合肥研究院在提升有序Double Half-Heusler热电性能研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/11886.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！

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员张永胜课题组在提升有序Double Half-Heusler（DHH）热电性能研究中取得进展，相关研究为后续实验提供新的研究体系，也为提升半休氏勒合金（Half-Heusler，HH）的热电性能提供新思路。相关研究成果发表在*Journal of Materials ChemistryA*上。

具有半导体特性的18电子HH热电材料已被广泛研究，但是这类体系数量较少。具有17和19电子的HH体系相混合可以形成新型18电子的DHH，扩大了HH研究体系。一般情况下，两相混合在高温下会形成固溶体，在低温下会形成有序结构。实验中通常在高温下合成DHH，所形成的混合固溶体虽然有利于散射声子、降低热导率，但同时也会损失载流子迁移率。而两相混合形成的有序结构却能在维持高载流子权重迁移率的同时，降低热导率（由于混合原子的质量失配等）。因此，寻找稳定的有序DHH结构是一个提升热电性能的思路。

研究团队从三种18电子的Co基材料（TiFeSb，ZrCoBi和VCoGe）出发，通过用Fe和Ni替换Co，模拟了17电子和19电子HH体系的混合（$TiFe_{1-x}Ni_xSb$，$ZrFe_{1-x}Ni_xBi$和$VFe_{1-x}Ni_xGe$）。理论设计出具有18电子的新型DHH材料，从中预测出两个稳定的有序结构（$Ti_4Fe_2Ni_2Sb_4$和$V_4Fe_2Ni_2Ge_4$）。通过与高温无序固溶体系比较，研究人员发现有序结构的权重载流子迁移率较高，因此其电学性能优于相应的固溶体。此外，通过热导率计算发现，其同时具有较低的热导率。综合电学和热学性能分析，有序$Ti_4Fe_2Ni_2Sb_4$和$V_4Fe_2Ni_2Ge_4$体系在高温下具有良好的热电性能：p型（n型）热电优值分别为1.75（0.64）和1.33（0.95）。相关研究表明，形成有序结构是维持HH高电学性能的重要途径，同时为优化和设计高效Half-Heusler化合物提供新思路。

研究工作得到国家自然科学基金项目的资助。

论文链接

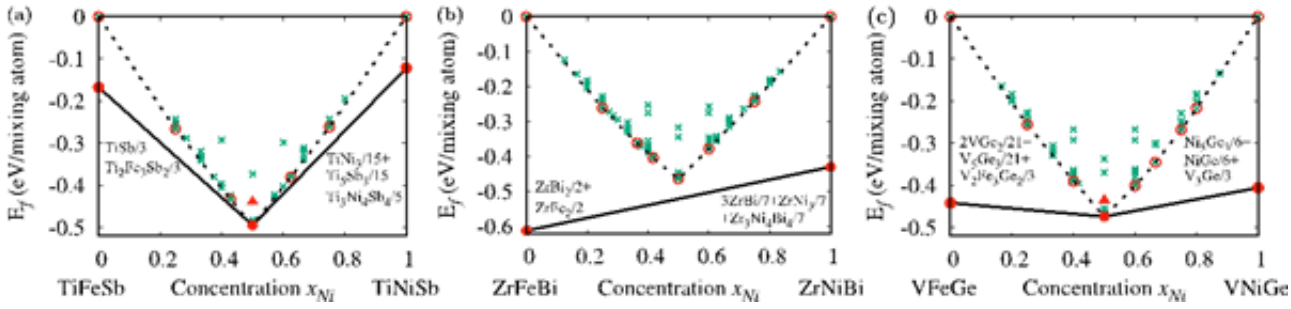


图1.DFT+CE预测的（a）$TiFe_{1-x}Ni_xSb$、（b）$ZrFe_{1-x}Ni_xBi$和（c）$VFe_{1-x}Ni_xGe$体系的能量基态线。绿色叉形表示DFT计算的形成能。黑色实线表示考虑相分离后的能量基态线，红色三角代表SQS结构（$Ti_{16}Fe_8Ni_8Sb_{16}$和$V_{16}Fe_8Ni_8Ge_{16}$）

