

高熱電出力因子に向けた ϵ -CoSi 薄膜/Si における電子輸送機構

Electron transport mechanism in ϵ -CoSi film/Si for high thermoelectric power factor

阪大院基礎工¹, 阪大院工², 高知工科大³, 九州シンクロトロン光研究センター⁴, [○]石部 貴史¹,
上松 悠人¹, 竹中 良介², 鈴木 雄大², 佐藤 和則², 藤田 武志³, 小林 英一⁴, 中村芳明¹
Grad. School of Eng. Sci.¹, Grad. School of Eng.², Kochi Univ. of Technol.³, Kyushu Synchrotron
Light Research Center⁴, [○]Takafumi Ishibe¹, Yuto Uematsu¹, Ryosuke Takenaka², Katsuhiko
Suzuki², Kazunori Sato², Takeshi Fujita³, Eiichi Kobayashi⁴, Yoshiaki Nakamura¹

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

【背景・目的】Si 基板上薄膜熱電電源は、小型・自立型なクリーン電源として切望されている。その熱電変換効率増大に向けて、従来、薄膜化・ナノ構造化によって大幅に熱伝導率は低減されてきた。しかし、電子散乱も同時に誘発されるため、熱電出力因子の低下が課題であった[1]。近年、フェルミ準位近傍に Dirac band と Heavy hole band を有する ϵ -CoSi が高い熱電出力因子（ $\sim 70 \mu\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ）を示すことが報告された [2]。この高い熱電出力因子は、Dirac band 上の低エネルギー電子が、電子-フォノン相互作用によって選択的に Heavy hole band に散乱されることで、伝導電子の平均エネルギーが増大することに起因する可能性が示唆された。しかし、バンド構造と熱電特性の関連を実験的に示した例はない。本研究では、単相 ϵ -CoSi 薄膜を形成し、バンド構造観察と熱電特性評価により、高熱電出力因子をもたらす電子輸送機構を実験的に明らかにする。

【実験方法】超高真空下（ 2×10^{-8} Pa）にて、分子線エピタキシー法によって ϵ -CoSi 薄膜は形成された。化学的表面処理を施した Si(111)基板上に、基板温度 660°C で、Si バッファ層を 50nm 形成し、Si 清浄表面を取得した。その後、室温下で Co と Si を同時蒸着した後（膜厚: 50 nm）、真空下でアニール処理（基板温度: 100-400°C）を 30 分間施した。これにより ϵ -CoSi 薄膜を形成した。X 線回折法（XRD）、透過型電子顕微鏡法（TEM）により構造観察を、光電子分光法（PES）によりバンド構造観察を行った。熱電特性は、自作電気特性測定装置（van der Pauw 法、ホール効果測定）、ゼーベック係数測定装置（ZEM-3, Advance Riko Inc.）を用いて評価された。第一原理計算及び Boltztrap を用いて熱電特性の理論計算を行った。

【結果】XRD 測定より、200°C でアニールした試料は単相の ϵ -CoSi であることが分かった。また、PES 測定により ϵ -CoSi 薄膜が理論と同等のバンド構造を有していることを確認した。ゼーベック係数のキャリア密度依存性を取得したところ、実験結果は、電子-フォノン相互作用に基づく理論計算結果と近いことが分かり、 ϵ -CoSi 薄膜において電子-フォノン相互作用による電子輸送が生じている可能性が示唆された。本講演では、電子輸送機構と熱電特性の関連について詳述する。

【謝辞】本研究の一部は科研費 基盤研究 A（19H00853）、挑戦的研究（萌芽）（19K22110）、新学術領域研究（20H05191）、及び CREST, JST の支援により行われた。

【参考文献】[1] T. Ishibe, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10**, 37709 (2018). [2] Y. Xia, et al., *Phys. Rev. Appl.* **11**, 024017 (2019).