

新疆理化所在高温热敏陶瓷材料线性化机理研究方面取得进展

多晶氧化物陶瓷材料由于晶粒和晶界表现出的半导体特性，丰富了其在功能陶瓷材料领域应用的多样性。然而，如何通过缺陷工程来调控晶粒能带结构和晶界势垒，对于实现高性能电子器件至关重要。

近日，中国科学院新疆理化技术研究所研

究员常爱民团队通过对 $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$

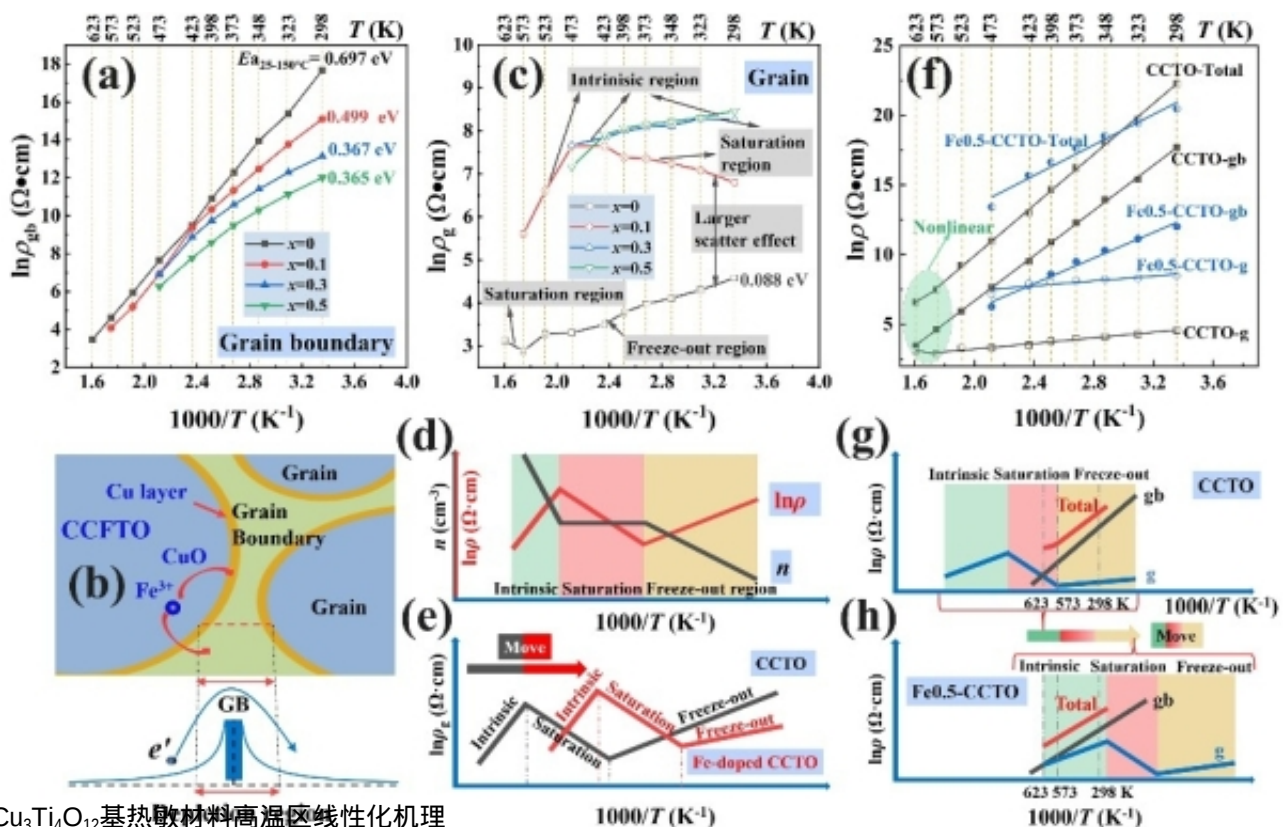
(CCTO) 陶瓷材料晶粒和晶界效应的研究，深度剖析了CCTO陶瓷材料电性能在高温区非线性的物理机制；通过 Fe^{3+} 诱导CCTO陶瓷材料的能带结构，实现了CCTO陶瓷材料电性能在高温区的线性化。

该团队结合阻抗谱和第一性原理的分析方法，发现CCTO陶瓷材料的晶粒电阻率在575

K以后会表现出异常的PTC (Positive Temperature Coefficient) 特性，这是导致CCTO陶瓷材料 $\ln \rho - 1000/T$ 曲线在高温区非线性的主要原因。 Fe^{3+} 可以改变CCTO材料的能带结构，第一性原理计算表明， Fe^{3+} 掺杂使材料的禁带变窄，并且在禁带中诱发出了新的杂质能级，这与由阻抗谱得出的晶粒电阻率与温度的依赖关系向低温区偏移的结论相符。这种偏移导致晶粒电阻率的应用温域以内没有单调的变化，从而增强了CCTO材料的 $\ln \rho - 1000/T$ 曲线在高温区的线性度。此外， Fe^{3+} 可以通过改变晶界的活化能在很大范围内调节CCTO材料的活化能，从而扩大了CCTO陶瓷材料的应用温区。该研究方法中基于 Fe^{3+} 掺杂对陶瓷晶粒和晶界的调控机制，为多晶半导体陶瓷材料的研究提供了新的途径。

相关研究成果发表在《应用物理快报》(Appl. Phys. Lett. 2022, 121,

032102) 上。研究工作得到国家自然科学基金、中科院青年创新促进会等项目的资助。



$\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ 基热敏材料高温区线性化机理

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/184632.html>