



重庆大学  
CHONGQING UNIVERSITY

# 第十六次中国热电材料及应用学术会议

# 会议手册

主办单位：中国材料研究学会热电材料及应用分会

承办单位：重庆大学

协办单位：四川大学 西华大学 重庆邮电大学  
重庆新型储能材料与装备研究院



中国·重庆

2024年10月13日-16日

# LINSEIS

pushing boundaries

# 德国林赛斯热分析

LINSEIS

THERMAL

ANALYSIS

## 提供全线热分析和热物性设备



### 经典热分析仪器

- ※ 可以提供-125°C到2400°C整个温度范围的解决方案
- ※ 可以测量样品熔点、结晶、热焓、比热容、玻璃转化点、失重等
- ※ 多种传感器和炉体可供选择
- ※ 可与MS、FTIR、GCMS等仪器联用



### 导热系列仪器

- ※ 可以提供-125°C到2800°C整个温度范围的解决方案
- ※ 样品类型：纳米膜、微米膜、块体、粉末、液体
- ※ 包含面间模式和面内模式测量
- ※ 可以测量样品导热系数、比热容、热扩散系数等
- ※ 可以测量样品热阻、接触热阻等



### 膨胀系列仪器

- ※ 可以提供-263°C到2800°C整个温度范围的解决方案
- ※ 可以测量样品线膨胀与收缩，玻璃转化点，软化点，烧结过程等
- ※ 可实现多炉体和多样品测量，提高测量效率
- ※ 仪器种类齐全，应用领域广泛



### 热电系列仪器

- ※ 测量样品霍尔系数、迁移率、载流子浓度等
- ※ 测量样品的电阻、电阻率、塞贝克系数等
- ※ 测量样品的热电转化效率等
- ※ 可以测量薄膜和块体样品

# LINSEIS

pushing boundaries

电话：021-505 506 42 010-622 378 12

邮箱：links@linseis.com.cn

网址：www.linseis.com.cn



# LINSEIS 德国林赛斯热分析

pushing boundaries

LINSEIS

THERMAL

ANALYSIS

## 热电领域热分析应用

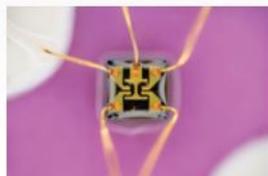
林赛斯致力于在热电领域提供最优解的热分析解决方案，为您提供合适的热分析产品，让您快速精准检测电阻率和电导率等。如塞贝克系数/电阻测量系统LSR、激光导热仪LFA、霍尔效应测量系统HCS、热阻导热测试仪TIM-Tester、薄膜综合物性分析仪等。



silicon wafer



resistors



micro chip



electronic components:  
circuit board



### ■ 霍尔效应测量仪 (HCS)

- 霍尔常数
- 迁移率
- 载流子浓度



### ■ 热阻导热测试仪 (TIM - Tester)

- 符合ASTM D5470标准，测量导热及接触热阻
- 适合导热膏、导热片、陶瓷基底、绝热片等固体、膏体样品
- LVDT传感器距离控制，最大接触压力2.5KN
- 测量厚度0.1 - 15mm



### ■ 激光闪射导热仪 (LFA)

- -125°C 至2800°C
- 多炉体/多样品转盘，自动进样器
- 薄膜及块体测量
- 可测样品尺寸3-25.4mm直径或方形



### ■ 赛贝克系数/电阻测量仪 (LSR)

- 同步测量赛贝克系数和电阻
- 棱柱、圆柱或线性及箔片特殊样品
- 可选配圆形样品、薄膜样品及高阻测量模块
- -100°C 至 1500°C
- 可直接测量ZT值



### ■ 薄膜综合热物性测量仪 (TFA)

- 纳米级薄膜测量
- 多个独立系统，模块化设计
- 可同步测量 $\lambda$ 、 $\rho$ 、 $\sigma$ 、 $S$ 、 $\varepsilon$ 、 $C_p$ 、 $AH$ 、 $\mu$ 、 $n$

LINSEIS  
pushing boundaries

电话: 021-505 506 42 010-622 378 12  
邮箱: links@linseis.com.cn  
网址: www.linseis.com.cn



## ■ 参会须知 ■

1. 本会议手册为代表们提供了有关会议的相关信息，供参会时参考。未尽事宜、日程与议程变更及临时活动，请随时留意会务组发布的通知；
2. 出席会议、乘坐会议班车，请佩带参会证；
3. 请在会场内关闭手机等通讯工具，会场禁止吸烟、大声喧哗；
4. 会议期间代表们自由活动产生的市内交通等费用自理；
5. 会议代表凭房卡在酒店用早餐，凭会务组发放的餐券在指定地点用午餐。餐券只能在会议指定的时间和地点使用，餐券遗失不补，结余券不退。如自行安排餐饮，费用自理；
6. 会议期间请注意安全，请妥善保管好公、私财物；
7. 会议期间会场门口设置医疗保障点，如有身体不适，请与会务工作人员联系或及时到医疗点就医。
8. 如遇有其他紧急情况或特殊问题，请与会务工作人员联系。

## ■ 联系方式 ■

会议报到：魏琳琳 18064266287 汪新灿 13855379315 荆韶洁 15637869908  
会期交通：赵琳琳 15071094016 马江平 18223230412 班朝刚 19936073093  
酒店住宿：陈 鹏 18883057439 闫艳慈 18323223205 吴 宏 18680785914  
会议餐饮：廖定容 18523554440 段有雨 15766228668 甘立勇 19912482912  
会场服务：王 莉 15101234160 曹丽转 13167871806 彭坤岭 18716576797  
会务统筹：魏 娟 13983251816 廖定容 18523554440  
融创施柏阁酒店、永乐半山酒店：张 俊 18883363290  
圣荷酒店：张德凤 023-65348888/17783846339

## ■ 会议简介 ■

第十六次中国热电材料及应用学术会议定于2024年10月13-16日在重庆山城国际会议中心召开。本次会议聚焦热电材料的前沿热点、创新应用与行业发展，旨在搭建交流合作、协同创新平台。通过集聚全国从事热电转换材料及器件应用的科研工作者，分享最新科研成果，研讨本领域国际研究前沿与创新应用，促进热电材料及应用的产学研深度融合，推动我国热电事业高质量发展。会议期间将召开中国材料研究学会热电材料及应用分会第四届第三次理事会会议。本次会议将评选优秀青年科学家奖、优秀研究生奖、优秀报告奖和优秀墙报奖。

## ■会议主题■

### 1. 热电输运理论与材料计算

分会召集人：杨 炯、刘惠军、邓天琪

### 2. 高性能热电材料及其制备与多尺度微结构表征

分会召集人：何佳清、武海军、王玉梅、苏贤礼

### 3. 柔性/有机热电材料与器件

分会召集人：陈光明、杜 永、姚 琴、蒋庆林、焦 飞

### 4. 低维与复合热电材料

分会召集人：赵立东、谭刚健、徐 磊、罗裕波

### 5. 热电磁材料与器件

分会召集人：赵文俞、贾 爽、付晨光、潘 瑜

### 6. 热电器件的设计、开发与应用

分会召集人：柏胜强、鄢永高、吕冬翔、刘紫航

### 7. 热电新概念及前沿交叉

分会召集人：林元华、张 倩、魏天然、李 文

### 8. 热电制冷与热管理技术

分会召集人：邓 元、苗 蕾、毛 俊、刘睿恒

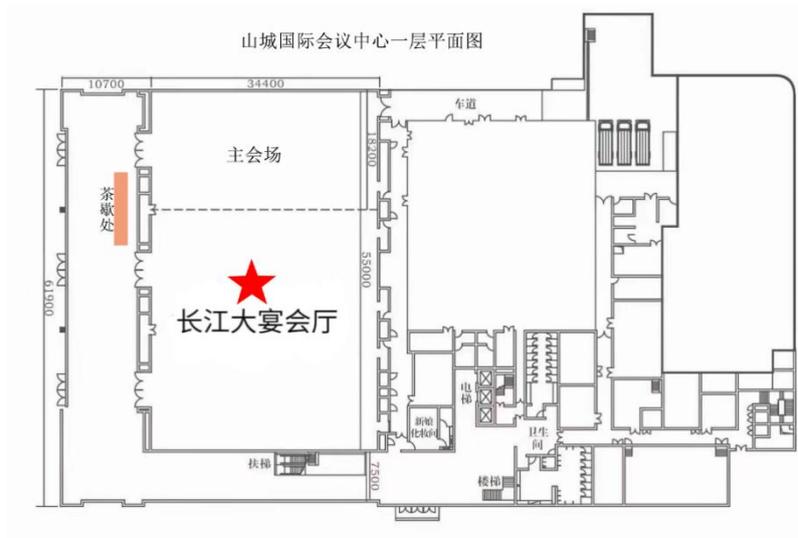
### 9. 小温差热电器件设计与应用

分会召集人：刘玮书、王连军、蒋庆林、刘 畅

## ■酒店地图■



■ 会场地图 ■



# 目 录

■主要日程安排 .....	4
大会报告安排 .....	6
会前科研培训安排 .....	8
A会场日程（嘉陵1厅） .....	9
B会场日程（嘉陵2厅） .....	15
C会场日程（缙云厅） .....	21
D会场日程（中梁厅） .....	27
■会议报告摘要 .....	33
大会报告摘要（P01-P05） .....	33
主旨报告摘要（K01-K11） .....	38
A分会场报告摘要（A01-A60） .....	42
B分会场报告摘要（B01-B52） .....	68
C分会场报告摘要（C01-C56） .....	90
D分会场报告摘要（D01-D62） .....	114
■墙报展示 .....	141
■平台简介 .....	168

主 办 单 位：中国材料研究学会热电材料及应用分会

承 办 单 位：重庆大学

协 办 单 位：四川大学 西华大学 重庆邮电大学

重庆新型储能材料与装备研究院

会 议 主 席：周小元，张勤勇，昂 然

会议学术委员会：张清杰，陈立东，赵新兵，张文清，唐新峰，  
李敬锋，蔡克峰，林元华，史 迅，杨荣贵，  
何佳清，邓 元，朱铁军，赵立东，赵文俞，  
裴艳中，杨君友，蒋 俊，陈光明，苗 蕾，  
张勤勇，王连军，隋解和，骆 军，周小元，  
肖 翀，张 倩，刘玮书，梁子琪

会议组织委员会：周小元，杨 炯，赵怀周，苏贤礼，武海军，  
万春磊，仇鹏飞，付晨光，姜 鹏，张永胜，  
康慧君，王洪超，葛振华，张 挺，帅 晶，  
徐 翥，王 洪，刘睿恒，谭刚健，李 文，  
毛 俊，周重见，魏天然，刘紫航，昂 然，  
王国玉，卢 旭，潘 瑜，韩 广

会 议 秘 书：韩 广，卢 旭，郑 珊

赞 助 单 位：国仪量子技术（合肥）股份有限公司  
林赛斯（上海）科学仪器有限公司  
甘肃金川六族新材料应用科技有限公司  
上海柯舜科技有限公司  
QUANTUM 量子科学仪器贸易（北京）有限公司  
耐驰科学仪器商贸（上海）有限公司  
中船鹏力（南京）超低温技术有限公司  
成都秦关仪器设备有限公司  
南京博蕴通仪器科技有限公司  
上海晨华科技股份有限公司  
凯戈纳斯仪器商贸（上海）有限公司  
四川步航创新科技有限公司  
曙光智算信息技术有限公司  
北京柯锐欧科技有限公司  
深圳市工视通智控技术有限公司  
多场低温科技（北京）有限公司  
武汉嘉仪通科技有限公司  
成都博康力源科技有限公司

## 主要日程安排

日期	时间	主要日程	地点
10月13日	全天	会议报到	重庆融创施柏阁酒店
	14:00-18:00	科研培训	华蓥+明月+古剑厅
	18:00-21:00	酒店自助晚餐	重庆融创施柏阁酒店 西餐厅
10月14日	08:30-9:00	开幕式	长江厅
	9:00-11:50	大会报告	
	11:50-13:20	自助午餐	重庆融创施柏阁酒店西餐厅、 华蓥+明月+古剑+金佛+仙女厅
	13:20-16:00	分会场报告	嘉陵1厅(A会场) 嘉陵2厅(B会场) 缙云厅(C会场) 中梁厅(D会场)
	16:10-18:18	快闪报告	嘉陵1厅(A会场) 缙云厅(C会场) 中梁厅(D会场)
		分会场报告	嘉陵2厅(B会场)
		热电分会第四届理事 会第三次会议	长江厅-1厅
	18:18-19:30	自助晚餐	长江厅
19:30-21:00	海报展示	长江厅外走廊	
10月15日	08:30-12:00	分会场报告	嘉陵1厅(A会场) 嘉陵2厅(B会场) 缙云厅(C会场) 中梁厅(D会场)
	12:00-13:30	自助午餐	长江厅
	13:30-18:10	分会场报告	嘉陵1厅(A会场) 嘉陵2厅(B会场) 缙云厅(C会场) 中梁厅(D会场)
	18:30-20:30	晚宴	长江厅

10月16日	08:30-12:00	分会场报告	嘉陵1厅(A会场) 嘉陵2厅(B会场) 缙云厅(C会场) 中梁厅(D会场)
	12:00-13:30	自助午餐	重庆融创施柏阁酒店 西餐厅
	13:30-14:10	大会报告	嘉陵厅(A+B会场)
	14:10-15:10	高峰论坛	
	15:10-15:30	颁奖&闭幕式	

# 第十六次中国热电材料及应用学术会议

## 大会报告安排

8:30 - 11:50, 10月14日, 星期一 (长江厅)			
时间	编号	报告人	题目
08:30 - 09:00	开幕式 主持人: 史迅 (中国科学院上海硅酸盐所) 议 程: 1. 重庆大学党委常委、副校长邓绍江致欢迎辞; 2. 中国工程院院士、重庆市科学技术协会主席潘复生致辞; 3. 重庆市科技局党委副书记许志鹏致辞; 4. 中国材料研究学会热电材料及应用分会理事会主任林元华致辞; 5. 合影。		
主持人: 赵新兵 (浙江大学)			
09:00 - 09:40	P-01	陈仙辉 院士 中国科学技术大学	磁增强热电材料性能
09:40 - 10:20	P-02	李敬锋 教授 清华大学	碲化铋基热电材料的研究进展与展望
10:20 - 10:30 茶歇			
主持人: 周小元 (重庆大学)			
10:30 - 11:10	P-03	唐新峰 教授 武汉理工大学	热电材料电热输运多尺度调控与快速制备新技术及应用研究
11:10 - 11:50	P-04	张文清 教授 南方科技大学	On the Electrical Transports of Thermoelectrics: Statics, Dynamics and Ionics

13:30 - 15:30, 10月16日, 星期三 (嘉陵厅)

时间	编号	报告人	题目
13:30 - 14:10	主持人: 张勤勇 (西华大学)		
	P-05	陈立东 院士 中国科学院 上海硅酸盐研究所	Recent progress on thermoelectrics
14:10 - 15:10	热电材料与器件创新发展高峰论坛		
15:10 - 15:30	颁奖&闭幕式 主持人: 周小元 (重庆大学)		

# 第十六次中国热电材料及应用学术会议

## 会前科研培训安排

14:00 - 18:00, 10月13日, 星期日 (华蓥+明月+古剑三连厅)			
时间	编号	报告人	题目
主持人: 卢旭 (重庆大学)			
14:00 - 14:55	T-01	仇鹏飞 中国科学院 上海硅酸盐研究所	热电材料性能的准确测量
14:55 - 15:50	T-02	柏胜强 中国科学院 上海硅酸盐研究所	热电器件界面设计与服役行为
15:50 - 16:10	茶歇		
16:10 - 17:05	T-03	毛俊 哈尔滨工业大学 (深圳)	热电器件制冷性能测试
17:05 - 18:00	T-04	杨炯 上海大学	热电输运计算的原理与应用

# 第十六次中国热电材料及应用学术会议

## A 会场日程（嘉陵 1 厅）

13:20 - 18:18, 10 月 14 日, 星期一			
时间	编号	报告人	题目
主持人：陈光明，焦飞			
13:20-13:45	K-01	朱铁军 浙江大学	Ag <sub>2</sub> (Te,S)塑性无机热电材料变形机制
13:45-14:05	A-01	蒋丰兴 江西科技师范大学	n 型 MXenes 薄膜热电性能的探索
14:05-14:25	A-02	王洪 西安交通大学	高输出功率密度“一体式”有机热电转换器件设计
14:25-14:45	A-03	马儒军 南开大学	高性能柔性热电材料与器件
14:45-15:00	A-04	杜飞鹏 武汉工程大学	n 型聚乙烯亚胺/碳纳米管热电材料的性能增强机制研究
15:00-15:15	A-05	郑壮豪 深圳大学	Ag <sub>2</sub> Se 薄膜热电性能优化及其器件化应用
15:15-15:30	A-06	唐俊晖 复旦大学	$\pi$ -共轭共聚物热电材料的薄膜序构调控研究
15:30-15:45	A-07	张坤 东华大学	硒化银/芳纶纳米纤维复合长丝的热电性能研究
15:45-16:00	A-08	范曾 大连理工大学	高效高柔性 PEDOT 基热电纤维的连续制备及可穿戴应用
16:00-16:10 茶歇			
学生快闪报告，主持人：肖钰，胡利鹏，潘瑜，张建			

16:10-16:18	A-09	沈克林 中国科学院 上海硅酸盐研究所	AgCu(Se,S,Te)无机塑性热电材料
16:18-16:26	A-10	石浩男 北京航空航天大学	形变势调控优化 N 型 SnSe 晶体面内 热电输运
16:26-16:34	A-11	刘子坚 深圳大学	通过光电-热电转换和热能储存实现 全天太阳能发电
16:34-16:42	A-12	于茂 南方科技大学	高循环稳定性的离子热电凝胶 Gelatin-FeCN <sup>3-/4-</sup> -K <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
16:42-16:50	A-13	王世豪 桂林电子科技大学	MgAgSb 的固相反应法制备及微纳复合对 其热电性能的影响
16:50-16:58	A-14	王雅宁 东北大学	宽温域 P/N 型 SnTe 基热电材料电声输运 特性研究
16:58-17:06	A-15	刘明 哈尔滨工业大学	超价键材料的掺杂策略及性能优化
17:06-17:14	A-16	李承骏 华中科技大学	热电/铁电复合薄膜材料制备及性能研究
17:14-17:22	A-17	肖先锋 中国科学院上海 硅酸盐研究所	通过 Mg <sup>2+</sup> 填充间隙实现 Cs <sub>2</sub> SnI <sub>6</sub> 的 超低热导率
17:22-17:30	A-18	阮毓荣 南方科技大学	Ni 基 half-Heusler 半导体中间隙 Ni 的 满壳层 d 轨道和反常电输运性质
17:30-17:38	A-19	焦文艳 武汉大学	层状材料 Bi <sub>4</sub> O <sub>4</sub> SeCl <sub>2</sub> 热电性能的 第一性原理研究
17:38-17:46	A-20	程睿 武汉理工大学	p 型(Bi,Sb) <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 高热电性能的 电子结构起源研究
17:46-17:54	A-21	傅赞天 东华大学	高效稳定的 Mg <sub>3</sub> (Sb,Bi) <sub>2</sub> 基热电器件
17:54-18:02	A-22	章淑娴 同济大学	外加磁场直接测量晶格热导率

18:02-18:10	A-23	宋薇 武汉理工大学	磁滞漫散射效应诱发优异热电性能
18:10-18:18	A-24	刘元梦 南京工业大学	单壁碳纳米管基柔性薄膜的热电性能优化及器件制备

08:30 - 18:15, 10月15日, 星期二			
时间	编号	报告人	题目
主持人: 刘玮书			
08:30-08:55	K-04	何佳清 南方科技大学	高熵热电材料中的精细结构及其与物理性能的关联性
08:55-09:15	A-25	杜春雨 深圳大学	柔性复合热电材料及传感器件
09:15-09:35	A-26	吴笛 陕西师范大学	全立方相 GeTe 基热电材料的构建和性能研究
09:35-09:50	A-27	苏彬 中国科学院福建物质结构研究所	液相烧结合成高性能 n 型多晶 SnSe
09:50-10:05	A-28	陈弘毅 中南大学	铜基硫属热电材料中低温区性能优化
10:05-10:15 茶歇			
主持人: 王玉梅			
10:15-10:35	A-29	罗中箴 福州大学	化学压力调控 SnTe 热电性能
10:35-10:50	A-30	庄华鹭 清华大学	新型热变形工艺提升(Bi,Sb) <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 热电性能
10:50-11:05	A-31	应盼 南京理工大学	基于结构设计策略合成宽温域高性能 GeTe 基热电材料

11:05-11:20	A-32	杨龙 同济大学	局域原子结构表征与低热导材料
11:20-11:35	A-33	陈荣春 大连理工大学	类三重构中熵 half-Heusler 合金设计及 热电性能优化
11:35-11:50	A-34	于勇 新加坡国立大学	从幕后走向台前，先进透射电镜技术助力 热电材料的研发
<b>11:50-13:30 午餐</b>			
主持人：葛振华，胡利鹏			
13:30-13:50	A-35	骆军 同济大学	新型 Heusler 热电材料设计与性能调控
13:50-14:10	A-36	肖钰 电子科技大学	间隙原子策略优化宽温域热电性能
14:10-14:25	A-37	李志国 东北林业大学	具有超高热功率和能量密度的 生物质基离子热电材料
14:25-14:40	A-38	钱鑫 河北大学	通过提高态密度有效质量在 SnTe 基热电 材料中获得超高的功率因子
14:40-14:55	A-39	刘剑 山东大学	3d 过渡金属元素掺杂提升 $Mg_3(Sb,Bi)_2$ 材料 的热电性能
14:55-15:10	A-40	余锦程 清华大学	高效稳定的硒化亚铜基热电材料
15:10-15:25	A-41	张益欣 昆明理工大学	铜空位和第二相协同调控硫化铜材料 热电性能
15:25-15:40	A-42	张雄 湖北师范大学	P 型 $YbZn_2Sb_2$ 基的热电性能研究
<b>15:40-15:55 茶歇</b>			
主持人：骆军，周敏			

15:55-16:20	K-10	张倩 哈尔滨工业大学 (深圳)	高性能半赫斯勒热电材料与器件
16:20-16:40	A-43	任清勇 散裂中子源 科学中心	Zintl 相中超越点缺陷散射的无序空位与 超低晶格热导率
16:40-17:00	A-44	胡利鹏 深圳大学	GeSe 的晶体对称性调控及其热电性能优化
17:00-17:15	A-45	李和章 清华大学	微结构调控提升全赫斯勒合金热电性能
17:15-17:30	A-46	谭箬 成都职业技术学院	AI driven design of thermally activated delayed fluorescence materials
17:30-17:45	A-47	郭鑫 长春理工大学	压力对 I-III-VI <sub>2</sub> 黄铜矿化合物的结构及电热 输运性能调控
17:45-18:00	A-48	陈鹏 重庆邮电大学	Ge(Sb,Bi) <sub>2n</sub> Te <sub>3n+1</sub> (n = 1,2)基单晶热电 输运性质研究
18:00-18:15	A-49	周酉林 湖北省薄膜技术 工程实验室	快速退火技术在热电薄膜材料中的应用研究
<b>18:30 会议晚宴</b>			

<b>08:30 - 12:00, 10月16日, 星期三</b>			
<b>时 间</b>	<b>编 号</b>	<b>报 告 人</b>	<b>题 目</b>
主持人: 马杰			
08:30-08:45	A-50	雷景丹 安阳师范学院	热电材料中利用纳米烧结助剂 接近晶体输运极限
08:45-09:00	A-51	葛邦治 西北工业大学	在 n 型 PbSe 中设计原子级晶格和缺陷结构 以实现平均热电优值提升

09:00-09:15	A-52	明洪蔚 闽都创新实验室	构建高密度层错和针状纳米相以散射 $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$ 载热声子的探索研究
09:15-09:30	A-53	马晓静 哈尔滨工业大学	多手段协同表征 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$ 基单晶热电材料中的 点缺陷
09:30-09:45	A-54	芝世珍 哈尔滨工业大学	关于超级热电材料的预想
<b>09:45-10:05 茶歇</b>			
主持人：卢旭			
10:05-10:25	A-55	马杰 上海交通大学	范德华晶体 $\text{InSe}$ 的非简谐声子研究
10:25-10:45	A-56	葛振华 昆明理工大学	硫化铜基热电材料研究进展
10:45-11:05	A-57	昂然 四川大学	高性能热电材料制备及界面构筑
11:05-11:20	A-58	丁发柱 中国科学院 电工研究所	N 型 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$ 基材料热电性能 及其热稳定性能研究
11:20-11:35	A-59	郑云鹏 福州大学	熵工程解耦钙钛矿热电材料电声输运
11:35-11:50	A-60	闫艳慈 重庆邮电大学	黄铜矿体系的反常热导率研究

# 第十六次中国热电材料及应用学术会议

## B 会场日程（嘉陵 2 厅）

13:20 - 18:00, 10 月 14 日, 星期一			
时 间	编号	报告人	题目
主持人：林元华， 阚二军			
13:20-13:40	B-01	刘颖 四川大学	稀有金属-硼（碳）功能材料及制备加工
13:40-14:00	B-02	车仁超 复旦大学	电磁波能量转化材料的微观机制
14:00-14:20	B-03	董晓臣 江苏师范大学	光敏剂结构调控及肿瘤多模态光治疗
14:20-14:40	B-04	李乙文 四川大学	人造黑色素材料
14:40-15:00	B-05	吴学邦 中国科学院合肥 物质科学研究院	核聚变堆钨材料的微结构调控与性能优化
15:00-15:20	B-06	江浪 中国科学院 化学研究所	单分子层分子晶体光电材料与器件
15:20-15:40	B-07	焦丽芳 南开大学	钠金属电池负极界面调控
15:40-16:00 茶歇			
主持人：李忠明， 杨荣贵			
16:00-16:20	B-08	陈先华 重庆大学	结构功能一体化镁合金研究与应用
16:20-16:40	B-09	李炫华 西北工业大学	光催化分解水及其废热发电的材料体系研究

16:40-17:00	B-10	姜学松 上海交通大学	高分子表面动态有序褶皱图案
17:00-17:15	B-11	唐国栋 南京理工大学	锡基硫族热电材料微结构调控与性能优化
17:15-17:30	B-12	苏贤礼 武汉理工大学	MoS <sub>2</sub> 相变、取向极化与热开关性能研究
17:30-17:45	B-13	康慧君 大连理工大学	氧空位和超晶格微结构设计提升钛酸钙材料热电性能
17:45-18:00	B-14	武海军 西安交通大学	点缺陷及序构调控电子功能材料

**08:30 - 18:15, 10月15日, 星期二**

时 间	编号	报告人	题目
主持人：张倩			
08:30-08:55	K-05	贾爽 北京大学	重费米子材料中的巨大反常能斯特效应
08:55-09:15	B-15	丁黎明 国家纳米科学中心	钙钛矿研究进展和未来
09:15-09:35	B-16	洪家旺 北京理工大学	先进材料中的挠曲电效应研究
09:35-09:50	B-17	邓婷婷 国科大杭州高等 研究院	SnSe <sub>2</sub> 基高性能无机塑性热电材料
09:50-10:05	B-18	张旦 河北大学	高性能 N 型 PbSe 基热电材料研究
<b>10:05-10:15 茶歇</b>			
主持人：魏天然			

10:15-10:40	K-07	肖翀 中国科学技术大学	类超晶格热电材料
10:40-11:00	B-19	毛俊 哈尔滨工业大学 (深圳)	塑性铋化镁单晶热电材料
11:00-11:15	B-20	李宜 北京化工大学	基于局域失配能的碲化铅的塑性研究
11:15-11:30	B-21	廖天军 重庆理工大学	双结叠层热光伏器件的能量转换极限及性能 调控
11:30-11:45	B-22	陆晓伟 中国科学技术大学 苏州高等研究院	光热电多场耦合效应及其辐射感知应用
11:45-12:00	B-23	陈志炜 同济大学	利用电子态相变的高性能 Thomson 热电制冷器
<b>12:00-13:30 午餐</b>			
主持人：杜永，洪家旺			
13:30-13:50	B-24	陈光明 深圳大学	基于聚合物复合材料的热电器件与应用
13:50-14:10	B-25	逯瑶 南方科技大学	高性能硫族化合物基柔性热电薄膜及器件
14:10-14:30	B-26	徐凌 华中科技大学	有机薄膜异质结结构的热电器件性能研究
14:30-14:50	B-27	黄燕 哈尔滨工业大学 (深圳)	全无机水凝胶热化学电池
14:50-15:05	B-28	姜庆辉 华中科技大学	基于 PVDF 铁电畴调制的高性能 PVDF-Bi <sub>0.5</sub> Sb <sub>1.5</sub> Te <sub>3</sub> 热电柔性复合薄膜
15:05-15:20	B-29	邢通 中国科学院上海 硅酸盐研究所	Ag <sub>2</sub> S 基无机柔性热电器件异质界面研究

15:20-15:35	B-30	张贻川 西南大学	离子液体调控的 PEDOT:PSS 基复合热电材料
15:35-15:50	B-31	梁丽荣 深圳大学	PEDOT/SWCNT 复合热电材料及其柔性器件
<b>15:50-16:00 茶歇</b>			
主持人：李文，曹峰			
<b>16:00-16:20</b>	<b>B-32</b>	<b>赵琨鹏</b> 上海交通大学	<b>临界热电输运性能的建模与调控</b>
16:20-16:35	B-33	张跃文 郑州大学	硫化物钙钛矿 BaZrS <sub>3</sub> 热电性能的实验探索
16:35-16:50	B-34	高明远 同济大学	硫族化合物热电材料作为植入物的体外和体内的生物相容性评估
16:50-17:05	B-35	孙海瑞 曲阜师范大学	微结构设计对 Te 基热电材料性能的调控
17:05-17:20	B-36	乌力吉贺希格 内蒙古工业大学	银基硫族化合物中无序结构形成机制和稳定性机理
17:20-17:35	B-37	奚晋扬 上海大学	能带重整化效应及其对热电材料电输运性质影响的理论研究
17:35-17:50	B-38	宁岁婷 湖北工业大学	R-GeTe 的本征热电性能及掺杂对其空位缺陷和能带结构的调控研究
17:50-18:05	B-39	吴宏 重庆邮电大学	层状 SnSb <sub>2</sub> Te <sub>4</sub> 基材料的热输运机制与热电性能优化研究
18:05-18:20	B-40	冯真真 河南大学	ns <sup>2</sup> 孤对电子导致尖晶石结构具有超低的晶格热导率
<b>18:30 会议晚宴</b>			

**08:30 - 11:55, 10月16日, 星期三**

时 间	编号	报告人	题目
主持人：姚琴			
08:30-08:50	B-41	郭存悦 中国科学院大学	有机小分子/单壁碳纳米管复合热电材料的制备与性能
08:50-09:05	B-42	李鹏程 武汉工程大学	碳纳米管/导电聚合物复合热电材料
09:05-09:20	B-43	蒋庆林 华南理工大学	高离域态体系下的有机热电材料
09:20-09:35	B-44	卓明鹏 苏州大学	基于个人热管理织物的柔性太阳能热电器件设计开发
09:35-09:50	B-45	刘卓鑫 深圳大学	凝胶型热电池的设计及应用探索
09:50-10:05	B-46	王乙涵 四川大学	电子束辐照 PEDOT:PSS 的结构调控及热电输运特性研究
<b>10:05-10:15 茶歇</b>			
主持人：苗蕾			
10:15-10:35	B-47	李文 同济大学	柔性热电薄膜器件制备与性能研究
10:35-10:55	B-48	申利梅 华中科技大学	高效热电制冷系统优化设计与应用特性研究
10:55-11:10	B-49	张云飞 武汉工程大学	二硫化钼/碳纳米管复合材料的微结构调控及热电性能研究
11:10-11:25	B-50	商红静 中国科学院电工研究所	柔性 Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 热电薄膜及可穿戴发电器件

11:25-11:40	B-51	李佳佳 同济大学	湿纺 PEDOT:PSS 包覆的 Te 纳米线有序排列的复合纤维用于高性能柔性热电发电机
11:40-11:55	B-52	王晓东 哈尔滨工业大学 (深圳)	新型高性能可穿戴温差发电器件

# 第十六次中国热电材料及应用学术会议

## C 会场日程（缙云厅）

13:20 - 18:18, 10月14日, 星期一			
时 间	编 号	报 告 人	题 目
主持人：姜鹏，苏贤礼			
13:20-13:45	K-02	王连军 东华大学	面向智能可穿戴领域用柔性热电材料及器件
13:45-14:05	C-01	周艳光 香港科技大学	超离子热电材料中的热载子刻画以及对离子运输的影响
14:05-14:25	C-02	周重见 西北工业大学	体热发电实现皮肤创面加速愈合
14:25-14:45	C-03	刘畅 香港科技大学 (广州)	湿热响应性水凝胶的设计与能量转化应用
14:45-15:05	C-04	孙宽 重庆大学	高性能离子热电材料中离子与聚合物基体的相互作用
15:05-15:20	C-05	宋坤 南京工业大学	小温差下热电材料在发电器件中的性能预测及优化
15:20-15:35	C-06	张圣亮 南京航空航天大学	高效热-电化学转换与存储一体化器件
15:35-15:50	C-07	王玉鹏 南方科技大学	热电循环热调节模式： 一种高效的热电新应用
15:50-16:10 茶歇			
学生快闪报告，主持人：周重见，朱航天，刘紫航，李国栋（武汉理工大学）			
16:10-16:18	C-08	贡亚茹 南京理工大学	提升电子态密度在 In、Ge 掺杂 SnSe 纳米片中获得高宽温域热电性能

16:18-16:26	C-09	杨泽源 昆明理工大学	通过相界面工程实现 n 型 Bi <sub>2</sub> S <sub>3</sub> 的超低晶格热导率和高热电性能
16:26-16:34	C-10	刘宇齐 南京理工大学	能带修饰与局域晶格工程协同优化 SnTe 热电性能研究
16:34-16:42	C-11	江奕林 清华大学	高性能 B/GeTe 复合热电材料
16:42-16:50	C-12	李志昊 山东大学	Sn 空位抑制与共振能级实现 SnTe 合金全温区优异功率因子
16:50-16:58	C-13	端思晨 哈尔滨工业大学 (深圳)	通过调幅分解实现 n 型半赫斯勒合金的高热电性能
16:58-17:06	C-14	高昊天 上海交通大学	自适应亚晶格稳定的高熵热电材料
17:06-17:14	C-15	朱江龙 四川大学	高性能 GeTe 热电材料的电声输运特性及其在多功能器件中的应用研究
17:14-17:22	C-16	余甜 武汉大学	空位调控和晶格软化策略对 MnSb <sub>2</sub> Te <sub>4</sub> 材料热电性能的改善研究
17:22-17:30	C-17	吴炫辉 武汉理工大学	相边界扫描和抑制 Pb 空位增强 n 型 Sb/Bi 掺杂 PbTe 化合物的热电性能
17:30-17:38	C-18	娄芊滢 浙江大学	重带热电材料的高缺陷容忍性
17:38-17:46	C-19	郭凯炜 中国科学院物理研究所	合理操控银空位以实现晶格素化在 $\alpha$ -MgAgSb 中获得卓越的热电性能
17:46-17:54	C-20	张凯琪 重庆大学	AgSbTe <sub>2</sub> 中载流子输运行为调控
17:54-18:02	C-21	田浩 南京大学	Sn-Se 体系的光热电效应研究
18:02-18:10	C-22	张琳 中国科学院电工研究所	n 型柔性 Bi <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> /SWCNTs 复合热电薄膜及器件

18:10-18:18	C-23	齐兴源 北京科技大学	熵工程与能带工程协同提高 GeTe 的热电性能
-------------	------	---------------	-------------------------

**08:30 - 18:10, 10 月 15 日, 星期二**

时 间	编号	报告人	题目
-----	----	-----	----

主持人：柏胜强

08:30-08:55	K-06	隋解和 哈尔滨工业大学	热电材料表面阻挡层的设计制备及器件研制
-------------	------	----------------	---------------------

08:55-09:15	C-24	谭刚健 武汉理工大学	缺陷结构调控优化 PbSe 热电性能
-------------	------	---------------	--------------------

09:15-09:35	C-25	任广坤 中国工程物理 研究院	通过自变化填充率优化拓扑柔性热电器件的 转换性能
-------------	------	----------------------	-----------------------------

09:35-09:50	C-26	裴俊 北京科技大学	微型热电器的设计优化:歧管微通道热沉 助力微型热电器件实现高发电性能
-------------	------	--------------	---------------------------------------

09:50-10:05	C-27	于永龙 中核四 0 四 有限公司	百毫瓦级放射性同位素温差电池的 构建与分析
-------------	------	------------------------	--------------------------

**10:05-10:15 茶歇**

主持人：谭刚健

10:15-10:40	K-08	邓元 北京航空航天大学	微型制冷器件关键技术与应用
-------------	------	----------------	---------------

10:40-11:00	C-28	朱航天 中国科学院物理 研究所	面向高功率热管理的热电材料与器件设计
-------------	------	-----------------------	--------------------

11:00-11:20	C-29	周敏 中国科学院理化 技术研究所	低温热电材料
-------------	------	------------------------	--------

11:20-11:35	C-30	江峰 哈尔滨工业大学 (深圳)	Ag <sub>2</sub> Se 择优取向晶体的制备与高性能热电制冷器件的开发
11:35-11:50	C-31	靳群 中国科学院深圳 先进技术研究院	微型热电温度控制器
11:50-12:05	C-32	朱婉婷 武汉理工大学	尖晶石型铁氧体红外辐射新材料及其电子器件高效散热研究进展
<b>12:05-13:30 午餐</b>			
主持人：王连军，李登峰			
13:30-13:55	K-09	刘玮书 南方科技大学	微小温差热电转换新应用-热功能皮肤
13:55-14:15	C-33	张虎林 太原理工大学	基于 PVA 热电水凝胶的自供电柔性可穿戴电子
14:15-14:35	C-34	曹峰 哈尔滨工业大学 (深圳)	高效全光谱全天候温度自适应热电发电器件设计
14:35-14:50	C-35	张嘉佳 北京大学	操控极化子界面占位熵提升 PEDOT 热电性能
14:50-15:05	C-36	张鼎 南开大学	高性能热电水凝胶结构设计与研究
15:05-15:20	C-37	孙婷婷 东华大学	纺织技术实现可穿戴热电器件从三维到四维的构筑
15:20-15:35	C-38	陈跃星 深圳大学	用于电子皮肤和舵机旋转角度控制的高性能柔性 Ag <sub>2</sub> Se 薄膜的器件化研究
<b>15:35-15:50 茶歇</b>			
主持人：邓天琪，刘睿恒			
15:50-16:10	C-39	刘晨晗 南京师范大学	基于微观晶格结构的导热系数调控

16:10-16:30	C-40	杨炯 上海大学	用于半哈斯勒热电材料的通用机器学习力场开发及其在热输运中的应用
16:30-16:50	C-41	李登峰 重庆邮电大学	氮化物反钙钛矿及其双反钙钛矿的热电性能研究
16:50-17:10	C-42	陈欣 曲阜师范大学	黑磷基材料的结构调控与热电输运性能优化
17:10-17:25	C-43	张晨光 南洋理工大学	Kinetic high-throughput synthesis of bulk materials: Towards high thermoelectric performance
17:25-17:40	C-44	张攀 湖北大学	基于神经网络势研究低温相 SnSe 热电材料的声子热输运性质
17:40-17:55	C-45	席丽丽 上海大学	高通量筛选潜在延展性低导热 ABX <sub>3</sub> (X=S, Se, Te) 钙钛矿热电材料
17:55-18:10	C-46	刘俊艳 中国科学院物理研究所	铁磁半金属 FeIn <sub>2</sub> S <sub>4</sub> 的拓扑节线及其横向电热输运
<b>18:30 会议晚宴</b>			

<b>08:30 - 11:55, 10月16日, 星期三</b>			
时 间	编 号	报 告 人	题 目
主持人: 赵怀周			
08:30-08:55	K-11	裴艳中 同济大学	近室温热电材料之声子输运
08:55-09:15	C-47	刘睿恒 中国科学院深圳先进技术研究院	热电制冷在芯片热管理中的应用
09:15-09:35	C-48	苗蕾 广西大学	高性能可穿戴热电发电器件的舒适性研究

09:35-09:50	C-49	高杰 桂林电子科技大学	构建富银纳米沉积相在银/硒化银复合柔性 热电薄膜中实现前所未有的热电性能
09:50-10:05	C-50	祝薇 北京航空航天大学	面向多场应用的热电器件服役性能与 可靠性评估方法研究
<b>10:05-10:15 茶歇</b>			
<b>主持人：韩广</b>			
10:15-10:35	C-51	樊希安 武汉科技大学	热电器件失效现象、机理及可能的解决方案
10:35-10:55	C-52	郭逢凯 哈尔滨工业大学	异质界面优化设计与热电器件稳定性
10:55-11:10	C-53	王春阳 中国科学院工程热 物理研究所	热电制冷器件散热模块结构优化研究
11:10-11:25	C-54	井航 中国工程物理研究 院核物理与 化学研究所	应用于毫瓦级放射性同位素温差发电器 的高长径比方钴矿热电器件
11:25-11:40	C-55	刘凯 浙江大学	无源自供电热电器件设计与制备
11:40-11:55	C-56	冯江河 中国科学院深圳 先进技术研究院	多级半导体制冷器件设计集成及 低温热电材料

# 第十六次中国热电材料及应用学术会议

## D 会场日程（中梁厅）

13:20 - 18:18, 10 月 14 日, 星期一			
时 间	编 号	报 告 人	题 目
主持人： 赵文俞， 贾爽			
13:20-13:45	K-03	李江宇 南方科技大学	基于扫描探针的局域力热性能同步表征
13:45-14:05	D-01	应剑俊 中国科学技术大学	Co 基热电磁耦合新材料
14:05-14:25	D-02	朱增伟 华中科技大学	绝缘量子材料的热霍尔效应研究
14:25-14:45	D-03	潘瑜 重庆大学	拓扑材料的横向热电性能
14:45-15:05	D-04	魏平 武汉理工大学	热电磁多功能材料与 热电/磁卡复合制冷技术
15:05-15:20	D-05	贺彬 Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids	Bi-Sb 合金中一维朗道量子化产生的高 zT
15:20-15:35	D-06	刘志愿 安徽工业大学	混合磁性纳米复合热电材料中的热电磁效应 及交换耦合作用
15:35-15:50	D-07	彭坤岭 南京理工大学	平面蜂窝层状化合物 BaAgX 的 热电性能研究
15:50-16:10 茶歇			
学生快闪报告， 主持人： 赵琨鹏， 陈志炜， 吴笛， 王保田			
16:10-16:18	D-08	郑思康 重庆大学	范德华层状硫族化合物氧化特性与 表面结构可控构筑研究

16:18-16:26	D-09	韩岫 浙江大学	基于实验数据的 half-Heusler 热电材料机器学习研究
16:26-16:34	D-10	胡丽蓉 浙江大学	典型半赫斯勒热电材料的 p 型掺杂性
16:34-16:42	D-11	王向东 华东师范大学	基于知识-数据双驱动方法发现影响晶格热导率关键因子——晶体频率参数
16:42-16:50	D-12	叶先峰 武汉理工大学	强非谐性和高能带简并度诱发 Fe <sub>2</sub> NbAl 的优异热电性能
16:50-16:58	D-13	李瑞恒 四川大学	AgInSe <sub>2</sub> 合金化促进(Bi, Sb) <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 的优异热电和机械性能提升
16:58-17:06	D-14	保王启 昆明理工大学	(Bi, Br, Cl)共掺增强 n 型多晶硒化锡块体热电性能
17:06-17:14	D-15	张鸣奇 武汉理工大学	面向 5G 光模块应用的微型热电器件结构设计及性能优化
17:14-17:22	D-16	朱思靖 广西大学	采用低热导填料和蜂窝结构封装的高制冷性能可穿戴式热电冷却器
17:22-17:30	D-17	陈梦朝 浙江大学	拓扑磁体驱动的高性能能斯特热电器件
17:30-17:38	D-18	赵伟 东华大学	PEO 基离子热电凝胶的分子间相互作用调控与性能优化
17:38-17:46	D-19	戴胜男 上海大学	整体法视角下掺杂剂对材料晶格热导率的影响
17:46-17:54	D-20	田震 大连理工大学	同时具有 N、P 型 BiSbSe <sub>3-x</sub> Te <sub>x</sub> 热电材料的制备及优化策略
17:54-18:02	D-21	王雨萌 上海硅酸盐研究所	富碲 Ag <sub>2</sub> (Te,S) 二元化合物力学性能与热电性能研究

18:02-18:10	D-22	薛文华 中国科学院物理 研究所	9-4-9 型 $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$ 中新相对电输运性能的影响
18:10-18:18	D-23	林心语 重庆大学	硒化银柔性多孔膜：从自支撑无机膜到无机网络/有机骨架热电器件

**08:30 - 18:15, 10 月 15 日, 星期二**

时 间	编号	报告人	题 目
主持人：杨炯			
8:30-8:50	D-24	刘惠军 武汉大学	<b>Machine learning in the study of thermoelectric materials</b>
8:50-9:10	D-25	李武 宁波东方理工大学 (暂名)	以 SnSe 为例验证热电 ZT 的第一性原理计算
9:10-9:30	D-26	张东波 北京师范大学	石墨烯赝磁场驱动朗道声子寿命增长
9:30-9:50	D-27	王保田 中国科学院 高能物理研究所	$\text{CsAg}_5\text{Te}_3$ 基热电材料声子动力学属性的第一性原理计算和中子散射研究
9:50-10:05	D-28	魏宾 清华大学	多面体扭转在自然异质超晶格材料电热运输的作用
<b>10:05-10:15 茶歇</b>			
主持人：徐磊			
10:15-10:35	D-29	王淑芳 河北大学	高取向金属硒化物热电薄膜与器件
10:35-10:55	D-30	桑夏晗 武汉理工大学	$\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 基合金表界面原子尺度结构演化机制

10:55-11:15	D-31	姜鹏 中国科学院大连 化学物理研究所	界面热电
11:15-11:30	D-32	赵云山 南京师范大学	二维量子材料热电输运特性研究
11:30-11:45	D-33	林嘉河 浙江大学衢州 研究院	硒化银的多尺度结构设计与热电特性的调控
11:45-12:00	D-34	宿力中 太原科技大学	n 型硒化锡晶体热电材料研究进展
<b>12:00-13:30 午餐</b>			
主持人：王淑芳，罗中箴			
13:30-13:50	D-35	杨君友 华中科技大学	铁电/热电功能基元复合薄膜制冷新材料 制备及其性能研究
13:50-14:10	D-36	刘紫航 哈尔滨工业大学	基于机械剥离法设计高性能织构化的 层状热电材料
14:10-14:25	D-37	冯晓斌 武汉理工大学	纳米晶碲化铋薄膜变形机制 及其尺寸效应研究
14:25-14:40	D-38	刘玉 合肥工业大学	低维纳米材料的表面功能化设计与 热电性能调控
14:40-14:55	D-39	付良威 南京理工大学	热电磁相互作用和~1nm 界面铁层协同实现 300°C以下 Fe/Mg <sub>3</sub> (Sb,Bi) <sub>2</sub> 材料的超高 zT 值
14:55-15:10	D-40	杨啸 中国科学院工程热 物理研究所	二维材料热电性能表征及热整流效应研究
15:10-15:25	D-41	侯正浩 石家庄学院	载流子浓度优化与动态掺杂提高 n 型 PbS 宽 温域的热电性能
15:25-15:40	D-42	李周 安徽大学	BiCuSeO 基热电材料的缺陷结构调控与性能 优化研究

15:40-15:55 茶歇			
主持人：蒋庆林，樊希安			
15:55-16:15	D-43	赵怀周 中国科学院物理研究所	全镁基热电材料与器件的机遇与挑战
16:15-16:30	D-44	曹丽莉 北京信息科技大学	氧化物薄膜热电偶的叶片温度实时监测技术研究
16:30-16:45	D-45	赖华俊 广西科学院	面向热电-氢敏传感器的 SiGeSn 热电薄膜材料与器件的研究
16:45-17:00	D-46	李娟 中国科学院深圳先进技术研究院	$\alpha$ -MgAgSb 中反位缺陷调控优化热电低温制冷性能
17:00-17:15	D-47	李顺 江苏大学	小温差驱动热电催化材料及应用
17:15-17:30	D-48	周曼 北京航空航天大学	基于选区激光熔化技术集成微型热电器件的动态热管理平台
17:30-17:45	D-49	顾津宇 中国科学院上海硅酸盐研究所	ZrCoSb 基半赫斯勒材料的氧化行为研究
17:45-18:00	D-50	张宇 浙江大学温州研究院	AgSbTe <sub>2</sub> 中温材料性能调控与器件制备
18:00-18:15	D-51	刘敏 同济大学	Ag <sub>2</sub> Se 可作为 n 型 Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> 热电材料更坚韧的替代品
18:30 会议晚宴			

08:30 - 12:10, 10 月 16 日, 星期三			
时间	编号	报告人	题目
主持人：刘惠军			

8:30-8:50	D-52	邓天琪 浙江大学杭州 国际科创中心	热电半导体材料的电子-声子耦合与 散射机制研究
8:50-9:10	D-53	李国栋 武汉理工大学	热电材料力学行为理论方法及强韧化研究
9:10-9:30	D-54	刘德欢 华中科技大学	基于虚晶近似的电子-合金相互作用的 第一性原理计算
9:30-9:45	D-55	谢琳 大湾区大学	轨道-晶格相互作用诱导晶体非晶晶格 热导行为
9:45-10:00	D-56	陈星宇 上海硅酸盐研究所	无铅卤化物钙钛矿 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 超低热导率的 微观机制
<b>10:00-10:15 茶歇</b>			
主持人：王国玉			
10:15-10:35	D-57	徐磊 南京理工大学	溶液合成热电材料
10:35-10:55	D-58	张建 中国科学院合肥 物质科学研究院	n 型碲化铋体系中的有机复合 及热电性能优化
10:55-11:10	D-59	秦炳超 北京航空航天大学	高性能 P 型 SnSe 晶体的制冷性能开发
11:10-11:25	D-60	周志方 中南大学	界面结构设计优化氧化锌薄膜近室温 热电性能
11:25-11:40	D-61	马妮 中国科学技术大学	新颖硫属化物的创制及物性探索
11:40-11:55	D-62	朱康 中山大学深圳校区	兼顾制冷量与能效的热电制冷器件 与系统通用设计策略

# 会议报告摘要

## 大会报告摘要 (P01-P05)

P-01

### 磁增强热电材料性能

陈仙辉 院士

中国科学技术大学

热电材料因其可通过无污染的过程实现电能与热能的相互转换而受到广泛关注。目前热电材料的研究主要集中在优化材料基于塞贝克/帕尔贴效应的纵向热电性能上，其发展主要经历两个阶段，在能带理论提出之后，人们有了半导体的概念，这也促使材料的热电性能通过能带工程实现了第一次飞跃。此后人们也意识到结合声子工程可以进一步提升材料的热电性能并提出了“电子晶体，声子玻璃的概念”，这促使热电材料经历了第二次性能的大幅度提升。然而，现今热电材料性能的瓶颈仍然促使着热电技术不能大规模应用。最近，科学家们已经发现，多类材料的热电性能在存在内外磁场情况下会得到明显改善。所以，研究材料的磁热电耦合效应可能给热电技术的应用带来新的机遇，有望实现热电材料的第三次革命。在本次报告中，我们研究了多种拓扑量子材料中复杂的磁热电耦合效应。我们利用强磁场极大地提升了拓扑狄拉克半金属  $\text{Cd}_3\text{As}_2$  单晶的热电性能，最高的热电品质因子  $ZT$  在  $450\text{K}$ 、 $9\text{T}$  下达到  $1.24$ ；发现在外磁场驱动下，自旋反铁磁序转变成铁磁序的过程中， $\text{TbPtBi}$  从拓扑绝缘体转变成外尔半金属，与此同时其横向和纵向热电性能也会大幅度的提升，其横向和纵向功率因子分别达到了  $35 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$  和  $24 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ ；在二维拓扑材料  $\text{TaCo}_2\text{Te}_2$  中发现其优异的低温热电性能，其横向和纵向功率因子分别达到了  $116 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$  和  $257 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ ；在反铁磁  $\text{EuMnSb}_2$  中，我们证明了自旋熵在该体系中增强的大热电势可达近  $150 \mu\text{V K}^{-1}$ ，这也进一步证明磁热电耦合效应对热电性能提升的重要作用。



**简介：**陈仙辉，1992年在中国科学技术大学获博士学位。现为中国科学技术大学教授，中国科学院院士，发展中国家科学院院士。曾在德国卡尔斯鲁厄研究中心和斯图加特马普固体物理研究所做洪堡学者，先后在日本高等研究院(北陆)、美国休斯敦大学德克萨斯超导研究中心、新加坡国立大学做访问教授。1998年获国家杰出青年基金，2002年获聘教育部“长江学者”特聘教授。主要研究方向为超导、强关联和拓扑量子等新型量子材料的探索及其物理研究。2008年获教育部和李嘉诚基金会—长江学者成就奖，2009年获中国物理学会—叶企孙奖，2009年获香港求是科技基金会—求是杰出科技成就集体奖，2013年获国家自然科学基金一等奖，2015年获国际超导材料 Bernd T. Matthias 奖，2016年获安徽省重大科技成就奖，2017年获首届全国创新争先奖章、何梁何利基金科学与技术进步奖，2019年获发展中国家科学院物质科学奖，2023年获未来科学大奖物质科学奖，2024年获全国模范教师称号等。

李敬锋\*

清华大学

碲化铋因在室温附近具有优异的热电性能，且化学稳定性好，制备工艺相对简便，成为最早实现商业化应用的代表性热电材料。因此，其性能提升研究经久不衰，特别受到应用端的高度关注，近二十年来也取得了明显进展。区熔法是制备碲化铋基热电材料的主流生产工艺，但长期以来其产品材料的热电优值（ZT 值）低于 1，且机械加工性能较差。近年来采用热压、热挤压、放电等离子体烧结等工艺制备的材料不仅热电性能高，而且机械加工性能也得到明显改善，特别是纳米颗粒复合对 p 型材料的 ZT 值和强度提升均有显著效果，然而 n 型材料的性能提升进展缓慢。本报告将围绕碲化铋基热电材料，从掺杂改性、晶格缺陷、微结构等几个方向总结近二十年的代表性研究工作，并尝试对未来研究方向进行展望。



**简介：**李敬锋，清华大学长聘教授，日本工程院外籍院士。1984 年毕业于华中科技大学，1991 年获日本东北大学博士学位，1992 年任该校助理教授，1997 年晋升为副教授，2002 年回国任清华大学教授，2021 年受聘日本东北大学客座教授。主要研究铁电压电与热电材料及其 MEMS 微加工技术，至今在 Science (4)、Nature Materials、Joule (3)、Nat. Commun. (8)、Adv. Mater. (9)、EES (8) 等期刊上共发表 SCI 论文 570 余篇，被引约 35000 次（H 因子 97），入选全球高被引学者，获授权专利 42 项（包括国外专利 4 项），在重要国际会议大会上作大会报告 11 次、主旨和邀请报告约 100 次，出版专著《Lead-free Piezoelectric Materials》

（Wiley 出版社）和《热电材料及其制备技术》（科学出版社）等 4 部。入选美国陶瓷学会会士、国际热电学会理事、IEEE 铁电委员会委员、中国硅酸盐学会常务理事、中国材料学会理事和热电材料与应用分会主任/荣誉主任，兼任 Journal of Materiomics 主编、《硅酸盐学报》副主编、Journal of The American Ceramic Society、NPG Asia Mater. 等期刊编委。2003 年获国家杰青资助，2008 年入选教育部长江学者特聘教授。

## P-03 热电材料电热输运多尺度调控与快速制备新技术及应用研究

唐新峰 教授

武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

热电转换技术在制冷和精确温控、热电发电等方面具有广泛的应用前景，实现热电转换技术大规模商用应用的核心和关键是高性能热电材料和高效热电器件的开发、以及低成本规模化材料和器件制备新技术的发展，本报告将介绍我们在上述两方面开展的典型工作及进展。

主要内容包括以下三个方面。一是对三个重要材料体系在不同尺度上对电热输运进行有效调控与性能优化，包括 n 型  $\text{Mg}_2(\text{Si,Ge,Sn})$  材料的电子能带结构调控，p 型  $\text{Bi}_{0.52}\text{Sb}_{1.48}\text{Te}_3$  同质纳微复合结构调控电子和声子的输运，p 型  $\text{Cu}_2\text{Se}/\text{BiCuSeO}$  异质界面结构调控电子和离子的输运，在调控规律和机制研究基础上，大幅度提升了其热电性能。二是发展了种热电材料超快速低成本规模化制备新技术，包括高温自蔓延燃烧合成制备新技术和低温电场、力场和温度场多场耦合制备新新技术，大幅度缩短了热电材料的制备时间，极大降低了制备成本。三是开发了不同型号的高效微型热电器件，并实现在光通信模块精确温控、汽车尾气热电发电系统中的应用。



**简介：**唐新峰，武汉理工大学材料学科首席教授，博士生导师，美国物理学会会士，英国皇家化学学会会士，中国材料研究学会热电材料及应用分会名誉理事长，科技部重点研发计划首席科学家。曾任武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室常务副主任、新材料研究所所长、中国材料研究学会热电材料及应用分会理事长和国际热电学会理事。长期从事高性能热电材料、新型热电器件及应用技术研究。

## P-04 On the Electrical Transports of Thermoelectrics: Statics, Dynamics and Ionics

张文清 教授  
南方科技大学

This talk presents an examination of the approaches of tuning electrical transports of thermoelectric materials, delineating the foundational aspects of statics, dynamics, and ionics. On the static point of view, we refer to the intricacies of tuning the Seebeck coefficient and electrical conductivity in traditional narrow-gap semiconductors, mostly on modifications of electronic band structures and effective mass of charge carriers, highlighting their synergistic effect on the figure of merit, ZT. The talk then transcends into the discussion on a few dynamic aspects of charge transports, including but not limited to external-field-stimulated dynamic electronic states, spin entropy, and Kondo scattering in correlated systems. Advancing further into the domain of ionics, we briefly address the roles of ionic transport and the conditions under which transport-mediated thermoelectric phenomena emerge within these ionic materials beyond the intuitive electrochemistry picture. The interplay between static tuning methods with the dynamic and ionic transports reveals a complex, yet promising future for the development of next-generation thermoelectric materials.



**简介:** 张文清, 南方科技大学教授, 国家杰出青年科学基金获得者, 美国物理学会会士。主要从事计算材料物理和材料设计、AI+计算材料科学, 电热输运、和高性能热电转换材料研究等。

陈立东 院士

中国科学院上海硅酸盐研究所

Research activities on thermoelectrics in China cover a wide spectrum spanning the full development chain, from basic research to industrialization. A number of research centers in China have established expertise in both computational and experimental study of thermoelectric materials and devices. Especially, given the growing investment in China into computational approaches for materials design, such methods for thermoelectric materials are likely to become even more prevalent. Looking beyond traditional options, China's researchers have also contributed to the discovery of new families of thermoelectric materials. For example, it has been demonstrated that large anharmonicity induced by crystal structures can lead to intrinsically very low lattice thermal conductivity, and thus good thermoelectric performance. The recent discovery of  $\text{Ag}_2\text{S}$ -based ductile semiconductors has driven a shift in the potential for flexible thermoelectrics. The continuous development of high-performance thermoelectric materials has enabled the design and fabrication of TE devices for practical applications and the conversion efficiency has been steadily improved up to 15%.



