
Cu₂SnSe₃材料体系热电性能调控研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/14230.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！

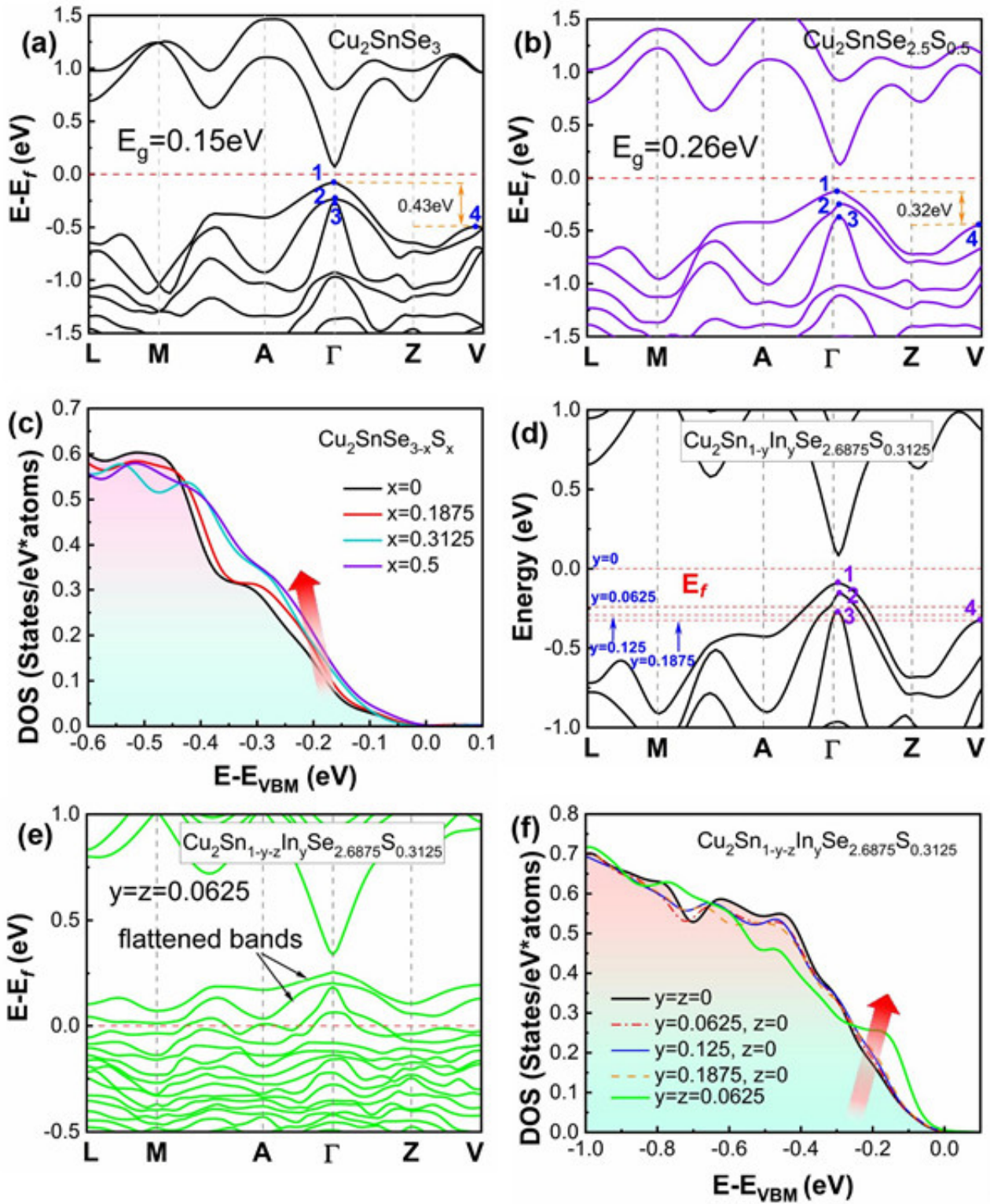
近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体所能源材料与器件制造研究部研究员秦晓英课题组在Cu₂SnSe₃材料体系热电性能调控方面取得进展。研究人员利用能带结构综合调控与多维缺陷散射声子显著提升了Cu₂SnSe₃的热电性能，使得Cu₂Sn_{0.82}In_{0.18}Se_{2.7}S_{0.3}的热电优值ZT在858K时高达1.51，为Cu₂SnSe₃基材料的热电性能调控提供了新思路。相关研究成果发表在ACS Nano上。

