

科研进展

科学岛团队在新型硒化物热电性能调控方面取得新进展

文章来源：明洪新 发布时间：2022-07-06

近期，中科院合肥研究院固体物理研究所能源材料与器件制造部秦晓英研究员课题组在Cu2SnSe3材料体系热电性能调控方面取得新进展。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了其热电性能，使得Cu2Sn0.88Fe0.06In0.06Se3-5wt.%Ag2Se样品的热电优值ZT在848K时高达1.61，相关研究结果发表在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热电品质因子ZT决定，ZT=S^2σT/(κc+κl)，其中S为热电势，σ为电导率，T为绝对温度，κc和κl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^2σ)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，很少利用堆垛层错或者具有大纵横比的纳米第二相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κl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Cu2Sn0.88Fe0.06In0.06Se3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(如图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应是其(112)晶面具有高的表面能(如图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(如图4)，结合点缺陷及其它散射机制实现对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~0.2Wm^-1K^-1。与此同时，研究表明在Cu2SnSe3的Sn位掺杂Fe以及Cu位掺杂Ag可以增加价带顶的态密度，并且Sn位掺杂Fe还可以构建额外的空穴传输通道(如图5)，这使其功率因子提升了3倍，在800K时达到了12μWcm^-1K^-2。最终，Cu2SnSe3的最高ZT值在848K时可达1.61，是目前本体系报道的最高值(如图6)。相关工作为国家自然科学基金的支持，理论计算在中科院超算中心合肥分中心完成。

