messungen zur Sensitivität, Ansprechzeit, Reproduzierbarkeit und Stabilität. Um die Sensorfunktionalität zu verbessern, wurden unterschiedliche Parameter wie Betriebstemperatur, Eisengehalt, Schichtdicke und Partikelgröße optimiert. Durch den Einsatz nanoskaliger, nasschemisch gefällter Precursor oder durch gepulste Laserablation wurde das Oberflächen-zu-Volumen-Verhältnis der Sensorschichten vergrößert. Hiermit ließ sich die Selektivität der Sensoren für Propen steigern. Darüber hinaus wurden im Rahmen dieser Arbeit erstmals erfolgreich $\text{SrTi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_{3-\delta}$ -Schichten über ein neuartiges Elektroabscheideverfahren präpariert.

Um die Beobachtungen der beiden ersten Teile auch quantitativ zu erklären, wurde ein neues Sensormodell entwickelt. In diesem Zusammenhang wurde zwischen einem "makroskopischen" und einem "mikroskopischen" Beitrag zum Gesamtmechanismus unterschieden. Im stationären Fall bildet sich innerhalb der Sensorschicht ein makroskopisches Konzentrationsprofil des Analytgases aus. Auf mikroskopischer Ebene wirkt sich die lokale Gaskonzentration auf die lokale Leitfähigkeit innerhalb der Sensorschicht aus. Zwei Fälle wurden hierbei unterschieden.

Der erste Ansatz basierte auf dem gängigen Modell, das in der Literatur für *n*-halbleitende Sensoren vom Taguchi-Typ propagiert wird. Eine Kernthese ist hierbei, dass adsorbierte Donator- oder Akzeptormoleküle die Leitfähigkeit des Halbleiters in oberflächennahen Bereichen beeinflussen. Im zweiten, favorisierten Modellansatz wurde berücksichtigt, dass bei Redoxreaktionen Gittersauerstoff als Oxidationsmittel aus dem Perovskit ausgebaut wird und das gesamte Materialvolumen zur Gassensitivität beiträgt. Mit nur wenigen Fitparametern konnten die experimentellen Daten mit Hilfe dieses "Bulkmodells" gut beschrieben werden.

Nachdem so der Sensormechanismus des Halbleitermaterials beschrieben wurde, befasste sich der letzte Teil der Arbeit mit der Weiterentwicklung der Sensorpräparation.

Querempfindlichkeiten wurden durch den Einsatz einer reaktiven Filterschicht gemindert. Um kompakte Sensoren mit niedrigem Leistungsbedarf und einer Vielzahl an integrierten Funktionalitäten nachzukommen, wurde ein neuartiges Folienmaterial untersucht. Dies ermöglichte einen sehr flexiblen Sensoraufbau in HTCC-Technologie.