近年来，热电技术作为有望解决能源问题的新途径引起广泛关注。热电材料的转化效率由热电优值ZT表示。Cu₂SnSe₃是一种组成元素廉价、环境友好的新型热电材料，但其ZT值较低，只有约0.2。目前对于Cu₂SnSe₃热电性能的优化主要是通过Sn位掺杂提高空穴浓度，然而这种掺杂会导致热电势的大幅下降和电子热导率的显著提升，使得ZT值的提升有限。此外，大多数研究只通过引入一到两种缺陷来降低材料的晶格热导率，很少利用多维缺陷（0维到3维）的引入实现对声子的全频谱散射，进一步降低晶格热导率。

鉴于此，研究人员采取元素替代/空位对其能带结构进行综合调控。研究表明，Se位固溶硫可以有效的增宽带隙和提高价带顶的态密度（图1），使得Cu₂SnSe₃高温热电势从170提高至277 μV K⁻¹；而Sn位掺In会造成多轻带/能谷参与输运，显著提高了能带简并度和态密度（图1），进而大幅提高该化合物的电导率和热电势。研究还发现，在Sn位重掺In可以诱导形成多维缺陷（如Sn空位、位错、相界/孪晶界和CuInSe₂纳米析出相，图2），实现对声子的全频谱散射从而大幅降低晶格热导率（图3(b)）。由此，Cu₂SnSe₃的最高ZT值在858 K时可达到1.51，是目前本体系报道的最高值（图4）。

研究工作得到国家自然科学基金的支持，理论计算在中科院超算中心合肥分中心完成。

[论文链接](#)



Cu_2SnSe_3 (a)和 $\text{Cu}_2\text{SnSe}_{2.5}\text{S}_{0.5}$ (b)的能带结构；(c) $\text{Cu}_2\text{SnSe}_{3-x}\text{S}_x$ 的态密度；掺In(d)和Sn空位(e)对 $\text{Cu}_2\text{SnSe}_{2.6875}\text{S}_{0.3125}$ 能带结构的影响；(f) $\text{Cu}_2\text{Sn}_{1-y-z}\text{In}_y\text{Se}_{2.6875}\text{S}_{0.3125}$ 的态密度。