**简介：**陈立东，陈立东，中国科学院院士，现任中国科学院上海硅酸盐研究所研究员，国际热电学会理事会理事，亚太材料科学院院士，

《npj Computational Materials》联合主编。2001年获中国科学院人才计划资助进入上海硅酸盐研究所工作，2003年获国家杰出青年基金资助，2004年获得上海市优秀留学回国人才奖和中国科学院人才计划终期评估优秀。曾任中国科学院上海硅酸盐研究所副所长，中国材料研究学会热电材料及应用分会第一届理事会主任，亚洲热电联盟第一届主席。长期从事热电材料与器件研究，围绕热电材料与器件高性能化的关键科学问题，系统地开展了电热输运机理、可控制备与性能调控的研究，创新性地提出了通过多尺度微观结构设计引入电子与声子输运的选择性散射单元、实现电热输运协同调控和热电材料高性能化的学术思想。所开发的高性能热电材料与热电转换技术正在逐步应用于热电致冷与温控、热能高效回收利用、空间科学等技术领域。

# 主旨报告摘要 (K01-K11)

## K-01 $\text{Ag}_2(\text{Te},\text{S})$ 塑性无机热电材料变形机制

朱铁军\*

浙江大学

当前柔性可穿戴电子和物联网等领域发展迅猛,面向复杂应用场景的自供电电源需求与日俱增。热电技术作为一种全固态能量转换技术,可利用环境温差实现热能向电能直接转换,有望为复杂场景的低功率电子供电提供一种极具潜力的技术方案。面向曲面、复杂结构热源的低功率电子应用,迫切需要开发柔性热电技术。近年来,以  $\text{Ag}_2(\text{S},\text{Te})$  为代表的室温塑性无机热电半导体的发现为开发高性能柔性热电器件提供了新的研究方向。理解无机半导体的室温塑性变形机制、开发兼具室温高热电性能和良好柔塑性的无机热电半导体材料是该研究的核心主题。在本报告中,我们将介绍近期有关  $\text{Ag}_2(\text{S},\text{Te})$  的物相结构与脆塑性关联及其塑性变形机制等方面工作。

## K-02 面向智能可穿戴领域用柔性热电材料及器件

王连军

东华大学

伴随技术革新和发展,可穿戴设备所需功耗从瓦级降至毫瓦级甚至纳瓦级,人体释放显热可达 4.8 W,因此收集人体热量的热电转换系统即使在其转换效率低于 1% 的情况下也可为系列穿戴设备持续供电,有望成为下一代可穿戴设备的理想电源。然而,柔性、可穿戴性需求与高性能、热阻匹配、高输出的制约矛盾使目前可穿戴热电器件性能远低于传统刚性块体器件。柔性热电材料的微观结构有效调控及器件面向可穿戴应用的高可靠低衰减构筑仍是一个技术难题,极大限制了热电材料的可穿戴应用。

本报告介绍了我们课题组围绕可穿戴应用对热电材料及器件的需求,在高柔性热电薄膜及纤维创制、微观结构调控以及可穿戴热电器件构筑方面的研究进展,主要采用电喷雾、喷墨打印、模具成型等工艺方法创制高柔性有机、无机、离子热电材料,进一步基于掺杂调制、界面效应、分子间相互作用调控等方法实现材料热电性能的优化,并采用先进纺织技术等构筑穿戴体验良好的热电器件,同时结合结构设计、热设计等提升器件输出性能。旨在通过上述从材料到器件的研究工作切实推进柔性热电的可穿戴应用进程。

## K-03 基于扫描探针的局域力热性能同步表征

李江宇\*

南方科技大学

本文将介绍基于扫描探针的局域力热性能同步表征方法。通过热探针结合惠斯通电桥,可以实现高精度的纳米尺度温度测量,进而确定样品的局域热导率。而基于热探针接触振动频谱或者纳米

压痕力-位移曲线，也可以反推样品的局域杨氏模量，从而实现样品局域力热性能的同时表征。以此为基础，我们将介绍扫描探针力热表征在几种典型材料的应用。

## **K-04 高熵热电材料中的精细结构及其与物理性能的关联性**

何佳清\*、江彬彬、王戊

南方科技大学

在热电材料中，高熵能够提供性能扩展和优化的空间，从而产生不寻常的传输现象和出色的热电性能。我们的透射电子显微镜研究发现同一晶体位置的多种元素的局部化学波动对其独特性能起着至关重要的作用，从而确定了不同元素特性对热电材料中高熵结构局部化学波动的各自贡献。通过选择特定元素，在 750 K 时我们将 GeTe 基的高熵材料的 ZT 提高到 2.7，并且使分段器件在 506 K 的温差下实现了 13.3% 的热电转换效率。这种通过高熵操纵来调整电子和声子局域化的例子展示了一种改善热电材料性能的新方法。

## **K-05 重费米子材料中的巨大反常能斯特效应**

贾爽\*

北京大学

The Anomalous Nernst Effect (ANE) refers to the perpendicular voltage drop that occurs when a magnetic material is in the presence of a temperature gradient. This effect has the potential for use in future thermoelectric energy conversion. In our research, we observed a significant ANE in several Ce-based, ferromagnetic heavy fermion compounds. We measured a large anomalous Nernst coefficient, reaching values as high as  $10 \mu\text{V K}^{-1}$ . This giant ANE is a result of a strong Berry curvature field stemming from the intense hybridization between the f and conduction electrons in ferromagnetic order. Our findings open up possibilities for studying correlation-driven topological responses in an itinerant ferromagnetic Kondo lattice environment.

## **K-06 热电材料表面阻挡层的设计制备及器件研制**

隋解和

哈尔滨工业大学

阻挡层是高可靠高稳定高效率热电器件中的核心之一，本报告简要总结课题组近期围绕阻挡层开展的研究工作。

## **K-07 类超晶格热电材料**

肖翀\*

中国科学技术大学

热电材料利用 Seebeck 效应与 Peltier 效应可以实现热能和电能之间的直接相互转化，是一类无毒害的绿色能源转换材料，在能源利用方面具有独特的优势。然而决定热电材料性能好坏的三个参

数 Seebeck 系数、电导率和热导率是通过载流子相互耦合在一起的，并呈现出相反的变化趋势，电热运输的协同调控一直是一个公认的历史性难题，在深入理解电热输运行行为的基础上，我们提出类超晶格块材概念。不同于传统超晶格薄膜，类超晶格块材属于宏观材料，可通过简单的固相反应合成并在自然界中稳定存在，同时又保持了超晶格的基本特征，类超晶格块材中的不同亚层通道可以作为独立调控的功能基元，进而获得“声子玻璃-电子晶体”运输特性，为我们进行电热输运性能的协同调控提供了理想的平台。

## **K-08 微型制冷器件关键技术与应用**

邓元

北京航空航天大学

微型热电致冷器件在热管理领域具有重要应用，如何突破批量制造关键技术，引入高质量新型热电材料是研究的重点。针对高性能的薄膜材料制备，界面设计、高密度阵列单元精细加工，器件封装等环节开展了研究，批量制备出高性能的制冷器件，并开展了热控的相关应用研究。

## **K-09 微小温差热电转换新应用-热功能皮肤**

刘玮书

南方科技大学

热的利用与我们的生活息息相关，传统的热电转换技术在大温差废热利用有着巨大的场景。然而，对于随处可见微小温差的场景，转换效率存在明显的效率瓶颈。在面向人体集成应用，微小温差热电转换材料有望为健康检测传感器提供持续能源，为人体假肢提供类人皮肤的热功能。该报告将围绕微小温差热电转换技术在实现热功能皮肤方面的最新进展，报告将围绕恒温调控，汗腺仿生，热源识别等类皮肤的功能展开介绍。介绍利用热电转换实现宽温域环境下的恒温调控，以及基于离子热电凝胶的被动恒温调节层结构实现类皮肤的汗腺仿生功能，以及离子热电效应对凝胶中水蒸发的开关效应。报告还将介绍利用离子热电凝聚中的离子弛豫行为实现对辐射，对流，传导等三类热源的识别。

## **K-10 高性能半赫斯勒热电材料与器件**

张倩\*、李孝芳、端思晨、包鑫

哈尔滨工业大学（深圳）

本工作聚焦开发高性能半赫斯勒热电材料与器件。基于相图工程进行材料的设计与制备。通过等温截面相图确定了不同半赫斯勒体系 ABX 在相应温度下的 B 位或 A 位固溶度极限。在 973 K 和 1173 K 的温度截面下， $ZrNi_{1+x}Sn$  中 Ni 位固溶度分别为  $0 < x < 0.07$  和  $0.01 < x < 0.13$ 。在 1173 K 的温度截面下， $HfNi_{1+x}Sn$  中 Ni 位固溶度为  $0.04 < x < 0.16$ ， $NbCo_{1+x}Sn$  中 Co 位固溶度为  $0.01 < x < 0.07$ ， $NbFe_{1+x}Sb$  中 Fe 位固溶度为  $0.01 < x < 0.13$ 。揭示了额外 B 位原子的晶格占位情况及其对不同体系电热运输的影响机制。采用平衡合金法确定了  $TiNiSn-ZrNiSn-HfNiSn$  三元系统的相分离边界，并运用原位透射电子显微镜和相场模拟的手段揭示了各向异性调幅分解的演变过程。依据平衡相图设计材料组分，探究了  $Ti_{1-x-y}Zr_xHf_yNiSn$  合金热处理前后电声输运性能的变化，阐明了热处理后热电性

能解耦合的物理机制。并制备获得半赫斯勒基“双高”热电器件。制备了 Te/Ni/Sb 共掺杂（合金化）的 ZrCoBi 基热电材料，揭示了材料性能优化的内在机制。Ni/Te 双掺杂可以有效提高材料的载流子浓度并保持材料的迁移率，多组元在材料中引入多重散射中心。在 973 K 时，n 型  $\text{ZrCo}_{0.94}\text{Ni}_{0.06}\text{Bi}_{0.775}\text{Te}_{0.075}\text{Sb}_{0.15}$  的 zT 值达到~1.2，300 K-973 K 的平均 zT 为 0.66。

**K-11**

## **近室温热电材料之声子输运**

裴艳中

同济大学

已知固体物质室温下的热导率局限在  $5000\text{-}0.1\text{W/m}\cdot\text{K}$  范围内，热导体及热绝缘体等热功能应用均受诸多限制。面向总量巨大、能量密度低的分散式废余热回收发电应用的热电转换技术需研制导电性能优良的热绝缘体。本报告主要涉及晶体材料力学/声学/热学性质模型的建立、晶格驻波效应最小化热导率的作用机制、以及热绝缘材料开发等近期研究进展。

# A 分会场报告摘要 (A01-A60)

## A-01 n 型 MXenes 薄膜热电性能的探索

蒋丰兴\*、万志亮、刘梦婷、刘小芳

江西科技师范大学

MXenes 是当前被发现为数不多的 n 型碳基材料之一,在二维(2D)热电材料领域显示了良好的研究前景。通常, MXenes 是由单层或几层原子组成的过渡金属碳化物晶体,在平面内具有强共价键,在平面外方向具有相对较弱的范德华键。MXenes 高的导电性( $\sim 10^4$  S/cm)、亲水性和机械柔性,使其非常适用于热电应用。然而, MXenes 通常表现出会阻碍热电性能的金属行为,表现出较低的热电势 ( $-5$  mV/K)。但是, MXenes 的化学成分和表面功能化的多样性为基于能带工程、载流子浓度和迁移率的研究路径提供了便利。增强层状 MXenes 材料热电性能的多种策略已经得到全面证明,如结构改性、缺陷、带隙工程等。本团队近年来,主要围绕柔性 MXenes 基薄膜热电材料做了系列工作,取得了一些成果,为优化和提升其热电性能提供了一定的参考。

## A-02 高输出功率密度“一体式”有机热电转换器件设计

王洪\*、朱紫涵、庄田田、王晶

西安交通大学

有机热电器件能将低密度热能直接转换为电能,在中低温余热回收具有巨大潜力,有助于缓解能源危机和环境污染方面的压力。针对器件内阻大、内耗大,输出功率密度低的技术瓶颈,申请人提出了调控有机介质极性和传输速率降低器件内阻、设计新结构制备“一体式”器件降低热传导协同作用的研究思路:揭示了有机介质中利用费米能级与价带相对位置调控载流子极性的新机制;提出了利用温度马兰戈尼效应实现热传导和电传导去耦合的新策略;设计了热整流“一体式”器件新结构,提高了器件的输出功率。

## A-03 高性能柔性热电材料与器件

马儒军\*

南开大学

柔性热电材料在柔性可穿戴电子、自供电器件等领域表现出巨大应用前景。碳基热电材料(如碳纳米管、石墨烯)具有良好的热电性能、柔性以及可加工性,目前已广泛应用于可穿戴人体热量收集、自供电柔性电子等领域。针对不同应用场景和领域,我们设计了不同形貌的柔性热电材料与器件。通过改进的湿法纺丝方法,制备了兼具高强度和高可拉伸的碳纳米管复合热电纤维,断裂强度高达 120 MPa,断裂应变高达 27%,塞贝克系数高达  $44.0 \mu\text{V/K}$ 。利用模板辅助,实现了高弹可压缩石墨烯复合热电泡沫的大批量制备。通过成分和结构优化,石墨烯复合热电泡沫的压缩率可达 98%,塞贝克系数可达  $49.2 \mu\text{V/K}$ ,工作温度区间可达  $-170 \sim 300^\circ\text{C}$ ,制备的热电泡沫阵列器件能够同时实

现温差发电与芯片热管理。通过对天然木材进行简单化学和高温处理，并利用水热合成在木材的三维网络结构上原位生长碲纳米线，制备了具有良好热电性能的柔性热电木头，塞贝克系数超过了  $400.0 \mu\text{V/K}$ ，压缩应变可达 30%。通过串联集成，制作了一个小型的热电木头房子，并模拟夏天和冬天温差发电情况，展示了热电木头在建筑领域的巨大应用前景。

## A-04 n 型聚乙烯亚胺/碳纳米管热电材料的性能增强机制研究

杜飞鹏\*、熊泽苗、田贵森、夏致祥、彭晓曦、张云飞

武汉工程大学

有机热电材料作为绿色能源发展的主要方向之一，近年来取得了巨大的进展。但是，n 型有机热电材料因其电导率低、空气稳定性差，发展却相对滞后，严重制约了有机热电材料的应用。发展低成本、高性能的 n 型有机热电材料成为研究的焦点之一。聚乙烯亚胺/单壁碳纳米管复合材料 (PEI/SWCNTs) 由于加工简单、成本较低，成为有潜力的 n 型热电材料候选者。但是，PEI/SWCNTs 作为 n 型热电材料导电性不高、空气稳定性差的缺陷制约其使用。

我们对 PEI/SWCNTs 的空气不稳定机制及性能调控进行了一系列研究。一方面，对 PEI/SWCNTs 的空气不稳定机制进行研究，发现在 PEI/SWCNTs 复合材料中 PEI 对空气中  $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  吸附而产生了两性离子， $\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  的协同作用加速了 PEI 的载流子类型由 n 向 p 型的转变，使其向 SWCNT 的电子转移过程受到了阻碍。另一方面，采用多元醇醚对掺杂剂  $\text{C}_{60}$  和二茂铁进行改性，增强掺杂剂与 SWCNTs 和 PEI 之间的界面相互作用，在稳定 PEI/SWCNTs 的塞贝克系数的同时提高其电导率和功率因子；同时，改善了 PEI/SWCNTs 的空气稳定性。多元醇醚改性二茂铁掺杂的 PEI/SWCNTs 功率因子达到  $182 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ ，其 n 型特征的塞贝克系数在空气中 3672 h 后仍保持 68% 以上，表现出良好的空气稳定性。空气稳定性机理研究和掺杂剂改性方法为发展高性能 n 型 PEI/SWCNTs 热电材料提供了理论支持。

## A-05 $\text{Ag}_2\text{Se}$ 薄膜热电性能优化及其器件化应用

郑壮豪\*<sup>1</sup>、陈跃星<sup>1</sup>、李甫<sup>1</sup>、陈天宝<sup>2</sup>

1. 深圳大学物理与光电工程学院，深圳市先进薄膜与应用重点实验室
2. 深圳市彩煌热电科技有限公司

开展可穿戴设备用环境友好型高热电性能硒化银 ( $\text{Ag}_2\text{Se}$ ) 薄膜的研究，是热电领域前沿研究方向之一。本工作首先基于共蒸发沉积手段的设计，实现了对  $\text{Ag}_2\text{Se}$  薄膜成分的精准控制，并根据 Gibbs-Wulff 晶体生长定律，利用 Te 的替位掺杂降低  $\text{Ag}_2\text{Se}$  (001) 表面自由能，实现高择优生长取向  $\text{Ag}_2\text{Se}$  柔性薄膜可控生长，极大的提高了其热电性能；其次，采用一种全新的 Se 化方式，实现高功率因子  $\text{Ag}_2\text{Se}$  薄膜的自组装生长，并构建热电薄膜器件，利用有机材料涂覆优化机械性能，并在人体可穿戴设备及光电传感等方面进行了应用示范。

## A-06 $\pi$ -共轭共聚物热电材料的薄膜序构调控研究

唐俊晖、梁子骥\*

复旦大学

$\pi$ -共轭给体 (D)-受体 (A) 共聚物作为有机光伏 (OPV) 中的给体材料已被广泛研究, 尽管它们具有出色的机械弯曲性、溶液加工性和灵活的分子结构可设计性, 但在有机热电 (OTE) 领域仍亟待进一步深入研究, 如何通过对薄膜序构的调控以实现热电功率因子的优化仍是一大挑战。在本工作中, 选取了两种 D-A 聚合物——PBDP-T 和 PBDB-T, 分别具有出色的泽贝克系数 (S) 和电导率 ( $\sigma$ ), 并将其功能单元整合, 通过“主链序构”策略合成无规共聚物。然而, 所得到的共聚物中无序的 $\pi$ -主链导致未能成功获得高功率因子 (PF)。与之相对的是, 采用“薄膜序构”策略, 将代表性的高电导率聚合物 P2F 和高泽贝克系数聚合物 PTB7-Th 共混。值得注意的是, 当 PTB7-Th 的含量在 35–80 wt% 之间时, 混合薄膜中会形成三维导电通路, 有利于电荷输运并获得高电导率。在最佳的 65 wt% PTB7-Th 含量下, 获得了高达  $145.5 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$  的峰值功率因子, 远超两种母体聚合物的性能, 这标志着对于“两相复合”法则的突破。中等 PTB7-Th 含量下所达到的峰值功率因子归因于双层和混合形貌的共存, 前者提供了随 PTB7-Th 含量增加而缓慢下降的 $\sigma$ , 而后者则显著提高了 S。考虑到共混薄膜的热导率明显低于纯聚合物薄膜, 最终在室温下实现了高达 0.15 的热电优值。

## A-07 硒化银/芳纶纳米纤维复合长丝的热电性能研究

张坤\*

东华大学

选用延展性无机半导体材料  $\text{Ag}_2\text{Se}$  和芳纶纳米纤维 (ANF) 构筑了具有高热电性能和良好柔韧性的复合热电长丝。 $\text{Ag}_2\text{Se}/\text{ANF}$  复合长丝具有独特的壳核结构, 壳层为致密的  $\text{Ag}_2\text{Se}/\text{ANF}$  复合材料而芯层为多孔的  $\text{Ag}/\text{ANF}$  复合材料。致密的壳层使得  $\text{Ag}_2\text{Se}/\text{ANF}$  复合长丝拥有良好的热电性能和机械性能。该复合热电长丝的最佳功率因子和最大断裂强度分别可达  $1166.4 \mu\text{W/m}\cdot\text{K}^2$  和 37.3 MPa。多孔的芯层保证了无机复合热电长丝在 200  $\mu\text{m}$  的直径下依然具备良好的柔韧性。在弯曲半径为 5 mm 时, 该复合热电长丝可承受 500 次弯曲循环, 其功率因子的变化率为 13%, 仍然可达  $919.6 \mu\text{W/m}\cdot\text{K}^2$ 。X 射线光电子能谱表征显示  $\text{Ag}_2\text{Se}$  中 Ag 原子与 ANF 中 N 原子和 O 原子在界面处形成了新的 Ag-O-C 和 Ag-N-C 键, 该界面间相互作用是  $\text{Ag}_2\text{Se}/\text{ANF}$  复合长丝具有良好机械性能的主要原因。

## A-08 高效高柔性 PEDOT 基热电纤维的连续制备及可穿戴应用

范曾\*

大连理工大学

随着柔性电子器件的快速发展, 开发取材广泛、易制备加工的柔性热电材料已逐步成为当前热电研究领域的热点课题之一。近年来, 以聚(3,4-乙烯二氧噻吩):聚(苯乙烯磺酸) (PEDOT:PSS) 为代表的导电聚合物由于毒性低、柔性强且热导率低等特点, 被认为是极具潜力的柔性热电材料体系。导电聚合物的热电性能很大程度上取决于其分子链构型与分子链排列。报告人团队已通过湿纺法成功制备了一系列以 PEDOT:PSS 为基体的高性能热电纤维材料。通过利用一维纤维结构的空间限

域效应、同时结合弹性体模板力学牵拉以及引入无机相复合等多种方法，目前已实现对多种高性能 PEDOT 基热电纤维超百米的连续纺制和性能优化。室温条件下，单根纤维最高功率因子超过  $400 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ ，结构弯曲半径小于  $2 \text{ mm}$ ，表明纤维兼具优异的热电性能和力学柔性。基于所制备的高效、高柔性热电纤维，团队又进一步拓展并探索了其在柔性热电转换、自驱动“应变-温度”双模传感等领域的应用可行性。该相关研究工作不仅为一维热电材料体系的制备和电/热输运协同调控提供了实验与理论基础，对于推动柔性电子器件的未来发展也具有重要意义。

## A-09 AgCu(Se,S,Te)无机塑性热电材料

沈克林、仇鹏飞、史迅\*、陈立东

中国科学院上海硅酸盐研究所

无机塑性热电材料的发展为开发高性能柔性热电器件开辟了新的途径。其中，n 型  $\text{Ag}_2(\text{S,Se,Te})$  和 p 型  $\text{AgCu}(\text{Se,S,Te})$  三元固溶体是当前已报道的最典型的两类无机塑性热电材料。相较于  $\text{Ag}_2(\text{S,Se,Te})$  三元固溶体， $\text{AgCu}(\text{Se,S,Te})$  三元固溶体的相组成、晶体结构和物理性质更加复杂，但它们之间的构效关系仍不明确，缺乏系统性的研究。本研究采用固态淬火法制备了 60 余个不同化学组分的  $\text{AgCu}(\text{Se,S,Te})$  三元固溶体。通过对其相组成、晶体结构、力学性能和热电性能系统地研究，构建了  $\text{AgCuSe-AgCuS-AgCuTe}$  体系的组分-相组成-结构-性能三元相图，确定了该体系的“塑性-脆性”和“n-p”导电类型的转变边界，并确定了具有本征塑性和高热电性能的组分范围。在此基础上，通过引入 Ag 缺位，获得了高性能的 p 型无机塑性热电材料，其在  $340 \text{ K}$  的  $zT$  值达  $0.81$ 。最后，开发了首个 n/p 热电臂均为无机塑性热电材料的全  $\text{AgCu}(\text{Se,S,Te})$  基面内型柔性热电器件。在  $30 \text{ K}$  温差下，其归一化功率密度为  $0.09 \text{ W m}^{-1}$ ，优于已报道的基于有机和有机/无机杂化热电材料的面内型柔性热电器件。

## A-10 形变势调控优化 N 型 SnSe 晶体面内热电输运

石浩男、赵立东\*

北京航空航天大学

热电技术可以实现电能和热能的直接转换，是当下能量回收的解决方案之一。近年来，新型热电材料 SnSe 在温差发电和固体制冷方面均展现出巨大的潜力。然而，与 P 型 SnSe 晶体相比，N 型 SnSe 晶体由于面外方向比较容易解理，机械性能较差，还不足以投入实际应用。本工作中，为了与高性能 P 型 SnSe 晶体搭配，我们开发了 N 型 SnSe 晶体的面内性能，它具有较高的载流子迁移率和较强的机械强度，更加适用于热电器件的制造。在 N 型 SnSe 晶体中，通过固溶 Pb 元素使室温的载流子迁移率达到了  $\sim 445 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。值得注意的是，载流子迁移率的提升主要是因为降低了面内方向的形变势，而非有效质量。我们通过准声子散射模型证实了固溶 Pb 前后的有效质量是不变的。形变势的调整则有效实现了电-声解耦，在室温下获得了  $\sim 15.3 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$  的功率因子。同时，Pb 固溶引入了点缺陷，降低了晶格热导率，最终室温  $ZT$  值达到了  $\sim 0.4$ ， $300\text{-}773 \text{ K}$  下的平均  $ZT$  值则达到  $\sim 0.74$ 。这一结果表明 N 型 SnSe 晶体在面内方向具有很大的制冷潜力，其近室温性能值得进一步的开发和利用。

## A-11 通过光电-热电转换和热能储存实现全天太阳能发电

刘子坚、陈光明\*、杜春雨

深圳大学

热电材料作为一种新型能源材料，展现出将热能直接转化为电能的能力，从而成为便携式及远程电子设备中极具吸引力的自主供电解决方案。然而，其在实际户外环境中的广泛应用受限于有限的电力输出能力及输出过程的不连续性，这显著制约了其效能的充分发挥。鉴于此，本研究致力于突破这一瓶颈，创新性地设计并实现了一种全天太阳能发电机系统。该系统巧妙融合了光电转换与热电转换机制，并引入潜热储能技术，三者协同作用，旨在实现高效、稳定且连续的电力供应。具体而言，该系统在日间能够充分利用太阳光进行光电热电转换，同时在光照不足或夜间时段，则通过潜热储能机制平滑过渡与储存能量，并通过热电效应进行热电能量转换确保电力输出的连续性。该全天太阳能发电机在日照充足的白天，其平均开路电压可达 6.8 mV，即便在夜间，凭借热电效应与相变储热技术的协同，仍能维持 0.9 mV 的平均开路电压，展现出卓越的适应性与稳定性。尤为重要的是，该系统在不同环境条件下均能稳定为通信传输等户外应用提供可靠电力支持，显著提升了能源自给自足的可行性与灵活性。本研究不仅是对热电材料应用的一次重要拓展，更为高效、可持续的能源转换与存储技术开辟了一条崭新的研究路径，对于推动未来便携式设备及远程监控系统等领域的绿色、自主供电具有深远意义。

## A-12 高循环稳定性的离子热电凝胶 Gelatin-FeCN<sup>3-/4-</sup>-K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

于茂、刘子扬、李其镨、刘玮书\*

南方科技大学材料科学与工程系

准固态离子热电 (i-TE) 凝胶为热电材料的热电势调控开启了新的维度，在满足微小温差热电转换技术的高热电势需求上展现了巨大的潜力。近五年来，离子热电凝胶器件的热电势和输出能量密度随着热电材料的发展取得了不断的突破，但充放电循环稳定性这一关键性能指标却没有得到足够的重视，这限制了其长时间的服役应用。我们报道了一种基于明胶基体的准固态离子热电凝胶，该材料实现了热电化学效应和热扩散效应的协同作用，具有高的热电势和优异的持续放电循环稳定性。通过协同 K<sub>3</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>]/K<sub>4</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>]氧化还原电对的热电化学效应和 K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 的热扩散效应，实现 19.3 mV K<sup>-1</sup> 的高热电势。该工作选用铂镀层电极并改进器件封装方式，改善了电极界面的化学稳定性，并抑制凝胶水分的蒸发问题和低温端盐析问题，在长时间循环热充-放电过程中，表现出良好的循环性能。Gelatin-FeCN<sup>3-/4-</sup>-K<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 器件的两小时放电能量密度，在 50 次热充放电循环后的保持率高于 70%。高循环稳定性对于离子热电技术在自供电柔性可穿戴电子产品中应用有重要意义。

## A-13 MgAgSb 的固相反应法制备及微纳复合对其热电性能的影响

王世豪<sup>1</sup>、陈俊良<sup>1</sup>、刘呈燕<sup>3</sup>、苗蕾<sup>\*2</sup>

1. 桂林电子科技大学 材料科学与工程学院 广西壮族自治区桂林市七星区金鸡路 1 号
2. 广西大学 物理科学与工程技术学院 广西壮族自治区南宁市西乡塘区大学东路 100 号
3. 湖南人文科技学院 能源与机电工程学院 湖南省娄底市娄星区氏星路 487 号

MgAgSb 作为近年来新开发的近室温高性能热电材料，具有原材料含量丰富、无毒性、环境友好性和机械性能强等优点，其室温相 $\alpha$ -MgAgSb 拥有良好的热电性能，在近室温区被作为 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的候选材料广泛研究。在传统的几种 MgAgSb 合金的制备方法中，由普通球磨法制备样品的电导率较低，而固相反应法制备的样品虽然电导率较高，但往往同时具有较高的热导率，热电性能还存在进一步优化的空间。因此，本文首先通过固相反应法在 600 °C 的较低温度下成功制备高纯度的 MgAgSb 合金，样品在 300°C 时峰值 ZT 达到 0.97，从而获得了一种高效且低成本制备 MgAgSb 合金的方法。而后，通过固相反应法和球磨法分别制备 MgAgSb 合金，将它们以不同比例掺杂后，通过放电等离子烧结和热处理相结合的方成功制备纳米复合 MgAgSb 基合金。结果表明，随着掺杂量的增加，在电导率略有下降的情况下，样品的塞贝克系数明显升高，从而导致样品具有较高的功率因子；同时由于样品中引入了纳米结构，大幅度增强了声子的散射，导致热导率降低。最终样品的室温 ZT~0.79，在 250 °C 时峰值 ZT 达到 1.33。

## A-14 宽温域 P/N 型 SnTe 基热电材料电声输运特性研究

王雅宁\*

东北大学

环境友好的 SnTe 基热电材料受到了人们的广泛关注，但是本征 SnTe 低的 Seebeck 系数和高的热导率限制了其获得高的 zT 值，并且 SnTe 中的大量 Sn 空位使得制备 N 型 SnTe 极其困难。本次工作包括三个研究内容，在第一项研究中发现，利用 MnSe 二元合金化可以在 SnTe 中形成纳米级到微米级的 MnSe 第二相，形成从 0 维到 2 维的缺陷，在大的温度范围内有效降低晶格热导率，最低晶格热导率为 0.44 W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>，接近理论最低值，但由于 Mn 的过早析出，未能获得理想的 zT 值和平均 zT 值。因此，在第二项研究中，利用大量 Ge 和 AgSbTe<sub>2</sub> 与 SnTe 共合金化，在大幅提升 Seebeck 系数的同时，点缺陷产生的大量晶格畸变能够有效降低晶格热导率，协同提升 SnTe 的 zT 值，在 823 K 时，最高 zT 值为 1.28，在 400 K 到 823 K 温度区间内平均 zT 值为 0.77，该研究结果处于所有 SnTe 研究工作中的前 5%。在第三项工作中，用价格相对低廉的 PbI<sub>2</sub> 取代 SnI<sub>2</sub>，成功制备出了 N 型 SnTe，并在此基础上进行 Sb 掺杂，实现了电导率和 Seebeck 系数的解耦，最终在 300 K 到 823 K 温度范围内的平均 zT 值可以达到 0.54，这一结果在目前所有的 N 型 SnTe 文献报道中处在第一位。以上研究工作对推动全 SnTe 基热电器件的研发具有重要意义。

## A-15 超价键材料的掺杂策略及性能优化

刘明<sup>\*1,2</sup>、郭逢凯<sup>1</sup>、Matthias Wuttig<sup>2</sup>、余愿<sup>2</sup>、隋解和<sup>1</sup>

1. 哈尔滨工业大学

2. 亚琛工业大学

超价键 (Metavalent bonding) 是一种独特的键合机制，具有该键合机制的材料在热电、相变和光电子方面表现出优异的性能。对于热电材料来说，超价键材料的性能主要通过掺杂外来原子来调节。通过引入掺杂剂形成固溶体或第二相，是调控电荷和声子输运的关键途径。然而，掺杂剂形成第二相还是固溶体很难预测和设计，这阻碍了材料微观结构和性能的调控。在本研究中，我们发现

超价键材料之间更容易形成固溶体，而在超价键和其他键合机制材料之间，更容易形成析出相。我们通过不同硫化物与超价键材料 GeTe 合金化证明了这一点。我们发现，GeTe 与超价键的 PbS 合金化时，S 的固溶度可以超过 5%，而 GeTe 与共价键的 GeS 和 SnS 合金化时，富 S 第二相则普遍存在，S 的固溶度低于 1%。得益于高固溶度软化晶格和优化电输运性能的作用，我们在  $(\text{Ge}_{0.84}\text{Sb}_{0.06}\text{Te}_{0.9})(\text{PbSe})_{0.05}(\text{PbS})_{0.05}$  中实现了  $ZT=2.2@773\text{ K}$ 。本研究提出的掺杂策略可以应用于其他超价键材料，不仅在热电领域。

## A-16 热电/铁电复合薄膜材料制备及性能研究

李承骏、罗裕波、李旺、杨博宇、孙成伟、马征、  
马文远、危颖超、姜庆辉、李鑫、杨君友\*  
华中科技大学

$\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$  (BST)薄膜因其在室温下的优异热电性能，展现出在低品位热能收集领域的巨大潜力。在本研究中，我们通过磁控溅射和丝网印刷方式在铁电衬底上成功制备了 BST 薄膜，并探讨了衬底极化状态对薄膜热电性能的影响。结果表明，衬底极化状态可以影响 BST 载流子输运行为，通过对 PZT 施加 2 kV 的面外极化，BST 薄膜的峰值功率因子从未极化的  $12.0\ \mu\text{W}/\text{cm K}^2$  提升至  $15.2\ \mu\text{W}/\text{cm K}^2$ 。此外，由该 PZT/BST 复合薄膜组成的 5 腿热电发电机在温差  $\Delta T=39\text{ K}$  时表现出  $13.06\ \text{W}/\text{m}^2$  的最大输出功率密度。DFT 计算进一步揭示了 PZT 的极化可以在 PZT/BST 异质界面诱导电荷密度重新分布并导致显著的层间电荷转移，从而对 BST 薄膜的载流子输运行为和功率因子进行可控调制。本研究报道了一种通过铁电极化方式来提高 BST 热电薄膜热电性能的方法。

## A-17 通过 $\text{Mg}^{2+}$ 填充间隙实现 $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$ 的超低热导率

肖先锋、姚琴、陈立东\*  
中国科学院上海硅酸盐研究所

金属卤化物钙钛矿 (MHP) 具有较高的载流子迁移率、较大的塞贝克系数和较低的热导率，在热电 (TE) 应用方面具有巨大的潜力。与有机-无机杂化 MHP 相比，全无机 MHP 具有更好的热稳定性和光稳定性以及合适的带隙。但它们的热导率相对较高，约为杂化钙钛矿的两倍，这极大地限制了它们作为热电材料的应用研究。空位有序双钙钛矿是钙钛矿结构的一种变体，其八面体空隙具有半径约为  $1.6\ \text{\AA}$  的空隙，有利于容纳大多数金属离子。在本研究中，我们成功地将  $\text{Mg}^{2+}$  作为客体离子填充到  $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$  的八面体空隙中，引起晶格膨胀、局域形变，从而导致声子相互作用增强。同时， $\text{Mg}^{2+}$  在八面体空隙中振动，增加了非谐性。因此，在室温下获得了极低的热导率  $\kappa = 0.11\ \text{W m}^{-1}\ \text{K}^{-1}$ ，这是 MHP 中最低的值之一。此外，电导率  $\sigma$  得到改善，在  $y = 0.102$  时达到最大值，塞贝克系数降低，这可能是由于  $\text{Mg}^{2+}$  的填充导致  $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$  的载流子浓度增加。这项工作为降低所有无机 MHP 热电材料的热导率提供了一种有效的方法。

## A-18 Ni 基 half-Heusler 半导体中间隙 Ni 的满壳层 d 轨道和反常电输运性质

阮毓荣、冯涛、张文清\*

南方科技大学

名义化学计量的 Ni 基 half-Heusler 半导体在电子性质上展现出了巨大的差异，这种差异迄今为止还没有一个统一的框架来解释。此外，额外间隙 Ni 对电输运的影响仍然缺乏理论研究，极大限制了未来对 Ni 基 half-Heusler 半导体的热电性能优化。在本文中，我们研究了间隙 Ni 对 9 种稳定 Ni 基 half-Heusler 半导体的电子性质和电输运的影响，揭示了 Ni-eg4 在不同  $XNi_{1+x}Z$  中局域态的形成及其轨道能级位置。XNi<sub>1+x</sub>Z 中局域 Ni-eg4 态作为新的重价带顶，有效抑制了高温的双极效应，进一步保持了优异的高温热电性能。通过 Ni-d 轨道在合适的能级位置上的调谐，进一步优化了 XNi<sub>1+x</sub>Z 的电输运并保持了对高温双极效应的抑制。我们的研究结果从理论上解释了额外间隙 Ni 在 Ni 基 half-Heusler 热电材料中导致的反常电子性质和对电输运性质显著的调谐作用。

## A-19 层状材料 Bi<sub>4</sub>O<sub>4</sub>SeCl<sub>2</sub> 热电性能的第一性原理研究

焦文艳、刘惠军\*

武汉大学物理科学与技术学院

The van der Waals semiconductor Bi<sub>4</sub>O<sub>4</sub>SeCl<sub>2</sub> has recently attracted great interest due to its extremely small lattice thermal conductivity, which may find possible application in the field of energy conversion. Herein, we accurately predict the thermoelectric transport properties of the Bi<sub>4</sub>O<sub>4</sub>SeCl<sub>2</sub> using first-principles calculations and Boltzmann transport theory, where the carrier relaxation time is obtained by fully considering the electron-phonon coupling. It is found that a maximum p-type ZT value of 3.1 can be reached at 1100 K along the in-plane direction, which is originated from increased Seebeck coefficient induced by multivalley band structure, as well as enhanced electrical conductivity caused by relatively stronger intralayer bonding. Besides, it is interesting to note that comparable p- and n-type ZT values can be realized in certain temperature regions, which is very desirable in the fabrication of thermoelectric modules.

## A-20 p 型(Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 高热电性能的电子结构起源研究

程睿<sup>1</sup>、洪敏<sup>2</sup>、柳伟<sup>1</sup>、唐新峰<sup>\*1</sup>

1. 材料复合新技术国家重点实验室，武汉理工大学，武汉 430070

2. 未来材料中心和工程学院，南昆士兰大学，昆士兰/布里斯班 4300，澳大利亚昆士兰

(Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 是目前唯一商业化应用的 p 型热电材料，也是研究最广泛的热电材料体系之一。其中，在 Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub> 这一确定的化学组分附近具有最大的态密度有效质量 ( $m^*$ )，因而具有最佳的热电功率因子 (PF) 和无量纲热电优值 (ZT)。但迄今为止，Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub> 组分具有最大态密度有效质量的物理本质仍然不明确，因而严重阻碍了 (Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 体系及其热电器件性能的进一步提升。本工作利用分子束外延技术制备了一系列高质量及组成精确控制的 Bi<sub>2-x</sub>Sb<sub>x</sub>Te<sub>3</sub> 单晶化薄膜，利用角分辨

光电子能谱 (ARPES) 技术和第一性原理计算对其电子能带结构进行了精细的实验表征和理论分析, 率先揭示了价带结构随组分的两步优化策略。发现 $\Gamma$ -M 方向的双价带随组分变化发生收敛, 以及在重掺杂的条件下 $\Gamma$ -K 方向的价带显著贡献电输运, 是  $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$  获得所有 p 型  $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$  组分中最大的  $m^*$  以及超高热电功率因子 ( $\sim 5.5 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ ) 的重要电子结构起源。该研究为  $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$  体系的体能带结构特征提供了新见解, 也为进一步优化其热电性能提供重要的实验和理论指导。

## A-21 高效稳定的 $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 基热电器件

傅赞天<sup>1</sup>、张骐昊<sup>2</sup>、蒋蒙<sup>1</sup>、王连军<sup>\*1</sup>、江莞<sup>1</sup>

1. 东华大学

2. 卡尔斯鲁厄理工学院

热电器件可以收集废热并将其直接转化为电能, 从而提高化石燃料的利用率并减少二氧化碳排放。近年来, 高性能热电材料不断被报道, 然而, 相应热电器件的制备和应用仍面临重大挑战。这主要集中在两个方面: 一是多数热电材料存在成本高、稳定性差、难以批量制备、甚至具有毒性等问题, 限制了器件的规模化发展; 二是器件在界面阻挡层设计、焊接技术及组装过程中存在技术瓶颈, 导致整体效率和循环可靠性不佳。针对这些问题, 本团队以环境友好、低成本的  $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$  材料为核心, 开展了从材料设计到器件集成与可靠性提升的全链条研究。首先, 通过优化材料组分和微结构, 使得材料在 300-750 K 范围内的平均热电优值超过 1.0; 进而, 提出了快速筛选界面阻挡层的方法, 并开发了高温焊接-低温服役的界面结合技术, 确保界面具备极低的接触电阻和优异的长期稳定性。在此基础上, 设计并研制了多种  $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$  基热电器件, 最高转换效率突破 11%, 且在近 300 小时的热循环测试中未出现明显衰减。本研究展现了  $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$  基热电器件从室温到 750 K 的优异发电性能, 极大地推动了其实际应用进程。

## A-22 外加磁场直接测量晶格热导率

章淑娴、裴艳中<sup>\*</sup>、陈志炜

同济大学

降低晶格热导率是提升热电材料性能的关键策略。然而, 现有的测量方法主要依赖于模型近似 (如单一能带模型和 Wiedemann-Franz 定律), 通过从总热导率中扣除电子热导率来间接估算晶格热导率。对于复杂能带结构的材料, 这种近似方法往往存在较大的误差。

$\text{Bi-Sb}$  合金在低温下展现出优异的热电性能, 但其复杂的电子结构使得精确测量晶格热导率极具挑战性。利用  $\text{Bi-Sb}$  合金的高电子迁移率特性, 本研究通过应用磁热电效应, 在外加磁场下完全抑制电子热导率, 实现了电子和声子热导率的分离, 进而直接测量晶格热导率。研究还表明, 传统单 Kane 能带模型对晶格热导率的估算存在 30% 的高估, 外磁场下直接测量得到晶格热导率结果再现了符合声子 Umklapp 散射机制的  $T^{-1}$  趋势。本研究为理解声子输运机制、优化复杂能带结构的热电材料提供了一种可靠的测试方法。

## A-23

### 磁滞漫散射效应诱发优异热电性能

宋薇<sup>1</sup>、孙川清<sup>1</sup>、杨康康<sup>1</sup>、柯少秋<sup>1</sup>、李翔宇<sup>1</sup>、  
刘明瑞<sup>2</sup>、孙丛立<sup>1</sup>、赵文俞<sup>\*1</sup>、张清杰<sup>1</sup>

1. 武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室
2. 佛山仙湖实验室

$Mg_3(Sb,Bi)_2$  基材料由于优异的室温热电性能引起了越来越多的关注。然而，固有的低载流子迁移率问题严重限制了其室温热电性能。一直以来，传统的方法是通过抑制 Mg 空位来增加迁移率，但是没有改变其本征的迁移率难题。我们通过添加 Co 第二相杂质成功引入了磁致漫散射效应，发现了载流子迁移率的异常增加，同时显著降低了晶格热导率。通过负磁阻的平方场依赖性，我们发现磁致漫散射效应使得载流子迁移率提升了 46%。拉曼光谱半高宽的增加证实了晶格热导率的降低。磁性  $Mg_3(Sb,Bi)_2$  基合金在 300 K 时的最大 zT 为 0.94，在 300 - 400 K 时的平均 zT 为 1.17。这项工作表明了磁致漫散射效应可以显著改善室温热电性能。

## A-24 单壁碳纳米管基柔性薄膜的热电性能优化及器件制备

刘元梦、刘庆丰\*

南京工业大学化工学院，材料化学工程国家重点实验室

柔性热电材料具有可弯曲性、轻质、低成本和环保等优点，可以有效地利用非平面热源，在可穿戴电子器件中具有广泛前景。单壁碳纳米管（SWCNTs）基热电材料由于其独特的电子结构，较高的电导率和易于调控的特性而被广泛研究。目前提高 SWCNTs 热电性能的策略主要是溶剂处理、手性结构分选和与其他材料复合三个方面，然而，尽管各种策略能够有效地提高了 SWCNTs 的热电性能，但仍有很大的改进空间。基于此，我们采用了“三重处理”的方式实现了 SWCNT 基柔性薄膜整体性能的大幅提高，通过合理的超声分散、 $NaBH_4$  处理和冷压处理，使碳管较好地分散，并调控了 SWCNTs 的缺陷，显著增强了 SWCNT 膜的致密度，在保持较高的塞贝克系数情况下，电导率提升到了  $14300 S cm^{-1}$ ，最终在室温下实现了  $20.29 \mu W cm^{-1} K^{-2}$  的高功率因数，是目前 SWCNT 及其复合薄膜中的最高值。用该 SWCNT 薄膜制备的六腿柔性器件具有较好的稳定性和优异的灵活性，在 40 K 温差下得到的最大功率密度高达  $2996 \mu W cm^{-2}$ ，显示出巨大的应用潜力。

## A-25

### 柔性复合热电材料及传感器件

杜春雨\*

深圳大学

热电材料是一种清洁的能源材料，能够实现热能和电能直接相互转换。近年来，复合热电材料在可穿戴器件应用中展现出巨大前景。基于热电材料所制备的热电传感器件能利用人体热量直接为可穿戴设备持续供电，有效解决了目前可穿戴设备续航的问题，且热电器件的热电势与器件两端的温差呈线性关系，其传感机理与可穿戴设备的交互方式完美契合。然而，热电传感器件的研究仍处于发展的初期阶段，急需开发高性能的热电材料和探索高效的组装策略，以实现热电传感器件在

可穿戴设备的实际应用。针对上述问题，本研究内容如下：(1)采用插层法制备了插层型还原氧化石墨烯/聚(3,4-二氧乙撑噻吩)：聚(对乙烯苯磺酸)(rGO/PEDOT:PSS)复合热电材料，并通过精确调控材料的氧化水平、优化材料体系的载流子浓度和载流子迁移率等方法，显著提高了复合材料的 Seebeck 系数、电导率及功率因子。以该复合热电材料作为传感元件，制备了一种新型柔性自供电可穿戴传感器件。该传感器件对手部动作检测具有较高的识别精度，表明其在动态人体运动监测方面具有潜在的应用前景。(2)以新型的光/热双参数响应的单壁碳纳米管/聚(3-己基噻吩-2,5-二基)(SWCNT/P3HT)复合材料为传感器材料，开发了一种用于人类物联网火灾预警的智能传感系统。该系统由复合材料、电路微控制器和信息传输系统组成。由于 SWCNT/P3HT 复合材料具有高热电和光电性能，智能传感系统具有响应时间快和识别准确率高优点，可以用于智能家居中火源危险智能预警。

## A-26 全立方相 GeTe 基热电材料的构建和性能研究

吴笛\*、马宝鹏、张福东、王伟帅

陕西师范大学

近年来，p 型 GeTe 基材料由于其优异的热电性能成为经典中温区热电材料 PbTe 的有力竞争者。尤其是通过(Bi, Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 合金化引入局域化的 van der Waals 面间隙以及通过高熵合金构建丰富的局域微结构等策略，将 GeTe 基材料的热电性能推到了新的高度。但这些策略并未真正消除在服役温区内 GeTe 本征的菱方-立方的铁电相变，为相关器件在长期服役过程中相变温度附近区域埋下了力学失效的隐患。(GeTe)<sub>x</sub>(AgSbTe<sub>2</sub>)<sub>100-x</sub>，又称 TAGS-x，是一系列由 GeTe 和 AgSbTe<sub>2</sub> 合金化组成的热电材料，当 x 数值低于 75 时，材料可以在室温下呈现出整体的立方相结构。但是，该系列材料仍然 2 大问题：1) 其性能最优的成分位于 x=85，而 TAGS-85 室温下仍然处于菱方相；2) 在 x<75 的 TAGS-x 合金中存在大量的 Ag<sub>8</sub>GeTe<sub>6</sub> 晶界相，恶化了电输运性能。我们通过将化学计量比的 AgSbTe<sub>2</sub> 修正为偏离化学计量比的 Ag<sub>1-δ</sub>Sb<sub>1+δ</sub>Te<sub>2+δ</sub>，并和 GeTe 合金化，构建了一系列 δ-TAGS-x 材料，可以在更广阔的成分范围，即 x<85 时，均实现室温下立方相结构；并通过调控偏离化学计量比指数 δ 大幅减少并最终消除 Ag<sub>8</sub>GeTe<sub>6</sub> 晶界相。最终获得了 300-773 K 温域全立方相的 GeTe 基热电材料以及可媲美菱方 GeTe 基材料的热电器件性能。

## A-27 液相烧结合成高性能 n 型多晶 SnSe

苏彬\*

中国科学院福建物质结构研究所

热电材料可以实现热能与电能的相互转换。在众多的新型热电体系中 SnSe 热电多晶目前备受关注，但 n 型多晶 SnSe 的低热电性能限制了该体系的进一步发展。在本工作中，我们将液相烧结工艺应用于 n 型多晶 SnSe 的制备，发现该工艺能优化了材料的组分，提高其电性能，并且同时引入高密度的位错和第二相，实现晶格热导的大幅下降，最终获得高热电性能的 n 型多晶 SnSe。

A-28

## 铜基硫属热电材料中低温区性能优化

陈弘毅\*

中南大学

铜基硫属热电材料，廉价、环境友好、在高温区具有极低的晶格热导率和优异的电输运性能。但中低温区结构对称性差，没有类液态效应，导致中低温区热电性能较低，极大的限制了铜基硫属热电的应用。因此我们尝试通过晶格结构调控、第二相复合、相变等方法来优化其中低温区热电性能。通过化学键调控相变焓，将  $\text{Cu}_2\text{S}$  的相变温度从 700 K 下降至 400 K，实现了中温区高对称立方结构，大幅提高了  $\text{Cu}_2\text{S}$  的中低温区热电性能。通过 S, Te 掺杂调控第二相的能带和声子谱结构，在保持  $\text{Cu}_2\text{Se}$  电子迁移率的同时，通过第二相射声子，在 850 K 下实现了 2.04 的 zT 值。通过调节  $\text{Cu}_2\text{Se}$  相变过程中的能带宽化和光学声子软化，协同优化相变热电性能和相变温区，在 400 K 附近的相变过程中 zT 值达到了 1.3。这些研究为铜基硫属热电材料中低温区热电优化提供了思路。

A-29

## 化学压力调控 SnTe 热电性能

罗中箴<sup>1</sup>、明洪蔚<sup>2</sup>、邹志刚<sup>3</sup>

1. 福州大学

2. 闽都创新实验室

3. 南京大学

SnTe 具有与 PbTe 相同的晶体结构和类似的能带结构，是一种极具潜力的中温区热电材料。然而，SnTe 的 L 带与  $\Sigma$  带之间存在较大的能量差 ( $\sim 0.35$  eV)，以及高的晶格热导率，这抑制了其热电性能的提升。目前，对 SnTe 性能的调控主要通过 Sn 位重掺杂（如 Mn、Cd、Mg、Ge 或 Ca 等元素）来降低 L 带的能量促进价带收敛，同时结合点缺陷散射声子提升材料的热电性能。然而，重掺杂导致的化学压力（压缩应变）对 SnTe 电子结构、声子输运特征及热电输运性能的影响机制尚不明确。本研究采用了密度泛函理论计算，详细分析了这些影响机制。理论预测在 5 GPa 压力下 p 型和 n 型 SnTe 的 ZT 分别可达到 2.12 (650 K) 和 2.55 (850 K)。进一步实验表明，通过化学压力可以实现强价带收敛，从而显著提升 SnTe 的功率因子。同时，引入偏心原子实现超低晶格热导率。最终，将 p 型 SnTe 的  $ZT_{\max}$  和  $ZT_{\text{avg}}$  分别提升至 1.51 (848 K) 和 0.81 (300-848 K)。

A-30

## 新型热变形工艺提升 $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$ 热电性能

庄华鹭、李敬锋\*

清华大学 材料学院

碲化铋合金是目前唯一实现大规模商业化应用的近室温热电材料，在光电子器件的温控热管理方面具有广阔的应用前景。本工作为了进一步提升其热电性能，通过改进传统的热锻工艺，开发了一种新型热变形工艺。该工艺可使  $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$  块体经历剧烈的塑性变形，从而在其内部引入大量异质结构与缺陷，包括高密度位错、层错和缺陷团簇。多尺度缺陷结构显著增强了变形处理材料在宽频率范围的声子散射，从而大幅降低了其晶格热导率。在此基础上，通过成分优化策略精细调控载

流子浓度，从而确保了良好的电输运性能，并最终可将 ZT 值提升至超过 1.7。这项工作表明制备技术是进一步提升 P 型(Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>基热电材料性能的关键。

## A-31 基于结构设计策略合成宽温域高性能 GeTe 基热电材料

应盼\*、张青堂、唐国栋

南京理工大学

GeTe 由于其在中高温区出色的热电性能而备受关注。然而，为了更广泛地应用于热电发电和热电制冷等领域，需要进一步提升其在更宽温域的热电性能。在本工作中，我们在 GeTe 中进行了 Bi-Sn-Cu 掺杂，其中 Bi 和 Cu 掺杂促进了价带顶的能带收敛，Sn 掺杂则强化了 Rashba 效应，提升了材料在低温下的塞贝克系数。此外，三元素掺杂还提高了材料在常温下的晶体结构对称性，使高温立方相的电输运特性延展至低温区域，进而在整个温度范围内提升了材料的功率因子。掺杂引发的重构效应在基体中形成了丰富的纳米结构，包括 Ge 和 Cu 元素的富集区域，这些元素富集区通过几纳米宽的界面过渡区与基体共格连接，确保了材料的高载流子输运能力。与此同时，异质界面引入的晶格应变充当了声子散射中心，降低了晶格热导率。电声输运的协同优化不仅使合成材料的峰值热电性能得到提升，同时在宽温域内（300-823 K）表现出较高的热电性能，平均 ZT 达到 1.6，超过了过去文献报道的无铅掺杂 GeTe 基热电材料。研究结果为通过结构设计开发宽温域、高性能热电材料提供了理论依据和技术路径。

## A-32 局域原子结构表征与低热导材料

杨龙\*、李昌源、白清羽、陈志炜、裴艳中

同济大学

本报告首先介绍基于同步辐射 X 射线、中子和电子等高能衍射技术的原子对分布函数（pair distribution function, PDF）全散射实验方法，该方法适用于晶态、非晶态和无定形态等多种材料体系。PDF 可用于表征常见热电材料局域结构，我们将以低热导材料体系为例，介绍如何利用 PDF 对其亚纳米尺度局域原子结构进行表征与建模，揭示出不同于长程平均结构的短程有序原子排列。此外，我们提出了实验上可行的结构调控方法，有望加速目标结构无机热电半导体材料的制备。

## A-33 类三重构中熵 half-Heusler 合金设计及热电性能优化

陈荣春、康慧君\*、王同敏

大连理工大学

在众多热电体系中，ZrCoSb 基 half-Heusler (HH)合金由于出色的热稳定性和优异的力学性能，已成为目前最具有应用前景的中高温热电材料之一。然而，由于热电参数间的耦合以及较高的晶格热导率，导致 N 型 ZrCoSb 基 HH 合金的无量纲热电优值(ZT)一直处于低位徘徊。作为一种全新的设计理念，中高熵合金设计思想已成功应用于 PbSe、GeTe 等多种热电体系中，为热电材料的进一步发展开辟了新途径。鉴于此，本文基于二重构 HH 合金理念，设计并制备了一种 M<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>CoSb (M = Zr、Ti、Hf; N = V、Ta)类三重构中熵 HH 合金。在熵驱动的能量过滤效应及能带结构调控的协同

作用下,  $M_{1-x}N_xCoSb$  类三重构中熵 HH 合金实现了电导率与泽贝克系数的解耦。最终, 在 923 K 时, 将  $M_{0.85}Nb_{0.15}CoSb$  ( $M = Zr, Ti, Hf; N = V, Ta$ ) 中熵 HH 合金的峰值 ZT 提升至 0.58。

## A-34 从幕后走向台前, 先进透射电镜技术助力热电材料的研发

于勇\*<sup>1</sup>、何佳清<sup>2</sup>、Michel Bosman<sup>1</sup>

1. 新加坡国立大学
2. 南方科技大学

热电材料可以直接转化废热为电能, 减轻能源消耗。热电材料电性能和热性能普遍的倒置关系是材料工作者一直难以解决的问题。引入纳米结构部分解耦电热性能是一种广泛应用的方法。传统的透射电镜方法的主要问题是其只能对原子位置进行粗略成像从而估测其对晶格热导的影响, 但是无法精细测量材料内部多个物理量例如应变和电势场等, 这对理解和利用纳米结构提升热电性能是很不利的。

针对传统透射电镜方法解析能力有限的问题, 申请人基于目前最先进的透射电镜方法, 开辟新的电镜应用场景, 解决热电材料研究的诸多物理机制问题, 获得了众多新发现, 为理解热电过程, 提升热电性能提供参考。电镜方法包含但不限于球差校正扫描透射电镜下的环形暗场像, 差分相位分析, 离轴电子全息, 纳米束衍射, 四维扫描透射电子显微术, 超高能量分辨能量损失谱等等。基于以上方法我们研究了热电材料多尺度高精度的应变, 电势分布, 缺陷电场等等新现象及其对热电性能的影响。

先进透射电镜技术在热电材料中的使用, 可以揭示宏观性能测量无法说明的微观机理, 使早期透射电镜服务于性能机理解释的地位发生改变, 真正让电镜工作者在热电材料研究中从幕后走向台前。

## A-35 新型 Heusler 热电材料设计与性能调控

骆军\*<sup>1</sup>、董子睿<sup>2</sup>、张玉波<sup>3</sup>、张文清<sup>4</sup>

1. 同济大学
2. 上海大学
3. 闽江学院
4. 南方科技大学

传统上, Heusler 合金分为 half-Heusler (HH) 和 full-Heusler (FH) 两类, 它们的晶体结构上可以看作是多个面心立方晶格嵌套而成, 其中 FH 合金由 4 套面心立方晶格穿插而成, 而 HH 合金的一套面心立方晶格空置 (4d 空位), 从而造成了 HH 与 FH 之间的天然成分间隔。我们最近的研究结果表明, 可以利用合适的原子填充 HH 合金中的 4d 空位, 成分上接近连续地从 HH 合金过渡到 FH 合金, 从而成功地设计并合成了一系列空位填充型 Heusler 合金, 如  $MRu_{1+x}Sb$  ( $M = Ti, Zr, Hf$ )、 $TiFe_{1.5}Sb$ 、 $TiFeCu_xSb$ 、 $TiFe_xCu_{2x-1}Sb$ 、 $TiFe_{1.1-x}Ni_xSb$  和  $NbFeCr_xSb$  等。对空位的连续填充, 导致这

