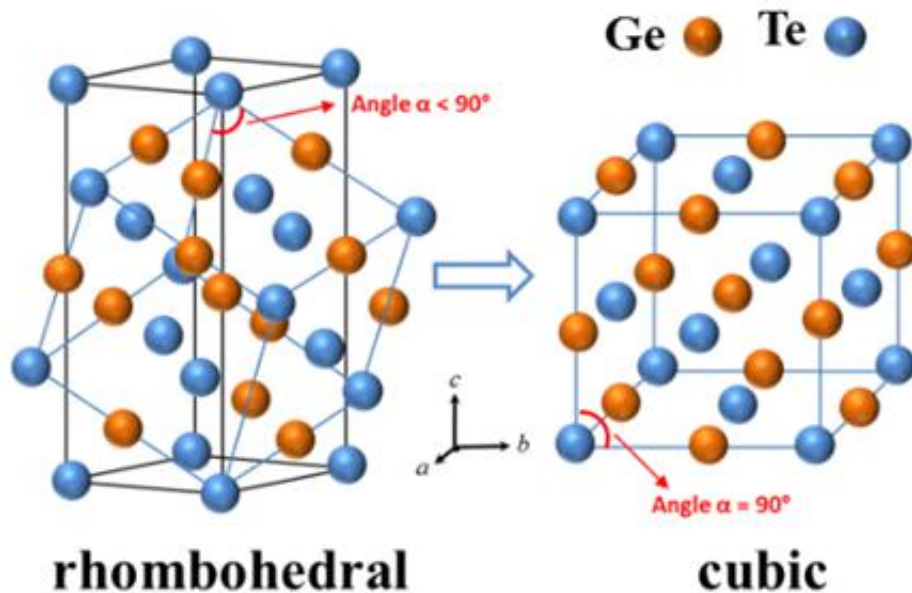


# 废热回收：掺杂改变热膨胀系数，推动GeTe热电材料实际应用

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5246.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！



GeTe室温菱方晶体结构和高温立方相晶体结构

废热回收：掺杂改变热膨胀系数，推动GeTe热电材料实际应用。热电材料可以将热能直接转变为电能，实现工业余热和汽车尾气废热的回收再利用，从而缓解能源危机。近年来，一系列新型高性能热电材料相继被发现并得到研究。其中，p型GeTe基热电材料的最高热电优值(ZT值)已突破2.0，理论能量转换效率达到12%，其性能在中低温区远高于经典的填充方钴矿材料等，显示出极大的应用前景。

然而直到今天，GeTe基材料研究多停留在材料性能方面，而未有实用器件问世。其中最重要的难点在于，材料相变前后热膨胀系数的巨大失配。GeTe材料在室温下是菱方相，热膨胀系数为 $1 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ；在700K左右转成立方相，热膨胀系数猛增为 $23 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ，是室温相的两倍；并且，GeTe在相变过程中还存在负热膨胀系数区域。这种相变前后热膨胀系数的巨大突变将会引起材料在升降温过程中体积剧烈变化，不利于器件的制备和长期服役。

---

最近，中国科学院上海硅酸盐研究所陈立东、史迅课题组在GeTe材料中同时掺杂Mg和Sb，有效提高了低温相的热膨胀系数，实现了GeTe菱方相与立方相热膨胀系数的匹配，并通过对其电热传输性能的调控获得了高达1.84的热电优值ZT，在此基础上成功制备了具有高服役稳定性的GeTe基热电单偶。相关研究结果以Superior performance and high service stability for GeTe-based thermoelectric compounds为题发表于《国家科学评论》(National Science Review, NSR)。

研究发现，(Mg, Sb)共掺可以改变GeTe菱方相结构的晶胞夹角，使其菱方相结构与立方相结构更为相近，从而大幅减小两种结构的热膨胀系数差异，并使负热膨胀系数区间消失。

此外，研究者还探寻了掺杂对材料电热传输性能的影响，从合成的一系列共掺化合物中寻找最优配比。当组分为Ge<sub>0.85</sub>Mg<sub>0.05</sub>Sb<sub>0.1</sub>Te时，菱方相热膨胀系数为 $19 \times 10^{-6}$  K<sup>-1</sup>，接近立方相热膨胀系数( $23 \times 10^{-6}$  K<sup>-1</sup>);其最高ZT值达1.84，在300-800 K温区内平均ZT值达到1.2，与已报道的最优结果相当。

更进一步，研究者以Ti为阻挡层材料，Ni为电极材料，成功制备了具有优良输出功率和服役稳定性的Ni/Ti/Ge<sub>0.85</sub>Mg<sub>0.05</sub>Sb<sub>0.1</sub>Te热电单偶。这些结果有力地推动了高性能GeTe基热电器件研制和应用研究。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwz052>

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