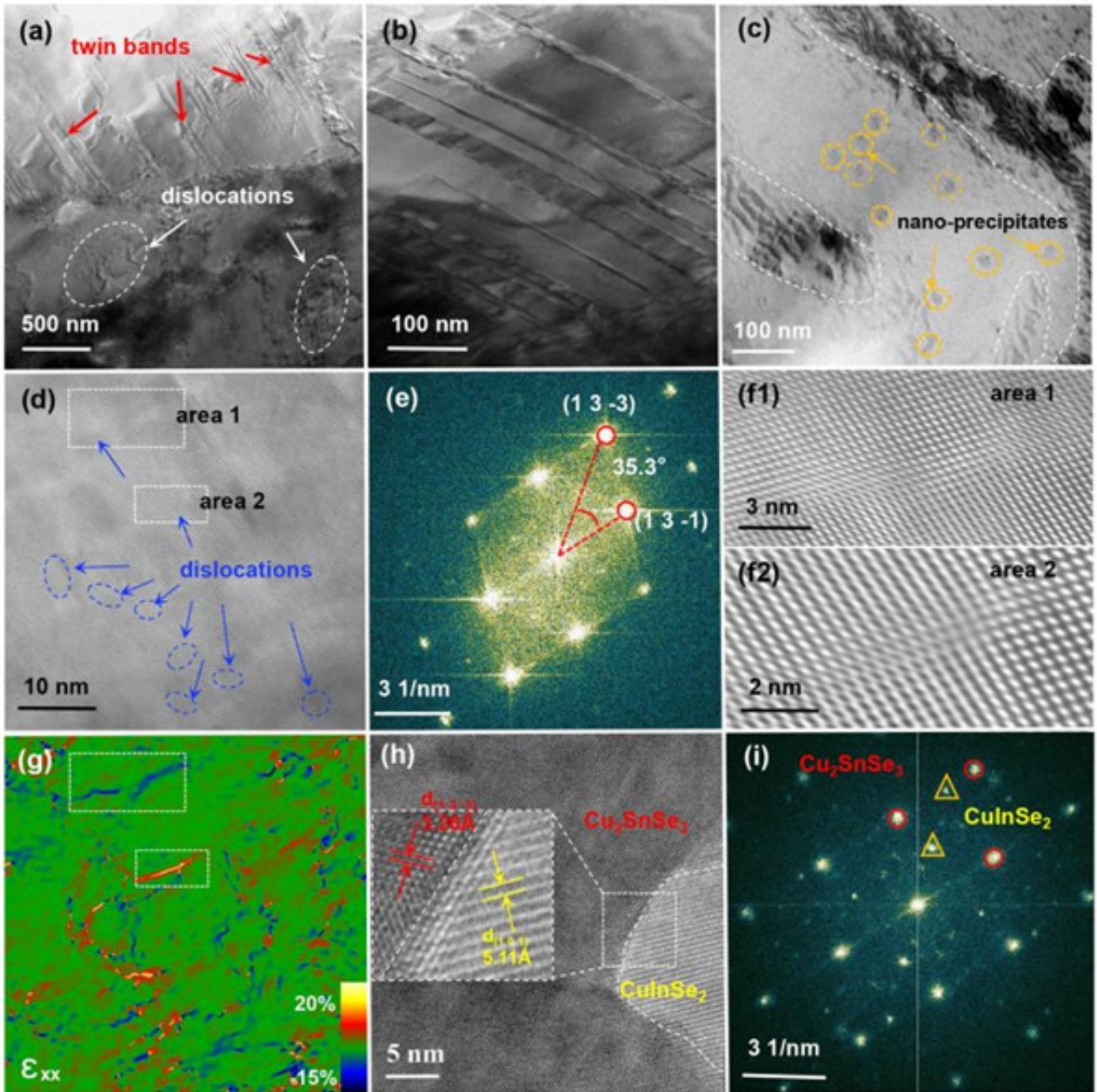


图2. $\text{Cu}_2\text{Sn}_{0.82}\text{In}_{0.18}\text{Se}_{2.7}\text{S}_{0.3}$ 样品的TEM微结构表征和GPA应变分析。

