



合肥研究院在新型硒化物热电性能调控方面取得进展

2022-07-11 来源：合肥物质科学研究院

【字体：大 中 小】



语音播报



近期，中国科学院合肥研究院固体物理研究所能源材料与器件制造研究部研究员秦晓英课题组在Cu₂SnSe₃材料体系热电性能调控方面取得进展。研究人员通过在Cu₂SnSe₃化合物中构建高密度堆垛层错与内生纳米针（nanoneedle）来散射中低频声子并大幅提升其热电性能，使得Cu₂Sn_{0.88}Fe_{0.06}In_{0.06}Se₃-5wt.%Ag₂Se样品的热电优值ZT在848K时可达1.61。相关成果发表在Nano Energy上。

热电技术作为有望解决能源问题的新途径，近年来引起广泛关注。热电材料的转化效率由无量纲量热电品质因子ZT决定， $ZT = S^2\sigma T / (\kappa_C + \kappa_L)$ ，其中S为热电势， σ 为电导率，T为绝对温度， κ_C 和 κ_L 分别是载流子和晶格对热导率的贡献。Cu₂SnSe₃是一种组成元素廉价、环境友好的新型热电材料，但其较高的热导率和较低的功率因子PF($PF = S^2\sigma$)限制了其ZT值的提升。目前对于Cu₂SnSe₃热电性能的优化主要是通过Sn位掺杂提高空穴浓度，然而这种掺杂会导致热电势的大幅下降和电子热导率的显著提升，使得ZT值的提升有限。此外，大多数研究只通过引入点缺陷或者球形纳米颗粒来散射声子，很少有利用堆垛层错或者具有大纵横比的纳米第二相来显著散射材料中的中低频声子(MLFPs)。

由于多元合金/化合物里MLFPs主导热运输，因此有效散射MLFPs是降低晶格热导率 κ_L 的关键。研究人员通过元素掺杂降低Cu₂SnSe₃的层错能（图1）以及利用Ag₂Se与Cu₂Sn_{0.88}Fe_{0.06}In_{0.06}Se₃的固相反应来分别引入高密度的堆垛层错和以[112]为轴的内生AgInSnSe₄纳米针（图2和图3）来有效散射MLFPs。第一性原理计算表明，纳米针形成的内因是其(1 1 2)晶面具有高的表面能（图1）。理论分析发现，纳米针的纵横比是一个调控散射声子的额外自由度，通过改变纵横比可以散射不同频率的声子。平均径向尺寸为50nm、纵横比等于10的纳米针可以和堆垛层错一样显著散射MLFPs（图4），结合点缺陷及其他散射机制实现对Cu₂SnSe₃声子的全频谱散射，使其晶格热导率在848K时降低至理论最小值 $\sim 0.2 \text{WK}^{-1} \text{m}^{-1}$ 。与此同时，研究表明在Cu₂SnSe₃的Sn位掺Fe以及Cu位掺Ag可以增加价带顶的态密度，并且Sn位掺Fe还可以构建额外的空穴传输通道（图5），这使其功率因子提升了3倍，在800K时达到了 $12 \mu \text{Wcm}^{-1}$



1K^{-2} 。Cu₂SnSe₃的最高ZT值在848K时可达到1.61，是目前本体系报道的最高值（图6）。相关工作为Cu₂SnSe₃及其他热电材料的热电性能调控提供了新思路。

[论文链接](#)

