

「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

H28 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

- ① 研究代表者: 渡邊 孝信 (早稲田大学理工学術院、教授)
- ② 研究項目
 - ・研究全体の統括
 - ・急峻な温度勾配を利用した新方式のナノスケール熱電発電の検討
 - ・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

(2) 鎌倉グループ

- ① 主たる共同研究者: 鎌倉 良成 (大阪大学工学研究科、准教授)
- ② 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
 - ・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
 - ・金属/半導体界面を用いた熱電性能向上の検討

(3) 池田グループ

- ① 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)
- ② 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

2年度目にあたる当該年度では、ナノスケールSi熱電発電モジュールの最適構造の理論的検討を進め、その実証実験にも取り組んだ。また、ナノスケールSiの熱電特性評価装置を開発し、計測のための予備的実験に取り組んだ。

TCADシミュレーションによる微細熱電発電モジュールの最適構造の検討を通じて、微細化および高集積化による発度が向上する“スケーラブル”なマイクロ熱電発電デバイスを考案した。このデバイスは基板に垂直に流れる主熱流から基板面内方向に漏れ出した副熱流が作る急峻な温度勾配で駆動する点に特徴があり、現行のプレーナ型LSI製造プロセスで作製できるという利点がある。ナノワイヤ長を短くすると飛躍的に発電性能が向上することが実験でも確認され(図 2-1)、従来のLSI同様にスケーリング戦略で発電性能を向上できることを示した。

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、分子動力学法による異種物質界面付近の熱伝導シミュレーション、熱電発電性能を向上させる金属-半導体界面の最適設計を行った。金属-半導体界面の設計では、半導体側を縮退させてできるトンネル障壁でもエネルギーフィルタ効果によるゼーベック係数の向上が見込めることが判明し、パワーファクターを増大させる最適な金属コンタクトの指針を獲得した。

ナノスケールSiの熱電特性評価手法の開発では、走査電子顕微鏡(SEM)を用いたナノ材料熱伝導率評価装置の開発、ならびにケルビンプローブフォース顕微鏡(KFM)を用いたナノサイズSiのゼーベック係数評価法を開発した。後者に関して、KFMプローブで局所温度を計測できることが実験で確認され(図 2-2)、同時に取得される表面ポテンシャル分布から局所ゼーベック係数を取得する見通しを得た。

本研究ではSiGeナノワイヤを用いた熱電デバイス開発も目標に掲げ、それに必要となるSiGe混

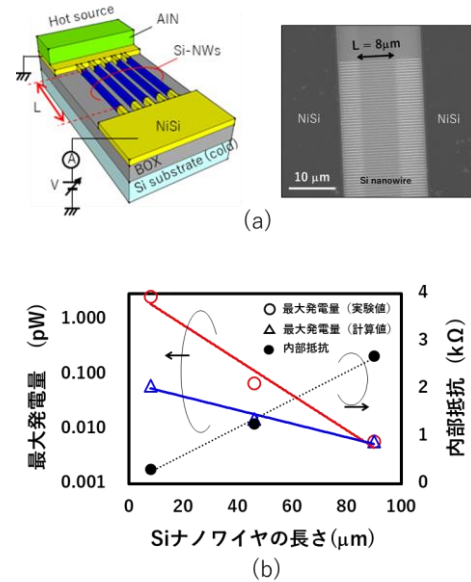


図 2-1: (a)試作したSiナノワイヤ熱電発電デバイス構造と(b)熱電発電性能

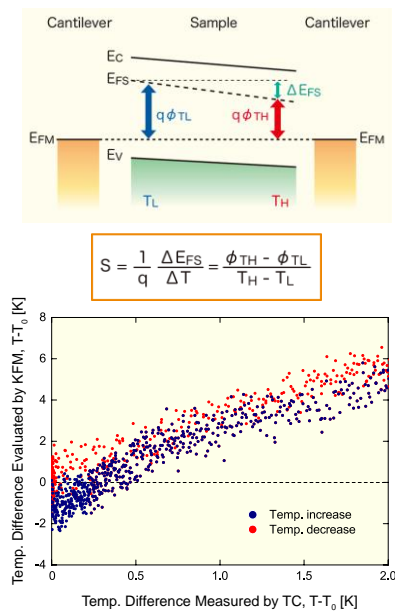


図 2-2: KFM によるゼーベック係数評価の原理および表面ポテンシャルから算出した温度と局所温度の相関関係

晶層付き基板の作製装置を開発した。

代表的な原著論文

- 1) Motohiro Tomita, Atsushi Ogura, and Takanobu Watanabe, "Development of Interatomic Potential of Group IV Alloy Semiconductors for Lattice Dynamics Simulation," ECS Transactions Vol. 75, pp. 785-794, (2016).
- 2) Veerappan Mannimuthu, Mukannan Arivanandhan, Faiz Salleh, Yosuke Shimura, Yasuhiro Hayakawa, Hiroya Ikeda, "Fabrication of high quality, thin Ge-on-insulator layers by direct wafer-bonding for nanostructured thermoelectric devices", Semiconductor Science and Technology, vol. 32, pp. 035021-1-10, (2017).
- 3) Yuhei Suzuki, Faiz Salleh, Yoshinari Kamakura, Masaru Shimomura, Hiroya Ikeda, "Phonon-drag effect on Seebeck coefficient in co-doped Si wire with submicrometer-scaled cross section", IEICE Transactions on Electronics, vol. E100-C, No. 5, pp. 486-489, (2017).