熱電多層膜の輸送現象とエネルギー変換効率

ダイキン工業（株）電子技術研究所　平野　徹、○西尾　好正、寺木　潤一

要旨

熱電材料を利用したペルチエ冷却器の性能向上を目的として、多層膜構造を利用した場合の性能改善の可能性を調べた。多層膜構造として不純物を局所的に集中させる形でバリア層を形成する場合と、合金組成比の違い等を利用したヘテロ接合でバリア層を形成する場合の2種類の多層膜に関する輸送特性の特徴と性能改善の可能性を報告する。

1．ペルチエ効果と性能改善の原理

ペルチエ冷却器は図１に示すようにｎ型、ｐ型半導体を組み合わせたπ型素子と呼ばれるものが使用される。電流を流すと運動エネルギーの形でのエネルギー（熱）の輸送が同時に生じ、上端部から熱が吸収される。電流J_eと熱流J_Qの比例係数はペルチエ係数Πと呼ばれる（$J_Q = \Pi J_e$）。熱電半導体のエネルギー変換効率の指標は性能指数値$Z = \Pi^2 \sigma / \kappa T$で与えられ、この性能指数値が大きいほど性能は良い（σ：電気伝導率、κ：熱伝導率、T：温度）。図１から分かるように各半導体中に存在する少数キャリアはバック・フローになっておりエネルギー輸送効率を落としている。また多数キャリアの低エネルギー部分の寄与も性能を低下させることが指摘されている。このためバリア層を利用してこれらの寄与を減少させると性能が改善し、単純にこれらの寄与をカットする計算を行うと５０％程度の性能改善効果があることが分かっている。

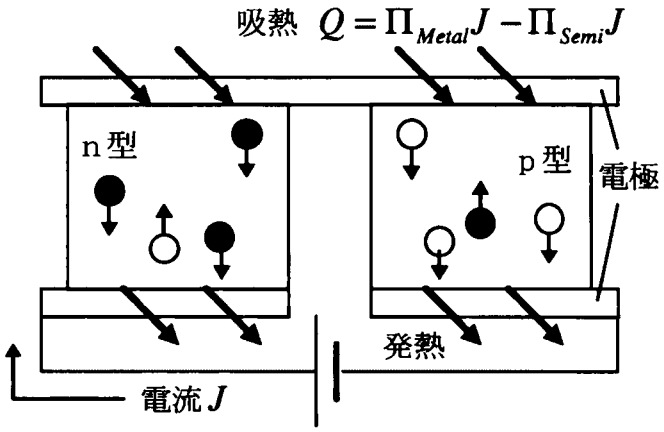

図１：ペルチエ効果と性能改善原理　黒丸は電子、白丸はホールを表わす

2．不純物密度の変調を利用した多層膜

多層膜として不純物を層状に集中させてバリア層を形成し、少数キャリアと多数キャリアの低エネルギー部分の寄与を減少させることを検討した。この多層膜に対してBoltzmann方程式を解くことにより輸送係数を計算し、性能指数値を求めた。バリア層の効果はキャリアの散乱確率に反映される。この散乱確率として一つの不純物の散乱特性を表わす形状因子と不純物の層状の空間分布を特徴づける構造因子を利用して計算を行った。計算例を図２、３に示す。層状の不純物ドーピングによりペルチエ係数は増大するが、電気伝導率の減少が大きく（図２）、格子熱伝導率がほとんど不純

