

合肥研究院在高通量筛选高性能half-Heusler热电材料方面取得进展

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员张永胜课题组在高通量筛选高性能half-Heusler(HH)合金热电材料方面取得新进展，相关研究为后续的实验提供了理论指导，也为理解热电性能物理机制提供了思路。相关研究结果发表在Journal of Physical Chemistry C上。

热电材料可以将温差转化为电能，在缓解能源危机方面有着重要的应用价值，材料的热电转化效率通常用热电优值ZT来表征。HH材料由于具有优良的电学性质、力学性能、热稳定性和矿藏丰富等优势，受到热电材料界的广泛关注。目前研究较多的是p型NbFeSb和n型ZrNiSn，但是它们的高热导率阻碍了ZT值的提高。因此，寻找具有高热电性能的母体HH材料就成为当务之急。然而，目前仍有大量的HH体系的热电性能未被研究，且已有的高通量工作普遍采用了较简单的模型近似，因此，采用较为精确的方法来搜索高效HH母体材料和探索其背后的物理机制有重要意义。

为此，张永胜课题组采用形变势理论高通量搜索了95种HH化合物。考虑了带隙、矿藏、无毒性等因素，最终筛选到了9种p型和6种n型HH候选体系，其电学性能（功率因子）优于目前广泛研究的NbFeSb和ZrNiSn材料。通过研究发现其优良的电学性能是由于高能带简并度贡献Seebeck系数，低形变势、轻带和高群速度协同贡献其高电导率。此外，通过热学性质计算发现两种化合物(LiZnSb和CaZnGe)由于其强非简谐晶格振动导致较低的晶格热导率(在300 K下小于 $4 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$)。通过计算发现HH化合物的热电优值主要是由电学性质起主导作用，VCoGe、NbCoSi和TiNiGe因其高功率因子和相对较低的热导率，使它们成为良好的热电材料候选。

该工作不仅为实验提供了良好的候选体系，同时为理解热电性能的物理机制提供思路。

以上研究得到国家自然科学基金项目，中科院超算中心合肥分中心和宿州新材超算中心的资助。

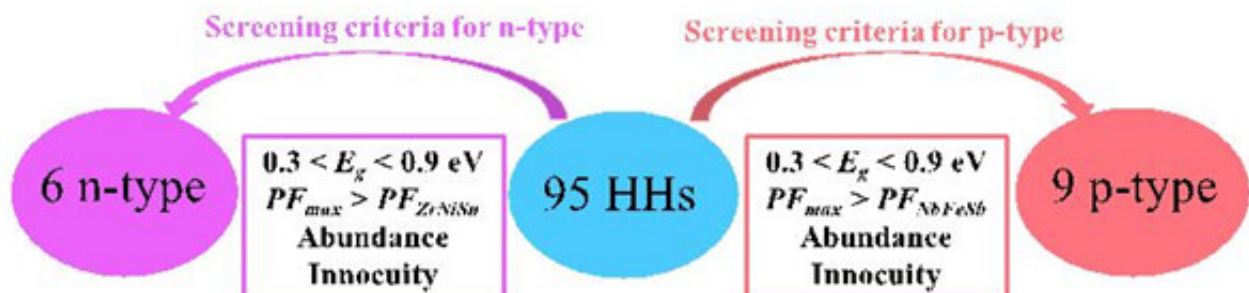


图1. 高通量搜索比NbFeSb (ZrNiSn) 电学性能更好的p (n) 型母体HH候选材料的流程图。

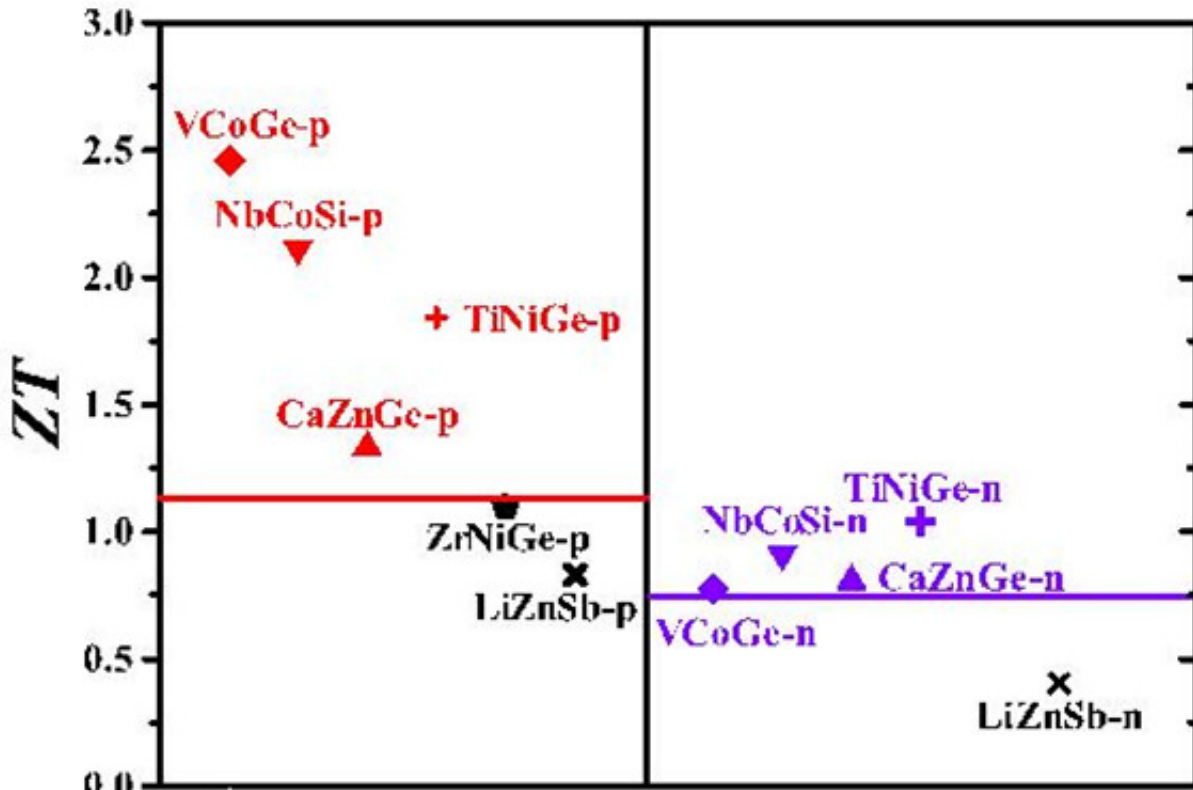


图2. 900 K 下理论计算的HH候选材料的ZT值。红线和紫线分别代表理论计算p型NbFeSb和n型ZrNiSn的ZT值。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/146383.html>