些合金的晶体结构、电子能带结构及其载流子的浓度甚至类型也不断变化，从而合金展现出新奇有趣的物理性能，例如 p 型到 n 型可调的导电行为、极低的晶格热导率、优异的热电性能以及非常规的局域电磁耦合现象。在报告中，我们将系统地总结空位填充型合金的设计理念及其成分、晶体结构与物理性能之间的深刻联系，我们也期待这些新型合金不仅在热电材料领域，还会在自旋电子学、太阳能电池、稀磁半导体、拓扑绝缘体等更多领域展现更丰富的可能。

## A-36 间隙原子策略优化宽温域热电性能

肖钰\*

电子科技大学

间隙原子在优化热电传输性能方面发挥显著作用，并在多种热电材料体系得到验证。本工作以铅硫族化合物（ $PbQ, Q=Te/Se/S$ ）为例，系统研究了间隙原子对电子和声子传输的影响规律，揭示了间隙原子在铅硫族热电材料中的电声解耦作用和动态掺杂效应。结合间隙原子与能带尖锐化策略的优势，可降低铅硫族热电材料晶格热导率，同时优化电子传输性能，大幅提升铅硫族化合物的近室温热电优值，实现宽温域高效热电制冷与发电性能。此外，工作还将介绍其它多种间隙原子对电声优化的作用机制，包括：振动间隙原子、层间间隙原子和液态间隙原子等，为间隙原子策略在更多热电材料体系中的应用提供研究思路。

## A-37 具有超高热功率和能量密度的生物质基离子热电材料

李志国

东北林业大学

低品质热能在我们的环境中无处不在，取之不尽、用之不竭，将低品质的热能通过离子传导转化为电能，对于高效的热能转换具有重要意义<sup>[1]</sup>。目前对于氧化还原型离子热电材料（i-TE）热功率的提升主要集中在调控氧化还原对离子的溶剂熵差或浓度差<sup>[2-3]</sup>，其本身的热扩散效应对热功率的贡献过低，常常被忽略<sup>[4]</sup>。尽管可以通过额外添加扩散离子作为热扩散介质，协同热扩散效应和氧化还原效应以增强热功率<sup>[5]</sup>。但是，通过增强氧化还原电解质自身的热扩散效应以提升 i-TE 热功率的策略尚未被报道。生物质作为一种来源广泛、含天然孔隙且可再生的资源，成为了制备离子传输材料的理想基体<sup>[6]</sup>。其表面丰富的多孔结构和官能团易于化学修饰，可以加速离子从电解质到电极表面的传输速度，从而提高离子扩散效率和电导率。同时，生物质材料低热导率的特性可有效隔绝热对流，这解决了传统 i-TE 的高离子传导性和低热传导性之间的矛盾。因此，生物质材料与热电领域的相互适用性使其成为制备超高性能 i-TE 的不二之选。本工作基于生物质材料的低导热性，提出了一种结构设计和组分调控的新策略，以实现全组分利用，并协同增强单一氧化还原电解质的热扩散效应和热电效应，从而获得高热功和输出能量密度。我们认为，本文报到的新的策略为实现高性能热电电池（TGC）提供了新颖的设计方案，也为利用未开发的低品位热能为物联网供电提供了新途径。

## A-38 通过提高态密度有效质量在 SnTe 基热电材料中获得超高的功率因子

钱鑫、陈荣华、王淑芳\*

河北大学

SnTe 基热电材料具有与 PbTe 相似的晶体结构，价格低廉、对环境友好，有望取代 PbTe 成为新一代高性能热电材料。然而，SnTe 中存在着较高的空穴浓度和显著的轻重价带能量差，导致其本征载流子浓度极高，进而使泽贝克系数严重恶化。此外，SnTe 的晶格热导率也较高，这在一定程度上限制了其在整个温度范围内的热电性能。本研究通过在 SnTe 中合金化少量的 CuInSe<sub>2</sub>，引入共振能级的同时还促进了价带收敛，这使得 SnTe 的态密度有效质量和泽贝克系数得到大幅提升，SnTe-1%CuInSe<sub>2</sub> 样品的室温功率因子达到了 20  $\mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ，300-823 K 的平均功率因子达到了 21.5  $\mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 。在合金化 CuInSe<sub>2</sub> 的基础上进一步在 Sn 位掺杂 Mn 元素，显著提高了材料在高温区的热电性能。在 823 K 时，功率因子从 SnTe-1%CuInSe<sub>2</sub> 样品中的  $\sim 25 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-1}$  提高到 Sn<sub>0.91</sub>Mn<sub>0.09</sub>Te-1%CuInSe<sub>2</sub> 样品中的  $\sim 35 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 。此外，通过 TEM 表征发现，样品中产生了 MnSe、MnTe 和 Cu<sub>2</sub>Se 等纳米结构缺陷，显著增强了对声子的散射作用并降低了材料的晶格热导率。最终，Sn<sub>0.91</sub>Mn<sub>0.09</sub>Te-1%CuInSe<sub>2</sub> 在 823 K 的 ZT 值可以达到 1.33，相比于未掺杂的 SnTe 样品提高了 202%。

## A-39 3d 过渡金属元素掺杂提升 Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> 材料的热电性能

刘剑\*

山东大学

我们研究了 3d 过渡金属元素 (Mn、Fe、Co、Cu) 掺杂对 Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> 材料热电性质的影响。样品通过机械合金化+等离子火花放电的方法进行制备。首先研究了不同 Mn 掺杂量的影响，结果表明掺杂元素以 Mn<sup>2+</sup> 离子的形式存在，载流子浓度随掺杂量增加而降低。但载流子有效质量明显降低，导致载流子迁移率大幅度提升，从而有效提升了材料的电导率和功率因子。Mn 掺杂降低了材料的晶格热导率，但电子热导率提升使总热导率有所增加。Mn 掺杂量为 0.03 时材料得到最优的热电性能。Fe、Co、Cu 掺杂也可以提升材料的电学性能，其中 Mn 和 Co 的提升效果最显著。但不同元素掺杂提升材料性能的机制并不相同。Fe 和 Co 掺杂能有效提升材料的载流子浓度，而 Cu 和 Mn 掺杂能够有效地提高载流子迁移率。

## A-40 高效稳定的硒化亚铜基热电材料

余锦程、胡海华、李敬锋\*

清华大学材料学院

硒化亚铜是一种环境友好的 p 型快离子导体，在中高温热电发电领域具有极大的应用潜力。虽然具有类液态流动性的 Cu 离子可以在参与导电的同时散射声子，但是其在电场或温场中的定向迁移能够引发 Cu 单质的偏析，使材料与器件的稳定服役面临着巨大的挑战。本工作基于密度泛函理论和微动弹性带模拟，利用 Ag 和 F 元素在 Cu<sub>1.99</sub>Se 基体共掺杂的策略，成功诱导了离子限域效应。进而，

Cu 离子的长程迁移得到有效抑制，体系内载流子浓度显著降低。最终，材料的峰值 ZT 在 1050 K 时可达 3.0。所制备的热电模组历经 120 次循环测试仍能在 518 K 温差下维持 13.4% 的转换效率。本工作作为高效稳定的类液态热电材料的研发积累了相关经验。

## A-41 铜空位和第二相协同调控硫化铜材料热电性能

张益欣\*、葛振华

昆明理工大学

热电材料作为一种新型的能源转换材料，既能将任意形式的温差转换为电能，也能够通电后进行温度的精确控制，热电技术的发展可以有效缓解能源危机，同时也是极端环境供电的不二之选。硫化铜 ( $\text{Cu}_{2-x}\text{S}$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ )) 是一种本征 p 型热电材料，不仅原料来源丰富、低毒，还具有本征的低热导，优化后的硫化铜材料的热电优值 (ZT) 超过 1.0，是一种潜在的可商业化使用的新型热电材料。不过此类材料的热、电和离子输运之间存在强关联，所以难以协同优化。本研究分别在  $\text{Cu}_2\text{S}$  和  $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$  材料中添加易诱导提升/降低铜空位的添加剂，通过 Cu 空位浓度的自发调控以及第二相的引入实现热电性能和使用稳定性的协同优化。在  $\text{Cu}_2\text{S}$  材料的制备过程中添加适量的 Sn 和 Se 诱导产生了  $\text{Cu}_2\text{SnSe}_4$  第二相以及位错、气孔等多尺度晶格缺陷。增强的全频声子散射能够整体降低硫化铜材料的晶格热导率。额外添加的 Se 可以引入 Cu 空位调节材料的载流子浓度。 $\text{Cu}_{1.992}\text{SSe}_{0.016}(\text{Cu}_2\text{SnSe}_4)_{0.004}$  样品在 873 K 时的 ZT 值为 1.5；在  $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$  材料的制备过程中添加  $\text{CoSb}_3$  可以获得  $\text{Co}^{3+}$  掺杂的  $\text{Cu}_{1.96}\text{S}-\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$  复合材料。主相 Cu 含量的增加以及高价掺杂优化了硫化铜基复合材料的电传输性能。原位产生的多尺度第二相、沿晶界分布的气孔以及纳米析出物等复杂纳米结构增强了全频声子的散射，并显著降低了材料的热导率。 $\text{Cu}_{1.8}\text{S}-5 \text{ wt}\% \text{ CoSb}_3$  样品在 773 K 时获得了 1.6 的 ZT 值。以上研究结果为其它热电材料体系的成分自发调控以及电-声输运协同优化提供了借鉴，也为热电器件的搭建提供了合适的备选材料。

## A-42 P 型 $\text{YbZn}_2\text{Sb}_2$ 基的热电性能研究

张雄\*、罗浩凌、李晔、张喻

湖北师范大学

通过系统研究 La、Bi 和 Cu 掺杂以及纳米 InSb 原位复合对  $\text{YbZn}_2\text{Sb}_2$  热电性能的影响规律，我们发现这些掺杂具有双重作用，即可调控载流子浓度又可引入点缺陷增强声子散射，从而实现电-声输运的协同调控。而纳米 InSb 原位复合具有三重作用，实现了载流子浓度、迁移率和晶格热导率的协同优化，将峰值热电优值 (zT) 较母体  $\text{YbZn}_2\text{Sb}_2$  提升了 76%。与 La/Bi 掺杂和纳米 InSb 原位复合相比，Cu 掺杂在载流子浓度调控和晶格热导率降低方面表现更突出。 $\text{YbZn}_2\text{Sb}_2$  是  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  的衍生物，因而这些工作可为 P 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  的热电性能优化提供重要参考。

## A-43 Zintl 相中超越点缺陷散射的无序空位与超低晶格热导率

任清勇<sup>\*1,2</sup>、朱金峰<sup>3</sup>、陈辰<sup>4,5</sup>、王晨<sup>6</sup>、陈粤<sup>6</sup>、张倩<sup>4</sup>、马杰<sup>3</sup>

1. 散裂中子源科学中心
2. 中国科学院高能物理研究所
3. 上海交通大学物理与天文学院
4. 哈尔滨工业大学（深圳）
5. 大湾区大学
6. 香港大学

晶格缺陷是抑制晶格热导率、优化热电材料性能的一个重要手段，传统的 Debye-Callaway 自由声子气模型认为晶格缺陷主要起缺陷-声子散射作用。近年来，在一些新型热电材料中观测到了高浓度的空位缺陷，且这些缺陷呈无序或短程序分布。这些材料具有更低的晶格热导率，但是传统的缺陷-声子散射模型无法给出一个很好的解释。同时，大量空位缺陷和无序/短程无序分布情况也为理论研究工作带来了很大的挑战，如 Zintl 相化合物  $\text{Sr}_2\text{ZnSb}_2$ 。

在这个工作中，我们利用非弹性中子散射技术直接测量了  $\text{Sr}(\text{Cu,Ag,Zn})\text{Sb}$  样品的声子谱信息。相较  $\text{SrCuSb}$  和  $\text{SrAgSb}$ ，具有无序空位缺陷的  $\text{Sr}_2\text{ZnSb}_2$  样品的声子谱表现出明显软化和宽化。同时，声子平均能量和格林艾森常数分析指出声子谱的宽化与声子非谐性的增强有关。结合中子衍射测量、原子位移参数分析、X 射线光电子能谱表征和理论模拟计算，研究团队进一步发现空位缺陷的引入会引起价电子转移量和原子键强度的变化，从而导致声子谱的软化和非谐性的增强<sup>[1]</sup>。

## A-44 GeSe 的晶体对称性调控及其热电性能优化

胡利鹏\*

深圳大学

对称和对称性破缺始终是凝聚态物理和材料科学与工程领域的研究前沿，揭示对称性对材料性能的影响是发展新型功能材料的关键。在热电领域，高晶体对称性有利于高能谷简并度，然而，晶体对称性在提高材料热电性能方面的作用仍然研究较少。在本工作中，我们利用晶体对称性和本征点缺陷之间的相互作用来提高 IV-VI 半导体 GeSe 的热电优值。二元正交 GeSe 高的 Ge 空位形成能，产生了极低的载流子浓度和  $zT \sim 0.05$ 。通过合适的多组元合金化可以稳定更高对称性的菱方/立方 GeSe，从而有效地降低了 Ge 空位的形成能，使载流子浓度提高了约四个数量级。反之，通过人为引入额外的阳离子空位，也可以加速高对称菱方/立方 GeSe 结构的形成。同时，与正交 GeSe 相比，菱方/立方 GeSe 拥有更高的能谷简并度和更小的能带有效质量，分别获得了得体的塞贝克系数和较高的载流子迁移率。此外，菱方/立方 GeSe 具有更低的声速以及更强的晶格非谐性，显著降低了材料的晶格热导率。最终，高对称 GeSe 基合金的  $zT$  值达到了 1.3 以上。这些结果证明了通过晶体对称性和本征点缺陷之间的相互作用优化 GeSe 乃至其它热电体系  $zT$  值的有效性。

A-45

## 微结构调控提升全哈斯勒合金热电性能

李和章<sup>\*1</sup>、李敬锋<sup>2</sup>、王超<sup>1</sup>

1. 清华大学精仪系

2. 清华大学材料学院

在本研究中，围绕  $Mn_2VAl$  体系全哈斯勒合金和  $Mn_2CoAl$  反全哈斯勒合金，重点研究其微结构调控与热电性能提升间的关联性，以期发现提升该材料体系热电性能的策略。首先研究了含反位缺陷的  $Mn_2VAl$  合金的电子结构和热电性质。电子结构计算发现， $Mn_2VAl$  的费米能级周围的电子结构随反位缺陷数量而改变。热电性能也随反位缺陷数量的增加而提高。在优化反位缺陷浓度后再进行掺杂改性，提高 ZT 值近 2 倍。最后研究了  $Mn_2CoAl$  晶体结构及反位缺陷与热电性质的关系，发现  $Mn_2CoAl$  样品中存在反位缺陷。电导率和塞贝克系数结果显示  $Mn_2CoAl$  合金不是自旋无隙半导体，而是半金属。本研究发现反位缺陷调控是提升热电性能的一种有效方法，可通过部分取代在全哈斯勒合金中获得高功率因子，使用该类材料的热电转换模块有望获得应用。

A-46

## AI driven design of thermally activated delayed fluorescence materials

谭箐

成都职业技术学院

Machine learning models are becoming essential tools in molecular design and discovery, due to its efficiency in exploring the desired chemical space with targeted properties. In this research, we introduce an integrated framework by combining the modules of algorithmic synthesis, deep prediction, adversarial generation, and fine screening, for the purpose of effective design of the thermally activated delayed fluorescence (TADF) molecules that can be used in the organic light-emitting diode devices. The retrosynthetic rules are employed to algorithmically synthesize the D-A complex based on the empirically defined donor and acceptor moieties, which is followed by the high throughput labelling and prediction with the deep neural network. The new D-A molecules are subsequently generated via the adversarial autoencoder, with the excited state property distributions being perfectly matching those of the original samples. Fine screening of the generated molecules, including the spin-orbital coupling calculation and the excited state optimization, is eventually implemented to select the qualified TADF candidates within the novel chemical space. Further investigation shows that the created structures fully mimic the original D-A samples, by maintaining a significant charge transfer characteristic, a minimal adiabatic singlet-triplet gap and a moderate spin-orbital coupling that are desirable for the delayed fluorescence.

## A-47 压力对 I-III-VI<sub>2</sub> 黄铜矿化合物的结构及电热输运性能调控

郭鑫\*、余伟、魏佳满、武毅、王亚强、邢有博

长春理工大学

I-III-VI<sub>2</sub> 黄铜矿化合物作为一类具有金刚石结构特征的热电材料受到广泛关注。由于结构的特殊性，I-III-VI<sub>2</sub> 材料在压力下表现出多种高压相，这为压力调控晶体结构、优化输运性能提供了有利条件。研究发现 I-III-VI<sub>2</sub> 黄铜矿化合物中 CuInTe<sub>2</sub>、CuGaTe<sub>2</sub>、CuGaSe<sub>2</sub> 等 Cu 基材料表现出潜在的高热电性能。本文围绕 CuInTe<sub>2</sub> 基材料开展了压力对电热输运性能调控的研究。研究揭示了压力对 CuInTe<sub>2</sub> 基材料的阳离子混乱、能带和电子结构的调控规律；压力与富 In 引入的反位缺陷相结合，协同优化载流子浓度和迁移率，在自复合 CuInTe<sub>2</sub> 样品中实现了较高的功率因子 1406  $\mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ 。此外，高压制备过程在基质内引入了高密度晶界、致密位错、层错等多尺度缺陷结构，结合富 In 引入的点缺陷和原位纳米晶，对多频声子产生强烈散射。相比于非高压制备样品，实现了晶格热导率的显著降低。最终通过高压调控实现了  $zT=1.12@773 \text{ K}$  的自复合 CuInTe<sub>2</sub> 基材料。这项工作证明了压力在优化 CuInTe<sub>2</sub> 材料电热输运性能方面的作用，特别是在电输运性能方面的优势。为提高材料的迁移率和功率因子以及改善 I-III-VI<sub>2</sub> 化合物的热电性能，提供了新颖的研究策略。

## A-48 Ge(Sb,Bi)<sub>2n</sub>Te<sub>3n+1</sub> (n = 1, 2) 基单晶热电输运性质研究

陈鹏<sup>1</sup>、吴宏<sup>1</sup>、周小元<sup>\*2</sup>、王国玉<sup>\*2</sup>

1. 重庆邮电大学

2. 重庆大学

基于 Seebeck 效应和 Peltier 效应的热电能源转化技术能够实现热能与电能直接相互转化，作为一种环境友好的新能源技术，显著提高了能源利用效率，助力实现“碳达峰”和“碳中和”目标。为了提升材料的热电性能，研究者们开发了包括声子工程和能带工程在内的多种性能优化策略，并在多种材料中获得了优异的热电性能。近年来，层状结构热电材料因其卓越的性能而受到广泛关注。其中，层状 GeSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>、GeSb<sub>4</sub>Te<sub>7</sub> 和 GeBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 材料具有本征的低晶格热导率，展示出良好的热电潜力。本研究系统探讨了 GeSb<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 的各向异性电热输运特性及其本征低晶格热导率的内在机制，并通过 In 掺杂和 Se 固溶的优化策略显著提升了材料的热电性能。此外，通过 Yb/In 共掺杂，进一步改善了 GeSb<sub>4</sub>Te<sub>7</sub> 的热电性能。基于理论计算与实验研究，揭示了 GeBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub> 的本征低晶格热导率的成因，并通过 In 掺杂引入共振能级，从而提升了其热电性能。本研究的成果为其他层状结构材料的开发及热电性能的优化提供了重要的参考价值。

## A-49

### 快速退火技术在热电薄膜材料中的应用研究

周酉林<sup>\*1,2</sup>、王愿兵<sup>1,2,3</sup>

1. 武汉嘉仪通科技有限公司
2. 湖北省薄膜技术工程实验室
3. 华中科技大学集成电路学院

热电薄膜在能量收集、制冷、温度传感等领域具有广泛的应用。高质量热电薄膜的制备已然成为关键，然而在薄膜的生长过程中，往往会产生成分偏析、相分离、缺陷等问题，要突破这些瓶颈，实现薄膜材料热电性能的提升，关键在于退火工艺的精准控制。

快速热处理技术（RTP）是一款集合红外辐射加热技术和冷壁快速降温技术于一体的退火技术，在材料的快速升/降温、精确保温、和精细气氛调节等较为苛刻的热处理工艺中展现出显著的优势。采用 RTP 技术，借助高效温度控制工艺，可有效调控薄膜生长过程中的化学反应和晶相转变，实现了特定组分和物相的量化，从而获得良好的热电性能。RTP 退火中的温度控制和时间控制，对薄膜中的晶相生长起到关键作用，时间的延长有助于晶体尺寸的增加，获得晶体结构完美的薄膜材料，缺陷浓度和种类减少，电阻率降低，显著提高薄膜的电学性质。RTP 的快速升温 and 短时结晶有助于提高热电薄膜的结晶度和取向，增大了晶粒尺寸，获得了更高的电导率、载流子浓度等，进一步提升热电性能。RTP 的快速升温有助于热电薄膜中对相转变的控制，促进单晶薄膜的生成。RTP 降温速率的可控性和快速降温有利于薄膜材料的相调控，促进特定相的生成或转变。RTP 的气氛控制有助于对薄膜成核、结晶或再结晶的过程控制，从而高质量性能更优的热电薄膜。

通过 RTP 工艺参数优化，能够有效调节热电薄膜中的晶体缺陷，适当增加晶体尺寸，能够获得电学性能更高的、均匀性更好的热电薄膜。

## A-50

### 热电材料中利用纳米烧结助剂接近晶体输运极限

雷景丹<sup>1</sup>、赵琨鹏<sup>1,2</sup>、朱敏<sup>4</sup>、史迅<sup>\*1,3</sup>

1. 上海交通大学
2. 乌镇实验室
3. 中国科学院上海硅酸盐研究所
4. 中国科学院上海微系统研究所

晶界在热电材料的电热输运过程中起着至关重要的作用，它导致了单晶和多晶之间的不同性质。控制晶界以实现与单晶相似的多晶热电性能是一项长存依旧的任务，也相当具有挑战性。 $Mg_3(Bi, Sb)_2$  基热电材料凭借其优异的热电性能、环保兼具低成本的优点，是热电材料领域的研究焦点。以  $Mg_3(Bi, Sb)_2$  基材料为例，我们开发了一种液相烧结策略，成功地将  $Mg_2Cu$  纳米烧结助剂引入  $Mg_3(Bi, Sb)_2$  基材料的晶界中。纳米烧结助剂有助于将平均晶粒尺寸扩大到  $23.7 \mu m$ ，并有效地散射声子，从而获得与单晶相似的优异电输运性能和超低的晶格热导率，以及优异的热电性能（在 500 K 时  $zT$  为 1.5）和热电转换效率（在 207 K 温差下为 7.4%）。这项工作为合成高性能多晶材料以大规模的应用提供了一种简单有效的策略。

## A-51 在 n 型 PbSe 中设计原子级晶格和缺陷结构以实现平均热电优值提升

葛邦治\*

西北工业大学

在 PbSe 中引入缺陷通常可以有效降低晶格热导，但往往会损害电荷输运性能。本研究通过在  $\text{Cu}_x\text{Pb}(\text{Se}_{0.8}\text{Te}_{0.2})_{0.95}$  ( $x = 0-0.0057$ ) 中设计化学成分，成功稳定了多尺度缺陷结构，如 Cu 间隙原子、位移的 Pb 和 Se 原子、少量阴离子空位引发的位错及热力学驱动的纳米结构。在不显著损害电荷迁移率的前提下，大幅降低了晶格热导。通过 Cs-STEM 和 APT 技术直接观察这些缺陷的原子结构，揭示其形成机制及对材料输运性质的影响。这些缺陷有效解耦了影响热电优值 ZT 的物理参数，并显著提升了材料性能。

## A-52 构建高密度层错和针状纳米相以散射 $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$ 载热声子的探索研究

明洪蔚\*

闽都创新实验室

由于多元合金/化合物里中低频率声子 (MLFPs) 主导热输运，因此有效散射 MLFPs 是降低晶格热导率  $\kappa_L$  的关键。本工作通过元素掺杂降低  $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$  的层错能以及利用  $\text{Ag}_2\text{Se}$  与  $\text{InFe}$  掺杂  $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$  的固相反应来分别引入高密度的层错和纳米针来有效散射 MLFPs。第一性原理计算表明纳米针形成的内因是其 (1 1 2) 晶面具有高的表面能。理论分析发现，纳米针的纵横比是一个调控散射声子的额外自由度，通过改变纵横比可以散射不同频率的声子。平均径向尺寸为 50 nm、纵横比等于 10 的纳米针可以和层错一样显著散射 MLFPs，结合点缺陷及其它散射机制实现对  $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$  声子的全频谱散射，使其晶格热导率在 848 K 时降低至理论最小值  $\sim 0.2 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-1}$ 。与此同时，研究表明在  $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$  的 Sn 位掺 Fe 以及 Cu 位掺 Ag 可以增加价带顶的态密度，并且 Sn 位掺 Fe 还可以构建额外的空穴传输通道，这使其功率因子提升了 3 倍，在 800 K 时达到了  $12 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。最终， $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$  的热电优值 ZT 在 848 K 时可达到 1.61。相关工作为  $\text{Cu}_2\text{SnSe}_3$  及其它类金刚石结构化合物的热电性能调控提供了新思路。

## A-53 多手段协同表征 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$ 基单晶热电材料中的点缺陷

马晓静<sup>1</sup>、姚洪浩<sup>1</sup>、芝世珍<sup>1</sup>、赵鹏<sup>1</sup>、叶升<sup>1</sup>、端思晨<sup>1</sup>、尹力<sup>1</sup>、李娟<sup>1</sup>、

包鑫<sup>1</sup>、隋解和<sup>1</sup>、曹峰<sup>2</sup>、张倩<sup>1</sup>、毛俊<sup>\*1</sup>

1. 哈尔滨工业大学 材料科学与工程学院

2. 哈尔滨工业大学深圳 理学院

点缺陷在  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基热电材料电声输运研究中起着关键作用。然而，在非热力学平衡态下制备的多晶材料通常会引入如堆垛层错，位错，空位或间隙原子等不同类型的晶体缺陷。本文通过以 Mg、Sb 金属为自助熔剂，成功生长了具有高质量，大尺寸的 p、n 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  单晶样品。利用单晶 X 射线

衍射技术在微观尺度下确定了  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  单晶的晶体结构与原子占位。宏观上，我们将已得到的单晶材料研磨成粉，利用同步辐射技术收集 X 射线衍射数据，并利用 Rietveld 方法对测试得到的衍射花样进行全谱精修，其平均化后的原子占位与单晶结论相同。通过对单晶衍射数据进行精修后得到差值傅里叶电子密度图，发现 n 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  单晶样品在  $(1/3, 2/3, 0.38(3))$  位置存在间隙 Mg 原子，在 Mg2 位点  $(2/3, 1/3, 0.8653(3))$  处存在空位。在 p 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  单晶样品中，Mg1 和 Mg2 位点均存在不同量的 Mg 原子空位。此外，在  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  单晶的拉曼光谱中观察到两种不同的 Mg-Sb 振动模式，其峰位与强度均存在明显差异，这也表明点缺陷会影响材料声子振动模式。

## A-54

### 关于超级热电材料的预想

芝世珍\*、贾聚财

哈尔滨工业大学（深圳）

Improving the dimensionless figure of merit ( $zT$ ) is the everlasting goal for thermoelectrics. With the discovery of super-thermoelectric materials, which exhibit much higher  $zT$ s (arbitrarily say,  $zT > 5$ ) than that of the traditional materials, it is possible to dramatically alter the landscape of the thermoelectric applications. Identifying super-thermoelectric materials is extremely challenging based on the current understanding of electron and phonon transport. It is interesting to wonder if it is possible to predict how the super-thermoelectric material might look like before it has been discovered. Herein, band modeling on the thermoelectric properties is conducted. It is concluded that super-thermoelectric materials should have a much lower optimal carrier concentration than the “golden carrier concentration”. In addition, the super-thermoelectric materials should also have a much larger optimal Seebeck coefficient than that of the existing materials ( $\sim 200 \text{ mV K}^{-1}$ ).

## A-55

### 范德华晶体 InSe 的非简谐声子研究

马杰\*<sup>1</sup>、舒明方<sup>1</sup>、金敏<sup>4</sup>、魏天然<sup>1</sup>、杨炯<sup>3</sup>、史迅<sup>2</sup>

1. 上海交通大学

2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

3. 上海大学

4. 上海电机学院

作为一种特殊的块体材料，范德华晶体由于层间较弱的作用力（范德华力），不仅表现出很多二维材料的特性，而且可以通过滑移、扭转等方式对相邻层的结构和整个晶体的物性进行调控。在展现出独特的设计灵活性和丰富的物理性质同时，对信息传输与处理、能源转换与存储等具有巨大的应用前景。InSe 是典型的无机层状范德华半导体材料，具有超常的塑性变形能力，亚毫米尺度的单晶可以通过弯曲、扭转、折叠等一系列力学加工而不破碎，压缩应变可达约 80%。尽管理论计算预测了主导塑性变形的层间滑移路径，但是受限于样品质量和仪器分辨率，如何在宏观块体中获得直接实验证据仍存在挑战。此外，层间滑移对晶体结构、晶格动力学与输运特性的影响规律和机制也同样存在挑战。对此，我们聚焦 InSe 晶体材料，采用中子散射实验与理论分析相结合的方法，深入研究了层间塑性滑移、晶格非谐性、热输运性质之间的关系。为无机塑性半导体材料的力学/变形

行为和物理性能的耦合关联研究建立了典型示范，也为层状三维晶体和二维材料的物性调控提供了新的思路。

## A-56 硫化铜基热电材料研究进展

葛振华\*

昆明理工大学

热电材料能够实现电能和热能直接相互转化是一种重要的新能源材料。超离子导体硫化铜是一种有前景的热电材料，但铜的超离子导电性导致电场下单质铜析出以及其复杂的相结构限制了硫化铜基热电材料的实际应用。本课题组发现了天然的辉铜矿( $\text{Cu}_2\text{S}$ )矿石具有优异的热电性能，并且由于宏观伴生的石英绝缘网络具有超高的电稳定性。提出了铜基超离子导体材料稳定性增强的新机制：多尺度的网络状的绝缘石英阻挡层和非晶界面能够阻挡高温下铜离子的定向长程迁移，同时还能起到天然变阻器的作用调节每个辉铜矿单元的工作电压，最终维持材料内部的铜离子浓度在临界析出电势以下。基于以上研究提出了利用宏观绝缘材料复合增强铜基超离子导体材料电稳定性的新方法，并在多种二元铜基超离子导体材料中证明了该优化方案的有效性和普适性。与此同时，在硫化铜相结构调控方面，提出了异价铜离子调控硫化铜相结构的新方法，通过该方法在室温下获得了硫化铜的高温相，这为精细研究硫化铜的高温相结构及性能扫除了温度障碍，移除了硫化铜材料在升降温（25-500 °C）过程中的相变点，提升了器件的稳定性。

## A-57 高性能热电材料制备及界面构筑

昂然\*

四川大学

本次报告围绕高性能热电材料的制备及界面工程展开，探讨了通过纳米结构引入和掺杂调控提升热电性能的策略。首先，我们在 n 型  $\text{PbSe}$  中引入  $\text{Gd-Cu}_2\text{Te}$ ，通过  $\text{Gd}$  掺杂引起的导带平坦化有效补偿  $\text{PbSe}$  中较小的 Seebeck 系数，显著提升了电性能；先进的电镜技术揭示了  $\text{PbSe}$  基体与  $\text{Cu}_2\text{Se}$  纳米析出物之间的半共格界面，该界面不仅保持了较高的载流子迁移率，还显著降低了晶格热导率，使  $zT$  值大幅提升。其次，通过微量  $\text{Se}$  掺杂调控 p 型  $\text{PbTe}$  基体中的  $\text{Pb}$  空位，提高了  $\text{Na}$  在  $\text{Pb}_{0.99}\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$  中的溶解度，并诱导出大量密集位错，从而极大地降低了晶格热导率；在 823 K 下，该材料实现了高达 2.2 的  $zT$  值，这表明微量掺杂和缺陷工程能够有效优化热电性能。在  $\text{GeTe}$  基多功能材料研究中，通过构建多尺度层次结构和应变场分布，实现了超低晶格热导率和优异的机械性能，并在室温附近获得了最高 0.6 的  $zT$  值；利用该材料制备的热电模块在 328 K 下实现了 45.9 K 的最大温差和 5.2% 的单臂转换效率，展示了其在热电发电和制冷中的应用前景。进一步地，我们在  $\text{GeTe}$  材料中引入  $\text{Cu}_2\text{Te}$  合金，形成了多相共格纳米界面网络，成功优化了载流子浓度和迁移率；在 653 K 下，该材料表现出超低晶格热导率 ( $\approx 0.33 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ) 和 2.22 的峰值  $zT$ ；这种结构调控不仅提高了热电性能，还改善了机械性能，使得在 400 K 温差下的热电模块功率密度达到了  $1.47 \text{ W cm}^{-2}$ ，显示出其在非辐射能量采集和无接触热传感等领域的应用潜力。在  $\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$  基材料中，采用钴间隙掺杂策

略实现了显著的热电功率因子 ( $27.3 \text{ mW cm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ) 和优异的多功能传感性能, 拓展了固态热电材料在呼吸监测、触觉反馈和远程检测等领域的应用。最后, 通过  $\text{AgInSe}_2$  合金化提高了  $(\text{Bi, Sb})_2\text{Te}_3$  系统的热电和机械性能, 在  $353 \text{ K}$  下获得了约 1.3 的峰值  $zT$ , 并展示了在自供电信息交互腕带设备中的潜力; 这些研究为热电材料的商业化应用提供了新思路, 尤其在可穿戴电子、远程通信和健康监测等领域具有广泛应用前景。

## A-58 N 型 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$ 基材料热电性能及其热稳定性研究

丁发柱<sup>\*1</sup>、商红静<sup>1,2</sup>、任志锋<sup>3</sup>、古宏伟<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院电工研究所
2. 齐鲁中科电工先进电磁驱动技术研究院
3. 休斯顿大学

N 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基热电材料凭借其优异的热电性能, 被认为是最具有潜力取代商业  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的热电材料之一, 近年来备受关注。面对实际应用, 热电材料不仅需要具有高热电性能, 同时需要具备良好的稳定性。但 N 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基热电材料出现了中高温性能衰退问题, 严重阻碍了其应用发展。因此, 我们主要针对 N 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基材料的热稳定性展开了研究, 系统分析了材料高温下长时间运行后热电参数的变化; 并通过微观结构分析及密度泛函理论计算分析了其相关物理机制, 澄清了影响材料热稳定性的原因。主要是高温 Mg 损失造成了材料高温性能衰减。为了解决这个问题, 我们通过阳离子掺杂和涂层技术分别有效提高了  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基材料的高温稳定性能,  $673 \text{ K}$  下, 材料持续运行 100 小时电性能几乎没有衰减。喷涂有涂层的材料制备的热电单臂器件, 在热端温度  $673 \text{ K}$  下持续测试 20 小时, 输出功率几乎没有变化。总的来说, 掺杂和涂层技术确实是提高 N 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基材料热稳定性有效手段。

## A-59 熵工程解耦钙钛矿热电材料电声输运

郑云鹏<sup>1,2</sup>、林元华<sup>\*1</sup>

1. 清华大学
2. 福州大学

热电材料能够实现电能和热能之间的直接相互转换, 受到广泛关注。若要实现高的热电优值  $zT$ , 则需要同时实现材料的高电导率、高塞贝克系数和低热导率, 但是热电输运参数间的相互耦合, 特别是载流子输运和声子输运间的强耦合关系, 使得参数的同步优化受到挑战, 制约了热电性能的提升。氧化物热电材料因其高稳定性、高元素丰度的优势在热电材料中具有重要地位, 其中 n 型氧化物钛酸锶基 ( $\text{SrTiO}_3$ ) 材料具有较优的电学性能, 但是热导率较高, 性能具有较大提升空间。然而, 强烈的电声耦合同样存在于钛酸锶基热电材料, 难以在维持电学性能的同时降低热导率, 其热电性能的提升面临瓶颈。

本工作中, 清华大学材料学院林元华教授团队提出熵工程策略, 通过熵设计时对钛酸锶晶体学位置的选择和元素平均尺寸的优化, 在引入质量、尺寸波动和高密度缺陷散射声子的同时, 调控了容忍因子和 Ti 的位移以减少载流子散射, 同步实现热导率的显著降低和载流子迁移率的优化, 通过

电声解耦提升了钛酸锶的热电性能。通过熵工程这一有效方法，脉冲激光沉积方法生长的高质量外延( $\text{Sr}_{0.2}\text{Ba}_{0.2}\text{Ca}_{0.2}\text{Pb}_{0.2}\text{La}_{0.2}$ ) $\text{TiO}_3$  薄膜的晶格热导率降低到了近非晶极限的  $1.25 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ，加权迁移率优化至  $65 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，使得电声解耦关键参数 $\mu W/\kappa_L$ 提升到了 $\sim 5.2 \times 10^3 \text{ cm}^3 \text{ K J}^{-1} \text{ V}^{-1}$ ，最终在 488 K 实现了 0.24 的 zT，在 1173 K 时的估值 zT 达到 $\sim 0.8$ ，优于其它 n 型热电氧化物。本研究有助于增进对熵效应的认识，提出的熵工程解耦电热运输的策略能够进一步推广以提升其它热电材料的热电优值，并且从熵的角度对于解耦其它强耦合物理量提出了新思路。

## A-60

### 黄铜矿体系的反常热导率研究

闫艳慈

重庆邮电大学

黄铜矿系列化合物 I-III-VI<sub>2</sub> (I=Cu; III=Ga, In, Al; VI=Te, Se)晶格热导率存在反常行为：晶格热导率随熔点上升而下降，这与传统固态物理学中晶格热导率和固体熔点成正比的经典结论相悖。在排除其它因素对晶格热导率的影响的情况下，我们发现本征的 U 过程散射即晶格非谐性是此系列样品晶格热导率反常的原因。此外，理论计算表明，引起此系列样品晶格热导率反常行为的非谐性并不是传统意义上宏观的非谐性，而是局域的非谐性（不影响刚性骨架）。本工作的结论是对现有理论模型的修正，提出局域非谐性对晶格热导率有显著影响，指出高熔点和低热导率在某些特定体系是能够共存的，为发展新型热电材料以及热管理材料提供了新思路。

## **B 分会场报告摘要 (B01-B52)**

**B-01 稀有金属-硼（碳）功能材料及制备加工**

刘颖

四川大学

**B-02 电磁波能量转化材料的微观机制**

车仁超

复旦大学

**B-03 光敏剂结构调控及肿瘤多模态光治疗**

董晓臣

江苏师范大学

**B-04 人造黑色素材料**

李乙文

四川大学

**B-05 核聚变堆钨材料的微结构调控与性能优化**

吴学邦

中国科学院合肥物质科学研究院

**B-06 单分子层分子晶体光电材料与器件**

江浪

中国科学院化学研究所

**B-07 钠金属电池负极界面调控**

焦丽芳

南开大学

## **B-08 结构功能一体化镁合金研究与应用**

陈先华

重庆大学

镁合金密度小、性能优良，是国际公认的最有潜力轻量化材料之一，航空航天、武器装备、交通等领域对结构功能一体化镁合金材料有迫切需求。然而，镁合金的力学性能与功能特性通常难以兼得、甚至相互矛盾。本报告介绍了析出/固溶、梯度结构和纯净度对镁合金结构与功能特性的作用规律与机制，提出了协同调控力学性能与功能特性的新思路，发展了新型高强高电磁屏蔽、高模量高阻尼、超高耐蚀等结构功能一体化镁合金，并在航空航天、轨道交通等领域实现应用。

## **B-09 光催化分解水及其废热发电的材料体系研究**

李炫华

西北工业大学

## **B-10 高分子表面动态有序褶皱图案**

姜学松

上海交通大学

具有环境刺激响应性动态微纳图案能够在微观尺度上对高分子表面性能如光学、声学、电学、摩擦和浸润性等进行动态调控，是制备智能高分子表面材料的关键环节，然而如何在表面上制备出动态、有序的微纳米图案一直是高分子材料领域的巨大挑战。我们的研究围绕智能高分子表面中动态微纳米图案制备难这一关键问题，将动态交联聚合物网络引入到自然界常见的表面褶皱图案体系中，提出了基于动态化学构建动态表面微纳米图案的新策略，解决了表面动态图案难以制备的难题。在此基础上构建了一系列具有温度、pH、可见光和红外光响应性的多级次图案化表面，实现了表面褶皱图案二维严格有序并揭示其形成力学机制，从分子层面上加深了对表面褶皱这一自然现象的理解。进一步提出利用动态表面褶皱图案构建 3D 动态指纹的策略，探索了动态表面褶皱图案作为智能光学材料在动态光栅、传感、防伪等领域的应用。

## **B-11 锡基硫族热电材料微结构调控与性能优化**

唐国栋\*

南京理工大学

锡基硫族热电材料具有元素无毒、来源丰富、低成本等优势，是极具发展前景的一类环境友好型热电材料，近年来受到广泛关注。针对硫属化合物热电材料热电性能低的问题，我们提出通过微结构设计（空位缺陷、晶粒择优取向、纳米棒、晶格应变、纳米片结构、多孔结构、量子点、填隙缺陷、密集型位错）有效抑制锡基硫族热电材料晶格热导率。另一方面利用能带调控有效提升了材料电输运性能。利用这些方法协同优化了锡基硫族热电材料性能，很大程度地提高了锡基硫族热电材料的能量转换效率。此外，创新性提出通过双空位缺陷和共振能级协同提升 N 型 SnSe 热电性能

新方法，设计得到了具有高 ZT 值的 N 型多晶 SnSe 材料。这些方法可应用于其他热电材料体系性能的提升。为获得高效热电材料提供了新思路。

## B-12 MoS<sub>2</sub> 相变、取向极化与热开关性能研究

苏贤礼\*、杨振、刘可可、吴劲松、张清杰、唐新峰

武汉理工大学

材料热导率的主动控制在能源可持续利用的热量管理中具有重要意义。然而，目前高性能热开关材料的应用温度主要局限于室温附近，限制了其广泛应用和发展。本研究通过电场、压力场和温度场的共同作用成功诱导块体 MoS<sub>2</sub> 由六方（2H）相到菱方（3R）相的可逆相变和取向极化，从而在 300-1573 K 的温度范围内展现出卓越的热开关性能。研究表明，电场的引入显著降低了驱动相变所需的压力和温度。此外，在多场耦合作用下，3R 相在形核过程中产生了面内应变，导致面内电极化。电场迫使 3R 相晶核的面内极化方向与电场方向对齐，随着晶核沿电场方向的生长，最终实现取向极化。这导致材料取向发生近 90° 变化，由 2H 相中压力诱导的择优取向转变为 3R 相中电场诱导的取向极化。这种相变和取向极化导致 MoS<sub>2</sub> 沿电场方向的热导率发生剧烈变化，进而在 300-1573 K 范围内实现了大的热开关比，在 300 K 和 1573 K 时分别达到 15.2 倍和 6.2 倍。研究发现为探索高性能热开关材料提供了新的思路和途径。

## B-13 氧空位和超晶格微结构设计提升钛酸钙材料热电性能

康慧君、李建波、蒋全伟、陈荣春、王同敏\*

大连理工大学

CaTiO<sub>3</sub> 作为钙钛矿的典型代表之一，具有含量丰富、无毒以及化学稳定性好等优点，通常用作光催化剂、发光材料以及微波介质陶瓷，但其热电性能却研究较少。正交结构的 CaTiO<sub>3</sub> (<1380 K) 相比立方结构的 SrTiO<sub>3</sub>，具有更低的热导率，若可进一步提升电输运性能，将会导致更高的热电优值 (ZT)。氧空位作为一种空位缺陷，往往可以给氧化物材料提供足够的载流子浓度，增强其导电能力、催化能力以及吸光能力，其产生条件往往需要高温，还原性气体或者真空环境。本工作基于高温高真空环境，在纯 CaTiO<sub>3</sub> 中产生了大量氧空位，极大地提高了 CaTiO<sub>3</sub> 的电输运性能，将绝缘的 CaTiO<sub>3</sub> 制备成具有热电性能的材料。在此基础上，采用异价离子 La<sup>3+</sup>、Ce<sup>3+/4+</sup> 掺杂 Ca<sup>2+</sup> 进一步提升了电输运性能并降低了热输运性能，成功将 CaTiO<sub>3</sub> 的高温 ZT 值提升至 0.4 以上，使 CaTiO<sub>3</sub> 材料跻身明星氧化物热电材料行列。若进一步实现 CaTiO<sub>3</sub> 钙钛矿结构杂化，将有助于进一步降低热导率，提升其高温 ZT 值，有望实现规模化应用。

## B-14 点缺陷及序构调控电子功能材料

武海军\*

西安交通大学

高效电子功能材料在国家重大战略领域具有广泛的应用潜力，以航空/航天/航海领域为例，深空探测器中放射性同位素温差发电、发动机燃气轮机高温区温度、应变、热流等参数准确测试，以及

深海探测中的声波检测等。汇报人围绕这些国家战略需求，长期从事可实现力↔电↔热环境感知和能量转换的铁电/压电和热电材料的结构设计、机理分析及性能调控。这些材料的序参量往往具有长程属性，这导致材料对外场的静态响应（例如极化强度）优异但是动态响应（例如压电系数  $d_{33}$ ）往往不佳。汇报人基于点缺陷及序构设计，调控序参量短程有序化，实现电子功能材料高性能化/新型化；通过点缺陷调控材料的相结构，实现短程有序，研发出一系列兼具高性能和宽温域的铁电压电材料；通过点缺陷调控电声输运特性，实现长程电传输+短程热传输，研发出一系列兼具高性能和耐温性的热电材料。

## B-15

### 钙钛矿研究进展和未来

丁黎明

国家纳米科学中心

单结钙钛矿太阳能电池自 2009 年效率逐年攀升，目前到 26.8%，基本到平台。体相和表界面钝化，传输层，薄膜制备工艺，大面积，柔性器件，叠层电池都获得迅速深入系统研究。全球太多公司对钙钛矿太阳能电池进行模组放大，看起来就是大规模工业化前夜。丁黎明团队 2012 年开始涉及钙钛矿，是国内最早开展这个方向的少数团队之一，我们在添加剂，传输层，新钙钛矿材料，集成电池，叠层电池，光探测器，卷对卷，柔性器件，高湿度制备等方面开展了系统深入研究，取得一些重要结果。本次报告将对钙钛矿半导体材料研究进展做介绍，内容包括太阳能电池，发光二极管，光探测器，场效应晶体管等应用，并探讨这个方向的未来。

## B-16

### 先进材料中的挠曲电效应研究

洪家旺\*

北京理工大学

挠曲电效应是电极化强度与应变梯度之间的一种新奇耦合效应。相比于只存在非中心对称材料中的压电效应，挠曲电效应可存在于所有介电材料中。特别是在微纳尺度下，由于应变梯度的急剧增加，挠曲电效应可以提高几个数量级，因此在微纳尺度引起许多新奇的物理现象，给先进材料的研究和应用带来新的机遇和挑战。我们通过建立挠曲电系数表征方法，发展了可提升几个数量级的挠曲电系数增强方法；提出超高应变梯度调控策略，实现挠曲调控范围从纳米到微米级提升，揭示非对称弯曲力学行为挠曲形变机制；发现力致电学整流现象，设计出力和频率等多模态响应的忆阻器原型器件。微纳尺度下的新奇挠曲电效应为微纳机电系统的开发和应用提供了新的调控方法。

## B-17

### SnSe<sub>2</sub> 基高性能无机塑性热电材料

邓婷婷<sup>\*1,2</sup>、高治强<sup>2</sup>、仇鹏飞<sup>1,2</sup>、史迅<sup>2</sup>

1. 国科大杭州高等研究院

2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

近年来, Ag<sub>2</sub>S 等新型无机塑性半导体的发现为柔性热电材料的开发开辟了新的途径。本工作首次发现 SnSe<sub>2</sub> 单晶块体在室温下具有类似于 Ag<sub>2</sub>S 的良好塑性和变形能力, 其沿单晶面内方向可以弯折、扭转成各种形状而不发生断裂。理论计算揭示其良好塑性来自于层间较小的滑移能垒和大的解离能, 保证晶体受力时易滑移、难解理, 从而表现出良好的塑性变形能力。SnSe<sub>2</sub> 单晶块体载流子浓度较低, 限制了其获得高的热电性能。在 SnSe<sub>2</sub> 中引入卤族元素掺杂, 可以显著提高载流子浓度, 将功率因子提高至  $10 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ 。在此基础上, 层间插入 Cu 原子, 大幅度提高了载流子迁移率, 热电功率因子进一步提升至  $18 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ , 远超当下 Ag<sub>2</sub>S 基、AgCuSe 基等柔性热电材料。与此同时, 卤族元素掺杂和 Cu 插层 SnSe<sub>2</sub> 晶体仍保持了室温良好塑性。利用该塑性单晶制备出的面内柔性热电发电器件可获得最大功率密度达  $0.18 \text{ W m}^{-1}$ , 远高于有机柔性面内热电器件。该研究对新型无机塑性热电材料的开发和柔性热电器件的制备提供新的研究思路。

## B-18

### 高性能 N 型 PbSe 基热电材料研究

张旦\*、王淑芳

河北大学

热电转换技术可实现电能和热能直接相互转化, 具有安静、可靠、易维护和体积小等优点, 在余热回收利用、半导体制冷等领域等方面具有重要的应用前景。PbSe 基热电材料由于能带结构良好、热导率低、熔点高及组元廉价而备受关注。本报告以 PbSe 基热电材料为研究对象, (1) 提出引入 ds 区元素解耦电声输运特性的新策略, 实现了 PbSe 电热输运的协同调控, 在 N 型和 P 型 PbSe 中同时实现了与商业碲化铋相媲美的近室温热电性能 (300-523 K); (2) 发现稀土元素 (La 和 Gd), 可以实现载流子浓度和能带结构的协同调控, 进而在中温区 (523-873 K) 获得了高的电输运性能和热电性能, 在此基础上, 通过引入高密度位错来降低晶格热导率可以进一步提升整个测试温度区间的热电性能。

## B-19

### 塑性铋化镁单晶热电材料

毛俊\*

哈尔滨工业大学 (深圳)

传统高性能热电材料多为无机半导体, 其化学键以共价键为主, 材料往往表现出本征脆性, 在弯曲和拉伸状况下易发生断裂。研究发现, 铋化镁单晶在面内方向的压缩应变超过 75%, 拉伸应变高达 100%, 这一数值相较传统热电材料高出了一个数量级, 甚至超过了部分具有类似晶体结构的金属材料。扫描透射电子显微表征发现塑性变形后的铋化镁单晶中存在大量滑移带和位错。此外, 第一性原理计算发现铋化镁中的多个滑移面均具有较低的滑移势垒, 这表明材料中可能存在多个滑移

系对铋化镁单晶的塑性变形起到贡献。不仅如此，利用晶体轨道分布密度积分对滑移过程中的键能进行量化分析，发现滑移中连续的动态成键过程能够有效地阻止原子面的解理，这对材料的塑性变形也起到了重要贡献。

## B-20 基于局域失配能的碲化铅的塑性研究

李宜\*

北京化工大学

p 型 PbTe 的高脆性是 PbTe 基热电材料商业应用中的一个重大障碍。由于位错对材料塑性的影响显著，因此对 PbTe 中位错的深入研究至关重要。本研究通过 Peierls–Nabarro 理论框架下的剪切模型中的局部失配能量来探究 PbTe 中  $1/2[011](011)$  刃位错的性质。通过引入适度的应变区域大小，可以在剪切过程中实现 Pb–Te 键的平滑和渐进过渡，同时平衡局部失配能量的弹性和非弹性成分。计算了位错的平均失配能量和 Peierls 应力，并与在单晶形式中表现出良好塑性的钛酸锶材料进行对比。研究表明，未掺杂的 PbTe 可以表现较好的塑性。这项工作提供了一种理论方法来研究 PbTe 中的位错性质，为进一步研究 p 型掺杂引发 PbTe 基材料力学性能下降的问题奠定了基础。

## B-21 双结叠层热光伏器件的能量转换极限及性能调控

廖天军\*

重庆理工大学

热光伏是利用半导体 p-n 结将高温物体的辐射能转换为电能的装置，光辐射器和光伏电池两个核心部件之间的光谱匹配是本领域研究的重要课题。国内外学者已在选择性光谱辐射器、滤波器、叠层太阳能电池方面，取得丰硕成果，有力推动了本领域的发展。本报告将汇报近期在双结叠层热光伏器件性能极限的研究工作，首先，简要介绍器件的基本组成部件以及工作原理；其次，汇报器件的两个工作模式：子光伏电池独立运行（四端器件）和子电池串联（两端器件），利用普朗克热辐射理论和细致平衡原理，获得能量转换效率极限。最后，汇报两个工作模式的优缺点，以及性能极限与已发表成果的比较情况。另外，还将汇报热光伏器件在能量转换过程寄生的各自损耗，如何抑制非本征损耗，如何在考虑能量损耗以及多物理场耦合的前提下，获得实际工况下的能量转换性能。

## B-22 光热电多场耦合效应及其辐射感知应用

陆晓伟\*

中国科学技术大学苏州高等研究院

作为一种功能性材料，热电材料能够实现热能与电能的直接转换。在光场激励下，经典热电材料可呈现新颖的近场光学特性，为构建高效光热电多场耦合系统，发展其在红外辐射感知中的应用奠定了重要基础。本报告主要内容如下：（1）由光子与电子耦合形成的等离激元效应是构建光与物质强相互作用的有效手段。实现等离激元激发的必要条件是固体材料须具有负的介电函数实部。因

此, 在可见光波段, 传统具有表面等离激元效应的材料是金、银等贵金属。然而, 采用近场光学表征手段, 研究发现在可见光波段, 碲化铋 ( $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ) 热电纳米晶由于存在强的带间共振跃迁, 可呈现与贵金属类似的、负的介电函数实部, 进一步在多光子作用下, 展现出强烈依赖入射光偏振态的等离激元效应。(2) 不同于上述光子与电子的耦合, 钛酸锶 ( $\text{SrTiO}_3$ ) 由于存在强的声子共振吸收, 在长波红外 (8-14  $\mu\text{m}$ ) 波段同样出现负的介电函数实部, 为实现光子与声子的强耦合提供了可能; 另一方面,  $\text{SrTiO}_3$  作为经典的氧化物热电材料, 在单位温差下, 可产生显著的热电势 ( $\sim 1000 \mu\text{V/K}$ )。因此, 基于  $\text{SrTiO}_3$  晶体的光热电多场耦合效应, 可实现长波红外辐射的灵敏探测。根据黑体辐射理论, 人体自发红外辐射处于长波红外波段, 从而  $\text{SrTiO}_3$  光热电探测器可用于探测微弱人体红外辐射, 进而在无源、低功耗非接触人机交互系统中发挥作用。

## B-23 利用电子态相变的高性能 Thomson 热电制冷器

陈志炜、裴艳中\*

同济大学

19 世纪 50 年代, William Thomson 根据热力学理论预言并验证了 Thomson 效应的存在。与 Peltier 效应不同的是, Thomson 效应引起的吸放热发生在热电材料的内部, 而 Peltier 效应发生在热电材料与电极材料的接点处。然而, Thomson 效应在传统的热电材料中通常可以忽略不计, 这是因为电子在材料内部的熵变往往非常小。这导致了高性能热电制冷器的开发主要基于 Peltier 效应, 也导致了提高 ZT 成为提高制冷性能的唯一途径。本工作利用电子态相变, 在  $\text{YbInCu}_4$  中直接调控电子熵变, 从而产生巨大的 Thomson 系数, 成功研制了 Thomson 效应增强的热电制冷器。该器件在 38 K 的深低温下实现了大于 5 K 的稳定温差。本工作为热电制冷器的开发提供了一种新的方法, 也为固态低温制冷应用提供了新的机会。

## B-24 基于聚合物复合材料的热电器件与应用

陈光明\*

深圳大学

近年来, 聚合物/无机粒子复合热电材料研究发展迅猛, 但其柔性器件与应用研究明显滞后。我们课题组在该领域已有十年的研究积累, 近 3 年将研究重心拓展到柔性热电器件的设计与应用场景研究, 部分研究工作包括: (1) 采用 SWCNT 复合材料柔性膜, 利用 3D 打印技术, 设计制备了弹簧状可压缩热电器件, 其独特结构设计确保器件易于弯曲和压缩, 而且大幅提高了热流利用效率; 更为突出的是, 由于其垂直温差结构设计, 可有效利用人体皮肤的温度用于可穿戴设备<sup>[1]</sup>。(2) 制备了 PEDOT:Tos/Te 纳米线/SWCNT 三元复合热电材料柔性膜, 进而设计了一种螺旋形柔性热电器件, 兼具可拉伸、可压缩和可穿戴特性, 用于戴在手腕上, 方便利用人体皮肤与外界环境的垂直温差进行发电, 由 5 个 p-n 对组成的器件在 80 K 温差下的输出功率为 9.59 mW<sup>[2]</sup>。(3) 制备了轻质、可压缩和高弹 PEDOT:Tos/SWCNT 复合气凝胶热电材料, 其室温 ZT 值约 0.02; 设计了可压缩热电器件, 在 50% 压缩应变和温差 50 K 下其输出功率 1967 nW, 进而探索了其在热油/热台表面和鞋垫等的方面应用<sup>[3]</sup>。(4) 首先制备了具有插层结构的 PEDOT:PSS/氧化石墨烯复合材料, 然后还原为 rPEDOT:PSS/rGO 复合热电材料柔性膜, 其热电性能在反复弯曲、温差转换、温度变化和空气中均

具有良好的稳定性；进而，将其贴在手套的不同部位，利用温度传感特性可以精确识别手指的点按、捏和握等复杂手部运动<sup>[4]</sup>。（5）制备了 p-型 PEDOT/Te/SWCNT 三元复合材料薄膜，将其与 n-型 PEI 修饰 SWCNT 复合薄膜组装器件，嵌入到墙体中进行火灾预警应用场景研究。结果表明，该器件具有快速响应（引发时间短， $<0.1\text{ s}$ ）、有效多次报警、高稳定性与耐久性以及阈值可调等优点，有望应用于下一代智能远程物联网预警<sup>[5]</sup>。（6）采用两亲离子水凝胶电解质，制备了具有高力学性能且自恢复的热电池，将其贴在手套上，可用于感知与区分具有不同形状的热物体（如五角星、小鸭子 and 圆柱体等），也可感知盛有热水或冰水的烧杯<sup>[6]</sup>。

## B-25 高性能硫族化合物基柔性热电薄膜及器件

逯瑶\*

南方科技大学

柔性热电技术在便携式电子设备和集成电路领域极具发展潜力，一方面可以利用人体与环境的温差进行发电，有望满足穿戴式电子设备对持续供电的迫切需求，另一方面可以利用电能进行温度调控，实现人体局部降温及芯片精准控温。因此，发展具有良好变形能力的柔性热电材料和器件，提高材料与热 / 冷源表面的能量传输效率，成为拓展热电技术新的规模化应用的关键。

