合肥研究院等在二元金属硫化物中发现电子熵增强的室温巨压卡效应

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/10705.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

近日，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所功能材料物理与器件研究部林建超、童鹏

$_{1-x}Fe_xS$中发现电子熵增强的室温巨压卡效应。相关研究成果以*Giant Room-temperature Barocaloric Effect at the Electronic Phase Transition in* $Ni_{1-x}Fe_xS$为题，发表在*Materials Horizons*（DOI: 10.1039/C9MH01976F）上。

全球每年25~30%的电力被用于制冷行业。现有制冷技术大多依赖于传统的气体压缩循环，制冷效率低且使用的制冷剂（如氟利昂）对环境有害（如产生温室效应）。固态相变材料可在磁场、电场、轴向力或等静压的驱动下产生熵变和温变，即磁卡（热）、电卡（热）、弹卡（热）、压卡（热）效应，统称固态相变热效应。与之对应的固态制冷技术由于效率高且环境友好，成为取代现有制冷技术的理想方案之一。相较于磁卡、弹卡、电卡效应，压卡效应的研究尚处于起步阶段，因此探索新型压卡材料、阐明压卡效应机理是现阶段的主要研究方向。

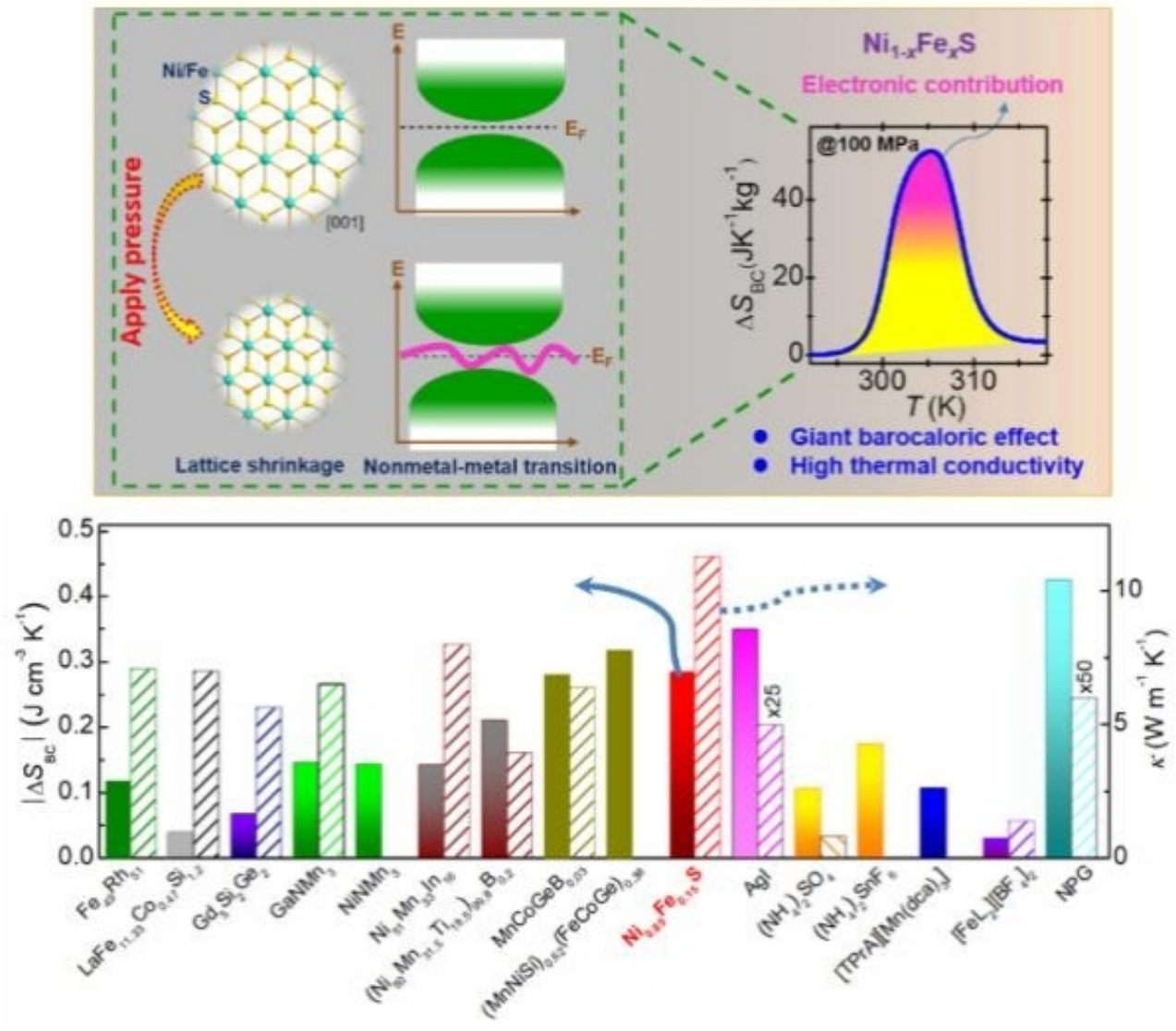
六角结构的二元金属硫化物NiS因非金属-金属转变引起研究人员的关注。该一级相变伴随着晶格体积的陡峭收缩，
且相变温度对压力敏感。研究人员在
Ni位引入Fe元素制备$Ni_{1-x}Fe_x$
S（0≤x≤0.175）系列样品，实现了在室温范围内（260K-330K）对材料相变温度的灵活调控。压力下差示扫描量热法（DSC）测试结果表明，$Ni_{1-x}Fe_x$
S样品均呈现显著的压卡效应，100MPa压力驱动的熵变值可达52.8J $K^{-1}kg^{-1}$，仅次于塑晶（plastic crystals）等少数几个材料体系。低温电子比热、中子衍射和第一性原理计算结果表明，Fe部分取代Ni后，仍保留一级相变特征。相变前后电子熵变与晶格熵变相当，两者的协同作用导致巨压卡效应。Ni1-xFexS样品在相变前后的平均热导率可达11.5 W
$m^{-1}K^{-1}$，高于现有的压卡材料体系，是塑晶热导率（0.12 Wm^{-1}
K^{-1}
）的100倍。在实际应用中，热导率大小是衡量压卡材料性能的重要指标之一。高热导率意味着高的换热效率，有利于获得高工作频率和制冷功率密度。

在已报道的大部分压卡材料中，除大的晶格熵变外，自旋或电偶极子等也对总熵变有重要贡献。电子熵变由于贡献小，往往被忽略不计。目前，对具有显著电子熵贡献的压卡材料鲜有报道。该

研究从实验上阐明电子熵对巨压卡效应的贡献，为探索高性能压卡新材料体系提供了新视角。

研究工作受到中科院前沿重点研究计划、大科学装置联合基金、深圳市基础研究计划，以及合肥大科学中心“ 高端用户培育基金 ”项目等的资助。该研究的中子衍射实验依托中国散裂中子源（CSNS）的通用粉末衍射谱仪完成。

论文链接



$Ni_{1-x}Fe_xS$巨压卡效应起源的示意图以及压卡、热导性能与现有压卡材料的对比。

研究团队单位：合肥物质科学研究院

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发