

---

# 黄铜矿基热电材料研究获进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39242.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 $ZT=S^2 T/\kappa$ 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。

研究团队通过铜合金化技术，在 $\text{Cu}_{0.7}\text{Ag}_{0.3}\text{GaTe}_2$ 体系中引入电荷平衡的双反位缺陷。在 $\text{Cu}_{0.7}\text{Ag}_{0.3}\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}_2$ 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，由铜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 $\text{Cu}_{0.7}\text{Ag}_{0.3}\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}_2$  ( $x=0-0.5$ ) 的热导率降低。 $\text{Cu}_{0.7}\text{Ag}_{0.3}\text{Ga}_{0.6}\text{In}_{0.4}\text{Te}_2$ 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<sub>2</sub>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。（来源：中国科学院合肥物质科学研究院）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.6c02266>

特别声明：本文转载仅仅是出于传播信息的需要，并不意味着代表本网站观点或证实其内容的真实性；如其他媒体、网站或个人从本网站转载使用，须保留本网站注明的“来源”，并自负版权等法律责任；作者如果不希望被转载或者联系转载稿费等事宜，请与我们联系。

---

作者：张建等 来源：《美国化学会志》

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](http://www.iikx.com)转发