

合肥研究院在简洁表征half-Heusler材料热导率研究方面取得进展

近日，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所物质计算科学研究室研究员张永胜课题组在表征half-Heusler材料中rattling效应对热导率影响的研究中取得新进展，相关结果以Characterization of rattling in relation to thermal conductivity: Ordered half-Heusler semiconductors 为题发表在《物理评论B》上。

热电材料转换效率可以用无量纲的ZT值来衡量， $ZT = S^2 \sigma T / \kappa$ ，其中S、 σ 和 κ 分别代表塞贝克系数、电导率和热导率。在热电材料研究中，理解和分析影响半导体热学性能的因素非常重要，可为降低材料晶格热导率或开发具有低晶格热导率的材料提供理论依据。声子玻璃-电子晶体(PGEC)概念指出：高性能的热电材料应该具有像玻璃一样低的热导率，并且具有像晶体一样高的电导率；而这要求材料具有相互独立的电学和热学输运网络。一般来讲，含有rattling(近自由振动)原子的框架材料会表现出上述类似的PGEC特性。围绕这个概念，很多复杂的新型化合物被研究，例如笼状物clathrates和填充方钴矿材料。近年来，Half-Heusler (HH) 化合物因具有优异的电学性能、强的机械性能以及好的热力学稳定性而备受关注。从晶体结构上来看，它含有三个相互嵌套的面心立方子结构，可以看作是一个填充的闪锌矿晶体结构。如果其中一个原子和周围的近邻间的结合较弱，就易于在面心立方格子中振动，表现出rattling行为，可以有效地散射声子，降低热导率。在这种独特的结构中，研究其rattling振动行为对热导率影响，对于设计寻找具有低热导率的HH材料具有重要意义。

为此，张永胜课题组科研人员基于密度泛函理论方法的声子计算，研究了half-Heusler材料中的rattling振动行为对热导率的影响。发现热导率不仅与材料的平均声子频率具有正相关性，与原子间的平均有效弹簧常数也具有良好的正相关性。进一步，他们构造了两个能简洁度量热导率的参数：三个原子中最小平均声子角频率与最大声子角频率的比值($\omega_{\min} / \omega_{\max}$)和最低有效弹簧常数与最高有效弹簧常数的比值(k_{\min} / k_{\max})。计算结果显示， $\omega_{\min} / \omega_{\max}$ 的值越小，原子间成键越弱； k_{\min} / k_{\max} 的值越小，rattling频率越低。通过该计算方法可简单有效地确定具有低晶格热导率的材料，并有助于理解材料中的rattling振动与晶格热导率低的关系，为筛选潜在的低热导率的材料提供一个新的思路。

