
福建物构所材料热电转化机理的理论研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/4678.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！

福建物构所材料热电转化机理的理论研究取得进展。自旋轨道耦合(SOC)作为固体材料中的基本相互作用之一，对电子的输运行为有着显著的已知影响。但其对声子这种与固体材料中声、热传导直接相关的基本粒子的影响在很大程度上仍然未知。目前所有相关研究都集中在SOC如何影响各种材料中声子输运的谐性项，而少有研究SOC对声子非谐性的影响及其后果的工作。例如在对材料热电性质的研究中，人们通常认为SOC仅影响声子的谐振性质，因此在计算晶格热导率时可以被忽略。

在科技部纳米重点专项、中国科学院战略性先导科技专项以及海西研究院前瞻跨越专项的支持下，中科院福建物质结构研究所结构化学国家重点实验室庄巍课题组从理论上研究了在具有超高热电转换效率的SnSe体系中SOC如何影响声子输运以及热电效率的问题。使用第一性原理计算和玻尔兹曼输运方程，该课题组发现SOC极大地增强了材料中晶格热导率(高达~60%)。庄巍课题组还首次提出这种增强源于其对声子非谐性的影响：SOC通过削弱由Se原子的p轨道形成的离域共振键网络来增强层间Sn-Se键，因此削弱了声子非谐性。上述研究成果发表在Nano Energy上。

该成果是庄巍课题组自2016年起在热电机理研究方向上的最新进展，以前的研究成果包括引入MoO₂纳米夹层物以显著增强MoS₂的热电性能(Journal of Material Chemistry A, 5:2004-2011, 2016);通过钛掺杂增强WS₂的热电性能(Journal of Material Chemistry A, 4:10159-10165, 2016);通过与AgSbSe₂合金化改善GeSe的热电性能(Angewandte Chemie International Edition, 56, 14113-14118, 2017)以及通过嵌入VMo₂S₄纳米夹杂物实现具有增强热电性能的p型MoS₂(Journal of Physical Chemistry B, 122, 2, 713-720, 2018)。

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