

Epitaxial growth of CoSi film/ Si and its thermoelectric properties

M23海自1

派遣先 The 39th Annual International Conference on Thermoelectrics
(アメリカ・シアトル)

期 間 2023年6月21日～2023年6月27日(7日間)

申請者 大阪大学 大学院基礎工学研究科 助教 石 部 貴 史

海外における研究活動状況

研究目的

IoT、IoH (Internet of Things, Human) センサ需要の高まりに伴い、それを駆動する小型・自立型電源が必要である。こうした電源の候補としてSi基板上薄膜熱電材料が注目されている。最大の課題は、低い熱電変換効率である。効率向上に向けて熱伝導率(κ)低減と熱電出力因子($S^2\sigma$; S :ゼーベック係数、 σ :電気伝導率)増大が必要であるが、それらの同時実現は長年の課題であった。熱伝導率に関しては、ナノ構造の導入により大幅に低減されたものの、 $S^2\sigma$ 増大を実現する有力な方法論は見つかっていない。そこで本研究では、“Dirac電子(超高 σ)と電子フォノン相互作用(EPI)誘起波数空間 E -filtering効果(高 S)による高 $S^2\sigma$ ”を実現する高結晶性 ε -CoSi系薄膜熱電材料をSi基板上に開発することを目的とする。

海外における研究活動報告

申請者が参加したThe 39th Annual International Conference on Thermoelectricsは、USA、ヨーロッパ圏、アジア圏の持ち回りで毎年開催されている。本会議の主題は、熱電変換材料、デバイスに特化したものであり、実

験・計算を専門とする様々な研究者が集う。今回、COVID19の関係上、2019年以来、4年ぶりに開催された。今回は、シアトルで開催され、町並みは綺麗で落ち着いた印象を受けた。申請者は現地参加し、講演を行った。講演内容は以下の通りである。

昨今のCOVID-19や高齢化社会において遠隔管理システムの重要性が顕在化し、センサネットワークを基盤とした新生活様式への移行が急速に進むと考えられる。このためSiテクノロジーを駆使したIoT、IoH (Internet of Things, Human) センサ開発はもちろん、駆動用の小型・自立型電源の開発が同時に求められる。そこで代表者は、これらの要求仕様を満たすSi基板上薄膜熱電材料に注目した。しかし、我々の身の周り(室温近傍)では、その低い熱電変換効率のため、社会応用には至っていない。これは、変換効率を決める無次元性能指数: $ZT=S^2\sigma T/\kappa$ (T :絶対温度)における三物性値のトレードオフ関係(S, σ, κ)がボトルネックとなるためである。従来、重元素導入により κ 低減を実現し、 ZT 向上が達成されてきたが[Nature **489**, 414 (2012).], 重元素は高価、有毒であるため、環境調和性に乏しい。一方、環境調和性の高い軽元素を利用した場合、その高い κ のため、 ZT は低い。最近では、ナノ構造を用

いることで κ は理論極限程度まで低減され、さらなるZT向上のためには、 κ 低減と同時に、高い熱電出力因子($S^2\sigma$)が求められる[T. Ishibe, et al., *ACS Applied Materials & Interfaces* **15**, 26104-26110 (2023).].しかし、 $S^2\sigma$ 増大を実現する有力な方法論は見つかっていない。

こうした中、申請者は“Dirac電子(超高 σ)と電子フォノン相互作用(EPI)誘起波数空間 E -filtering効果(高 S)による高 $S^2\sigma$ ”を実現する高結晶性 ϵ -CoSi系薄膜熱電材料をSi基板上に開発することを提案した。まず、Si基板上に単結晶 ϵ -CoSi薄膜を形成した例はなく、その熱電特性に関しては言うまでもない。そこで、Si基板上への単結晶 ϵ -CoSi薄膜の形成技術開発を行った。Si基板上に独自のCo系初期成長核を形成した後、CoとSiを同時に蒸着することにより、単結晶 ϵ -CoSi薄膜の形成に成功した。この薄膜の S と σ は、どちらも多結晶 ϵ -CoSi薄膜よりも高く、結果として2倍程度高い $S^2\sigma$ を獲得した。この高 $S^2\sigma$ は、EPI誘起波数空間 E -filtering効果に起因することを理論的にも実

証した。本成果により、 $S^2\sigma$ 増大を可能とする新たな方法論の有効性が示されたことで、高性能熱電材料開発がさらに進むことが期待される。

本国際会議での講演では、複数の質問を受け、大変参考になる意見を頂いた。特に薄膜熱電材料の研究者からは、薄膜材料に特化した課題について質問され、深い議論を行うことができた。こうした対面での会議ならではの情報交換をできたことは非常に価値があるものと言える。この講演で得た知見・経験を元に、研究をさらに推し進めたい。最後に、国際会議参加にご支援いただきました村田学術振興財団に深く御礼申し上げます。

**この派遣の研究成果等を発表した
著書、論文、報告書の書名・講演題目**

Takafumi Ishibe, Shintaro Ishigaki, Katsuhiro Suzuki, Kazunori Sato, and Yoshiaki Nakamura, "Epitaxial growth of CoSi film/Si and its thermoelectric properties" The 39th Annual International Conference on Thermoelectrics.