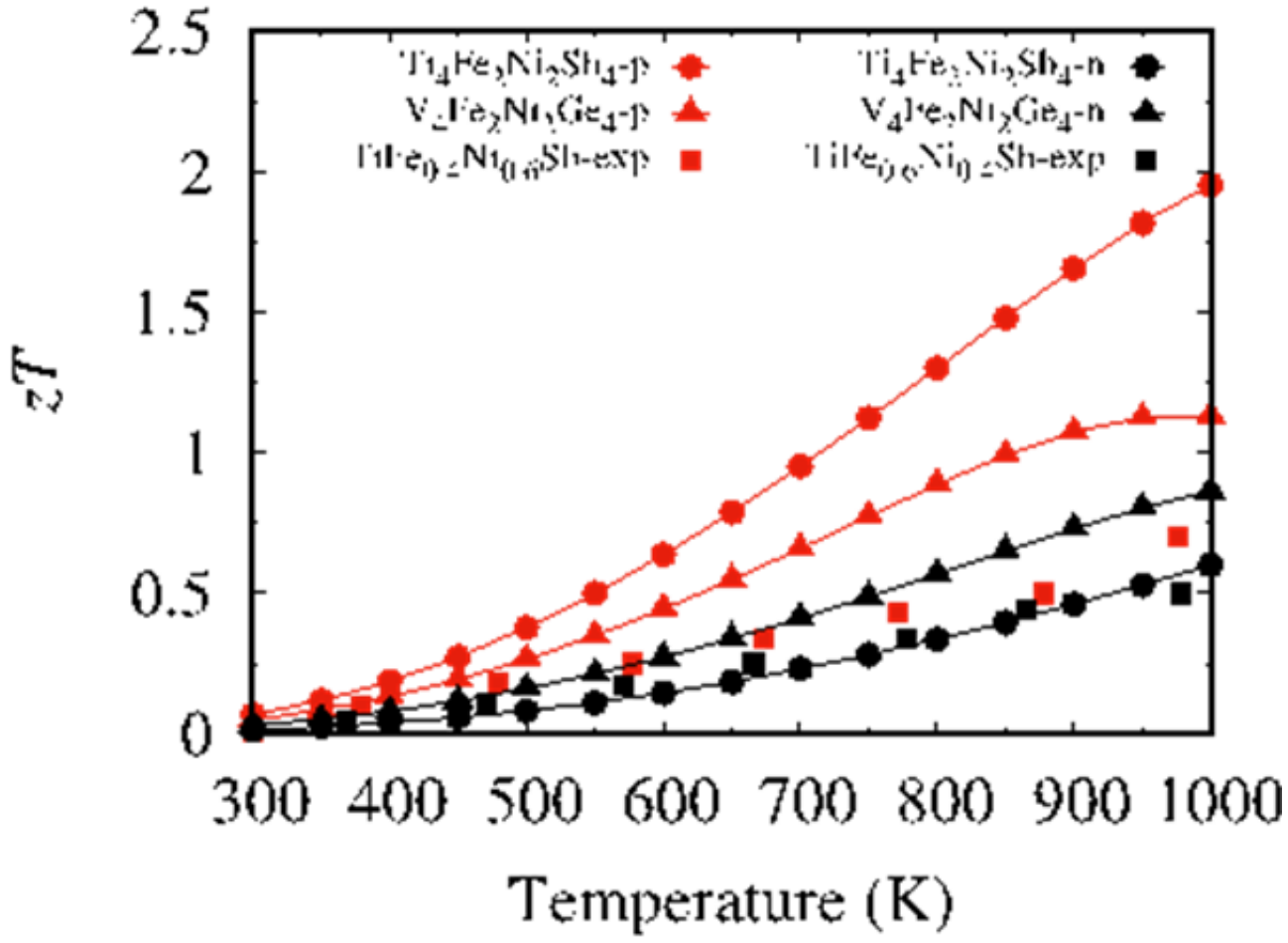


图2.$Ti_4Fe_2Ni_2Sb_4$（圆圈）和$V_4Fe_2Ni_2Ge_4$（三角）的zT值（电子弛豫时间为10 fs,载流子浓度为$10^{21}cm^{-3}$）随温度的变化。黑色方块为$TiFe_{0.5}Ni_{0.5}Sb$的实验值。红色和黑色分别代表p型和n型。方块是$TiFe_{0.4}Ni_{0.6}Sb$和$TiFe_{0.6}Ni_{0.4}Sb$的实验值

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