

## エピタキシャル $\text{CaSi}_2$ 薄膜中のシリセンバックリング構造変形による 熱電出力因子増大

Enhancement of thermoelectric power factor by deformation of silicene buckled  
structure in epitaxial  $\text{CaSi}_2$  thin film

阪大院基礎工<sup>1</sup>, 滋賀医科大学<sup>2</sup>, 阪大院工<sup>3</sup> °寺田吏<sup>1</sup>, 上松悠人<sup>1</sup>, 石部貴史<sup>1</sup>, 成瀬延康<sup>2</sup>,

Tien Quang Nguyen<sup>3</sup>, 佐藤和則<sup>3</sup>, 中村芳明<sup>1</sup>

Grad. School of Eng. Sci.<sup>1</sup>, Shiga University of Medical Science<sup>2</sup>, Grad. School of Eng.<sup>3</sup>,

°Tsukasa Terada<sup>1</sup>, Yuto Uematsu<sup>1</sup>, Takafumi Ishibe<sup>1</sup>, Nobuyasu Naruse<sup>2</sup>,

Tien Quang Nguyen<sup>3</sup>, Kazunori Sato<sup>3</sup>, Yoshiaki Nakamura<sup>1</sup>

E-mail: nakamura.yoshiaki.es@osaka-u.ac.jp

【背景】IoT センサ用の自立型電源として薄膜熱電電源が注目を浴びている。熱電変換の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。二次元 Si 原子層であるシリセンは、そのバックリング構造を変形することで、熱電性能を大幅に向上可能であることが理論計算により予測されている[1, 2]。しかしながら、シリセンは大気中で不安定であるため[3]、構造変調による熱電性能向上は実験的に実現できていない。そこで、大気中で安定かつシリセンを内包する  $\text{CaSi}_2$  に着目し、内包されたシリセン構造の変形による熱電性能向上を提案する。本研究では、薄膜形成プロセスを用いて  $\text{CaSi}_2$  薄膜中のシリセン構造を変調し、熱電性能を向上させることを目的とした。

【方法】Si(111)基板を超高真空中 ( $\sim 2 \times 10^{-8}$  Pa) に導入し、分子線エピタキシー法を用いて Ca を室温で蒸着した。その後、基板温度 550°C で一時間加熱処理を行うことで、Ca と Si 基板を反応させ、 $\text{CaSi}_2$  薄膜を形成した。この時、超高真空中で十分加熱することで、 $\text{CaSi}_2$  中の Ca 原子が脱離し、シリセン構造が変形すると考えた。薄膜の構造観察には、反射高速電子回折法 (RHEED)、X 線回折法 (XRD)、走査型透過電子顕微鏡法 (STEM) を用いた。熱電特性評価には、自作電気特性評価装置、ZEM-3 (アドバンス理工) を用いた。

【結果】RHEED 観察および XRD 測定の結果から、Si 基板上の  $\text{CaSi}_2$  薄膜がエピタキシャル成長していることが分かった。また、STEM 観察の結果、 $\text{CaSi}_2$  薄膜中のシリセンのバックリング高さが理想的な結晶と比較して増大していることが分かった。この  $\text{CaSi}_2$  薄膜の熱電特性を評価したところ、先行研究の多結晶薄膜に比べてゼーベック係数が大幅に増大し、室温の出力因子 ( $S^2 \sigma$ ) を 3000 倍に増大することに成功した。本講演では、 $\text{CaSi}_2$  薄膜中のシリセン構造変形が熱電特性に与える影響について実験・理論両面から詳述する。

【謝辞】本研究の一部は科研費 基盤研究 A (JP19H00853) および特別研究員奨励費 (JP20J10412) の支援により行われた。

【参考文献】[1] Z. Gao, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12**, 14298 (2020). [3] A. Molle, et al., *Adv. Funct. Mater.* **23**, 4340 (2013). [3] T. Terada, et al., *Adv. Mater. Interfaces* 2101752 (2021).