

MBE 法による B-doped BaSi₂ 膜の熱電特性評価Evaluation of thermoelectric properties of B-doped BaSi₂ films grown by MBE筑波大¹, °吉田 竜一¹, 辻 美紀江¹, 山下 雄大¹, 都甲 薫¹, 末益 崇¹Univ. Tsukuba¹, °Ryuichi Yoshida¹, Mikie Tsuji¹, Yudai Yamashita¹, Kaoru Toko¹, Takashi Suemasu¹

E-mail: labyoshidayoshidayoshidalab@gmail.com

【背景・目的】本研究では新規熱電変換材料として BaSi₂ に着目している。優れた熱電特性を有する熱電材料はレアメタルや有毒元素を含むことが多いのに対し、BaSi₂は資源が豊富な Ba と Si で構成されている。BaSi₂は第一原理計算により、室温付近で 600 μ V/K を越える非常に大きなゼーベック係数を有することが明らかになっている^[1]。さらに複雑な結晶構造に起因して、室温付近で 1.56 W/mK と小さな熱伝導率を持つことが確認されている^[2]。しかし、導電率は低く、高い熱電特性を達成するには、不純物を高濃度ドーピングし、キャリア密度を大きくする必要がある。そこで本研究では、MBE 法により、B を高濃度ドーピングした BaSi₂ を作製し、熱電特性評価をすることを目的とした。

【実験】本研究では、MBE 装置を用いて FZ-n-Si(111) 基板 ($\rho > 1000 \Omega\text{cm}$) 上に BaSi₂ を 200 nm 成長した。まず、Si 基板の基板温度 $T_s = 500^\circ\text{C}$ で Ba のみを供給する RDE 法により BaSi₂ テンプレート層を成長した。次に、 $T_s = 650^\circ\text{C}$ に変調し、Ba と Si、B を同時供給する MBE 法により B-doped BaSi₂ 膜を 200 nm エピタキシャル成長した。その際、B のセル温度 (T_B) を 1230, 1300 $^\circ\text{C}$ に設定した。ホール密度はそれぞれ $p = 9.8 \times 10^{16}$, $1.5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ である。最後に、*in situ* で a-Si の表面パッシベーション膜を 3 nm 堆積した。結晶性を θ -2 θ XRD、ラマン分光法(励起波長 532 nm)で評価した。また、熱電特性をゼーベック係数、導電率および出力因子測定で評価した。

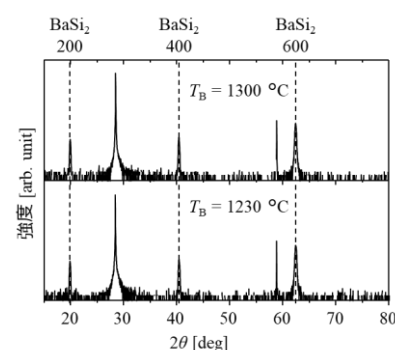


Fig.1 θ -2 θ XRD patterns of B-doped BaSi₂ with different T_B .

【結果・考察】Fig. 1 に各試料の θ -2 θ XRD パターンを示す。全ての試料において BaSi₂ $a00$ 面由来のピークが検出された。よって、 T_B によらず a 軸配向の B-doped BaSi₂ が成長したことがわかる。Fig. 2 に熱電特性を示す。ホール密度の上昇に伴って導電率が増加したが、一方のゼーベック係数が減少し、出力因子に大きな差はみられなかった。しかしながら、この値はバルク BaSi₂ の出力因子^[4]に比べて 50 倍ほど大きい値である。ゼーベック係数の大きい $T_B = 1230^\circ\text{C}$ でゼーベック係数を増加できれば、出力因子のさらなる向上が期待できる。

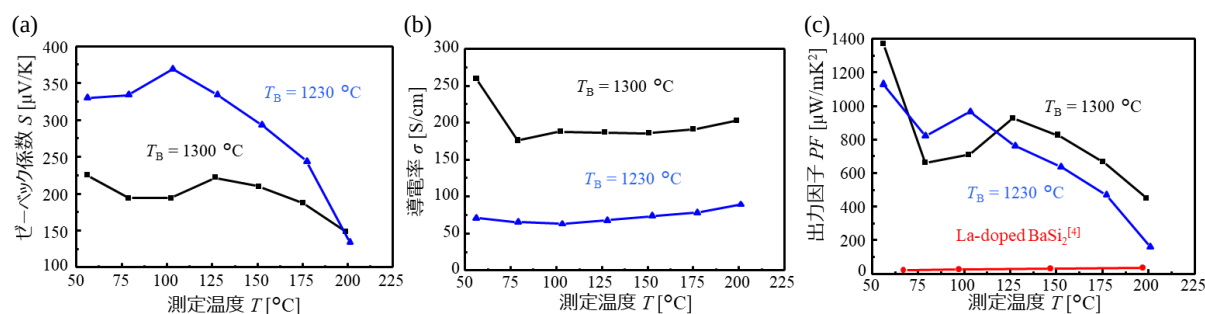


Fig. 2 (a) Seebeck coefficient, (b) conductivity, and (c) power factor of B-doped BaSi₂ with different T_B .

【参考文献】

- [1] H. Funashima, private communication.
- [2] K. Hashimoto *et al.*, J. Appl. Phys. **102** (2007) 063703.
- [3] Y. Inomata *et al.*, Jpn J. Appl. Phys. **43** (2004) L478.
- [4] K. Hishimoto *et al.*, MAT. TRANS. **49** (2008) 1737.