

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

A02-热电材料与器件

A02-Thermoelectric Materials and Devices

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



A02. 热电材料与器件

分会主席：罗中箴、杨荣贵、陈玲、林悦、刘睿恒

主题报告**A02-01****纳米复合热电材料研究进展**

李敬锋*

清华大学

高性能热电材料需具备高赛贝克系数、高电导率和低热导率，然而这三者之间存在强耦合关系，难以实现独立调控。因此，热电材料研究的核心科学问题在于如何实现电热输运特性的协同优化。纳米复合结构能够有效增强声子散射，从而通过降低热导率提升热电优值，但如何在减少热导率的同时提高功率因子仍是一大挑战，其关键在于对纳米相与基体间界面结构的精准调控。本报告将聚焦于几个典型热电材料体系中的纳米复合策略，介绍近期的研究进展：在碲化铋体系中，发现纳米 SiC 颗粒与基体间的共格界面产生的“能量过滤”效应，以及非共格界面对基体内本征点缺陷的调制作用；在 GeTe 体系中，发现纳米 B 颗粒与基体间界面产生的“能量过滤”效应，以及界面热失配对基体内位错的引入效应；在 $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 体系中，发现纳米 Nb、Ta 颗粒与基体间的低阻界面可作为载流子“快速传输通道”，允许更多高能载流子参与电输运。这些研究成果揭示了纳米相与基体间界面结构对热电性能提升的重要作用。

A02-02

半赫斯勒化合物中的局域化学序与关联性能

朱铁军*

浙江大学

调控隐藏在周期性晶格中的局域化学序可突破元素种类的限制，为设计具备理想功能特性的材料提供新维度。然而，由于缺乏合适的研究体系，局域化学序与功能特性之间的构效关系仍然不明晰。近来，我们首次发现阳离子缺位半赫斯勒化合物存在空位短程有序-长程无序现象，且有序度可调，为研究局域化学序对功能特性影响提供了理想的实验范例。本报告介绍该类化合物相关研究进展，实现了在单一成分下空位有序度在长程序（LRO）与短程序（SRO）之间的连续调控。通过透射电子显微分析与蒙特卡罗模拟技术，我们成功解析了不同空位有序度下空位在实空间中的分布构型。研究发现，空位有序度密切且显著地关联半赫斯勒化合物的电学、磁学和热学性能。特别地，当空位有序度从 LRO 调至 SRO 时，电子态密度有效质量提升了两倍，且铁磁性也从无到有地出现。本报告提供了通过调控局域化学序来优化材料功能特性的新策略，并强调了在晶体中设计局域化学序以获得理想功能特性的巨大潜力。

A02-03

热电材料 Cu_2Se 相变和畸变的原位电镜研究

吴劲松*

武汉理工大学

快离子导体 Cu_2Se 半导体材料是一种有潜力的热电材料，具有热导较低的优点。但是由于快离子导体的特征，使得 Cu_2Se 在外温度场和电场的作用下会由于 Cu 离子的快速迁移，而产生有效材料的流失，导致性能很快衰减。我们结合最近发展的原位电子显微学来研究材料中由离子迁移和温度变化而产生的相变、应力等参数的变化。并通过高分辨扫描透射电子显微学确定了 Cu_2Se 和 Ag_2Se 等是极性半导体。得益于原位透射电子显微学的迅速发展，能够对材料在外场作用下的结构动态演变进行直接观察。我们利用原位电子显微学来研究了具有离子导体特征的半导体材料在温度、外加电压作用下产生的相变和电阻变化，探索它们的电阻变化机理。

A02-04**Development, Doping and Applications in Organic Thermoelectrics of n-Type Polymers**

Xugang Guo*

South University of Science and Technology, China

The advance of organic thermoelectrics (OTEs) highly relies on the design and synthesis of high-performance p-type and n-type organic/polymer semiconductors with comparable device performance. However, the device performance of n-type polymers lags greatly behind their p-type counterparts, hence limiting the advance of OTEs field. The development of high-performance n-type polymers hinges on the design and synthesis of highly electron-deficient building blocks with small steric hindrance, planar backbone, compact geometry, good solubilizing capability.