硫族化合物热电材料，如  $\text{Ag}_2\text{Se}$ ， $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  等，是优异的室温热电材料。然而，传统无机合金具有本征刚性，不易产生柔性变形。因此，亟需探索提高无机材料柔性力学性能的理论 and 实验方法，而如何从材料微观结构设计和生长调控的角度来获取高热电性能、可加工性和柔性力学性能是本领域的重要研究课题。

基于上述挑战，团队分别采用“自下而上”和“自上而下”的策略制备一系列高性能  $\text{Ag}_2\text{Se}$  和  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基柔性热电薄膜，系统研究了无机热电薄膜中成分、微结构等对热电性能和力学性能的影响机制，实现了柔性与热电性能的同步提升，并探索薄膜器件的多功能应用。取得的主要成果如下：

1, 采用自下而上的湿化学法原位合成了 1D  $\text{Ag}_2\text{Se}$ /2D MXene 纳米复合材料，经真空抽滤和热压后处理制备了柔性复合薄膜。跨维度复合优化了载流子传输，薄膜室温功率因子最高为  $2.1\text{ mW m}^{-1}\text{ K}^{-2}$ 。由 6 个热电臂串联而成的柔性热电发电机，当温差为 30 K 时最大输出功率密度为  $24\text{ W m}^{-2}$ 。通过对  $\text{Ag}_2\text{Se}/\text{MXene}$  基器件结构的优化，实现了热电器件在制冷及传感领域的应用。

2, 采用自上而下方法，实现了从相应单晶剥离出来的基于  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的薄膜在 1000 次弯曲周期内的良好柔韧性，以及  $4.2$  (p 型) 和  $4.6$  (n 型)  $\text{mW m}^{-1}\text{ K}^{-2}$  的高功率因子。这种前所未有的可弯曲性归因于原位观察到的交错层结构，该结构在薄膜制备过程中自发形成，可在保持良好导电性的同时促进应力传播。此外，类施主交错层结构极少影响薄膜的载流子传输，从而保持了其卓越的热电性能。组装的柔性发电机在 60 K 温差下显示出  $321\text{ W m}^{-2}$  的高归一化功率密度。

## B-26 有机薄膜异质结构的热电器件性能研究

徐凌\*

华中科技大学

有机异质结已经成为探索卓越热电性能的独特平台，其基础是通过不同长度、尺度结构的界面分别控制电和热输运成为可能性。特别是，“异质结”除了用于形成异质结的每个组件外，还存在人工制造的组件，以进一步控制电导和热传导，从而开发高性能热电器件。潜在地，在有机异质结中，不同的组分(有机-有机，有机-无机)具有低热导和高电导，这为发展高热电作用提供了必要条件。此外，有机异质结提供了一个机会，在从分子到薄膜和混合设计的不同长度、尺度的不同组件之间形成好的导电性和阻止热传输的界面，在结合两个组件时充当第三个组件。特别是，通过合理选择电、极化和热参数，可以很容易地通过界面调控电导和热导。本报告以有机薄膜异质结为例，阐述了促进电输运同时抑制热传输的机制。有机薄膜具有较低的本征热导，同时薄膜之间组分晶格失配以及声子在界面散射作用，使得有机薄膜异质结具有很低的热导。在电输运方面，作者讨论了调控电输运的因素 1.薄膜各组分之间功函数匹配；2.高介电常数材料诱导极化场影响输运；3.界面偶极和表面极化效应。传统热电材料驱动力主要是由于温度梯度下载流子扩散（即熵差），在报告中作者阐述了在垂直薄膜体系中存在除传统熵差的额外驱动力：温度诱导的界面极化效应。基于此效应，可以同时提高薄膜电导率和塞贝克系数，为实现两者之间解耦合提供了新的思路。

## B-27 全无机水凝胶热化学电池

刘有法、陈晓阳、董晓宇、刘澳、欧阳珂丰、黄燕\*

哈尔滨工业大学（深圳）

热化学电池作为一种能够将热能转化为电能的能源装置，因其具有安全可靠、绿色安全、成本低、可大规模生产的特性有望为解决能源危机和环境危机提供新的思路。然而当前的热化学电池要么为水系液态热化学电池，要么为有机准固态水凝胶热化学电池。前者存在液体泄漏的风险，后者虽无液体泄漏的风险，但其有机分子链构建的水凝胶网络在遭受物理损伤后难以恢复，进而影响其再次使用。此外，目前的有机水凝胶热化学电池制备复杂耗时，不利于工业生产。在此，利用无机盐的离子反应，我们报道了一种新型的全无机水凝胶热化学电池。它不仅能够实现快速成胶，还能进行反复破碎成胶。另外，由于体系的  $H^+$  能够抑制  $Fe^{3+}$  的水解，使得热化学电池冷热两端能够保持较高的电对浓度差，进而实现热电势的提升，并且其热化学电池性能在进行多次反复破碎成胶后仍不衰减。该工作的报道不仅解决了当前有机水凝胶热化学电池面临的问题，更将为热化学电池的发展提供一种全新的思路。

## B-28 基于 PVDF 铁电畴调制的高性能 PVDF-Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub> 热电 柔性复合薄膜

姜庆辉\*

华中科技大学

如何获取低成本、易加工成型、高性能的柔性热电材料是科学工作者亟待解决的问题之一。根据传统的有效介质理论,有机/无机热电复合材料可继承有机材料基元高延展性、低成本、低热导率等优点,又拥有无机热电材料基元高的功率因子,是一种有效的实现途径。不过,这种复合材料的性能受限于两相的本征性能,并且是一种简单的机械复合结构,因此性能的提升有限。在本报告中,我们设计了聚偏二氟乙烯(PVDF)与 Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub>(BST)的有机/无机复合热电材料,提出了低成本高效制备铁电β相 PVDF 的流延刮涂+放电等离子退火新工艺,在此基础上实现了 0-3 结构的铁电/热电功能基元的有效序构,实验证实并论证了 PVDF 相的铁电畴壁显著提升复合材料的载流子迁移率(由非铁电体系的 15–50 cm<sup>2</sup>·V<sup>-1</sup>S<sup>-1</sup> 提升到 75 cm<sup>2</sup>·V<sup>-1</sup>S<sup>-1</sup>),同时热电-铁电异质结产生的能量过滤效应提升泽贝克系数(从非铁电体系的 200 μV·K<sup>-1</sup> 提升到 227 μV·K<sup>-1</sup>),从而实现了电导-泽贝克性能解耦,功率因子提升了五倍以上,达到了 712 μW·m<sup>-1</sup>K<sup>-2</sup>。基于以上材料组装的 PVDF/BST 薄膜热电器件,在 50 K 温差下的输出功率最大值为 12 μW。

## B-29 Ag<sub>2</sub>S 基无机柔性热电器件异质界面研究

邢通、彭立明、仇鹏飞、史迅\*

中国科学院上海硅酸盐研究所

热电发电技术可以利用人体与环境之间温差发电,对于便携式与可穿戴设备同样具有特殊应用价值。近年来,塑性无机半导体 Ag<sub>2</sub>S 由于本征塑性以及优异热电性能而被广泛研究,但是关于 Ag<sub>2</sub>S 基无机柔性热电材料的器件研究仍然处于起步阶段,其中异质界面层的研究较为缺乏。本工作以高性能 Ag<sub>2</sub>S<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub> 无机塑性热电材料为对象,初步探索了能够与之形成较低接触电阻、结合力良好的金属界面,并以金属 W 为例,系统地研究了表征了界面结构与电学性能。W 与热电材料之间均为欧姆接触,具有可调节的接触电阻率及良好的结合力。具有可调节的接触电阻率的原因一方面是金属半导体间能垒低至 0.3 eV,具备形成低接触电阻的必要条件,另一方面是可通过 Se 含量来有效调控 Ag<sub>2</sub>S<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub> 载流子浓度,从而实现对接触电阻率的控制,W 与 Ag<sub>2</sub>S<sub>0.4</sub>Se<sub>0.6</sub> 具有低至 1 μΩ·cm<sup>2</sup> 的接触电阻率。此外,Ag<sub>2</sub>S<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub> 半导体与 W 的接触符合热离子-场发射模型(TFE)模型,载流子浓度与接触电阻率的关系在理论与实际上均符合良好。本工作系统地研究了 Ag<sub>2</sub>S<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub> 热电材料异质界面,为高性能 Ag<sub>2</sub>S 基柔性热电器件的界面设计与研发奠定了基础。

## B-30 离子液体调控的 PEDOT:PSS 基复合热电材料

张贻川\*

西南大学

高分子复合热电材料是一类可实现热能与电能直接相互转化的能源材料，在温差发电、废热回收利用等领域有广泛的应用前景。目前，复合热电材料的有机部分主要是共轭型导电高分子，如聚苯胺、聚 3,4-乙炔二氧噻吩 (PEDOT)、聚吡咯等<sup>[1]</sup>，其中 PEDOT 凭借着优异的热电性能及商业可获得性 (以 PEDOT:聚苯乙烯磺酸盐 (PSS) 水溶液形式) 是有机热电领域的佼佼者。另外，采用单壁碳纳米管 (SWCNT) 等高导电性的碳纳米粒子与高分子复合是一种提高热电性能有效方法，这种方法优势在于载流子可以通过体系界面 $\pi$ - $\pi$ 共轭作用使本征共轭导电高分子与碳纳米粒子之间传输，协同提高复合材料的热电性<sup>[2]</sup>。本工作通过离子液体 (IL) 诱导 PEDOT 的苯式-醌式结构转变，IL 同时促进 SWCNT 分散，协同提高 PEDOT:PSS/SWCNT 热电性能，功率因子 (PF) 可达  $182.7 \pm 9.2 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ 。此外，针对 PEDOT:PSS/SWCNT 体系力学性能较差的问题，加入聚乙烯醇 (PVA) 调节体系的力学性能。PEDOT:PSS/PVA/SWCNT 材料除了展示高的热电性能外 (PF:  $106.1 \pm 8.2 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ )，还展示了优异的力学性能 (断裂强度可达  $136.5 \pm 10.6 \text{ MPa}$ )<sup>[3]</sup>。该工作提供了一种热电性能和力学性能兼顾的复合材料制备方法。

参考文献

[1] Zhang Y., Zhang Q., Chen G. Carbon Energy 2020, 2: 408.

[2] Zhang Y., Li Z., Long Q., Chen G. J. Colloid Interface Sci. 2024, 674: 695.

[3] Li Z., Deng L., Lv H., Liang L., Deng W., Zhang Y., Chen G. Adv. Funct. Mater. 2021, 31: 2104836.

## B-31 PEDOT/SWCNT 复合热电材料及其柔性器件

梁丽荣\*

深圳大学

热能作为一种广泛存在的可持续能源尚未被有效利用，尤其是一些废热、余热等低品位热，而热电材料正是一种利用材料内部载流子运动实现热能与电能之间直接相互转换的功能材料。为了进一步实现柔性可穿戴方面的应用，由热电材料组装而成的热电器件还应具有适应外部机械形变的柔性、可拉伸性与可压缩性等。在此，基于导电聚合物及其复合材料薄膜和气凝胶，制备了高性能微纳米结构的 PEDOT:PSS/SWCNT 复合热电薄膜、PEDOT:PSS/Te/SWCNT 三元复合热电薄膜和 PEDOT:PSS/SWCNT 复合热电气凝胶。然后，基于复合热电薄膜，优化器件结构设计，开发了一种高装配密度和可调面内/面外结构的热电器件，以及一种可拉伸、可压缩、可弯曲和可穿戴的三维螺旋形热电器件。基于三维复合热电气凝胶，所设计的器件可实现高温传感、智能火灾预警和高温能量收集。

B-32

## 临界热电输运性能的建模与调控

赵琨鹏<sup>\*1</sup>、陈弘毅<sup>3</sup>、史迅<sup>2</sup>、陈立东<sup>2</sup>

1. 上海交通大学

2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

3. 中南大学

临界现象在自然界极其普遍，材料在临界变化时具有明显的原子动态无序和临界涨落，从而导致异常的物理性能。然而，目前对其物理机制的认识大多停留在定性的层次，或只关注单一电阻率/塞贝克系数的定量物理模型。因此，深入地理解与认识临界电热输运现象，提出囊括所有电输运的普适性模型，对临界热电效应的研究具有重要的理论意义与实用价值。作者从朗道理论出发，建立了临界电输运特性的定量模型，揭示了材料动态相变过程中的能带展宽和声子软模效应对电输运性能的影响机理，实现了序参量、相变温度和临界热电性能的有效调控。第一性原理计算和实验研究验证了该模型的普适性和有效性。在临界温度下，热电性能优值  $zT$  达到 1.3，是相同温度下正常静态相性能的 2.5 倍。热电单偶制冷模块的器件性能在相变区间同样得到大幅提升，表现出与材料热电性能相同的趋势。该研究工作不仅为动态相变过程中临界电输运性能的研究提供了新的理论框架，还为临界热电效应的调控和优化指明了新的方向。

B-33

## 硫化物钙钛矿 $BaZrS_3$ 热电性能的实验探索

张跃文\*

郑州大学 物理学院

钙钛矿结构化合物是热电材料的重要组成部分，其中氧化物钙钛矿研究最多，硫化物研究报道较少。新型硫化物钙钛矿  $BaZrS_3$  具有低毒、储量丰富的优点，其薄膜器件在光电领域已有重要应用。但是，由于熔点高、脆性、制备困难（Ba 易氧化、Ba/S 和 Zr 熔点差异大、BaS/ZrS<sub>2</sub> 价格昂贵）等问题， $BaZrS_3$  块体材料的实验报道极少，其热电转换潜力尚不清楚。

本研究中，通过对低成本  $BaZrO_3$  粉末进行硫化反应，并结合放电等离子烧结制备出了相对密度接近~100%的纯相  $BaZrS_3$  块状。 $BaZrS_3$  样品具有高载流子迁移率 ( $385 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ )，是因为高相纯度、高致密度、以及可作为载流子通道的  $ZrS_6$  八面体共顶点三维晶格结构；在 623K 时其晶格热导率为  $1.11 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ，归因于畸变钙钛矿结构和硫缺失产生的晶格缺陷。通过优化制备工艺， $BaZrS_3$  样品在 623 K 时最大  $zT$  值为 0.37，这是已报道的硫化物、卤化物和有机无机杂化等钙钛矿型热电材料的最高值。此外，制备  $BaZrS_3$  块状样品具有较好的稳定性。本工作为其他硫族化物钙钛矿热电材料的制备和性能优化提供了新思路。

## B-34 硫族化合物热电材料作为植入物的体外和体内的生物相容性评估

高明远<sup>1</sup>、罗怡平<sup>1,2</sup>、李文<sup>1</sup>、郑龙坡<sup>1,2</sup>、裴艳中<sup>\*1</sup>

1. 同济大学

2. 上海市第十人民医院

热电材料能够响应局部温度梯度产生电能，这使其成为调节细胞功能和重建组织的潜在解决方案。植入物的生物相容性是成功将热电技术整合到生物医学应用中的关键属性。根据人体存在的生物友好元素及热电性能对硫族热电材料进行生物相容性评估，包括但不限于  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{SnSe}$ ,  $\text{Ag}_2\text{Se}$ ,  $\text{SnTe}$ ,  $\text{MnTe}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.88}\text{Se}_{0.12}$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{GeTe}$ ,  $\text{Cu}_2\text{Se}$ ,  $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ ,  $\text{Te}$  和  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 。主要包括体外细胞实验和动物体内实验两个部分。根据 ISO 10993 生物材料评价方法，体外相容性包括：材料直接接触细胞活/死染色实验、细胞黏附实验、CCK-8 细胞活力检测等。为了验证热电材料细胞毒性的普适性，选取对 NIH/3T3（小鼠成纤维细胞）、HUVECs（人脐静脉内皮细胞）、BMSCs（人骨髓间充质干细胞）三种细胞系进行细胞活力实验，分别对应细胞增殖与迁移、血管生成和炎症反应、骨修复和再生。依据 ISO 10993-5 标准对其细胞毒性进行分级，选取细胞毒性为 0,1 级的材料进行体内生物相容性实验，包括但不限于血液相容性（溶血实验，血液生理生化测试）、全身毒性（急性和亚急性毒性测试）、局部炎症（组织慢性炎症 HE 染色和 ROS 染色）等。 $\text{Ag}_2\text{Se}$ 、 $\text{SnSe}$ 、 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ 、 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.88}\text{Se}_{0.12}$  和  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的释放离子浓度均低于提取物中的 10 ppm，通过初步体外评估（包括细胞活力、粘附性和血液相容性），它们表现出良好的生物相容性。此外，大鼠皮下模型的血液学和组织病理学分析表明体内生物安全反应进一步证实了  $\text{Ag}_2\text{Se}$ 、 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  和  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的生物相容性。这项工作为推广  $\text{Ag}_2\text{Se}$ 、 $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  和  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  作为潜在的热电生物材料提供了有力的证据，为它们未来在生物医学中的应用奠定了基础。

## B-35 微结构设计对 Te 基热电材料性能的调控

孙海瑞\*、陈欣、刘晓兵、张永胜

曲阜师范大学

作为一种元素半导体材料，碲（Te）的禁带宽度适中、热导率低以及结构可调性，在热电领域具有潜在的应用价值。然而，受限于其较低的本征载流子浓度与迁移率，Te 的热电性能提升一直面临挑战。在本工作中，我们采用高温高压技术，在 Te 材料内部晶界处成功构建了 Te/黑磷异质结，这一异质结构的引入显著提升了 Te 基材料的载流子浓度。我们进一步地在材料中固溶 Sb 和 Se 元素，并逐渐升高合成压力，发现可以在保持材料优异电学性能的同时，逐步降低热导率。在 4.5 GPa 制备的 Te 基材料，最高 ZT 值在 610 K 可达 1.1。为了大幅提升该材料的载流子迁移率，我们在晶界处构建了 Ag 导电通道，从而对电学性能进行了全面优化。同时，分布在晶界处的 Ag 颗粒作为声子散射中心，有效地抑制了晶格热导率。最终该样品在 600 K 实现了 ZT 值的最大值 1.2，平均 ZT 值 0.78，相较于单纯 Sb 掺杂的 Te 材料，性能提升幅度达到了约 47%。因此，通过高压微结构设计可以有效调控载流子行为，实现电学与热学参数的解耦优化，为中温区热电材料设计与性能优化提供了新思路。

## B-36 银基硫族化合物中无序结构形成机制和稳定性机理

乌力吉贺希格<sup>1,2</sup>、赵琨鹏<sup>\*1</sup>

1. 上海交通大学

2. 内蒙古工业大学

对于多元固溶体，Hume-Rothery 规则（H-R rule）认为溶质原子与溶剂原子之间的相对原子尺寸差（一般小于 15%）和电负性差需要尽可能小才能形成单相固溶体，否则会导致分相。最近的一项研究发现，实验上得到的银基硫族化合物  $\text{Ag}_2(\text{S},\text{Te})$  具有超出 H-R 规则的特征。该体系室温相中，Ag 离子无序分布在 S/Te 所形成的刚性 FCC 亚结构框架中，使该体系的高温立方相得以保留。此外，即便阴离子半径差超过了 H-R 规则，但仍然可以在很大的成分和温度范围内通过常规的固相制备方法得到单一的均匀相。这些特殊的结构性质使银基硫族化合物具有复杂的原子结构、极低的晶格热导率、较高的电子迁移率和良好的室温塑性，在柔性热电或微电子器件领域表现出很大的应用潜力。然而，目前其复杂的结构无序性、相稳定性机理和无序结构对电热输运性质的影响机制仍未清晰，导致该体系热电性能的优化严重受阻。本文以 FCC 结构  $\text{Ag}_2\text{S}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$  为研究对象，采用第一性原理计算和分子动力学模拟相结合的研究方法，揭示其无序结构的形成机制和相稳定性机理，探索结构无序性对电子结构性质的影响规律。研究表明，在  $\text{Ag}_2\text{S}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$  中不同 S 和 Te 离子混合占位的构型基态能量具有很大差别。然而，在有限温度的动力学作用下，其基态能量相差很大的构型平均能量非常接近。此时，温度效应使不同 S 和 Te 混合占位的构型表现出几乎相同的总能量。在基态，需要由无序分布的 S 和 Te 混合构型来引导 Ag 的无序分布，使体系能量降低。RDF 分析表明，在 300~600 K 的温度范围内， $\text{Ag}_2\text{S}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$  中不同构型的 Ag-S 和 Ag-Te 平均键长几乎不随温度发生变化，并且 S 和 Te 位置的不同混合占位对平均键长没有明显的影响。此外，由 Ag-S 和 Ag-Te 平均键长得到的 S 和 Te 离子半径偏差基本上超过了 20%，证明了 S 和 Te 的离子半径偏差超过 H-R 规则。在  $\text{Ag}_2\text{S}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$  中 Ag 离子的分布范围比较广，并且具有明显的流动特性。可以快速流动的 Ag 离子平衡了较大的 S 和 Te 离子半径偏差，使体系能够稳定存在。高于 300 K，不同的 S 和 Te 混合位置对体系的带隙没有影响。不同的 S 和 Te 离子的混合占位对  $\text{Ag}_2\text{S}_{0.25}\text{Te}_{0.75}$  能带影响较小。Ag 离子的无序分布导致带隙降低，但不改变导带形状。本工作为有序-无序亚结构共存的无机半导体研究提供了新的思路。

## B-37 能带重整化效应及其对热电材料电输运性质影响的理论研究

奚晋扬\*、杨炯

上海大学

材料能带结构的温度相关性对其性质有较大影响。我们发展了一套电子-声子重整化（Electron-Phonon Renormalization, EPR）方法<sup>[1]</sup>，考虑了温度导致的晶格膨胀和晶格振动对材料能带结构乃至电输运性质的影响。在传统无机半导体<sup>[1]</sup>、热电材料<sup>[2-5]</sup>、光电钙钛矿<sup>[6,7]</sup>与黄铁矿<sup>[8]</sup>等中开展了工作，结合晶格振动、带边化学键特征等因素，揭示了带隙温度相关性的本质。特别地，针对有机-无机杂化钙钛矿  $\text{MAPbI}_3$ ，首次计算了温度对载流子有效质量、等效电声耦合强度以及电输

运性质参数如电导率、迁移率的影响，表明了强烈的结构涨落将很大程度上抑制其电输运性质<sup>[6]</sup>；基于对温度效应的理解，从我们 MatHub-3d (www.mathub3d.net) 数据库 274 个热电半哈斯勒化合物中筛选出了 3 个，表明它们能够在中高温发生导带简并，并以 TiPtSn 为例分别进行了电输运性质的理论预测和实验验证，展示了其中高温导带简并的存在以及电子 Seebeck 系数的提升<sup>[5]</sup>。

通过上述一系列不同功能材料的有限温度能带结构与电输运性质的计算，我们将几何结构、晶格振动、带边化学键等特征属性与能带重整化进行了关联，深刻揭示了电声耦合重整化效应的本质，获得了普适性的理解。从而能够实现以温度为手段，调控电子结构性质以及设计优化功能性材料性能。

参考文献：

[1] J. Phys.: Condens. Matter 2020, 32, 475503

[2] Chem. Mater. 2021, 33, 1046

[3] Phys. Chem. Chem. Phys. 2023, 25, 26006

[4] Phys. Rev. B 2023, 108, 155205

[5] <https://arxiv.org/abs/2407.00433>

[6] J. Comput. Chem. 2021, 42, 2213

[7] Phys. Chem. Chem. Phys. 2022, 24, 16003

[8] Phys. Scr. 2023, 98, 065902

## B-38 R-GeTe 的本征热电性能及掺杂对其空位缺陷和能带结构的调控研究

宁岁婷<sup>1,2</sup>、余甜<sup>2</sup>、祁宁<sup>2</sup>、陈志权<sup>\*2</sup>

1. 湖北工业大学

2. 武汉大学

GeTe 属于传统的IV-VI族窄带隙半导体，在中温区实现了优异的热电性能，其热电优值已超过 2.5。由于 GeTe 中 Ge 空位具有较小的缺陷形成能，很容易形成，使得 GeTe 表现出本征 p 型，并且具有较高的载流子浓度，这严重限制了其优异热电性能的实现。目前大量研究表明，掺杂可以实现对 GeTe 载流子浓度的调控从而有效优化其热电性能。本工作主要从理论计算方面来深入探究掺杂引起其热电性能提升的内在机理。首先，采用基于密度泛函理论的第一性原理计算来研究 R-GeTe 的本征热电性能及缺陷化学。在此基础上，也进一步评估了 8 种可能掺杂剂对其热电性能的影响，筛选出能够有效抑制 R-GeTe 中 Ge 空位的形成或在 R-GeTe 中实现更高能带收敛的掺杂剂。计算结果表明，Bi 和 Sb 掺杂可以明显增加 R-GeTe 中 Ge 空位的形成能，抑制 Ge 空位的形成，从而有效

降低载流子浓度。同时，在不考虑结构相变的前提下，Cd、Mg、Mn 和 Yb 掺杂会使得 R-GeTe 的能带简并度增加，从而有效增加塞贝克系数。通过对 R-GeTe 载流子浓度和能带结构的协同调控，可以更显著地提升其电输运性能。在实验中，通常可以通过选择两种具有不同优化机制的元素进行共掺，来协同优化 R-GeTe 的热电性能。我们的研究结果进一步阐明了掺杂对 R-GeTe 热电性能优化的内在机理，也表明了选择合适的掺杂会极大地提升 R-GeTe 的热电性能。该研究结果为 GeTe 中合适掺杂剂的选择提供了强有力的理论指导，有利于进一步实现 GeTe 优异的热电性能，加快 GeTe 基热电材料商业化应用的进程。

## B-39 层状 $\text{SnSb}_2\text{Te}_4$ 基材料的热输运机制与热电性能优化

吴宏

重庆邮电大学

层状  $(\text{IVVI})_m(\text{V}_2\text{VI}_3)_n$  基合金由于本征低的晶格热导率，近年来受到研究者的广泛关注。然而，在该类化合物中阳离子无序占位对自身内禀物理性质的潜在影响尚未厘清以及其较低塞贝克系数限制了高热电性能。针对上述问题，本工作以  $\text{SnSb}_2\text{Te}_4$  基化合物为研究对象，结合理论计算，阐述其本征低晶格热导率的内在原因，并讨论阳离子互换位置对材料电子及声子性质的影响。进一步利用 Se 在 Te 位上的固溶，增加本征的  $\text{Sn}_{\text{Sb}}$  反位缺陷的形成能使载流子浓度降低和汇聚多能谷来提高态密度有效质量，显著提高材料的 Seebeck 系数。 $\text{SnSb}_2(\text{Te}_{0.75}\text{Se}_{0.25})_4$  样品在 720 K 时  $zT$  峰值为 0.5。相比于  $\text{SnSb}_2\text{Te}_4$  样品， $\text{SnSb}_2(\text{Te}_{0.75}\text{Se}_{0.25})_4$  材料的平均  $zT$  提高了~200%。在此基础上，通过 In 和 Se 共掺杂，协同实现杂质能级及能带汇聚的叠加效应，大幅提升该体系宽温区的 Seebeck 系数，使  $\text{In}_{0.1}\text{Sn}_{0.9}\text{Sb}_2\text{Te}_{3.4}\text{Se}_{0.6}$  样品在 670 K 获得了 0.6 的最高  $zT$  峰值和 0.4 的平均  $zT$  值。该工作为其他低维材料的宽温区热电性能优化提供思路。

## B-40 $ns^2$ 孤对电子导致尖晶石结构具有超低的晶格热导率

李岩<sup>1</sup>、付钰豪<sup>2</sup>、冯真真<sup>\*1</sup>

1. 河南大学 物理与电子学院

2. 吉林大学 物理学院

一些半导体立方尖晶石硫属化物的低热导率使其在热电领域具有广阔的应用前景，理解这类材料中低晶格热导率的物理机制是一个关键挑战。在此，我们从理论上设计了三种尖晶石半导体： $\text{CdBi}_2\text{Se}_4$ 、 $\text{PbIn}_2\text{Se}_4$ 和  $\text{PbBi}_2\text{Se}_4$ 。我们发现这些材料具有超低的本征晶格热导率 ( $\kappa_l$ )，300 K 时， $\kappa_l$  范围为 0.46 至 1.09 W/m K。通过分析化学键的性质及其与晶体结构的关系，我们研究了这类材料具有低热导率的起源。研究发现，在电子能带结构中，Pb-6s/Bi-6s 和 Se-4p 轨道之间的相互作用在费米能级下产生反键态，导致这些化合物的晶格软化。三种化合物的晶格动力学表现出强烈的声子-光学模耦合以及避免交叉的特性。 $\text{PbIn}_2\text{Se}_4$ 和  $\text{PbBi}_2\text{Se}_4$ 中出现额外的反交叉现象归因于 Se 原子的强烈非谐振动，这是由于  $\text{Pb}^{2+}$   $s^2$ 活性孤对电子与 Se 形成反键态所致。此外，连接四面体和八面体的 Se 原子在 x、y、z 方向上具有不对称、各向异性的势能面，并表现出强烈的晶格非谐性。电子能带结构显示出复杂的简并导带，导致具有多个各向异性的载流子 pockets，其有效质量较小。这种能带结

构同时带来了高塞贝克系数和高导电率。估算的  $\text{PbBi}_2\text{Se}_4$  在 800 K 时的最大  $zT$  值约为 1.5。这些发现为未来设计和探索具有低晶格热导率的新型热电材料提供一些见解。

## B-41 有机小分子/单壁碳纳米管复合热电材料的制备与性能

郭存悦\*、李奕阳、吕一帆

中国科学院大学

热电 (TE) 材料能够直接实现热能与电能之间的相互转换, 对能源的高效利用具有日益重要的研发价值。有机小分子/单壁碳纳米管 (OSM/SWCNT) 复合热电材料是无机热电材料与聚合物基热电材料的有益补充。本工作基于两个系列的噻吩衍生物, 苯并噻吩[3,2-b]苯并呋喃 (BTBF) 及其溴代衍生物 (BTBF-Br 和 BTBF-2Br) 与噻吩并[2',3':4,5]噻吩并[3,2-b]噻吩并[2,3-d]噻吩 (TTA) 及其溴代衍生物 (TTA-2Br), 将其分别与单壁碳纳米管复合制备出性能良好的复合热电材料。其中, 50 wt% BTBF-2Br/SWCNT 复合薄膜的室温电导率为  $530.86 \pm 18.72 \text{ S cm}^{-1}$ , 塞贝克系数 (S) 为  $56.55 \pm 0.58 \mu\text{V K}^{-1}$ , 功率因子 (PF) 达  $169.70 \pm 3.46 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ ; 该复合薄膜加热到 300 °C 时仅失重 5 wt%<sup>[1]</sup>。40 wt% TTA-2Br/SWCNT 复合薄膜的室温电导率为  $977.52 \pm 67.98 \text{ S cm}^{-1}$ , S 为  $49.86 \pm 1.25 \mu\text{V K}^{-1}$ , PF 值达  $242.59 \pm 9.42 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ <sup>[2]</sup>。

## B-42 碳纳米管/导电聚合物复合热电材料

李鹏程\*、李慧、张寒

武汉工程大学

有机热电材料具有成本低、可溶液加工、柔韧性好、原材料丰富和质量轻等优点, 在柔性可穿戴及便携式电子器件中展现不可取代的优势。碳纳米管 (CNTs)/导电聚合物复合材料由于两组分间  $\pi$ - $\pi$  相互作用有利于电荷传输, 同时两相界面能量过滤效应协同提升其塞贝克系数, 成为近年来极具应用前景的一类复合热电材料。

尽管目前碳纳米管/导电聚合物复合热电材料的热电性能得到一定的提升, 复合材料的掺杂调控及其对热电性能影响机制尚不明确, 在一定程度上限制了其热电性能的进一步提升。本文通过在 CNTs 表面原位聚合生长聚苯胺 (PANI), 制备 CNTs/PANI 复合材料, 并以樟脑磺酸掺杂制备 CNTs/PANI 复合薄膜。通过调控掺杂度 (调节樟脑磺酸含量、碱处理或溶剂后处理) 和界面结构 (去掺杂-再掺杂工艺) 协同优化复合材料的电导率和塞贝克系数, 从而提升其热电功率因子, 并探讨了掺杂工艺调控对 CNTs/聚合物复合材料热电性能的影响规律。在此基础上, 分别通过湿法纺丝和 CNTs 纤维表面浸涂聚合物的方法制备 CNTs/PANI 复合热电纤维, 开发了基于 CNTs/PANI 复合纤维的柔性热电器件, 为聚合物基复合材料热电性能的提升及其柔性热电器件设计提供了新的思路。

蒋庆林\*

华南理工大学

近十年来,有机热电材料取得快速发展,多种体系的室温热电优值超过 0.1,在与无机热电材料形成补充的同时可充分发挥其可溶液加工和本征柔性的特点。有机与无机热电材料最本质的区别在于其结构上的无序性,这种无序导致了大量结构缺陷和无定形相,而且有机分子间通过弱相互作用聚集,因此表现出电子局域化明显和迁移率较低。近年来,我们以解决制约有机热电发展的电子局域和输运不畅的难题为目标,提出源头解决方案,聚焦强共轭有机半导体,通过分子结构设计和聚集态结构调控,减小分子间 $\pi$ - $\pi$ 距离,增强电子云重叠,强化分子间相互作用强度(类化学键程度),突破电子的局域限制,实现了电子大范围共有化运动—高度离域。如我们构筑了分子间强相互作用下的电子高迁移(实现高电导率)和离子“准冻结”(贡献高热电势)茈萘亚胺材料, $zT$ 值高达 0.23。进一步,通过结构重构将其霍尔迁移率提高到  $3\text{ cm}^2/\text{Vs}$ ,并展现出“类能带”电子传输模型。值得一提的是,在这种高离域态体系中我们首次发现了室温有机铁磁材料。以上研究表明:通过高离域态体系下的有机热电材料研究,不仅可以深入认知有机半导体的热电输运本质,还有望在大幅提升热电性能和拓展全新功能应用等方面取得新突破。

## B-44 基于个人热管理织物的柔性太阳能热电器件设计开发

卓明鹏\*

苏州大学 纺织与服装工程学院

基于光热转换与辐射降温的太阳辐射调控技术,不仅可以实现个人热管理,获得理想的热舒适;还可以为可穿戴热电器件提供可观的温差,实现高性能电力输出。因此,织物式太阳能热电器件因其在能源利用、便携性和环保性方面的显著优势而受到广泛关注。因此,我们首先提出设计新型的有机光热材料并制备其光蓄热纳米纤维薄膜,系统研究了有机光热材料“分子结构-凝聚态结构-光电性能”之间的内在关联,深入探究了有机光热材料在纳米纤维薄膜的光热转换机制,并进一步与热电纤维进行耦合集成,实现了光-热-电的能量收集和转换。热电器件单元的密度也是实现高能量输出的一个重要因素,经济实惠高效的热电器件构筑方法也是热电应用的关键。为解决这两个问题,促进柔性热电在智能可穿戴中的运用,我们进一步通过简便的丝网印刷技术,调控 CNT 浆液流变性,实现在传统织物上印刷大面积 CNT 热电器件阵列,进一步与辐射制冷织物进行集成,为高密度 CNT 热电单元提供理想的温差,同时实现夏季服装的热舒适和高效光热转换,助力于可穿戴智能织物和柔性智能电子产品的集成化、轻量化、便捷和舒适发展。

参考文献:

Y. D. Zhao, W. Jiang, S. Zhuo, B. Wu, P. Luo, W. Chen, M. Zheng, J. Hu, K.-Q. Zhang, \* Z.-S. Wang,\* L.-S. Liao,\* M.-P. Zhuo\*, Sci. Adv. 2023, 9, eadh8917.;

S. Zhuo, W. Jiang, Y. Dong Zhao, J.-Z. Liu, X. Zhao, J. Ye, M. Zheng, Z.-S. Wang, X.-Q. Zhou, X.-Q. Wang, Y.-L. Shi, W. Chen, K.-Q. Zhang, L.-S. Liao, M.-P. Zhuo, Chem. Eng. J. 2024, 479, 147571.

Y. B. Xue, Y. M. Cao, P. Luo, X. X. Dong, B. B. Han, Y. D. Zhao, M. Zheng, M. Zheng, Z. S. Wang, M. P. Zhuo, *Adv. Funct. Mater.* 2024, 34, 2310485.

## B-45 凝胶型热电池的设计及应用探索

刘卓鑫\*、陈光明

深圳大学

基于热电化学效应，热电池可直接将低品位热能转化为电能，具有巨大的发展潜力。特别是近年来准固态凝胶电解质的迅速发展，为各类微型电子设备提供了一个崭新的能源解决方案。本研究围绕凝胶型热电池的设计与应用展开，重点探讨其在可穿戴电子设备和低品位热能回收中的前沿应用。首先，针对可穿戴技术对高共形、自愈合和自供能设备的需求，本研究开发了一种 MXene 增强的水凝胶电解质，显著提高了柔性热电池的组装效率和机械性能。这种电解质在多次自愈合循环下，表现出优异的热电化学性能，尤其在可穿戴设备中的加密通信和动作监测方面展现出广阔的应用前景。接着，基于对废热回收的可持续能源需求，本研究设计了一种含乙二醇和 MXene 纳米片的复合水凝胶电解质，不仅提升了热电池在低温下的热电势，还确保其在极端环境下的长期稳定性。该研究还展示了一种全天候发电的热电池窗户，能够有效利用室内外温差回收低品位热能。最后，为解决柔性准固态热电池在机械强度和功率输出上的不足，本研究提出引入甜菜碱两性离子的策略，通过多重非共价相互作用，大幅增强了电解质的机械性能和热电化学性能，并成功应用于自供能智能手套。本研究为凝胶型热电池的设计提供了一定的新思路，并为其在可穿戴电子、健身监测和极端环境中的应用奠定了初步实验基础。

## B-46 电子束辐照 PEDOT:PSS 的结构调控及热电输运特性研究

王乙涵<sup>\*1</sup>、林坤华<sup>2</sup>、何佳<sup>1</sup>、李赞<sup>1</sup>、王孟邻<sup>2</sup>、青澄<sup>2</sup>、殷勤俭<sup>2</sup>、张坤<sup>1</sup>

1. 四川大学原子核科学技术研究所

2. 四川大学化学学院

高能电子束辐照通过电离效应和碰撞效应将能量和动量沉积到聚合物中，在不引入任何外来杂质元素的情况下，可以引发交联或降解等微结构变化，进而改变导电聚合物的电导和热导特性，有望成为导电聚合物微观结构调控和改性的强有力技术手段。利用 10 MeV 电子束，通过改变电子束剂量 (2.5~160 kGy) 对 PEDOT:PSS 进行辐照处理。研究发现，在低 (2.5~30 kGy)、中 (30~100 kGy) 和高 (100~160 kGy) 剂量区，PEDOT:PSS 薄膜的电导率均表现先升高后降低的变化趋势，而塞贝克系数几乎保持不变。辐照后的 PEDOT:PSS 薄膜的电导率和功率因子均为原始 PEDOT:PSS 薄膜的 2.5 倍。辐照引起的分子交联显著提高了 PEDOT:PSS 的热导率和机械稳定性。结构分析和密度泛函理论 (DFT) 计算结果表明，在空气氛围的辐照过程中，PSS 链段中产生的自由基容易与 O<sub>2</sub> 结合生成含氧官能团，使得 PEDOT:PSS 的能带间隙降低，提高其热电性能，其中含氧基团越多，其带隙越小，且羰基含量与电导率成正相关。此外，电子束辐照使得 PEDOT 中的苯式结构向醌式结构转变，促进了载流子传输。研究结果揭示了高能电子束辐照对 PEDOT:PSS 的改性作用，为构建高性能导电聚合物热电材料体系提供了新的思路 and 重要参考依据。

B-47

## 柔性热电薄膜器件制备与性能研究

李文\*、裴艳中、骆军、丁文俊、沈欣怡

同济大学

柔性热电薄膜器件是可穿戴电子潜在的随身可持续自供电电池，但高质量热电薄膜材料的高效制备及器件的可持续高性能稳定输出仍是难题。从力学角度考虑，在弹性范围内工作的材料与器件可以实现其材料力学性能与热电性能的可持续性，而材料的弹性性能能力取决于材料的厚度和弹性应变。本研究提出了热塑性形变调控微结构和织构化的材料设计思路，大幅提升二元  $\text{Ag}_2\text{Se}$  及其固溶体等热电薄膜材料弹性应变，显著优化材料的弹性形变能力；而且薄膜材料基本保持了其块体材料的高热电性能，最终在百万次弯曲条件下基本保持其高性能热电输出；该研究为无机高效柔性热电薄膜材料与器件的研制提供了可行方案。

B-48

## 高效热电制冷系统优化设计与应用特性研究

申利梅<sup>1,2\*</sup>、刘泽宇、刘志春

(1.华中科技大学能源与动力工程学院，湖北武汉 430074)

(2.深圳华中科技大学研究院，广东深圳 518057)

热电冷却技术由于其可靠性、静音性、兼容性和可控性而被广泛应用于航空航天、生物医疗、电子器件热管理等领域。而热电制冷技术在实际应用中面临的关键挑战之一，是如何在复杂工况下确保热电制冷系统高效运行。为此，本团队从器件设计、系统集成、应用特性三个方面开展了高效热电制冷系统优化设计与应用特性研究。在热电制冷器件设计方面，提出了变工况运行时高性能器件的设计方法，耦合数据与物理驱动的方法开发了器件快速设计软件；在系统集成匹配设计方面，构建了热电制冷的热力循环，分析热电制冷系统的制冷能力极限，研究热电制冷器、冷/热端散热器的协同匹配策略；面向热电制冷系统应用需求，研究系统的动态运行特性分析与自适应控制策略，分析其全寿命周期性能演化规律。

## B-49 二硫化钼/碳纳米管复合材料的微结构调控及热电性能研究

张云飞\*、蒋朵、杜飞鹏

武汉工程大学

高性能碳纳米管(CNTs)基热电材料的设计与制备对自供电可穿戴设备的发展具有重要意义。二硫化钼 ( $\text{MoS}_2$ )具有较高的载流子迁移率和能量过滤效果，国内外研究者一直致力于利用少层的二硫化钼来提高碳纳米管的热电性能。课题组通过选用  $\text{MoS}_2$  作为掺杂剂，同时提高了  $\sigma$  和  $S$ ，使  $\text{MoS}_2/\text{CNT}$  热电材料的功率因子 ( $PF$ ) 得到了有效提升。此外，通过巯基二氧化硅纳米粒子作为共同硫源以及通过将  $\text{MoS}_2$  生长在氧化石墨烯 (GO) 片层的方法，分别制备少层  $\text{MoS}_2$ ，增强了  $\text{MoS}_2$  与 CNTs 之间的能量过滤效应，使得复合材料保持高电导率的同时，塞贝克系数得到有效地提高，使复合热电材料的  $PF$  得到进一步地提升；本工作为设计制备高性能碳纳米管基热电材料提供了有益指导。

## B-50 柔性 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 热电薄膜及可穿戴发电器件

商红静<sup>\*1</sup>、邹琪<sup>1</sup>、张琳<sup>1</sup>、丁发柱<sup>1,2</sup>、古宏伟<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院电工研究所

2. 齐鲁中科电工先进电磁驱动技术研究院

近年来，可穿戴电子器件快速发展，迫切需要一种便捷、可持续的能源技术解决其用电问题。热电能量转换技术作为一种无机械转动部件、安全可靠的能源技术，在柔性电子领域展现出了良好的应用潜力。Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 作为目前唯一商业化的热电材料，块材在室温附近表现出优异的热电性能，因此 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 薄膜也被寄予厚望。我们采用磁控溅射技术在聚酰亚胺柔性衬底上成功制备出了高性能 p 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 薄膜材料，并通过微观结构调控优化了其热电性能，室温功率因子达到 23.2 μW cm<sup>-1</sup> K<sup>-2</sup>。当弯曲半径为 5 mm，弯曲次数为 900 次时，薄膜电阻几乎没有增加，展现出良好的可变形能力。采用我们自主制备的 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 薄膜，也成功研制了面内发电器件，当温差为 40 K 时，器件功率密度达到 898 μW cm<sup>-2</sup>，并成功实现人体发电。

## B-51 湿纺 PEDOT:PSS 包覆的 Te 纳米线有序排列的复合纤维 用于高性能柔性热电发电机

李佳佳、蔡克峰<sup>\*</sup>

同济大学

与薄膜或块体材料相比，热电纤维的尺寸更小且具有可编织性，更适合应用于小型便携或可穿戴电子设备，因此引发了广泛的关注。我们通过水热法合成了 PEDOT:PSS 包覆的 Te 纳米线 (PC-Te NWs) 并通过湿法纺丝制备了不同 PC-Te NWs 含量的 PEDOT:PSS/PC-Te NWs 复合纤维。由于 PEDOT:PSS 的包覆，一方面避免了 Te 纳米线由于表面能高而产生团聚，另一方面提高了 Te 纳米线和 PEDOT:PSS 基质的相容性，使得 PC-Te NWs 在复合纤维中的含量可以达到 70 wt%。PC-Te NWs 的高长径比和纺丝过程中针头内壁的压力使得 PC-Te NWs 沿着复合纤维的轴向有序排列。依次用硫酸和乙二醇处理后，优化复合纤维的塞贝克系数为 121.2 μV K<sup>-1</sup>，电导率为 262.5 S cm<sup>-1</sup>，功率因子为 385.4 μW m<sup>-1</sup> K<sup>-2</sup>，是所有已报道的 PEDOT:PSS/Te NWs 基复合纤维的最高值。另外，该复合纤维具有较好的柔性，抗拉强度为 52.5 MPa。由该复合纤维组装的柔性热电发电机具有良好的输出性能。该工作可有效地综合利用 PEDOT:PSS 的电导率可调、柔性好的优点以及 Te 纳米线高塞贝克系数的优点，为制备高性能柔性热电复合纤维提供了有效方法。

## B-52 新型高性能可穿戴温差发电器件

王晓东、张倩<sup>\*</sup>

哈尔滨工业大学（深圳）

柔性热电发电机可以通过收集人体热量为可穿戴电子产品供电。然而，现有的热电材料很少同时实现高柔性和高输出性能。我们提出了一种简单、经济有效且可扩展的两步浸渍法来制备具有优异弹性和优良热电性能的三维热电网络。网状结构赋予了其超轻量化 (0.28 g cm<sup>-3</sup>)、超低导热系数

( $0.04 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ )、中等柔软度 ( $0.03 \text{ MPa}$ ) 和高伸长率 ( $>100\%$ )，弥补了传统刚性无机热电材料和热电聚合物难以结合柔性和高热电性能的缺陷。所获得的基于网络的柔性热电发电机实现了相当高的输出功率  $4 \mu\text{W cm}^{-2}$ ，甚至可与最先进的基于块体的柔性热电发电机相媲美。为了测试在实际穿戴中收集身体热量的效果，将热电网络整合到一件商业夹克中，制成了一件“热电夹克”，在正常穿着时可以产生毫瓦级的电力，这足以覆盖大多数可穿戴电子设备和组件的能耗。高输出性能、可扩展技术和显著的可穿戴性优势，为高性能柔性热电器件的大规模生产和实际应用提供了新的思路和方法。

## C 分会场报告摘要 (C01-C56)

### C-01 超离子热电材料中的热载子刻画以及对离子运输的影响

周艳光

香港科技大学

当材料的特征尺寸到非常小的尺度的时候，比如只有十亿分之一的纳米尺度，由于量子尺寸效应，材料中的热输运过程同在大体材料中有显著的不同。正因为如此，纳米科技常常被应用于设计高效率热点转换材料和结构。在此次的报告中，我将从两个方面介绍课题组在一种特殊的纳米晶体材料-超离子热电材料热输运机理探索和其潜在应用的尝试。具体包括热载子表征算法开发和超离子热电晶体中的反常热输运的机理，以及热载子对离子运输的影响，从而为设计小温差高性能热电材料提供指导。

### C-02 体热发电实现皮肤创面加速愈合

周重见

西北工业大学

难愈创面是实现全民健康的一大阻力，例如，我国糖尿病患者数量已经破亿且不断攀升，按国际统计平均每人需要 0.5 m<sup>2</sup> 计算，仅糖尿病足这一种难愈创面即需求皮肤修复相关产品总量近 5e4 的平方米。电刺激能够有效地加速全层伤口愈合，然而，传统的发电设备是专门设计的，体积大，操作繁琐，无法实现全天候创面监测。在这里，我们报告了一种灵活且生物相容的热电装置，能够通过体热发电输出微伏级的电力。在小鼠中，我们证明热电装置诱导的电流激发了与组织再生相关的 Piezo1 介导通路的表达，细胞实验证明了该电压加速了细胞迁移和增殖，动物实验证明了该器件能使伤口愈合比空白对照组快超过 4 天。重要的是，热电装置可以快速愈合伤口，而不需要额外的电路，如放大器。这些优点将取代伤口愈合方法，为热电应用开辟新的领域。

### C-03 湿热响应性水凝胶的设计与能量转化应用

刘畅

香港科技大学（广州）

本研究通过精细的水凝胶分子设计与改性，调控其微纳结构、尺寸、微纳界面传质行为及体相结构，进而控制材料的介观与宏观形貌，成功开发出具有高性能、高响应性的功能水凝胶。这些水凝胶能够在日常环境中实现对湿度与热量的响应与利用。基于此，研发了湿热能量转化器件，能够提供高达 2V 的电压输出。此外，本研究还制备了适用于极端干旱环境（相对湿度约 20%）的大气取水设备，为解决干旱地区水资源短缺提供了新思路。

## C-04 高性能离子热电材料中离子与聚合物基体的相互作用

孙宽

重庆大学

在地球上，2/3 热能的温度低于 200 摄氏度，这是一个巨大的能源。不幸的是，目前尚缺乏一种高效且具有成本效益的技术来收获这些低品位的热能。在过去的五年里，基于离子热电 (i-TE) 材料的热电发生器 (TEG) 被认为是一种潜在的解决方案，因为以移动离子为电荷载流子的 i-TE 有可能在低工作温度和小温度梯度下产生可观的热电压。但如何从材料的角度提高这项新技术的输出功率和转换效率仍然是一个挑战。在本次汇报中，我将介绍我们最近在 i-TE 领域的一些探索性实验，通过理论推测和材料设计，以获得世界纪录的塞贝克系数和一种新的运行模式，这大大提高了 i-TE 的输出功率。我还将演示 i-TE 在 60 摄氏度以下获取热能并为电子设备供电方面的应用。希望这次汇报能为设计更高效的低品位集热 i-TE 提供新的思路。

## C-05 小温差下热电材料在发电器件中的性能预测及优化

宋坤

南京工业大学

热电器件在可穿戴设备供电、低品位余热回收等小温差环境下展现出了巨大的应用价值。然而，现有热电器件的实测性能远低于理论预测值，严重阻碍了新型热电材料的性能验证和器件优化。在小温差载荷下，由 Peltier 效应引起的热跳跃是除界面阻外影响器件效率的主要因素。对于常见的热电器件，热跳跃对转换效率的影响约为 10%。考虑热跳跃和界面电阻的联合影响，热电器件的理论效率首次与实测值吻合。另一方面，热电材料参数密切依赖于温度，但仍缺乏评估发电过程中材料参数随温度变化趋势的指标。本文指出，电流密度的相对标准差(RSD)可有效评估温度依赖热电材料的发电性能。对于平均 ZT 值相同的材料，RSD 越低则转换效率越高。相关理论在具有不同 RSD 的 N 型碲化铋材料中得到了验证。将具有较低 RSD 的 N 型和 P 型材料制备成热电器件，在低于 300K 温差下实现了 7.82% 的转换效率，是商用碲化铋器件效率的 2 倍。相关研究为热电器件的性能预测及优化奠定了基础。

## C-06 高效热-电化学转换与存储一体化器件

张圣亮

南京航空航天大学

低品质热 (<100 °C) 作为一种被忽略的高熵值能量，现行能量转换和存储技术难以对其进行回收利用。发展离子型热电体系，实现低品质热能向电能的高效转换是当前极具挑战的科学前沿问题。得益于其成本低廉、结构简单、性能优异，离子热电池和热电容器在热电转换领域备受关注。其中，锌离子热电化学电池，作为一种新兴的低品质热能转换和电能存储一体化器件，具有塞贝克系数高和功率密度高等特点，但仍面临稳定性差，储能密度低、储释速率慢等问题。围绕上述挑战，我们针对钒基锌离子电池体系在低品质热能回收和电能一体化存储方面的应用，尤其是在机制探索、关键电极材料设计制备、可穿戴器件构筑技术等方面展开了一系列深入研究；制备了一系列高性能

热-电化学材料，揭示了离子传输以及能量转换与存储机制，构筑了具有巨热电势的高效锌离子热-电化学电池

## C-07 热电循环热调节模式：一种高效的热电新应用

王玉鹏

南方科技大学

当前的热电材料应用多集中于发电和制冷两个传统领域，而忽略了其在热调节方向的巨大应用前景。常见的热调节包括恒温热调节和循环热调节：前者控制物体温度恒定，可用于电子皮肤系统；后者控制物体实现高低温循环往复，可用于气体分离和温度驱动软体机器人等新应用。本文聚焦于后者——热电循环热调节模式，基于有限差分法建立了其数学模型，由此定义了该模式下的系统运行特点和性能评价指标。基于数学模型的计算研究发现，该模式在实现近室温附近的小温差振荡的场景下，具有极高的系统效率。本文还基于该热调节模式设计并制造了一种二氧化碳气体分离系统，由此验证了其实际应用的可行性。实验数据表明，与传统电加热系统相比，该系统的能源消耗节省了 42%，循环效率提高了 2.5 倍，极大地提高了气体分离效果。最后，本文还提出了经验性的热电材料品质因子（ZRT），用以指导热电循环热调节模式下的热电材料优化方向。该工作为开发热电材料的新模式，拓宽热电材料的新应用提供了指导意义

## C-08 提升电子态密度在 In、Ge 掺杂 SnSe 纳米片中获得高宽温域热电性能

贡亚茹

南京理工大学

通过设计纳米片结构，调控材料的声子输运过程，大幅降低了材料的热导率，研究发现纳米片形成的纳米晶界以及位错和层错导致了显著的晶格应变，形成了强的声子散射中心，从而使晶格热导率显著降低，在 873 K 时获得了  $0.19 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  的超低晶格热导率。Ge、In 双掺杂较大提升了 SnSe 材料的电子态密度，有效提升了塞贝克系数，同时，Ge 和 In 双掺杂显著提高了载流子浓度和电导率，使多晶 SnSe 在宽温度范围内获得了高功率因子。这种电声协同效应将 SnSe 多晶的最高热电优值提升至 1.92，并显著提升了其宽温域热电性能，平均热电优值达到 0.88，宽温域热电性能的提升有效提高了材料热电转换效率。该研究通过无毒元素掺杂将多晶 SnSe 宽温域性能提升到新的水平，对推动多晶 SnSe 热电材料在高效固态热电发电器件中的广泛应用具有重要意义。

## C-09 超通过相界面工程实现 n 型 Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 的超低晶格热导率和高热电性能

杨泽源

昆明理工大学

硫化铋 (Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) 是一种地球储量丰富、价格低廉、环境友好的 n 型热电材料。然而, 由于低的电子浓度导致其电导率不佳, 热电性能也亟待提升。通过掺杂诱导载流子浓度的提升通常也会导致载流子热导率的增加, 不利于热电性能的优化。本研究利用水热反应制备 Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 基热电材料, 通过添加 HCl 实现高价的卤族元素掺杂, 提升 Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 材料的载流子浓度; 进一步通过添加 N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O 实现不完全的还原反应, 金属 Bi 富集在晶界处有利于载流子传输。N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O 还原 5 min 的 Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-Cl 样品的峰值功率因子 (PF) 在 673 K 时达到 676.6 μWm<sup>-1</sup>K<sup>-2</sup>, 相较于纯的 Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 样品提升 6 倍以上。此外, 由于晶粒细化以及额外第二相的引入增强中低频声子的散射作用, 从而显著降低晶格热导率, 该样品在 623 K 时的晶格热导率为 0.28 W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>。得益于电传输和热输运性质的协同优化, N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O 还原 5min 的 Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-Cl 样品在 673 K 时的峰值 ZT 为~ 1.01, 平均 ZT 值为~ 0.63 (323 ~ 673 K)。本研究证明了 Bi<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 是一种在中温区具有应用前景的热电材料, 同时相界面工程是一种有效的提高材料热电性能的策略。

## C-10 能带修饰与局域晶格工程协同优化 SnTe 热电性能研究

刘宇齐

南京理工大学

SnTe 作为传统 PbTe 热电材料的环保替代品之一, 在清洁能源转换领域受到了广泛关注。我们通过对其进行 Ge/Bi 共掺杂, 进一步合金化 AgBiTe<sub>2</sub>, 使 SnTe 在 873 K 时的峰值 ZT 达到 1.45。其中, Ge、Bi 和 Ag 掺杂导致了能带收敛, 使得 SnTe 塞贝克系数和功率因子显著提高。同时引入了位错、点缺陷和微/纳米孔结构等局域晶格缺陷, 这些缺陷可以有效地散射不同波长的声子, 并导致 Sn<sub>0.92</sub>Ge<sub>0.04</sub>Bi<sub>0.04</sub>Te-10%AgBiTe<sub>2</sub> 的晶格热导率降低至为 0.61 W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup>。通过能带修饰和局域晶格工程实现了电声传输的解耦, 为高性能热电材料制备提供了可行策略。

## C-11 高性能 B/GeTe 复合热电材料

江奕林

清华大学

GeTe 材料是一种性能优异的中温区热电材料, 近年来受到人们的广泛关注。在本研究中, 我们采用了一种简便的复合方法以增强 GeTe 的热电性能。向 Bi 掺杂的 GeTe 中引入少量硼颗粒能够显著提高功率因子, 同时降低了热导率, 从而实现电输运与热输运特性的协同调控。硼粒子与基体之间存在的热失配导致高密度位错形成, 位错的形成有效散射了中频声子, 使得样品的晶格热导率在 613 K 时降低至 0.43 Wm<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup>。此外, B/GeTe 界面的存在改变了界面势垒, 提高了部分载流子的散射, 进而提升了 Seebeck 系数, 使功率因子在 300 K 下达到 25.4 μWcm<sup>-1</sup>K<sup>-2</sup>。因此, 样品于 613 K 时

达到了  $4.0 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$  的  $Z_{\max}$  值。这一结果不仅是基于 GeTe 的热电材料中的最高纪录，也优于大多数应用于中温范围内的热电体系。本研究为进一步提升基于 GeTe 的热电材料性能提供了一条有效途径。

## C-12 Sn 空位抑制与共振能级实现 SnTe 合金 全温区优异功率因子

李志昊

山东大学

作为潜在的中温热电材料，SnTe 基热电材料通常在 750 K 以上实现最大功率因子，不利于实际应用中的连续高功率输出。本工作通过 In 掺杂引入共振能级、烧结工艺调控实现 Sn 空位抑制，使得  $\text{Sn}_{0.99}\text{In}_{0.01}\text{Te}$ /电气石复合材料在整个测试温区实现了稳定在  $22 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-2}$  左右的高功率因子；通过优化烧结工艺，有效地调控材料中的 Sn 空位浓度，并利用霍尔系数测试和电子顺磁共振(EPR)证实了 Sn 空位浓度的降低；进而通过理论分析和与已报道数据的比较，证明了 Sn 空位浓度的变化导致了载流子浓度降低与迁移率的提升，进而优化了样品的电学性能，实现了全温区优异功率因子；最终， $\text{Sn}_{0.99}\text{In}_{0.01}\text{Te}$ /电气石复合材料在 873 K 时取得最高  $zT$  值 0.8,  $\text{PF}_{\text{eng}}$  和  $\text{PF}_{\text{ave}}$  分别可达  $1.2 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$  和  $22.5 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 。本工作揭示出一种有效的高功率因子 SnTe 基热电材料工艺条件优化路径，并为构建高输出功率热电器件提供了备选材料。

