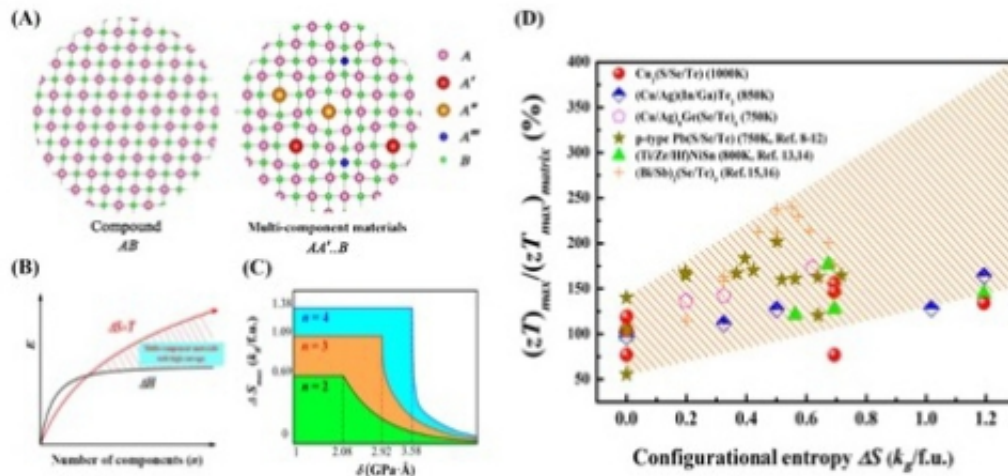
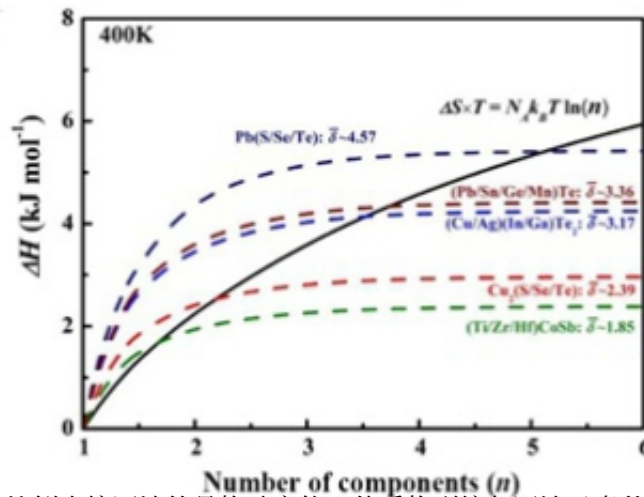


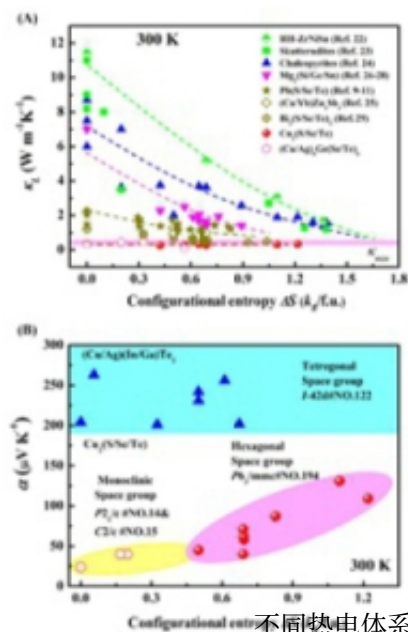
上海硅酸盐所等在多元高熵热电材料快速筛选和设计中取得进展



多元高熵热电材料的示意图（图A-C）以及熵对热电优值ZT的优化（图D）



多元等比例高熵固溶的晶格畸变能、体系构型熵与固溶元素种类的关系



不同热电体系中材料的热导率（图A）和塞贝克系数（图B）与熵值的关系

近年来，以加快材料研发进程为目标的“材料基因工程”通过有效整合材料计算、材料合成和表征及数据库技术，快速甄别决定材料性能的关键基本因素，实现科学化的“系统寻优”，完成材料的性能优化和新材料的设计与探索，突破了以往大量经验积累和简单试错为特征的“经验寻优”的传统方式，降低了材料研发的周期和成本。以热电能量转换材料为例，传统的研究方法涉及大量的结构和成分优化，时间周期长，因而采用“材料基因工程”的研究方法尤为重要。

最近，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员史迅、陈立东与南方科技大学教授张文清等带领的科研团队，提出了采用材料中的“熵”这一具有类似基因特性的基础参量作为热电材料的性能表征参数，从而实现对多元热电材料的快速筛选，发展了计算多元热电材料体系熵的模型与方法，并结合计算与实验对一系列多元体系进行了筛选、设计和验证，获得了多种热电性能大幅提升的多元高熵热电材料。该项工作是材料基因工程研究方法在热电材料上应用的重要体现，丰富了“材料基因工程”理念的研究领域和内容。相关研究发表在《先进材料》杂志（Advanced Materials, adma.201702712R2）上。

在多元热电材料体系中，构型熵取决于体系中的固溶元素种类和各自的固溶度，而能否形成具有一定固溶元素种类和固溶度的关键在于体系的固溶焓与构型熵之间的竞争。研究团队首先建立了弹性力学模型对系列二元和多元热电材料体系的固溶特性进行了评估，获得了决定体系构型熵上限的本征固溶因子 d 判据，根据该判据可对各种热电材料体系能否实现高熵固溶进行有效筛选，如 $\text{Cu}_2(\text{S}/\text{Se}/\text{Te})$ 、半赫斯勒合金多元热电材料可以实现3元的等比例高熵固溶，类金刚石结构 $(\text{Cu}/\text{Ag})(\text{In}/\text{Ga})\text{Te}_2$ 和 $(\text{Pb}/\text{Sn}/\text{Ge}/\text{Mn})\text{Te}$ 族化合物可实现4元等比例高熵固溶。

在此基础上，作为类似基因特性的熵可从电子和声子的输运等多方面指引热电材料的性能优化。首先由于熵的增加，晶格中的结构无序和畸变也随之大幅增加，进而显著降低了晶格热导率。对于初始热导率较高的体系（如类金刚石化合物），熵导致的热导率的降低更为显著。其次，熵的增加导致晶体结构的局部特征无序增多，从而使得材料具有更高的宏观晶体对称性，进而增加材料的能带简并度并改善电学性能。例如 $\text{Cu}_2(\text{S}/\text{Se}/\text{Te})$ 基体化合物室温时为单斜结构，对它们进行多元化增加材料的熵后，其晶体结构转变为具有较高对称性的六方结构，其塞贝克系数在相同载流子浓度下提升了3倍以上。基于上述效应，多元高熵类金刚石化合物和 $\text{Cu}_2(\text{S}/\text{Se}/\text{Te})$ 热电材料的最佳热电优值 ZT 分别提升至1.6和2.23。

该研究工作得到了国家基础研究计划、国家重点研发计划材料基因组专项、国家自然科学基金、中科院重点部署项目、上海市科委重大项目等的资助和支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/113553.html>