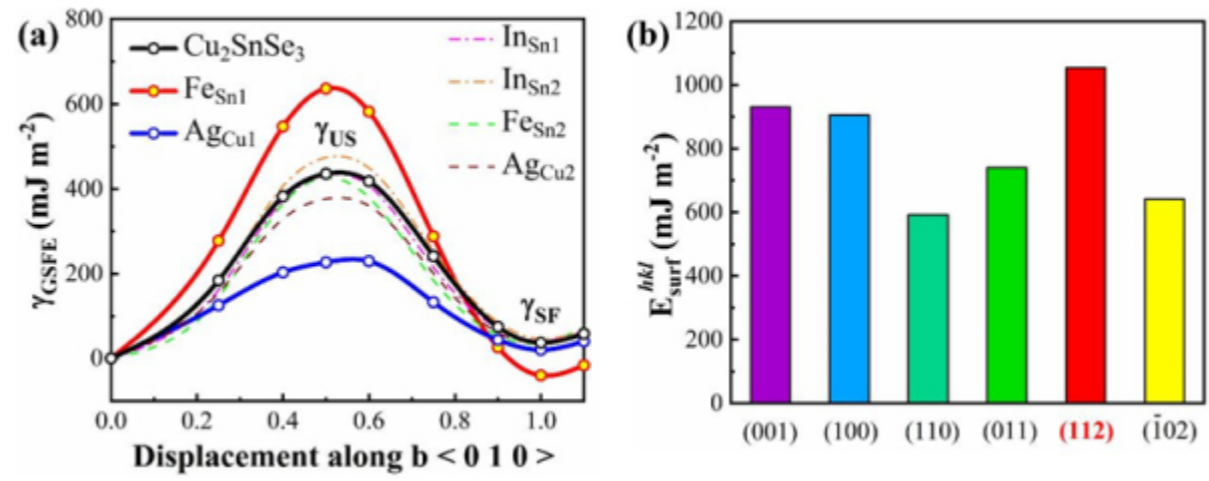


图1 (a) Cu₂SnSe₃的广义层错能和 (b)AgInSnSe₄的表面能