## C-13 通过调幅分解实现 n 型半赫斯勒合金的高热电性能

端思晨

哈尔滨工业大学（深圳）

固溶体的形成会产生高浓度点缺陷，可以有效降低材料的晶格热导率。然而许多热电合金在一些温度条件下无法形成完全固溶体，从而在相图上表现出存在非连续固溶的间隙，导致相分离。在实验研究中往往会避开这些非固溶体区域以获得单相。也有一些研究集中在相分离的形核生长和调幅分解区域，通过调控成分与温度在热电材料中诱导形成第二相纳米沉淀散射声子。但是，热电材料的相图往往不完备，相分离边界通常未知。在这种情况下，通过调幅分解手段来设计微观结构非常具有挑战性。此外，热电合金的调幅分解演化过程，及其对电子和声子传输的影响很少被系统研究。

本工作采用平衡合金法绘制了 973-1273 K 温度范围内的  $\text{TiNiSn-ZrNiSn-HfNiSn}$  三元等温截面相图。利用原位 TEM 和相场模拟方式阐明了处于调幅分解区间的成分  $\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.25}\text{Hf}_{0.25}\text{NiSn}$  中的各向异性的调幅分解条纹的演变过程。在经过热处理过程后，应力诱导形成的位错阵列和相成分的均匀分布达成了电热输运性能的协同调控。最终，热处理后的  $\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.25}\text{Hf}_{0.25}\text{NiSn}_{0.99}\text{Sb}_{0.01}$  在 300-973 K 温度范围内的平均  $zT$  值达到 1.1。与 p 型  $\text{Nb}_{0.86}\text{Hf}_{0.14}\text{FeSb}$  搭配的热电发电模块在 653 K 的温差下最大转换效率为~12%，功率密度为  $3.7 \text{ W cm}^{-2}$ 。该工作证明了调幅分解是提升热电性能的有效途径。

高昊天

上海交通大学

熵工程因其可以实现电热运输的解耦和独立调控，在热电研究领域逐渐受到广泛关注。通过掺杂和固溶外来元素来提高材料的构型熵是制备合成高熵热电材料的有效手段。然而，材料中外来元素的掺杂或固溶量存在一定的极限，其影响因素较多，其中外来原子与基体原子尺寸的差异是最直观最重要的一个参数。经典的 Hume-Rothery 定律指出：当组元原子尺寸差小于 15% 时，有利于形成较大固溶度（溶解度极限）的固溶体；大于 15% 时则容易发生分相。对于成份复杂的高熵材料来说，不同原子之间的原子半径差、电负性差、甚至是价态差会引入的额外的晶格畸变和焓变，从而导致材料的自由能提升。此外，各种元素之间的多重组合可能导致许多低形成能物相的产生，许多高熵材料实际上并不具有稳定的单相结构，而是倾向于通过第二相析出或调幅分解生成多相混合材料。因此，研究原子尺寸大失配材料的相结构稳定机理具有重要意义。本工作以  $Mg_2\delta$  (Si, Ge, Sn, Bi) 为例，基于密度泛函理论计算和分子动力学模拟，证明了具有自适应性的 Mg 亚晶格可以有效缓解 Si, Ge, Sn 和 Bi 原子尺寸大失配造成的较大应力，稳定高熵固溶体的相结构。同时，高熵材料中复杂的材料组成和严重的结构畸变为电热运输提供了新的自由度，获得接近理论极限的极低晶格热导率 ( $0.58 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ) 和较高的功率因子 ( $43 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ )，最终高熵样品的最高热电优值  $zT$  可达 1.3，优于大部分  $Mg_2X$  基材料。

## C-15 高性能 GeTe 热电材料的电声输运特性及其在多功能器件中的应用研究

朱江龙

四川大学

GeTe 作为一种高性能、无铅的中温区热电材料近年来备受关注，但其过高的本征载流子浓度限制了热电性能的提升以及多功能器件的开发。在本次报告中，我们首先制备了一种新型多功能  $Ge_{0.78}Cd_{0.06}Pb_{0.1}Sb_{0.06}Te$  材料，该材料具备优异的近室温热电性能和机械强度，适用于接近室温的热电发电和制冷器件的构建。具体来说，通过能带收敛的有效性、优化的载流子浓度以及电子品质因数，显著提升了 Seebeck 系数，从而大幅提高了功率因子。同时，在基体中构建的复杂多尺度分层结构和应变场分布有效降低了晶格热导率，并增强了力学性能。 $Ge_{0.78}Cd_{0.06}Pb_{0.1}Sb_{0.06}Te$  在 303 K 时具有较高的室温  $ZT \sim 0.6$ ，平均  $ZT$  为  $\sim 1.18$  (303-553 K)，并且维氏硬度达到了  $\sim 200 \text{ Hv}$ 。特别是，当  $Th=328 \text{ K}$  时，7 对制冷器件最大  $\Delta T$  达到了  $\sim 45.9 \text{ K}$ ，而在  $Th=553 \text{ K}$  时，单腿器件的转换效率达到了  $\sim 5.2\%$ 。另外，为了克服 GeTe 中反掺杂优化策略导致的载流子迁移率显著降低的问题，我们通过合金化  $Cu_2Te$  在  $Ge_{0.84}Cd_{0.06}Pb_{0.10}Te$  中引入伪立方 GeTe、 $Cu_2Te$  和 PbTe 相之间的多相相干纳米界面网络，并实现了有效的 Cu 离子离域化。这种设计选择性地调控了电荷载流子和声子的输运，增加了迁移率并优化了载流子浓度，从而有助于提高功率因子，在 653 K 下获得了超低的晶格热导率  $\sim 0.33 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 。最终，在  $(Ge_{0.84}Cd_{0.06}Pb_{0.10}Te)_{0.99}(Cu_2Te)_{0.01}$  材料中获得了峰值  $ZT \sim 2.22$  (803 K) 和平均  $ZT \sim 1.40$  (303-803 K)。此外，这种新颖的结构调制还显著增强了材料的机械性能。利用这些优化的

材料，我们在制造的 7 对热电器件中，在 $\Delta T=400\text{ K}$  时实现了高的输出功率密度 $\sim 1.47\text{ W cm}^{-2}$ 。同时，组装了一个热电能量收集阵列装置，展示了其在激光非辐射能量回收和非接触式热感应中的应用潜力，进一步推动了热电材料和器件的多功能应用。

## C-16 空位调控和晶格软化策略对 $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$ 材料热电性能的改善研究

余甜

武汉大学

拓扑绝缘体  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  由于具有超低的晶格热导率，在热电领域表现出广阔的应用前景。然而，它的热电性能受限制于高载流子浓度和低迁移率，并且高载流子浓度的产生机制尚不明确。在本工作中， $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  的载流子浓度实现了大幅度调控，从  $2.24 \times 10^{21}\text{ cm}^{-3}$  调节到  $9.1 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ 。透射电镜结果和正电子湮没实验表明， $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  七原子层的层状结构中存在大量的 Mn 空位，这是导致高载流子浓度的原因。在  $\text{MnSb}_2\text{Te}_4$  中引入过量的 Mn 元素以及  $\text{AgSbTe}_2$  合金化后，Mn 空位被极大地抑制，这不仅使载流子浓度降低以及载流子散射弱化，进一步导致了迁移率的提高和电子热导率的下降。除此之外，过量的 Mn 原子在 Mn 原子层引入了应变场，增强了声子散射。而 Ag 原子替换 Mn 原子后化学键强变弱，造成晶格软化，这导致了声速的大幅度降低，从而进一步降低了晶格热导率。最后，我们在 300 K 附近获得了  $0.44\text{ W m}^{-1}\text{ K}^{-1}$  的超低晶格热导率，且随着温度升高到 798 K，其进一步降至  $0.17\text{ W m}^{-1}\text{ K}^{-1}$ 。最终，通过对热电性能协同调控， $\text{Mn}_{1.06}\text{Sb}_2\text{Te}_4(\text{AgSbTe}_2)_{0.04}$  样品在 798 K 时获得了约 1.53 的最高记录  $zT$ ，对应室温最优载流子浓度大约在  $2 \times 10^{20}\text{ cm}^{-3}$ 。

## C-17 相边界扫描和抑制 Pb 空位增强 n 型 Sb/Bi 掺杂 PbTe 化合物的热电性能

吴炫辉

武汉理工大学

具有岩盐结构的 PbTe 基化合物是一种性能优异的中温热电材料，PbTe 基化合物中 p 型材料热电性能高，然而 n 型 PbTe 性能不高，严重制约了其规模化应用。本研究采用相边界扫描方法结合理论计算，系统研究了 Sb 和 Bi 等不同掺杂元素、不同处理气氛对材料结构中的缺陷结构和热电性能的影响规律，揭示了 PbTe 基化合物中阳离子空位  $\text{VPb}^2$  缺陷的形成机制及其与掺杂元素、处理气氛之间的耦合关系。对于 Sb 掺杂的样品，通过引入额外的 Pb，能够显著抑制 Pb 空位的产生，同时提高样品的载流子浓度和载流子迁移率，在 773K 下获得最大热电性能  $ZT$  达到 1.22。对于 Bi 掺杂的样品，在氩气研磨制备的平均热电性能  $ZT$  比在空气中研磨制备的提高了 60%。正电子湮没测试表明，热电性能的不同源于两者晶格内部 Pb 空位浓度的差异。结合缺陷形成能与正电子寿命的计算，样品掺杂 Bi 并在空气中研磨更容易诱发 Pb 空位，并推导出形成 Pb 空位的缺陷方程式。该研究工作为进一步提高 n 型 PbTe 基热电材料的热电性能提供了新的途径。

## C-18

### 重带热电材料的高缺陷容忍性

姜芊滢

浙江大学

对偏化学计量比或低纯度原料引入的缺陷和杂质的不敏感性对于高性能热电材料的规模化制备具有重要意义。本研究发现具有高优化载流子浓度的重带热电材料对其名义成分中的偏化学计量比展现出高“容忍性”。以重带半赫斯勒化合物为例，我们发现在载流子浓度优化的 ZrNiSn 材料中，即使名义成分的偏化学计量比高达 $\pm 5\%$ ，其峰值  $zT$  值的波动普遍低于 10%。基于此，本研究通过建立成分- $zT$  相图，揭示了 ZrNiSn 材料中  $zT$  峰值超过 1.0 的宽名义成分范围。重带热电材料所展现的高缺陷容忍性也意味着采用低纯度原料即有可能实现高热电性能。进一步通过研究 n 型 ZrNi(Sn, Sb)、(Zr, Nb)CoSb 和 p 型 ZrCo(Sb, Sn) 三个体系，我们证实了即使采用低纯度原料 ( $\approx 99.5\%$ ) 替代高纯度原料 (99.95%~99.999%) 三个体系仍可获得相当的高  $zT$  值，而低纯原料的使用可使原材料成本显著降低。这些发现表明深入理解热电材料的缺陷容忍性将有助于其规模化应用的成本节降。

## C-19 合理操控银空位以实现晶格素化在 $\alpha$ -MgAgSb 中获得卓越的热电性能

郭凯炜

中国科学院物理研究所

$\alpha$ -MgAgSb 作为一种近室温温域下极具潜力的 P 型热电材料已经引起了广泛的关注。但是，高性能  $\alpha$ -MgAgSb 的纯相合成以及银空位的有效调控仍然具有一定的挑战性。在该工作中，我们通过实验证明了 MgAg 合金是合成纯相  $\alpha$ -MgAgSb 以及设计有效的银元素化学计量比的前提。我们通过熔融和固相反应制备的 MgAg<sub>x</sub> 与 Sb 球磨，合成了一系列 MgAg<sub>x</sub>Sb ( $x=0.97 \sim 1.03$ ) 材料。通过“银空位-电输运”关系研究，在标准计量 MgAgSb 和 MgAg<sub>1.01</sub>Sb 样品中实现了晶格素化，300K 室温  $zT$  达 0.9、573K 峰值  $zT$  达到了 1.5，是目前报导的最高值。同时，为了制备性能可靠，重复性高的热电发电器件，我们制备了直径为 25.4 毫米，高度为 3 毫米的大尺寸样品以便我们获得更多的 P 型热电臂。最终，我们结合了 n 型 Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> 基热电材料制备了 7 对的热电发电器件，在热端不超过 593K 的情况下，290K 的温差下实现了 10% 的最大热电转换效率。我们的研究结果充分证明了 MgAgSb 材料的合理合成和大规模制备的可行性，以及在近室温发电应用中的巨大潜力。

## C-20

### AgSbTe<sub>2</sub> 中载流子输运行为调控

张凯琪

重庆大学

AgSbTe<sub>2</sub> 在中温区表现出优异的热电性能，但其电学性能受到固有无本征缺陷和第二相的影响。即使在双极化温度以下，p 型 AgSbTe<sub>2</sub> 中的高迁移率少数载流子（电子）对于电输运性质仍然发挥着重要作用，并降低塞贝克系数。在此，我们通过降低阳离子空位形成能有效地提高主要载流子（空穴）浓度，同时通过抑制 n 型 Ag<sub>2</sub>Te 第二相来降低电子浓度，使得 AgSbTe<sub>2</sub> 中载流子输运机制实现从双载流子向单载流子类型的转变，使用霍尔测量所证实。通过进一步通过调整空穴和电子电导率

的比值，平均功率因子提高了 70%。样品中高密度堆叠层错和超结构则导致晶格热导率进一步降低，最终(AgSbTe<sub>2</sub>)<sub>0.98</sub>(AgAlSe<sub>2</sub>)<sub>0.02</sub>样品实现了高热电优值，最大 zT 为 1.90（623 K），平均 zT 为 1.42（323 K 至 623 K）。此外，基于有限元分析建模结果，我们制备了单腿和双腿热电器件，转换效率分别达到 11.2%和 5.2%。

## C-21 Sn-Se 体系的光热电效应研究

田浩

南京大学

光热电（PTE）效应在近红外波段的探测具有宽带响应、无需外加偏压、室温操作及适应弱光探测等优势，在远距离通信、红外成像和生物医学等领域具备了极大的应用潜力。

我们通过助熔剂法和化学气相传输法生长不同载流子浓度的 P 型和 N 型 SnSe 晶体( $10^{17}$ - $10^{19}$  cm<sup>-3</sup>)。在不同激光波长（444 nm - 1550 nm）下对晶体进行光热电响应研究。发现载流子浓度为  $10^{19}$  cm<sup>-3</sup> 的 P 型晶体的光响应性能最佳，具有较高的光响应度（R<sub>v</sub>）和较低的噪声等效功率（NEP）。结合双温模型，发现影响光热电效应的关键参数是电导率（载流子浓度）。因此，通过掺杂工程优化 SnSe 晶体的载流子浓度和电导率，可以有效提高其光热电性能。

为了进一步优化提升在近红外波段的探测，我们通过 CVT 采用交替生长技术制备了一系列具有不同 SnSe 含量的 SnSe-SnSe<sub>2</sub> 复合晶体。在相同波长范围内（444 nm - 1550 nm）进行测量并通过对光响应度、噪声等效功率和比探测度（D\*）等关键指标的评估，比较了 SnSe-SnSe<sub>2</sub> 复合晶体与纯 SnSe 晶体的性能差异。结果表明，在可见光波段（444 nm 和 532 nm），SnSe-SnSe<sub>2</sub> 复合晶体的光响应度与纯 SnSe 晶体相当，且对波长的依赖性较弱。而在近红外波段（1310 nm 和 1550 nm），SnSe-SnSe<sub>2</sub> 复合晶体的光响应度显著提高了 27.3%。结合双温模型理论计算，认为这一增强归因于 SnSe 和 SnSe<sub>2</sub> 之间形成的 P-N 异质结构，提供了更多的光学跃迁通道，从而增强了在近红外波段的光吸收。通过复合材料中的异质结构可以优化热电材料在特定电磁波段的光热电效应，尤其是在近红外波段，SnSe-SnSe<sub>2</sub> 复合晶体表现出了优越的光响应性能。

综上所述，我们通过掺杂以及制备复合晶体等手段能够增强 Sn-Se 体系在可见光、近红外波段的光热电响应。这一发现为开发基于光热电效应的新型光电探测器提供了一种材料工程的策略。

## C-22 n 型柔性 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>/SWCNTs 复合热电薄膜及器件

张琳

中国科学院电工研究所

聚合物材料热电性能较低以及无机热电材料固有的刚性，使得成本低、柔性强且性能优异的 n 型热电材料和器件的获得较为困难。本项工作，我们采用低成本的溶剂热辅助真空抽滤法，成功地制备出由 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 纳米片和单壁碳纳米管（SWCNTs）组成的 n 型柔性独立自支撑热电薄膜。为提高 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 材料的导电性，制备热电性能优异且柔韧性良好的 n 型 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 薄膜，我们选择将其与导电性良好的 n 型柔性 SWCNTs 进行复合。然而由于氧化作用，暴露于空气的 SWCNTs 呈现 p 型导电特性，为此我们选用富电子聚合物聚乙烯吡咯烷酮（PVP）对 SWCNTs 进行 n 型化，并探究了 p-n 导电类型转变机理。在此基础上，将 n 型 SWCNTs 与 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 纳米片进行复合。均匀分散的 SWCNTs

表面生长出形貌均匀、结晶度高的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  纳米片, 且  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  与 SWCNT 的界面相互作用降低了  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  与 SWCNT 的接触电阻。因此优化后的  $\text{Bi}_2\text{Se}_3/\text{SWCNTs}$  复合膜在室温下具有  $292.7 \text{ S cm}^{-1}$  的电导率和  $-42.4 \mu\text{V K}^{-1}$  的塞贝克系数, 并最终获得了  $52.7 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$  的功率因子。此外, 由于  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  纳米片与 SWCNTs 交织在一起, 复合薄膜表现出优异的柔韧性, 围绕半径为  $3.5 \text{ mm}$  的棒进行 5000 次弯曲循环后, 热电性能几乎保持不变。58 K 的温度梯度下, 制备的热电器件的电压和功率密度分别达到  $11.5 \text{ mV}$  和  $86.2 \mu\text{W cm}^{-2}$ 。薄膜和器件性能在  $\text{V}_2\text{VI}_3$  基柔性热电材料中均处于国际先进水平。

## C-23 熵工程与能带工程协同提高 GeTe 的热电性能

齐兴源

北京科技大学

GeTe 基热电材料凭借其窄带隙和多带传输特性, 展现出优异的电输运性能。然而, 较高的晶格热导率限制了其热电性能的进一步提升。熵工程是降低晶格热导率的有效策略之一, 且引入多种元素有助于调控电子能带结构。本研究通过熔融结合放电等离子体烧结技术, 制备了一系列  $\text{Ge}_{0.67}\text{Pb}_{0.06}\text{Sb}_{0.13}\text{Ag}_{0.1}\text{Bi}_{0.1}\text{Ti}_x\text{Te}$  ( $x=0-0.04$ ) 样品, 系统研究了 Ti 的引入对相结构、能带结构及电热输运性能的影响。XRD 结果表明, 随着 Ti 的引入, 样品的相结构在室温下从菱方相逐渐转变为立方相, 显示出结构对称性的提升; 霍尔测试结果显示, Ti 的引入通过提供额外电子有效优化了载流子浓度。密度泛函理论计算显示, 熵工程促进了多带收敛, 而 Ti 的引入引发了能级共振, 显著提升了载流子的有效质量 ( $12.3 m$ )。得益于结构对称性的增强、载流子浓度的优化、多带收敛以及能级共振的协同效应, 所有高熵样品在 323 K 时的功率因子(PF)均保持在约  $1.6 \mu\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ , 相较于原始 GeTe 的  $0.98 \mu\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ , 提升了 1.6 倍。同时, 由于熵工程引发的无序亚晶格对声子的强烈散射, 样品在 323K 时的晶格热导率降低至  $0.65 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 。最终,  $x = 0.03$  的样品在 323 K 时获得了 0.66 的 ZT 值, 并在 323-773 K 温区内实现了高达 1.28 的  $ZT_{\text{avg}}$  值, 优于大多数低熵 GeTe 基热电材料。

## C-24 缺陷结构调控优化 PbSe 热电性能

谭刚健\*、张清杰、唐新峰

武汉理工大学

PbSe 是一种重要的中温热电材料体系。在本报告中, 将重点介绍我们通过渗流效应和缺陷配对, 在 p 型 PbSe 中引入非常规缺陷结构 (间隙 Sn 原子、取代型 Cu 原子), 以产生杂质共振能级, 显著提升其 Seebeck 系数的工作。此外, 我们的研究还表明, 这些非常规的缺陷结构形式, 还对 PbSe 的声子输运产生了重要影响, 特别是在随温度变化的过程中, PbSe 中的各种缺陷结构会发生动态调整, 从而对声子造成了强烈散射。最终, PbSe 的热电性能得到了大幅度提高。

## C-25 通过自变化填充率优化拓扑柔性热电器件的转换性能

任广坤

中国工程物理研究所

柔性热电器件可以加工成用于智能电子设备发电的模块，但以传统方式组装它们以收集低品位热量可能会受到转换性能不佳的限制。在这项工作中，我们通过在器件中构建全无机拓扑结构，利用 Al 基基板和  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基热电材料，展示了一种操纵填充率以实现最佳转换效率的策略。通过不同的热管理结构可将相关填充率从 11% 调整到 35%，使柔型器件具备拓扑特性。在 10K 温差条件下，自然和强制环境中的归一化功率密度值分别达到  $\sim 35 \mu\text{W cm}^{-2} \text{K}^{-2}$  和  $\sim 65 \mu\text{W cm}^{-2} \text{K}^{-2}$ ，其中界面强度和机械可靠性通过结合力表征和 1000 次循环的拉伸测试得到了验证。这些，加上乐高®式的高适用性、全无机成分的抗老化能力以及铝金属的轻量化等特点，使得该策略有望在室温下增强能量转换效率，进一步拓宽应用领域。

## C-26 微型热电器的设计优化:歧管微通道热沉助力微型热电器件实现高发电性能

裴俊

北京科技大学

微型热电器件(Micro TED)由于其物联网无源供电和热管理领域的广阔应用前景受到人们的广泛关注。随着热电器件微型化，器件结构及工作条件对器件性能影响愈发显著，但关于热电器件结构及工作条件的研究报道尚不多见。本工作中，围绕  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 、 $\text{Cu}_2\text{Se}$ 、半哈斯勒合金(HH)、 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$ 、 $\text{SnSe}$  等主流热电材料，采用有限元模拟方法模拟设计了一种 Micro TED，探究了 Micro TED 致冷性能、发电性能与材料性能、器件结构、工作条件等的构效关系。模拟结果显示 HH 基 Micro TED 最大致冷温差仅为 23.37K，约为碲化铋基 Micro TED 的 1/3。但 HH 基 Micro TED 其最大致冷功率密度可达  $214.83 \text{ mW/mm}^2$ ，比碲化铋基 Micro TED 的值高近 1 倍。高功率因子的 HH 热电材料在高制冷量 Micro TED 中可能具有独特优势。Micro TED 的发电性能主要取决于器件冷热两端的温差( $\Delta T$ )。当热端固定，冷端负载歧管微通道(MMC)热沉时，可以有效提高 micro TED 的  $\Delta T$ ，并显著提高其输出功率密度。当热端固定为 350K，冷端负载 MMC 热沉时，碲化铋基、 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基、 $\text{SnSe}$  基 Micro TED 的最大发电功率密度( $P_{d,\text{max}}$ )分别达  $43.53 \mu\text{W/mm}^2$ 、 $29.68 \mu\text{W/mm}^2$ ， $31.06 \mu\text{W/mm}^2$ ，相比未负载热沉的 Micro TED 器件， $P_{d,\text{max}}$  均提高了 50 倍以上。负载有 MMC 热沉的  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基、 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基、 $\text{SnSe}$  基 Micro TED 有望用于物联网传感器无源供电领域( $1\sim 100 \mu\text{W}$ )。

## C-27 百毫瓦级放射性同位素温差电池的构建与分析

于永龙

中核四 0 四有限公司

Thermoelectric conversion is regarded as one of the preferred technologies for converting heat into electricity in space nuclear power systems. Herein, a radioisotope thermoelectric generator(RTG)

containing radioactive isotope was designed in order to meet the urgent need in deep space and deep sea in China. The results of heat dissipation characteristics of the RTG show that the graphite cladding outside the heat source not only realizes the uniform temperature distribution, but also effectively resists the impact load and improves the mechanical strength of the whole system. In addition, boron-containing polyethylene and 10-mm thick Pb layer were selected as the radiation shielding layer, and the radiation dose was controlled at the RTG's surface less than  $10 \mu\text{Sv/h}$ . Finally, with the temperature difference of 72 K, the RTG achieves the output voltage of 3 V and the maximum output power of 300 mW. The conversion efficiency of the whole system reaches 1.48%.

## C-28 面向高功率热管理的热电材料与器件设计

朱航天

中国科学院物理研究所

高效电子功能材料在国家重大战略领域具有广泛的应用潜力，以航空/航天/航海领域为例，深空探测器中放射性同位素温差发电、发动机燃气轮机高温区温度、应变、热流等参数准确测试，以及深海探测中的声波检测等。汇报人围绕这些国家战略需求，长期从事可实现力 $\leftrightarrow$ 电 $\leftrightarrow$ 热环境感知和能量转换的铁电/压电和热电材料的结构设计、机理分析及性能调控。这些材料的序参量往往具有长程属性，这导致材料对外场的静态响应（例如极化强度）优异但是动态响应（例如压电系数  $d_{33}$ ）往往不佳。汇报人基于点缺陷及序构设计，调控序参量短程有序化，实现电子功能材料高性能化/新型化；通过点缺陷调控材料的相结构，实现短程有序，研发出一系列兼具高性能和宽温域的铁电压电材料；通过点缺陷调控电声输运特性，实现长程电传输+短程热传输，研发出一系列兼具高性能和耐温性的热电材料。

## C-29 低温热电材料

周敏

中国科学院理化技术研究所

低温热电材料不仅可用于诸如红外探测器、遥感器、低温电子学、低温医学等方面的低温制冷，还可用于低温冷能（LNG、LN<sub>2</sub>等）的温差发电。因此，低温热电材料在低温制冷和冷能发电等领域展示出巨大的应用潜力。简要介绍了热电制冷的基本原理及热电制冷材料，包括传统 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基热电材料，近年来新发展的在近室温区性能优异的 Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> 合金、掺杂 SnSe 化合物等，以及低温区 Bi-Sb 合金、CsBi<sub>4</sub>Te<sub>6</sub>、FeSb<sub>2</sub> 等合金材料，分析了研究中存在的问题，并对未来的研究发展进行了展望。

## C-30 Ag<sub>2</sub>Se 择优取向晶体的制备与高性能热电制冷器件的开发

江峰

哈尔滨工业大学（深圳）

Ag<sub>2</sub>Se 基热电材料因其优异的室温热电性能受到广泛关注。然而，有关 Ag<sub>2</sub>Se 块体热电制冷器件鲜有报道，这是由于 Ag<sub>2</sub>Se 在 400K 左右存在一级相变，所引起的应力波动对材料界面和器件设计造成不利影响。在本篇研究工作中，首先成功制备出高度取向 Ag<sub>2</sub>Se 晶体，室温迁移率和功率因子分别达到~1846 cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup> 和~31.2 μW cm<sup>-1</sup> K<sup>-2</sup>，并取得了 0.95 的热电优值。此外，通过一步烧结方法，制备 Ag/Ag<sub>2</sub>Se/Ag 接头。通过在降温过程中维持 10 MPa 压力的方法，以此来减少相变所产生的应力波动对界面的不利影响，最终接触电阻为 2.9 μΩ cm<sup>2</sup>，表明该方法有利于获得优异的 Ag<sub>2</sub>Se 界面行为。其次，通过和商业化 p 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 粒子匹配制备 7 对制冷器件，在热端温度为 350 K 的条件下，最大制冷功率达到 2.9 W，最大制冷温差为 70.4 K，表明 Ag<sub>2</sub>Se 材料在热电制冷领域的应用具有重大潜力。

## C-31 微型热电温度控制器

靳群

中国科学院深圳先进技术研究院

温度控制在现代电子技术中至关重要，尤其是对温度敏感型元件的精度、灵敏度、可靠性、稳定性及性能可调节性往往起到决定性作用。近年来，为了进一步扩展微电子领域的摩尔定律，多维纳米电子集成和多功能元件组装研究得到了广泛关注。然而，这些方案加剧了对温度敏感型电子元件精确控温的挑战性。因此，将热电薄膜材料<sup>[1-2]</sup> 集成为高性能微型片上温度控制器变得越来越重要。为此，我们报告了一种将面内方向自支撑热电薄膜集成为片上微型温度控制器的方法，用于电子设备中的热能收集和管理<sup>[3]</sup>。该器件的可调有效热阻可通过工作电流控制，从而实现高效率的温度控制。仅需 445 μW 的功耗，就能实现超过 44.5 K 的冷却温度，比微加热器的功耗降低了两个数量级。此外，我们的片上微型温度控制器还具有超过 2,000 K/s 的冷却速度和高达 100 万次循环可靠性。我们的片上微型热电温度控制器为现代电子技术的热管理开辟了新途径。

## C-32 尖晶石型铁氧化物红外辐射新材料及其电子器件高效散热研究进展

朱婉婷

武汉理工大学

随着电子器件向微型化、高功率化、高集成化发展，散热问题日益突出。红外辐射散热具有零能耗、零污染、占用空间小等众多优势，与电子器件热管理需求相契合，但发展应用于电子器件热管理的红外辐射散热技术还有赖于研发性能优异的红外辐射材料。本团队采用化学共沉淀法合成了系列尖晶石型铁氧化物 MeFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (Me = Cu、Mn、Ni、Co、Mg、Zn) 纳米粒子，研究了样品在 3 ~ 5 mm、8 ~ 14 mm 以及 2.5 ~ 25 μm 波段的发射率，发现尖晶石型铁氧化物纳米材料均具有优异红外辐射性能，

其中  $\text{MnFe}_2\text{O}_4$  在各波段的发射率值均最高，分别为 0.90、0.97 和 0.96；采用溶剂热法合成了  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  纳米粒子，探究其结构与红外辐射性能的关系，发现在 8~13 mm 波长范围内，尺寸为 800 nm 中空球形  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  颗粒的平均红外发射率高达 0.99。这些初步研究结果表明，减小带隙、增加载流子迁移率、提高晶格应变、增大晶体结构的不对称性，均可有效提高尖晶石型铁氧体的红外发射性能。将铁氧体纳米粒子与高分子复合形成的红外散热涂层，在 4w 输入功率条件下，可实现电子器件降温 17.6°C，为其应用于电子器件红外辐射散热热管理提供了可能性。

## C-33 基于 PVA 热电水凝胶的自供电柔性可穿戴电子

张虎林

太原理工大学

柔性可穿戴电子的飞速发展，对传感器的柔性可拉伸性、集成供电、环境适应性等提出了越来越苛刻的要求。基于凝胶热电转换的无源传感技术，既能满足器件的柔性可拉伸性要求，也能通过俘获人体热能提供无源传感，并能共形贴合于人体而获得良好适应性。本报告将给大家汇报本小组近 2 年多的研究进展，主要聚焦于 PVA 凝胶电解质热电转换效率协同提升、凝胶器件结构设计和无源可穿戴体征监测/信息转换应用的几种可行路线，探索凝胶 Seebeck 系数、有效电导率、有效热导率和弹性模量等与凝胶制备工艺的关联性规律，揭示氧化还原反应熵变与离子热扩散耦合热电转换原理，开发可与人体共形贴合的多体征无源监测/信息转换的智能可穿戴电子设备。该研究将积极推动凝胶热电器件的功能拓展及其在柔性可穿戴健康监测/人机交互等场景中的应用发展。

## C-34 高效全光谱全天候温度自适应热电发电器件设计

曹峰

哈尔滨工业大学（深圳）

针对偏远地区或海域的传感器和监测设备不间断自给供电需求，提出了基于温度自适应选择性吸收/发射器的浮动式热电温差发电器件，可实现外太空、太阳和水域三大热力学源的综合协同利用。具体采用  $\text{W}_x\text{V}_{1-x}\text{O}_2$  相变材料并结合  $\text{SiO}_2$  基准光学微腔，设计并制备了性能优异的温度自适应选择性吸收/发射器。该发射器在红外区具有~40%的热辐射调制能力，日间可实现~96%的太阳光选择性吸收，夜间在低于 300°C 环境下具有~81%（82°C）的热发射率。通过与 8 对  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基热电器件联用，设计出了可高效利用太阳能、深空和水域的浮动式温度自适应热电发电器件。在 1 个标准太阳光强照射下（AM1.5），浮动式温度自适应热电发电器件利用光热吸收和水体散热可产生约 34 °C 的稳定温差，其最大输出功率密度约为 1.0 mW cm<sup>-2</sup>，同时可以在晴朗、多云和阴天等天气实现全光谱全天候连续电输出。利用夜间向深空辐射自身热量，亦能实现持续稳定的电输出（~2 μW cm<sup>-2</sup>）。最终实现基于全光谱连续能源捕获的全天候不间断供电。

## C-35 操控极化子界面占位熵提升 PEDOT 热电性能

张嘉佳

北京大学

在有机热电材料中，导电聚合物 PEDOT:PSS 薄膜材料受到了广泛的关注和研究，但是其最大的问题是在掺杂氧化态比较高的时候，其塞贝克系数通常比较低（ $10-20 \mu\text{V K}^{-1}$ ）。大量的研究工作致力于提升其塞贝克系数：一种策略是用还原剂对 PEDOT:PSS 薄膜进行后处理，降低其氧化态；另外一种策略是添加具有优异热电性能的无机纳米颗粒，比如  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 、 $\text{Te}$  等。但是如何有效的解耦塞贝克系数和电导率的本征偶联仍然是一个具有挑战性的工作。

我们选取二芳基乙烯分子掺杂 PEDOT:PSS 薄膜，开环状态的二芳基乙烯分子在紫外光的辐照下，可以发生关环反应，关环态的高能量 DAE 分子和 PEDOT 的骨架具有相似的  $\text{C-C}=\text{C-C}$  骨架结构，通过弱耦合的相互作用，在 DAE 分子和 PEDOT 链的界面处会形成新的界面电子态。新的界面电子态为载流子（极化子）的传输提供了更多的占据位点，进而增加了极化子界面占位熵。由于塞贝克系数的物理含义是搬运单个电荷所产生的熵变，因此极化子界面占位熵的引入，有效的提升了 PEDOT 的塞贝克系数，最大有 10 倍的增益。而其电导率由于掺杂度没有改变，也没有明显的降低，解耦了塞贝克系数和电导率的本

## C-36 高性能热电水凝胶结构设计与研究

张鼎

南开大学

离子型热电材料由于较高的热电性能，展现出巨大应用前景。其中，基于热化学效应的热电水凝胶具有较高的热电势，且在稳定的温差下，能够持续的输出电信号，因而成为热电领域的研究热点。本工作选择典型的离液阴离子  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4/3-}$  作为氧化还原离子对，利用氧化还原离子对之间的可逆反应，实现热电转换。通过在水凝胶中引入离液阳离子  $\text{Gdm}^+$ ，由于  $\text{Gdm}^+$  与  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4+}$  具有较强的相互作用，能够诱导  $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4+}$  形成热敏结晶，有助于提高冷热两端氧化还原离子对的浓度差，促进离子对之间的氧化还原反应，从而显著提高水凝胶的热电性能。此外，进一步通过仿生机械拉调节水凝胶分子链取向结构、利用冷却速率调控热敏结晶物质在水凝胶中的分布，分别制备了具有高强韧、高热电性能的聚乙烯醇和聚丙烯酰胺水凝胶。本工作为高性能热电水凝胶的设计与构建提供了理论指导。

## C-37 纺织技术实现可穿戴热电器件从三维到四维的构筑

孙婷婷

东华大学

续航能力已成为可穿戴设备发展过程中亟待解决的问题。热电转换技术利用人体体热这一先天条件发电可实现供电持续性、免维护性、无扰性，在可穿戴领域展示出极大的应用前景。然而，如何实现热电器件的可穿戴性、热阻匹配、动态适应异形热源界面、高输出性能仍存在挑战。织物被

认为是人体的第二层皮肤，织物的智能化配置是实现热电器件可穿戴特性的最有效途径之一，同时织物丰富的组织结构为解决上述挑战提供可能。本报告将介绍如何利用纺织技术构筑从三维到四维的系列热电器件，以解决可穿戴热电领域难题。

## C-38 用于电子皮肤和舵机旋转角度控制的高性能柔性 $\text{Ag}_2\text{Se}$ 薄膜的器件化研究

陈跃星

深圳大学

$\text{Ag}_2\text{Se}$  材料在近室温热电应用中显示出巨大潜力，但其性能和器件设计仍在不断发展。我们通过硒化反应的方法制备高性能  $\text{Ag}_2\text{Se}$  热电薄膜，并通过微调蒸气硒化时间，增强了  $\text{Ag}_2\text{Se}$  薄膜的(013)取向和载流子迁移率，减少了过多的 Ag 填隙，实现了超过  $29 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-2}$  的功率因子(@393 K)。引入保护层提高了薄膜的柔韧性，在  $60^\circ$  弯曲 1000 次后仍保持 90% 的性能。进一步地，我们设计了一种柔性  $\text{Ag}_2\text{Se}$  薄膜热电器件，该器件具有优化的电极材料和结构，在 42 K 的温差下实现了超过  $65 \text{ W m}^{-2}$  的高输出功率密度。结合 p 型  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  薄膜和理性模拟，该装置表现出快速的人体运动响应和精确的舵机控制，凸显了高性能  $\text{Ag}_2\text{Se}$  薄膜在传感控制的应用潜力。

## C-39 基于微观晶格结构的导热系数调控

刘晨晗

南京师范大学

热电材料的塞贝克和帕尔贴效应可实现热能和电能之间的转换，应用前景广泛。为了提高转换效率，降低材料的导热系数是重要途径之一。另一方面，对于电子冷却领域的热管理，应该结合主动和被动方式，即需要高功率因子和高导热系数。因此，导热系数的主动调控是高效热管理和热电转换的保障。本报告从微观晶格结构出发，建立了合金/掺杂体系声子热输运设计的一般理论，阐明了声子硬化、杂质散射和晶格畸变之间的竞争机制，提出了掺杂改善热输运的方法，打破了传统认知。此外，本报告将介绍晶格对称性、声子聚焦效应和原胞大小等参数影响热输运的物理机制，丰富导热系数调控的内涵，推进热电材料的发展。

## C-40 用于半哈斯勒热电材料的通用机器学习力场开发及其在热输运中的应用

杨炯

上海大学

随着“AI for Science”引发的材料研发新范式的兴起，如何实现数据驱动的核心思想与人工智能技术的有效结合成为了加速新材料（如热电材料）设计与性质研究过程的关键性问题。在这项工作中，我们利用高通量计算与机器学习原子间势相结合的方法构建了 HH130，这是一个针对 MatHub-3d 中 130 种半哈斯勒（HH）化合物的标准化数据库，其中包含适用于 HH 热电材料热输运性质研究的 MLIP 模型和数据集。HH130 包含的 31,891 个结构是通过双重自适应取样的方法生成，覆盖了广泛

的热力学条件，并将在 MatHub-3d 上免费提供（下载：<http://www.mathub3d.net/static/database/HH130.zip>）。此外，基于 HH130 中的数据集，我们利用高阶变消息传递神经网络 MACE 训练出了高精度的预训练通用力场 MACE-HH-v1.0。结合声子玻尔兹曼输运方程，MACE-HH-v1.0 被用于 HH 化合物的热输运研究。对于数据集中包含的 HH 化合物及等价固溶体，其晶格热导率可达到与 DFT 相当的精度，而对于异价固溶体和非化学计量比的 HH 化合物，则需要通过额外的数据集进行微调。这项工作表明，借助准确的数据集和通用力场模型，可以实现高阶力常数和热输运性质的精准预测。

## C-41 氮化物反钙钛矿及其双反钙钛矿的热电性能研究

李登峰

重庆邮电大学

钙钛矿虽有较低的热导率但电输运性质不佳从而没有表现出优异的热电性能，反钙钛矿具有很好的稳定性、低热导率与更好的电输运性能，是潜在的热电材料。我们基于第一性原理结合机器学习势函数的方法，研究了  $X_3BN$  型反钙钛矿以及基于它的双反钙钛矿  $X_6BB'N_2$  ( $B=As, Bi, Sb, X=Mg, Sr$ ) 的热电性能。我们发现  $Sr_3BiN$  和  $Mg_3BiN$  的室温晶格热导率分别为  $2.65 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$  和  $5.22 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ，与传统热电材料  $Bi_2Te_3$  的热导率相当。在  $900 \text{ K}$  时， $n$  型  $Mg_3BiN$  和  $Sr_3BiN$  最大  $ZT$  值分别为  $1.19$  和  $1.49$ 。我们通过对  $X_3BN$  型反钙钛矿中的  $Mg$  基和  $Sr$  基进行  $B$  位分裂，构造了三种  $X_6BB'N_2$  双反钙钛矿，我们发现热导率有所降低， $Mg_6BiAsN_2$  的晶格热导率在  $300\text{K}$  时仅为  $3.10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ，在  $900 \text{ K}$  时其最大  $n$  型功率因数约为  $6.37 \text{ mW/mK}^2$ ，最大  $ZT$  为  $1.77$ ，其余两种双反钙钛矿的  $ZT$  均大于  $1$ 。因此，双反钙钛矿是一种有效的提升材料的热电性能方法， $Mg$  基和  $Sr$  基双反钙钛矿在热电器件中有潜在的应用前景。

## C-42 黑磷基材料的结构调控与热电输运性能优化

陈欣

曲阜师范大学

近年来，黑磷作为一种新型二维层状材料，由于具有随层数可调节的能带带隙、高载流子迁移率等特性，成为功能材料领域的研究热点。黑磷褶皱蜂窝状结构使其电学、热学等性质在层面内呈现出显著的各向异性，具备实现热电输运参数独立调控的潜力，优异的机械柔韧性使其在柔性热电器件应用中具备广泛的研究价值，但是黑磷结构具有高热导率，导致热电转换效率低，限制了其实际应用。针对以上问题，我们通过第一性原理计算结合玻尔兹曼输运理论详细探究黑磷体系的热电输运性能优化机制。通过掺杂、多维度结构设计等途径改变能带结构，实现能带简并与电输运性能的提升；利用超晶格势场增强非谐声子散射，有效降低晶格热导率，实现热电性能的协同优化。我们进一步利用高温高压实验合成技术，成功制备系列黑磷复合材料体系，与理论预测结果一致。本工作揭示了黑磷基体系作为柔性热电材料的潜力应用价值，为开发新型柔性环境友好型热电材料提供了新思路。

## C-43 Kinetic high-throughput synthesis of bulk materials: Towards high thermoelectric performance

张晨光

南洋理工大学

Traditional solid-state synthesis is considered the standard technique to make inorganic materials. The process is slow, due to the long time required for the collective arrangement of a large number of atoms that need to travel long distances. These large activation energy barriers for atomic diffusion are usually overcome applying high temperature for sufficiently long time.<sup>[1]</sup> Due to the large temperature/pressure of the process, traditional solid-state synthesis prevents mechanistic control of reactions and results in thermodynamically stable materials, forbidding access to metastable compounds <sup>[2][3]</sup>. Here, a kinetic high-throughput synthesis technique is presented: ‘6S’ – Self sintered scalable solid-state synthesis. This one-pot, Joule-based heating technique results in dense (above 95% of the theoretical density), single-phase polycrystalline materials. We use 6S to achieve doping control in bulk AgSbTe<sub>2</sub>, a promising thermoelectric material for intermediate temperature applications. XRD, EBSD and further HRTEM characterization showed a kinetically successful suppression of Ag<sub>2</sub>Te growth in pristine AgSbTe<sub>2</sub> was realized in our 6S setup and the final zT of pristine AgSbTe<sub>2</sub> can reach ~1.2 at 600K. Finally, a maximum zT ~1.7 at 573K for AgSb<sub>1.01</sub>Cd<sub>0.04</sub>Te<sub>2.06</sub> was achieved, comparable to the current state-of-the-art performance <sup>[4]</sup>. The combination of thorough materials characterization and both electronic and thermal transport demonstrates that 6S is not only a high-throughput screening synthesis technique, but rather it results in high-quality solid-state materials synthesized in an accelerated manner. The simplicity, low cost, and high acceleration factor of 103 with respect to traditional methods makes 6S the state-of-the-art technique for solid-state inorganic materials synthesis and will benefit the broad materials science community across domains beyond thermoelectrics.

## C-44 基于神经网络势研究低温相 SnSe 热电材料的声子热输运性质

张攀

湖北大学

晶格热导率是决定热电材料性能的重要参数，优异的热电材料往往具有强非简谐性和低晶格热导率。考虑高阶声子散射作用对准确计算热电材料的晶格热导率往往具有重要作用，但是通过密度泛函理论计算获取四阶力场数矩阵是一件非常耗时的工作。同时，热电领域的实验研究中通过引入点缺陷、界面和纳米孔洞等声子散射源能有效降低材料的晶格热导率，但是由于计算方法的限制，该类复杂体系声子热输运性质的理论研究同样存在困难。基于密度泛函理论计算的玻尔兹曼运输方程方法精度高，但是无法探究复杂体系的声子热输运性质；基于经验势的分子动力学模拟适用于复杂结构的晶格热导率计算，但经验势的开发难度大且精度受限。近几年快速发展的机器学习势，同时具有密度泛函理论计算精度和经验势模拟效率，为解决以上困难提供了有效手段。本文以低温相 SnSe 热电材料为研究对象，使用神经网络势结合玻尔兹曼运输方程和分子动力学模拟方法，系统研

究了四声子散射作用和本征空位点缺陷对其热输运性质的影响。结果发现，考虑更高阶声子散射作用的晶格热导率计算结果比仅考虑三声子散射作用的计算结果和实验值更吻合，说明了更高阶声子散射作用在低温相 SnSe 的声子热输运性质中起到了不可忽略的作用。同时，我们发现 Se 空位比 Sn 空位对其晶格热导率的降低作用更加显著。进一步研究表明，Se 空位的引入导致空位附近的 Sn 原子由与原先近邻的 Se 原子成键转变为与次近邻的 Sn 原子成键，这一特征导致 Sn 原子的成键减弱并引起声学支声子速度的降低。此外，弱的成键使 Sn 原子更加容易振动并导致低频光学支的下移。低频光学支声子与声学支声子的耦合作用增强了声子间的散射，并导致其晶格热导率的进一步降低。本文不仅加深了对低温相 SnSe 热电材料声子热输运性质的理解，同时为使用神经网络势方法探究四声子散射作用和本征点缺陷对热电材料声子热输运性质的影响提供了重要的研究案例。

## C-45 高通量筛选潜在延展性低导热 $ABX_3$ ( $X=S, Se, Te$ ) 钙钛矿热电材料

席丽丽

上海大学

钙钛矿材料在热电、光电、催化、磁、介电、超导等领域有很多应用。本研究以氧化物钙钛矿  $ABO_3$  和硫族钙钛矿  $ABX_3$  ( $X=S, Se, Te$ ) 为研究对象，通过高通量第一性原理计算和机器学习方法，探讨了氧化物和硫族钙钛矿材料的电子结构、电输运、热输运、力学性能等之间的关系。结果表明 1) 氧化物钙钛矿电子结构根据价带顶高对称点和能带简并数可分为四类，并分析了立方氧化物钙钛矿材料电子结构与电输运性能的关系，基于此，预测了一系列潜在的高性能氧化物钙钛矿热电体系。2) 硫族钙钛矿  $ABX_3$  ( $X=S, Se, Te$ ) A 位和 X 位原子对之间较弱的化学键导致了较高的延展性。此外，低声子群速度证实了这些材料具有低晶格热导率。因此，我们确定了 6 种 n 型候选材料和 6 种 p 型候选材料作为准延展性热电材料，这些材料在 300K 下的 ZT 值均大于 0.3，是热电应用的最佳候选材料。3) 第一性原理高通量计算数据与机器学习方法，深入理解钙钛矿材料柔性、热电性能与材料的元素特征等之间的关系，发现原胞体积和 A, B 位置绝对颠覆性比值这两个参数是影响柔性和热电性能的关键因素。

## C-46 铁磁半金属 $FeIn_2S_4$ 的拓扑节线及其横向电热输运

刘俊艳

中国科学院物理研究所

拓扑节线金属和拓扑半金属相继被发现，吸引越来越多的研究者的关注，这是由于它们具有低能费米激子。与传统材料中的电子不同，这种由 Dirac 或 Weyl 哈密顿描述的低能激发子，具有高迁移率、相反手性和拓扑鲁棒性，并在拓扑金属和半金属中产生了拓扑表面态费米弧和手性异常等有趣的现象。这种低能激发子在动量空间中以 Weyl 点和节线的形式存在，受简单晶格对称性和非简单的 (nonsymmorphic) 晶格对称性 (滑移镜面) 所保护，与简单晶格对称性相比，非简单的晶格对称性在稳定能带交叉点方面起着关键作用。这种能带交叉点不受自旋轨道耦合影响。受保护的交叉点在三维动量空间形成节线，这些节线纠缠在一起可以形成包括外节点链 (outer nodal chains)、内节点链 (inner nodal chains) 等，目前实验能够实现节点链构型的材料非常有限，迫切需要发现更多潜

在的候选材料，以探索更多新奇的性质。本工作利用第一性原理计算，预测了具有中心对称性的铁磁半金属  $\text{FeIn}_2\text{S}_4$  为外尔链的候选材料。这种 Weyl 链受两个相互垂直的非简单的晶格对称性所保护，且不易受到自旋轨道耦合所影响而被打破，而受简单对称性保护的节线易受自旋轨道耦合影响。此外，Weyl 链主要贡献费米能级附近正的贝里曲率，进而导致较大的反常霍尔电导率和反常能斯特电导率。这一研究为探索磁性系统中有趣的拓扑物态及其反常霍尔电导率和反常能斯特电导率提供了潜在候选者，并为后续实验探究其横向电热输运行行为的内禀机制提供了理论指导。

## C-47 热电制冷在芯片热管理中的应用

刘睿恒

中国科学院深圳先进技术研究院

随着集成电路的集成化和小型化程度不断提高，散热问题愈加突出，严重制约电子器件的性能与可靠性。热电制冷技术是一种基于帕尔贴效应的主动散热控温技术，可以实现热量的定向输运与主动制冷，在小型化且高功率电子器件的主动热管理展现出极大的潜力。但是受限于热电材料性能，热电效能一直是制约其在芯片散热方面应用的主要因素。21 世纪初，低维量子限域效应的提出为热电性能的大幅优化打开了窗口，并发展出用于高功率密度散热的微型化薄膜热电器件方案；本报告系统阐述了热电控温散热效能的影响因素，回顾了近年来热电材料与微型化器件的发展趋势，以及团队在热电材料以及薄膜器件用于芯片散热方面的研究进展；同时，在稳态散热的基础上，进一步对热电瞬态脉冲制冷效应进行了初步探索，探究了基于热电瞬态过冷效应的短时超大热流的精确控温方案，并开发了专属的控制逻辑算法，实现了热电控温精度与稳定性的大幅提升。

## C-48 高性能可穿戴热电发电器件的舒适性研究

苗蕾

广西大学

可穿戴生物电子设备的不间断供电是不可或缺的，尤其是在心脏起搏器等生命攸关的应用场合。可穿戴式热电发电机（w-TEG）通过塞贝克效应利用人体体温与环境之间的温差，提供不间断的电能。其优点众多，包括可靠性高、无活动部件、无噪音和环保，因此是确保不间断供电的理想方案。尽管有这些优点，但实现高输出和舒适的 w-TEG 的科学探索仍处于起步阶段。可穿戴式热电发电机（w-TEG）能够将人体热量转化为电能，为自供电的可穿戴式电子设备提供了一种新的、可靠的发电方法。然而，在保证可穿戴性的关键指标--w-TEG 的舒适性方面一直缺乏研究。在此，我们基于一个全面的夹层热电（TE）模型，提出了设计具有高输出功率的舒适型 w-TEG 系统的新见解。该模型通过系统地考虑各种热阻环境和弯曲状态、TE 和封装材料的物理性质以及设备结构，为同时优化舒适度（皮肤温度和压力感）和输出功率铺平了道路。为了验证这一设计策略，我们首次使用 n 型  $\text{Mg}_3\text{Bi}_2$  和 p 型  $\text{MgAgSb}$  基 TE 材料制造了 w-TEG 器件。这些 TE 材料具有取代传统  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  材料的巨大潜力，使我们的可穿戴 TEG 器件在 0.8 kPa 穿戴压力和 33 °C 皮肤温度条件下，4.5\*4.5cm<sup>2</sup> 器件的输出功率达到 367  $\mu\text{W}$  (18.4  $\mu\text{W cm}^{-2}$ )，确保了实际穿戴条件，保证了穿戴者的舒适性。这种新的评估方法也可推广到其他可穿戴电子设备中。

## C-49 构建富银纳米沉积相在银/硒化银复合柔性热电薄膜中实现前所未有的热电性能

高杰

桂林电子科技大学

$\beta$ - $\text{Ag}_2\text{Se}$  是近年来在可穿戴热电器件领域受到了广泛的关注，然而，由于缺乏通过调控其成分来优化载流子输运特性的有效手段无效， $\beta$ - $\text{Ag}_2\text{Se}$  基热电材料的功率因子（PF）长期停滞不前。本工作通过调整放电等离子烧结工艺，利用烧结过程中 Ag 原子从 Ag 单质相向  $\text{Ag}_2\text{Se}$  相中的转移及析出，在  $\beta$ - $\text{Ag}_2\text{Se}$  相中形成了与其共格的富银纳米沉淀相。富银纳米沉淀相的形成不仅能够与  $\beta$ - $\text{Ag}_2\text{Se}$  基体形成电荷转移效应，而且减少了相界面和声学声子引起的载流子散射。对于具有最佳组成的复合薄膜，其在 303 K 实现了前所未有的超过  $40 \mu\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-2}$  的 PF。通过数值模拟，计算出单个薄膜的理想长度为 6 mm。在 17.4 K 的温差下，单个薄膜实现了高达  $12.09 \mu\text{Wcm}^{-2}\text{K}^{-2}$  的输出功率密度。本研究为提高  $\beta$ - $\text{Ag}_2\text{Se}$  基热电材料的电学性能提供了一条创新途径。

## C-50 面向多场应用的热电器件服役性能与可靠性评估方法研究

祝薇

北京航空航天大学

热电器件在服役过程中，往往长期处于热、电等综合外场的作用下，这种复杂应力场的综合作用对热电器件的热电性能和机械性能均会造成巨大影响，从而降低器件的可靠性。而可靠性是一种表示器件在规定时间内和规定条件下完成规定功能的能力的特性，对于热电器件而言，即表示为其在应用于发电或制冷等工作场景中，能保证自身稳定完成额定工作目标而不出现故障的能力。同时，新型热电器件的发展在追求器件本身的高性能的同时，也在考验热电器件的新材料、新结构与新功能在新场景中的服役性能。因此，尚需建立系统的可靠性分析方法与评价标准以实现对热电器件的寿命预测与防护。

对热电器件进行可靠性分析和评估的过程中，首先需分析器件在服役过程中出现的各类故障模式和故障机理，而界面扩散现象就是一类在热电器件工作过程中普遍存在并会导致器件故障的事件。因此本工作主要研究热电器件在服役过程中热电臂与金属材料之间的界面扩散现象引起的失效，分析该失效模式下热电界面的电学性能比接触电阻率和力学性能抗拉强度的退化机理，并结合失效标准和可靠性分析方法构建热电器件的失效模型，确定热电器件的使用寿命。实验中以  $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Ni}$  这一热电臂/金属界面结构为研究对象，首先研究了温度场中的界面扩散和电场中的电迁移两种扩散模式的机理，并对两种扩散过程进行量化分析和计算；其次明确了扩散过程中界面比接触电阻率和抗拉强度与扩散深度的呈线性关系；最后通过扩散方程和边界条件对热电耦合应力场中的界面扩散行为进行量化描述，推导出了给定失效阈值的情况下界面结构和器件的使用寿命。本课题基于对失效模式的研究，提出了针对热电器件系统的失效分析和寿命预测方法，为开展热电器件的可靠性分析与评估工作提供了参考。

## C-51 热电器件失效现象、机理及可能的解决方案

樊希安

武汉科技大学

热电器件因其全固态、体积小、控温精度高、高效清洁且环境友好之特性，已成为散热控温的刚需以及温差发电新能源的解决方案之一，越来越受到学术界和产业界的关注。在评估热电器件的工作性能时，其可靠性是一个至关重要的指标。除了热电材料本身的热电转换效率之外，器件的结构设计、不同材料间的性能匹配、异质界面特性以及复杂的工况环境（如高温、高湿、机械振动和冲击等）均对其可靠性具有显著影响。在长期运行过程中，这些因素可能导致器件内应力集中、界面间元素扩散、裂纹形成与扩展、结构损伤等问题，最终引起器件性能的下降甚至失效。因此，对热电器件进行系统的可靠性分析，综合考虑器件结构设计、异质界面特性，元素扩散行为、应力分布等，深入解析器件失效的机理，对于优化热电器件的服役特性、提升其整体性能具有重要意义。

## C-52 异质界面优化设计与热电器件稳定性

郭逢凯

哈尔滨工业大学

高结合强度、低接触电阻率和高热稳定性的异质材料界面是热电器件稳定服役的基础。传统的将热电材料粉体与阻挡层粉体直接烧结制备热电接头的方法易导致严重的界面扩散或反应，致使接触电阻率过高，且高熔点阻挡层粉体烧结后致密度低，扩散阻挡能力差。本工作提出采用块体-粉体烧结方法，在方钴矿和  $Mg_3(Bi, Sb)_2$  基热电材料体系中有效降低界面初始扩散或反应程度，缓解界面热膨胀失配并降低接触电阻率。在此基础上构筑窄通道结构调控界面元素扩散，制备的方钴矿/阻挡层接头在  $550^\circ\text{C}$  老化 70 天后，界面结构稳定、功能特性无明显衰减，达到领先水平。该结果为稳定高强低阻热电接头制备提供了新思路，对提高热电器件服役稳定性具有重要指导意义。

## C-53 热电制冷器件散热模块结构优化研究

王春阳

中国科学院工程热物理研究所

为了探讨热电制冷器件散热模块结构对热电制冷效率的影响，本研究通过数值模拟分别在相变材料和无相变材料情况下对两种热散模块（固化结构与非固化结构）的热电器件制冷性能进行了对比分析。研究了孔隙率以及结构单元数量对热电器件冷却性能和冷端温度的影响，其中，孔隙率的设定范围在 0.75~0.95，而结构单元数量为 4~36。此外，该研究采用焓法来解决固-液相变过程的传热问题。研究表明，散热模块无论是固化还是非固化结构，相变材料均可以显著降低冷端温度并提升热电器件的冷却性能。其中，固化结构的散热模块对热电器件冷却性能和冷端温度的影响更为显著。该研究成果将为热电制冷器件的相变材料散热模块结构优化提供有效的理论依据。

