武汉理工揭示热电半导体纳米孪晶PbTe的塑性机制

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/17893.html

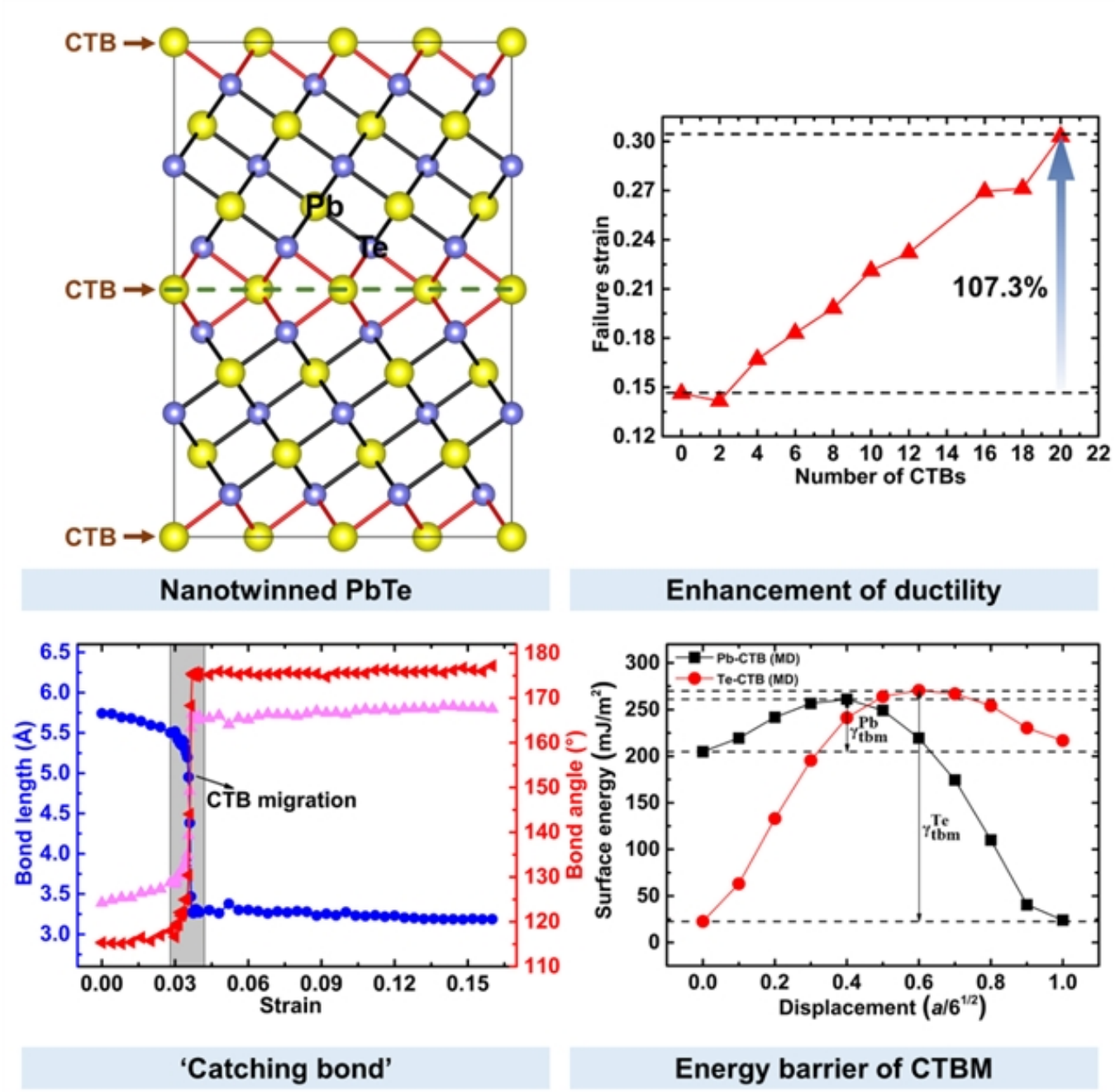
本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

武汉理工揭示热电半导体纳米孪晶PbTe的塑性机制。
2022年4月6日，武汉理工大学的李国栋教授、张清杰教授与美国加州理工学院William A. Goddard III教授合作在Matter期刊上发表了一篇题为Nanotwin-Induced Ductile Mechanism in Thermoelectric Semiconductor PbTe的新研究。

