

科研进展

科研人员在利用能带汇聚提高NbFeSb基热电材料性能研究方面取得新进展

文章来源: 鞠楠洋 发布时间: 2022-02-27

近期, 中科院合肥研究院固体所计算物理与量子材料研究部张永胜研究员课题组在调控NbFeSb基Half-Heusler (HH) 热电材料性能方面取得新进展, 该研究不仅为实验提供新的HH研究体系, 也为制备具有优异性能的HH热电材料提供了一种能带工程方法。相关研究结果发表在Journal of Materials Chemistry A 期刊上。

热电材料可以利用温差实现热能与电能直接转换, 具有18电子的HH材料因其具有优良的稳定性和半导体行为成为一种被广泛研究的高温区热电材料。在众多的HH材料中, NbFeSb是一种典型的p型高性能热电材料, 传统提高NbFeSb基化合物热电性能的方法侧重于降低热导率。在电学性能提升方面, 由于NbFeSb中费米能级附近的态密度主要由过渡金属的d轨道贡献, 因此通过能带工程增强HH化合物的热电性能并不容易。

为此, 张永胜研究员课题组通过将Fe(Nb)与其在元素周期表中的近邻元素进行替换(用Mn和Co替换Fe或用Zr和Mo替换Nb), 形成具有17和19电子的HH混合的化合物。通过团簇展开方法对17和19电子HH的混合体系(NbMn_{1-x}Co_xSb和Zr_{1-x}Mo_xFeSb)进行研究, 理论设计出了两种具有18电子的新型有序HH材料: Nb₄Mn₂Co₂Sb₄和Zr₂Mo₂Fe₄Sb₄。对新型HH体系的能带结构分析, 发现17电子的NbMnSb与19电子的NbCoSb在价带顶(L点)实现能带汇聚, 导致Nb₄Mn₂Co₂Sb₄具有很高的能带简并度(N_{vL}=16), 从而使材料的Seebeck系数和功率因子大幅度的提高, 且高于传统的NbFeSb材料。同时, 得益于复杂的声子结构, 两种混合体系的热导率都低于NbFeSb。综合分析电学和热学性能, 计算得到Nb₄Mn₂Co₂Sb₄在1000K时p型和n型的zT值分别高达0.72和0.62。该研究结果表明, 将17电子和19电子的HH化合物混合形成18电子化合物不仅是开发具有高热电性能的新型HH材料的有效方法, 也是实现高效能带工程的有效途径。