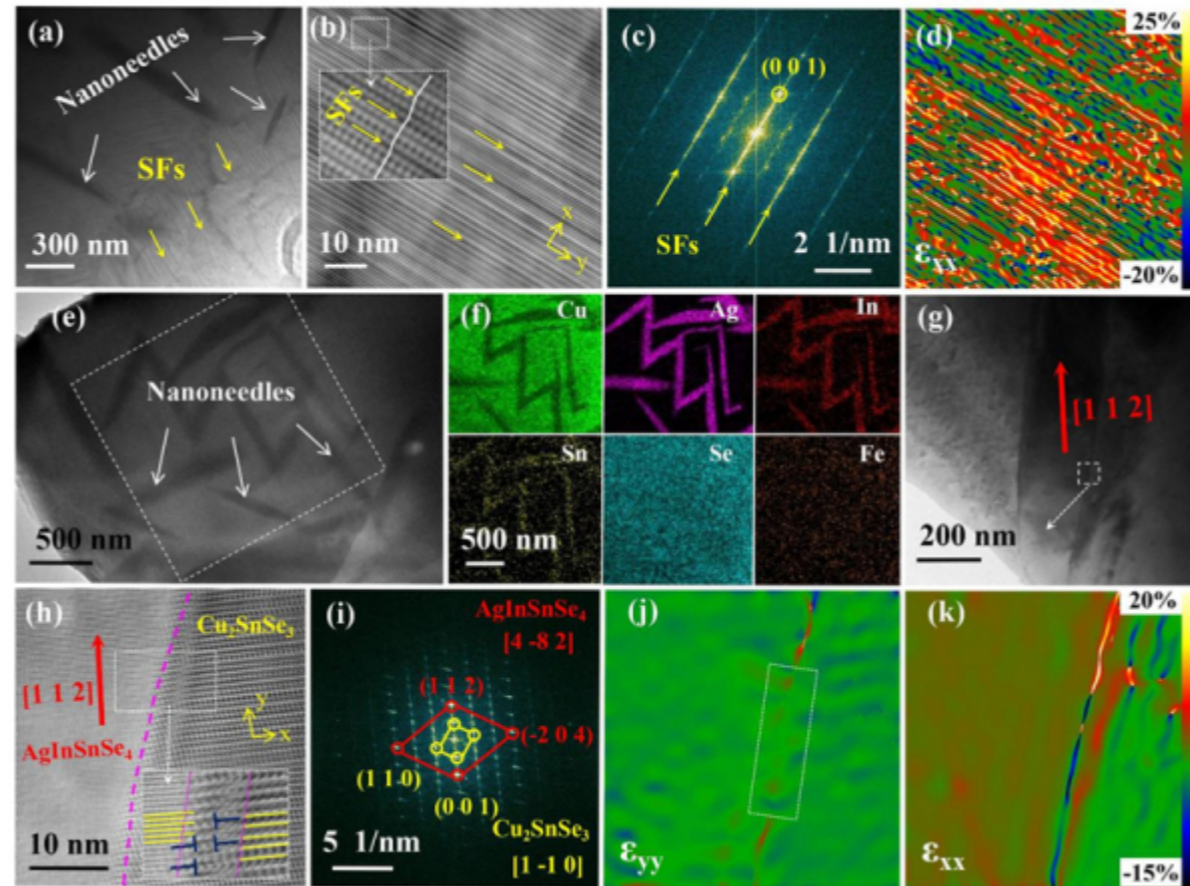


图2 微结构表征及应变分析

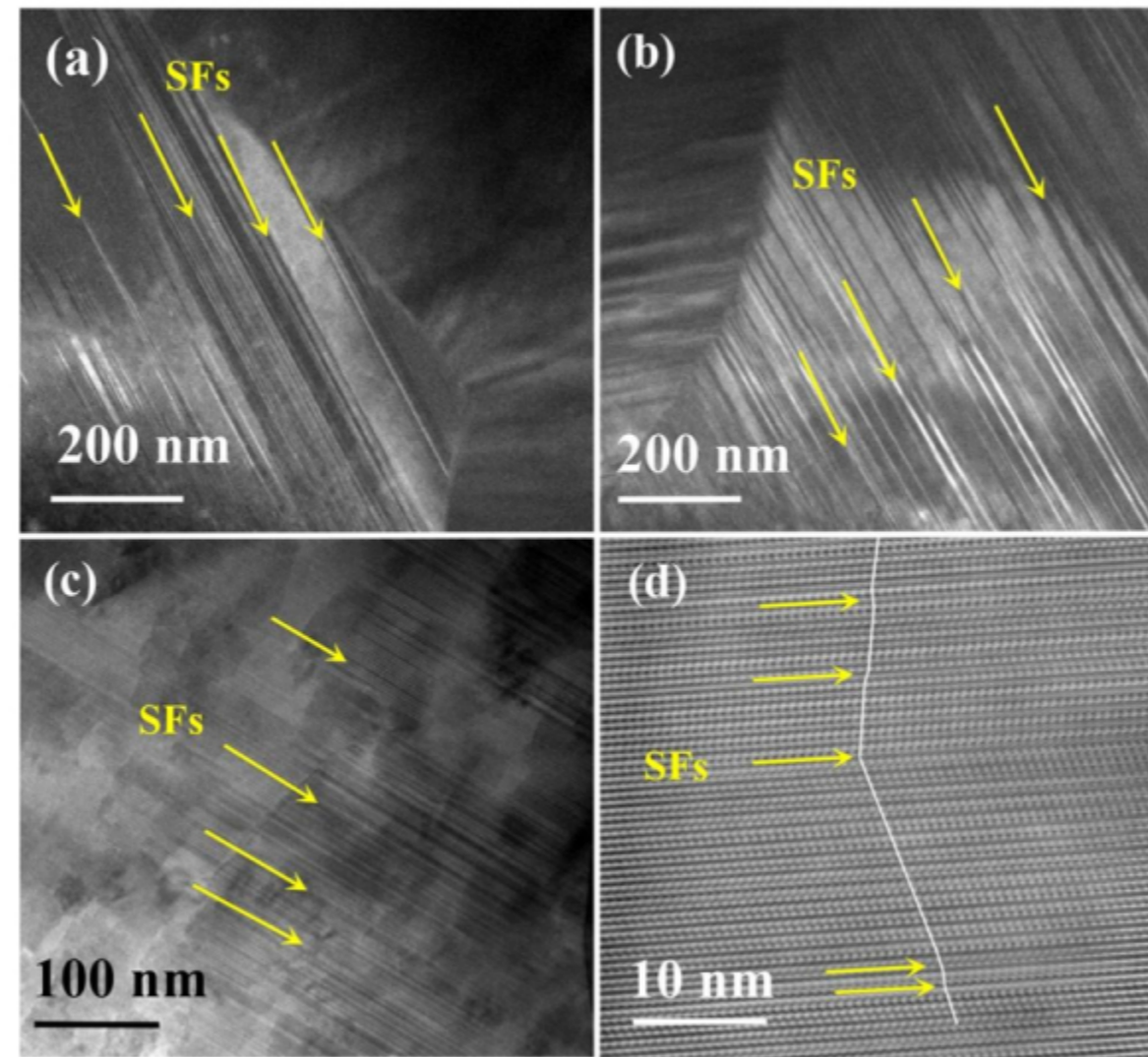


图3 层错的微观形貌



