

SiO₂ 絶縁膜界面の欠陥終端による Nanowire 型 Si 熱電発電デバイスの特性改善

Performance Improvement of Si Nanowire Thermoelectric Generator by Terminating Interfacial Defects of SiO₂/Si

早大理工¹, 産総研² 〇橋本 修一郎¹, 大場 俊輔¹, 姫田 悠矢¹, 大和 亮¹, 松川 貴², 松木 武雄², 渡邊 孝信¹

Waseda Univ.¹, AIST² 〇S. Hashimoto¹, S. Oba¹, Y. Himeda¹, R. Yamato¹, T. Matsukawa², T. Matsuki¹, and T. Watanabe¹

E-mail: shuichiro.h@aoni.waseda.jp

【はじめに】熱や振動などのエネルギーから電気を生み出すエナジー・ハーベスティング（環境発電）は、あらゆるモノがワイヤレス通信でつながった IoT 社会を実現するキーテクノロジーとして注目されている。近年、シリコンナノワイヤ（SiNW）が電気伝導率を維持したまま低い熱伝導率を示すことが明らかにされ^[1]、CMOS プロセスで製造可能な微小熱電発電デバイス（Micro Thermoelectric Generator : μ TEG）の材料としての期待が高まっている^[2]。これまで我々は、SOI 基板上に作製した n 型 SiNW- μ TEG について、n 型 Si が本来もつ負のゼーベック係数では説明できない、逆向きの正のゼーベック係数が NW 部のポテンシャル障壁により発現することを報告してきた^[3,4]。今回、ゼーベック係数の極性反転を引き起こすポテンシャル障壁の起源として、NW 周縁の SiO₂ 界面の捕獲電荷が熱電特性に及ぼす影響を調査した。

【実験方法】Fig. 1 にデバイス模式図を示す。SOI 基板上に EB リソグラフィにより 40 nm 幅・10 μ m 長の<110>方位 NW とパッドをパターンニングした後、Dry 熱酸化（850 $^{\circ}$ C, 1hr）により SiO₂ 膜を NW 周縁に形成した。次に、P⁺イオン注入（ 1.0×10^{15} cm⁻² ドーズ）および活性化アニールにより n 型ドーピングした。最後に、TiN 電極（165 nm 膜厚）および Al 熱伝導層（300 nm 膜厚）を成膜した。45 $^{\circ}$ C に昇温した AlN セラミックス製の高温熱源を接近させ、熱電特性を評価した。一連の測定をフォーミングガスアニール（FGA : Ar:H₂ = 9:1, 400 $^{\circ}$ C, 30 min）前後で行い、欠陥終端が μ TEG の熱電性能に及ぼす影響を調査した。

【計算方法】Fig. 2 にシミュレーションモデルを示す。12 μ m 長、40 nm 幅の n-Si（ 5.0×10^{17} cm⁻³）の両端に高温/低温熱源を設定し生じる熱起電流を、TCAD 解析ツール^[5]を用いて計算した。このとき、中央 10 μ m において SiO₂ 層との界面に固定電荷（ -1.0×10^{12} cm⁻²）を設定し、中央部において 0.84 eV のポテンシャル障壁を仮定した。計算では、Drift Diffusion 方程式と Heat Flow 方程式を自己無撞着的に解いている。NW の熱伝導率は 1.48 W m⁻¹ K⁻¹ で一定とし、生成-再結合モデルには SRH 統計を採用した。

【結果および考察】Fig. 3 に、FGA 前後の SiNW- μ TEG のゼーベック係数およびパワーファクターを示す。FGA 前の SiNW- μ TEG（w/o FGA）において、+214 μ V K⁻¹ と逆向きのゼーベック係数が得られたのに対し、FGA 後（w/ FGA）では-206 μ V K⁻¹ とゼーベック係数が正の値となった。これは、FGA により捕獲準位数を低減し界面に捕獲される電荷が削減されたことで、ゼーベック係数の極性が正常となったことを示している。これにともない、パワーファクターも FGA により 128 μ W m⁻² K⁻¹ から 628 μ W m⁻² K⁻¹ へと向上した。計算においても、界面捕獲電荷誘起のポテンシャル障壁により逆向きの熱起電流が発現することがわかった。Fig. 4 は、NW 内部の生成-再結合速度分布のシミュレーション結果を示している。空乏層における生成-再結合速度に関して、低温熱源側の速度が高温熱源側の速度を上回ることにより、高温側の正孔が低温側に拡散したものと考えられる。これらの結果は LSI 同様、微小熱電デバイスにおいても捕獲準位数の低減がデバイス特性の改善に不可欠であることを示している。

【謝辞】本研究は、JST-CREST（JPMJCR15Q7）の支援を受けたものである。

【参考文献】[1] A. I. Boukai et al., Nature, **451**, 7175, 168 (2008). [2] B. M. Curtin, et al., Nano Lett., **13**, 5503 (2013). [3] 橋本修一郎他, 第 77 回応用物理学会秋季学術講演会, 講演予稿集. [4] S. Hashimoto, et al, Appl. Phys. Lett., (in press). [5] Silvaco, ATLAS-GIGA.

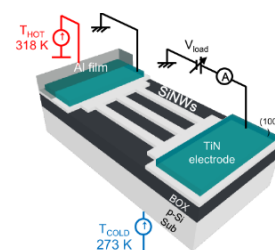


Fig. 1 Schematic of our SiNW- μ TEG.

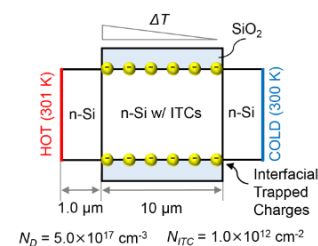


Fig. 2 TCAD Simulation model.

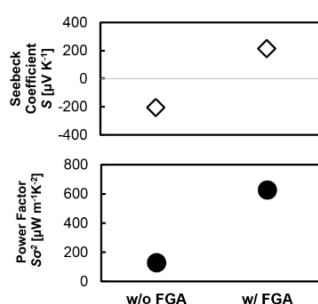


Fig. 3 Thermoelectric property of the μ TEG

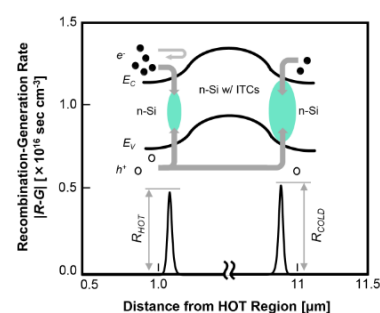


Fig. 4 Simulated R-G rate in SiNW structure