複雑結晶構造を有する Si 基板上 $BaSi_2$ 薄膜の熱電性能評価

Thermoelectric performances of $BaSi_2$ film/Si with complex crystal structure

阪大院基礎工 [1], 筑波大院 [2]
○石部 貴史 [1], 近田 尋一郎 [1], 谷内 卓 [2], 山下 雄大 [2], 末益 崇 [2], 中村 芳明 [1]
Osaka Univ.[1], Univ. of Tsukuba[2]
°Takafumi Ishibe[1], Jinichiro Chikada[1], Suguru Yachi[2], Yudai Yamashita[2],
Takashi Suemasu[2], and Yoshiaki Nakamura[1]
E-mail: ishibe@ee.es.osaka-u.ac.jp

【背景】近年、IoT 社会実現に向けてセンサ需要が急激に増加している。センサが実装される Si プラットフォームとの整合性、及び小型自立電源としての可能性から、Si 基板上薄膜熱電材料が注目されている[1]。安価・無毒な元素から構成され、Si 基板上に作製可能な $BaSi_2$ は、複雑結晶構造由来の極小熱伝導率（κ）を示すと予想され、環境にやさしい高性能熱電材料となることが期待される。先行研究によるとバルク $BaSi_2$ で 1.56 $Wm^{-1}K^{-1}$ と非常に低い熱伝導率が達成されている[2]。しかしながら、キャリア密度の調整が不十分であり、出力因子（$S^2\sigma$）が低い。また、実用化に向けてさらなるκ低減も要求される。そこで、本研究では、ドーピング濃度の最適化による出力因子増大、及び薄膜化による熱伝導率低減を行うことで、高熱電性能を有する Si 基板上 $BaSi_2$ 薄膜の開発を目的とする。

【方法】$BaSi_2$ 薄膜の成長には分子線エピタキシー法を用いた。清浄化した Si 基板上に、Ba を蒸着することで、Si(111)基板上にエピタキシャル $BaSi_2$ テンプレート層を 5 nm 形成した（基板温度: 500°C）。その後、Ba と Si を同時蒸着することで、高結晶性の $BaSi_2$ 薄膜を形成した（基板温度: 500°C）。表面・結晶構造評価には、それぞれ原子間力顕微鏡法、X 線回折法を用いた。S、σ、κ はそれぞれ、ゼーベック係数測定装置（アドバンス理工）、自作電気特性測定装置、2ω薄膜熱伝導率計（アドバンス理工）により評価した。

【結果】Figure 1 は $BaSi_2$ 薄膜の X 線回折スペクトルである。Si(111)に対して $BaSi_2$(100)の結晶方位関係で成長していることを確認した。熱電性能を評価したところ、キャリア密度が 4×10^{18} cm^{-3} のとき、$S^2\sigma$は 2.9 $\mu Wcm^{-1}K^{-2}$ と、$BaSi_2$ 材料の中で最大値を示した。また、κについても 1 $Wm^{-1}K^{-1}$ 以下の極小値を得た。本講演では、$BaSi_2$ 薄膜の熱電性能を明らかにするとともに、その性能向上要因について詳述する。

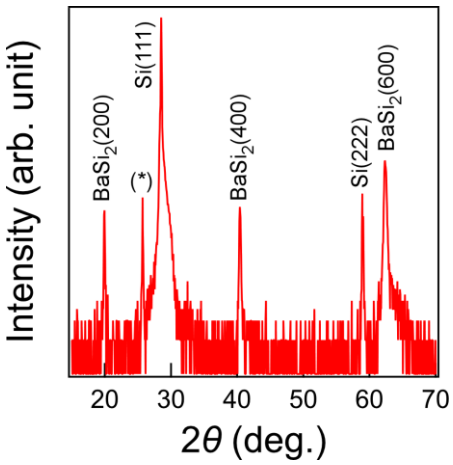

Fig. 1 (a) X-ray diffraction spectra of $BaSi_2$ film on Si. * indicates satellite peak of Si(111) coming from Cu K_β

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

[1] T. Taniguchi, *et al.*, *Appl. Phys. Express* **11**, 111301 (2018).
[2] K. Hashimoto, *et al.*, *J. Appl. Phys.* **102**, 063703 (2007).