热电半导体碲化铋的堆垛层错致强化机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/23872.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！

热电半导体碲化铋的堆垛层错致强化机制。
2023年8月9日，武汉理工大学功能材料力学团队在Matter期刊上发表了题为Stacking Fault Induced Strengthening Mechanism in Thermoelectric Semiconductor Bi2Te3的研究成果。

该成果报道了一种高相对密度堆垛层错策略，可以改善范德华相互作用实现层状碲化铋材料剪切强度的显著提升，并通过实验和理论计算加以验证，为开发具有高热电优值和力学性能的层状热电材料提供了新的策略。

团队博士研究生黄写格为第一作者，李国栋教授、段波教授、美国加州理工学院William A. Goddard III教授为共同通讯作者。

随着5G和物联网的快速发展，可用于芯片冷却、无线传感器、可穿戴设备等领域的微型热电器件备受关注。碲化铋基热电材料是构建微型热电器件的关键室温材料。微型热电器件的单个热电支腿只有几十微米甚至更小，这要求碲化铋具有优异的机械可加工性。然而，弱的范德华相互作用导致碲化铋材料本征强度极低，在微加工过程中容易出现缺边和微缺陷，在很大程度上限制其在5G、物联网等领域的应用。

李国栋教授团队基于堆垛层错策略，应用分子动力学模拟研究了剪切载荷下堆垛层错对碲化铋力学行为的影响。研究表明，高相对密度的堆垛层错可以诱导所有范德华层结构重组，最终演变成具有较小层间距的全堆垛层错结构，层间距减小11%，并通过实验证明。这显著增强了碲化铋的范德华相互作用，使得极限抗剪强度提升2倍。相反，由于范德华层的解理，低相对密度的堆垛层错降低了碲化铋的极限抗剪强度。