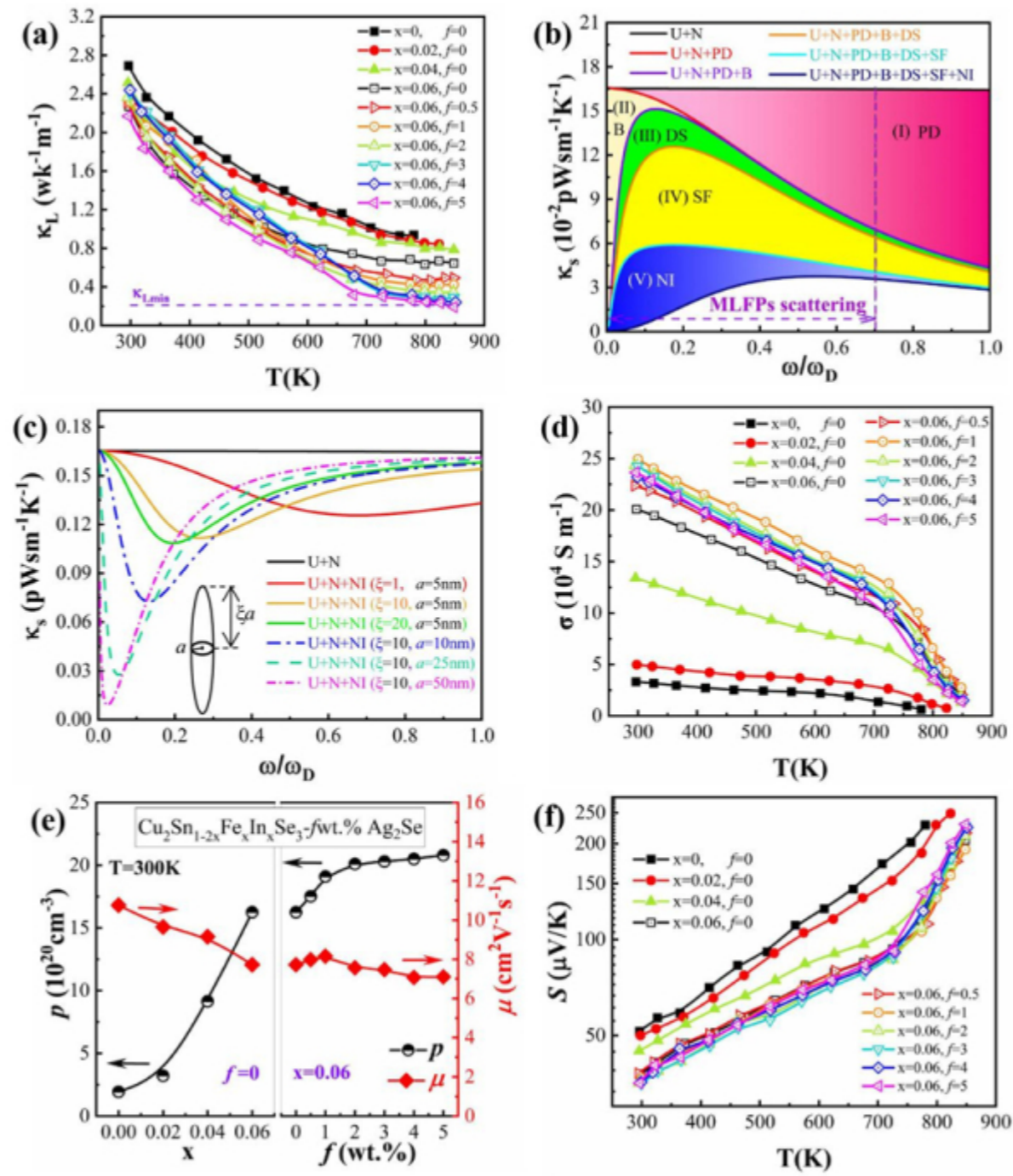


图4 热电输运性质及分析



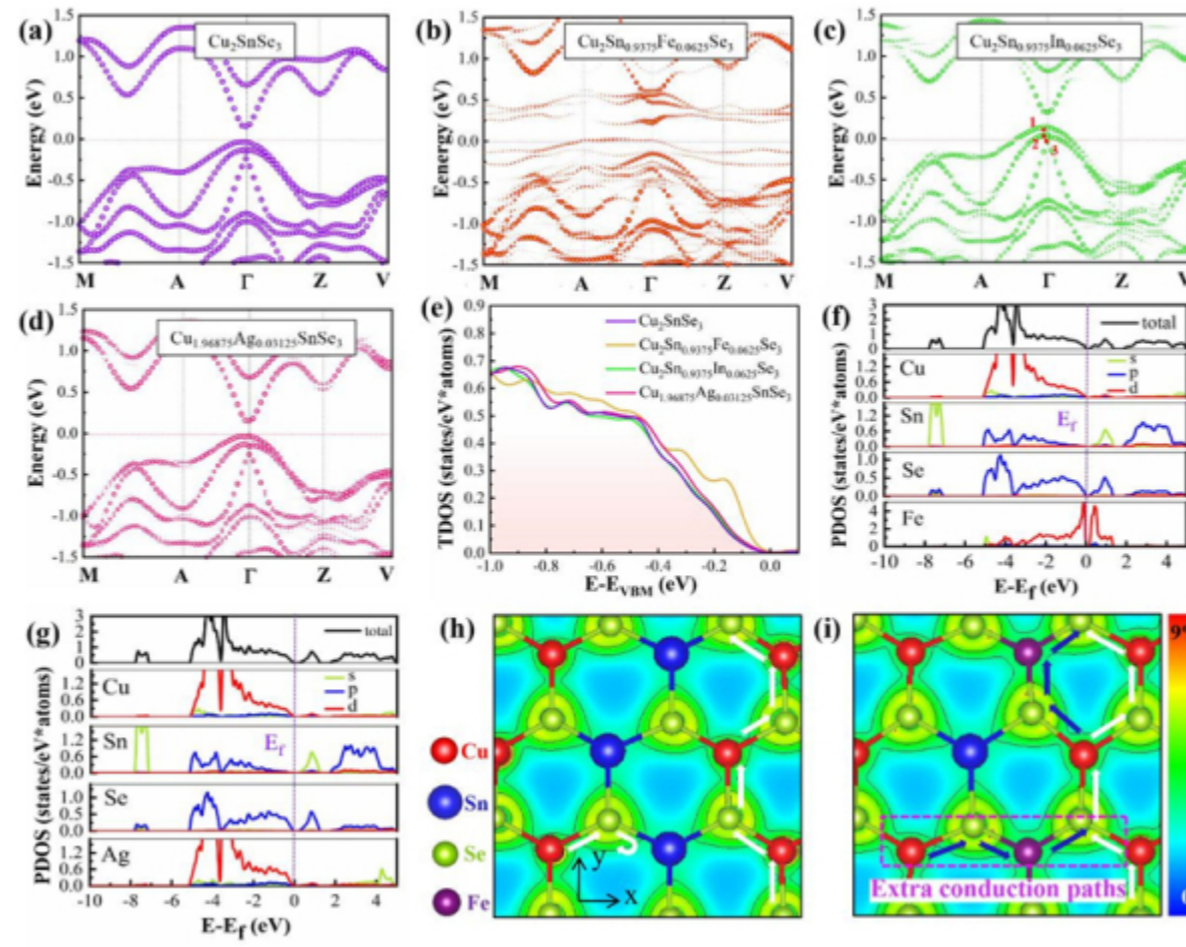