该工作得到国家自然科学基金的支持，理论计算在中科院超算中心合肥分中心完成。

文章链接: https://authors.elsevier.com/c/1f14G7soS82Jzk

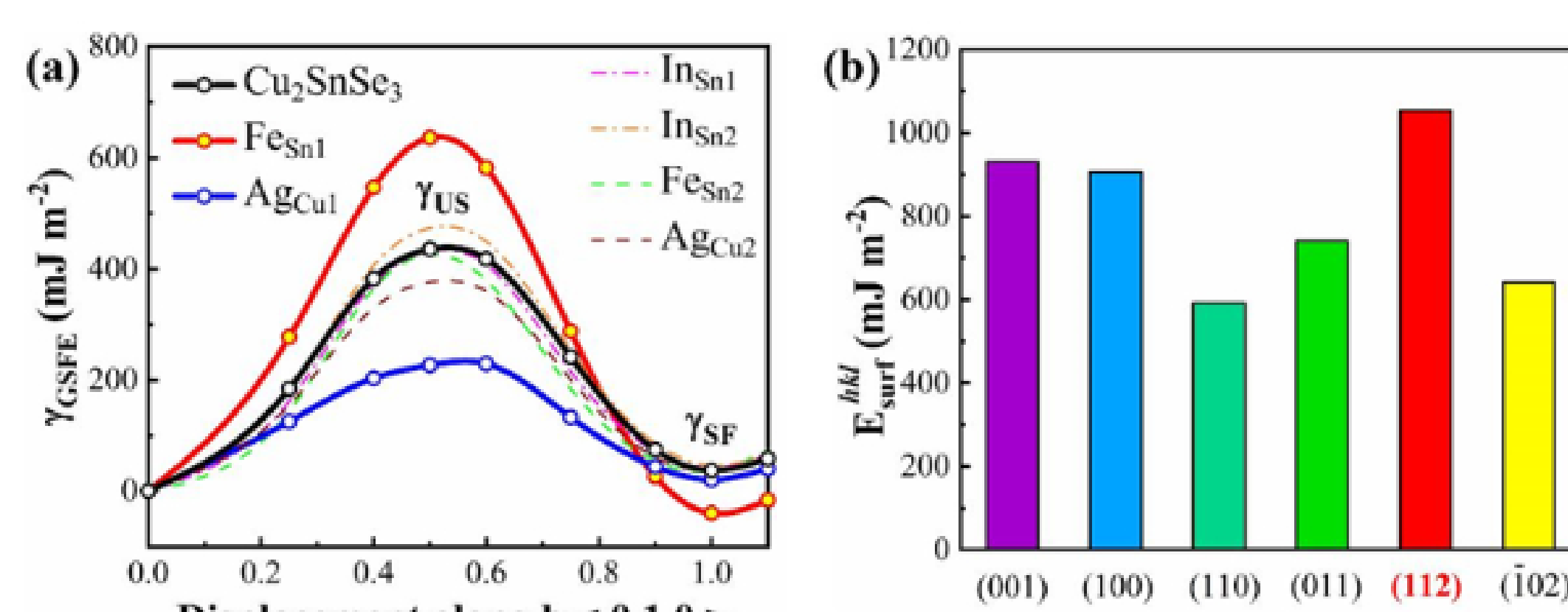


图1. (a) Cu2SnSe3的广义层错能和(b) AgInSnSe4的表面能。