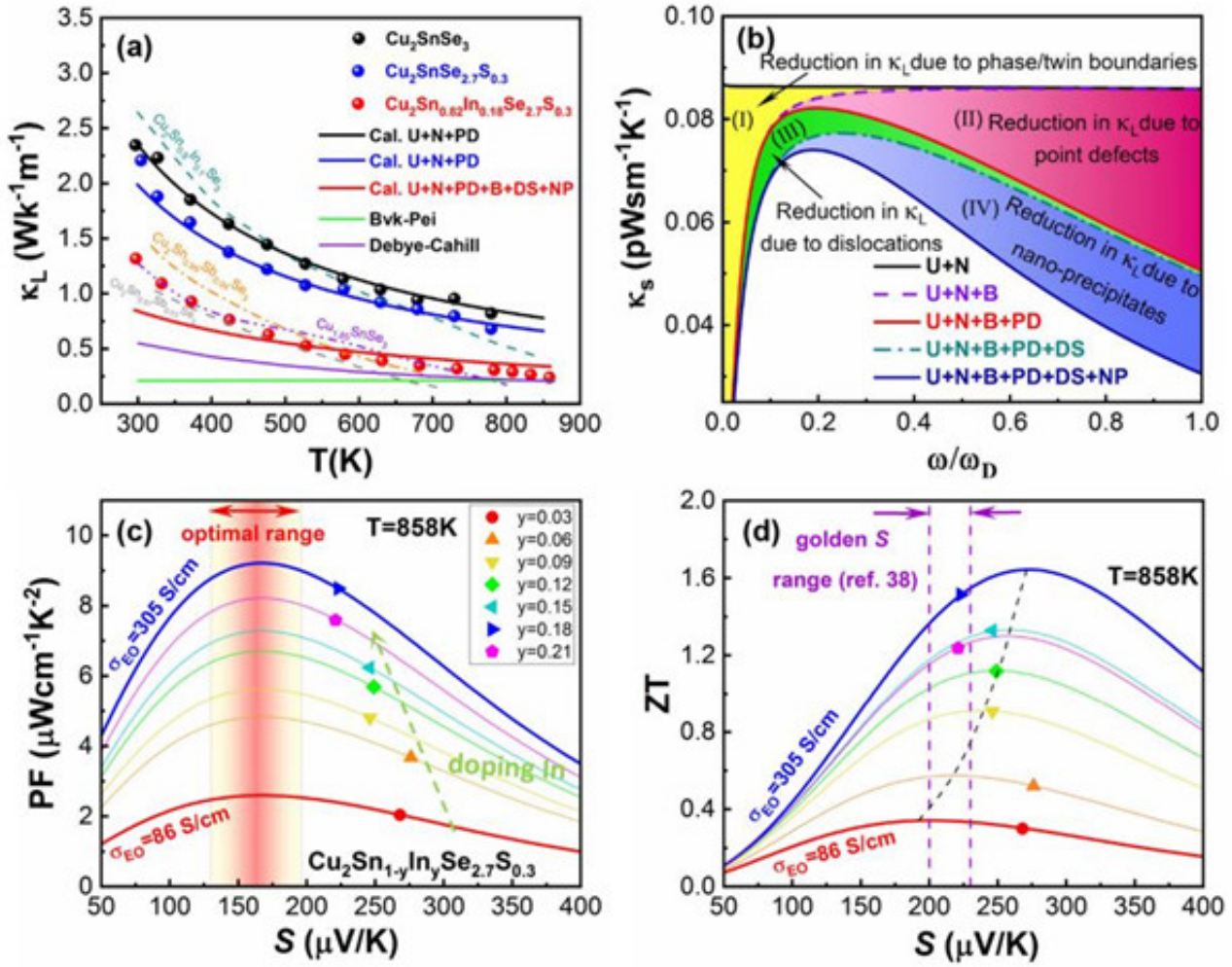


图3.(a)晶格热导率随温度变化图, 其中实心球为实验数据, 实线为理论计算结果; (b)考虑不同声子散射机制时 κ_s 随频率变化关系; PF(c)和ZT(d)随热电势变化图, 其中点为实验数据, 实线为计算结果。

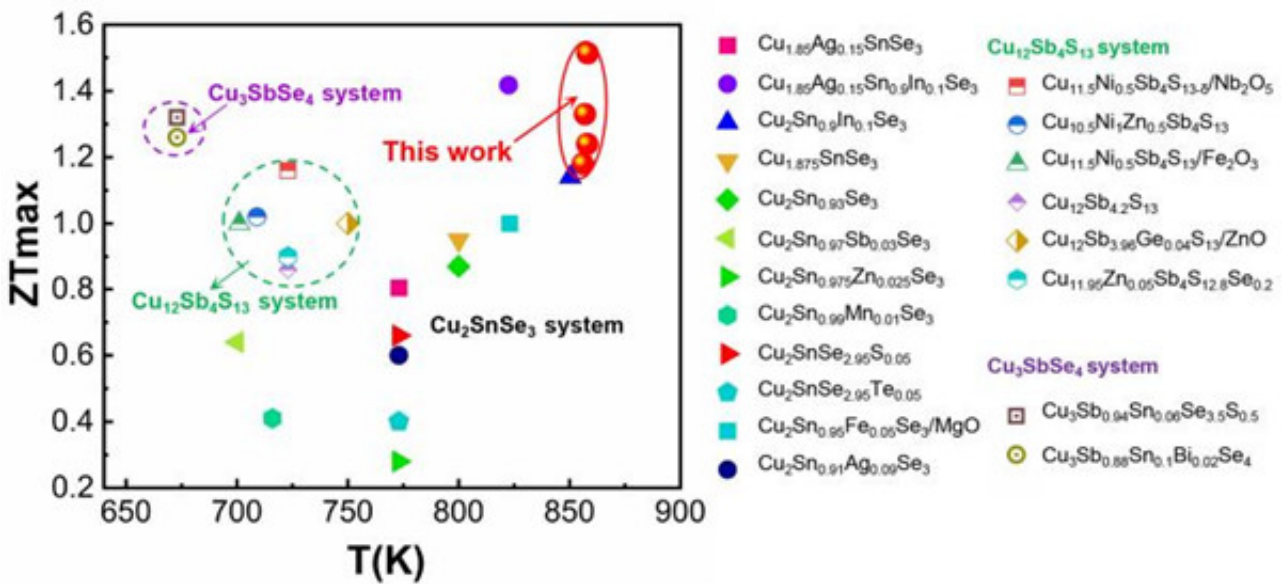


图4.858 K时 Cu_2SnSe_3 的最高ZT值与其它研究结果对比。

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](http://www.iikx.com)转发