

# 上海硅酸盐所在高性能无机塑性热电化合物研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13848.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！**

无机塑性热电材料可以打破传统无机脆性热电化合物和有机柔性热电化合物的禁锢，同时实现超常的室温变形能力和优良的热电性能，在柔性电子、异形热源余废热回收发电等领域具有广阔的应用前景。前期研究中，中国科学院上海硅酸盐研究所发现了在室温具有金属一样延展性的半导体材料-Ag<sub>2</sub>S (Nature Materials, 2018) 和范德华单晶塑性半导体InSe (Science, 2020)，开发出n型高性能无机柔/塑性热电材料和器件 (Energy Environmental Science, 2019)，开辟了无机塑性热电材料研究新方向。然而，无机塑性材料体系仍然稀少，尤其欠缺p型无机塑性材料。探索和发现具有不同导电类型的新型高性能无机塑性热电化合物是开展热电器件研制的关键。

近日，上海硅酸盐所研究员史迅、陈立东与副研究员仇鹏飞，以及上海交通大学副教授魏天然等合作，开发出n型Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>和p型(Ag<sub>0.2</sub>Cu<sub>0.8</sub>)<sub>2</sub>S<sub>0.7</sub>Se<sub>0.3</sub>高性能无机塑性热电化合物，并利用其室温优异的变形能力制备出可与曲面热源紧密贴合的环形热电器件。相关研究成果分别以Ductile Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub> with Excellent Shape-Conformability and High Thermoelectric Performance和p-Type Plastic Inorganic Thermoelectric Materials为题，发表在Advanced Materials和Advanced Energy Materials上。

Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>化合物与Ag<sub>2</sub>S

的中温相结构相似，均为体心立方结构。

室温下Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>具有比Ag<sub>2</sub>S

更为优异的变形能力，可以与环形、四方形、甚至螺母表面形成紧密贴合。第一性原理计算结果表明，立方结构的Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>具有比单斜结构的Ag<sub>2</sub>S

更低的不稳定层错能和更高的解理能，

这是室温下Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>变形能力优于Ag<sub>2</sub>S的原因。Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>

适中的禁带宽度 (0.29eV) 和高的载流子迁移率 (470 cm<sup>2</sup>

V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>) 导致其具有较高的功率因子。同时，Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>晶格热导率在0.2-0.4

Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>

之间，其极低的晶格热导率来自于晶体结构中可迁移的Ag离子和无序分布的S/Te原子对声子的强烈散射。在600K时，Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>

热电优值为0.8，与区熔法制备的n型商用Bi<sub>2</sub>

Te<sub>3</sub>基金属相当。研究团队将弯曲后的n型Ag<sub>20</sub>S<sub>7</sub>Te<sub>3</sub>和p型Pt-Rh线构成环形热电器件，在70

K温差下，该原型器件开路电压为69.2 mV，最大输出功率为17.1

---

$\mu\text{W}$ 。相关研究结果发表在Advanced Materials上，上海硅酸盐所博士研究生杨世琪为论文第一作者。

该研究团队进一步选取n型 $\text{Ag}_2\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ 材料，在Ag位固溶Cu，将n型导电行为改变成p型导电行为。当Cu的成分在0.7-0.8区间时，材料兼具塑性和p型导电行为。p型材料在室温具有优异变形能力，其三点弯曲应变达10%，压缩应变大于30%。第一性原理计算表明， $(\text{Ag}_{0.2}\text{Cu}_{0.8})_2\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ 具有与 $\text{Ag}_2\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ 相当的高解理能/不稳定层错能比值，这是其室温具有大变形能力的原因。同时，随Cu含量的增加，材料的主要缺陷类型由Ag间隙离子（施主缺陷）转变为Cu空位（受主缺陷），导致材料导电类型由n型转变为p型。通过进一步成分优化，在800K时Cu空位的p型 $(\text{Ag}_{0.2}\text{Cu}_{0.8})_2\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ 热电优值达0.95。相关研究成果发表在Advanced Energy Materials上，上海硅酸盐所博士生高治强和杨青雨为论文共同第一作者。

研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、中科院、上海市青年科技启明星等项目的支持。

论文链接：[1](#)、[2](#)

图1. (a) 不同形状的  
n型 $\text{Ag}_{20}\text{S}_7\text{Te}_3$

无机塑性热电化合物及其热电优值；(b) 与曲面热源具有良好结合的 $\text{Ag}_{20}\text{S}_7\text{Te}_3$ 基环形热电器件及其输出性能

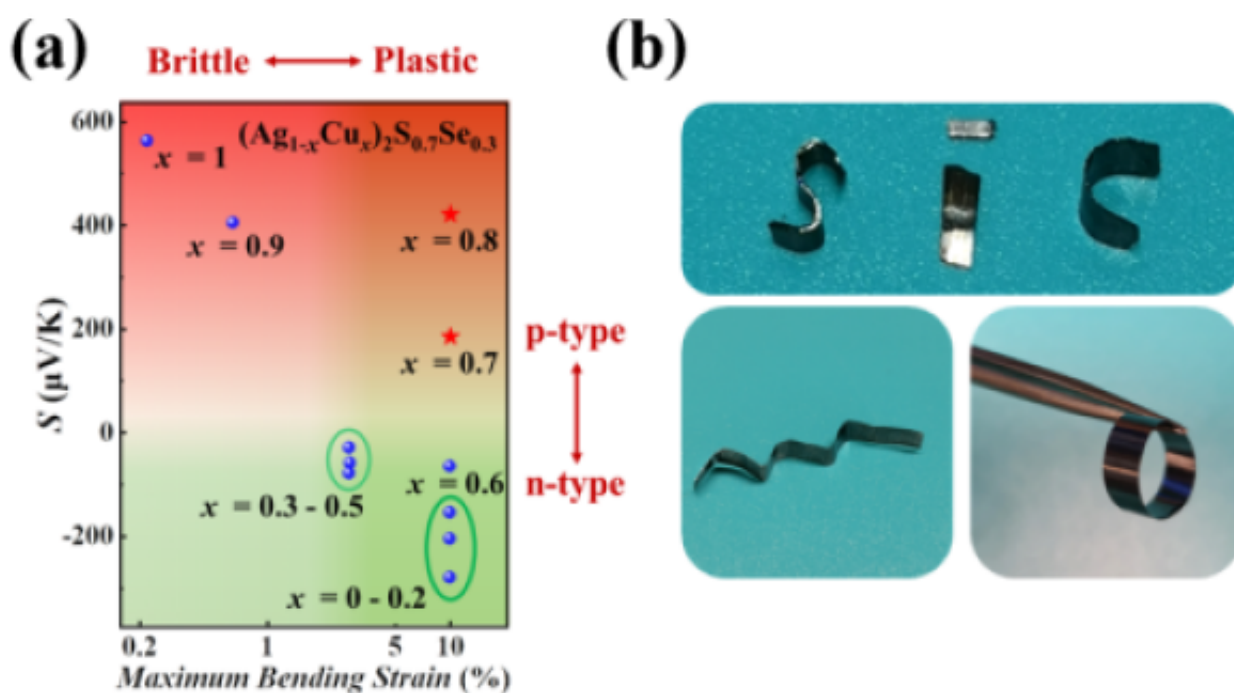


图2. (a)  $(\text{Ag}_{1-x}\text{Cu}_x)_2\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$  泽贝克系数和力学性能随Cu含量的变化；(b) 不同形状的p型 $(\text{Ag}_{0.2}\text{Cu}_{0.8})_2\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ 无机塑性热电化合物

研究团队单位：上海硅酸盐研究所

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](http://www.iikx.com)转发