

「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28年度採択研究代表者

H28 年度 実績報告書

塩見 淳一郎

東京大学
准教授

メカノ・サーマル機能化による多機能汎用熱電デバイスの開発

§ 1. 研究実施体制

(1) 塩見グループ

- ① 研究代表者: 塩見 淳一郎 (東京大学工学系研究科、准教授)
- ② 研究項目
 - ・ナノ構造膜の熱電特性設計・評価
 - ・ひずみによる物性変調効果のナノスケール計測

(2) 後藤グループ

- ① 主たる共同研究者: 後藤 真宏
(物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点、主席研究員)
- ② 研究項目
 - ・モデルナノ構造膜の作製
 - ・ひずみ印加スパッタ試料の作製
 - ・ハイスループットスパッタ材料合成

(3) 岩瀬グループ

- ① 主たる共同研究者: 岩瀬 英治 (早稲田大学 理工学術院、准教授)
- ② 研究項目
 - ・熱電材料のフレキシブル基板への転写
 - ・伸縮配線および機構の搭載

§ 2. 研究実施の概要

ユビキタス元素系材料で高性能な熱電材料を創製することは、コストや安全・安心面で非常に有益である。しかし、多くの機能向上に向けた試みがなされてきたが有効なアプローチは未だ実現していない。当チームでは、十分に人工的に制御された材料のナノ構造化により、電子・フォノンの輸送を独立して制御することを狙っている。平成 28 年度は、主にシリコン (Si) と酸化シリコン (SiO_x) ナノドットを含む相を交互に堆積した超格子膜を研究対象とした。まず、分子動力学法とグリーン関数法によってフォノン・電子の輸送を計算し、酸素濃度や構造への依存性を評価した。並行して、ハイスループットスパッタリングによって Si と SiO_x 相の厚さを変えた超格子膜を作製し、構造やそれへの熱処理の影響などをナノレベルで解析した。得られた膜の熱伝導計測も進め、構造への高い感度が得られ始めている。

加えて、マテリアルズインフォマティクスによって材料開発を加速することを狙って、新しい手法を開発し実践した。まず、ナノ構造の熱輸送を計算する手法とベイズ最適化手法を組み合わせることによって、ナノ構造を最適化する新しい手法を開発した。2 元系の結晶材料を対象として、ナノ構造内のそれぞれの原子の組成そのものを記述子とすることで、全候補数の数パーセントの数の構造を計算するだけで最適構造を同定できることを示した。また、実験を用いた探索手法としてコンビナトリアル技術を適用する手法の開発を進めた。本格的なユビキタス元素系の熱電材料探索の前段階として、BiTe 系材料の研究を試験的に試みた。今後に向けた当研究の円滑な推進のためには、材料創製を担うハイスループットスパッタ材料合成装置の効率化・新規機能性付与が重要であるため、当該装置にマスク自動交換機構を増設し、デバイス作製プロセスを自動化した。

また、ひずみによる熱電物性の制御性を検証するために、ひずみ印加スパッタ試料の作製に必要となるひずみ印加スパッタサンプルホルダーの設計・試作を行なった。並行して、局所ひずみと熱電物性の相関を計測する測定系を構築した。

伸縮性フレキシブル基板への熱電デバイス実装を目指す部分においては、今後の基盤技術となる項目について重点的に研究を実施した。まず、熱電材料をフレキシブル基板への転写する技術に関して、微小熱電素子のフレキシブル基板上への統合手法の開発を行うとともに、伸縮配線および機構を搭載する技術に関して、延伸性と高熱伝導率を同時に有する統合基板の製作手法の検討を行った。具体的には、ロール型の素子統合装置(スタンピング転写装置)を作製し、転写統合時の圧力を 110 kPa 以上、せん断応力を 40kPa 以下とすれば、転写率 95 %以上、転写位置ずれ精度 2 度以下を実現できることを明らかにした。また、統合フレキシブル基板の検討として、フレキシブル基板上に伸縮配線を実装する製作手法および、基板の一部に面内の熱伝導率が高いが伸縮性のない厚さ 25 μm のグラファイトシートを用いて延伸性を有する統合基板を形成する手法について検討を行った。

<論文>

1. Shenghong Ju, Takuma Shiga, Lei Feng, Zhufeng Hou, Koji Tsuda, and Junichiro Shiomi, “Designing Nanostructures for Phonon Transport via Bayesian Optimization”, *Phys. Rev. X* 7, 021024 (2017).

2. M. Goto, M. Sasaki, Y. Xu, T. Zhan, Y. Isoda and Y. Shinohara, "Control of p-type and n-type thermoelectric properties of bismuth telluride thin films by combinatorial sputter coating technology", *Applied Surface Science*, 407 405-411 (2017).
3. Makoto Tokonami, Eiji Iwase, "Characterization of Transfer Positioning Accuracy on Roll-Type Stamping Transfer", *Proceedings of the International Symposium on Micro-Nano Science and Technology (MNST2016)*, SaP2-B-5 (2016).