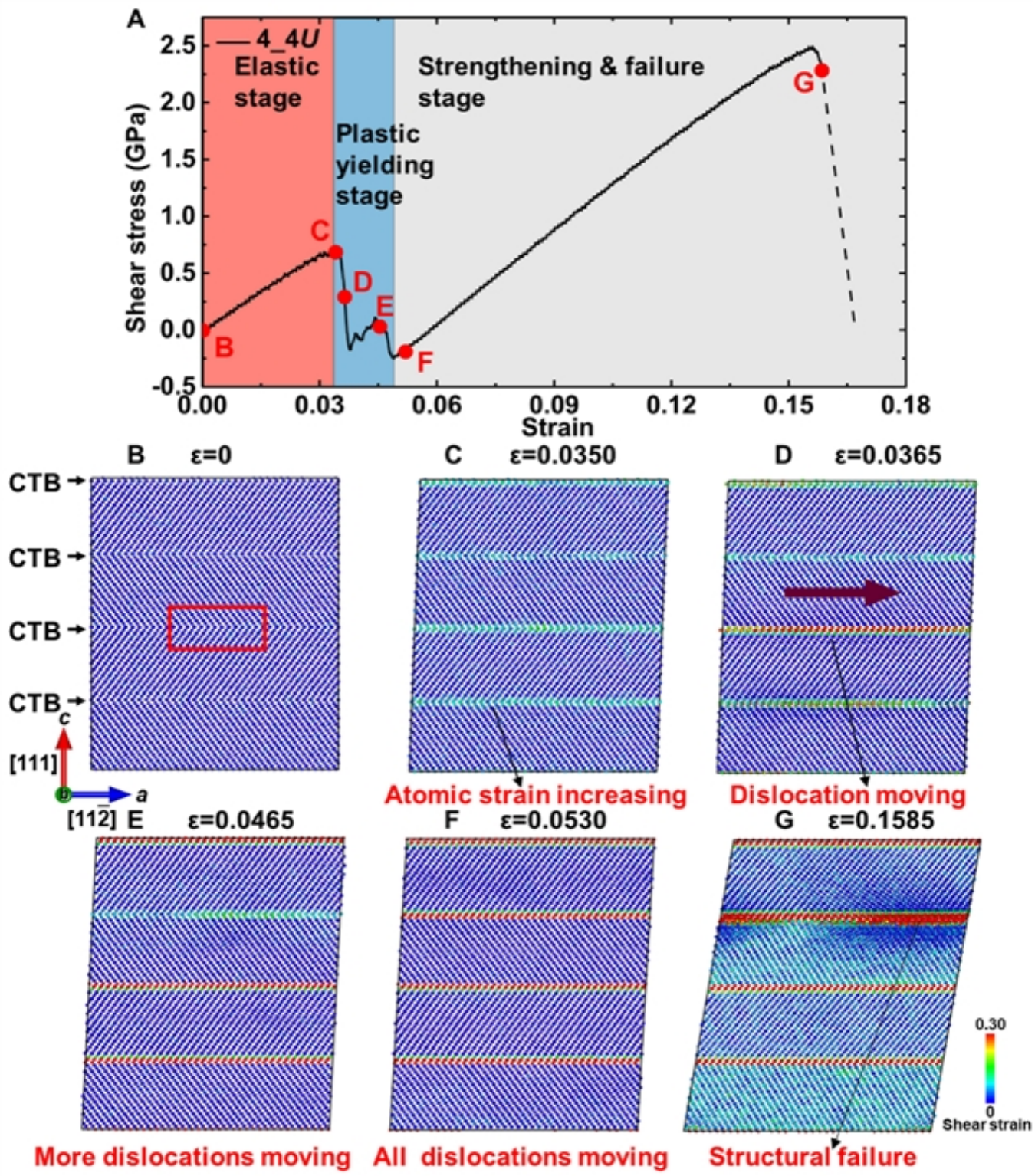
研究团队应用分子动力学模拟研究了沿（111）晶面建立的纳米孪晶PbTe（分别包含Pb孪晶界和Te孪晶界）在剪切载荷下的结构演化规律和失效机理。

热电材料通过塞贝克效应和帕尔贴效应实现热电能量转换和热电制冷，是有着广泛应用前景的新能源材料。而热电材料大多是无机半导体，具有本征脆性，无法满足热电器件对可折叠、可拉伸、可弯曲性能的要求，并且热电器件在长期在循环热应力工况下很容易发生裂纹扩展结构失效。因此需要对热电材料的热电性能和力学性能进行优化来满足热电器件大规模商业化应用的需求。共格孪晶界作为一种特殊的晶界，晶体结构以孪晶界呈镜面对称、界面能较低、热稳定性好，能够有效降低热电材料晶格热导率并且保持其电性能，同时，共格孪晶界也会对材料的强、韧性等力学性能产生显著影响。

李国栋教授所在团队近10年来一直致力于热电材料的强、韧性及协同调控机理的研究工作，发展了通过纳米孪晶策略提高热电材料的机械强度和断裂韧性的方法。相关研究成果表明，纳米孪晶可以有效增强Bi2Te3、InSb热电材料的强度并大幅降低Mg2Si热电材料的晶格热导率。碲化铅（PbTe）基热电材料具有优异的热电性能，有研究证实共格孪晶界能够大幅度降低PbTe材料的晶格热导率，提高材料的热电性能。但共格孪晶界对PbTe材料强、韧性等力学性能的影响机理尚未研究。



李国栋教授等人应用分子动力学模拟研究了沿（111）晶面建立的纳米孪晶PbTe（分别包含Pb孪晶界和Te孪晶界）在剪切载荷下的结构演化规律和失效机理。单晶岩盐结构的PbTe材料中Pb-Te离子键的断裂主导材料的失效过程，具有典型的脆性破坏特征。而包含Pb孪晶界的纳米孪晶PbTe材料表现出独特的塑性失效过程。随着模型中Pb孪晶界数量的增加，材料的极限应变增加，计算的最高增幅可达107.3%（Pb孪晶界数量为20）。



此破坏过程归纳为三个阶段：弹性阶段、塑性屈服阶段和强化破坏阶段。在剪切载荷驱动下各Pb孪晶界面上不全位错成核并沿孪晶面滑移，致使Pb共格孪晶界逐渐迁移到Te共格孪晶界。通过分析化学键响应过程，Pb孪晶界附近的Pb-Te离子键发生软化，形成一条易激发的不全位错滑移路径。在剪切载荷作用下Pb孪晶界附近的Pb-Te离子键发生断裂和重组，这种抓紧键可以有效地释放内应力并且保持结构的完整性，极大地增强纳米孪晶PbTe的变形能力。从能量角度考虑，Pb孪晶界迁移势垒低于Te孪晶界迁移势垒，使得Pb孪晶界迁移较易发生。这些发现在原子尺度上

揭示了纳米孪晶PbTe塑性屈服动态过程，为优化PbTe基热电材料的力学性能提供理论指导。（来源：科学网）

相关论文信息：https://doi.org/10.1016/j.matt.2022.03.010

作者：李国栋等 来源：《物质》

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