

宁波材料所热电材料能带工程和性能优化研究获系列进展

热电材料是一类能够实现热电与电能直接相互转换的功能材料，可用于半导体制冷、高精度温控和温差发电。为提升热电转换效率，需要在保持较低热导率的基础上尽可能提高材料的功率因子 S^2 。然而Seebeck系数 S 和电导率 σ 之间具有本征关联性，通常难以实现功率因子的大幅度提升。利用“能带工程”能够在一定程度上实现 S 和 σ 的解耦，以获得较高的功率因子和转换效率。围绕几类环境友好的新型热电材料，中国科学院宁波材料技术与工程研究所光电功能材料与器件团队通过理论与实验紧密结合，在能带工程和性能优化方面开展了一系列有特色和成效的研究工作。

该团队研究人员以近室温区新型热电材料 -MgAgSb 为例，通过理论先行开展能带工程设计，并有力推动了相关实验研究进展。由基础电子结构理论可知，共价键结合的半导体中带隙多来自于成键态与反键态的分裂，其价带或导带具有典型的成键态或反键态特征。研究人员通过探索“掺杂元素能级—成键/反键态强度—能带色散”之间的内在关联，为 -MgAgSb 多能谷简并设计了多种掺杂方案。这种能带工程设计思路极具操作性，不仅适用于 -MgAgSb ，也可为其其它热电材料能带调控提供理论指导。该研究工作发表在《先进能源材料》(Adv. Energy Mater. 2017, 1700076)。

SnTe 有望替代 PbTe ，成为一类环境友好型中温区热电材料。在前期工作中，该团队已通过“价带简并”和“共振能级”两种能带工程机理实现其热电性能优化。他们最近研究发现， SnTe 中共振态能级位置和轻/重价带能量差具有良好的匹配性，这预示上述两种机理可在 SnTe 中协同作用，实现较大温区内热电性能的全面提升。研究人员进一步指出，实现两种机理协同作用的共掺方案是较低浓度的 In 和适量的 Mg 、 Mn 或 Cd 等元素。实验研究证实了这些理论预测，相关研究工作发表在ACS Energy Lett. 2017, 2: 1203和J. Mater. Chem. C 2017, doi: 10.1039/C7TC02162C等。

SnSe 是近年来被报道的高性能中温区热电材料，然而其机械性能较差。该团队研究人员自主开发了“水平梯度凝固法”，获得了高质量大尺寸 SnSe 单晶，相关工作发表在J. Cryst. Growth 2017, 460: 112和J. Alloys Compd. 2017, 712: 857。研究人员同时还制备了 SnSe 多晶，以克服单晶生长条件苛刻、制备周期较长等缺点，并通过掺杂设计来改善其热电性能。例如 PbBr_2 掺杂获得性能优异的n型 SnSe 多晶， Ag 掺杂获得性能优异的p型 SnSe 多晶。相关研究工作发表在RSC Adv. 2017, 7: 17906和NPG Asia Mater. 2017等。

以上工作获得了国家自然科学基金(11234012, 11404350, 11404348)、浙江省杰出青年基金(LR16E020001)和宁波市科技创新团队(2014B82004)等项目支持。

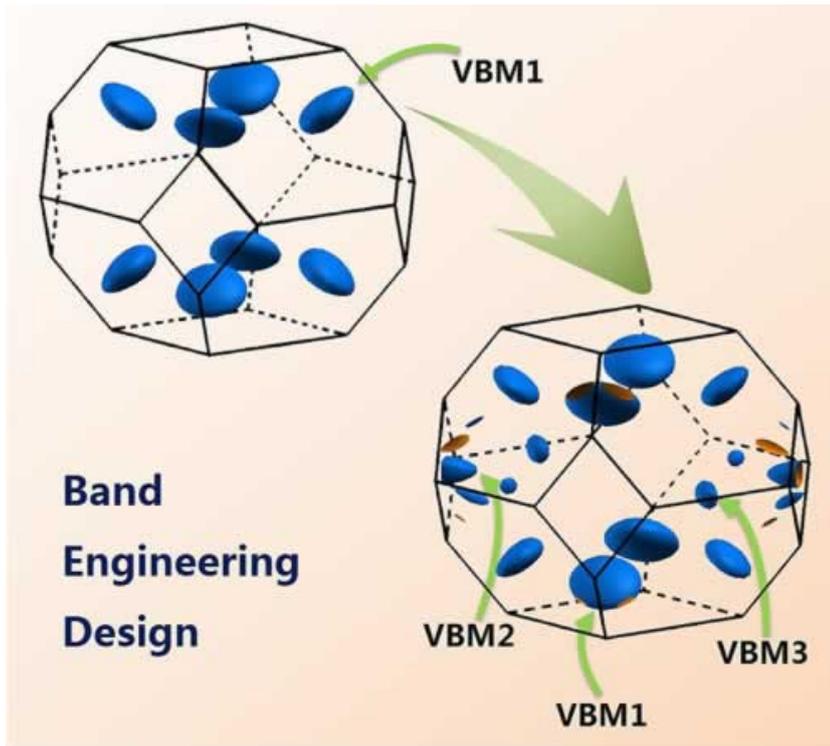


图1. α -MgAgSb中能带工程示意图

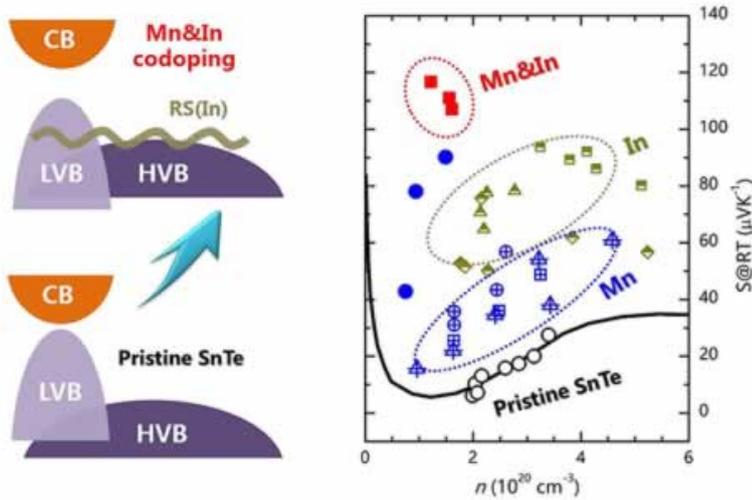


图2. In&Mn共掺SnTe能带工程示意图及实验结果

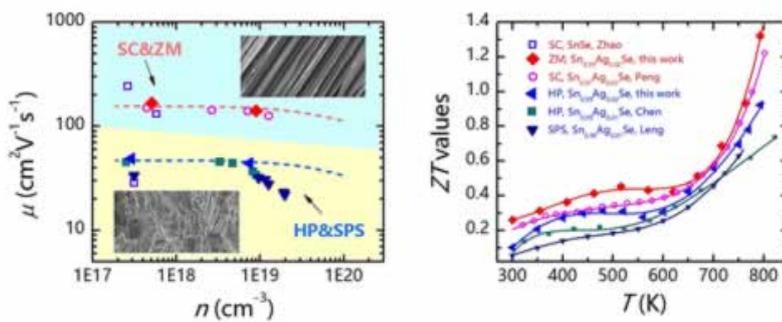


图3. Ag掺杂SnSe织构化多晶的迁移率和ZT值

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/111086.html>