合肥研究院在高性能Pyrite型过渡金属二硫化物热电材料的化学趋势方面获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/19203.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研究员张永胜课题组在三种Pyrite型IIB-VIA_2（ZnS_2、CdS_2和$CdSe_2$）过渡金属二硫化物的热电性能研究方面取得新进展。该研究计算分析了三种不同Pyrite型二元硫化物的热学和电学输运性质，发现它们均具有良好的热电性能；分析了与原子成键、晶格振动和电子结构分布间的热电趋势。相关研究成果发表在*Physical Review B*上。

探索高性能热电材料的物理机制是寻找、优化和设计良好热电材料的基础。前期，张永胜课题组通过高通量计算发现了多种Pyrite型IIB-VIA_2化合物是潜在高性能热电材料。本研究中，课题组利用理论计算方法进一步解释了其中的物理机制并探索了其中可能存在的热电趋势，验证了三种Pyrite型IIB-VIA_2化合物的良好热电性能并对比分析了它们的声子和电子性质。

在热学输运方面，研究发现这三种Pyrite型化合物均具有低的晶格热导率（室温下，可低至2 W/mK以下）。这是由于它们含有成键弱的具有类rattling效应的金属原子和成键强的非金属二聚体，这些金属原子导致化合物具有大量软的声子模式，此外，所有原子沿垂直于非金属二聚体的振动导致强的非简谐效应。在软的声子模式和强的非简谐效应的共同作用下，这些Pyrite型化合物均表现出低的晶格热导率。进一步对比研究发现，体系中更重的原子质量、更大的原子位移参数和更长的原子间键长，有利于化合物具有更软的声子模式和更强的非简谐效应，导致化合物具有更低的晶格热导率。

在电学输运方面，研究显示这三种Pyrite型化合物都具有高的功率因子（室温下，均可高于5.0 mW/mK^2）。这来源于体系复杂的费米面结构使它们在价带顶和导带底同时具有大的态密度有效质量和小的电导率有效质量，保证了它们的大的Seebeck系数和高的电导率。结合它们的低的晶格热导率和高的功率因子，这三种Pyrite型化合物均可表现出良好的热电性能【室温下，热电优值（ZT值）均可大于0.5】。

该研究论证了三种Pyrite型IIB-VIA_2（ZnS_2、CdS_2和$CdSe_2$）过渡金属二硫化物的良好热电性能，并分析总结了其中的物理机制和热电趋势，可为未来实验和理论上寻找和优化含有类似类rattling效应的金属原子和强非金属二聚体的高性能热电材料的研究提供参考。

