



上海硅酸盐所高性能新热电材料体系设计与合成获重要进展

文章来源：上海硅酸盐研究所

发布时间：2012-03-16

【字号：小 中 大】

热电转换技术利用半导体材料的塞贝克（Seebeck）效应和帕尔贴（Peltier）效应实现热能与电能直接相互转化，在工业余热和汽车尾气废热发电等领域具有重要而广泛的应用。热电技术的能量转换效率主要取决于材料的本征物理特性，通常可由一个无量纲的综合指数（热电优值ZT）来衡量，取决于材料的Seebeck系数、电导率、热导率和绝对温度。传统的高性能热电能量转换材料为固体晶态化合物，研究者在维持晶体中优良电输运性能的同时，采用多层次结构调控等手段降低晶格热导率，获得高的热电性能。近年来，以skutterudite和clathrate为典型代表的笼状化合物热电性能的优化，以及通过纳米结构降低晶格热导率提升热电性能的研究均取得了显著进展，其热电优值超过1.5。然而，晶态化合物中晶格热导率的降低受制于结构的长程有序性，其最低极限（最小晶格热导率）与完全无序的玻璃态相当，限制了热电性能继续优化的空间。

最近，中国科学院上海硅酸盐研究所史迅研究员、陈立东研究员、张文清研究员、许纺纺研究员与美国加州理工大学G. Jeffrey Snyder博士、布鲁克文国家实验室Qiang Li教授、密歇根大学Ctirad Uher教授等合作，提出在固态材料中引入具有“液态”特征的离子来降低热导率和优化热电性能，突破晶格热导率在固态玻璃或晶态材料上的限制。他们发现了一类具有“声子液体—电子晶体”特征、完全不同于传统晶态热电化合物的新型热电材料体系，拓展了热电材料的设计理念。

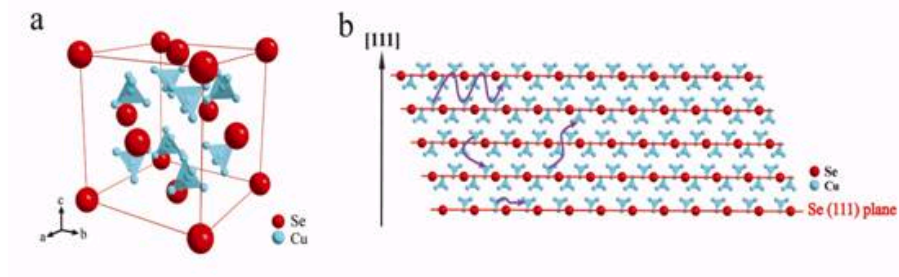
研究发现，在具有高温反萤石结构的半导体硒化二铜（ Cu_{2-x}Se ）化合物中，Se原子可以形成相对稳定的面心立方亚晶格网络结构，而Cu离子则随机分布在Se亚晶格网络的间隙位置进行自由迁移。Se亚晶格提供了良好的电输运通道，具有“液态”特征的可自由迁移Cu离子不但可以强烈散射晶格声子来降低声子平均自由程，而且由于消减了部分晶格振动横波模式而降低了材料的晶格热容，突破了晶态和玻璃态材料的晶格声子热振动与输运限制。

初步结果表明， Cu_{2-x}Se 显示了优良的热电性能，其性能优值ZT可超过1.5，与目前发现的高性能晶态热电材料相当，并可望通过优化掺杂等手段进一步提升。同时，本项研究工作提出的“声子液体”概念还可以很好地解释许多含Cu和Ag离子等半导体材料中发现的电热输运行为及其规律，有望引出一类具有“声子液体—电子晶体”特征的新热电材料体系，为新热电化合物的探索以及传统热电材料性能的进一步优化提供了新的方向和途径。

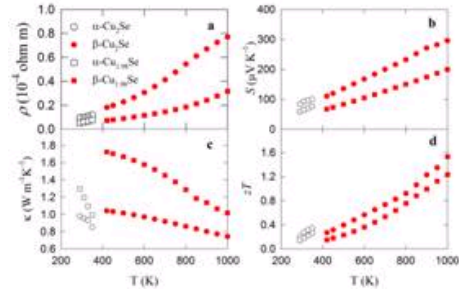
相关研究成果已发表于《自然—材料学》（*Nature Materials*）杂志，并已申请中国发明专利。研究成果获得了审稿人的高度评价，认为：“本文拓展了已有的‘声子玻璃—电子晶体’概念至‘声子液体—电子晶体’，为热电材料的研究方向提供了新的可能性；在一个具有简单化学式、小晶胞和轻元素构成的材料中实现的高热电性能打破了人们对热电材料的一些传统认识；本文在 Cu_{2-x}Se 新系统中报道的高性能非常有趣，促使人们更多地思考可能具有比传统热电材料更好的新材料的可能性，这些新材料的发现将会显著地推动本研究领域的发展……。”

研究工作得到了中国科学院百人计划、国家自然科学基金创新研究群体和杰出青年科学基金、国家外专局创新团队国际合作伙伴计划、上海市优秀学科带头人、上海市浦江人才等的资助和支持。

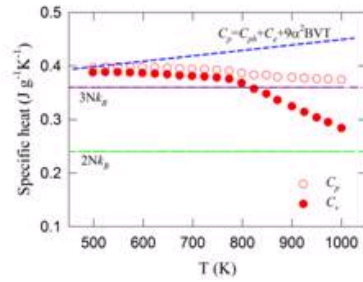
[论文链接](#)



(a) Cu_2Se 化合物高温下的晶体结构和 (b) 铜离子迁移示意图



Cu_{2-x}Se 化合物的热电性能



Cu_2Se 化合物的热容随温度的变化，高温下展示明显的声子液体特征

打印本页

关闭本页