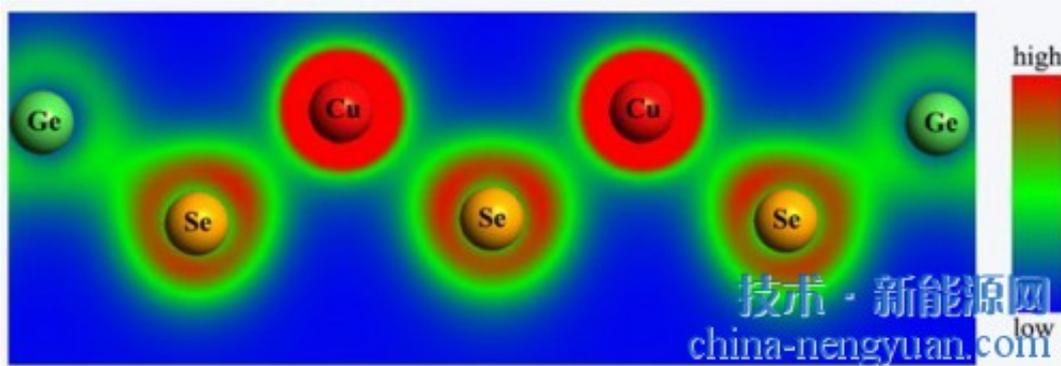


宁波材料所热电转换技术研究获进展



热电转换技术作为一种清洁能源技术在国际上备受关注，有望为提高能源的利用率和缓解环境污染问题提供一种综合协调的方案。热电材料的转换效率由无量纲的热电优值 $ZT(=S^2 T/\kappa)$ 来表征，其中 S 和 κ 是材料的Seebeck系数和电导率， $S^2 T$ 称为功率因子， T 为绝对温度， κ 为热导率，包括电子热导率和晶格热导率。获得高热电优值可以通过提高Seebeck系数和电导率，降低热导率来实现。

近年来，铜基类金刚石结构化合物由于具有很低的晶格热导率引起了热电研究领域的关注。晶格热导率由声子热容、声子群速度和声子寿命决定。 Cu_2GeSe_3 具有与Ge类似的四配位键合结构，它们具有差不多的热容，然而 Cu_2GeSe_3 的室温热导率仅有 2.4W/mK 。之前的实验研究中，人们推测 Cu_2GeSe_3 中原子振动具有很强的非谐性，从而导致了如此低的热导率。

中国科学院宁波材料技术与工程研究所近期用第一性原理计算研究了 Cu_2GeSe_3 的晶格动力学和热学性质，计算得到的声子谱、热容和热导率与实验相符。他们还计算了 Cu_2GeSe_3 中表征原子振动非谐性的格林爱森常数，发现其比之前推测值低很多，他们认为强非谐性不足以解释其低热导率，进一步分析了其振动特性，发现决定热导率的低频振动主要来自于Cu和Se振动的贡献，研究人员从成键特性出发探讨了 Cu_2GeSe_3 低热导率的来源，揭示了Cu-Se弱共价键导致其低热导率的物理机理。相关结果发表于《欧洲物理快报》(EPL 109, 47004 (2015))。

该研究工作得到了国家自然科学基金(11234012, 11404348, 11404350)、中国博士后基金(2014M561796)、浙江省博士后科研项目择优资助(BSH1402080)、宁波市自然科学基金(2014A610008)和宁波市科技创新团队(2014B82004)的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/74733.html>