研究工作得到国家自然科学基金和中国博士后科学基金的支持。

论文链接

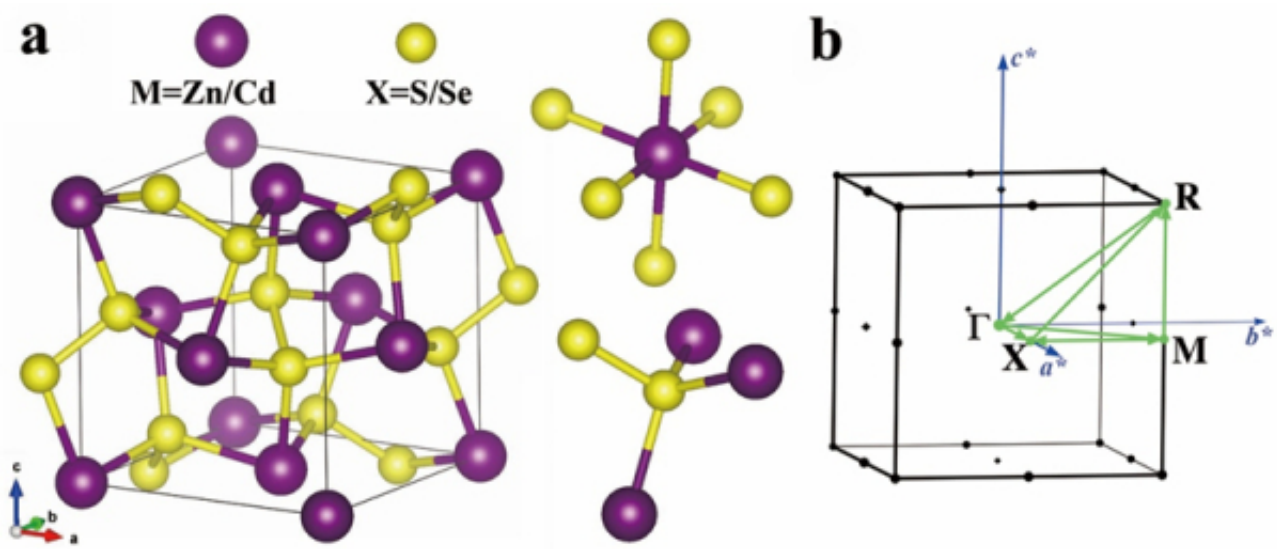


图1.Pyrite型化合物的晶体结构（a）和相应的布里渊区（b）

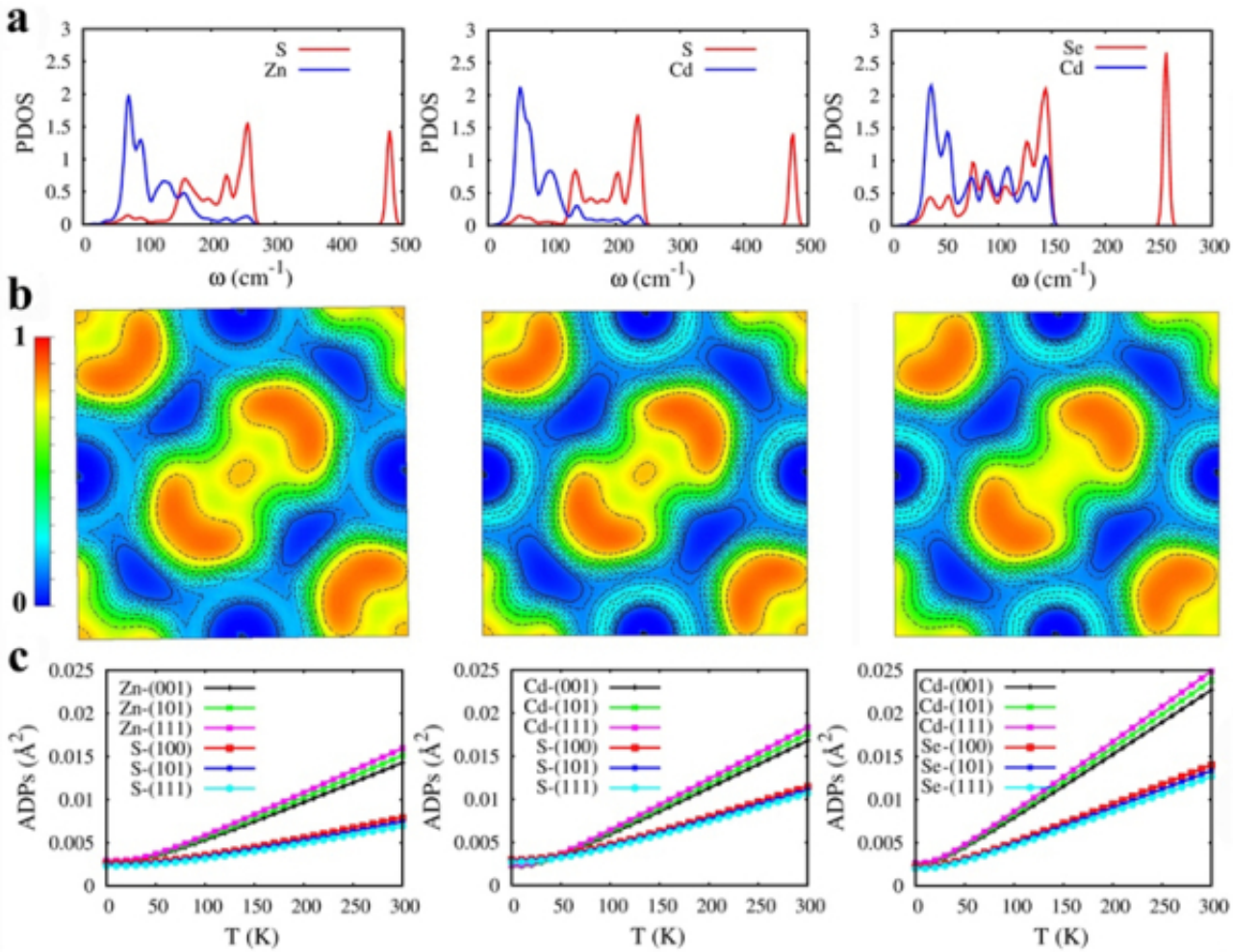


图2.三种Pyrite型化合物中不同原子贡献的声子态密度（PDOS）（a），强的非金属二聚体上的局域电