黄铜矿基热电材料研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/39096.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！

黄铜矿基热电材料研究获进展
。近期，中国科学院合肥物质科学研究院联合
中国
科学技术
大学等，在黄铜矿
基热电材料研究方面取得进展。研究
团队通过Ag/In合金化
技术，在黄铜矿基热电材料中引入
电荷平衡的双反位错缺陷。
该电中性双反位错
缺陷在提升载流子浓度的同时保持载
流子迁移率，并通过In
合金化诱导的合金无序散射与纳米畴之间的相互作用增强声子散射，进而抑制晶格热导率。

热电材料能够高效将热能转化为电能
，是能源领域研究热点，其性能由无量纲优值
$ZT=S^2\sigma T/\kappa$ 决定。高性能热电材料需同时
满足高电导率、高塞贝克系数和低热导率。但是，热电材料中电子与声子的调控参数具有强耦合
特性，难以协同调控，制约
材料性能提升。当前的主要问题在于
，保持甚至增强材料固有电输运性能的同时抑制热输运，这也是性能突破的关键。

研究团队通过铟合金化技术，在$Cu_{0.7}Ag_{0.3}GaTe_2$
体系中引入电荷平衡的双反位缺陷。在$Cu_{0.7}Ag_{0.3}Ga_{1-x}In_xTe_2$体系中，Cu/Ag与Ga/In
的原子比例偏离严格的1：1化学计量比
，这
种固有的
化学计量偏差为反
位缺陷的形成提供了热力学驱动力。
热力学分析表明，Ag与Cu
之间存在互溶性间隙，
易发生相分离。因此，为实现原子尺度的均匀
混合、抑制Ag-Cu
相分离并形成均匀固溶体，

需要促进反位缺陷形成。此外，由于Cu、Ag、Ga和In
四种元素的原子半径相近，反位缺陷引起的晶格畸变较小，相应的缺陷形成能垒也相对较低，为双反位缺陷的稳定存在提供了有利条件。这种双反位缺陷解耦了声子散射与载流子散射机制，在保持高载流子浓度的同时提升了载流子迁移率。结果表明，双反位缺陷增加了载流子有效质量，提升了价带顶附近的态密度，并优化了塞贝
克系数。
同时，由铟合金化引发的合金无序散射和纳米级畴结构等复杂微观结构，增强了声子散射效应。多种声子散射机制的协同作用使$Cu_{0.7}Ag_{0.3}Ga_{1-x}In_xTe_2$（x=0-0.5）的热导率降低。$Cu_{0.7}Ag_{0.3}Ga_{0.6}In_{0.4}Te_2$在873K时实现2.03的ZT值（零温差），在300K-873K温度范围内平均ZT值达0.61
，较纯$CuGaTe_2$提升约59%，实现了热电性能的突破。

这一双反位缺陷策略改变了点缺陷工程的格局，并打破了电输运与热输运长期存在的权衡关系。

相关研究成果发表在《美国化学会志》（*JACS*
）上。研究工作得到国家自然科学基金和国家重点研发计划等的支持。

论文链接

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