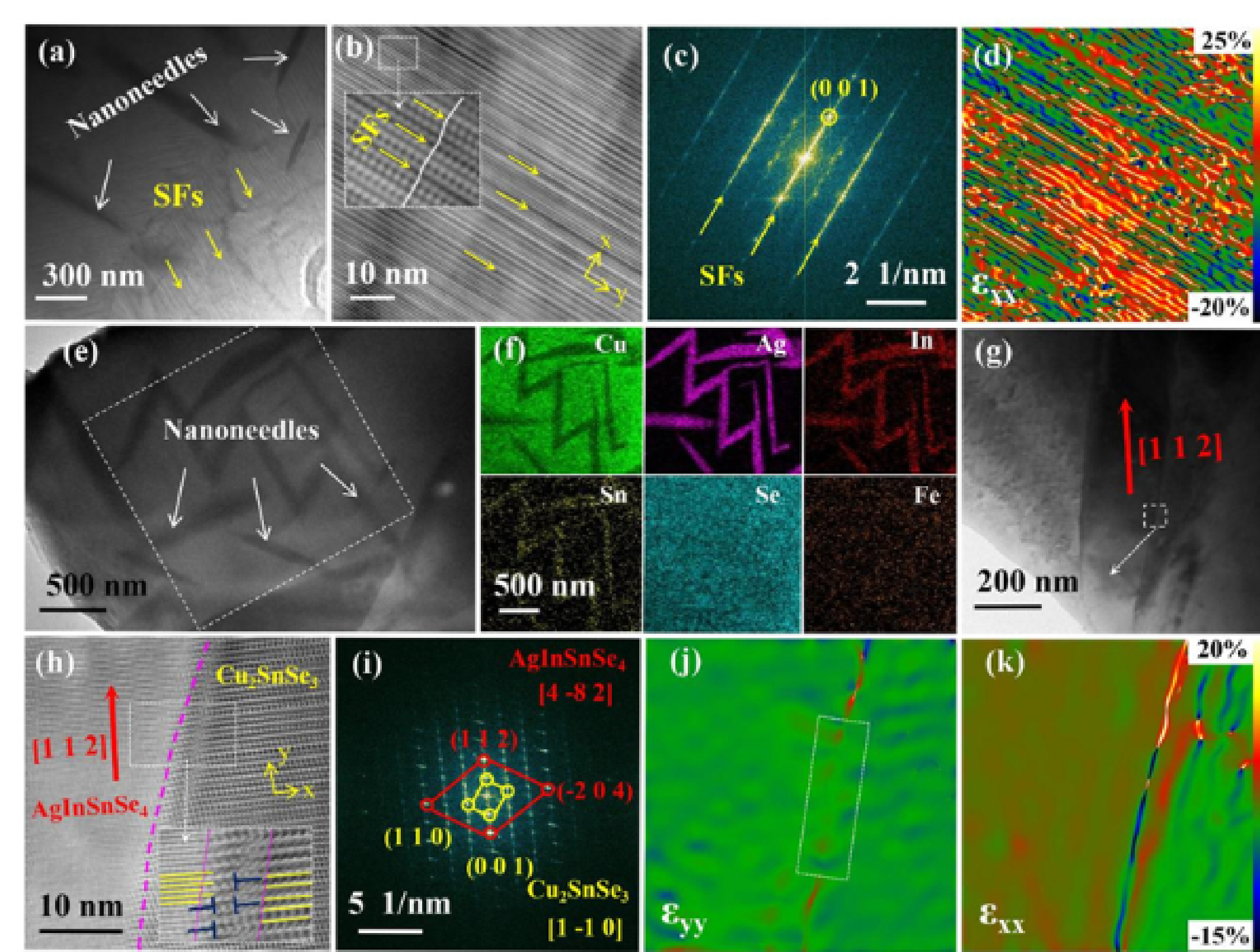


图2. 微结构表征及应变分析。

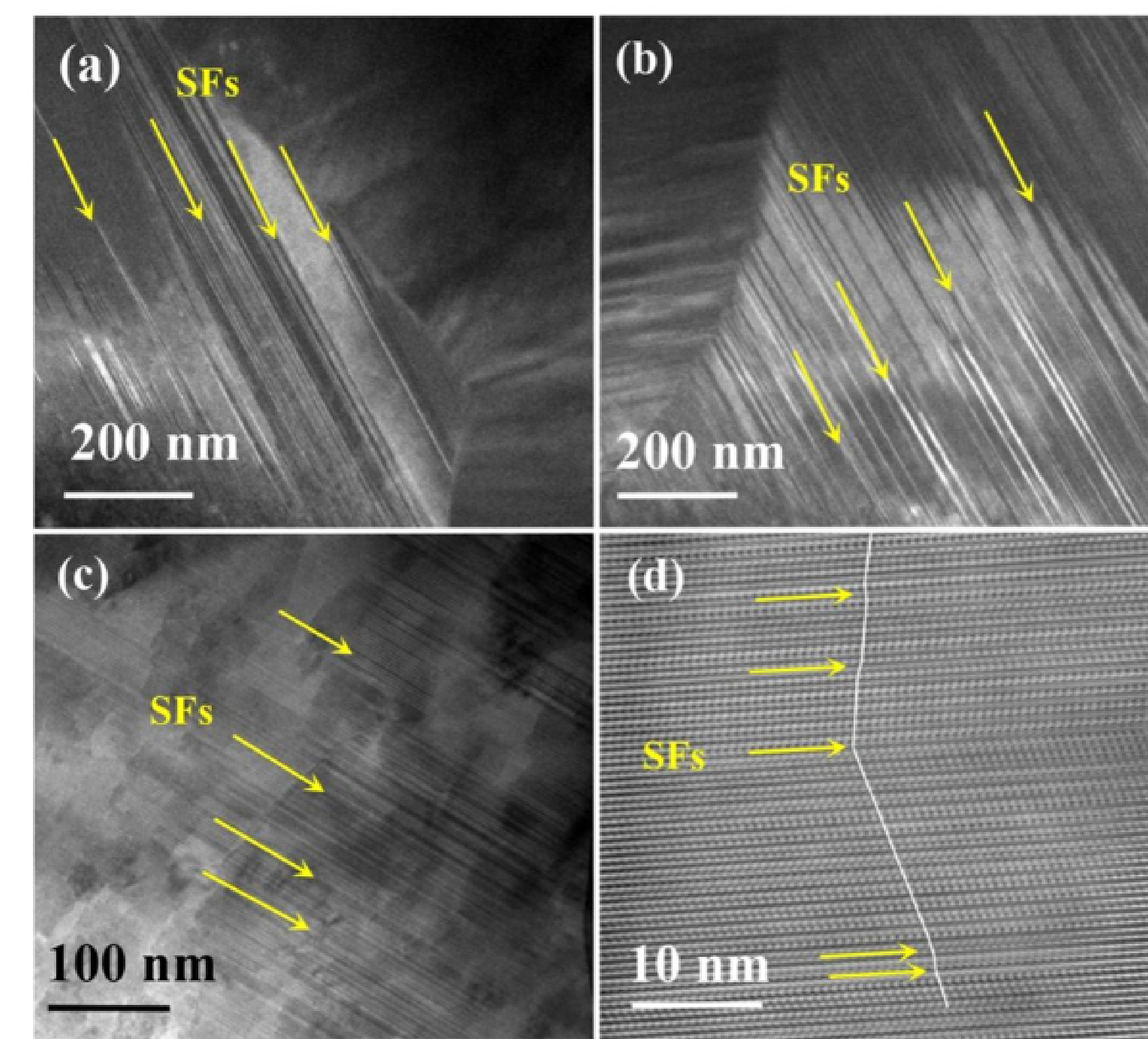


图3. 层错的微观形貌。