In this talk, I will present a series of imide-functionalized ladder-type bithiophene imide derivatives with up to five imide groups, and the polymer semiconductors built from them show remarkable performance in various organic (opto) electronic devices. On another hand, chemical doping is a basic technique for tuning charge carrier density, Fermi level, and electrical conductivity of organic semiconductors and improving the device performance of OTEs. However, n (electron)-doping is fundamentally more challenging than p (hole)-doping and typically achieves a much lower doping efficiency. We will discuss our progress on catalyzed molecular n-doping techniques based on various catalysts, including vapor deposited transistor metal nanoparticles, solution-processable surface-functionalized transition metal nanoparticles, and soluble organometallic complexes. The catalyzed molecular n-doping techniques together with the development of high-performance n-type polymers lead to superior device performance in OTEs.

A02-05

SnSe/SnS: 超越热电的多功能应用

赵立东*

北京航空航天大学

近年来，具有二维层状结构的 SnSe 和 SnS 材料因其优异的热电性能及独特的电热输运特性而广受关注。除在热电领域具有重要应用外，SnSe 与 SnS 独特的晶体结构还赋予这些材料丰富的物理特性，使其具有多功能、高集成化器件应用的潜力，成为当前最受瞩目的交叉学科热点之一。本报告分析了 SnSe 与 SnS 的基本物理性质，并概述了其在热电领域的重要研究成果。此外随着薄膜材料与纳米材料制备技术的发展，SnSe 与 SnS 也已成功应用于光热、光电和铁电等多个领域。我们系统阐述了该材料在太阳能电池、光电探测器、光催化等方面的多功能应用。并对 SnSe/SnS 等二维材料的潜在应用及发展做出展望。

A02-06

热电制冷面内散热的材料与器件研究

赵文俞*

武汉理工大学

集成电路芯片面内散热对基于热电厚膜的热电制冷技术提出了重大需求，但长期面临热电厚膜的热电性能太低和商用厚膜制冷器件是空白的难题。武汉理工大学材料复合新技术全国重点实验室热电磁材料与器件团队对热电制冷面内散热的热电转换厚膜材料及其制冷器件进行了系统研究，采用磁致增强热电性能新方法，实现了热电厚膜的热电性能显著提升，开发出了面向芯片面内散热的五节级联热电制冷厚膜器件。本报告的内容包括在热电厚膜材料中掺入磁性纳米粒子，实现在纳米尺度上协同调控电子/声子输运性能，创制高热电转换性能的厚膜材料；基于仿真模拟方法的五节级联热电制冷厚膜器件结构优化设计与性能预测，基于多束放电等离子体烧结方法的大尺寸厚膜制冷器件制造，基于热电制冷厚膜器件的芯片面内散热性能评价。

A02-07

方钴矿热电材料与器件

隋解和*

哈尔滨工业大学材料科学与工程学院

高性能热电器件需要性能优异的热电材料、高强低阻阻挡层、合理的结构尺寸和稳定可靠的连接。本报告主要聚焦本课题组在方钴矿热电材料的性能调控、放量制备、阻挡层设计和器件研制等方面的研究成果。通过额外添加等原子比的 Co 和 Si，在 $\text{Yb}_{0.3}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ 中原位构建了弥散分布的 CoSi 纳米第二相，协同调控热电输运行为，大幅提高了热电性能， $\text{Yb}_{0.3}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}/0.05\text{CoSi}$ 在 873 K 的 ZT 值高到 1.5。研究发现熔体旋甩方钴矿所得的旋甩薄带、喷溅产物和片状产物经烧结后均可完全转变为方钴矿纯相，将熔体旋甩制备方钴矿的产率提高至~91%，与传统仅利用旋甩薄带烧结的材料性能一致。提出烧结方钴矿块体与阻挡层粉体的热电接头制备工艺，有效降低了界面接触面积，抑制初始界面反应程度， $\text{Ti}_{88}\text{Al}_{12}/\text{Yb}_{0.3}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}/0.05\text{CoSi}$ 和 $\text{Fe}_{60}\text{Cr}_{30}\text{Co}_{10}/\text{Ce}_{0.45}\text{Nd}_{0.45}\text{Fe}_{3.5}\text{Co}_{0.5}\text{Sb}_{12.05}$ 接头的接触电阻率 $<2\ \mu\Omega\cdot\text{cm}^2$ 且能在 773 K 下稳定。为满足方钴矿器件高温端在 823 K 的长期稳定性，开发了“网状结构”的 NiCr 阻挡层，有效阻碍了 Ni 与方钴矿的界面反应，在 823 K 老化 70 天后， $\text{Ni}_{45}\text{Cr}_{55}/\text{Yb}_{0.3}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}/0.05\text{CoSi}$ 以及 $\text{Ni}_{75}\text{Cr}_{25}/\text{Ce}_{0.45}\text{Nd}_{0.45}\text{Fe}_{3.5}\text{Co}_{0.5}\text{Sb}_{12.05}$ 接头的接触电阻率分别为 $\sim 3.65\ \mu\Omega\cdot\text{cm}^2$ 和 $\sim 11.52\ \mu\Omega\cdot\text{cm}^2$ 。突破了瞬时液相焊低温连接-高温服役关键技术，研制的方钴矿器件在高温端 823 K，温差 500 K 的条件下，器件的转换效率为 8.61%

