

「微小エネルギーを利用した革新的な環境発電技術の創出」  
平成27年度採択研究代表者

H27年度  
実績報告書

渡邊 孝信

早稲田大学理工学術院  
教授

計算フォノンクスを駆使したオン・シリコン熱電デバイスの開発

## § 1. 研究実施体制

### (1) 渡邊グループ

研究代表者: 渡邊 孝信 (早稲田大学理工学術院、教授)

研究項目

- ・研究全体の統括
- ・モンテカルロ輸送シミュレーションによる熱電発電デバイスの最適設計
- ・非平衡分子動力学法による SiGe ナノワイヤのフォノン輸送シミュレーション
- ・ナノワイヤ型 Si 熱電発電デバイスの開発
- ・ナノワイヤ型 SiGe のメタライゼーション技術の開発

### (2) 鎌倉グループ

主たる共同研究者: 鎌倉 良成 (大阪大学工学研究科、准教授)

研究項目

- ・キャリア-フォノン連成モンテカルロシミュレーション技術の開発
- ・モンテカルロシミュレータの金属/半導体界面への拡張
- ・非平衡グリーン関数法を用いた熱電輸送シミュレータの開発
- ・ナノマイクロ領域における熱電輸送現象を取り扱うための最適なシミュレーション方式の検討

### (3) 池田グループ

主たる共同研究者: 池田 浩也 (静岡大学電子工学研究所、准教授)

研究項目

- ・表面電位顕微鏡(KFM)を用いたナノワイヤ材料用ゼーベック係数評価技術の確立
- ・ナノワイヤ/電極界面の電位分布解析

- ・走査電子顕微鏡(SEM)を用いたナノワイヤ材料用熱伝導率測定技術の開発
- ・SiGe ナノワイヤにおける熱電変換特性の解明
- ・熱電発電モジュールの発電性能評価装置の構築

## § 2 . 研究実施の概要

当該年度は3年4箇月間の研究期間の初年度にあたる。まずは各拠点の研究環境の整備を進め、主要な各研究項目の進め方について詳細な検討を行った。

本研究計画の中心に位置づけられる「Si熱電発電モジュールの作製と性能評価」について、電子線リソグラフィで作製したSiナノワイヤ試料を用いて、簡単な出力評価を実施し、熱電発電能を確認した。より正確な性能評価を行うためには、温度を高精度で制御可能な熱源をデバイス近傍に設けるが必要である。そこでデバイス上の微小な領域に精密な熱源を設置できる温度調節機能付き専用プローブを製作した。また、熱-電気特性シミュレーション、ならびに理論的な検討を通じてナノワイヤ部に温度勾配が集中しやすいデバイス形状について検討を行った(図 2-1)。熱源とSiナノワイヤの間の熱経路となる熱伝導層の熱抵抗を抑えることが肝要であり、熱-電気回路モデルを用いた検討に基づき、この熱伝導層材料に要求される物性と膜厚を定量的に示した。以上の結果を踏まえて、次年度からデバイスの試作と評価を本格的に進めていく。

本研究の理論的基礎を固める計算科学に関する研究項目では、電子-フォノン連成モンテカルロ法による熱電発電シミュレーションを実施した。まずは簡単な一様ドーピングSi結晶を仮定し、両端に設けた熱浴に温度差を与えて得られる電流-電圧特性からゼーベック係数を計算したところ、理論的に、また実験値と比較しても、妥当な結果が得られることを確認した(図 2-2)。

当チームが提案している走査電子顕微鏡(SEM)を用いたナノ材料熱伝導率評価技術の実現に向けて、まずはミリメートルスケールの大きな系で基礎原理であるACカロリメトリ法の検証から着手した(図 2-3)。綿布上にZnOナノ結晶を成長したフレキシブル材料を用い、周期的温度変化データから熱拡散率を導出する解析手法を確立した。熱画像カメラを導入して非接触で周期的温度分布変化を観測することにも成功している。ナノ材料評価に用いるSEM装置の設置も完了し、次年度からナノ材料の熱伝導率評価に取り組む準備を整えた。

本研究ではSiGeナノワイヤのプロセスの開発も目標に掲げている。Ge組成を自由に制御できるよう、SOI基板等にGe蒸着および熱処理を施し、SiGe混晶層を形成する実験を開始した。

本研究期間に入ってから始めた研究項目が多く、学術論文誌での発表には至っていないが、当初の目標は概ね達成できている。

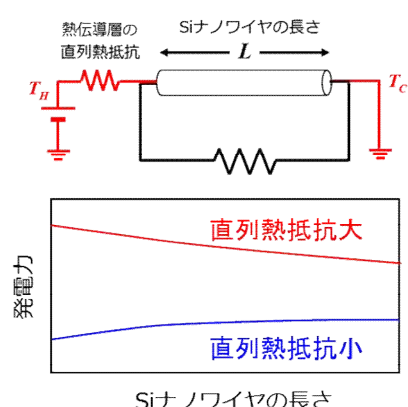


図 2-1: 熱伝導材料の仕様の検討に用いた熱-電気回路モデル

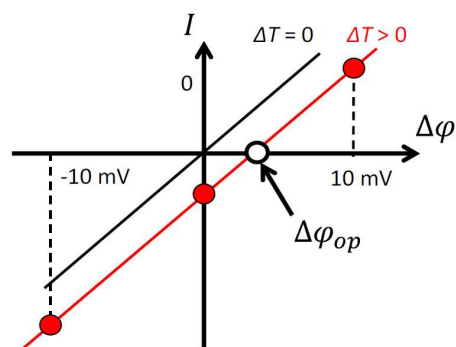


図 2-2: 電子-フォノン連成シミュレータで再現された熱電発電特性の概要

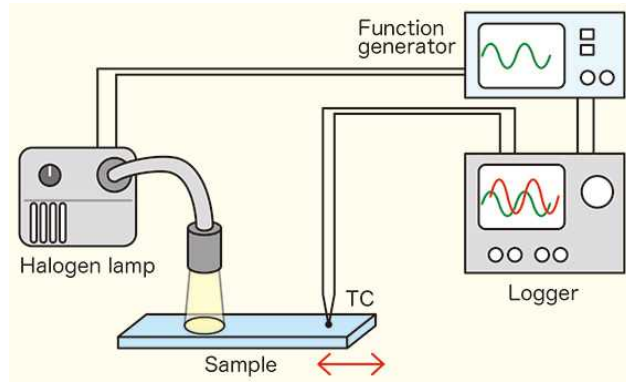


図 2-3: AC カロリメトリ法による熱拡散率測定装置の概略図