图5 电子结构计算



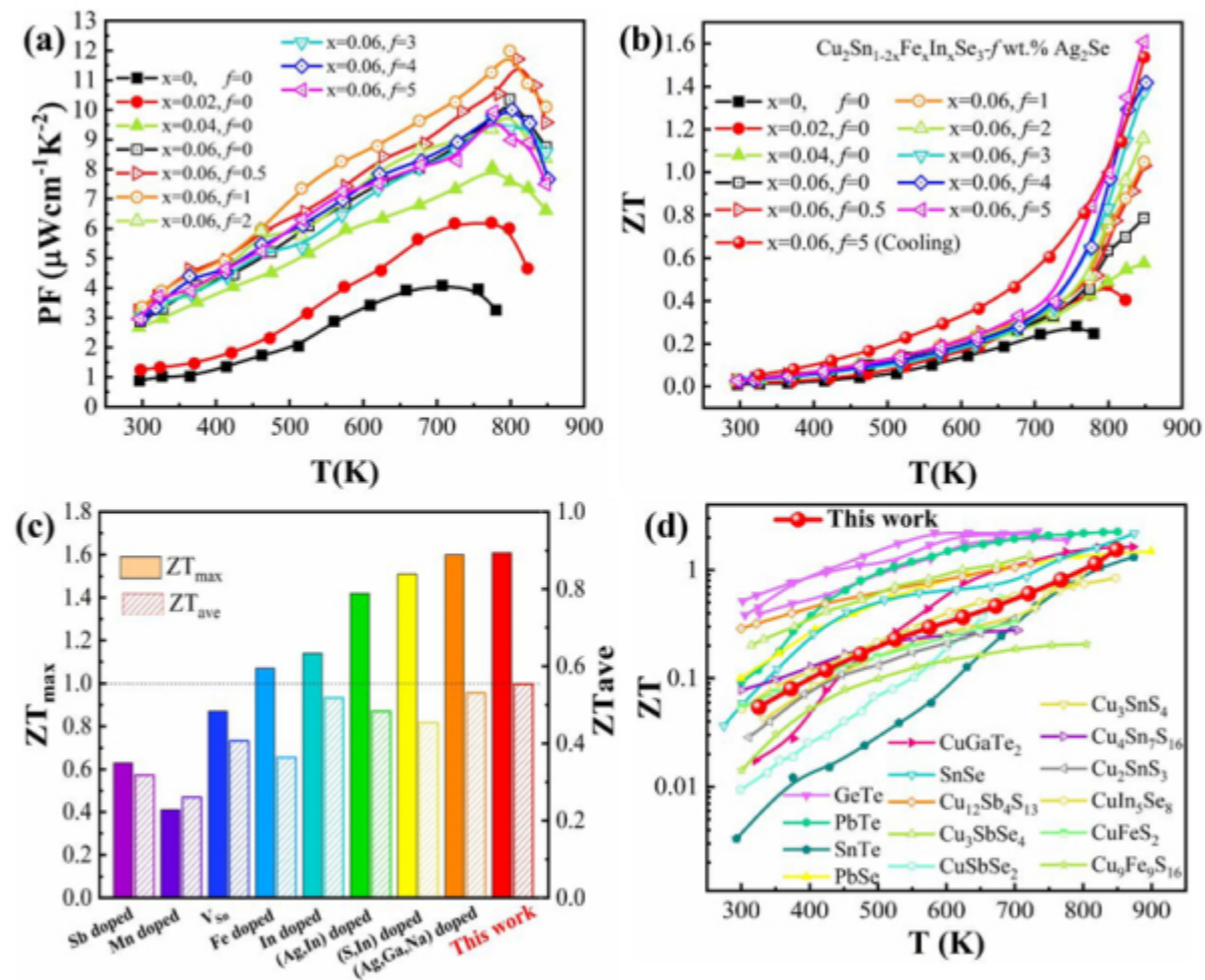


图6 功率因子及热电优值

责任编辑：江澄

打印



更多分享

» 上一篇：室管膜瘤恶性与复发机制研究获进展

» 下一篇：上海天文台旋转天体内部动力学研究取得进展



扫一扫在手机打开当前页

编辑部邮箱: casweb@cashq.ac.cn