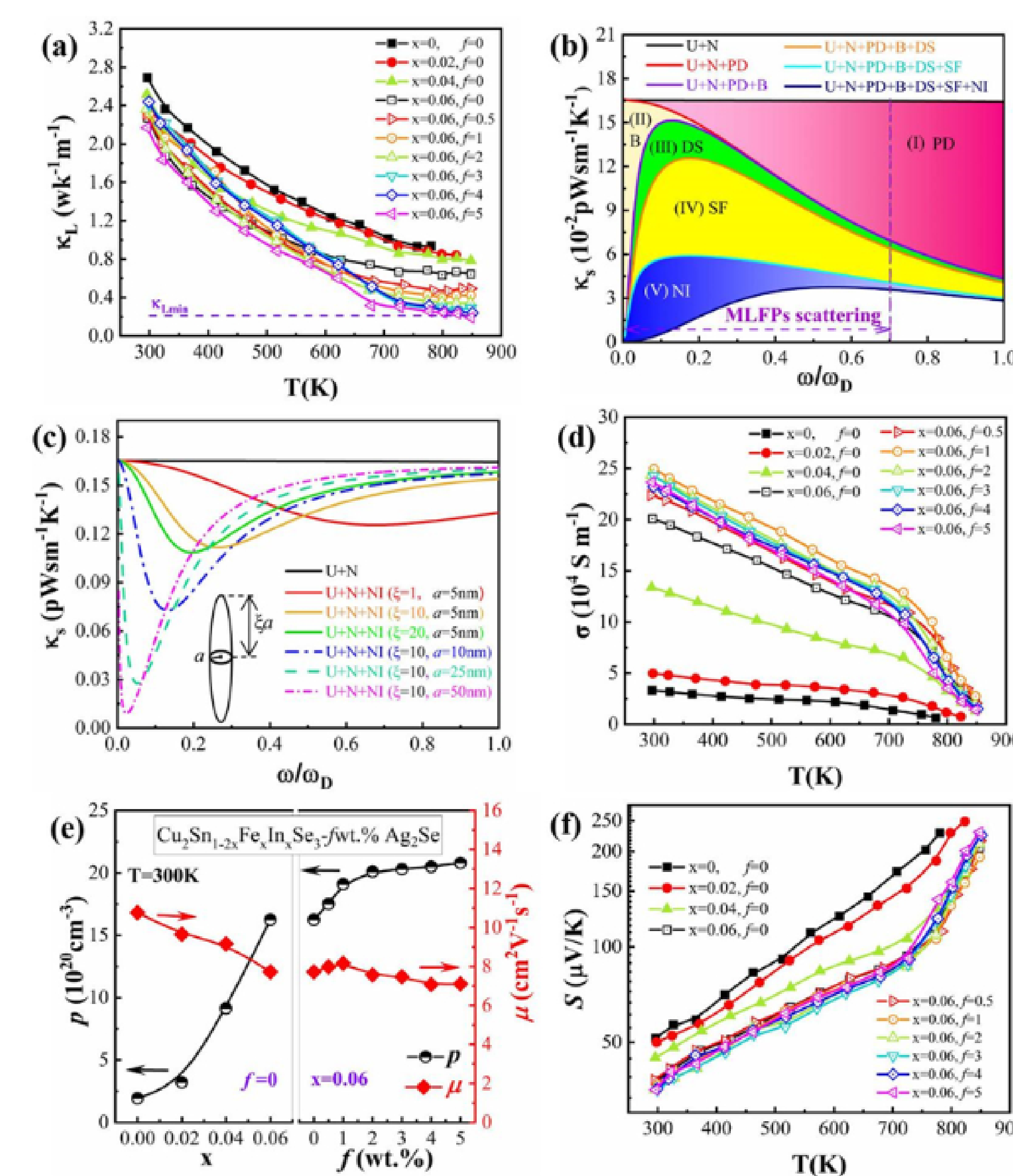


图4. 热电输运性质及分析。

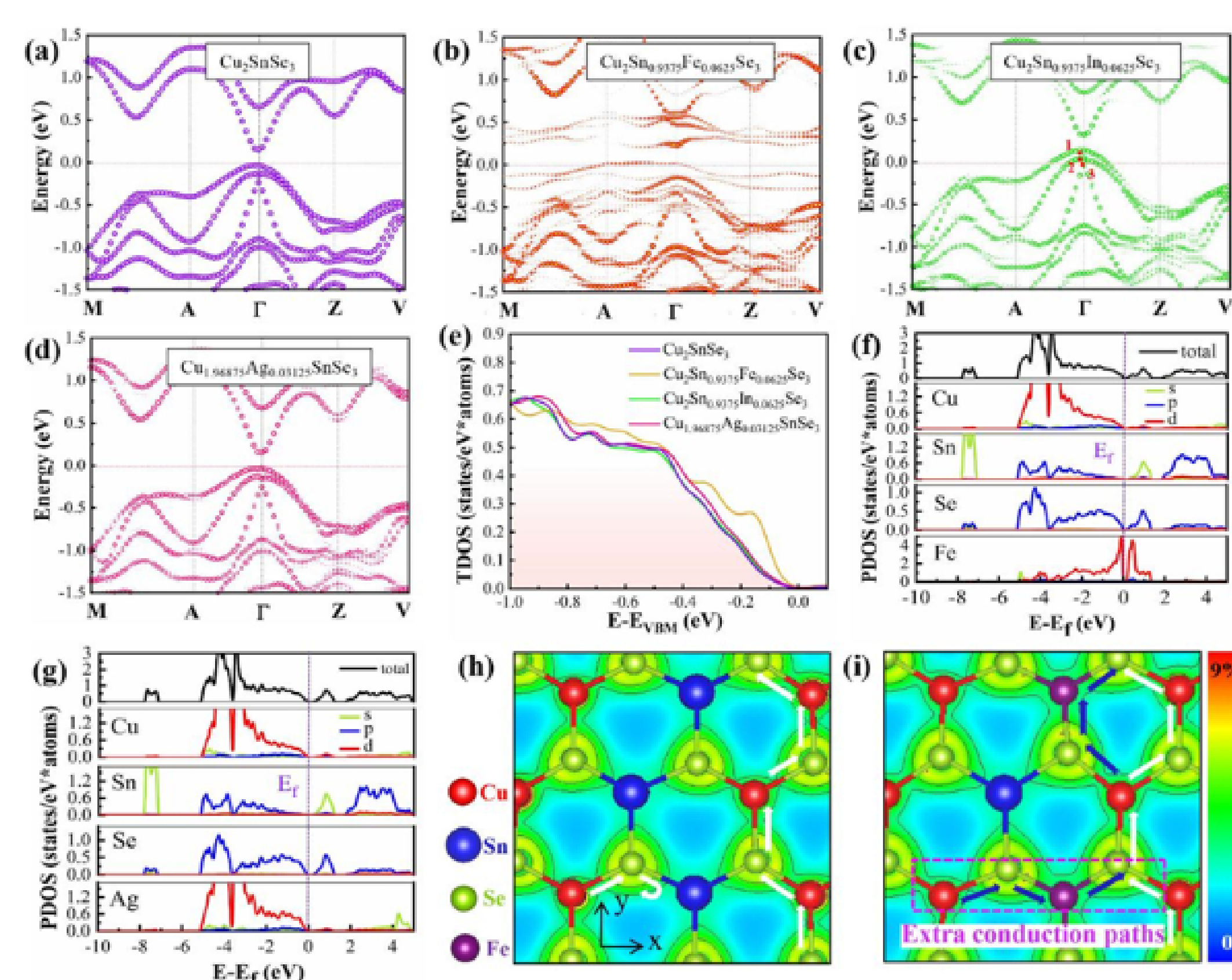


