

Si 基板上 B20 型 CoSi 薄膜の電子状態と熱電特性の関係

Relationship between electronic states and thermoelectric characteristics

in B20-type CoSi film /Si

阪大院基礎工¹, 九州シンクロトロン光研究センター², 高知工科大³○石部 貴史¹, 雛川 貴弘¹, 坂根 駿也¹, 佐藤 和則¹, 小林 英一²,藤田 武志³, 中村 芳明¹Osaka Univ.¹, Kyushu synchrotron light research center², Kochi Univ. Technol.³°Takafumi Ishibe¹, Takahiro Hinakawa¹, Shunya Sakane¹, Kazunori Sato¹Eiichi Kobayashi², Takeshi Fujita³, and Yoshiaki Nakamura¹

E-mail: ishibe@ee.es.osaka-u.ac.jp

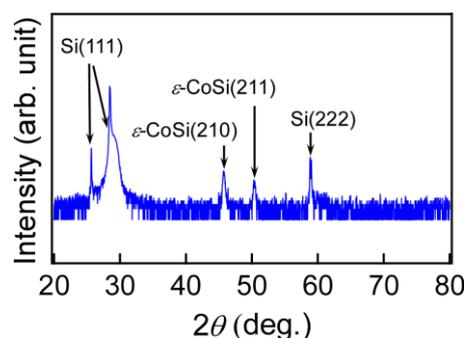
【背景】 Si 基板上薄膜熱電材料は、メンテナンスフリー、自立発電可能、Si プロセスとの高い整合性の観点で、IoT センサ用電源として期待されている。熱電特性向上のためには、高い出力因子と低い熱伝導率が求められるが、それらの相互依存のため同時実現は難しい。近年、Dirac, Weyl 電子系を有する材料が、その特徴的電子状態を反映して高い $S^2\sigma$ を示すことが報告された[1]。我々は、Dirac-like な電子系を有する、Si 材料系の B20 型 CoSi (ϵ -CoSi) に注目した。これまで、単一結晶相の ϵ -CoSi 薄膜を Si 基板上に作製することには成功したが[2]、その電子状態と熱電特性の関係については未解明であった。本研究では、光学的手法と理論計算を組み合わせ ϵ -CoSi 薄膜/Si の電子状態を分析し、熱電特性に与える影響を明らかにすることを目的とする。

【方法】 超高真空分子線エピタキシー装置を用いて ϵ -CoSi 薄膜を Si 基板上に成長した。Si(111)基板上に Si バッファ層を 30 nm 程度蒸着し、Si 清浄表面を取得した。室温あるいは 100°C で Co と Si を同時蒸着することで、準安定相の c-CoSi 薄膜を形成した。その後、100-400°C でポストアニールを施すことで ϵ -CoSi 薄膜を形成した。結晶構造評価には、反射高速電子回折法 (RHEED)、X 線回折法 (XRD) を、熱電特性評価には、自作電気特性測定装置、ZEM-3 (アドバンス理工)、 2ω 薄膜熱伝導率計 (アドバンス理工) を用いて評価した。電子状態評価には、X 線光電子分光法、フーリエ変換型赤外分光法を、電子状態計算には、第一原理計算法を用いた。

【結果】 Figure 1 は 400°C アニールした試料の XRD スペクトルである。 ϵ -CoSi に由来するピークが確認され、単一結晶相の ϵ -CoSi 薄膜形成に成功したことが分かる。さらに、本 ϵ -CoSi 薄膜/Si は、計算値よりも高いゼーベック係数を示した。本講演では、この S 増大機構を電子状態の観点から詳述する。

【謝辞】 本研究の一部は科研費 基盤研究 A (16H02078, 19H00853)、挑戦的研究 (萌芽) (19K22110) の支援により行われた。

【参考文献】 [1] B. Hinterleitner, et al., *Nature* **576**, 85-90 (2019). [2] 雛川、他、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、11p-W834-13 (2019).

Fig. 1 XRD spectra of ϵ -CoSi film/Si.