## C-54 应用于毫瓦级放射性同位素温差发电器的高长径比方钴矿热电器件

井航

中国工程物理研究院核物理与化学研究所

放射性同位素温差发电器(RTG)是一种固体能量转换装置,利用放射性同位素衰变产生的热量通过塞贝克效应产生电能。本工作的目的是通过热阻网络和有限元分析(FEA)方法研究热电器件(TEM)结构对温度分布和整体性能的影响,以提高 RTG 的输出性能。在 RTG 的放射性同位素加热器单元(RHU)热源为 4W,直径保持 70 mm 不变的情况下,通过热阻网络和 FEA 两种方法研究了支腿长度(L)、支腿数量(n)和截面积(A)对电压、输出功率和转换效率的影响。我们使用热阻网络方法得到输出功率与转换效率随 L 的增加, nA 的减小而增大。简化的热阻网络提供了一种评估方案,帮助缩小 L、n 和 A 值的取值范围。因此,在接下来的部分中,再通过 FEA 方法对 RTG 中热电器件的结构进行更精细的研究。我们使用 FEA 方法得出增大 L,选择合适的 A,减小 n,可以使 TEM 内的温度梯度增大,最终提高毫瓦 RTG 的输出功率和转换效率。当  $A = 0.64 \text{ mm}^2$ ,  $L = 25 \text{ mm}$ ,  $n = 36$  时,毫瓦 RTG 的最大输出功率( $P_{\max}$ )为 86.95 mW,最大转换效率( $\eta_{\max}$ )为 2.17%。为了优化毫瓦 RTG 的输出功率和转换效率,同时保证大电压和可制造性,选择了  $n=64$ ,热电支腿的尺寸为  $0.8 \times 0.8 \times 25 \text{ mm}^3$  制作方钴矿(SKD)热电器件。安装此 SKD-TEM 的毫瓦 RTG 将提供 1.13 V 的输出电压( $V_{\text{out}}$ ), 63.30 mW 的最大输出功率( $P_{\max}$ )和 1.58% 的最大转换效率( $\eta_{\max}$ )。此外,它具有优异的环境适应性,能够在高达 538 K 的环境温度( $T_{\infty}$ )下工作。我们还分析了高长径比 SKD-TEM 的热应力分布。由于 SKD 材料和粘合剂之间的热膨胀系数(CTE)不同,SKD-TEM 内的最大应力发生在 p-SKD 支腿内部和周围。最后,制作出  $9.9 \times 9.9 \times 25 \text{ mm}^3$  的 SKD-TEM,包含 64 条支腿,每条腿的尺寸为  $0.8 \times 0.8 \times 25 \text{ mm}^3$ 。在热端温度( $T_h$ )为 723 K,冷端温度( $T_c$ )为 296 K 时,开路电压( $V_{\text{oc}}$ )为 3.51 V,最大输出功率( $P_{\max}$ )为 194.45 mW,最大转换效率( $\eta_{\max}$ )为 3.4%。

## C-55 无源自供电热电器件设计与制备

刘凯

浙江大学

物联网的快速发展引发了对无源自供电技术的巨大需求。常规无源器件由于时间和地点等条件的限制而无法稳定、可持续地使用。在这里,本工作考虑物联网定点放置与人体可穿戴两种应用场景,利用辐射制冷和选择性光热吸收在自然环境中建立起温差,成功实现了一种基于热电技术的全天候稳定无源供电策略。无源自供电热电器件实现了全天范围内约  $1.8 \text{ }^{\circ}\text{C}$  的平均温差,全天电学输出高于 102 mV 和  $376 \text{ }\mu\text{W}$ ,成功支持无线温度传感器实现 24 小时远程数据传输和 LED 照明;另在可穿戴场景下原理样机实现无需接触人体皮肤即可产生 40.8 mV  $V_{\text{oc}}$  和  $52.7 \text{ }\mu\text{W}$   $P_{\max}$  的电学输出,成功支持 LED 灯持续工作。本工作验证了该策略在自供电物联网节点领域的可行性,也展示了无源供电技术持续从环境中收集能量的潜力。

冯江河

中国科学院深圳先进技术研究院

层叠式的多级热电制冷器 (multi-stage TEC) 早已被证明是实现超全固态低温制冷的有效技术之一。尽管多级制冷器已经大量的理论研究, 但如何在已有的热电材料基础上设计并制备高性能的多级热电制冷器仍是一个挑战。我们面向串联电流控制的多级制冷器件广泛应用, 基于单对器件不同热端温度、制冷温差与电流下的制冷参数分析, 根据多级器件层级间热流匹配规则, 提出了一种对多级器件几何结构进行快速设计的范式 (图 1), 即满足应用需求前提下, 单层级器件采用串联电流下最大的制冷系数 ( $COP_{max}$ )。与传统单层级最大制冷量设计策略相比, 在相同温差下,  $COP_{max}$  设计不仅实现了更大 COP 和制冷量, 而且减少了热电支腿的数量。利用 ( $COP_{max}$ ) 策略设计并集成的三级和四级制冷器件获得最大制冷温差 ( $\Delta T_{max}$ ) 分别为 108.6 K 和 126.8 K。1. 利用热挤压工艺提升  $n\text{-Bi}_2\text{Te}_3$  和  $n\text{-Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  抗弯性能 2-4 倍, 并获得低温高功率因子, 分级材料和异质材料配合设计, 有望对多级制冷器件的制冷性带来新突破。

# D 分会场报告摘要 (D01-D62)

D-01

## Co 基热电磁耦合新材料

应剑俊\*、桂智刚、陈仙辉

中国科学技术大学

Co 基热电材料由于其潜在的磁性以及部分体系能带结构的特殊性为研究内禀磁性对热电性能的影响以及热电性能对于外部磁场的响应提供了一个重要的平台，是研究磁热电效应的重要体系。我们首先完成了对 Co 基 full-Heusler 合金  $\text{Co}_2\text{XAl}$  ( $\text{X} = \text{Ti, V, Al}$ ) 的探索，通过测量零场与施加外场下的热电输运，一方面，我们发现了自旋涨落机制在该体系中重要贡献，该机制热电势贡献值大于传统意义上金属体系热电势主导项——电子扩散项；另一方面，在  $T_c$  附近，磁子曳引机制对于热电势的贡献达到了电子扩散项 24 倍。该工作揭示了磁性机制对于热电性能的重要影响。随后，我们在另一 Co 基材料  $\text{TaCo}_2\text{Te}_2$  中通过测量纵向及横向热电性质，发现其在 20 K 零外场下纵向功率因子达到  $11600 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ ，是目前已知的热电制冷材料中的最大值，并且在 120 K 存在另一功率因子局域极大值  $2200 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ ，即该体系同时实现了由不同类型载流子主导的优异纵向热电性能；与此同时，其横向热电在 13.5 T 下达到了  $161 \mu\text{V K}^{-1}$ ，相应的横向功率因子达到了  $25680 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ ，并且随磁场均未饱和，是当前横向热电性能最好的材料之一。该体系优异的横纵向热电性能得益于声子曳引效应以及电子与空穴良好的补偿机制。

D-02

## 绝缘量子材料的热霍尔效应研究

朱增伟\*

华中科技大学

在多种量子绝缘材料中，由声子引起的热霍尔效应的潜在机制尚未完全揭示。 $\text{NiPS}_3$ （一种具有范德瓦尔斯堆叠的蜂窝层结构及锯齿形反铁磁序）中存在显著的热霍尔电导率。纵向 ( $\kappa_{aa}$ ) 和横向 ( $\kappa_{ab}$ ) 热电导率在相同温度下达到峰值，热霍尔角 ( $\kappa_{ab}/\kappa_{aa}/B$ ) 符合之前确定的普适规律。 $\kappa_{ab}$  的幅值对  $b$  轴磁化强度非常敏感，而声子平均自由程则不然。研究表明，磁振子和声子带在动量空间的  $b^*$  方向上交叉。 $\kappa_{ab}$  在其峰值以上的指数温度依赖性揭示了一个能量尺度，这个尺度与磁振子-声子杂化打开的能隙数量级相当。这指向了一个内禀的 THE 机制，与其他磁性绝缘体中的 THE 产生机制有指导作用[1]。在非磁性固体元素中，如不涉及自旋自由度的作用的黑磷 (BP) [2]，其大的 THE 信号需要一个最小机制来解释。我们展示了即使磁场、热流和温度梯度位于同一平面内，纵向热流也能在 BP 中产生横向温度梯度。而低温下，长的声子平均自由程为点状对称性破缺缺陷的散射留下了很小的空间。我们也展示了当磁场沿蜂窝状平面的两个对角方向之一定向时，信号达到峰值，并认为这可以理解为两个不同贡献的总和，每个贡献都平行于一个镜像平面。这种角度依赖性以及观察到的信号量级可以用磁场对载热声子移动的电偶极子施加的扭矩作为 THE 的驱动力来解释[3]。

[1] Qingkai Meng, Xiaokang Li\*, Lingxiao Zhao, Chao Dong, Zengwei Zhu\*, Kamran Behnia\*, arXiv:2403.13306

[2] Xiaokang Li\*, Yo Machida, Alaska Subedi, Zengwei Zhu\*, Liang Li, Kamran Behnia\*, Nature Communications, 14, 1027 (2023)

[3] Xiaokang Li\*, Xiaodong Guo, Zengwei Zhu\*, Kamran Behnia\*, arXiv:2406.18816

## D-03 拓扑材料的横向热电性能

潘瑜\*

重庆大学

Transverse thermoelectrics based on Nernst-Ettingshausen effect have been widely investigated in the 20th century. Old results of transverse thermoelectrics have shown low performances and usually require large magnetic fields. In recent years, the surge of topological materials has stimulated the development of high performance transverse thermoelectrics, including both ordinary Nernst effect (ONE) and anomalous Nernst effect (ANE). High transverse thermoelectric performance is achieved by topological semimetals owing to their unique properties such as sharp band dispersion, ambipolar charge carrier transport, and large Berry curvature. Here, we will discuss the advantages of transverse thermoelectrics, the origin of ONE and ANE phenomena, and high transverse thermoelectric performance reported in topological materials.

## D-04 热电磁多功能材料与热电/磁卡复合制冷技术

魏平、赵文俞\*、张清杰

武汉理工大学

近年，磁性热电材料和器件作为热电领域研究的新方向而逐渐受到学者的关注。报告将重点介绍本团队围绕热电磁多功能材料与热电/磁卡复合制冷技术开展的系列工作，内容涉及磁性增强  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基、 $\text{Mg}_3\text{Bi}_2$  基材料室温热电性能和  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基热电-磁卡复合制冷材料与器件。在磁增强热电材料方面，我们提出采用磁性纳米粒子改善  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基和  $\text{Mg}_3\text{Bi}_2$  基室温热电性能的策略，揭示了磁性纳米粒子的超顺磁性和负磁阻行为提升材料热电性能的作用机制；在热电/磁卡复合制冷技术方面，研制了同时具有良好热电性能和磁熵变的  $\text{Gd}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基和  $\text{LaFeSi}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$  基热电磁多功能材料，揭示了材料异质界面反应机制和界面反应层对电热输运性能和磁卡效应的影响规律；在此基础上，设计和制造了由帕尔贴制冷与布雷顿磁制冷循环耦合的热电/磁卡复合制冷器件，并实测了器件的热电/磁卡复合制冷性能。这些研究为发展全固态热电/磁卡复合制冷技术提供了实验依据。

## D-05 Bi-Sb 合金中一维朗道量子化产生的高 zT

贺彬\*<sup>1</sup>、潘瑜<sup>1,2</sup>、冯晓龙<sup>1</sup>、陈栋<sup>1</sup>、Federico M. Serrano-Sanchez<sup>1</sup>、Mohamed Nawwar<sup>3</sup>、胡海华<sup>1</sup>、Ulrich Burkhardt<sup>1</sup>、Ulrich Burkhardt<sup>1</sup>、Berit H. Goodge<sup>1</sup>、Joseph P. Heremans<sup>3</sup>、Claudia Felser<sup>1</sup>

1. Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids Dresden Germany

2. 重庆大学前沿交叉学科研究院

3. Department of Mechanical and Aerospace Engineering, The Ohio State University

热电材料能带的态密度(DOS)在获得大赛贝克系数及高 zT 中具有关键作用。尽管一维δ函数型 DOS 被 Dresselhaus 等研究人员认为是提升 zT 的有效途径,该 DOS 也仅在纳米材料而非块材中得以实现。外加磁场可以引入朗道量子化,从而在三维块材中实现δ函数型 DOS。该机制在 n 型掺杂的 Bi-Sb 合金中得以实现并在 100K 下得到了 zT>2,与此同时,实现该效应的外加磁场仅为 0.4T。为验证该结果,我们在不同的样品中用多用方法取得了类似的结果。实验结果表明,朗道量子化可以使 Seebeck 系数翻倍,并使得加场下的 zT 为零场下的五倍以上。该实验结果证实了量子效应对热电研究的重要意义,并可应用于低温制冷材料

## D-06 混合磁性纳米复合热电材料中的热电磁效应及交换耦合作用

刘志愿\*、管希成、马俊杰、巴倩

安徽工业大学

磁性纳米颗粒磁转变引诱的热电磁效应以及其本身的纳米界面效应可以在纳米-介观尺度协同优化热电材料的电和热输运性能。将居里温度位于室温附近的磁性纳米颗粒引入到碲化铋(Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>)基材料中制备磁性纳米复合热电材料,利用其热电磁效应及其纳米界面效应有望获得宽温区高性能 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基热电材料。本文将 Ba<sub>2</sub>Zn<sub>2</sub>Fe<sub>12</sub>O<sub>22</sub>(BZFO)与 La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>Mn<sub>0.95</sub>Cu<sub>0.05</sub>O<sub>3</sub>(LSMCO)磁性纳米悬浮液与 Bi<sub>0.37</sub>Sb<sub>1.63</sub>Te<sub>3</sub> 基体材料超声混合并结合 SPS 工艺成功制备了 0.25%(xLSMCO+yBZFO)/Bi<sub>0.37</sub>Sb<sub>1.63</sub>Te<sub>3</sub> (x:y=1:0, 1:1, 1:2, 1:3 和 1:4)混合磁性纳米复合热电材料。物相和显微结构分析表明混合磁性纳米颗粒的引入未改变基体晶体结构。由于磁性纳米颗粒微磁场对载流子的磁散射导致复合材料电性能降低。而磁性纳米颗粒本身的磁散射、纳米效应及与基体之间的界面效应可以强烈散射载流子与声子,导致复合材料热导率显著降低。结果,LSMCO-BZFO11 样品在 300-500 K 温度范围内具有最大的平均 ZT 值 1.01,与基体相比增加约 12.8%。此外,混合磁性纳米复合样品在室温附近出现磁熵变峰值,表明磁性纳米复合热电材料能够在室温附近产生磁热效应,这可能对碲化铋基合金在制冷领域的应用有着积极作用。

## D-07 平面蜂窝层状化合物 BaAgX 的热电性能研究

彭坤岭

南京理工大学

热电材料能以全固态形式实现热能与电能之间的相互转换,在分散性热源回收发电和热电制冷等领域具有重要的应用前景。热电材料的转换效率可用无量纲热电优值(zT)来评价,其中品质因子  $\beta \propto \frac{\mu}{\kappa_L} m_{dos}^*{}^{3/2}$  可以直接地评估材料的热电潜力,其揭示了热电材料在减低晶格热导率( $\kappa_L$ )的同

时保持高载流子迁移率 ( $\mu$ ) 的重要意义。然而, 大多数降低  $\kappa_L$  的策略 (如熵工程、缺陷工程) 都会不可避免地在电荷输运过程中引入外部散射源进而恶化了载流子迁移率, 这极大地限制了热电性能的进一步提高。我们提出了一种基于晶体对称性的路线, 通过水平镜像对称性来消除具有纯面外振动矢量的声子所介导的电子-声子耦合强度。成功突破了准二维材料本征低迁移率的障碍。在 ZrBeSi 型准二维体系中得到了证明, 其中代表性多晶样品  $\text{Ba}_{1.01}\text{AgSb}$  的室温空穴迁移率高达  $344 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , 突破了目前准二维多晶热电材料的记录值; 由于较弱的 Ag-X 共价键和近乎孤立的 Ba 阳离子表现出类似 rattling 的模式, 使得该类材料的具有本征低晶格热导率。本工作揭示了准二维系统中电子-声子耦合与晶体对称性之间的关系, 为开发用于电子和能量转换的高迁移率半导体拓宽了视野。

## D-08 范德华层状硫族化合物氧化特性与表面结构可控构筑研究

郑思康

重庆大学

经典热电材料 SnS、SnSe 以及具有超强塑性变形能力的 InSe、GaSe 等范德华层状硫族化合物暴露于空气中易被氧化, 常导致结构变化和性能恶化。因此, 该体系材料的氧化行为与表面结构长期稳定性已成为相关领域基础科学与实际应用中的关键问题之一。而通过对氧化行为与机制的解析, 不仅能够理解氧化现象提供指导, 也有望为氧化工程实现材料性能优化与器件设计奠定基础。鉴于此, 本研究以 GaSe 为代表, 深入探究了其热氧化和表面结构演变的依赖关系。通过系统的显微分析, 多尺度解析了氧化结构。在不同氧化温度下发现了包括  $\text{Ga}_2\text{Se}_3/\text{Ga}_2\text{O}_3$  和多层  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  在内的各种组装异质表面, 并阐明了整个温度范围内的氧化机制。进一步探索了通过热氧化来实现对 GaSe 光致发光性能的调控, 展示了其在表面氧化工程中的巨大潜力, 对深入理解和利用氧化表面结构具有重要意义。最后, 我们探索了其他层状硫族化合物的氧化行为, 发现了该类材料氧化行为的相似性与利用热氧化定制表面结构的普适性, 对相关体系的发展及其器件设计起到指导作用

## D-09 基于实验数据的 half-Heusler 热电材料机器学习研究

韩岫、韩仲康、付晨光、朱铁军\*

浙江大学

基于数据驱动的材料研究方法被认为是材料科学发展的“第四范式”, 实现准确的材料性能预测需要可靠的数据集和科学的模型训练方法。已有的高通量材料数据库为机器学习预测材料性能提供了数据集支持, 这些数据库数据量大、获取方便, 但可信任度有限、缺乏统一的筛选标准; 而基于实验数据的机器学习研究受限于大量数据的获取, 相关工作难以推进。Half-Heusler 化合物是现阶段性能最优的高温热电材料体系, 三元组分具有广泛的元素排列组合方式, 且在过去二十年的实验研究中积累了相对丰富的实验数据。基于筛选后的 478 条材料性能数据, 本工作使用 SISSO 机器学习方法对 half-Heusler 化合物的热电优值、晶格热导率和本征电导率预测模型进行训练, 并提取与目标参数相关的关键特征, 以期基于可靠实验数据的训练模型实现高性能 half-Heusler 热电材料成分预测。

## D-10

### 典型半赫斯勒热电材料的 p 型掺杂性

胡丽蓉、韩岫、朱铁军、邓天琪、付晨光\*

浙江大学

具有高价带简并度的半赫斯勒 (half-Heusler, HH) 半导体是极具潜力的 p 型热电材料。然而, HH 半导体中实现有效 p 型掺杂仍面临着挑战, 制约了高性能 p 型 HH 热电材料的开发。通过第一性原理计算, 本工作系统研究了三种典型的 HH 化合物 (NbFeSb、NbCoSn 和 ZrNiSn) 中的本征缺陷、p 型掺杂剂以及掺杂剂与本征缺陷相互作用产生的复合缺陷。研究结果表明, 4d 间隙位缺陷是主导上述三种化合物的本征缺陷, 限制了 p 型掺杂的有效性; 此外, 在某些情况下, 掺杂剂与 4d 间隙位缺陷形成的复合缺陷是阻碍 p 型掺杂的关键。提出将计算的钉扎费米能级作为评判 HH 热电材料 p 型掺杂性的关键指标, 并对上述三种材料中不同 Wyckoff 位置掺杂剂的 p 型掺杂有效性进行了预测, 与现有实验结果具有一致性。这些研究结果揭示了 p 型掺杂 HH 半导体中的主导缺陷类型, 为掺杂剂选择及其 p 型热电性能优化提供了理论指导。

## D-11 基于知识-数据双驱动方法发现影响晶格热导率关键因子

### ——晶体频率参数

王向东<sup>1,3</sup>、计嘉琳<sup>2</sup>、杨炯<sup>1</sup>、张文清<sup>\*4</sup>

1. 上海大学

2. 嘉兴大学

3. 华东师范大学

4. 南方科技大学

晶体中具有弱化学键的原子会产生低频声子模式, 并反映出大的原子位移参数 (Atomic Displacement Parameters, ADP), 从而显著降低材料的晶格热导率。然而, 具有大 ADP 的原子并不意味着它具有低频声子模式。即, 具有刚性化学键的轻原子往往同时表现出高频振动和较大的 ADP。如果直接依据 ADP 参数识别低晶格热导率材料是不合理的。因此, 我们基于知识-数据双驱动方法, 提出了一种高效且物理上可解释的特征——晶体频率参数 (Crystal Frequency Parameter, CFP)。CFP 是原胞内所有原子的原子频率参数 (Atomic Frequency Parameters, AFP = ADP × 原子质量) 的总和。从物理知识上, 我们揭示了 CFP 与三声子散射权重相空间存在正相关性。从数据驱动上, 我们运用 XGBoost 和 SHAP 可解释机器学习技术, 进一步验证了 CFP 对晶格热导率的关键作用。结合两者, CFP 被证明是预测晶格热导率的关键因子, 并基于高通量方法从含有 10,034 个无机晶体的 PhononDB 数据库中识别出 501 种潜在的低晶格导热材料。通过求解声子玻尔兹曼输运方程, 我们证实了在文献中从未报道过的 Na<sub>4</sub>Se<sub>4</sub>、Na<sub>4</sub>Ag<sub>2</sub>As<sub>2</sub> 和 Na<sub>4</sub>Ag<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub> 中的低晶格热导率。此外, 通过精确计算电声耦合的弛豫时间, 我们发现了一种新的热电材料 Na<sub>4</sub>Se<sub>4</sub>, 其在 800 K 时的 ZT 达到 1.16。基于知识-数据双驱动方法发现影响晶格热导率的关键因子, 为低热导率材料的设计和热电材料的发现提供了新的理论基础和方法论指导。

## D-12 强非谐性和高能带简并度诱发 Fe<sub>2</sub>NbAl 的优异热电性能

叶先峰<sup>1</sup>、余健<sup>2</sup>、赵文俞<sup>\*1</sup>、张清杰<sup>1</sup>

1. 武汉理工大学

2. 九江学院

Full-Heusler 化合物作为磁性材料已有大量理论和实验研究，但其热电性能研究却不多。基于材料基因工程方法，海量计算 Full-Heusler 化合物的电子能带结构和声子结构及其与电热输运性能参数之间的构效关系，对指导实验发现具有高热电性能的 Full-Heusler 化合物具有重要意义。本研究基于密度泛函理论计算，系统研究了价格低廉、无毒环保、同主族 Full-Heusler 化合物 Fe<sub>2</sub>MAl(M= V, Nb, Ta)的热电输运性能。发现 Fe<sub>2</sub>NbAl 具有最低的晶格热导率和最高的电学输运性能，p 型 Fe<sub>2</sub>NbAl 化合物在 900 K 时 zT 值达到 1.7。在 Fe<sub>2</sub>NbAl 中，弱束缚的 Nb 原子如同一个“rattler”，导致晶格非谐性增强和低频声子被强烈散射。此外，重的 Nb 原子导致低的声子群速度，进一步降低 Fe<sub>2</sub>NbAl 的晶格热导率，900 K 时仅 4.85 W·m<sup>-1</sup>·K<sup>-1</sup>。Fe<sub>2</sub>NbAl 价带顶由布里渊区的 Γ 点变为高对称简并度的 X 点，导致 Fe<sub>2</sub>NbAl 简并度 N<sub>v</sub> 高达 6，从而获得高的电输运性能。900 K 时 p 型 Fe<sub>2</sub>NbAl 功率因子可达 255.6 μW·K<sup>-2</sup>·cm<sup>-1</sup>。该研究表明 Fe<sub>2</sub>NbAl 作为一种低成本的环境友好化合物，是一种潜在的高性能 p 型热电材料。

## D-13 AgInSe<sub>2</sub> 合金化促进(Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的优异热电和机械性能提升

李瑞恒、欧雯馨、昂然\*

四川大学

物联网、智能机器人和智能生物医学设备等新兴领域对高性能热电设备的需求日益增长，因为这些设备能够高效地将热能转换为电能，反之亦然。环境友好的(Bi, Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 体系 (BST) 在室温附近表现出优异性能，成为优化热电性能以满足商业应用需求的有前景的解决方案。我们通过 AgInSe<sub>2</sub> 合金化来增强(Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的热电和机械性能，以优化电子和声子的传输，并揭示潜在机制。得益于协同优化，BST-0.1%AgInSe<sub>2</sub> 的样品在 353 K 时达到峰值 zT 约 1.3，在 303 K 至 503 K 的平均 zT 约为 1.11，维氏硬度高达 105 Hv。通过对热电器件的合理优化，我们在 210 K 温差下实现了约 6% 的最大转换效率。利用器件强大的热电输出能力，我们进一步评估了其作为基于 ASCII 码的自供电信息交互腕带设备的潜力。我们设想这种多功能热电器件将在发电和人机交互中广泛应用，并在可穿戴电子、电信和医疗监测领域展现广阔的前景。

## D-14 (Bi, Br, Cl)共掺增强 n 型多晶硒化锡块体热电性能

保王启、冯晶、葛振华\*

昆明理工大学

热电材料能够直接将热能和电能进行相互转换，是一种新能源材料。硒化锡材料因其组成元素低毒，来源广泛，且具有本征低热导率，是一种有应用前景的热电材料。单晶硒化锡具有超高的热电性能，但是制备工艺较为复杂耗时，并且力学性能较差。本研究以多晶硒化锡为研究对象，通过固相熔融法结合放电等离子烧结制备了 n 型硒化锡多晶块体材料，并通过氯元素掺杂提升了载流子

浓度，优化了热电性能。使用  $\text{SnCl}_2$  为氯源，氯元素取代硒元素引入电子，将本征 p 型的  $\text{SnSe}$  转变为 n 型，并通过调整氯元素含量，提升了体系的电子浓度，优化了电输运性能， $\text{SnSe}_{0.88}\text{Cl}_{0.12}$  的样品在 773 K 取得最大的  $zT$  值 1.1，比相同温度下纯硒化锡样品的  $zT$  值高约 2 倍。针对  $\text{SnSe}_{0.88}\text{Cl}_{0.12}$  样品室温区电导率较低的问题，选择不同的含铋卤化物，进行阴阳离子协同掺杂，一方面铋元素取代锡元素引入电子，另一方面卤族元素取代硒进一步引入电子提升电传输性能。同时引入多尺度第二相，位错等缺陷，增强声子散射，降低热导率。 $\text{SnSe}_{0.88}\text{Cl}_{0.12}+1 \text{ wt}\% \text{ BiBr}_3$  样品在 773 K 时最大  $ZT$  为 1.2，整个测试温区（323-773 K）的平均  $zT$  被大幅提高，从 0.103 提升至 0.42，本研究将为硒化锡多晶热电材料的产业化提供助力，也为其它 n 型热电材料的性能提升提供借鉴。

## D-15 面向 5G 光模块应用的微型热电器件结构与性能优化

张鸣奇、杨东旺\*、鄢永高、唐新峰

武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

随着 5G 移动通信技术的快速发展，光模块作为信号传输的核心部件，其尺寸不断减小，内部组件的集成度不断提高，工作时微小面积内的功耗急剧上升，局部热流密度大幅增加，温度的升高会引起光输出功率的降低和波长漂移。同时，光模块在低温环境下启动时，必须加热到最佳工作温度，以保证数据的传输。为了保证 5G 光模块正常启动和运行，在有限空间内利用微型热电器件（micro-TET）的 Peltier 效应实现高热流密度局部主动制冷/制热和精准控温显得十分重要且充满挑战。本工作采用 ANSYS 有限元法基于 3D 数值模型创建了多因素设计路线图，包含了热电单元数目（N）、宽度（W）、长度（L），热电器件的填充气氛、界面接触电阻（ $R_{ec}$ ）、界面接触热阻（ $R_{tc}$ ）、基板热导率（ $k_{sub}$ ）、散热器热导率（ $k_{heat \ sink}$ ），环境温度（ $T_a$ ），以及激光源发热量（ $Q_L$ ）。根据此路线图，最优拓扑结构参数的 micro-TET 为： $2 \times 9.3 \times 1 \text{ mm}^3$ ， $W=0.3 \text{ mm}$ ， $L=0.4 \text{ mm}$ ， $N=68$ 。当保持激光源温度在  $50^\circ\text{C}$  时，其制冷模功耗为  $0.84 \text{ W}$ （ $Q_L=0.7 \text{ W}$ ， $T_a=80^\circ\text{C}$ ），制热功耗为  $0.39 \text{ W}$ （ $T_a=0^\circ\text{C}$ ）。将微型热电器件集成到 QSFP 28 接口的 5G 光模块，制冷模式下，光模块的内部温度始终保持在  $45.7^\circ\text{C}$ ，光功率高达  $7.4 \text{ dBm}$ 。这项研究有望应用于其它微型处理器的精确温度控制和集成制造。

## D-16 采用低热导填料和蜂窝结构封装的高制冷性能可穿戴式热电冷却器

朱思靖、苗蕾\*

广西新型电池材料工程技术研究中心

广西大学

基于珀耳帖效应的热电制冷器以其零排放、高效率的特点在小型冷库中得到了广泛的应用，而用于个人热管理的可穿戴式热电冷却器也受到了广泛的科学关注。对于采用无机热电材料封装柔性基板的面外结构可穿戴热电冷却器，一方面要求封装材料具有低的导热系数、高可靠性和高柔性，另一方面要求器件的散热轻便、便携、高效。因此，我们提出了一种由  $\text{SiO}_2$  气凝胶、中空玻璃微珠 (HGB) 和聚二甲基硅氧烷 (PDMS) 作为填料的复合材料，利用其低导热 ( $0.094 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ ) 来增加器件封装层的温差。然后采用蜂窝结构封装进一步降低了封装层的导热系数，同时给器件增强柔性，并带

来了一定的抗压性。最后利用六方氮化硼(HBN)和 PDMS 合成的辐射冷却(RC)膜, 在室外环境中降低热侧温度, 而不增加能源消耗, 为热侧提供散热。结果显示, 本文提出的蜂窝式可穿戴热电冷却器(HWTEC)在人体佩戴时可在室内和室外分别提供 9.1°C 和 6.5°C 的高冷却温差。我们的工作代表了柔性热电设备发展的重要一步, 并被认为在个人热管理, 电子皮肤和智能纺织品方面具有广阔的未来应用前景。

## D-17 拓扑磁体驱动的高性能能斯特热电器件

陈梦朝、钱昇、朱铁军、付晨光\*

浙江大学

拓扑磁体中的拓扑电子结构使材料展现出新颖的输运特性, 以反常能斯特效应为代表的横向热电效应在热电能量转换方面表现出大的应用潜力。近些年来, 尽管对于拓扑新材料的研究不断涌现, 但面向应用探索的能斯特器件研究却微乎其微。本工作成功批量制备了与单晶性能可比拟的高质量多晶样品, 集成了首个厘米级的能斯特热电器件, 并搭建了相应的器件性能表征测量系统, 在温差 15K 时实现 5.4mV 和 14.3 $\mu$ W 的优异性能输出, 揭示了具有本征大的贝利曲率的拓扑材料在热电应用方面的巨大潜力。

## D-18 PEO 基离子热电凝胶的分子间相互作用调控与性能优化

赵伟<sup>1</sup>、张骐昊<sup>2</sup>、王连军<sup>\*1</sup>、江莞<sup>1,3</sup>

1. 东华大学

2. 卡尔斯鲁厄理工学院

3. 东华大学功能材料研究中心

离子热电材料因具有巨大热电势 ( $S_i$ ) 在热量收集、能量转换及传感等领域引起了广泛关注。其中, 离子热电凝胶凭借优异的热稳定性、可调节的热电性能及机械特性, 被认为是未来热电材料的重要发展方向之一。然而, 离子热电凝胶在实际应用中仍面临一些关键挑战: (1) 在低湿度环境下,  $S_i$  和离子电导率 ( $\sigma_i$ ) 较低; (2) 离子凝胶内的相互作用机制尚不明确, 限制了性能提升; (3) 相较于 p 型材料, 高性能 n 型离子凝胶的发展滞后; (4) 凝胶的机械强度与  $\sigma_i$  之间往往存在负相关耦合, 难以兼顾。为应对这些问题, 本团队通过实验与理论计算结合, 系统性调控了 PEO 基离子凝胶的内部相互作用。首先, 通过调控阴离子-基体的氢键作用, 增加了阴阳离子迁移差, 在 60%湿度下获得了 18 mVK<sup>-1</sup> 的  $S_i$ ; 其次, 通过引入金属-配位与离子选择性缔合作用, 显著提高了阴离子的扩散系数和迁移熵, 成功制备了自愈合、可回收的 n 型 PEO 基离子热电凝胶, 在 50%湿度下  $S_i$  约-15 mVK<sup>-1</sup>。进一步, 为解决因离子液体引入导致的机械强度下降问题, 通过利用凝胶内部亲和性差异构建了相分离结构, 实现了  $\sigma_i$  和机械强度的协同优化, 并有效调控了 pn 型材料的转变。基于优化后的 p 型和 n 型 PEO 基热电凝胶, 成功组装了全自愈合的离子热电器件, 其温度-电压系数高达 80

$\text{mVK}^{-1}$ 。这些研究结果表明，通过分子间相互作用的精确调控为多功能离子热电凝胶的开发提供了有效策略，有望加速离子热电技术的实际应用进程。

## D-19 整体法视角下掺杂剂对材料晶格热导率的影响

戴胜男、奚晋扬、杨炯\*

上海大学

掺杂手段在提升材料的电输运和热输运性能方面起着关键作用。在处理掺杂缺陷体系的热输运性质时，传统方法是將掺杂缺陷视作点缺陷，通过点缺陷模型在声子寿命中引入质量与应力场波动项，以此考虑掺杂缺陷对晶格热导率的抑制作用。本工作提出了一种创新的视角——整体法，来研究缺陷体系的热输运问题。该方法将掺杂剂与基体视作统一的整体，仅考虑本征声子色散和声声相互作用的改变，以及异价掺杂引入的电声相互作用。本研究以  $\text{M}_x\text{Nb}_{1-x}\text{FeSb}$  ( $\text{M} = \text{V}, \text{Ti}; x = 0.037, 0.125, 0.25$ ) 和  $\text{NbFeSb}$  之间的晶格热导率变化为例，结果显示，等电子掺杂  $\text{V}_{0.25}\text{Nb}_{0.75}\text{FeSb}$  的热导率降低了 37.9%，而异价掺杂的  $\text{Ti}_{0.25}\text{Nb}_{0.75}\text{FeSb}$  在考虑电声相互作用后，热导率降低幅度由 44% 至 63%。值得注意的是，轻元素掺杂会诱导声子色散产生避免交叉行为。这一行为通过本工作提出的晶格动力学模型可进行解释，该模型表明，质量与力常数的波动会导致声子色散产生避免交叉行为，从而进一步降低晶格热导率。这种现象与点缺陷模型中掺杂缺陷影响点缺陷散射的强度类似，但两者源于不同的物理基础。本工作为理解掺杂对材料热输运性能的影响机制提供了全新的视角。

## D-20 同时具有 N、P 型 $\text{BiSbSe}_{3-x}\text{Te}_x$ 热电材料的制备及优化策略

田震、康慧君\*、王同敏

大连理工大学

热电材料因其输运载流子的类型不同，可分为 n 和 p 两种类型。现有研究大多通过在基体热电材料的不同位置进行元素替代掺杂，以产生电子或空穴，从而使其分别表现出 n 型和 p 型导电方式。这一方法会使由其构成的 n 型与 p 型热电臂在化学成分上存较大的差异，组成器件时产生大的界面势垒，阻碍载流子传输，降低热电转换的效率。为减少热电器件载流子在传递时所遇到的阻碍以及热电组件的应力集中，提高热电转换的效率和机械性能，本工作通过非热材料硒化锑( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ) 中引入 Bi、Te 元素，将其制备成具有一定热电性能的  $\text{BiSbSe}_{1.5}\text{Te}_{1.5}$  热电材料，并控制热压工艺，引入缺陷化学工程，突破性地成功制备了具有同种化学成分的 n 型、p 型  $\text{BiSbSe}_{1.5}\text{Te}_{1.5}$  热电材料。与此同时，对其进行成分优化，使近室温最大 ZT 值分别：n 型由 0.45(475 K) 提升到 0.54(475 K)，p 型由 0.14(375 K) 提升到 0.35(400 K)。此外，为进一步优化热电性能，分别对 n、p 型  $\text{BiSbSe}_{1.25}\text{Te}_{1.75}$  进行加压变形和加压烧结，使最大 ZT 值分别达到 0.60(n 型，470 K) 与 0.62(p 型，400 K)。本项研究工作将对开发设计性能优良的热电器件奠定基础并做出重要的贡献。

## D-21 富碲 $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$ 三元化合物力学性能与热电性能研究

王雨萌、仇鹏飞\*、史迅、陈立东

中国科学院上海硅酸盐研究所

无机半导体  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  最近被发现具有塑性变形能力且具有较为优异的热电性能，但  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体的晶体结构尚不清楚，“脆性-塑性”转变分界线尚不明确，热电性能仍有优化空间。本工作研究了  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体晶体结构，揭示了随 S 含量变化材料晶体结构的演变规律。当 S 含量大于 0.15 时，非晶出现，材料由单相转变为由两种或两种以上物相构成的同质多形体。通过系统的力学性能测试，发现  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体“脆性-塑性”转变分界线为 S 含量为 0.1 附近，并且晶体结构为  $\text{Ag}_2\text{Te}$  室温单斜结构和高温立方结构的  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体具有意想不到的良好塑性，该发现拓宽了塑性无机半导体种类。并且发现 Ag 含量是决定富碲  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体塑性的一个非常关键的参数，极微量的缺银会使塑性显著恶化。对具有塑性的富碲  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体的热电性能进行研究。其中， $\text{Ag}_2\text{Te}_{0.9}\text{S}_{0.1}$  样品的  $zT_{\max} \approx 0.6@600\text{ K}$ 。这项研究明确了  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体“脆性-塑性”转变分界线，为制备柔性热电器件提供了新的塑性热电材料，并为后续研究  $\text{Ag}_2(\text{Te,S})$  固溶体提供了启示。

## D-22 9-4-9 型 $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$ 中新相对电输运性能的影响

薛文华<sup>1,2</sup>、陈辰<sup>2</sup>、张倩<sup>2</sup>、王玉梅\*

1. 中国科学院物理研究所

2. 哈尔滨工业大学（深圳）

热电材料因其可以实现热能和电能直接转换而引起了广泛的关注。热电材料的性能由无量纲优值 ZT 决定， $ZT = S^2 \sigma T / (\kappa_L + \kappa_e)$ 。在该公式中，除了晶格热导率独立可控之外，电导率、泽贝克系数和电子热导率等电输运性质通过载流子强烈地耦合在一起。因此，适当的载流子浓度对于平衡这三个参数具有重要意义。一般而言，掺杂过渡金属或者稀土元素可以有效地调节载流子浓度，进而优化热电性能。 $\text{Ca}_9\text{Zn}_{4.5}\text{Sb}_9$  是一种典型的 p 型 Zintl 相热电材料，通过在 Ca 位合金化大尺寸原子 Eu，可以显著提升载流子迁移率，并降低晶格热导率<sup>[1]</sup>。此外，Eu 全部取代  $\text{Ca}_9\text{Zn}_{4.5}\text{Sb}_9$  中的 Ca 将导致晶体从正交结构 (Pbam) 转变到具有六方 (P63/mmc) 对称性的 2-1-2 型  $\text{Eu}_2\text{ZnSb}_2$  结构<sup>[2]</sup>。迄今为止结构转变的物理机制及其对热电性能的影响尚未清晰。

本工作以  $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$  ( $y = 0, 1.125, 3.375, 5.0, 5.05, 9.0$ ) 系列化合物为研究对象，利用球差矫正透射电镜在原子水平对  $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$  体系中的结构转变及其对热电性能的影响机制进行了研究。在 9-4-9 型  $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$  化合物中发现了一个新相，该相产生于 9-4-9 相，并逐渐长大最后单独成相。通过对新相结构及其与 9-4-9 和 2-1-2 相之间的关系研究，证明该相对于结构演变起着重要的作用。此外，XAS 表征发现 2-1-2 型  $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$  ( $y = 9.0$ ) 中 Eu 均为 +2 价，而在 9-4-9 型  $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$  ( $y = 1.125, 3.375, 5.0$ ) 化合物中，当新相产生之后，样品中开始出现  $\text{Eu}^{3+}$ 。我们进一步利用 EELS 分别对临界组分样品  $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$  ( $y = 5.05$ ) 中新相的 Eu 元素价态进行了研究。结果表明新相中确实存在  $\text{Eu}^{2+}$  和  $\text{Eu}^{3+}$  的混合价态， $\text{Eu}^{3+}$  等同于 n 型掺杂，降低了 9-4-9 型  $\text{Ca}_{9-y}\text{Eu}_y\text{Zn}_{4+\delta}\text{Sb}_9$  体系的载流子浓度，提高了材料的迁移率。因此，新相的产生使得电导率和塞贝克系数同时提升，实现二者有效解耦。

## D-23 硒化银柔性多孔膜：从自支撑无机膜到无机网络/有机骨架热电器件

林心语、王恒阳、韩广\*、周小元\*

重庆大学

硒化银柔性热电膜在低品位热能回收方面具有重要应用潜力。我们提出了一种成本低、可拓展的丝网印刷结合退火的策略，可用于合成不同孔密度的自支撑  $\text{Ag}_2\text{Se}$  无机膜。高密度的孔和薄的厚度赋予了  $\text{Ag}_2\text{Se}$  膜良好柔性，而具有更低密度孔的  $\text{Ag}_2\text{Se}$  膜则具有更高的功率因子。利用这种多孔微结构，我们制备了由  $\text{Ag}_2\text{Se}$  导电网络和聚二甲基硅氧烷（PDMS）骨架组成的复合结构，进一步提高了  $\text{Ag}_2\text{Se}$  膜在弯曲和扭转时的稳定性。最后，由五个  $\text{Ag}_2\text{Se}/\text{PDMS}$  热电腿组成的柔性原型热电器件在 30 K 的温差下可获得 20.2 mV 的输出电压和 810 nW 的最大输出功率，验证了  $\text{Ag}_2\text{Se}$  多孔膜的近室温应用潜力。本工作对于制备无衬底且具有良好柔性的自支撑  $\text{Ag}_2\text{Se}$  多孔膜提供了一个有效策略。

## D-24 Machine learning in the study of thermoelectric materials

刘惠军\*

武汉大学

Benefited from recent advances in big-data analytics, the machine learning method was proposed to accelerate discovery of materials with desired properties. In this talk, we apply several data-driven algorithms/strategies to establish high-throughput models that allows ready and accurate prediction on the Seebeck coefficient, the lattice thermal conductivity, and the ZT values of thermoelectric materials. Without any input from first-principles calculations, the models only require the information of crystal structures or fundamental properties of the constituent atoms, and can be readily generalized to systems drastically beyond the training data. Our work not only provides a large space for exploring high-performance thermoelectric materials, but also attests to the increasing importance of artificial intelligence-based approaches in modern materials discovery.

## D-25 以 SnSe 为例验证热电 ZT 的第一性原理计算

李武

宁波东方理工大学

考虑到对缺陷的计算很难，当前对单晶的热电 ZT 的计算不包括缺陷散射。在这项工作中，我们通过理论分析并以 SnSe 为例验证了不包含缺陷的 ZT 计算能够接近单晶中的实际测量值。进一步计算发现压力会导致 SnSe 的  $zT$  在特定方向显著增强。压力分别提高了 n 型沿 a 轴方向和 p 型沿 b 轴方向的热电功率因子，从而导致了  $zT$  的增加。在室温下，在 3.2 GPa 的压强下，n 型沿 a 轴方向和 p 型沿 b 轴方向的  $zT$  比常压下的值提高了一倍多。

International Journal of Heat and Mass Transfer 221, 125063 (2024)

D-26

## 石墨烯赝磁场驱动朗道声子寿命增长

张东波<sup>\*1</sup>、李建高<sup>1</sup>、郭迪<sup>1</sup>、李运美<sup>2</sup>、常凯<sup>3</sup>

1. 北京师范大学物理与天文学院，教育部多尺度自旋物理重点实验室
2. 厦门大学物理科学与技术学院物理系
3. 浙江大学物理学院，浙江大学量子物质中心

赝磁场是材料应变调控研究中的一个新奇物理。目前，声子赝磁场研究仅限于超材料中由结构或者应变对声波的调控。自然材料中，声子赝磁场是否存在尚未知晓。利用广义伯恩卡曼边界条件下的声子计算方法，我们计算了扭曲石墨烯纳米带的声子谱。结果发现，面外的声子振动模式发生了朗道量子化，相应的朗道能级按半整数分布，并且波函数表现出子晶格极化，以及空间局域化。这些特征与磁场中狄拉克费米子的行为一致。在此基础上，我们利用声子准粒子方法，进一步分析了声子朗道能级的动力学行为。虽然一般认为，当对称降低（如扭曲引起的），非谐增强。我们发现，扭曲下，当声子态发生朗道量子化后，寿命有显著增长。

## D-27 CsAg<sub>5</sub>Te<sub>3</sub> 基热电材料声子动力学属性的第一性原理计算和中子散射研究

王保田<sup>\*</sup>

中国科学院高能物理研究所

我们采用第一性原理计算结合中国散裂中子源多物理谱仪 MPI、J-PARC 非弹谱仪 AMATERAS 对近年来实验合成的具有超低晶格热导率的有序晶体 CsAg<sub>5</sub>Te<sub>3</sub><sup>[1]</sup>进行了研究。我们首次在有序晶体中观测到了类液体的声子行为，发现该材料的超低晶格热导主要是由于弱化学键合作用和声子非谐导致，粒子性声子和波动性声子在不同温度下对热导有不同的贡献，它们的耦合共同导致了热导的弱温度依赖<sup>[2]</sup>。另外，我们使用第一性原理计算及声子动力学计算详细研究了低热导晶体 CsCu<sub>5</sub>Se<sub>3</sub> 的晶体结构、化学键合、准谐及非谐声子动力学、晶格热导等，解释了晶格热导的弱温度依赖<sup>[3]</sup>。

参考文献：

[1]Lin, H.; Tan, G.; Wu, L.M.\*; Kanatzidis, M.G.; et al. Concerted rattling in CsAg<sub>5</sub>Te<sub>3</sub> leading to ultralow thermal conductivity and high thermoelectric performance, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2016, 55:11431–11436.

[2]Liu, P.F.; Li, X.Y.; Lin, H.\*; Zhang, J.R.\*; He, J.Q.\*; Wang, B.T.\*; et al. *Natl. Sci. Rev.*, 2024, nwae216.

[3]Xie Qing-Yu, Liu Peng-Fei, Ma Jiang-Jiang, Wu Li-Ming, Zhang Kai-Wang\*, and Wang Bao-Tian\*, Microscopic mechanisms of glasslike lattice thermal conductivity in tetragonal  $\alpha$ -CsCu<sub>5</sub>Se<sub>3</sub>, *Phys. Rev. B*, 2023, 108, 014302.

## D-28 多面体扭转在自然异质超晶格材料电热运输的作用

魏宾<sup>1,2</sup>、林元华<sup>\*1</sup>

1.清华大学

2.河南理工大学

新兴的氧化物基异质阴离子超晶格通过在不同层中引入额外的阴离子而具有可调或可扩展的物理性质，主要由于其固有的超低热导率，在热敏二极管和热电等领域显示出广阔的应用前景。为了解释这种低导热性，人们提出了许多解释，包括传统认知的弱层间相互作用和来自单一类型原子的振动。然而，热传导是源于原子的集体振动效应，但很少考虑超晶格的集体特征和各向异性声子效应，使上述机制相对简陋或无效。在这里，我们报道了一个多平带模型来理解四种典型超晶格硫氧化物  $\text{Bi}(\text{La})\text{Cu}(\text{Ag})\text{SeO}$ 、 $\text{Bi}_2\text{HoCu}_2\text{Se}_2\text{O}_4$ 、 $\text{Sr}_2\text{NiCu}_2\text{SeO}_2$  和  $\text{Sr}_2\text{FeCuSeO}_3$  中的热运输。通过非弹性 x 射线/中子散射测量和第一性原理模拟，在所有研究的系统中普遍发现了硒化物主导的多平带行为，它在氧化物主导的高色散声学和光学载热声子之间建立了桥梁，导致了巨大的散射效应。低热导率主要来自较重的  $\text{Bi}(\text{La}/\text{Sr})\text{O}_4$  四面体的具有大速度的高色散声子主导，而  $\text{Cu}(\text{Ag})\text{Se}_4$  四面体驱动多平面光学声子带（极低速度），其显著散射载热声子。这种平坦带是由弱的  $\text{Cu}(\text{Ag})\text{-Se}$  键引起的。此外，还根据多面体扭曲各向异性提出了平带的选择基础，并通过预测 13 种所研究化合物随各向异性变化的热导率得到了验证。我们的工作揭示了异质阴离子超晶格中热运输的一般机制，并通过操纵相关材料中的多面体畸变为控制热传导开辟了一条新途径。

## D-29 高取向金属硒化物热电薄膜与器件

宁兴坤、李志亮、王淑芳\*

河北大学

Metal selenides ( $\text{SnSe}$ ,  $\text{PbSe}$  and  $\text{Cu}_2\text{Se}$ ) has attracted great attention due to its good thermoelectric performance realized in bulks. For many micro-scale thermoelectric applications, thin films are desirable. Here, we report growing highly oriented metal selenide thin films by pulsed laser deposition, and enhancing the thermoelectric performance of these thin films by constructing ordered heterostructures and etc. In addition, high performance TE and PTE devices based on these highly oriented metal selenide thin films are also demonstrated.

## D-30 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 基合金表界面原子尺度结构演化机制

桑夏晗、薛泽帆、林蔚骁、崔文俊

武汉理工大学

热电材料是实现电能和热能直接转换的重要能源材料，通过 Seebeck 效应和 Peltier 效应分别实现热电发电和热电制冷。热电材料和器件在合成、复合和制造过程中产生丰富的表界面结构，对电热运输性能具有重要影响。深入研究表界面反应原子扩散和结构演化规律，单一界面的电热运输性能测量，在原子尺度调控表界面结构以优化性能，有望通过界面设计进一步提高热电材料和器件的性能。

为此，我们采用双球差校正扫描透射电子显微镜（STEM），通过构造 n 型和 p 型  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  合金与 3d 金属元素形成的异质界面，在原子尺度研究表界面处金属原子的不同扩散规律。密度泛函理论（DFT）计算结果表明 p 型 3d 过渡金属在  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  合金中面内扩散能量势垒显著低于面外扩散，其中 Ni 元素面外扩散势垒最低。在 p 型  $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$  (0001) 面与 Ni 异质界面处，我们成功观察到了 Ni 穿晶扩散行为。而在富 Bi 的 n 型  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  与 Ni 异质界面处，Ni 与 Te 选择反应导致界面出现大量多余 Bi 原子，阻碍 Ni 穿晶扩散，诱导界面晶粒异常长大、晶粒倾转和晶粒旋转。电镜观察表明 Bi 原子在  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  合金中的自扩散方式为沿 vdW 间隙扩散，难以发生穿晶扩散。这些工作为理解界面输运性能和设计热电材料界面结构提供了重要的结构支撑。

## D-31

## 界面热电

姜鹏\*

中国科学院大连化学物理研究所

热电材料可以实现热能和电能相互转化，既可以利用 Seebeck 效应实现温差发电，用于余热回收和深空深海特种电源等领域，也可以利用 Peltier 效应实现电制冷，用于热管理、探测器等领域。热电材料的性能取决于热电优值 ZT，其与 Seebeck 系数、电导率和热导率紧密相关，而这三个参数在单一材料体系中强烈耦合，如何突破三者之间的耦合是提升热电材料性能的关键。我们提出界面增强热电概念，通过构建由两种不同材料构成的薄膜异质结，两种材料分别具有大的 Seebeck 和大的电导率，从实空间解耦 Seebeck 系数和电导率之间的耦合。在该概念指导下，我们成功制备了  $\text{BiSbTe}/\text{SrTiO}_{3-x}$  和  $\text{CrN}/\text{SrTiO}_{3-x}$  两种异质结构，相比  $\text{BiSbTe}$ 、 $\text{CrN}$  薄膜以及  $\text{SrTiO}_{3-x}$  衬底，输出功率得到大幅提升（*J. Mater. Chem. A* 2020, 8, 10839; *J. Energy Chem.* 2022, 64, 16）。我们将界面增强热电概念进一步推广至界面增强光热电效应。在  $\text{CuNi}/\text{SrTiO}_{3-x}$  异质结构体系中，利用  $\text{SrTiO}_3$  高 Seebeck 系数和声子共振吸收特性（*Nat. Commun.* 2019, 10, 138），以及  $\text{CuNi}$  薄膜高电导率和稳定性，获得高性能光热电探测器（*Adv. Mater.* 2022, 34, 2204355）。在  $\text{Cu}/\text{Te}$  多层异质结构体系中，一方面利用界面增强概念提升复合薄膜的热电功率因子，降低器件噪音，另一方面通过调控异质结构光学吸收性能，增强光热电耦合，提升器件灵敏度。

## D-32

## 二维量子材料热电输运特性研究

赵云山\*

南京师范大学

二维量子材料，具有相对于三维结构离散化的态密度、栅极电压可调控的载流子密度、厚度可调的能带结构等优势，往往呈现优异的热电转化特性。本报告讨论二维层状材料在热电转化中新应用，通过搭建适用于二维体系热电测量的装置，挖掘其特殊的热电特性，以低对称晶格结构的少层五边形材料为研究载体，研究量子限域效应与能带工程对二维半导体材料的热电特性作用机理，讨论相变工程、改善肖特基势垒等策略带来的界面电阻降低，对其热电特性的提升规律，最后讨论二维材料中电声耦合效应作用以及载流子不同散射机制对提高其功率因子作用，为热电转化与有效热管理提供新思路 and 方向。

## D-33 硒化银的多尺度结构设计及热电特性的调控

林嘉河\*

浙江大学衢州研究院

硒化银( $\text{Ag}_2\text{Se}$ )在近室温具有高热电特性,极具发展潜力。当前其热电性能受制于载流子有效质量( $m^*$ ), $m^*$ 仅为 $0.1m_0$ ;同时Ag在高温下电离和迁移,形成大量间隙Ag和晶体缺陷,导致 $\text{Ag}_2\text{Se}$ 重复率低、难以制定性能优化策略。本研究从载流子有效质量调控的角度出发,以微波合成为主要手段,通过化学计量和分子轨道杂化的调控,实现塞贝克系数和电导率的优化。经数学建模和密度泛函理论(DFT)计算系统分析发现,减少Ag-5s轨道杂化同时引入Pb-6p轨道杂化使导带边缘平坦化,从而提高 $m^*$ 。此外,Pb的掺杂产生高密度的点缺陷、位错和晶界,有效降低晶格热导率。通过电子和声子输运的协同优化,Pb掺杂的 $\text{Ag}_{1.9}\text{Se}$ 在376 K时测得1.04的热电优值( $zT$ ),平均 $zT$ 值达到1.0。由 $\text{Ag}_{1.9}\text{Pb}_{0.01}\text{Se}$ 所组成的柔性热电发电机,在45 K的温差下实现了 $0.6 \mu\text{W}$ 的输出功率。本研究表明,通过调控空位和异价掺杂可增强 $m^*$ 同时也提高声子散射,并有效优化 $\text{Ag}_2\text{Se}$ 的热电性能,这一策略可拓宽至其他热电材料,助推热电发电和热电制冷的技术发展以及应用推广。

## D-34 n型硒化锡晶体热电材料研究进展

宿力中\*、冯孝坤

太原科技大学

构建高性能热电器件需要拥有性能相匹配的高性能p型与n型热电材料。硒化锡( $\text{SnSe}$ )晶体因其优异的热电性能引起了热电领域的广泛关注。当前,p型 $\text{SnSe}$ 晶体在300~773 K可取得~2.2的平均无量纲热电优值( $ZT_{\text{ave}}$ ),300 K时 $ZT$ 可达~1.5;n型 $\text{SnSe}$ 晶体在300~773 K也可获得1.7的 $ZT_{\text{ave}}$ ,但300 K时 $ZT$ 仅为~0.5,与p型 $\text{SnSe}$ 晶体仍有不小差距。优化n型 $\text{SnSe}$ 晶体的热电性能成为了实现全 $\text{SnSe}$ 基热电器件的研究重点。本文总结了n型 $\text{SnSe}$ 晶体的研究进展,分析了不同施主杂质掺杂的n型 $\text{SnSe}$ 晶体热电输运特性的异同,围绕载流子散射因子对比了固溶硒化铅对n型 $\text{SnSe}$ 晶体面内与面外电输运性能造成的不同影响,介绍了 $\text{SnSe}$ 相变对其热导率的影响,对n型 $\text{SnSe}$ 晶体热电材料后续研究的重点与难点进行了展望。

## D-35 铁电/热电功能基元复合薄膜制冷新材料制备及其性能研究

杨君友\*

华中科技大学

铁电材料的极化将产生空间电荷和形状变化,具有界面电荷效应及晶格应变效应。如果将铁电薄膜与热电薄膜材料复合形成复合薄膜,一方面可以利用复合薄膜材料中的铁电功能基元的极化产生的界面电荷效应,可以调控热电薄膜的电输运性能,另一方面铁电功能基元的晶格应变效应还可望对复合薄膜的热输运性能进行调控,从而对复合薄膜材料的电热输运性能实现有效调控,可望提升其制冷性能。采用磁控溅射、丝网印刷等工艺,分别制备了 $\text{Sb}_2\text{Te}_3/\text{PZT}$ 、 $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3/\text{PZT}$ 以及 $\text{PVDF}(\text{PZT})/(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$ 铁电/热电功能基元复合薄膜材料及其制冷器件,详细研究了制备工艺条件、微结构以及材料成分对复合薄膜电输运性能的影响。结果表明,铁电功能基元的极化调控对复合薄

膜的电输运性能可以产生显著影响，通过构建合理的铁电/热电功能基元复合薄膜和铁电功能基元的极化调控，可以有效提升复合薄膜材料的制冷性能。

## D-36 基于机械剥离法设计高性能织构化的层状热电材料

刘紫航\*、朱钰可、隋解和

哈尔滨工业大学

层状材料在热电应用中表现出潜力，其性能高低往往决定于微结构织构化强弱。本报告中重点介绍了层状晶体堆叠热变形（LCSHD）技术，利用各向异性结构特点诱导织构的快速形成，从而实现高热电性能。以 n 型多晶碲化铋（ $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ）为代表，基于 LCSHD 方法实现了  $45 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$  的高功率因子（PF）。在 LCSHD 样品中，还可发现位错缠结和低角度晶界，导致低晶格热导率和高达 1.2 的 ZT 值。所研制的七对  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  的模块，其转换效率为 6.4%，制冷性能也同样具有竞争力。此外，采用 LCSHD 方法也显著改善了包括  $\text{SnSe}_2$  和  $\text{SnSe}$  在内的层状热电材料 ZT 值。我们的研究结果为微结构织构化工程提供了新颖的途径，也促进了高性能层状热电材料的设计和发展。

## D-37 纳米晶碲化铋薄膜变形机制及其尺寸效应研究

冯骁斌\*、丁逸轩、段波、李国栋、翟鹏程

武汉理工大学

碲化铋是室温下具有优异热电性能的半导体材料，对热电器件商用化进程具有重要意义。然而，随着柔性器件日渐增长的需求，相对于碲化铋基薄膜热电性能的不断发展和其力学性能研究严重滞后，缺乏机械强度和韧性限制了其更进一步的商业应用。本工作通过磁控溅射制备一系列不同厚度（100-1500 nm）的纳米晶碲化铋薄膜，薄膜的力学性能具有强烈的尺寸依赖性。随着膜厚（晶粒尺寸）的不断增加，其纳米硬度呈现出先增加后减小的趋势，在晶粒尺寸为~20 nm 时达到临界峰值 36.9 GPa；在单轴拉伸下裂纹临界应变随膜厚增加不断增大，在 1500 nm 时达~7.3%，在 8 mm 弯曲半径下可反复弯折超过 1 万次（电阻率仅提高~20%），呈现出强度和柔韧性协同提高。研究发现，随着膜厚增加塑性变形机制由晶界协调塑性逐渐转变为位错约束层滑移，同时，晶内高密度生长层错有利于位错储存和运动。该工作为热电半导体材料强韧化提供了一种新的设计思路。

## D-38 低维纳米材料的表面功能化设计与热电性能调控

刘玉\*

合肥工业大学

热电器件由多组 P 型和 N 型无机半导体热电材料通过电串联及热并联的方式组装而成，构成一种全固态模块，其在清洁能源、空天科技和固态制冷等领域有重要应用前景。相比传统固相合成路径，液相合成法由于其温和的加工条件已成为制备纳米热电材料的主要策略。此外，该方法提供了精确调控方案，可合成具有特定形貌、尺寸、组成和晶体结构纳米材料。在多晶材料中，晶界/界面和高密度缺陷的存在是其显著特征，这些微观结构特性直接影响声电传输行为，从而决定材料的热电转换效率。然而，在多晶材料中进行缺陷工程调控极具挑战性，尤其是在经历高温退火和热压烧

结等后处理过程中，晶体生长和缺陷消失的趋势削弱了对材料电和热学性能的调控。这种限制尤其适用于“自下而上”策略构筑的纳米结构热电材料，但纳米粉体在热处理过程中的晶粒生长问题却并没有引起足够的关注。本研究聚焦于通过纳米颗粒表面化学性质的精细设计，以及分子配体作为功能基元对纳米结构材料的应用，旨在对纳米结构材料的电学性能进行优化，并通过可控的晶界和缺陷设计，构筑高性能的纳米复合热电材料。总之，以上策略为深入理解热电材料的微观传输机制和新型纳米复合材料的可控制备提供了新的思路。

## **D-39 热电磁相互作用和~1nm 界面铁层协同实现 300°C以下 Fe/Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> 材料的超高 zT 值**

付良威\*、金康鹏、聂浩楠、徐磊

南京理工大学

Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> by different sizes of iron to decouple the carrier mobility and thermal conductivity. Contrary to conventional wisdom, ferromagnetic microparticles enhance the figure of merit (ZT) more than superparamagnetic nanoparticles. This improvement is attributed to the higher carrier mobility which results from magnetic-induced overlapping of charge density and lowered grain-boundary barriers by ≈1 nm Fe layer segregation. Moreover, additional spin-phonon scattering reduces lattice thermal conductivity by over 40%. Consequently, Fe/Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> composite achieves a record-high ZT value of 1.73 at 573 K and maintains ZT > 1.5 over 450-573 K. The fabricated Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub>-CdSb module demonstrates a high conversion efficiency of 8.4% under a 275 K temperature gradient.