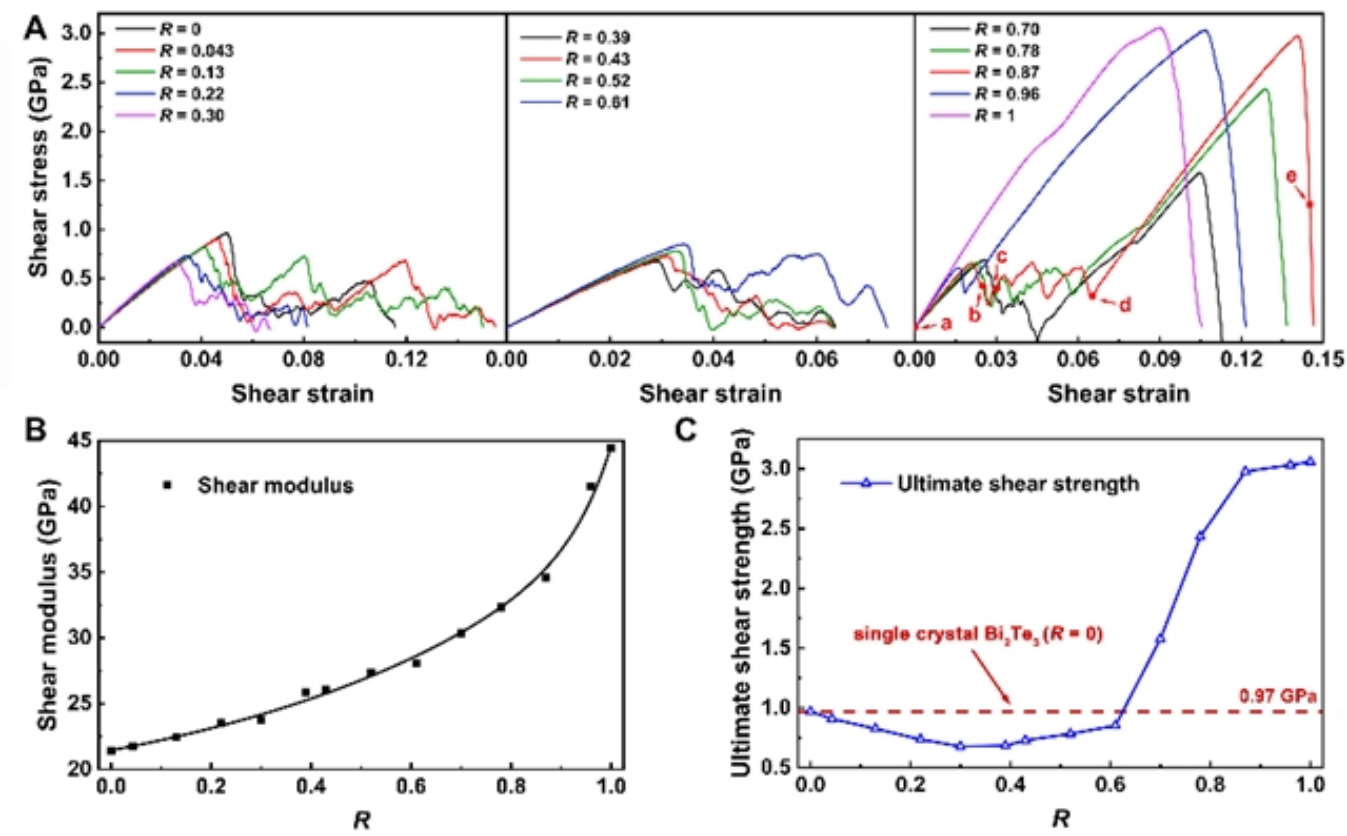


图1：分子动力学模拟的力学性能。

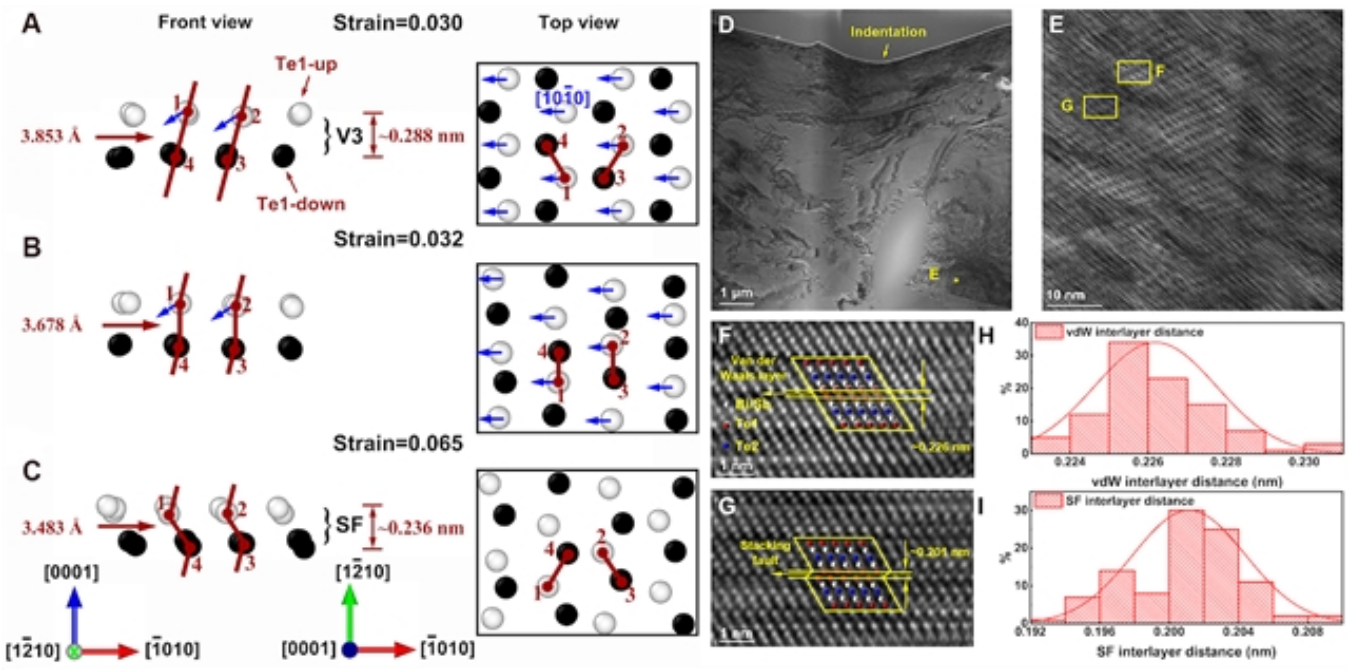


图2：堆垛层错的形成机制。

通过第一性原理研究发现，这种不同的结构演化取决于堆垛层错能与解理能之间的竞争关系，高相对密度的堆垛层错模型中，滑移诱导堆垛层错形成比解理更容易，导致结构重组形成具有更小