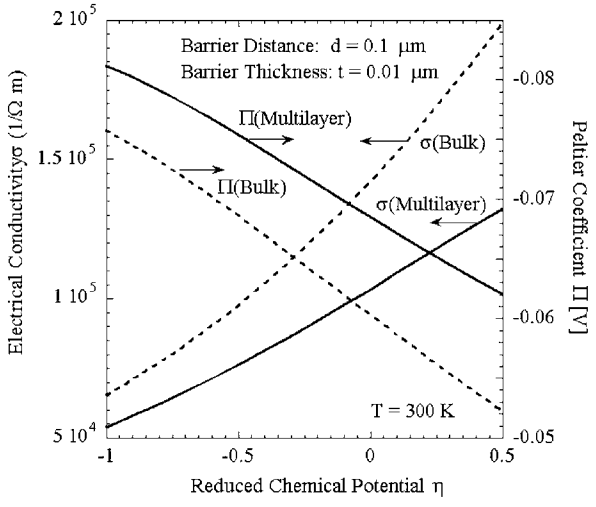

図２：多層膜の電気伝導率とペルチエ係数

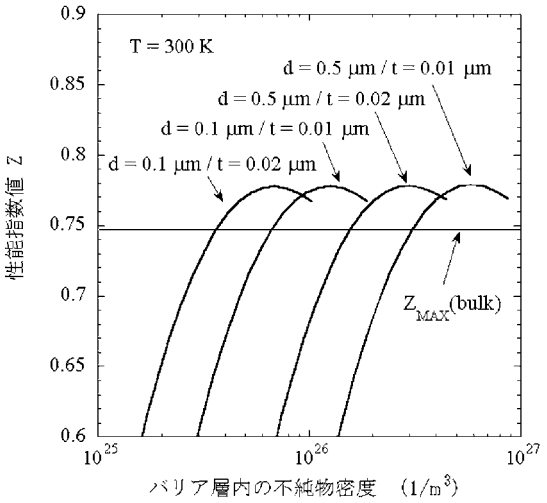

図３：多層膜の性能指数値

物の影響を受けないことを反映して性能指数値としては５％程度の性能改善効果に留まることが分かった（図３）。性能が十分に改善しなかった理由として、層状分布では散乱確率が小さく、少数キャリアと多数キャリアの低エネルギー部分の寄与を十分に減少させられなかったことが考えられる。

３．ヘテロ接合（合金組成比）を利用した多層膜

多層膜として合金組成比の違いを利用しバリア層を形成する場合を次に検討した。バリア内部の波動関数の指数関数的減衰効果が反映するように定式化を行った。多層膜を図４のように２つの領域に分割し、バリア間でのキャリアの運動のみをBoltzmann方程式により記述する。バリアを横切るプロセスは量子力学的な透過係数／反射係数により特徴づけることにした。不純物の変調ドーピングに比べ、低エネルギー部分の寄与を効果的に減少させることが出来るため、より大きな性能改善効果が期待される。

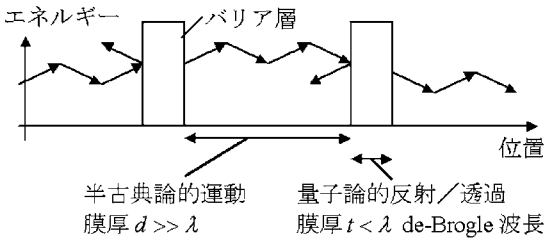

図４：ヘテロ接合を横切る電子の運動

４．製膜シミュレーション

磁性多層膜に対し電析を利用した製膜が行われており、ここでは電析法の適用可能性を製膜シミュレーションを行うことで明らかにしようと試みた。電析では電極電圧を変化させることで析出組成を変化させることが可能であるが、水溶液中のイオンの拡散速度が有限であることに起因する組成ずれが生じる（図５）。現状で設計を進めている多層膜を作製するためには、電極の回転数、イオン濃度を制御し、組成ずれを抑える必要のある事が分かった（イオン濃度を1/10にして組成ずれが生じる厚みを1/10にする等）。

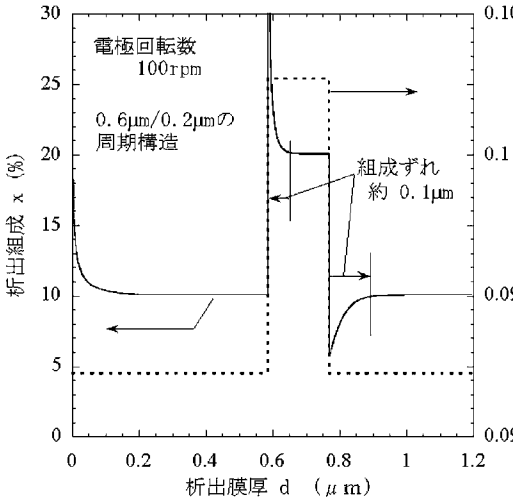

図５：製膜シミュレーションの例

５．結論

現在の計算結果によれば不純物の層状分布による性能改善効果は５％程度に留まることが予想される。しかしながら合金組成比の違いを利用してバリア層を形成した多層膜はより大きな性能の改善が期待される。詳細は報告会で発表する予定である。

これは平成１２年３月９日に開催した
計算科学技術活用型特定研究開発推進事業
研究報告会（主催 科学技術振興事業団）
の予稿集から抜粋したものです。

識別記号 OY_H10S_???_H11