## **D-40 二维材料热电性能表征及热整流效应研究**

杨啸、赵海波、申亚南、王春阳、张鹏宇、张挺、郑兴华\*

中国科学院工程热物理研究所

热电参数是衡量热电材料热电转换效率的重要指标，而微纳热电材料热电性能测量尺度小、难度大，准确快速测量热电参数是材料优化设计及应用的基础和关键。材料的低维和微纳结构化不仅可以有效改变其热导率，影响电导率及塞贝克系数，从而明显提高热电优值，同时也会产生明显的热整流效应，进一步影响热电转换效率。因此亟需开展微纳尺度热整流效应与热电性能的耦合机制研究。本研究提出一种适用于微纳材料热整流效应及热电性能一体化的原位表征技术，并利用该技术实验研究热整流效应与材料热电性能的耦合关系。实验研究材料的微观结构形貌、温度与其热整流效应及热电性能参数的耦合机制，为微纳材料热电性能的改善提供可靠的实验支撑。

## D-41 载流子浓度优化与动态掺杂提高 n 型 PbS 宽温域的热电性能

侯正浩<sup>1,2</sup>、崔秋娟<sup>1</sup>、钱鑫<sup>1</sup>、王淑芳<sup>\*1</sup>

1. 河北大学
2. 石家庄学院

硫化铅(PbS)基热电材料因其组成元素储量丰富、价格低廉、热稳定性高等优势而备受研究人员关注。目前关于 PbS 的研究主要聚焦于通过元素重掺杂提高其载流子浓度,以获得优良的中高温热电性能。然而,这种方法导致 PbS 近室温热电性能较差,严重制约了其在制冷领域的发展。本工作通过掺杂微量的 GaBi,优化了 n 型 PbS 的载流子浓度,室温的功率因子达到  $21.70 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 。同时,形成的 Ga/Bi 间隙原子与位错缺陷增强了声子散射,降低了 PbS 的晶格热导率, $\text{Pb}_{0.99875}(\text{GaBi})_{0.00125}\text{S}$  样品在 300~773 K 的平均 ZT 值达到 0.58。为了进一步优化 n 型 PbS 在宽温域下的热电性能,通过引入 Cu 原子实现了载流子浓度的动态掺杂, $\text{Pb}_{0.99875}(\text{GaBi})_{0.00125}\text{S}+2\%\text{Cu}$  样品的平均功率因子增加至  $17.6 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ,平均 zT 值进一步提升至 0.65。本工作为优化 PbS 近室温区热电性能提供了新方法,对于推动 PbS 基热电材料在制冷领域的应用具有重要意义。

## D-42 BiCuSeO 基热电材料的缺陷结构调控与性能优化研究

李周<sup>\*1</sup>、葛炳辉<sup>1</sup>、宋吉明<sup>1</sup>、肖翀<sup>2</sup>

1. 安徽大学
2. 中国科学技术大学

BiCuSeO 基热电材料具有本征高 Seebeck 系数和低晶格热导率,在热电领域具有一定的研究热度。然而其本征低电导率限制了这类材料的热电性能和实用性研究。这种本征低电导率主要受制于层内电荷受限和层间电荷输运受阻等原因造成的本征低载流子浓度,因而如何改善上述弊端促进层间电荷传输、显著提升载流子浓度是优化其热电性能的关键。另一方面,在电导率大幅提升(电子热导率被动升高)的同时,如何通过构筑多维度/跨尺度晶体缺陷实现“全波段”的载热声子散射以大幅降低晶格热导率,并有效平衡声子散射与载流子传输之间的矛盾,实现低热导率和高迁移率的共存也是值得研究的重要方向。针对上述诸多问题,本报告将从缺陷结构调控的角度出发介绍几种有效的实验策略和具体研究实例。这些实验策略和研究结果为调控 BiCuSeO 的热电输运性能提供了有益的思考,也进一步提升了 BiCuSeO 基热电材料在中温区范围的应用潜能。

## D-43 全镁基热电材料与器件的机遇与挑战

赵怀周<sup>\*</sup>、朱航天、张晓凡、郭凯炜、陈楠、杨佳伟

中国科学院物理研究所

近年来,国际热电领域在近室温新型热电材料探索方面取得了引人瞩目的成绩,其中 N 型  $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$  和 P 型  $\text{MgAgSb}$  材料因为优异的宽温域热电性能和良好的机械加工性能,成为最有希望替代商业碲化铋的近室温热电材料体系,而针对这两种材料的性能提升和器件研发则成为热电领域的研究焦点之一。报告人将介绍与合作者在全镁基热电材料及器件研发方面取得一系列重要进展,其中包括: P 型  $\alpha\text{-MgAgSb}$  基材料的合成与热电性能,  $\alpha\text{-MgAgSb}$  的短程离子迁移和本征低热导特性,

横波声学声子抑制与声子传输机制等。在 N 型镁基材料方面,介绍关于  $Mg_3(Bi,Sb)_2$  近室温热电性能提升、化学与热稳定性增强、 $Mg_3(Bi,Sb)_2/BiSbTe$  基热电制冷模块的构筑与表征等。最近,报告人研究组通过改进合成装备和工艺,克服了由于 P 性  $\alpha-MgAgSb$  成相过程中极易形成银空位缺陷导致电学性能不佳的长期挑战,制备出具有整数计量比的  $\alpha-MgAgSb$  材料,并通过近相变点退火,实现具有马赛克多晶特征的大晶粒生长,获得了载流子迁移率为  $93.3\text{ cm}^2V^{-1}s^{-1}$ , 室温至  $300^\circ\text{C}$  间平均  $zT$  达到 1.4 的高性能材料样品,为  $\alpha-MgAgSb$  材料报道最高水平,同时也明显超越了对应的 P 型碲化铋材料。进一步通过与高性能 N 型  $Mg_3(Sb,Bi)_2$  材料搭配,构筑出具有 7 对热电臂的发电模块,最大热电转换效率达到 12%,突破了我国“十三五”期间国家重点计划所制定的 10% 的既定目标,也是目前近室温热电转换效率最高报道值。最后,虽然具有优异的热电转换性能,但全镁基热电器件在应用方面仍面临艰巨的挑战和很大不确定性。

## D-44 氧化物薄膜热电偶的叶片温度实时监测技术研究

曹丽莉<sup>\*1</sup>、罗炳威<sup>2</sup>

北京信息科技大学

中国航发北京航空材料研究院

共电子合金化是降低热电材料晶格热导率的有效且常用方法,异价掺杂则是调控热电材料载流子浓度以实现电学性能优化的最佳策略。对于态密度有效质量较小的轻带热电材料,其最优载流子浓度较低、异价掺杂量较小,掺杂元素对于声子热运输的影响往往较弱。而态密度有效质量大的重带热电材料通常需要高剂量掺杂(接近甚至超过 10%)以实现电学性能优化,掺杂元素对于其声子热运输将产生显著影响,但是其作用机制尚不明晰。在本工作中,我们发现在相同取代量的情况下异价掺杂对于重带热电材料声子热导率的抑制作用远大于共电子合金化。进一步结合高低温热电运输测试、第一性原理计算、非弹性中子散射实验等,我们发现异价掺杂对于重带热电材料的声子结构和态密度有着显著的调制作用,从而引起声子热导率的大幅下降。这一研究结果表明选择合适的异价掺杂元素对于同时优化重带热电材料的电学和热学性能具有重要意义。

## D-45 面向热电-氢敏传感器的 SiGeSn 热电薄膜材料与器件的研究

赖华俊<sup>1</sup>、苗蕾<sup>\*2</sup>

1. 广西科学院

2. 广西大学

氢能是未来国家能源体系的重要组成部分以及用能终端实现绿色低碳转型的重要载体,但氢气具有易爆炸、易扩散、高燃烧热和火焰传播速度快等潜在威胁。精准快速的氢气传感器是保障安全使用氢能源的重要前提,而目前商业化的电阻型金属氧化物氢敏传感器存在高能耗、选择性差和生命周期短等缺陷。基于赛贝克效应的热电器件具有反应灵敏、无机械运动、寿命长、体积小、质量轻等独特优势,在废热回收和传感领域已经得到广泛应用,一种由热电器件与氢敏材料组成的热电-氢敏传感器以其快速响应、高选择性和低能耗的特点,在蓬勃发展的氢能源产业背景下逐渐受到关注。针对目前研究的热电-氢敏传感器响应弱、能耗高和环境不友好等问题,我们利用磁控溅射结合离子注入和快速热退火等手段研制了一种面向氢敏传感的 SiGeSn 面内型高性能热电薄膜器件。采用

高真空磁控共溅射制备  $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{Sn}_y$  薄膜，结合硼/磷离子注入工艺对其进行 p/n 型掺杂，最后采用快速热退火对薄膜进行掺杂原子激活与原位析出第二相。研究表明，快速退火工艺在激活载流子的同时，还会促使 Sn 纳米第二相形成。同时 Sn 第二相对基体材料产生调制掺杂效应，在维持迁移率不变的情况下大幅度提升载流子浓度，一定程度上弱化的电导率和 Seebeck 系数之间的耦合关系，使得样品在室温附近的功率因子得到显著增强。我们在 p/n 型样品中均观察到了类似的现象，在近室温范围内，获得  $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{Sn}_y$  薄膜材料的最大功率因子分别为  $12.21 \mu\text{W m}^{-1}\text{K}^{-2}$  (n 型) 和  $19.50 \mu\text{W m}^{-1}\text{K}^{-2}$  (p 型)。在此基础上制作面内型热电薄膜器件，首先使用聚酰亚胺胶带在衬底上制作热电臂掩膜图案，并采用三靶射频磁控共溅射沉积厚度为 100 nm 的  $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{Sn}_y$  无定型热电臂薄膜，随后对不同区域其进行硼、磷离子注入，然后采用 RTA 快速热退火对器件进行载流子激活，最后溅射 Ni 作为电极，制得包含 3 对 p-n 热电对的薄膜器件。测试结果显示，所制器件在近室温范围内最大开路电压为 14.8 mV ( $\Delta T=60\text{K}$ )，本工作为近室温范围内 Si 基热电-氢敏传感器的研究开发提供了重要的参考依据。

## D-46 a-MgAgSb 中反位缺陷调控优化热电低温制冷性能

李娟\*<sup>1</sup>、陈启用<sup>2</sup>、冯江河<sup>1</sup>、席丽丽<sup>2</sup>、刘睿恒<sup>1</sup>

1.中国科学院深圳先进技术研究院

2.上海大学

Thermoelectric cooling requires high thermoelectric performance near or below room temperature. a-MgAgSb is one of the limited high performance thermoelectric materials near room temperature, the traditional strategies of doping inevitably deteriorates the carrier mobility which is detrimental to low temperature thermoelectric performance especially in low temperature range. In this work, it's found that Mg-Ag anti-site exist and forms staggered nano scale anti-site zone mingled with the matrix. This structure greatly scatters phonons while the carriers are negligibly influenced because of the unchanged carrier transport channel. By manipulating the formation energy of Mg-Ag anti-site with Zn doping, both the carrier transport and phonon scattering is enhanced. As a result, an average  $\sim 0.72$  between 200~400 K and a device a-MgAgSb/  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  with  $\Delta T \sim 60$  K at 325 K is obtained, demonstrating anti-site manipulation an effective way for thermoelectric cooling performance enhance of a-MgAgSb.

## D-47 小温差驱动热电催化材料及应用

李顺\*、李春磊、张建明

江苏大学

熵工程作为一种新的合金化方法，是降低晶格热导率( $\kappa_L$ )和提高热电性能的有效策略。然而，大部分 half-Heusler 合金(HHs)中的熵工程应用均未达到预期效果。较低的塞贝克系数和模糊的电子和声子输运机制阻碍了中高熵 HHs 热电性能的进一步优化。本文报道了 n 型 ZrCoSb 基中熵 HHs 的合成制备，微观组织结构、理论计算以及相应的热电性能研究。结果表明，中熵 HHs 中  $\kappa_L$  的有效降低主要是由于原子无序，空位、层错、位错以及纳米畴/相对声子的散射。利用密度泛函理论计算，我们将较低的塞贝克系数归因于较低的态密度峰值和单带有效质量。通过优化放电等离

子烧结温度,  $Zr_{0.6}(NbTa)_{0.4}CoSb$  中熵 HH 合金在 923 K 下获得了  $1.27 W m^{-1} K^{-1}$  的超低  $\kappa_L$ , 比原始  $ZrCoSb$  HH 合金降低了 82.9%。结合优化的功率因子,  $Zr_{0.6}(NbTa)_{0.4}CoSb$  中熵 HH 合金的热电优值  $ZT$  最大, 达到~0.42。该研究中熵 HH 合金热电性能的进一步优化提供了理论指导。

## D-48 基于选区激光熔化技术集成微型热电器件的动态热管理平台

周曼、祝薇\*、邓元

北京航空航天大学

随着 5G 电子设备高密度集成、大功率输出和持续运行需求不断增长, 使其面临产热量高和散热困难的挑战, 需要开发一种设计良好、高效主动制冷技术来处理电子设备的散热问题。热电制冷技术因其易于集成、无噪音和高响应速度等优势, 在实现电子元件局部制冷和高效热管理方面显示出巨大的应用潜力。然而, 基于传统复杂制备工艺的热电器件难以满足高响应度、高分辨率、快速响应和灵活结构设计等需求。为了构建基于微型热电器件的动态热管理平台, 本研究提出了一种双面打印选择性激光熔化 (D-SLM) 和选择性激光烧蚀 (SLA) 相结合的激光集成制备创新技术。通过优化外部温度场辅助下的激光工艺窗口, 采用 D-SLM 技术实现 n 型  $Bi_2Te_3$  厚膜的局部 p 型改性, 从而获得基于单一材料的高精度 p-n 图案。此外, 通过增加激光能量密度并引入后退火工艺进一步提高厚膜的热电性能。结合选择性激光烧蚀技术, 可以实现形状灵活、尺寸微小的动态热平台的快速制备。最后, 设计的  $4 \times 4$  像素级热编程平台可以实现局部温度的主动调控, 像素点尺寸为  $2 mm \times 2 mm$ , 温差达到 3 K, 响应时间为 0.143 s。这项工作为制备动态热可编程信息显示和主动局部控温功能的热电器件提供了一种创新且有效的方法。

## D-49 ZrCoSb 基半赫斯勒材料的氧化行为研究

顾津宇、宋庆峰、柏胜强\*、孙宜阳、陈立东

中国科学院上海硅酸盐研究所

半赫斯勒材料因其具有高热电性能与力学性能、环境友好等特点, 已经引起了工业界和科学界的广泛关注。其中,  $ZrCoSb$  基材料已实现批量稳定制备, 材料最大  $zT$  值达~1.0@1000K, 器件转换效率超过 10%, 是一种极具应用前景的高温热电发电材料。然而热电器件的实际应用需要考虑工作环境下的服役稳定性。研究显示, 环境中的氧会导致热电材料的化学成分和微观结构发生演变, 从而降低器件的服役寿命和可靠性。本论文以  $ZrCoSb$  基半赫斯勒材料为研究对象, 采用第一性原理计算与实验相结合的方法, 研究并解析了三元  $ZrCoSb$ 、四元  $Zr_{0.5}Hf_{0.5}CoSb$  和五元  $Zr_{0.5}Hf_{0.5}CoSb_{0.8}Sn_{0.2}$  材料在 723-1073K 温度范围内的表面氧化过程, 揭示了材料表面氧化行为机理, 分析了掺杂元素对材料表面氧化行为的影响。实验结果表明, 三种  $ZrCoSb$  基材料的氧化过程均受服役温度影响。723 K  $\leq T \leq 823(873)$  K 时, 材料表面氧化呈现外氧化行为特征, 氧化过程由反应主导, 表面生成  $ZrO_2$  (或掺杂  $ZrO_2$ )、 $(SnO_2)$ 、 $Co_3O_4$  和  $CoSb_2O_6$  交替组成的氧化层 (简称交替氧化层)。823(873) K  $< T \leq 973(1023)$  K 时, 材料表面氧化呈现外氧化和内氧化行为相互竞争特征, 表面氧化过程由扩散主导, 表面生成由交替氧化层和由  $ZrO_2$  (或掺杂  $ZrO_2$ ) 与  $CoSb$  混合构成的氧化层 (简称致密氧化层) 组成的多层结构。973(1023) K  $< T \leq 1073$  K 时, 材料表面氧化呈现内氧化行为特征, 氧化过程由扩散

主导，表面生成 CoSb（或氧化 CoSb）层和致密氧化层。本研究发现在相同氧化机理下，不同掺杂元素会影响材料的氧化速率与内-外氧化的转变温度。第一性原理计算结合实验动力学分析揭示了 ZrCoSb 基材料氧化的两步化学反应过程、Co/Sb 在高温/低氧分压下不发生氧化的原因、致密氧化层（或掺杂 ZrO<sub>2</sub>）对 O、Zr、Hf 的扩散的阻碍作用及不同掺杂元素影响材料氧化行为的途径。基于上述结论，本研究提出通过原位氧化生成致密氧化层提升 ZrCoSb 基材料抗氧化性的方法。实验结果表明，原位生成致密氧化层均可显著提升材料的抗氧化性能。

## D-50 AgSbTe<sub>2</sub> 中温材料性能调控与器件制备

张宇<sup>\*1</sup>、夏凯阳<sup>1</sup>、胡惠平<sup>1</sup>、朱铁军<sup>1,2</sup>

1. 浙江大学温州研究院

2. 浙江大学

热电器件可以实现热能与电能的可逆转换，在制冷和发电领域具有广泛的应用。然而，热电器件的低转换效率是目前面临的主要挑战。目前，低温热电材料(<400K)和高温热电材料(700-1000K)均取得了显著进展，多种热电材料的热电优值(zT)突破 2 及以上。然而，中温区域(400 - 700K)的热电材料性能欠佳，仍有待提升。本研究针对 p 型中温材料 AgSbTe<sub>2</sub> 进行缺陷调控与能带工程设计，优化其电传输性能，其最大热电优值在 673 K 时达到 zT~2，且在 300 至 673 K 的宽温区范围内，平均热电优值 zT<sub>ave</sub>>1.3。这一性能源于银空位 (V<sub>Ag</sub>) 浓度的显著增加带来的载流子密度提升，以及价带顶平坦化和 n 型 Ag<sub>2</sub>Te 杂相受抑制所导致的塞贝克系数的大幅提高。采用优化后的材料制备的单对热电器件在温差为 370 K 时，能量转换效率超过 10%。研究表明，优化后的 AgSbTe<sub>2</sub> 材料可以在中温范围内实现高效废热回收。

## D-51 Ag<sub>2</sub>Se 可作为 n 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 热电材料更坚韧的替代品

刘敏、裴艳中<sup>\*</sup>

同济大学

近半个世纪以来，基于 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 的近室温热电材料一直是热电商业化器件应用的主流。由于 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 材料具有显著的层状结构，尤其是 n 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>，通常需要利用其织构化特征来实现优异的面内热电性能，然而，这也使得材料在韧性方面面临重大挑战。本工作以 Ag<sub>2</sub>Se 作为 n 型热电材料以替代传统的 n 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>。研究显示，Ag<sub>2</sub>Se 不仅在室温附近展现出卓越的热电性能，还具有优异的塑性。在热电器件中使用 Ag<sub>2</sub>Se 作为 n 型支腿，不仅实现了在室温±50K 范围内与商业模块相媲美的发电效率和制冷温差，并且在长期发电、制冷服役性测试中表现出极高的稳定性。Ag<sub>2</sub>Se 优异的韧性为器件的更广泛应用开辟了新的可能性。

## D-52 热电半导体材料的电子-声子耦合与散射机制研究

邓天琪\*

浙江大学杭州国际科创中心

半导体材料中的载流子输运性质主要受限于其能带结构与散射机制，而电子-声子耦合与电子-杂质散射是影响其迁移率、电导率、塞贝克系数等性能的关键机制。基于主要微观物理机制如电声耦合与杂质散射的第一性原理研究，受限于其精确计算方法的计算复杂度，仍主要应用于少数材料。我们基于密度泛函微扰理论（DFPT）计算，发展了基于长-短程耦合分离的高效电子-声子、电子-杂质散射与电子玻尔兹曼输运计算方法与软件，并应用该方法软件构建了含有一千七百余种半导体材料的电荷输运性质数据集，涵盖从 200K 到 900K 的温度范围内、从本征到重掺杂条件下的载流子散射与电学性质。该数据集显示在多数半导体材料中，电子-光学声子耦合主导了载流子的散射。即使在重掺杂条件下，电子-光学声子散射仍十分显著。此外我们还对不同温度与掺杂条件下的载流子散射机制开展了深入研究，探究其变化规律与散射机制、热电性能的关联。结合该数据集与机器学习模型，我们分析了决定半导体电学性质的本征结构特性，利用模型预测了约两万种半导体材料的迁移率，并探究了其在半导体热电性能预测、新热电材料开发中的应用。

## D-53 热电材料力学行为理论方法及强韧化研究

李国栋\*、段波、冯晓斌、翟鹏程、张清杰

武汉理工大学

热电器件的工业化应用要求材料兼具优异的热电性能和力学性能。近 20 年来，国际热电领域在热电性能的提升上取得了突破性进展，热电性能优值  $zT$  突破 2.0，为热电材料在重要领域的应用奠定了基础。但热电材料的力学性能研究相对滞后，热电材料强度和韧性较差，在外载作用下容易破裂，导致机械加工性能较差、服役可靠性差，这一瓶颈问题极大限制了热电材料的规模化应用。团队一直致力于热电材料力学性能研究方法及强韧化机制研究，本次报告将以  $\text{InSb}$ 、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 、 $\text{Ag}_2\text{Te}$  热电材料为例，重点介绍团队在热电材料力学性能增强理论方法、热电材料强韧化新机制、电热输运与强韧化协同调控等方面取得的最新研究进展，研究成果为设计制备高热电性能和高力学性能的热电材料提供了理论指导。

## D-54 基于虚晶近似的电子-合金相互作用的第一性原理计算

刘德欢\*<sup>1</sup>、赵怀周<sup>2</sup>、杨荣贵<sup>3</sup>

1. 华中科技大学

2. 中国科学院物理研究所

3. 北京大学

虚晶近似方法是一种简化复杂合金体系的有效手段，通过将合金中的不同元素按一定概率均匀分布在晶格上来模拟合金的电子结构。此方法能够有效处理载流子与合金中无序分布之间的散射效应，进而在一定程度上预测合金体系中的电子输运行为。本研究基于虚晶近似理论，运用第一性原理计算方法，系统地研究了  $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Pb}_x$  合金的电子-合金相互作用及其对电子输运性质的影响。我

们依照合金组分比例混合 Sn 与 Pb 的赝势，并利用密度泛函理论计算  $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Pb}_x$  虚晶格的电子能带结构、合金微扰势能及电子-合金散射率。结合  $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Pb}_x$  虚晶格的电子-声子散射率，我们采用玻尔兹曼输运方程，获得不同组分的  $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Pb}_x$  合金的电导率、电子迁移率、塞贝克系数以及电子热导率等重要热电参数。研究表明， $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Pb}_x$  合金中的电子-合金散射效应显著降低了电学输运性质，且表现出随合金组分变化的非线性行为。本研究通过结合虚晶近似和第一性原理计算，分析了  $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Pb}_x$  合金的电子-合金相互作用及其对电子输运性质的影响，为优化合金的热电性能提供了理论依据，同时也为合金半导体热电参数的定量分析提供了基于全第一性原理的计算手段。

## D-55 轨道-晶格相互作用诱导晶体非晶晶格热导行为

谢琳<sup>\*1</sup>、王艳<sup>2</sup>、何佳清<sup>2</sup>

1. 大湾区大学（筹）物质科学学院
2. 南方科技大学物理系

通常，晶体的晶格热导率随温度的上升而表现为单调下降的现象。与之相反，非晶的晶格热导率则随温度上升表现为单调上升直至饱和行为，两种物理现象泾渭分明。近年来，研究人员在部分晶体材料（例如  $\text{BaTiS}_3$ ）中观察到其反常的“非晶”热导行为，该独特的行为为新型热电材料的设计提供了一个新的研究思路，而其具体物理机制还有待深入研究。我们结合第一性原理杂化泛函计算和机器学习分子动力学方法研究了其中代表的  $\text{BaTiS}_3$  体系，通过杂化泛函计算发现  $\text{BaTiS}_3$  中由于 Ti 3d 电子和 S 4p 电子相互作用而产生了极强的 pseudo Jahn-Teller 效应，并导致 Ti-S 八面体晶格结构不再是理想的八面体结构，而是自发转变成畸变的八面体结构。进一步结合机器学习分子动力学计算，我们发现该畸变八面体结构在低温下表现为面内的静态赝自旋无序，而高温下表现为面内的动态赝自旋无序，由此我们解释了其面内非晶热导行为。该轨道-晶格相互作用不仅可以用于解释  $\text{BaTiS}_3$  体系的独特非晶热导行为，还可以统一用于阐明例如 MTe (M=Pb, Sn, Ge) 这类低热导材料中的强非谐以及低晶格热导物理现象。该相互作用还将启发我们去深入利用轨道，自旋以及电荷等多种自由度与晶格进行耦合，探索新的物理机制以及新的低热导材料体系。

## D-56 无铅卤化物钙钛矿 $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$ 超低热导率的微观机制

陈星宇<sup>\*</sup>、张家伟、仇鹏飞、史迅

上海硅酸盐研究所

卤化物钙钛矿因其卓越的光学和光电子特性而受到广泛关注。然而，许多卤化物钙钛矿的热导率尚未被深入研究。本工作开发了一种具有超低晶格热导率  $\kappa_L$  的全无机空位有序卤化物钙钛矿  $\text{Cs}_3\text{Bi}_2\text{Br}_9$  (在 300K 时，为  $0.24\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}$ ) 及其弱的温度依赖性 (约  $T^{-0.27}$ )。通过结合实验热容、拉曼光谱测量以及第一性原理计算，其超低  $\kappa_L$  主要归因于强非谐的低频、软声子模。研究表明，高度非谐的声子来源于 Bi 6s<sup>2</sup> 孤对电子与 Bi 6s 和 Br 4p 轨道反键态的相互作用。理论计算显示，这些低频声子主要来源于由强 Br 热振动导致的  $\text{BiBr}_6$  八面体动态畸变和强 Cs-rattling，同步辐射 X 射线原子对分布函数分析也证实了这一点。此外， $\kappa_L$  的弱温度依赖性可以归因于低频声子模式引起的声子的波状隧穿效应，本研究揭示了低能声子的强非谐性和波状隧穿效应，为设计具有固有低的  $\kappa_L$  的高效空位有序卤化物钙钛矿提供了新思路。

D-57

## 溶液合成热电材料

徐磊\*

南京理工大学

人类面临着严峻的能源短缺和环境污染问题。半导体热电转换材料可以同时实现节能和减排的诉求。为了提高热电转换性能，纳米科学的概念早已被引入该领域，但经过 30 余年的发展，依然局限于量子限域效应和晶界声子散射等少数范式。报告人使用溶液化学法合成热电材料，发展了一些新颖的提升热电优值的策略，例如单原子配位单元掺杂，亚纳米团簇复合，亚纳米-纳米级孔，位错诱导晶粒反向生长，表面能驱动晶胞重构，纳米晶几何形貌诱导的造孔等，希望拓展热电材料学的研究范式。

D-58

## n 型碲化铋体系中的有机复合及热电性能优化

张建\*、杨淑幻、李姝瑾、陈涛、李地、秦晓英

合肥物质科学研究院

针对 n 型碲化铋热电材料体系，利用微结构设计，引入有机/无机功能基元，基于缺陷工程对其热、电运输过程的调控，探索其物理机制，进而实现热电性能的优化。结果表明：（1）导电聚苯胺（PANI）纳米粒子与  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  之间的界面势垒会引发能量过滤效应，使得热电势  $S$  增强。另外，复合体系的晶格热导率显著降低；分析表明复合体系中的 PANI 粒子以及相界面增强了声子散射。最终，在  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}/1.5 \text{ wt.}\% \text{ PANI}$  复合体系中获得最大  $ZT=1.22$ （345 K），相比 BTS 增大了约 42%。（2）基于聚吡咯（PPy）纳米粒子及相界面对声子的强烈散射，复合体系的热导率显著降低。添加 2.0 wt.% PPy 的复合样品在 300 K 时低至  $0.26 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ，比 BTS 基体下降了 57%。最终，在  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}/0.5 \text{ wt.}\% \text{ PPy}$  样品中取得最大  $ZT=1.19$ （375 K），平均  $ZT$  值为 1.09（300-500 K），分别比 BTS 基体提高了约 34%和 30%。（3）在此基础上，研究了  $\text{BTS}/1.5\text{wt.}\% \text{ AgBi}_3\text{S}_5/\text{PPy}$  双重复合体系的热电性能，我们发现，双复合体系依然能维持较高的 PF 值，这是因为  $S$  的显著提升弥补了电阻率  $\rho$  的增加。另外，PPy 和  $\text{AgBi}_3\text{S}_5$  纳米粒子以及相界面强烈散射声子，从而显著降低  $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$  的热导率，从而进一步优化了材料的热电性能。最终，含 1.5wt.%  $\text{AgBi}_3\text{S}_5$  和 0.5 wt.% PPy 的复合样品的  $ZT_{\text{max}}$  值达到 1.30（348 K），比 BTS 基体大了 46%。通过这些研究，希望为相关材料的研究提供一些借鉴和参考，并为热电材料性能的优化提供理论依据和新的思路。

D-59

## 高性能 P 型 SnSe 晶体的制冷性能开发

秦炳超\*、赵立东

北京航空航天大学

SnSe 材料因其独特的声电传输特性而引起了热电研究人员近年来的广泛和重点关注，尤其是 P 型 SnSe 晶体，通过空穴掺杂激活多价带传输，其宽温域热电性能得到了显著优化。在此基础上，近年来，我们针对 P 型 SnSe 晶体的晶体结构、电子能带结构和微观缺陷结构，开展了一系列的研究工作，由此实现了其宽温域热电性能的显著提升，平均  $ZT$  最高可达 2.0 以上。并且，通过这些性能优化策略，P 型 SnSe 晶体的近室温热电性能也逐渐引人关注，300K 下的  $ZT$  值超过 1.0，已经达到了

商用碲化铋材料的水平。因此，我们尝试设计并搭建了基于 P 型 SnSe 晶体的热电器件，并在中低温温差发电和近室温电子制冷两个方面实现了不俗的效果。基于 SnSe 材料在元素储量、成本、环境友好等方面的优势，其在应用端展现出了较大的潜力。未来，通过改善单晶生长工艺以实现高质量、优良力学性能晶体的稳定制备，并针对单晶材料开展系统的热电器件界面设计，基于 P 型 SnSe 晶体的热电技术有望支撑并促进更多重要的应用场景。

## D-60 界面结构设计优化氧化锌薄膜近室温热电性能

周志方<sup>1,2</sup>、林元华<sup>\*2</sup>

1.中南大学粉末冶金研究院

2.清华大学材料学院

氧化锌 (ZnO) 基热电材料因其原料储量丰富，制备工艺简单，无毒无害以及优异的高温热稳定性和化学稳定性等优势受到广泛关注与研究。然而，低电导率和高热导率限制了氧化锌的热电应用。镓元素 (Ga) 掺杂的氧化锌 (GZO) 热电薄膜由于其载流子浓度的提升以及低维度下声子传输的受限，可同时实现电导率的提升及热导率的下降。尽管如此，塞贝克系数在载流子浓度提升的同时会有一定的降低，使得 GZO 薄膜的热电性能仍低于其它高性能热电材料。为更好地提升 GZO 薄膜的热电性能，本工作设计了多种界面结构，包括三明治结构、多层界面结构、引入同质缓冲层界面等，结合能量过滤效应、缺陷工程及界面优化等策略协同优化电导率和塞贝克系数，GZO 薄膜的室温功率因子达到了  $333 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ ，为氧化物热电薄膜的结构设计与性能提升提供了新的视角，并提升了其在近室温区范围内的应用潜力。

## D-61 新颖硫属化物的创制及物性探索

马妮、肖翀\*

中国科学技术大学

固体无机化学是设计材料的基石，对实现功能材料的合成至关重要。我们重点关注晶体生长与设计，探索材料功能化结构设计与固相反应机理，试图发展无机固体材料体系普适可控的合成方法及高质量单晶制备方案。从无数次合成工作中不断总结固态合成经验，针对不同材料体系，给出不同的合成路径，总计合成 20 例新材料。提出多重配位原子构筑结构基元，结构基元重组及多层堆叠的结构设计思路，通过选取不同配位的原子构筑结构基元的多样性。同时，相同结构基元的不同连接方式，也能够搭建新结构模型，例如通过将  $\text{Cu}_4\text{Se}_4$  与  $\text{CuSe}_2$  基元进行不同方式的几何连接，获得了几例结构新颖的新材料。此外，对于低维材料体系，结合多重配位原子及多层堆叠策略，获得了 AA'A"型、ABAB 型、ABCD 型等多种新型低维无机固体。进一步，在结构设计的基础上，聚焦固态反应，其具有高选择性、高产率，是制备新型固体材料的主要手段之一。以新型层状固体  $\text{Cs}_2\text{Ge}_3\text{Ga}_6\text{Se}_{14}$  为例，本文展示了其结构设计、固态合成及其结构表征，从投料比/反应时间/反应温度三个变量来调节，规避反应副产物或竞争相，优化反应调节，从而实现目标化合物的纯相合成，希望为无机固体新材料的探索研究提供一些新思路。

## D-62 兼顾制冷量与能效的热电制冷器件与系统通用设计策略

朱康<sup>1</sup>、刘玮书<sup>\*2</sup>

1. 中山大学深圳校区
2. 南方科技大学

作为一种固态制冷技术，热电制冷能够对冷却对象进行快速响应和精准控温，在电子/光电器件冷却、人体热管理等领域具有广泛的应用前景。在实际应用中，热电制冷器件与系统的性能不仅受到热电材料性能的制约，还会受到器件结构和外部热环境的综合影响。在有限的室温热电材料性能的背景下，面向真实应用场景的热电制冷器件与系统的优化设计，对于实际制冷性能的提升显得尤为重要。为了构建单级热电制冷器件与系统的通用设计策略，本文从热电转换过程的基本控制方程和真实的热边界条件出发，首先推导出实际热环境中热电制冷三大性能指标的近似理论关系式，然后在此基础上对热电制冷器件与系统设计中的几个关键问题进行了细致的分析，包括制冷量的最大化、最大制冷量下的系统能效分析以及外部热阻的最佳分配等，最终提出了一套兼顾制冷量与能效的热电制冷器件与系统白箱设计策略，设计流程中的每一步都有相应的显式计算式作为支撑，使得整个系统的设计正向化、透明化。本工作有望为热电制冷系统的性能评价和优化设计提供一条标准化的理论路径，并充分发挥高性能室温热电材料在制冷领域的应用价值。

# 墙报展示

## P1-001 AgSbTe<sub>2</sub> 复合对 Bi<sub>0.4</sub>Sb<sub>1.6</sub>Te<sub>3</sub> 材料热电性能的影响

屈相、陈祥斌、余甜、祁宁、陈志权\*

武汉大学物理科学与技术学院

## P1-002 P 型 Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub> 基热电薄膜的制备与性能优化

邹琪<sup>1</sup>、商红静<sup>1</sup>、张琳<sup>1</sup>、任志峰<sup>2</sup>、古宏伟<sup>1</sup>、丁发柱\*<sup>1</sup>

1. 中国科学院电工研究所

2. 休斯顿大学

## P1-003 压力协同 SWCNT 复合优化 BiCuSeO 基材料的热电性能

音展翔、张鹤、王亚强、武毅、邢有博、邓乐、何盼、郭鑫\*

长春理工大学

## P1-004 空位调制和取向优化提高 Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> 薄膜热电性能

高志、侯帅航\*

河北大学

## P1-005 卤素离子有助于提高碲化银纳米线的热电性能

于鹏禄、兰金叻\*

北京化工大学

## P1-006 低热导率 Ag<sub>8</sub>SnSe<sub>6</sub> 的结构调控与热电性能研究

李梦瑶\*

郑州大学

## P1-007 微纳尺度钛酸锶薄膜本征热电性能测试

刘畅、林元华\*

清华大学

## P1-008 AgBiSe<sub>2</sub> 基热电材料的相变调控与性能优化

郭振涛、刘紫航\*

哈尔滨工业大学材料科学与工程学院

**P1-009 柔性石墨烯/Ag<sub>2</sub>Se/PEDOT:PSS 复合材料的制备及其  
热电性能研究**

孟秋风\*、尹朔、杜永  
上海应用技术大学

**P1-010 合理的界面富集缺陷优化三明治式 Ca<sub>3</sub>Co<sub>4</sub>O<sub>9</sub> 织构  
复合材料的热电性能**

石宗墨\*<sup>1</sup>、韩震<sup>1</sup>、刘源<sup>1</sup>、陈婵丽<sup>1</sup>、林元华<sup>2</sup>  
1. 西安建筑科技大学  
2. 清华大学

**P1-011 具有广泛阳离子偏心效应的 Ag<sub>1.75</sub>InSb<sub>5.75</sub>Se<sub>11</sub> 基热电材料**

谢承昊、谭刚健、张清杰、唐新峰\*  
武汉理工大学，材料复合新技术国家重点实验室

**P1-012 外延 CdO 透明热电薄膜的热电性能研究**

宁兴坤、王淑芳\*  
河北大学

**P1-013 利用后硒化技术提高 SnSe 取向薄膜热电性能**

薛宇利、王淑芳\*  
河北大学

**P1-014 基于离子束注入的热电材料改性研究**

李赞<sup>1</sup>、何佳<sup>1</sup>、林坤华<sup>2</sup>、王孟邻<sup>2</sup>、青澄<sup>2</sup>、  
殷勤俭<sup>2</sup>、张坤<sup>1</sup>、王乙涵\*<sup>1</sup>  
1. 四川大学原子核科学技术研究所  
2. 四川大学化学学院

**P1-015 通过热拉法和激光再结晶制备单晶碲芯热电纤维**

张鹏宇<sup>1,2</sup>、孙敏<sup>4</sup>、申亚南<sup>1,2</sup>、赵海波<sup>1,2</sup>、杨啸<sup>1,2</sup>、  
王春阳<sup>1,2</sup>、张挺\*<sup>1,2,3</sup>  
1. 中国科学院工程热物理研究所  
2. 中国科学院大学

3. 南京未来能源系统研究院

4. 西安交通大学

## **P1-016 基于谐波探测的单根微米纤维原位热电性能原位表征**

申亚南<sup>1,2,3</sup>、杨啸<sup>1,2</sup>、王春阳<sup>1</sup>、张鹏宇<sup>1,3</sup>、

郑兴华<sup>1,3,4</sup>、张挺<sup>\*1,2,3,4,5</sup>

1. 中国科学院工程热物理研究所

2. 南京未来能源系统研究院

3. 中国科学院大学

4. 长时规模储能重点实验室

5. 中国科学院轻型动力创新研究院

## **P1-017 $Mg_3(Sb,Bi)_2$ 热电材料与发电器件性能优化研究**

王伊、樊震、赵怀周\*

中国科学院物理研究所

## **P1-018 微纳薄膜热电性能原位一体表征方法**

赵海波、杨啸、申亚南、王春阳、张鹏宇、张挺、郑兴华\*

中国科学院工程热物理研究所

## **P2-001 界面工程增强 n 型 PbSe 的热电性能**

邓蹇<sup>1</sup>、张富界<sup>1</sup>、南鹏飞<sup>2</sup>、陈志强<sup>3</sup>、张自由<sup>3</sup>、甘霖<sup>1</sup>、

葛丙辉<sup>2</sup>、董洪亮<sup>3</sup>、毛河光<sup>3</sup>、昂然<sup>\*1</sup>

1. 四川大学

2. 安徽大学

3. 上海高压科学中心

## **P2-002 能带修饰和声子散射增强提高 n 型 PbSe 热电性能**

孙雨鑫<sup>1,2</sup>、陈粤<sup>\*1,2</sup>

1. The University of Hong Kong

2. HKU Zhejiang

## **P2-003 $Cu_{22}Sn_{10}S_{32}$ 中 In 和 Zn 掺杂对热电性能的影响**

陈祥斌<sup>1</sup>、宁岁婷<sup>2</sup>、余甜<sup>1</sup>、屈相<sup>1</sup>、祁宁<sup>1</sup>、陈志权<sup>\*1</sup>

1. 武汉大学

2. 湖北工业大学

**P2-004 SnI<sub>2</sub> 掺杂对 Ag<sub>8</sub>SnSe<sub>6</sub> 微观结构及热电性能的调控研究**

郑启娴、祁宁、陈志权\*

武汉大学

**P2-005 镓掺杂多孔氧化铟微观结构与热电性能研究**

王冬、祁宁、陈志权\*

武汉大学

**P2-006 冷喷涂增材制造 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基材料及其热电性能优化研究**

程展旗<sup>1</sup>、景丹阳<sup>2</sup>、江跃珍<sup>2</sup>、胡孔刚<sup>2</sup>、况菁<sup>2</sup>、

仪登亮<sup>2</sup>、于福义<sup>2</sup>、段兴凯\*<sup>2</sup>

1. 南昌大学

2. 九江学院

**P2-007 碲化银纳米线拉伸形变与断裂行为研究**

吴珞祺、陆忠涛、冯骁斌\*、李国栋、段波、翟鹏程

武汉理工大学

**P2-008 高力学强度高近室温热电性能的 N 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基合金**

刘佳莹、刘锋、李昱征、应博阳、朱铁军、付晨光\*

浙江大学

**P2-009 TeCl<sub>4</sub> 掺杂显著提升 N 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 材料热电性能**

黄坤、葛振华\*

昆明理工大学

**P2-010 通过晶界处原位析出 Ag<sub>2</sub>Se 实现多晶 SnSe 材料  
高热电性能**

杨星、冯晶、葛振华\*

昆明理工大学

- P2-011**            **通过准均质化掺杂在  $\text{Cu}_3\text{SbSe}_4$  基热电材料中实现  
高热电性能和力学性能**
- 殷浩、葛振华\*  
昆明理工大学
- P2-012**            **纳米结构化及能带工程优化 p 型 BST 热电性能**
- 梁昊、张益欣、葛振华\*  
昆明理工大学
- P2-013**            **一步实现载流子调控和第二相复合增强 P 型  
 $\text{SnSe}$  多晶的热电性能**
- 李泽、冯晶、葛振华\*  
昆明理工大学
- P2-014**             **$\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  热电材料的研究进展:从结构、合成到性能**
- 李晓军、何文科\*  
电子科技大学
- P2-015**            **具有高性能的三元  $\text{AgBiS}_2$  热电材料**
- 安鸿绪、何文科\*  
电子科技大学
- P2-016**            **高性能多晶  $\text{SnSe}$  纳米材料的冷烧结制备工艺**
- 师李洁<sup>1</sup>、蒋曼\*<sup>1</sup>、丁军<sup>1,3</sup>、陈祥斌<sup>2</sup>、屈相<sup>2</sup>
1. 华中科技大学
  2. 武汉大学
  3. 青海大学
- P2-017**            **通过 Pb 掺杂和 Te 复合协同优化 p 型  $\text{BiCuSeO}$   
的电子和声子输运**
- 吕文乾、唐文欣、兰金叻\*、杨小平  
北京化工大学

**P2-018 热电材料  $\text{CoSb}_3$ 、 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 、 $\text{SnSe}$  多晶结构断裂韧性的深度学习分子动力学模拟研究**

雷振帅、李国栋\*、段波、冯骁斌、翟鹏程  
武汉理工大学

**P2-019 Effects of  $\text{B}_4\text{C}$  Nanodispersion on the Electrical and Thermal Conductivities of  $\text{GeTe}$  Thermoelectric Materials**

莱克、江奕林、李敬锋\*  
清华大学 材料学院

**P2-020 钴掺杂提升 n 型碲化镁的热电性能**

陈露、李静薇、李和章、李敬锋\*  
清华大学材料学院

**P2-021 非晶二硫化钼复合提升  $\text{Bi}_2(\text{Te}, \text{Se})_3$  的热电性能**

王正沁、庄华鹭、李敬锋\*  
清华大学 材料学院

**P2-022 界面应力工程提高碲化铋薄膜的面内热电性能**

韩湛然、余锦程、庄华鹭、李敬锋\*  
清华大学

**P2-023 r- $\text{GeTe}$  晶格热导率和载流子浓度协同优化**

祁霞、李文\*  
同济大学

**P2-024 Ag、Sb 共掺杂优化  $\text{Cu}_2\text{Se}$  材料热电性能**

张海兰、李志亮\*、赵烈栋  
河北大学

**P2-025 Cd 掺杂提高 p 型  $\text{InSb}$  热电材料性能的研究**

王晴<sup>1</sup>、王淑芳<sup>2</sup>、林元华\*<sup>1</sup>  
1. 清华大学  
2. 河北大学

- P2-026**                    **n 型 GeTe 基热电材料性能优化策略研究**  
王德壮、尹梁操、刘庆丰\*  
南京工业大学
- P2-027**                    **利用随机排列的微孔增强 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基材料的热电性能**  
巴倩、刘志愿\*、马俊杰  
安徽工业大学
- P2-028**                    **退火和快速热压烧结对 Bi<sub>100-x</sub>Sb<sub>x</sub> 合金热电性能的影响**  
鲁安奎\*  
中国科学院理化技术研究所
- P2-029**                    **Nb 复合 SrTiO<sub>3</sub> 热电陶瓷的高温高压制备与性能优化**  
于海东<sup>1</sup>、高姗<sup>1</sup>、杨鹏<sup>1</sup>、张跃文<sup>2</sup>、马红安\*<sup>1</sup>、贾晓鹏<sup>1</sup>  
1. 吉林大学  
2. 郑州大学
- P2-030**                    **La-Nb 共掺杂 SrTiO<sub>3</sub> 热电材料的高温高压合成与性能优化**  
高姗<sup>1</sup>、于海东<sup>1</sup>、杨鹏<sup>1</sup>、张跃文<sup>2</sup>、马红安\*<sup>1</sup>、贾晓鹏<sup>1</sup>  
1. 吉林大学  
2. 郑州大学
- P2-031**                    **实现 n 型运输的 CdSb 材料**  
赵鹏、姚洪浩、马晓静、张倩、毛俊\*  
哈尔滨工业大学（深圳）
- P2-032**                    **镧掺杂和能带工程协同优化铋化铍合金的近低温热电性能**  
周琦、苗蕾\*  
广西大学
- P2-033**                    **通过熵工程优化 GeTe 材料的热电性能**  
强宇\*  
中国科学院电工研究所

**P2-034  $\text{Ge}_{1-x}\text{Pb}_x\text{Cu}_y\text{Sb}_y\text{TeSe}_{2y}$  的电输运和热输运特性**

邱玉婷\*

北京航空航天大学

**P2-035 通过 Ag 掺杂优化 PbTe 的制冷性能**

马粒<sup>1,2</sup>、宋鲁平<sup>1</sup>、郑哲<sup>1</sup>、兰越景<sup>1</sup>、周琳森<sup>1</sup>、刘若璞<sup>1</sup>、  
李源森<sup>1</sup>、魏智杰<sup>1</sup>、郭劭轶<sup>2</sup>、石岩<sup>1</sup>、任广坤\*<sup>1</sup>

1. 中国工程物理研究院材料研究所

2. 电子科技大学物理学院

**P2-036 成分-介观有序调控策略协同优化 n 型多晶 SnSe 热电性能**

李文杰、侯仰龙、帅晶\*

中山大学

**P2-037 Mn 掺杂协同优化 N 型  $\text{Mg}_3\text{Sb}_2$  基热电材料的电热输运性能**

宋迎庆、宛晗、李周、宋吉明\*

安徽大学

**P2-038 复合  $\text{Zn}_4\text{Sb}_3$  引发的原位反应优化 BiCuSeO 热电性能研究**

陈多、梁小龙、李周、宋吉明\*

安徽大学

**P2-039 A-In-Se (A=Ag, Cu) 基化合物的结构和热电性能**

张曦云、訾鹏、苏贤礼\*、吴劲松、张清杰、唐新峰

武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

**P2-040 银空位调控  $\text{AgSbSe}_2$  的热电性能**

李珊、张梦晴、朱红玉、杨孟祥、宿太超\*

桂林理工大学

**P2-041 P 型方钴矿  $\text{Ce}_{0.45}\text{Nd}_{0.45}\text{Fe}_{3.5}\text{Co}_{0.5}\text{Sb}_{12}$  的第二相构建  
与热电性能优化**

童昊阳、郭逢凯、隋解和\*

哈尔滨工业大学

**P2-042 CdSe 量子点在溶液处理的多晶 SnSe 中实现了高热电性能**

窦炜、唐国栋\*

南京理工大学

**P2-043 电声协同调控优化 MnTe 基材料的热电性能**

ZULKIFAL SHAHZADA、李松、唐国栋\*

南京理工大学

**P2-044 通过晶格平整化增强 AgCuTe 掺杂多晶 SnSe 的热电性能**

王亚静、王超\*

河南大学

**P2-045 通过 AgCuTe 合金化形成半共格纳米结构  
增强 N 型 PbSe 的热电性能**

王鑫鑫、王超\*

河南大学

**P2-046 同相结构复合设计优化半赫斯勒的热电性能**

彭盼盼、谈畅、翟近泽、王洪超\*、王春雷

山东大学物理学院

**P2-047 n 型钙钛矿氧化物热电材料的性能优化**

翟近泽、姚杰、陈婷婷、王洪超\*、王春雷

山东大学

**P2-048 基于本征点缺陷的调控实现富 Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基合金的 p-n 型转变**

王默然\*

深圳大学

**P2-049 双间隙掺杂提升 PbSe 热电材料的平均功率因数和 ZT 值**

徐莉青、肖钰\*

电子科技大学

- P2-050**                    **Sb<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> 基热电材料的 Bi 合金化及微结构工程**
- 陈晨<sup>1</sup>、陈辰<sup>2</sup>、徐波<sup>\*1</sup>、田永君<sup>1</sup>
1. 燕山大学
  2. 大湾区大学
- P2-051**                    **碲掺杂调控硒化铜基材料的晶体结构和热电性能**
- 薛丽沙<sup>\*</sup>
- 河南工程学院
- P2-052**                    **温度、压力和电场对银基快离子导体热电材料合成和致密化的影响**
- 梅尔齐、杨东旺<sup>\*</sup>、鄢永高、唐新峰
- 武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室
- P2-053**                    **N 型高熵半导体 AgBiPbSe<sub>2</sub>S 热电性能与机械性能研究**
- 危颖超、马征、罗裕波、杨君友<sup>\*</sup>
- 华中科技大学
- P2-054**                    **异价 Ni 掺杂调控副硫锑钴矿电热输运性能**
- 余健<sup>\*1</sup>、叶先锋<sup>2</sup>、马世方<sup>1</sup>、赵文俞<sup>2</sup>
1. 九江学院
  2. 武汉理工大学
- P2-055**                    **全镁基热电器件的近室温区性能优化**
- 程延潇<sup>1</sup>、傅赞天<sup>1</sup>、左武升<sup>1</sup>、张骥昊<sup>\*2</sup>、王连军<sup>1</sup>、江莞<sup>1,3</sup>
1. 东华大学
  2. 卡尔斯鲁厄理工学院
  3. 东华大学
- P2-056**                    **基于相图缺陷热力学设计高性能 EuZn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub> 基 Zintl 相热电材料**
- 马宝鹏、张倩<sup>\*</sup>
- 哈尔滨工业大学（深圳）材料科学与工程学院

- P2-057 同类结构和异类结构合金化提高  $\text{Eu}_2\text{ZnSb}_2$  基 Zintl 相的热电性能**  
陈秉怡、张倩\*  
哈尔滨工业大学（深圳）
- P2-058 相边界工程提升 p 型  $\text{FeSb}_3$  基方钴矿的热电性能**  
李孝芳、马宝鹏、曹峰、毛俊、张倩\*  
哈尔滨工业大学（深圳）
- P2-059 高温高压调控 n 型  $\text{Mg}_2\text{Si}_{0.3}\text{Sn}_{0.7}$  热电性能**  
董向阳、翟汝颖、孙海瑞、张永胜\*、刘晓兵  
曲阜师范大学
- P2-060 在类液态固溶体中通过逐步合金化实现晶体畸变以调节热电输运行为**  
王文莹、薄琳、赵德刚\*  
济南大学
- P2-061 n 型  $\text{PbSe}$  热电材料的性能优化**  
牛晓艳<sup>1</sup>、李志亮<sup>2</sup>、王淑芳<sup>2</sup>、赵怀周<sup>\*1</sup>  
1. 中国科学院物理研究所  
2. 河北大学
- P2-062  $\text{CuSbSe}_2$  在超高热电性能  $\text{GeTe}$  材料中的多重修饰作用**  
金阳、文熠、赵立东\*  
北京航空航天大学
- P2-063 通过原位复合实现 N 型  $\text{BiSbSe}_3$  电传输性能的突破性提高**  
王思宁、邱玉婷、赵立东\*  
北京航空航天大学

**P2-064 通过掺杂间隙 Ni 调控 Mg 本征迁移动力学来实现  $Mg_3Sb_2$  基合金优异的结构和热电性能**

张琛卓、李子豪、孙丛立、魏平、赵文俞\*、张清杰  
武汉理工大学

**P2-065 兼具高横向热电性能和高界面稳定性的  $Co/Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te_3$**

**倾斜结构叠层热电器件研究**

张玉、朱婉婷、赵文俞\*、张清杰  
武汉理工大学

**P2-066 Ag 掺杂加强 n 型  $Bi_2Te_{2.7}Se_{0.3}$  的层间相互作用和室温热电性能**

杜雅婷、魏平、聂晓蕾、朱婉婷、赵文俞\*、张清杰  
武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

**P2-067 通过优化载流子浓度和降低热导率实现  $ZnSe$  掺杂  $CuGaTe_2$  的高热电性能**

雒思潼、张子佩、郑树启\*  
中国石油大学（北京）

**P2-068 通过能带工程和声子工程有效改善 n 型  $Mg_3Sb_2$  材料的热电性能**

梁静轩、于露、郑树启\*  
中国石油大学（北京）

**P2-069 熵工程优化  $CoSbS$  热电性能**

杨孟祥<sup>1</sup>、朱红玉<sup>\*1</sup>、孙海瑞<sup>2</sup>、陈欣<sup>2</sup>、张永胜<sup>2</sup>、刘晓兵<sup>2</sup>、宿太超<sup>1</sup>

