

「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

H29 年度
実績報告書

塩見 淳一郎

東京大学工学系研究科
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 教授)

② 研究項目

- ・ナノ構造の熱電特性設計
- ・ナノ構造膜の熱電特性評価
- ・局所熱電測定による制御の高度化
- ・マテリアルズ・インフォマティクスモデルの構築と最適化
- ・シリコン複合ナノ焼結体の作製・評価

(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
- ・熱電物性のマッピング計測

(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

- ・伸縮型熱電デバイスの試作および評価
- ・伸縮基板上金属配線の伸縮耐性の評価およびき裂進展メカニズムの解明

§ 2. 研究実施の概要

伝熱特性と機械的特性の関連に着目したメカノ・サーマル機能化の観点から、シリコン(Si)を基盤材料として低コストで応用に十分な性能指数を有する薄膜熱電材料とバルク熱電材料を開発し、さらにフレキシブルデバイス化してセンサー応用に繋げることを目的に、平成 29 年度は各要素技術の開発を進めた。

まず、ナノ構造設計指針を得るための解析においては、前年度から進めているナノドットを有する Si 構造の熱電特性の計算を発展させ

て、実際のナノ構造材料を念頭に、弾道性と拡散性が混在した準弾道輸送による熱電性能を計算できるようにした。その結果、電子とフォノンのトレードオフはナノドットの形状に繊細に依存し、ナノドットの大きさを最適化することで熱電性能指数の優位な向上が見込まれることがわかった。

上記の結果を踏まえて、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の熱伝導率最適化を行い、その最適化超格子膜の厚膜化を行なった。また、得られた超格子膜の解析から、熱伝導機構の中で「プロパゴン」の熱伝導率を効率的に低減できることを突き止めた。また、Si サンプルの内部応力を高められる成膜手法を見出した。これは、サンプル基板をスパッタ時のプラズマ近傍まで接近させることで実現した。薄膜の物性は異方性を有するため、面外方向の熱伝導率を計測する時間領域サーモフレクタンズに加えて、架橋マイクロデバイスを用いた定常計測法の開発を進め、膜厚 100 nm 以下の Si 単結晶膜を測定したところ、ナノ構造の熱伝導率の理解に繋がる知見を得ることができた。

ナノ構造熱電膜の今後の円滑な開発のためには、現在よりも作製できるサンプル数を多くする必要性が高まってきたため、既存のスパッタ装置に新たにコンビナトリアルサンプル交換機構、ガス安定化・放電機構、スパッタ成膜用電源を組み込み 2 台の成膜基盤構築を開始した。また、連続的に結晶構造が変化するコンビナトリアル材料を作製し、機械学習と組み合わせる(マテリアルズインフォマティクス)などして、高い熱電特性が得られる結晶構造の最適化が行なえる手法を確立する目的で、傾斜加熱材料変性装置を作製した。並行してマテリアルズインフォマティクスの技術開発も進め、ナノ構造内のそれぞれの原子の組成や構造そのものを記述子として、ベイズ最適化と熱電変換性能計算を組み合わせ膨大な候補構造の中から最適なものを同定する手法を実践した。手法の性能と効率を実証するために、グラフェンリボンにナノ細孔を導入する問題を例にとってこの手法を適用したところ、パワーファクターの増大と熱伝導度の低減という、互いに相反する複数の目的を同時に達成できることを確認した。

伸縮性フレキシブル基板への熱電デバイス実装に関しては、折り畳み伸縮を用いた延伸性を有する熱電デバイスの試作を行うとともに基礎特性の評価を行った。熱電素子を実装する平板部と、熱電素子同時を接続する折り畳み部からなり、折り畳み部が折れ曲がることにより、硬い熱電素子チップを実装する変形しない平板部は無変形のまま、熱電デバイス全体が伸縮することができる

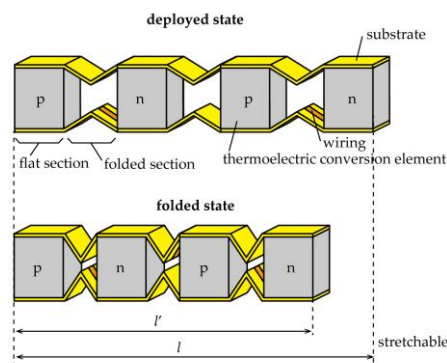


図1 折り畳み伸縮を利用した延伸性を有する熱電デバイスの概要

(図1参照). 縦4列横4列の計16個の熱電素子が並べた熱電デバイスの試作を行い, 延伸時で15 mm, 収縮時で12 mmの伸縮変形を実現した. また, 延伸時と収縮時の基礎特性を計測し, 変形による特性の変化を調査した. また, 延伸性を有する熱電デバイスを実現する場合には, 伸縮性を有する基板と金属配線を用いることが多いことから, 過度な変形や繰り返し変形をした際に生じる金属配線のき裂に関して分析を行った. その結果, 金属配線部と伸縮基板部の伸び剛性の比によって, き裂の進展形態が異なることを明らかにした.

<論文>

1. Takafumi Oyake, Lei Feng, Takuma Shiga, Masayuki Isogawa, Yoshiaki Nakamura, Junichiro Shiomi, “Ultimate confinement of phonon propagation in silicon nano-crystalline structure”, *Physical Review Letters*, **120**, 045901 (2018).
2. Takashi Kodama, Masato Ohnishi, Woosung Park, Takuma Shiga, Joonsuk Park, Takashi Shimada, Hisanori Shinohara, Junichiro Shiomi, Kenneth E. Goodson, “Modulation of thermal and thermoelectric transport in individual carbon nanotubes by fullerene encapsulation”, *Nature Materials*, **16**, 892–897 (2017).
3. Tomoya Koshi, Eiji Iwase, “Crack-configuration analysis of metal conductive track embedded in stretchable elastomer,” *Micromachines*, **9**, 130 (2018).