
高性能热电器件获新突破

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/26270.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！

高性能热电器件获新突破。近日，哈尔滨工业大学（深圳）材料科学与工程学院教授张倩团队在高性能热电器件领域研究取得重要进展，提出了一种基于相图计算的方法与纳米银低温烧结技术的热电器件全链条制备方案，突破了热电器件连接瓶颈。该研究成果发表于《自然—通讯》上。

热电器件可以实现热能与电能之间直接相互转换，是一类重要的能量转换器件。接触层是热电器件的重要组成部分，在热电材料和金属电极之间起到隔离、防止扩散的作用。

目前接触层材料的设计选择主要基于实验法，即通过重复实验或高通量实验制备多种异质界面、筛选可用的金属元素或者合金。这类试错法筛选范围有限、耗时耗力，难以形成指导理论推广到其他热电材料体系中。另外，基于密度泛函理论计算筛选接触层材料的方法，由于仅描述材料在理想状态下的性质，与实际应用往往存在较大差异。

相图计算方法不同于密度泛函理论相图计算，是基于热力学理论建立材料体系各相的吉布斯自由能模型。采用相图计算方法获得的热力学数据库可以准确描述宽成分、温度和压力范围内的热力学性质，由此获得的平衡相图能够广泛地指导新型接触层材料的设计与研制。

在该研究中，研究团队提出基于相图计算方法筛选热电器件接触层材料的策略，阐明了两相平衡区域与热电接头界面结构的对应关系。

以Zintl相器件为例，团队成功应用相图计算技术，建立了三元系热力学数据库，筛选出在服役温区内（室温至773开氏度）与n型Mg₃Sb₂基材料平衡共处的Mg₂Ni作为接触层材料。采用低温纳米银烧结工艺制备的n型单腿Mg₃Sb₂基器件的效率可达13.3%。

在673开氏度下时效处理800小时后界面形态、界面接触电阻及连接强度均无显著变化，与p型YbZn₂Sb₂基材料组建的全Zintl相热电器件在430开氏度的温差下获得了11%的发电效率，是为目前全Zintl相器件的最高值。

该研究旨在建立热电材料体系完善的相图热力学数据库，拓展了热电器件接触层材料的研究范围，简化了热电器件的开发周期，对于热电领域的发展具有重要意义。（来源：中国科学报 刁雯蕙）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-024-45869-w>

作者：张倩等 来源：《自然—通讯》

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](https://www.iikx.com)转发