

## 合肥研究院在热电材料研究方面取得进展

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所秦晓英研究小组在热电材料研究方面取得积极进展。相关成果已发表在J. Mater. Chemistry A (2015, 3, 11768) 及J. Mater. Chemistry C (2015, 3, 7045 - 7052)上。

热电材料可以将热能和电能进行直接转换而无需运动部件，也不排放任何有毒或温室气体；它可利用废热发电也可用于固态制冷。但目前热电材料的转换效率(无量纲优值ZT表征)较低( < 1)，难以大规模商业应用。因此如何提高其ZT值是当前热电材料领域研究的焦点和重点。

$\text{-Zn}_4\text{Sb}_3$ 是一种具有潜力的环境友好型高性能热电材料。通过诱导电子态密度(DOS)共振畸变是一种有效提高热电材料的热电势S并提升热电优值ZT的途径。秦晓英领导的研究组及其合作者最近的实验研究表明，稀土元素Gd掺杂引起  $\text{-Zn}_4\text{Sb}_3$ 费米能级附近DOS的共振畸变，表现为DOS有效质量的大幅增加；低温比热的测量证实了DOS共振畸变的发生；第一原理计算进一步揭示出，  $\text{-Zn}_4\text{Sb}_3$ 价带顶附近出现的态密度共振峰主要来自Gd原子中d轨道电子的贡献。

由于这种态密度共振畸变，使得  $\text{-(Zn}_{1-x}\text{Gd}_x)_4\text{Sb}_3$  ( $x=0.002, 0.003$ )的热电势增加了 $\sim 40 \mu\text{VK}^{-1}$ ，同时Gd掺杂导致 $x=0.002$ 样品的热导率降低了约15%，最终使得  $\text{-(Zn}_{1-x}\text{Gd}_x)_4\text{Sb}_3$  ( $x=0.002$ )样品的ZT值在655K达到了1.2，与未掺杂样品( $ZT=0.75$ )相比提高了60%。此结果表明，Gd掺杂是一种引起DOS共振畸变、并有效提升  $\text{-Zn}_4\text{Sb}_3$ 热电性能的方法。此工作最近发表于J. Mater. Chemistry A (2015, 3, 11768)。

另外，BiSbTe是目前最好的室温附近的热电材料，也是唯一商业化应用的室温制冷热电材料。但如何提高其在100-200oC附近的热电性能以用于低级废热发电是极具挑战性和经济效益的课题。秦晓英领导的研究组及其合作者最近的研究表明，在BiSbTe基体中复合1vol.%Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub>纳米颗粒以形成纳米复合材料。

除了约50%的晶格热导率降低外，由于异质结界面势的散射引起能量过滤效应使热电势率升高以及高温区迁移率降低的减缓，使得功率因子在476K时达到 $37\text{mWcm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，而其ZT值达到1.6，它是目前报道的在该温区的最大值。此外，该材料在300K至500K的宽广温度范围内都具有高ZT值(如在300K  $ZT=1.0$ 而在500K  $ZT=1.5$ )，使得该材料在低级废热回收应用上具有诱人的应用前景。该工作最近发表于J. Mater. Chemistry C (2015, 3, 7045 - 7052)。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/79734.html>