图5. 电子结构计算。

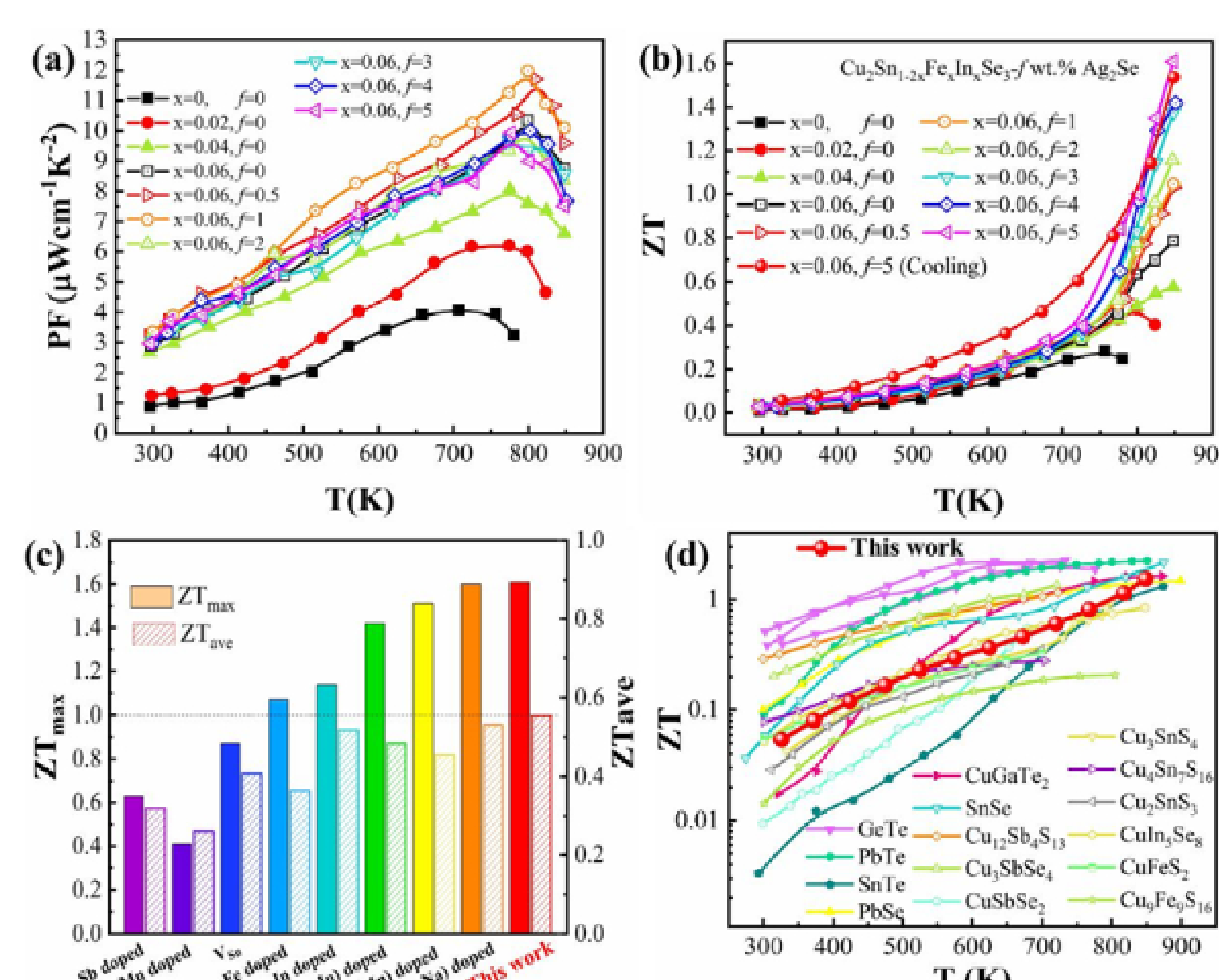


图6. 功率因子及热电优值。

科学岛报

更多



科学岛快讯

更多

