

# 多層シリセン積層構造を有するエピタキシャル $\text{CaSi}_2$ 薄膜の熱電特性

## Thermoelectric properties of epitaxial $\text{CaSi}_2$ films including multilayer silicene

阪大院基礎工<sup>1</sup>

○寺田 吏<sup>1</sup>, 上松 悠人<sup>1</sup>, 石部 貴史<sup>1</sup>, 中村 芳明<sup>1</sup>

Osaka Univ.<sup>1</sup>

°Tsukasa Terada<sup>1</sup>, Yuto Uematsu<sup>1</sup>, Takafumi Ishibe<sup>1</sup>, Yoshiaki Nakamura<sup>1</sup>

E-mail: u897541f@ecs.osaka-u.ac.jp

【背景】熱を電気に直接変換可能な熱電変換は廃熱回収技術として注目されている。最近では、熱電発電を IoT センサ用電源に適用することが期待され、高性能な Si 基板上薄膜熱電材料が求められている。熱電性能は、無次元性能指数  $ZT = S^2\sigma T / \kappa$  ( $S$ : ゼーベック係数、 $\sigma$ : 電気伝導率、 $T$ : 絶対温度、 $\kappa$ : 熱伝導率) で評価され、高い  $S^2\sigma$  と低い  $\kappa$  が要求される。近年、高  $ZT$  材料として二次元材料・層状物質が注目されている [1]。我々は、その中でも高移動度電子素子材料として期待されている二次元材料のシリセンに注目した。安価・無毒な Si の二次元単原子シリセンは、高い  $\sigma$  による高い  $S^2\sigma$ 、及び層状構造による低い  $\kappa$  を示し、 $ZT > 1$  が達成可能であることが計算されている [2]。しかし、その化学的不安定性のため形成が難しい [3]。そこで、化学的安定性が高く、結晶内にシリセンの多層構造を有する  $\text{CaSi}_2$  に注目した。本研究では、Si 基板上にエピタキシャル  $\text{CaSi}_2$  薄膜を作製し、その熱電特性を明らかにすることを目的とした。

【方法】超高真空中 (背圧:  $1 \times 10^{-8}$  Pa) にアンドープ Si(111)基板を導入して清浄表面を取得した後、Ca を室温で蒸着する。その後、基板温度 500~700°C で加熱処理を行い、Si 基板と Ca を反応させることでエピタキシャル  $\text{CaSi}_2$  薄膜を形成する。結晶構造観察には反射高速電子回折 (RHEED) 法、X 線回折法 (Rigaku)、また、電気特性評価には自作電気特性測定装置、ZEM-3 (アドバンス理工) を用いた。

【実験結果】作製した  $\text{CaSi}_2$  薄膜の  $S^2\sigma$  の  $\sigma$  依存性を Fig. 1 に示す。 $\sigma$  減少に伴う  $S^2\sigma$  増大を観測した。 $S^2\sigma$  は最大で  $8.0 \mu\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-2}$  と、ユビキタス薄膜熱電材料においては高い値を示した。この性能変化は成長温度による結晶性の違いに起因すると考えられる。本講演では、結晶構造と熱電特性の関係、高出力因子が得られた要因について詳述する。

【謝辞】本研究の一部は、科研費 基板研究 A (16H02078) の支援により行われた。

【参考文献】 [1] Y. Liu, *et al.*, *Adv. Sustainable Syst.* **2**, 1800046 (2018). [2] L. Pan, *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **14**, 13588 (2012). [3] A. Molle, *et al.*, *Adv. Funct. Matter.* **23**, 4340 (2013).

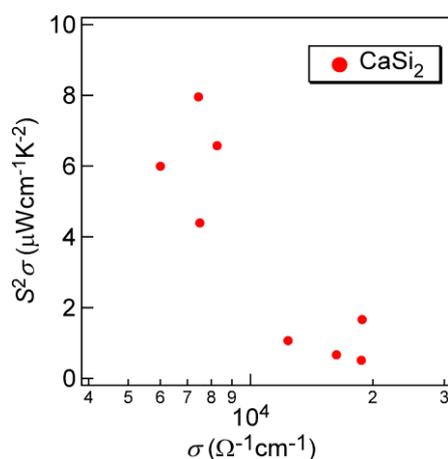


Fig. 1:  $S^2\sigma$  vs  $\sigma$  of epitaxial  $\text{CaSi}_2$  films/Si.