

熱電材料応用を目指した新しいIV族混晶 ($\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$) の開発

Development of new group-IV alloys ($\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$, $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$) for thermoelectric materials

○ 黒澤昌志^{1,2,3}, 中塚理^{1,4}, 財満鎮明⁴

(1. 名大院工, 2. 名大高等研究院, 3. JST さきがけ, 4. 名大未来研)

○ Masashi Kurosawa^{1,2,3}, Osamu Nakatsuka^{1,4}, and Shigeaki Zaima⁴

(1. Grad. Sch. of Eng., Nagoya Univ., 2. IAR, Nagoya Univ.,

3. JST-PRESTO, 4. IMaSS, Nagoya Univ.)

E-mail: kurosawa@alice.xtal.nagoya-u.ac.jp

未利用廃熱量が多い低温度域 (室温~200°C) のエネルギーハーベスティングを目指し, BiTe系に取って代わる新たな熱電変換材料の開発が希求されている. 材料設計指針となる性能指標 Z は, $S^2\sigma/\kappa$ (S : ゼーベック係数, σ : 電気伝導率, κ : 熱伝導率) で示される. つまり, 高変換効率の実現には, 「キャリアの高速移動は許すが, 熱伝導に寄与するフォノンのはっきり抑える」ことが求められる. 我々は, Snを含むIV族混晶 ($\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ [1] や $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ [2,3]) が上記に適した材料になり得ると考えている. その理由は, (1) 直接遷移型 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ ($x \geq 0.08$) における高いキャリア移動度 [4] と, (2) Ge や Si 母相中の重い Sn 原子がフォノン散乱体になり得るとの予測に基づく.

以上の背景のもと, 2年ほど前から $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ や $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$ を用いた熱電材料開発に取り組んでいる. しかし, 一筋縄にはいかない. その理由を2元平衡状態図 (相図) を用いて説明する. Si-Ge系は全率固溶型, すなわち, 液相/固相いずれにおいてもあらゆる濃度で安定に存在できる. 一方, Ge-Sn や Si-Sn系は共晶型である (Fig. 1). 液相ではあらゆる濃度で溶け合うが, 固相ではほとんど溶け合うことができない. 互いにどの程度固溶するのか? は温度の関数であり, 相図の固相領域 (図中の左端および右端の領域) の大きさで判断できる. Ge-Sn や Si-Sn系では, このスケールでは固相領域を確認できないほど小さく, Snの固溶限はそれぞれ1.0%, 0.1%程度である. そのため, Snを格子置換位置に取り込むには, 非平衡状態の活用が鍵となる. 当日の講演 (黒澤, 今井, 高橋) では, Snを含むIV族混晶 ($\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ や $\text{Si}_{1-x}\text{Sn}_x$) に対して進めている非平衡状態を駆使した結晶成長技術開発, ドーピング技術開発などに関する最近の進展について紹介したい.

謝辞

本研究の一部は, JSPS 科研費・基盤研究 (S) (No. 26220605), 若手研究 (A) (No. 17H04919), および JST さきがけ (No. JPMJPR15R2) の研究助成により実施されました. 日頃よりご支援, ご協力いただいている皆様方に厚く御礼申し上げます.

参考文献

[1] S. Zaima *et al.*, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **16**, 043502 (2015). (レビュー) [2] M. Kurosawa *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 171908 (2015). (実験) [3] Y. Nagae, M. Kurosawa *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.* **55**, 08PE04 (2016); **56**, 04CR10 (2017). (理論計算) [4] 例えば, J. D. Sau and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **75**, 045208 (2007). (理論計算) [5] T. B. Massalski in *Binary Alloy Phase Diagrams*, edited by J. L. Murray *et al.* (American Society for Metals, Ohio, 1986).

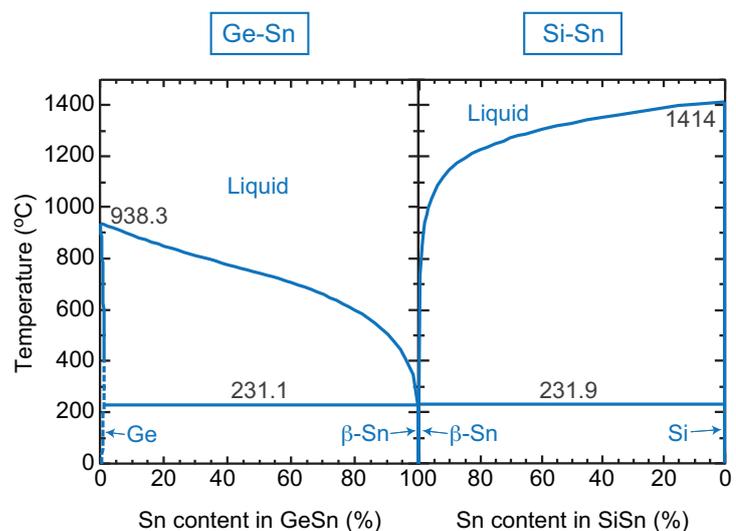


Fig. 1: Phase diagram of Ge-Sn and Si-Sn systems [5]