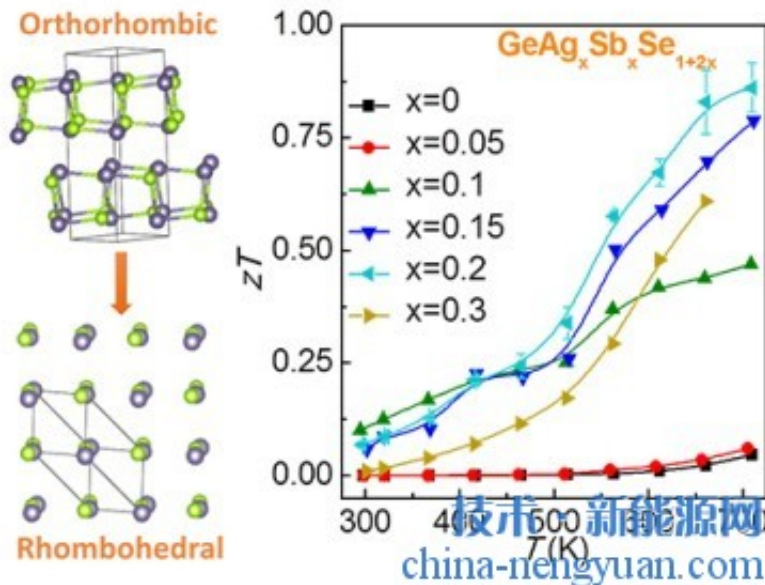


## 大连化物所热电材料研究取得新进展



近日，中国科学院大连化学物理研究所催化基础国家重点实验室研究员姜鹏、中科院院士包信和团队（502组）在热电材料研究中取得新进展，采用高熵合金提高晶体结构对称性的策略，成功调控GeSe晶体结构，大幅度提高GeSe材料的热电性能。相关研究成果发表在《德国应用化学》（Angew. Chem. Int. Ed., DOI: 10.1002/anie.201708134）上。

热电技术能够实现热能与电能之间的相互转化，作为一种洁净能源转换方式，具有广阔的应用前景。但是，传统的高性能热电材料通常含有Bi、Pb、Te等价格昂贵、毒性高的元素，阻碍了其大规模应用。GeSe是一种潜在的环境友好的热电材料，理论预测其具有优异的热电性能，长期以来，由于缺少有效的掺杂方法，导致其载流子浓度和电导率都非常低，严重影响了其热电性能的提升，迄今为止，文献报道的GeSe材料 $zT$ 实验值最高为0.2。

本工作中，该团队采用高熵合金提高结构对称性的策略，通过将GeSe与AgSbSe<sub>2</sub>合金化，成功实现了GeSe晶体结构由正交晶系（orthorhombic）向三方晶系（rhombohedral）的可控转化。研究表明，这种更高对称性的三方晶系结构具有高的载流子浓度（ $\sim 10^{20}\text{cm}^{-3}$ ），多重能带，以及高的有效质量等特征，热电性能得到显著提高。GeAg<sub>0.2</sub>Sb<sub>0.2</sub>Se<sub>1.4</sub>的 $zT$ 在710K能达到0.86，比正交结构的纯GeSe的 $zT$ 值提高了18倍，与文献中报道的 $zT$ 值相比提高了4倍。

该研究工作不仅表明GeSe基热电材料有很好的发展潜力，而且发展出的通过高熵合金调控晶体结构有效提高热电性能的新方法，有望应用到其它热电材料体系中。

该工作的理论部分得到美国西北大学教授G. Jeffrey Snyder和中科院福建物质结构研究所研究员庄巍的帮助，电镜表征工作由中科院物理研究所副研究员葛炳辉合作完成。研究工作得到国家自然科学基金和大连化物所自主部署基金的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/115486.html>