荷分布情况（b）和具有类rattling效应的金属原子的原子位移参数（ADP）在不同温度下的变化情况（c）

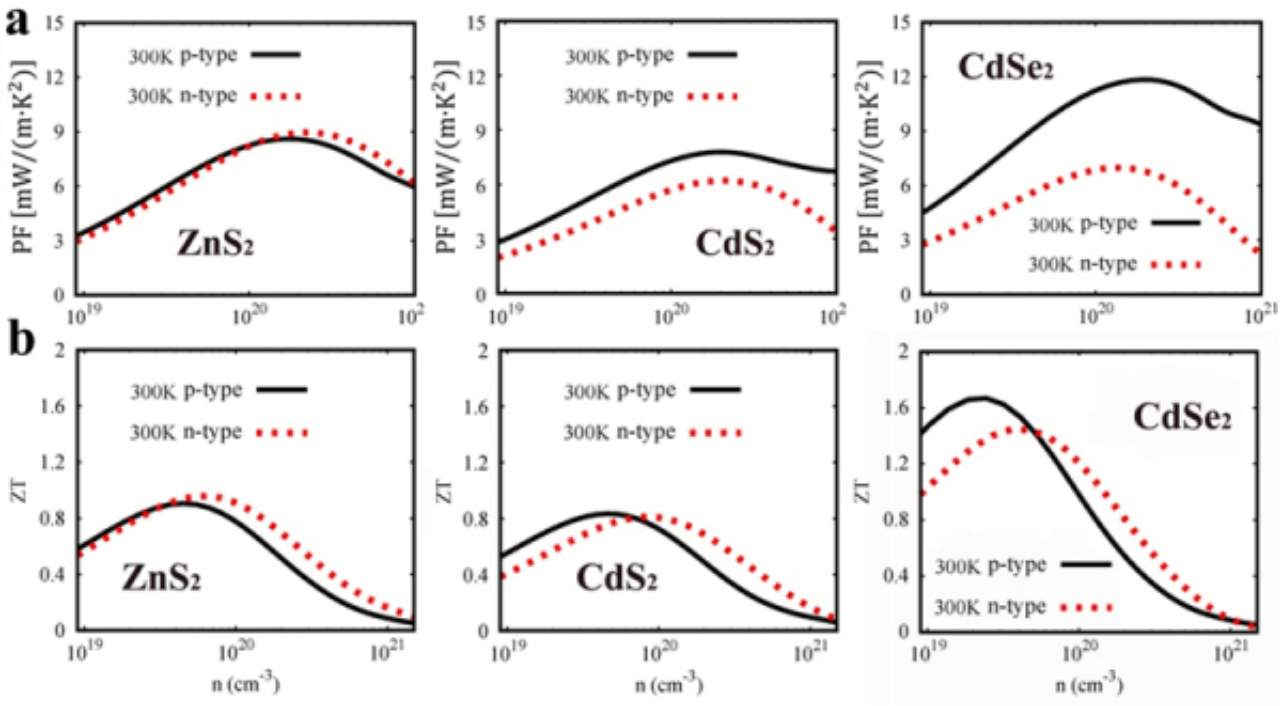


图3.室温下，三种Pyrite型化合物在不同载流子浓度下的电学输运性质（PF）（a）和热电优值（ZT）（b）

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