

## 宁波材料所在中低温区热电材料与器件领域获进展

热电技术可实现热能与电能直接相互转换，具有纯固态、无噪音、无运动部件等优点，在诸如深空探测等领域已实现重要应用。当前热电技术规模化应用瓶颈在于转换效率偏低，中国科学院宁波材料技术与工程研究所光电热功能材料与器件团队聚焦热电性能优化、器件设计制备以及系统集成应用研究，并取得了一系列进展。

针对当前唯一实现商用化的Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>热电材料，该团队利用大数据优选具备纳米活性的笼状物材料进行第二相掺杂，实现了电声差异散射，进一步设计缺陷工程掺杂提升功率因子，解决了该类体系中电-热强烈耦合的共性问题，制备了工业级（40mm）高性能样品（热电器件效率较商业产品提升约75%）。相关成果以High-Performance Industrial-Grade p-Type (Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> Thermoelectric Enabled by a Stepwise Optimization Strategy为题，发表在《先进材料》（Advanced Materials 2023, e2300338）上。

针对中温区典型材料SnTe和GeTe，该研究提出了中熵工程的优化方案，设计了适当的固溶元素和固溶浓度精确调控体系的结构熵，提升了材料功率因子并降低晶格热导率，实现了电-热运输的部分解耦。得益于电声输运性能协同优化，SnTe峰值ZT达到1.5@800K，平均ZT达到0.8（300-800K），为该体系当前报道最高值；GeTe峰值ZT达2.12@650K，均值ZT高达1.43（300-773K）。相关成果分别以High-Performance Thermoelectric Material and Module Driven by Medium-Entropy Engineering in SnTe和Enhanced Thermoelectric Performance in GeTe by Synergy of Midgap state and Band Convergence为题，发表在《先进功能材料》（Advanced Functional Materials 2022, 32, 2205458/2023, 33, 2212421）上。

针对中高温区类金刚石银基/铜基材料，该团队对于令人困惑的热导率异常问题进行了理论澄清。研究通过探讨原子轨道、晶体场、局域四面体畸变等因素对电子结构的影响发现，在银基材料（AgBX<sub>2</sub>）中存在阴离子与两种阳离子成键强度的错配，由此引起强烈的非简谐性晶格振动，导致银基材料晶格热导率较铜基材料（CuBX<sub>2</sub>）低50%-80%。相关成果以Mismatched atomic bonds and ultralow thermal conductivity in Ag-based ternary chalcopyrites为题，发表在《物理评论B》（Physical Review B 2023, 107, 115202）上。