层间距的全堆垛层错结构。

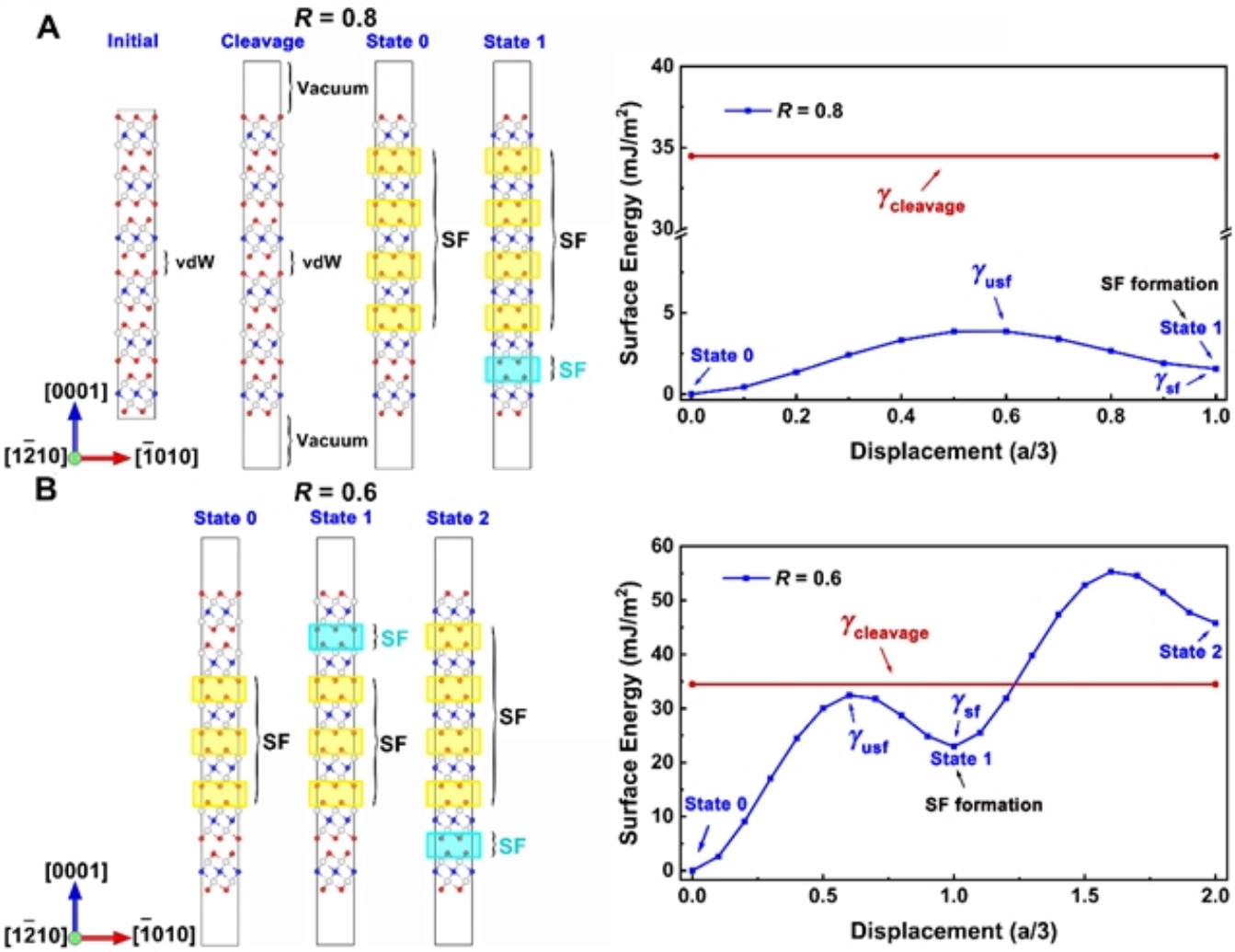


图3：第一性原理的计算结果。

武汉理工大学功能材料力学团队针对功能材料和器件在服役环境及工业应用中的关键力学问题，重点开展原子分子尺度力学理论与方法、材料微结构与热-电-力学性能优化、热电器件结构设计等方面的研究，为设计和制备高性能热电材料和器件提供了理论支撑。(来源：科学网)

相关论文信息：https://doi.org/10.1016/j.matt.2023.07.017

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