无机非金属材料塑化调控研究取得重要进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/30729.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！

无机非金属材料塑化调控研究取得重要进展。

无机非金属材料因丰富的结构与功能特性得到广泛应用，而室温下通常表现为脆性，难以像金属一样精准加工且易突然断裂造成灾难性失效。近年来，一些具有本征塑性的无机非金属材料陆续被发现，拓展了科学家对材料的传统认知，带来了较多潜在的颠覆性应用。目前，具有本征塑性的块体无机非金属材料聚焦Ag基半导体、二维材料、Mg
基化合物等，但材料种类较稀少且其物理性能如热电性能低于经典的脆性材料。

近日，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员仇鹏飞、史迅和陈立东，联合中国科学院大学杭州高等研究院与上海交通大学的科研人员，
在脆性碲化铋（Bi_2Te_3
）基材料中通过调制反位缺陷诱导形成高密度/
多样化的微观结构，实现了材料从脆性至塑性的转化，将塑性热电材料的室温热电优值提升至约1.0且与传统脆性热电材料相当。相关研究成果以*Room-temperature exceptional plasticity in defective Bi_2Te_3-based bulk thermoelectric crystals*为题，发表在《科学》（*Science*）上。

材料表现为塑性或脆性取决于外力作用下裂纹扩展和塑性变形之间的竞争。如果施加的应力在材料内
部裂纹形
成或传播之前被快
速弛豫或耗散，材料通常为塑性，反
之则为脆性。高密度/
多样化的微观结构可以有效弛豫或耗散应力以阻止裂纹传播。但是，无机非金属材料无法像金属一样在外力作用下自发形成高密度/
多样化的微观结构，导致其通常表现为脆性。理论上，当无机非金属材料同时存在两种及以上的高浓度本征缺
陷时，缺陷间的相互作用、
聚集和移动可能在材料内部引入高密度/多样化的微结构，有望实现材料的塑化。

Bi_2Te_3
基材料是室温区域最好的热电材料，在固态制冷、精准控温和局域热管理等方面已实现广泛商业应用。它们通常为脆性，在外力作用下
易于开裂。由于Bi和Te相近的原子半径和电负性，Bi_2Te_3
基材料易形成高浓度的本征缺陷。特别是，

当Bi:Te摩尔比达2:3时，反位缺陷Bi_{Te}和Te_{Bi}
具有相近的极低缺陷形成能，晶格中可同时存在高浓度Bi_{Te}和Te_{Bi}
反位缺陷，进而诱导形成高密度/多样化的微观结构来影响材料的力学性能。

该研究利用温度梯度法制备了化学计量比
精确调控的Bi_2Te_3块体单晶。Bi_2Te_3
块体单晶可以被弯曲成为环状等各种形状而不发生开裂，展现出优良的塑性变形能力。力学性能测试表明，Bi_2Te_3
块体单晶沿面内方向的三点弯曲应变量＞20%，压缩应变量＞80%
，拉伸应变量约8%
，与已报道的塑性无机非金属材料相当
，高于脆性多晶Bi_2Te_3材料。透射电镜表征发现，Bi_2Te_3单晶存在由Bi_{Te}和Te_{Bi}
反位缺陷转变而成的高密度/
多样化的微结构，如线缺陷（位错、涟漪）或面缺陷（交错层、超位错）甚至局部晶格畸变等。