上述工作得到了国家自然科学基金的资助, 所有计算在中科院超算中心合肥分中心完成。

文章链接: <https://doi.org/10.1039/D1TA09660E>。

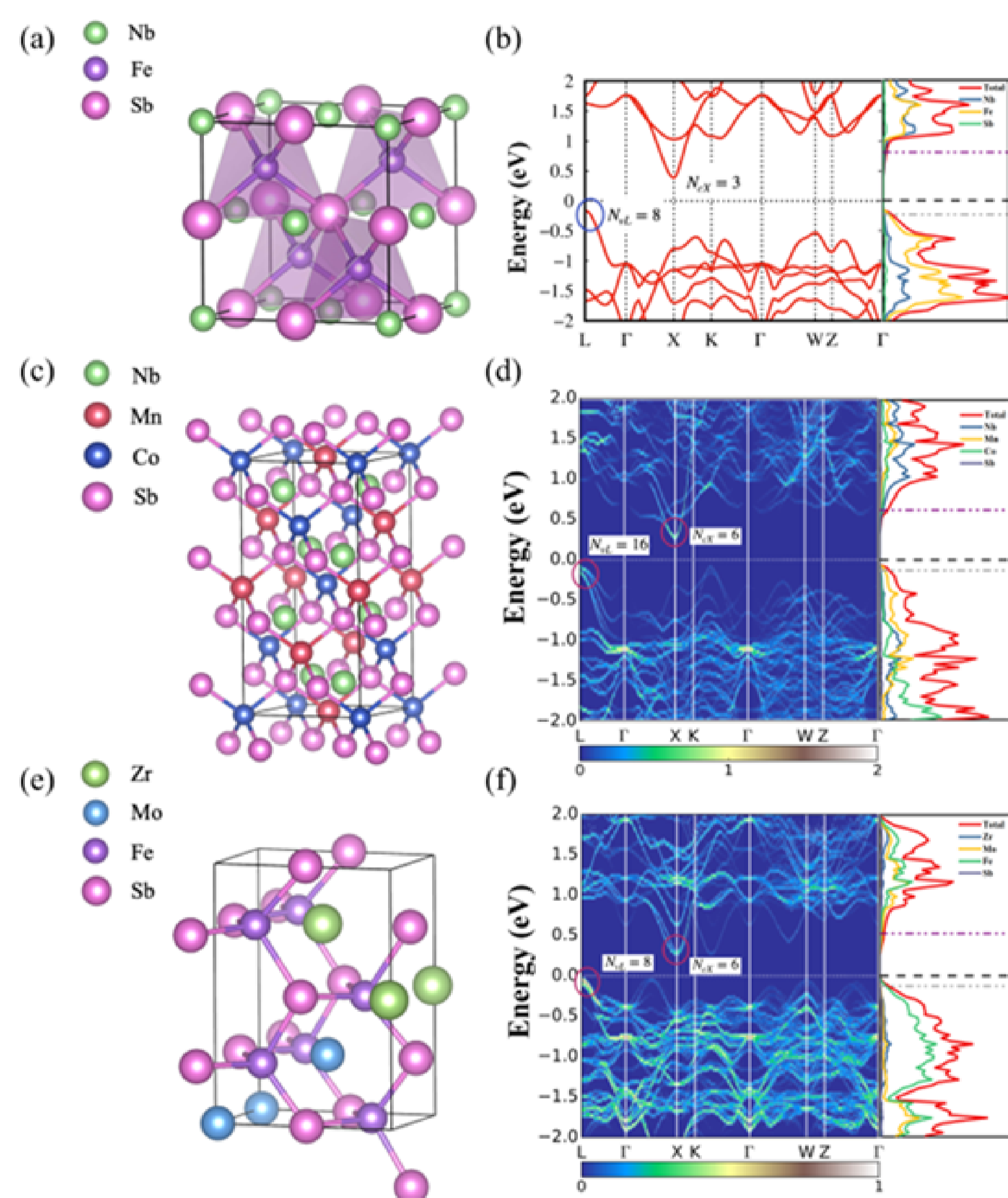


图1. NbFeSb, Nb₄Mn₂Co₂Sb₄和Zr₂Mo₂Fe₄Sb₄的晶体结构(a,c,e)及其电子结构(b,d,f)。

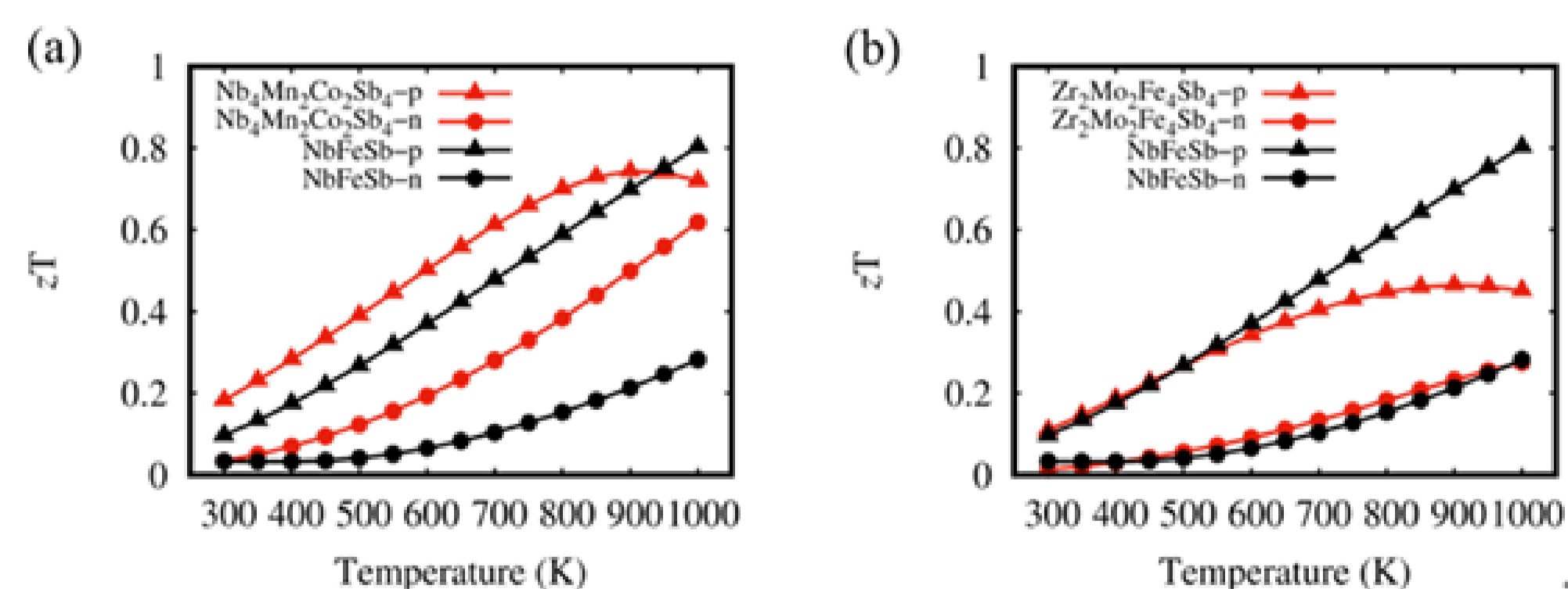


图2. Nb₄Mn₂Co₂Sb₄ (a中红线), Zr₂Mo₂Fe₄Sb₄ (b中红线)和NbFeSb (黑线)的zT值。三角形和圆形分别表示p型和n型的热电性能。

科学岛报

更多



科学岛视讯

更多