1. 桂林理工大学
2. 曲阜师范大学

**P2-070 小角晶界调控实现高性能 P 型碲化铋基合金**

李昱征、刘锋、应博阳、刘佳莹、付晨光、朱铁军\*  
浙江大学

- P2-071 合理成分设计提升 p 型  $\text{EuMg}_2\text{Sb}_2$  基材料的热电性能**  
朱宏攀、于健、韩广、周小元\*  
重庆大学
- P2-072 低热导率  $\text{Cu}_3\text{SbSe}_3$  材料热电性能提升策略研究**  
冀霄、周字桢、张凯琪、卢旭\*  
重庆大学
- P2-073 通过引入大量 Ge 空位实现 p 型  $\text{Cu}_2\text{GeSe}_3$  优异功率因子**  
刘慧、张凯琪、冀霄、卢旭\*、周小元\*  
重庆大学
- P2-074 Mg 重掺杂同时提升  $\text{CuInTe}_2$  热电性能与热稳定性**  
熊启红、吴宏、张凯琪、卢旭\*  
重庆大学
- P2-075 Multi-band convergence and glass-like thermal transport in high-entropy thermoelectric materials**  
Kai Li,† Liang Sun,† Chong Xiao\*  
University of Science and Technology of China
- P3-001 磁性拓扑材料中反常能斯特热电性能的调控**  
吕孟、刘俊艳、张伸、刘恩克\*  
中国科学院物理研究所
- P3-002  $\text{Ag}_2\text{Te}/\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$  人造倾斜叠层热电器件的界面接触和横向热电性能**  
杨毛俊\*、丁志强  
武汉理工大学
- P3-003 具有载流子高速传输通道的热电磁多层薄膜**  
陈天天、柯少秋、魏平、赵文俞\*、聂晓蕾  
武汉理工大学

- P3-004**                    **磁有序结构增强柔性薄膜热电性能**  
魏明旭、柯少秋、聂晓蕾、魏平、赵文俞\*、张清杰  
武汉理工大学
- P3-005**                    **Co/Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub> 人造倾斜叠层结构热电器件结构设计  
设计与性能优化**  
黄同露、何庆宇、赵文俞\*、朱婉婷、张清杰、魏平  
武汉理工大学
- P3-006**                    **磁各向异性增强 Co/BiSbTe/PVDF 柔性热电磁薄膜  
的电输运性能**  
梁栋<sup>1</sup>、闫文光<sup>1</sup>、聂晓蕾<sup>1</sup>、余健<sup>2</sup>、赵文俞\*<sup>1</sup>、张清杰<sup>1</sup>  
1. 武汉理工大学  
2. 九江学院
- P3-007**                    **单轴应力增强多束放电等离子体烧结 BiSbTe/环氧柔性  
薄膜性能**  
李孟扬、艾小玲、聂晓蕾、魏平、赵文俞\*、张清杰  
武汉理工大学
- P3-008**                    **具有良好热电和磁热性能的 Gd/BiTeSe 复合材料的  
制备与表征**  
葛军杰、李龙舟、刘承姗、魏平、赵文俞\*  
武汉理工大学
- P3-009**                    **Gd/Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub> 热电磁材料的制备和热电磁能量转换性能**  
李龙舟、刘承姗、贺丹琪、朱婉婷、聂晓蕾、魏平、赵文俞\*  
武汉理工大学
- P3-010**                    **开发适用于 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 热电器件的高结合力和热稳定性的  
阻挡层**  
汤志鑫、周畅、田新逢、李龙舟、魏平、赵文俞\*、张清杰  
武汉理工大学

## **P3-011 Organic Thermoelectric Materials for Wearable Electronic Devices**

萧润锋<sup>1</sup>、周晓燕<sup>2</sup>、章婵<sup>1</sup>、刘熙<sup>1</sup>、韩少波<sup>1\*</sup>、车参燕<sup>3\*</sup>

1. 五邑大学
2. 南方科技大学
3. 华南理工大学

## **P3-012 基于 PEDOT:PSS 和 PBFDO 的层状柔性有机热电器件**

章婵<sup>1</sup>、黄海铭<sup>1</sup>、韩少波<sup>1\*</sup>、刘熙<sup>1\*</sup>、莫黎昕<sup>2</sup>、赵景<sup>1</sup>、莫锦鹏<sup>1</sup>、车参燕<sup>3\*</sup>

1. 五邑大学
2. 北京印刷学院
3. 华南理工大学

## **P4-001 对称应变界面：实现可控扩散高导界面的新途径**

苗鑫<sup>1</sup>、陈少平<sup>\*2</sup>、樊文浩<sup>2</sup>、朱航天<sup>1</sup>

1. 中国科学院物理研究所
2. 太原理工大学

## **P4-002 泡沫金属作为热电腿金属层的研究**

李梓锋、方成、段波<sup>\*</sup>

武汉理工大学

## **P4-003 碲化铋基梯度梯度阻挡层材料设计**

潘程鹏<sup>\*</sup>

北京科技大学

## **P4-004 高性能的(Bi,Sb)<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基发电/制冷双模式热电器件**

俞志远、柴荣灏、孙雨鑫、隋解和<sup>\*</sup>

哈尔滨工业大学

## **P4-005 Batch Fabrication and Interface Stabilization Accelerate Application of Skutterudite Thermoelectric Module for Power Generation**

师文静<sup>1,2</sup>、于永龙<sup>1</sup>、朱盈喜<sup>1</sup>、隋解和<sup>\*2</sup>

1. 中核四 0 四有限公司
2. 哈尔滨工业大学

**P4-006 高性能无铅 Half-Heusler 合金成分优化和屏障设计**

李傅杉、李淑瑶、刘紫航、隋解和\*

哈尔滨工业大学

**P4-007 高效稳定的立方相 GeTe 基热电器件：转换效率突破 12%**

徐凯<sup>1</sup>、张琪昊<sup>2</sup>、王连军<sup>\*1</sup>、江莞<sup>3</sup>

1. 东华大学

2. 卡尔斯鲁厄理工学院

3. 东华大学

**P4-008 环路重力热管式温差发电系统实验研究**

刘文龙、王伟\*

北京理工大学

**P4-009 宽温域高性能级联器件用 Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基中温热电材料研究**

吴昊\*

哈尔滨工业大学

**P4-010 微型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基热电器件服役可靠性研究**

吕嘉南、杨东旺\*、鄢永高、吴劲松、唐新峰

武汉理工大学

**P4-011 离子束辅助沉积制备热电材料电极**

赵琪、赵怀周\*

中国科学院物理研究所

**P5-001 基于填充多面体规则的新型高性能三元  
热电材料的理性设计**

王震、冯真真、曾在平\*

河南大学

**P5-002 层间扭转增强黑磷材料热电性能**

段帅、崔扬帆、易文才、陈欣\*、杨兵超、刘晓兵\*

曲阜师范大学

- P5-003 新型笼状硬质材料  $YB_3C_3$  的热电性能研究**  
崔扬帆<sup>1</sup>、段帅<sup>1</sup>、王晓郡<sup>1</sup>、唐庆航<sup>2</sup>、奚晋扬<sup>2</sup>、刘晓兵<sup>1</sup>、张永胜<sup>1</sup>、陈欣<sup>\*1</sup>  
1. 曲阜师范大学  
2. 上海大学
- P5-004 异价重元素掺杂对半赫斯勒化合物  $ZrFeTe$  晶格热导率的影响**  
胡欣然、陈志权\*  
武汉大学
- P5-005 六方  $CaAgSb$  中的各向异性的热电输运性质**  
崔娟\*、杨宇  
北京应用物理与计算数学研究所
- P5-006 具有本征极低晶格热导率  $Ga_2AsS_4$  材料的热电特性研究**  
何静、冯真真\*、赵高峰  
河南大学金明校区
- P5-007 Double half-Heusler 化合物  $X_2FeNiZ_2$  ( $X=Ti, Zr, Hf$ ;  $Z=Sb, Bi$ ) 中键合异质性导致其具有超低晶格热导率**  
江涛、赵高峰、冯真真\*  
河南大学物理与电子学院
- P5-008 晶界热电材料：热电参数调控策略及研究进展**  
李雨欣、何文科\*  
电子科技大学
- P5-009 交错层结构对  $Bi_2Te_3$  力学性能的影响机制研究**  
黄写格<sup>1</sup>、吴珞祺<sup>1</sup>、冯骁斌<sup>1</sup>、翟鹏程<sup>1</sup>、段波<sup>1</sup>、何佳清<sup>2</sup>、李国栋<sup>\*1</sup>  
1. 武汉理工大学  
2. 南方科技大学

**P5-010 高压诱导晶格位错和畸变对纯相 SnTe 热电性能的影响**

郑博文<sup>1</sup>、陈涛<sup>2,3</sup>、孙海瑞<sup>1</sup>、张永胜<sup>1</sup>、刘晓兵<sup>\*1</sup>

1. 曲阜师范大学
2. 中国科学技术大学
3. 中国科学院固体物理所

**P5-011 基于双能带模型的 Mg<sub>3</sub>Bi<sub>2</sub> 基合金双极扩散效应研究**

仇嘉敏、芝世珍、赵鹏、张倩、毛俊\*

哈尔滨工业大学（深圳）

**P5-012 利用 Wannier 轨道分析研究 Cu-Sb-Se 三元半导体中的孤对 s<sup>2</sup>电子对**

袁珉慧<sup>1,2</sup>、刘国强<sup>2</sup>、蒋俊<sup>2</sup>、帅晶<sup>\*1</sup>、侯仰龙<sup>1</sup>

1. 中山大学
2. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所

**P5-013 结合机器学习探究 Mg<sub>3</sub>(Sb,Bi)<sub>2</sub> 热电材料的原子局部有序和合金化效应**

袁珉慧、欧阳沛、李相国、帅晶\*

中山大学

**P5-014 机器学习预测高性能 PbTe-2D-PbTe 二维材料异质界面**

李一斐、赵欣、唐桂华\*

西安交通大学

**P5-015 AIIINiSb (AIII=Sc, Y, Er)半赫斯勒材料中 A-Ni 化学键对其异常空位缺陷形成的影响**

陈启用、马乐飞、杨炯、席丽丽\*

上海大学材料基因组工程研究院

**P5-016 具有多能谷导带结构的层状材料 GaGeTe**

周佳丽、张家伟\*、史迅

中国科学院上海硅酸盐研究所

**P5-017 基于机器学习方法研究缺陷碲化铅的晶格热导率**

秦密<sup>1,2</sup>、张永胜<sup>\*3</sup>

1. 中国科学院固体物理研究所
2. 中国科学技术大学研究生院科学岛分院
3. 曲阜师范大学多学科高等研究院

**P5-018 氧吸附对 PbTe 表面影响的理论研究**

沈瑶玲<sup>1,2</sup>、张永胜<sup>\*3</sup>

1. 中国科学院固体物理研究所
2. 中国科学技术大学研究生院科学岛分院
3. 曲阜师范大学多学科高等研究院

**P5-019 立方相 AgSnBiSe<sub>3</sub> 热电输运性能研究**

原雨、张跃文<sup>\*</sup>

郑州大学

**P5-020 超高电/声平均自由程比 Bi-Sb 多晶体低温  
热电性能测试与表征**

吴晓炜<sup>1,2</sup>、樊震<sup>1</sup>、朱航天<sup>1</sup>、王天宇<sup>3</sup>、陈楠<sup>1,2</sup>、刘猛<sup>1</sup>、刘求林<sup>1,2</sup>、  
牛晓艳<sup>5</sup>、赵琪<sup>5</sup>、李志亮<sup>5</sup>、王淑芳<sup>5</sup>、鲁振<sup>1</sup>、刘德欢<sup>3</sup>、杨荣贵<sup>4</sup>、赵怀周<sup>\*1</sup>

1. 中国科学院物理研究所
2. 中国科学院大学物理科学学院
3. 华中科技大学能源与动力工程学院
4. 北京大学工学院
5. 河北大学物理科学与技术学院

**P5-021 利用能带和缺陷工程同时提高 n 型 Mg<sub>3</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.5</sub> 基 Zintl 的  
热电性能和力学性能**

姜云天、于露、隗思彤、郑树启<sup>\*</sup>

中国石油大学(北京)

**P5-022 Cu<sub>3</sub>SbSe<sub>4</sub> 基材料通过优化载流子浓度和能量过滤  
实现高热电性能**

王韬、隗思彤、王博诣、张子佩、郑树启<sup>\*</sup>

中国石油大学(北京)

- P5-023 通过 Sc 掺杂驱动的能带和缺陷工程推进 n 型  $Mg_{3+\delta}Sb_{1.5}Bi_{0.47}Te_{0.03}$  基热电 Zintl 基材料的热电性能**  
魏志博、于露、张子佩、郑树启\*  
中国石油大学（北京）
- P5-024 通过载流子浓度和声子散射的协同调制增强  $Cu_3SbSe_4$  基材料的热电性能**  
王婷、隗思彤、冀臻、李文浩、郑树启\*  
中国石油大学（北京）
- P5-025 Large Magneto-Transverse and Longitudinal Thermoelectric Effects in the Magnetic Weyl Semimetal TbPtBi**  
王洪辉<sup>1,3</sup>、潘瑜<sup>1,3</sup>、王国玉<sup>1</sup>、周小元<sup>1</sup>、陈仙辉<sup>1,2</sup>  
1. 重庆大学  
2. 中国科学技术大学  
3. 马克思普朗克化学物理研究所
- P5-026 拓扑半金属  $NbAs_2$  中巨大的横向热电效应**  
武帅、汪新灿、米薪润、郑思康、杨坤亚、周字桢、王洪辉、韩广、卢旭、潘瑜、王国玉、周小元  
重庆大学
- P5-027 朗道量子化和 Lifshitz 相变调控的高磁热电性能**  
蒋林峰、王洪辉、周字桢、武帅、郑思康、米薪润、喻科霖、王锐、王爱峰、潘瑜、王国玉、周小元  
重庆大学
- P5-028 混合磁性纳米颗粒对 p 型碲化铋基材料热-电-磁性能的影响**  
马俊杰、管希成、巴倩、刘志愿\*  
安徽工业大学
- P6-001 基于 Co 间隙掺杂的  $Mg_3(Sb, Bi)_2$  基多功能固态热电传感器**  
田邦州、昂然\*  
四川大学原子核科学技术研究所

**P6-002 Ag 化学计量偏移对塑性 AgCuSe<sub>0.6</sub>S<sub>0.4</sub> 力学性能及  
热电性能的影响**

尹庭威<sup>1,2</sup>、邓婷婷<sup>1,2</sup>、仇鹏飞<sup>\*1,2</sup>

1. 中国科学院大学 杭州高等研究院

2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

**P6-003 多晶 YbMnSb<sub>2</sub> 半金属的合成与热电性能**

刘硕<sup>1</sup>、李艾燃<sup>1</sup>、郝晓文<sup>2</sup>、陈梦朝<sup>1</sup>、任清勇<sup>2</sup>、朱铁军<sup>1</sup>、付晨光<sup>\*1</sup>

1. 浙江大学

2. 中国散裂中子源

**P6-004 机器学习辅助发现可用于柔性热电的范德华层状硫属化合物**

任琦、朱博南、唐刚、洪家旺<sup>\*</sup>

北京理工大学

**P6-005 热电热机理想循环构建及物性分析**

张欣懿、聂显铨<sup>\*</sup>、赵力、邓帅

天津大学机械工程学院

**P6-006 离子迁移诱导的卤化物钙钛矿巨大热电势效应及  
其在红外探测中的应用**

熊焱<sup>1</sup>、徐凌<sup>\*2</sup>

1. 南昌航空大学

2. 华中科技大学

**P6-007 基于相图设计制备 N 型 PbTe-PbS 热电材料  
及其电热输运研究**

付梓轩、张倩<sup>\*</sup>

哈尔滨工业大学（深圳）

**P6-008 钙钛矿型 SrZrS<sub>3</sub> 热电材料的制备和性能优化**

南岩岩、韩炎兵、张跃文<sup>\*</sup>

郑州大学

## **P6-009 不对称 Cu-S 键诱导新型 Cu-Zr-S 化合物中的本征低热导**

李直<sup>1,2</sup>、周钰洋<sup>\*1,3</sup>、张家伟<sup>1</sup>、朱晨曦<sup>1</sup>、仇鹏飞<sup>1,2,4</sup>、邓婷婷<sup>1,4</sup>、  
许钊钊<sup>1</sup>、陈立东<sup>1,2</sup>、史迅<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院上海硅酸盐研究所
2. 中国科学院大学材料科学与光电技术学院
3. 北京分子科学国家研究中心
4. 国科大杭州高等研究院

## **P6-010 高压分别作为调控手段和合成手段对热电性能的优化研究**

王殿振<sup>1,2,3</sup>、陶强<sup>1,2,3</sup>、周强<sup>1,2,3</sup>、朱品文<sup>\*1,2,3</sup>

1. 吉林大学超硬材料国家重点实验室
2. 吉林大学综合极端条件高压科学中心
3. 吉林大学物理学院

## **P6-011 方钴矿器件阻挡层界面稳定性实验研究**

左彤、唐显、李鑫

中国原子能科学研究院

## **P6-012 基于 SKD 器件的 ETG 系统服役性能研究**

武伟名、李鑫、何虎

中国原子能科学研究院

## **P7-001 基于机器学习实现微型热电冷却器全参数优化 与高效应用设计**

包书骋<sup>1</sup>、祝薇<sup>2</sup>、邓元<sup>\*1</sup>

1. 北京航空航天大学材料科学与工程学院
2. 北京航空航天大学杭州创新研究院

## **P7-002 超级多相界面解耦电子和声子传输实现 AgCuTe 基 复合材料的高热电性能**

李文沛<sup>1</sup>、刘呈燕<sup>\*2</sup>、苗蕾<sup>3</sup>

1. 桂林电子科技大学
2. 湖南人文科技学院
3. 广西大学

**P7-003 球形 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 红外辐射涂层增强电子器件高效散热研究**

刘明瑞<sup>\*1</sup>、朱婉婷<sup>2</sup>、赵文俞<sup>1,2</sup>、张清杰<sup>1,2</sup>

1. 佛山仙湖实验室

2. 武汉理工大学

**P7-004 SiGe 中原位反应纳米相的声子弛豫效应对电热输运的影响**

张忠玮、陈红波、苗蕾<sup>\*</sup>

广西新型电池材料工程技术研究中心

**P7-005 硅基微通道和薄膜热电制冷器集成冷却性能及调控研究**

刘泽宇<sup>1</sup>、李美勇<sup>1</sup>、王云艺<sup>1</sup>、申利梅<sup>\*1,2</sup>

1. 华中科技大学能源与动力工程学院

2. 深圳华中科技大学研究院

**P7-006 基于脉冲电流的热电片快速温变条件的研究**

邵帅跃、左正兴、王伟<sup>\*</sup>

北京理工大学

**P7-007 微型热电器件接触式综合性能精准测量技术**

张程、祝薇<sup>\*</sup>、邓元

北京航空航天大学

**P8-001 用于柔性热电器件的可规模化印刷、高性能和自修复 Ag<sub>2</sub>Se/松油醇纳米复合薄膜**

张明成、蔡克峰<sup>\*</sup>

同济大学

**P8-002 具有高柔韧性和优秀室温热电性能的 Ag-Te-S 三元热电薄膜**

吴昶璇、蔡克峰<sup>\*</sup>

同济大学材料科学与工程学院

- P8-003 硫掺杂极大提高柔性 Cu<sub>2</sub>Se 薄膜的热电性能**  
王俊辉、蔡克峰\*  
同济大学材料学院
- P8-004 自掺杂效应增强 GeTe 薄膜热电性能**  
孙晓宇、张倩、曹峰\*、刘兴军、毛俊  
哈尔滨工业大学（深圳）
- P8-005 有机碳化处理提升碳纳米管在高温下的热电稳定性**  
霍炳臣<sup>1,2</sup>、陈光明\*<sup>1</sup>、杜春雨<sup>1</sup>、郭存悦<sup>2</sup>  
1. 深圳大学  
2. 中国科学院大学
- P8-006 基于辐射冷却和光热转换结合的折纸型热电器件**  
孙祺、陈光明\*  
深圳大学
- P8-007 基于热电效应的新型智能火灾预警系统**  
丁招福、梁丽荣、陈光明\*  
深圳大学
- P8-008 基于 Ag<sub>2</sub>Se 的高性能柔性热电设备的多晶界面工程**  
吕文乾、唐文欣、兰金叻\*、杨小平  
北京化工大学
- P8-009 耐高温柔性二氧化硅气凝胶用于温度传感**  
陈彦锟、兰金叻\*、于运花  
北京化工大学
- P8-010 面向商业柔性热电器件的微结构定制薄 β-Ag<sub>2</sub>Se 薄膜**  
卢婧、雷岩\*、魏萌、谷龙艳、邓艺妹、何伟伟、张艳鸽、郑直  
许昌学院

- P8-011**                   **噻吩型聚合物的化学掺杂和电性能优化**  
罗思怡、徐真、钟飞、李慧\*、陈立东  
上海硅酸盐研究所
- P8-012**                   **PEDOT:PSS/BPs 复合柔性薄膜的光热电性能**  
刘梦婷、柳成、蒋丰兴、刘聪聪\*  
江西科技师范大学
- P8-013**                   **电化学增强半导体型 SWCNTs 热电性能**  
刘小芳、柳城、蒋丰兴、刘佩佩\*  
江西科技师范大学
- P8-014**                   **柔性 PEDOT:PSS 纤维束的后处理工艺及其热电性能**  
吴婷、刘庆丰\*  
南京工业大学
- P8-015**                   **BiCuSeO 二维纳米片的合成及其热电性能的研究**  
刘志磊\*  
北京化工大学
- P8-016**                   **具有形状可塑性的 n 型柔性 MOF 基热电泡沫**  
郭佳琪、马儒军\*  
南开大学
- P8-017**                   **柔性热电器件在便携设备中的应用研究**  
王贺嘉、王伟\*  
北京理工大学机械与车辆学院
- P8-018**                   **高能电子束诱导提高 PEDOT:PSS 的热电性能**  
何佳、王孟邻、王乙涵\*、李赞、林坤华、张坤、殷勤俭  
四川大学

- P8-019 柔性碳/铁电/热电混合薄膜中极化可调的热电冷却和电磁屏蔽**  
孙成伟、李承骏、钱勇鑫、李旺、杨博宇、刚双福、熊天顺、马征、危颖超、李鑫、姜庆辉、罗裕波、杨君友\*  
华中科技大学
- P8-020 超分子自组装制备高分散半导体型单壁碳纳米管/聚噻吩复合薄膜及其热电性能研究**  
胡宇晨<sup>1,2</sup>、姚琴<sup>\*2</sup>  
1. 上海科技大学  
2. 中国科学院上海硅酸盐研究所
- P8-021 碳化聚乙烯醇增强 n-型复合材料热电性能研究**  
林坤华<sup>1</sup>、王孟邻<sup>1</sup>、青澄<sup>1</sup>、何佳<sup>2</sup>、李赞<sup>2</sup>、王乙涵<sup>2</sup>、殷勤俭<sup>\*1</sup>  
1. 四川大学化学学院  
2. 四川大学原子核科学技术研究所
- P8-022 磷掺杂碳化聚多巴胺基 n 型材料的制备及热电性能研究**  
王孟邻<sup>1</sup>、林坤华<sup>1</sup>、何佳<sup>2</sup>、李赞<sup>2</sup>、青澄<sup>1</sup>、王乙涵<sup>2</sup>、殷勤俭<sup>\*1</sup>  
1. 四川大学化学学院  
2. 四川大学原子核科学技术研究院
- P8-023 l-抗坏血酸同时优化 PEDOT:PSS 聚合物塞贝克系数和电导率的新策略**  
罗浩凌、张喻、张雄\*  
湖北师范大学
- P8-024 具有绝缘衬底的 Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub>/环氧树脂热电薄膜的多束放电等离子烧结和优异性能**  
刘蕤之、柯少秋、聂晓蕾、魏平、赵文俞\*、张清杰  
武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

**P8-025 点状磁性阵列增强 BiSbTe/环氧树脂柔性薄膜  
的热电转换性能**

梁雨、胡媛、聂晓蕾、魏平、赵文俞\*、张清杰

武汉理工大学

**P8-026 热扩散法原位合成高热电性能的  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  薄膜**

陈宁、李浩彬、李颖贞、李甫、陈跃星、郑壮豪\*

深圳大学物理与光电工程学院先进薄膜及应用重点实验室

**P9-001 碳管基热电薄膜及双重散热热电发电机的构筑**

赵慧茹、王连军\*

东华大学

**P9-002 一种坚固的、具有高热电性能的离子热电纤维构筑器件**

尚梦菡、王连军\*

东华大学

# 平台简介

## ■重庆大学物理学院简介■

重庆大学物理学院的前身是始建于 1929 年的重庆大学理学院，是重庆大学最早设立的三个学院之一，著名学者郑衍芬、谢立惠等早年都曾任教于此。五十年代由于院系调整，物理的大部分师生迁入四川大学。1977 年恢复招收物理专业本科生，1985 年成立应用物理系，1998 在应用数学系和应用物理系的基础上恢复理学院。2001 年更名为数理学院，2010 年成立物理学院。目前，学院拥有本科、硕士研究生、博士研究生三个层次的教育体系。本科层面设有物理学、应用物理学两个专业，其中物理学本科专业入选国家一流本科专业建设和教育部强基计划，应用物理学专业为重庆市优势特色专业，拥有大学物理实验教学国家级示范中心。近五年，物理学院与中科院各院所深入合作，成立了彭桓武书院、钱三强英才班、严济慈班和彭桓武科教合作中心。学院拥有物理学一级学科博士学位授权点，设有物理学博士后流动站。物理学科 2019 进入并稳固在 ESI 前 1%。学院专任教师 90 余人，包括国家杰出青年基金获得者 3 人、国家万人领军人才 2 人、国家优秀青年基金获得者 3 人、国家海外高层次青年人才 6 人、国家万人计划青年拔尖人才 1 人、教育部新世纪优秀人才 3 人、重庆市百千万工程领军人才 1 人、重庆市杰出青年基金获得者 2 人、重庆市巴渝学者特聘教授 3 人、重庆市青年拔尖人才 6 人、重庆大学百人计划 13 人、重庆大学弘深青年学者 5 人。

近年来，重庆大学高度重视物理学科发展，在各方面取得较显著进步，并进一步凝练理论物理、凝聚态物理、量子光学、量子材料、先进材料四个学科方向，持续优化理论——实验双轨协同发展的学科格局，加快学科在科研平台成果奖励及拔尖人才培养等方面的建设。在新一轮的“双一流”建设过程中启动了“理科卓越行动计划”提升基础研究，2019 年成立了重庆大学量子材料与器件研究中心（陈仙辉院士任中心主任），2021 年获批国家自然科学基金委理论物理专款“西南理论物理中心”，2023 年成立重庆市物理基础学科研究中心，建设有强耦合体系微观物理和能量转化界面物理两个重庆市重点实验室。“以二级学科为核心，坚持多学科交叉融合”是本学科特色。近年来，在理论物理、粒子物理、凝聚态物理等二级学科取得显著进步，也与国内一流的工程、材料、电气等领域深入交叉，在超导及磁电耦合材料、半导体、太阳能电池、基于摩擦纳米技术的新能源及热电材料、微纳材料等研究上拥有特色。

“能量转化界面物理重庆市重点实验室”以“物态方向”、“力电方向”、“热电方向”、“光电方向”四个方向为核心，聚焦微振动、光电、热电能量转化和软物质相变转化中的界面物理问题，拟构建高效耐久的全天候太阳能转化集成系统，重点解决（1）钙钛矿材料中光电异质结界面的载流子调控，以获得高界面稳定性和高光电转化效率的钙钛矿太阳能电池；（2）二维异质结光解水制氢中水解界面的光生载流子分离、复合及输运机理，以获得高光电转化效率的二维异质结制氢电池；（3）热电材料中载流子和声子的微观散射及界面输运机理，以获得高转化效率的热电器件；（4）摩擦纳米发电机（TEG）中固液摩擦界面的电荷分离、复合及输运机理，以获得高输出功率密度、高稳定性和高能量利用的雨滴动能转化系统。研究中心固定成员 32 名，获得国家及地区基金 50 余项，纵向经费达 3800 余万（包括 2 项国家自然科学基金重点项目）。

## ■量子材料与器件研究中心简介■

重庆大学量子材料与器件研究中心成立于 2019 年 8 月，依托前沿交叉学科研究院和物理学院建设。中心将建设国际先进的实验条件，汇聚一批具有国际视野的高水平研究队伍，开展强关联、拓扑、低维等量子材料的基础物性研究和应用功能开发。一方面探索新奇宏观量子态和演生现象，另一方面寻求量子材料和量子器件在未来信息和能源技术中的颠覆性应用。通过实验与理论相结合，聚焦量子材料的新奇物性探索、应用功能调控和原型器件开发，推动量子材料基础研究与器件应用的有机结合。主要研究方向包括：**量子材料基础物性研究，量子材料的应用与器件研究和凝聚态理论与计算研究。**

### 领军人才：

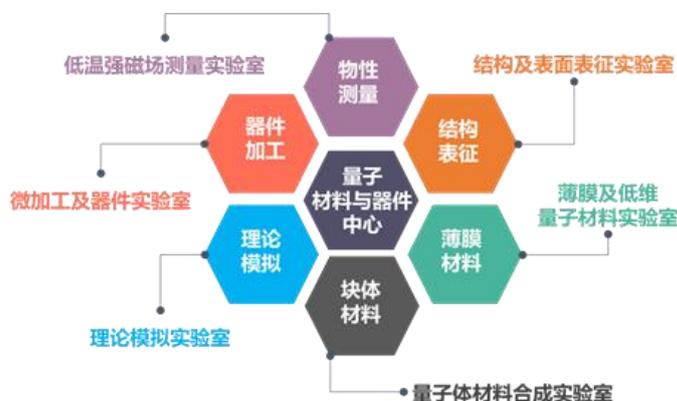
中心主任陈仙辉教授是中国科学技术大学教授，中科院强耦合量子材料物理重点实验室主任，中国科学院院士，发展中国家科学院院士。中心副主任孙阳教授和周小元教授，均为国家杰出青年基金获得者。

### 核心团队：

量子材料与器件研究中心研究团队现有研究人员 27 人，包括中心主任、学术带头人陈仙辉院士，执行副主任孙阳教授、周小元教授，以及多名物理、材料领域的杰出中青年科研人员（全职教授 5 名、副教授 1 名，物理学院兼职教授、研究员 10 名，副教授 4 名，弘深青年教师 3 名）。

### 平台建设：

中心紧扣重庆大学双一流建设的整体目标，凝练学科发展方向，在发展优势学科的基本原则上进行科学规划，已搭建的实验条件涵盖体材料和薄膜生长制备、综合物性测量、电子结构和超快光谱表征、微纳器件加工、理论计算与模拟等全方位，包括超导磁体稀释制冷机、极低温强磁场扫描隧道显微镜、角分辨光电子能谱、分子束外延、脉冲激光沉积、电子束曝光刻蚀等特色大型仪器。目前，中心依托平台已发表论文 150 余篇，包括 PRL 7 篇，Nature 子刊 10 篇，获批各类科研项目 20 余项，包括国家自然科学基金重大科研仪器研制项目、杰出青年项目、优秀青年项目、国家重点研发计划项目等，总经费 2500 余万



## ■重庆新型储能材料与装备研究院简介■

新型储能产业既关乎国家“碳达峰、碳中和”的重大战略，也关乎能源安全、制造强国和经济发展大局，是世界各地纷纷抢抓的新兴产业。为推动我国储能产业和技术应用快速发展，重庆新型储能材料与装备研究院（以下简称“研究院”）作为储能领域高水平的科研平台于2022年5月正式揭牌成立。研究院由重庆大学与重庆两江新区联合共建，坐落于重庆两江协同创新区，注册为重庆市地方性事业单位法人，实行理事会领导下的院长负责制，由潘复生院士担任院长。

研究院依托重庆大学相关国家级科研平台，联合行业龙头企业，瞄准国家能源战略和能源转型前沿技术，聚焦科技成果转化，围绕储能材料、储能技术、储能装备、能源互联网等产业方向，打造储氢材料、镁离子电池、金属空气电池、新型钠锂电池、储能装备、储能系统管理与安全6大研发平台。研究院致力于聚集国内外顶尖的新一代储能材料和装备的研发人才和团队，整合国内外储能材料与装备相关优势资源，打造新型储能领域国际一流的人才高地和创新高地，成为培育重庆新型储能支柱产业、服务国家战略新兴产业和重庆市现代制造业需求的国际一流创新平台。

研究院正在按照重庆市“416”科创战略布局积极筹建明月湖实验室，明月湖实验室拟于2024年6月挂牌，2023年12月召开了10多位院士参加的实验室建设方案咨询会。实验室建设将在中央政治局委员、重庆市委书记袁家军的指示下，按照“四个一代”模式，进行从研发到产业化的全面规划和布局，制定五年、十年和十五年的近期和中长期规划，聚焦新材料与新型储能领域，形成3000人规模，开展新一代颠覆性储能材料、高性能轻量化材料和智能新材料前沿基础研究、卡脖子技术攻关和产业化，建成国内领先、国际一流的国家级科创高地和人才高地，成为服务国家战略新兴产业和重庆市“33618”现代制造业集群体系建设、“416”科技创新战略布局的国际一流创新平台。



## ■重庆大学分析测试中心简介■

重庆大学分析测试中心位于西部（重庆）科学城，是在积极响应国务院文件《关于国家重大科研基础设施和大型科研仪器向社会开放的意见》的号召下，于2014年正式挂牌成立。2018年中心获国家检验检测机构资质认定（CMA），成为可提供具有法律效力检验检测报告的重要检测基地。



经过“985”和“双一流”建设经费的连续投入，中心在仪器设备、实验室建设、人才队伍、科研支撑等方面取得长足进步，为打造集创新设备、创新人才、创新技术于一体的一流公共服务平台奠定了重要基础。2020年中心获中国分析测试协会科学技术奖（CAIA）一等奖，2021年中心工程师获首届高校分析测试分会优秀青年人才奖二等奖、三等奖各1项（当年全国共设10项），2023年在重庆首届卓越工程师大赛中晋级8强，获优胜奖。

中心下设五个仪器平台（微纳结构、表面与结构、通用物性、质谱与色谱、光谱），形成了跨尺度多维度精准成像和极端条件量子输运表征两大特色创新平台，实验用房2000平方米，设备规模86台（套），总值1.85亿元。现有教职工31人，其中教授1名，教授级高级实验师1名，高级专业技术职称人员8名，8人具有博士学位，17人具有硕士学位，是一支朝气蓬勃、技术娴熟、业务过硬、团结向上、积极为教学科研服务的团队。

中心秉承“一流设备、一流技术、一流服务”的理念，按照检验检测机构资质认定要求进行管理，稳步提升分析测试质量。现可从事微区形貌结构分析，有机无机成分分析，材料的物理性能、力学性能分析，药物定性定量分析，生物大分子结晶、构象，环境污染分析等。作为校级公共服务平台承担学校各类科研项目的分析测试研究任务，同时为重庆市高校、企业及科研院所自主创新能力的提升提供服务与支撑。



重庆大学分析测试中心  
官微欢迎扫码关注



重庆大学分析测试中心  
官网欢迎扫码登录

## 扫描NV探针显微镜

扫描NV探针显微镜是一款结合了金刚石氮-空位色心光探测磁共振技术和原子力显微镜扫描成像技术的量子精密测量仪器，可实现对磁性样品高空间分辨率、高灵敏度、定量无损的磁成像。扫描NV探针显微镜可应用于自旋电子学、二维磁学材料、超导材料的研究。



低温扫描NV显微镜

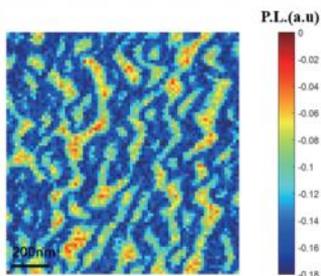
- ▶ **磁成像空间分辨率：**  $\leq 30$  nm
- ▶ **磁测量灵敏度：**  $\leq 5 \mu\text{T}\sqrt{\text{Hz}}^{1/2}$
- ▶ **主要功能：** 单等高线磁成像 (ISO-B) 模式、双等高线 (Dual-B) 磁成像模式、连续波谱 (Full-B) 成像、荧光扫描 (Quenching) 成像、原子力显微镜 (AFM) 成像、磁力显微镜 (MFM) 成像、共聚焦 (CFM) 成像、光探测磁共振谱 (ODMR) 测量
- ▶ **工作温区：** 2K-300 K
- ▶ **低温系统选件：** 干式低震动无液氦低温系统、湿式液氦低温系统
- ▶ **超导磁体选件：** 单轴超导磁体 9T、三轴矢量超导磁体 9/1/1 T (干式低震动无液氦低温系统); 单轴超导磁体 9T (湿式液氦低温系统)



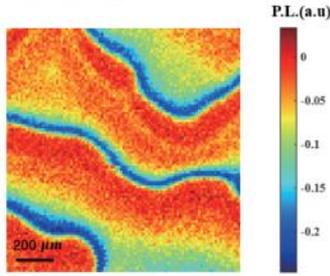
室温扫描NV显微镜

- ▶ **磁成像空间分辨率：**  $\leq 30$  nm
- ▶ **磁测量灵敏度：**  $\leq 2 \mu\text{T}\sqrt{\text{Hz}}^{1/2}$
- ▶ **主要功能：** 单等高线磁成像 (ISO-B) 模式、双等高线 (Dual-B) 磁成像模式、连续波谱 (Full-B) 成像、荧光扫描 (Quenching) 成像、原子力显微镜 (AFM) 成像、脉冲 (Pulse) 成像、共聚焦 (CFM) 成像、光探测磁共振谱 (ODMR) 测量。

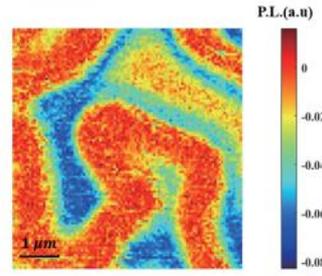
### 案例



BFO



YIG



CoFeB (2 K)

V-2024.09



## 捷欧路(北京)科贸有限公司(日本电子)

捷欧路(北京)科贸有限公司是日本电子株式会社(JEOL Ltd.)在中国成立的一家独资公司,负责在中国地区的销售与售后业务。JEOL是世界顶级科学仪器制造商,成立于1949年,总部设在日本东京都昭岛市武藏野3丁目1番2号,是东京第一证券交易所上市企业。公司一直致力于世界顶尖技术的创新、研究和开发,并凭借其产品为科学和人类社会的进步做出贡献。事业范围主要有电子光学仪器、分析仪器、测试检查仪器、半导体设备、工业设备、医疗仪器等制造、销售和研发。



JXA-iHP200F



JEM-F200



JSM-IT800(SHL)



JSM-IT710HR



JEM-ARM300F2





关注Vevo  
关注最前沿

FUJIFILM  
Value from Innovation  
VISUALSONICS

## Vevo 临床前超声光声多模式成像 ——纳米医学/材料学研究利器

### 光声成像

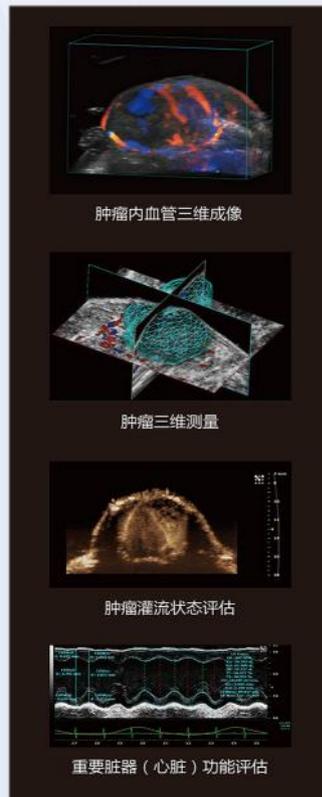
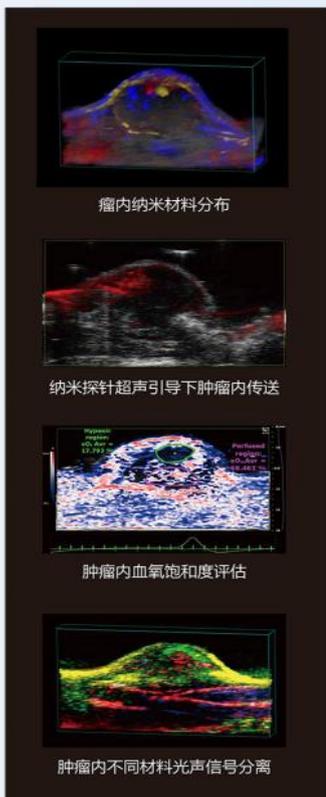
- 超高频光声，最高分辨率可达 50  $\mu\text{m}$
- 兼容低频探头，最高成像深度可达9 cm
- 材料在体外的光声信号谱检测
- 材料在活体内的光声信号检测
- 不同材料在体内的光声信号分离
- 材料对重要脏器如心功能影响的评估
- 材料对肿瘤或脏器血氧影响的评估、成像及定量，如组织中血氧饱和度、总血红蛋白的定量

### 超声成像

- 脏器或肿瘤的结构观察及材料在活体内的准确定位 ( B mode )
- 材料注射前后，肿瘤或脏器内血流状况的评估 ( Contrast mode )
- 材料使用前后，肿瘤或脏器的切面面积或体积测量 ( B mode , 3D mode )
- 材料干预前后，肿瘤或脏器内血流分布的观察 ( Color doppler mode )
- 材料对重要脏器的功能影响，如心功能

High Sensitivity, High Resolution ,

High Speed, More Applications...



# PRODUCT OVERVIEW

## 德国耐驰仪器制造有限公司 世界领先的热分析技术

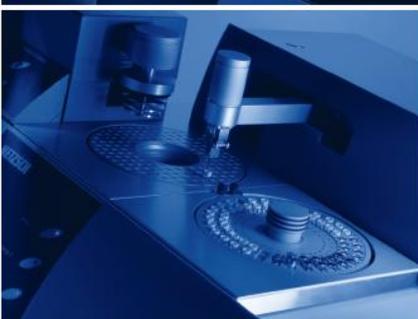
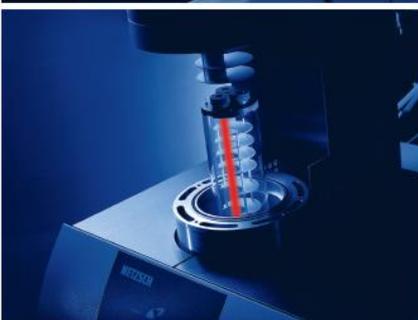
耐驰公司是世界顶尖级的热分析与热物性测量、流变测量、阻燃测量仪器等设备的研发、生产、销售的国际化技术性公司。凭借首屈一指的研发力量，耐驰仪器提供最完备的产品系列、最宽广的工作温度范围、最大的工作压力范围……耐驰拥有多项专利技术，屡次获得全球重大技术革新大奖，其产品技术含量和品质业界无出其右。耐驰仪器广泛应用于各行业的材料研发、质控等领域。

### NETZSCH 产品线：

- 差示扫描量热仪 (DSC)
- 热重分析仪 (TGA)
- 同步热分析仪 (STA)
- 热机械分析仪 (TMA)
- 动态热机械分析仪 (DMA)
- 大力值、高温动态热机械分析仪 (NETZSCH-GABO DMA)
- 介电树脂固化监测仪 (DEA)
- 热分析与红外/质谱/气质联用 (TA-FTIR/MS/GC-MS)
- 热膨胀仪 (DIL)
- 导热性能测试仪 (LFA/GHP/HFM)
- 热反射法薄膜导热系数测量仪 (TR)
- 塞贝克系数测量仪 (SBA)
- 加速量热仪 (ARC)
- 多模块加速量热仪 (MMC)
- 耐火材料强度分析仪 (RUL/CIC/HMOR)
- 热分析高级软件、热动力学软件
- 旋转流变仪系列 (Rotational Rheometer)
- 毛细管流变仪系列 (Capillary Rheometer)
- 建材传热测试系统 (Building Thermal Conductivity)
- 防火测试系统 (Fire Testing Systems)

**NETZSCH**  
Proven Excellence.

地址：上海市外高桥保税区富特北路456号1#楼第3层A部位  
电话：021-51089255 传真：021-58663120  
邮件：nsi@netsch.com 网址：www.ngb-netsch.com.cn



### 样品座

- 镀金无氧铜样品座
- 表面有沟槽，防止样品滑动
- 最大可容纳4英寸样品
- 安装温度传感器和加热器

### 探针臂

- 标配四个探针臂
- 可以进行X-Z-R三维移动
- 三同轴接头，漏电小
- 安装传感器，可时刻监测温度

### 真空外罩&防辐射屏

- 采用O圈和KF法兰密封
- 极限真空度能够达到 $5E-4$  mbar
- 防辐射屏安装温度传感器和加热器
- 真空上盖采用了翻折结构设计，避免每次拆装螺钉

### 光学系统

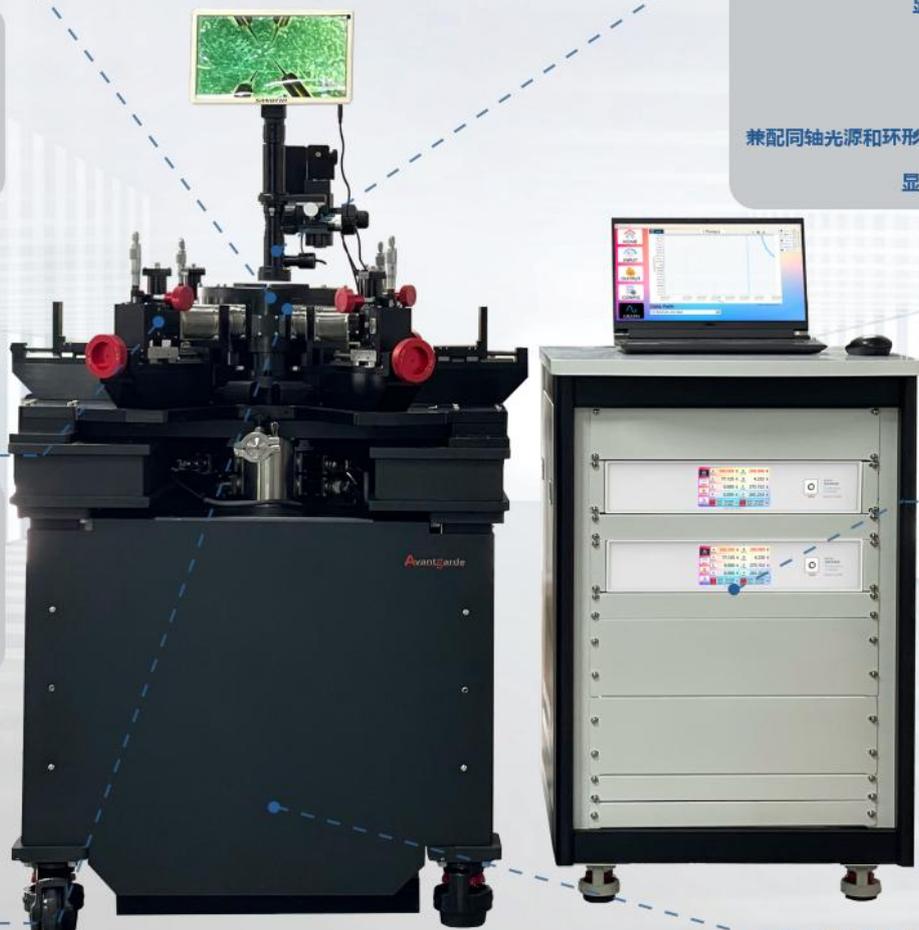
- 显微镜的放大倍数是10-180倍
- 工作距离90-100mm
- 分辨率 $3\mu\text{m}$
- 兼配同轴光源和环形光源，保证各种样品的清晰度
- 显示器有录像、拍照、测量功能

### 温度控制系统

- 闭环PID温度控制
- 可调节加热器输出
- 最大加热功率75W

### 特殊减振装置

- 振动小于 $1\mu\text{m}$
- 有效的隔离了制冷机电机和冷头产生的振动
- 结构紧凑避免使用吊装支架



### 其他低温探针台产品：

- PSM-LN2液氮高低温真空探针台
- PSM-PM系列永磁铁低温探针台
- PSM-65K系列闭循环低温探针台
- PSM-SM系列超导磁体低温探针台
- PSM-EM系列电磁铁低温探针台



## 公司简介

日立科学仪器（北京）有限公司是世界 500 强日立集团旗下日立高新技术有限公司在北京设立的全资子公司。本公司秉承日立集团的使命、价值观和愿景，始终追寻“以成为先端技术领域里提供高科技解决方案的全球第一为目标”的企业理念，通过与客户的协同创新，积极为教育、科研、工业等领域的客户需求提供专业和优质的解决方案。

我们的主要产品包括：各类电子显微镜、原子力显微镜等表面科学仪器和前处理设备，以及各类色谱、光谱、电化学等分析仪器。为了更好地服务于中国广大的日立客户，公司目前在北京、上海、广州、西安、成都、武汉、沈阳等十几个主要城市设立有分公司、办事处或联络处等分支机构，直接为客户提供快速便捷的、专业优质的各类相关技术咨询、应用支持和售后技术服务，从而协助我们的客户实现其目标，共创美好未来。

**研究/应用分类**

分离 / 分光分析	 液相色谱仪	 氨基酸分析仪			
	 荧光分光光度计	 紫外可见分光光度计	 紫外-可见-近红外分光光度计		
	 原子吸收分光光度计	 热重差热综合热分析仪	 平沼电化学产品		
表面分析	 AFM	 SEM	 TEM	 FIB-SEM	 CSI

## 联系方式：



**重庆办事处**  
重庆市九龙坡区科园一路 2 号大西洋国际大厦 1006 室  
电话：023-68794856

**成都办事处**  
成都市成华区航天路 118 号联东 U 谷成都新经济园 2 栋 1 单元 1 楼 103 号  
电话：028-85251595

**昆明办事处**  
昆明市盘龙区万宏路 119 号广瑞中心 25 层 2512 室  
电话：0871-65627504

# OUR BRANDS

## 天美旗下品牌

天美是中国品牌, 打造天美旗下多品牌协同发展的品牌战略



### 天美

- 1994年开始自主研发生产科学仪器;
- 产品包括紫外分光光度计、气相色谱仪、离子色谱仪、电子天平等。



### 达美柯

- 天美旗下生命科学及实验室通用设备品牌;
- 产品包括离心机、CO<sub>2</sub>培养箱、生物安全柜、紫外分光光度计等。



### 法莱宝

- 天美旗下生物样品培养及存储品牌;
- 2009年收购法国悠久历史的温控设备制造企业Froilabo;
- 温度控制领域拥有百年技术经验;
- 产品包括超低温冰箱、液氮罐、烘箱、生化培养箱和高低温冲击系统等。



### 普利赛斯

- 天美旗下高端电子天平品牌;
- 2010年收购瑞士称重产品制造企业Precisa;
- 在称重领域拥有近90年的研发制造经验;
- 产品包括电子天平、工业天平、快速水分测定仪和水分灰分仪等。



### 爱丁堡

- 天美旗下高端光谱品牌;
- 2013年收购英国高性能研究级光谱仪研发制造企业Edinburgh Instruments;
- 在分子光谱领域拥有50年的研发及生产经验;
- 产品包括稳态瞬态荧光光谱仪、拉曼光谱仪、瞬态吸收光谱仪、荧光寿命光谱仪、气体激光器、气体传感器等。



### 赛里安

- 天美旗下高端色谱/质谱品牌;
- 2014年收购源自瓦里安的布鲁克气相和气质产品生产线, 并沿用SCION品牌;
- 产品技术源自是久负盛名的瓦里安公司。

### 同位素质谱

- 2021年以控股方式收购热电离子质谱和稀有气体质谱研发生产公司Isotopx。



# PRODUCTS CONTENTS

## 产品目录

### 分析仪器

爱丁堡分子光谱系列之荧光光谱仪

爱丁堡分子光谱之荧光寿命成像模块

爱丁堡显微镜耦合方案升级FLIM测试模块

爱丁堡分子光谱之脉冲光源

爱丁堡系列脉冲光源

爱丁堡分子光谱之拉曼光谱仪

爱丁堡分子光谱之吸收光谱仪

爱丁堡气体激光器

爱丁堡气体传感器

天美紫外分光光度计

天美荧光分光光度计

同位素质谱仪

全自动水分灰分析仪

### 色谱仪器

天美气相色谱仪

赛里安8500 GC-8900 TQ三重四极杆气质联用仪

赛里安8300 GC-8700 SQ单四极杆气质联用仪

赛里安国产436i-eSQ单四极杆气质联用仪

赛里安LC6000高效液相色谱仪

赛里安Artemis 6000全自动氨基酸分析仪

天美IC 1020离子色谱仪

色谱数据系统

样品前处理及进样系统

### 实验室设备

Dynamica台式离心机

Dynamica落地高速冷冻离心机

Dynamica落地大容量冷冻离心机

Dynamica生物安全柜

Dynamica培养箱

Froilabo超低温冰箱

Froilabo低温液氮存储系统

NuAire生物安全柜

Tomy高压灭菌锅

### 实验室称量

电子天平

水分测定仪

工业天平

热分析仪

粘度计

# 四川蓝丰科技有限公司



大吨位 SPS 真空烧结炉

三温段热效应测试设备

热剂压机



多功能真空焊接炉

高温井式炉

球磨管

联系电话：13688022852

联系人：甯顺才

上海柯舜科技有限公司 (LINKPHYSICS) 于2008年成立, 始于代理国外的知名品牌, 是国内知名的低温设备制造厂商, 是集研发、生产、销售于一体的高新技术企业, 上海市“专精特新”企业、上海市宝山区企业技术中心、拥有ISO9001质量管理体系认证证书、2023年入选宝山区工业新升规快速成长企业, 主要为高校、科研院所、制造业研发中心及系统集成企业提供先进的半导体测试系统及科研仪器设备, 多年致力深耕低温磁场及探针台技术。

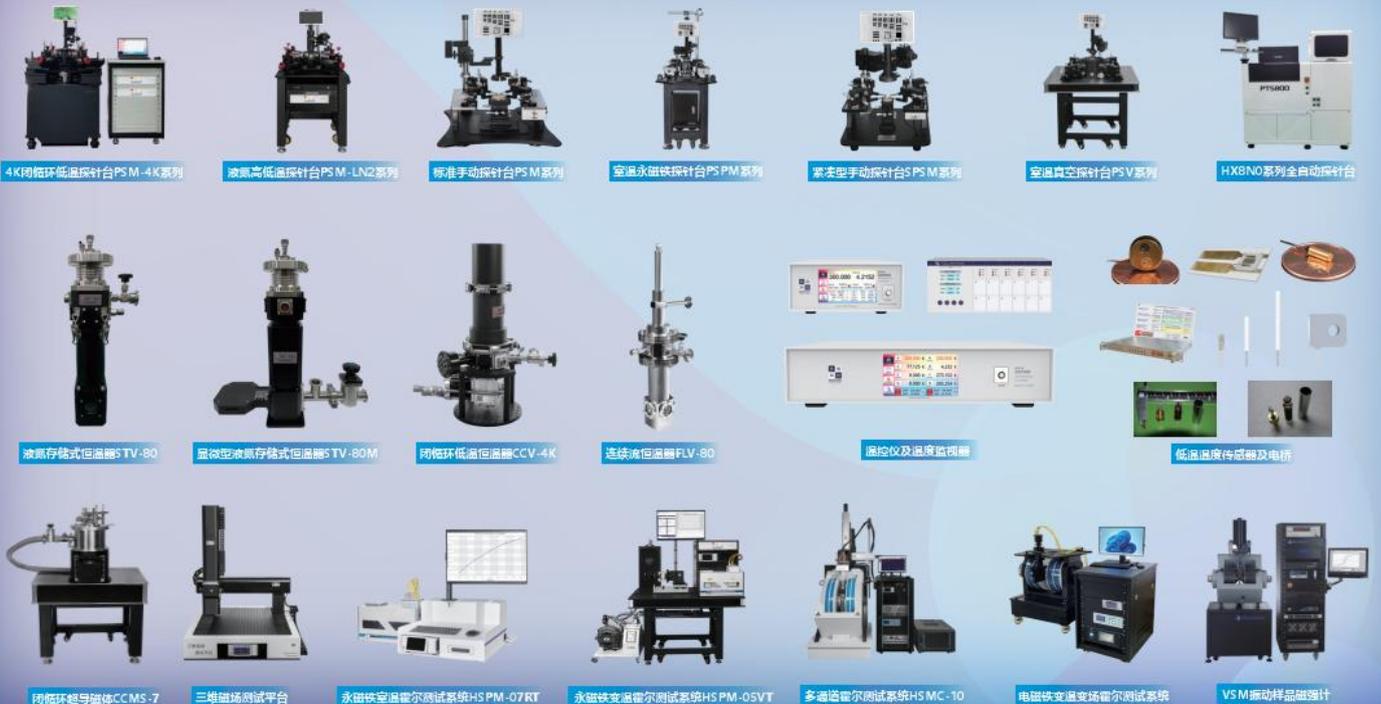


**4K闭循环低温探针台**

**4K闭循环低温探针台 PSM-4K系列主要特点:**

- 采用闭循环制冷, 无需消耗液氮, 最低温度4.5K
- 探针臂的位移调节在真空腔外操作, 可以在不破坏真空的情况下, 切换样品上不同器件进行测试
- 独特的探针臂 X-Y-Z-R四维调节, 能满足最大4英寸样品的测试
- 真空腔材质为铝制材料, 能够有效减小外界的电磁干扰提高测试的精准度和稳定性
- 探针臂采用三同轴接头, 漏电性能好, 实测漏电流小于100fA@1V@4.5K-350K
- 测试温度范围宽, 最大支持4.5K-350K连续变温
- 独特设计的探针设计, Guard保护直达针尖, 实现全通道三同轴结构

**公司主营产品:**



4K闭循环低温探针台PS M-4K系列

液氮高低温探针台PS M-LN2系列

标准手动探针台PS M系列

空温永磁探针台PS PM系列

紧凑型手动探针台PS M系列

空温真空探针台PS V系列

HXBNO系列全自动探针台

液氮存储式恒温器5 TV-80

液氮型液氮存储式恒温器5 TV-80M

闭循环低温恒温器CCV-4K

连续流恒温器FLV-80

温控仪及温度监测器

低温温度传感器及电桥

闭循环超导磁体CCMS-7

三维磁场测试平台

永磁体空温霍尔测试系统HS PM-07RT

永磁体变温霍尔测试系统HS PM-05VT

多通道霍尔测试系统HS MC-10

电磁铁变温变场霍尔测试系统

VS M振动样品磁强计





新型塞贝克系数/电阻测量系统



热电材料性能评价的经典设备

小型热电转换效率测量系统



适用于小模块热电器件的测量，可测单一样品

全新一代热电转换效率测量系统



最大温差500°C，测试热电器件的转换效率/发电量

Lake Shore霍尔效应测试系统



通过不同测试选件，可以选择15 K至1273 K温度环境，测量0.5 μΩ~200 GΩ的电阻，确定载流子浓度和载流子迁移率与温度的关系等

Lake Shore 全新M91快速霍尔测试仪



采用全新的FastHall 测量专利技术，在测量过程中无需翻转磁场，尤其是在使用强磁场超导磁体或测量极低迁移率材料时，可以实现更快、更精确的测量

电阻率—塞贝克系数扫描探针显微镜



集成化设计、全自动控制，操作起来非常简单，具有很高的可靠性



欢迎订阅 QDC 官方微信平台

Quantum Design China

北京市朝阳区酒仙桥路 10 号  
恒通商务园 B22 座 501 室  
邮编：100015  
电话：010-85120280

www.qd-china.com

上海市静安区威海路 511 号  
上海国际集团大厦 1703A 室  
邮编：200041  
电话：021-52280980

info@qd-china.com

广州市番禺区汉溪大道东 290 号  
保利大都汇 A3 栋 1509 室  
邮编：511495  
电话：020-89202739