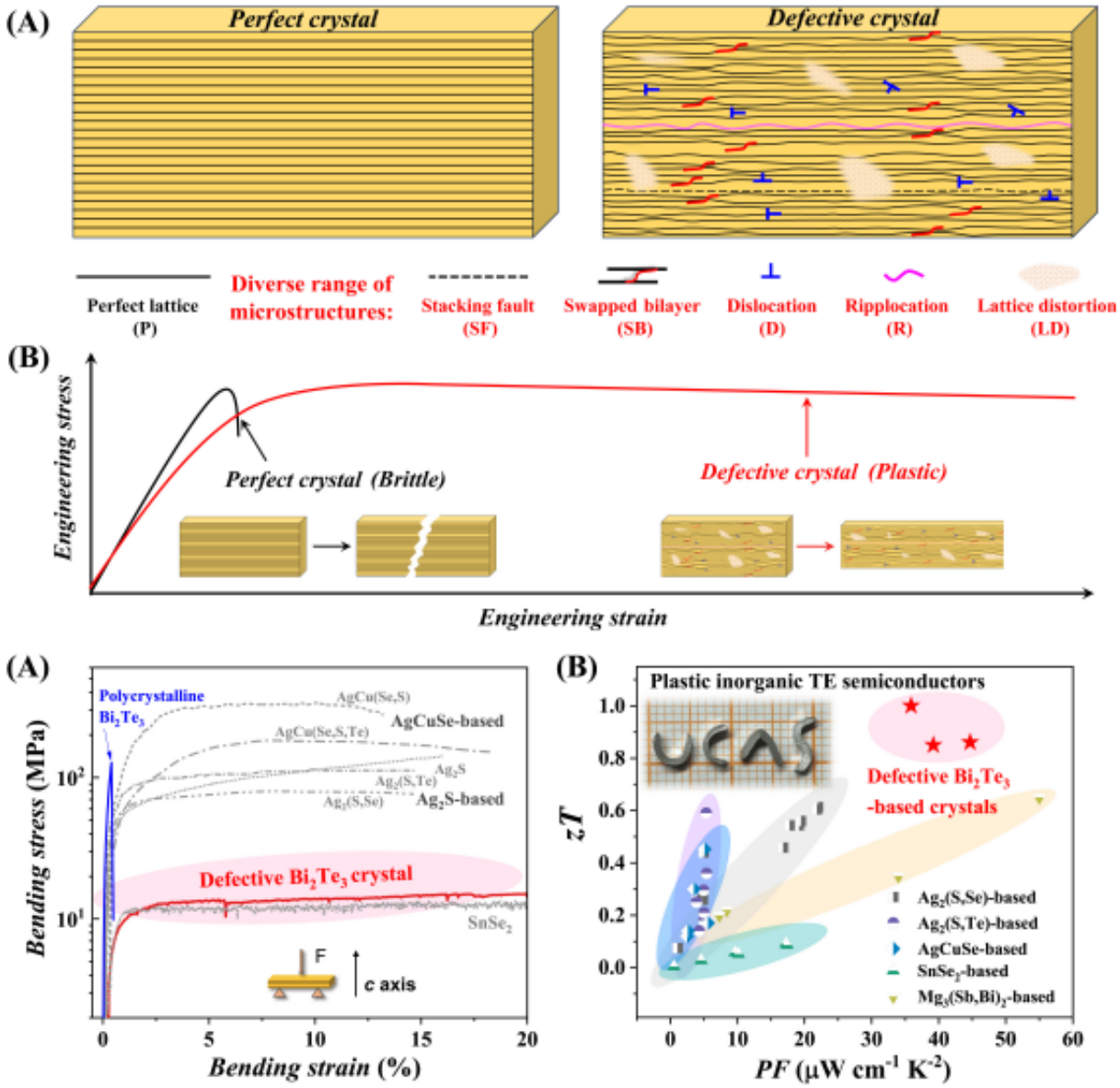
该研究以交错层和涟漪两种微结构为例，利用分子动力学计算揭示了其对力学性能的影响。在缺陷Bi_2Te_3单晶中，范德华层间存在Bi-Te
化学键且
原子剪切应变分布
不均匀，表明剪切过程中存在原子的
局部位移。层间Bi-Te
化学键可以作为桥梁连接近邻的范德华层以强化层间相互作用和抑制层间解理。同时，交错层中的原子形成Te-Bi-Te-Bi
四元环，在剪切过程中可像轮子一样连续滚动以促进层间滑移。拉伸模拟过程中的应力分析表明，跨层剪切主要发生在交错层和涟漪两种微结构附近。交错层附近存在微裂纹，但其扩展受到涟漪的阻碍。上述结果证明了高密度/多样化的微观结构是Bi_2Te_3单晶发生塑化的重要原因。

塑性Bi_2Te_3单晶具有优异的热电性能，室温功率因子和热电优值分别达到39.2
$\mu Wcm^{-1}K^{-2}$和0.86，高于已报道的塑性热电材料。在10
毫米弯曲半径下弯曲400
次后，材料热电性能几乎未发生变化。通过固
溶Sb调控载流子浓度，可在保持优良塑性的同时，将室温功率因子和热电优值进一步提高至44.7
$\mu Wcm^{-1}K^{-2}$和1.05。研究选取塑性$Bi_{0.8}Sb_{1.2}Te_3$单晶和$Ag_2Se_{0.67}S_{0.33}$分别作为p型和n
型热电臂，制备了8对具有Y型结构的柔性热电器件。在19°C
的环境温度下，研究将该器件佩戴于人体，获得的器件最大归一化功率密度为2.0
μWcm^{-2}且高于基于其他塑性热电材料的器件。

上述工作开发了新型高性能塑性无机热电材料，提供了将脆性材料转变为塑性材料的有效策略，为脆性无机非金属材料的塑化研究提供了重要借鉴。

研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金以及上海市科学技术委员会等的支持。

论文链接



具有高密度/多样化微结构的塑性Bi_2Te_3晶体的（A）三点弯曲应力-应变曲线和（B）热电性能

研究团队单位：上海硅酸盐研究所

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