研究工作得到国家自然科学基金、中国科学院青年创新促进会、浙江省高水平人才专项支持计划、浙江省自然科学基金和浙江省重点研发计划的支持。

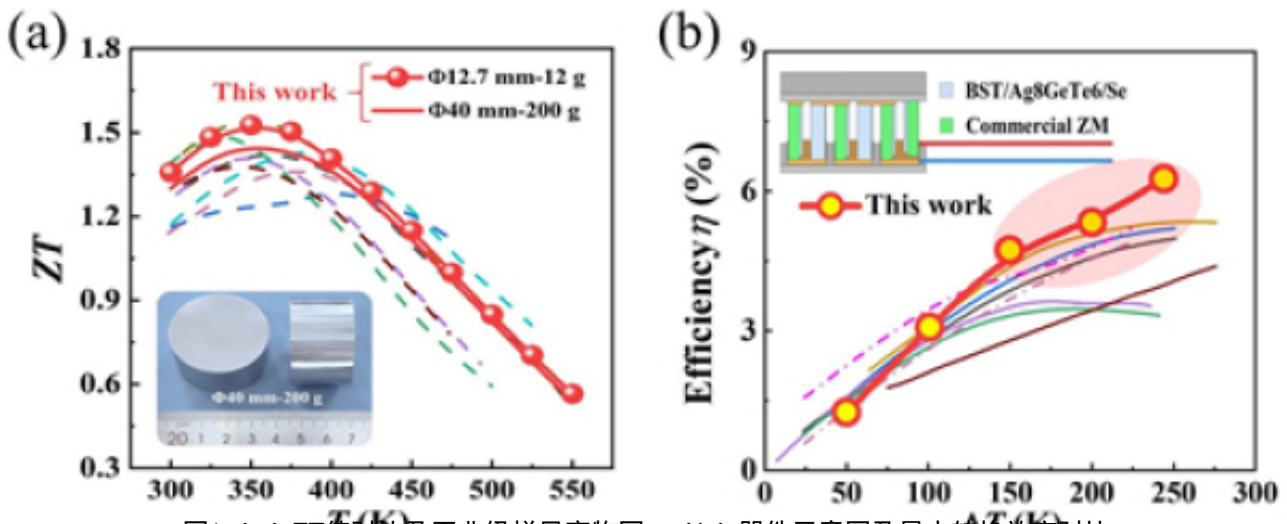


图1. (a) ZT值对比及工业级样品实物图；(b) 器件示意图及最大转换效率对比

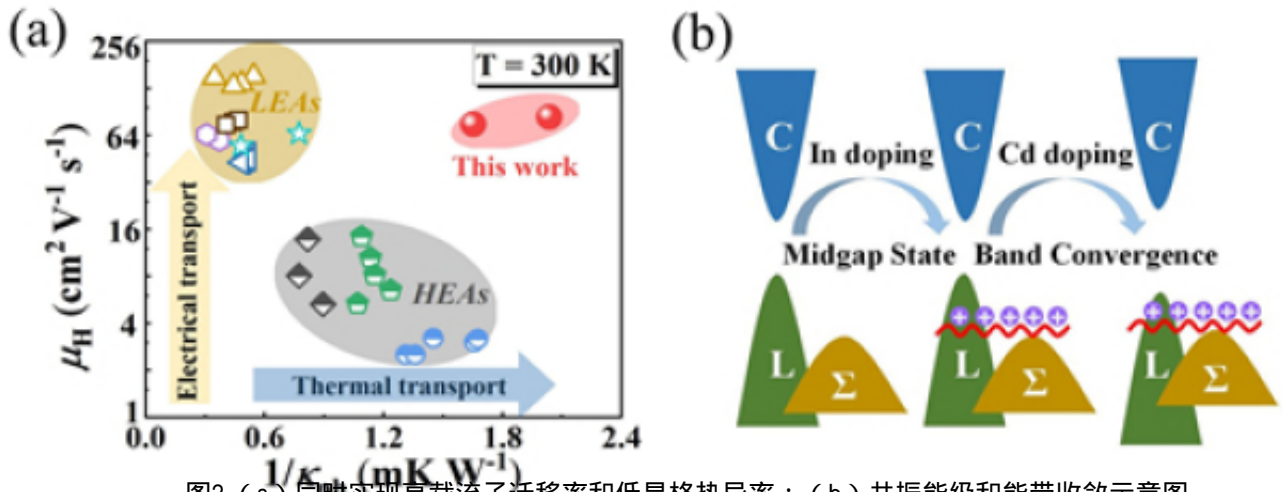


图2. (a) 同时实现高载流子迁移率和低晶格热导率；(b) 共振能级和能带收敛示意图

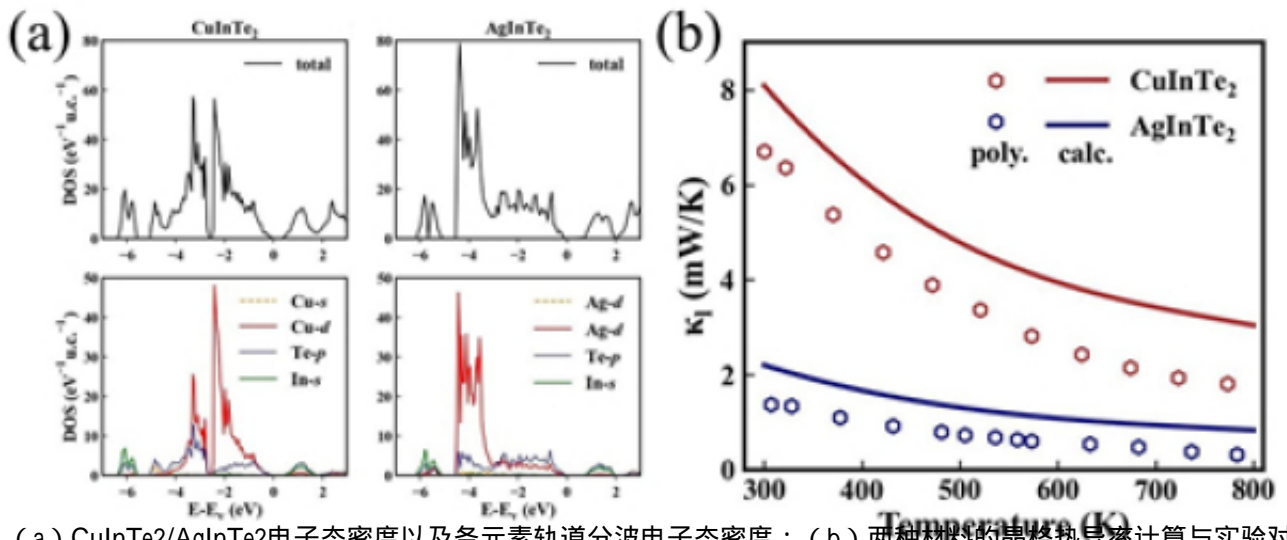


图3. (a) CuInTe2/AgInTe2电子态密度以及各元素轨道分波电子态密度；(b) 两种材料的晶格热导率计算与实验对比

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/197555.html>