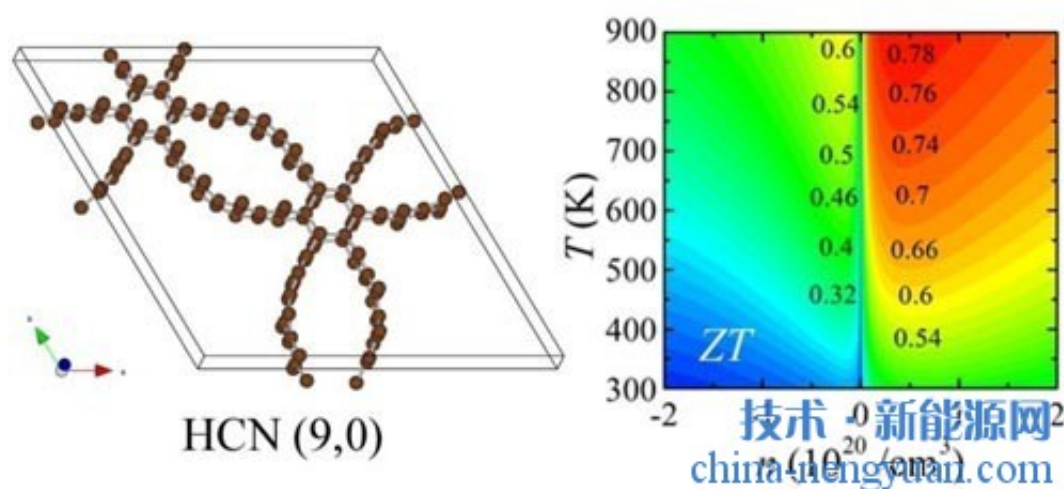


宁波材料所碳材料热电性能研究取得进展



热电材料利用Seebeck效应和Peltier效应可实现热能和电能直接相互转换,具有无噪音、无污染、可靠性高和使用寿命长等优点,在汽车尾气废热、工业余热和太阳能发电以及特殊制冷等领域具有广泛的应用前景。热电材料的转换效率由无量纲的热电优值 $ZT (=S^2 \sigma T / \kappa)$ 来表征,其中 S 和 σ 是材料的Seebeck系数和电导率, T 为绝对温度, κ 为热导率, $S^2 \sigma$ 称为功率因子。高 ZT 值的热电材料需要具备高Seebeck系数,高电导率以及低热导率(包括电子热导率 κ_e 和晶格热导率 κ_{ph})。

近年来,实验上已经成功合成了碳纳米管、碳纳米线和石墨烯等碳基材料。相比于传统材料,碳材料具有环境相容性好、碳源丰富且便于批量生产等优点。碳纳米管以其独特的结构和力学、电学和热学等性质引起了研究人员的广泛关注。在具有优异导电性能的同时,碳纳米管的热导率也非常高,这极大地限制了在热电方面的应用。据报道,人们尝试将碳纳米管制成三维碳材料,试图通过管间的强相互作用降低其过高的热导率从而提高其 ZT 值。然而,在这些三维碳材料中,碳纳米管的结构发生了显著的扭曲,其电学性能显著降低。

中国科学院宁波材料技术与工程研究所结合了第一性原理计算、玻尔兹曼输运理论和分子动力学模拟研究了一种三维杂化的有序碳纳米网络结构的热电输运性能。研究发现,这种有序的网络结构的能带结构类似于碳纳米管,在平行管径方向能带色散明显而在垂直管径方向基本没有色散,这种能带决定了网络结构的电学性能接近于碳纳米管。并运用玻尔兹曼输运理论计算验证了这种推测。在合适的掺杂条件下,碳网络结构可以表现出较高的Seebeck系数和适中的电导率,功率因子可以优化到较高水平。

在热导率方面,分子动力学模拟表明管间的成键作用使得碳网络结构的热导率比碳纳米管至少降低了一个数量级。在900 K附近,(9,0)碳网络结构的最优化 ZT 值可达到0.8,这一结果比碳纳米管的最优化 ZT 值提高了一个量级。此外,通过一定的方法可以进一步降低碳网络结构的热导率,这将进一步提高体系的热电性能。此项研究结果为碳材料应用对环境友好的高性能热电材料方面提供了一种思路。相关成果已发表在国际期刊RSC Adv. 4, 42234 (2014)上。

该研究工作得到了国家自然科学基金(11404350)、中国博士后基金(2014M551782)、宁波市自然科学基金(2014A610003)和宁波市科技创新团队(2014B82004)的支持。

原文地址: <http://www.china-nengyuan.com/tech/73943.html>