

電子-格子間非平衡状態における多層材料の熱電変換特性の理論評価

Theoretical analysis on thermoelectric properties of multilayers in non-equilibrium state between electrons and phonons

日立研開, °篠内 真, 黒崎 洋輔, 早川 純

Hitachi Ltd., Research & Development Group,

°Shin Yabuuchi, Yosuke Kurosaki, and Jun Hayakawa

E-mail: shin.yabuuchi.xj@hitachi.com

環境・エネルギー問題や資源枯渇問題の解決に向け、未利用熱エネルギーを有効活用するために、熱電変換素子の高効率化が必要とされている。熱電変換材料の性能指数は ZT ($ZT = S^2 \sigma T / \kappa$: S :ゼーベック係数, σ :電気伝導率, κ :熱伝導率) で表される。高効率の熱電変換材料に求められる性質は、 S と σ が高く、 κ が低い材料である。近年、金属/絶縁体接合界面において、金属材料の厚さと電子-格子相互作用に依存して、界面熱抵抗が増大する現象が注目されている[1]。これは、単一材料由来の物理現象ではなく、異種材料界面によって生じる電子温度と格子温度の非平衡状態が重要となる。我々はこの現象を利用し、異なる2つの材料を組み合わせた2層構造によって単一材料以上に熱伝導率を低減でき、熱電変換性能を大幅に向上できることを報告した[2]。現実的なデバイスを作製する場合、ナノサイズの2層構造ではなく、多層膜構造における特性制御が重要となる。本研究では、2種類の材料から成る多層膜構造における熱電変換特性を単一バンドモデルと2温度モデルに

より評価した。図1(a)に各層の厚さを20nmとし、交互に2種類の材料を5層ずつ積層させ、両端に温度差を与えた時の電子と格子の温度分布を示す。ここで、2種類の材料の一方は高い電気伝導率かつ低い格子熱伝導率としている。図1(a)に示すように多層構造の電子温度と格子温度は完全に乖離する。これは2種類の材料の電子熱伝導率と格子熱伝導率の大小関係が逆転していることに起因する。図1(b)に積層数を変化させたときの有効 ZT を示す。多層構造の ZT は層数が増加するに従い増加する。これは界面による熱伝導率の低減が電気伝導率とゼーベックの低下の影響を上回る場合である。発表では層数の増加によって ZT が低下する条件や多層構造の有効熱伝導率、有効電気伝導率、有効ゼーベック係数の詳細に関して報告する予定である。本成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託業務の結果得られたものである。

[1] A. Majumdar et al., Appl. Phys. Lett. 84, 4768 (2004)

[2] 篠内、他 2017 応用物理学会秋季 7a-C22-6

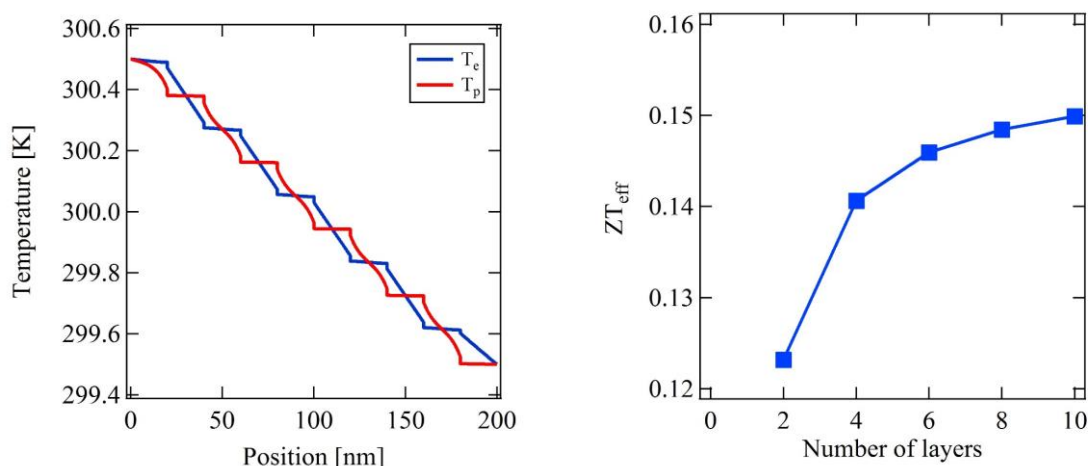


Figure 1 (a) Schematic of temperature profiles of electron and phonon in multilayer (b) Effective ZT values of multilayer with respect to the number of layers