以上研究得到国家自然科学基金项目和中科院超算中心合肥分中心的资助。

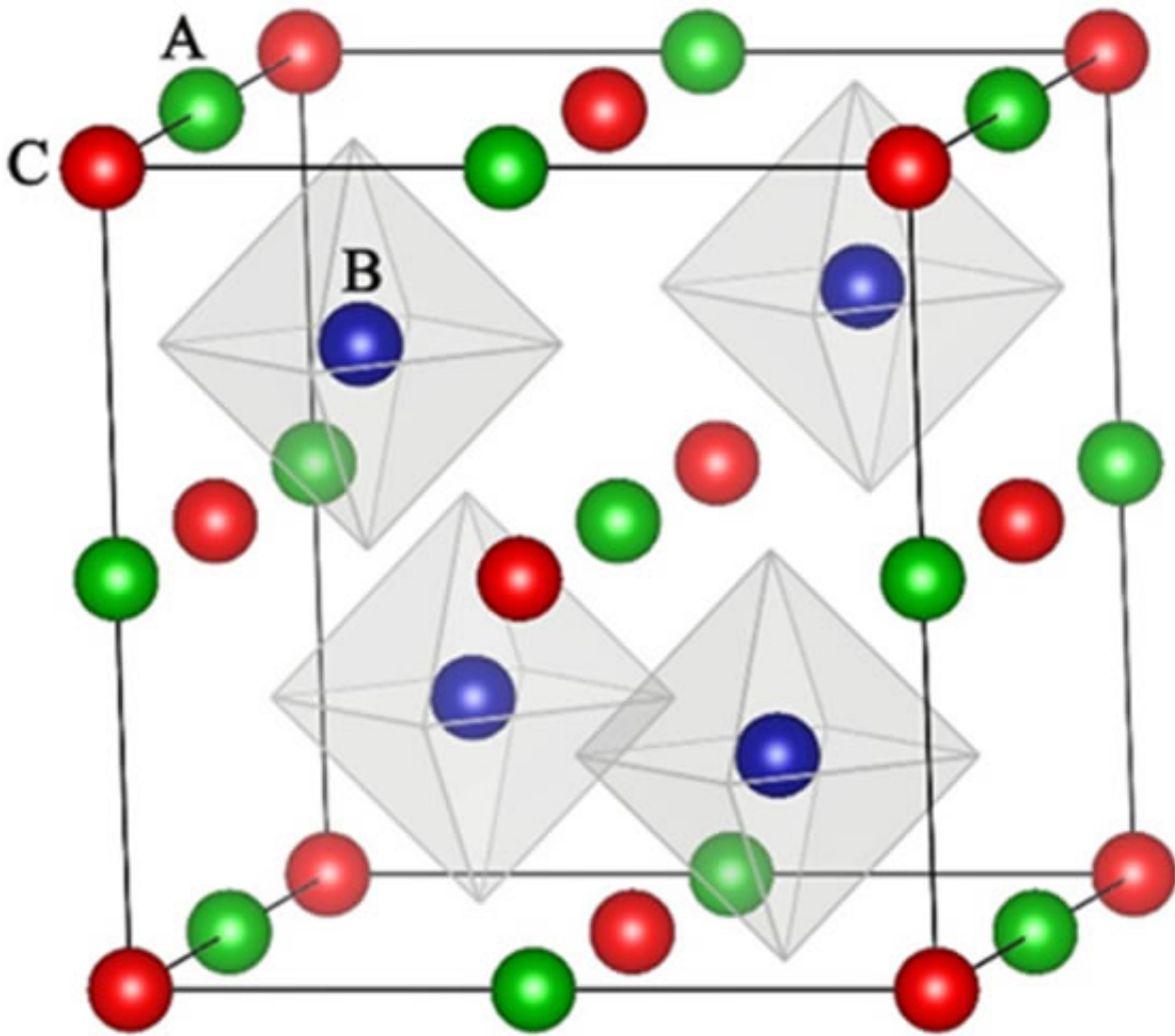


图1. Half-Heusler化合物的晶体结构示意图。

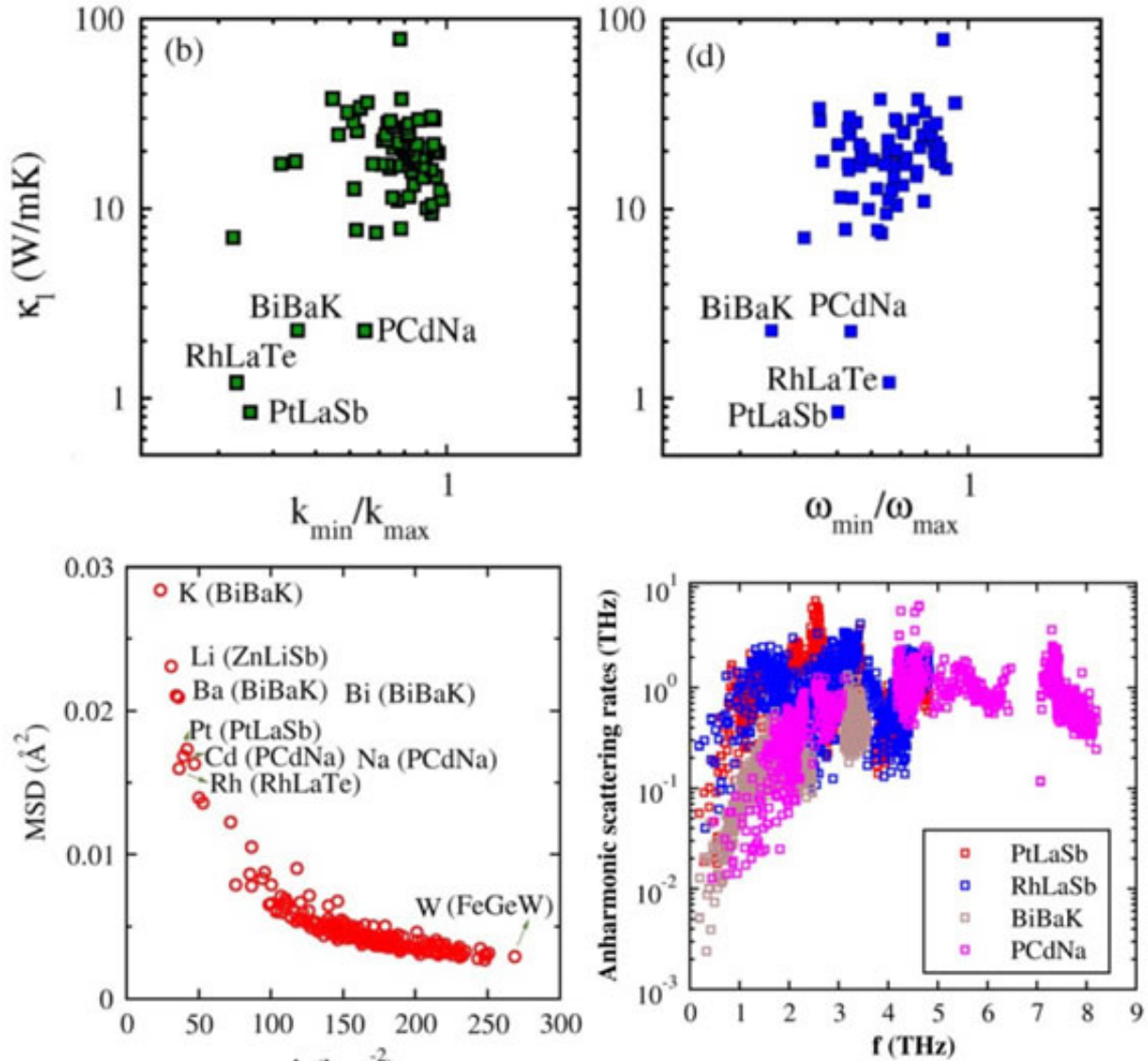


图2. (a) 最小与最大有效弹簧常数比值与热导率的关系；(b) 最小与最大声子角频率与热导率的关系；(c) 每个原子的弹簧常数与平均有效位移的平方的关系；(d) 四种具有较低晶格热导率材料的声子频率与声子的非谐散射率的关系。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/153665.html>