A02-08

微小温差热电转换的热工程思考

刘玮书*

南方科技大学材料系

热电转换可以实现热能和电能直接转换，是深空探测和固态制冷的关键技术，寻找高热电优值 ZT 的新材料成为领域共识。然而，怎样将热电转换技术拓展到其它更为广泛的微小温差场景人充满挑战。报告将从热工程的角度，重新思考在微小温差下的热电转换技术能够实现新功能、新价值的技术途径。报告将分别从太阳能利用、空气碳捕集、电子皮肤等新颖场景思考热电转换技术的潜在应该价值。对于太阳能利用，报告将讨论对于热电器件的热边界条件的再思考，从经典恒温边界条件到横热流边界条件；空气碳捕集是实现碳中和的关键技术，报告将分享利用热电转换实现循环的热调节，实现 CO_2 的吸附/脱出，以及循环热调节模式下材料优化策略与传统优化策略间的差异；最后，对于热电转换技术在电子皮肤领域应用，并实现恒温调节，汗腺仿生，以及热源识别等新颖功能。

A02-09

Ductile thermoelectric materials

史迅*, 仇鹏飞, 陈立东
中国科学院上海硅酸盐研究所

We report the recently discovered ductile inorganic thermoelectric materials such as Ag_2S and its alloys, and defective Bi_2Te_3 -based materials. They are typical semiconductors with excellent thermoelectric performance. At the same time, they are highly plastic, which are similar with the mechanical properties of metals. Furthermore, upon compositional optimization, these ductile materials can reach a delicate balance between high carrier mobility, power factor, a figure of merit and good mechanical plasticity. The good ductile thermoelectric materials open a new avenue for the fabrication of flexible and other new thermoelectric devices. These results promised an emerging paradigm and market of thermoelectric materials and devices.

References:

- [1] Deng, Tingting; Gao, Zhiqiang; Li, Ze; Qiu, Pengfei; Li, Zhi; Yuan, Xinjie; Ming, Chen; Wei, Tian-Ran; Chen, Lidong; Shi, Xun; SCIENCE, 386 (6726), 1112-1117 (2024).
- [2] Shen, Kelin; Yang, Qingyu; Qiu, Pengfei; Zhou, Zhengyang; Yang, Shiqi; Wei, Tian-Ran; Shi, Xun; ADVANCED MATERIALS, DOI 10.1002/adma.202407424 (2024).
- [3] Yuan, Xinjie; Qiu, Pengfei; Sun, Chuanyao; Yang, Shiqi; Wu, Yi; Chen, Lidong; Shi, Xun; ENERGY & ENVIRONMENTAL SCIENCE, 17 (14), 4968-4976 (2024).
- [4] Qiu, Pengfei; Deng, Tingting; Chen, Lidong; Shi, Xun; JOULE, 8 (3), 622-634 (2024).
- [5] Deng, Tingting; Gao, Zhiqiang; Qiu, Pengfei; Zhou, Zhengyang; Ming, Chen; Liu, Zhiping; Li, Zhi; Yang, Shiqi; Wei, Tian-Ran; Wang, Genshui; Chen, Lidong; Shi, Xun; ADVANCED MATERIALS, 36 (5), DOI10.1002/adma.202304219 (2024).

邀请报告

A02-10

拓扑半金属中的磁热电性能

王国玉*

重庆大学

拓扑半金属通常具有线性色散的电子能带结构，以及接近补偿的电子空穴载流子，这使其具有较好的磁热电性能。本报告以 HfTe_5 和 NbAs_2 作为例子来说明磁场对其横/纵向热电性能的调控作用。其中， HfTe_5 中的朗道量子化及 Lifshitz 转变使其在 1.4 T，一个永磁体即可达到的磁场，表现出好的横向及纵向热电性能； NbAs_2 中的高载流子迁移率及接近完美补偿的电子空穴浓度使其展现出高的横向热电性能。这些结果表明拓扑半金属是磁热电应用的有利候选者。

A02-11

 MnGeTe_2 化合物的热电输运性能优化

谭刚健，唐新峰

武汉理工大学

GeTe 是一种非常重要的中温热电材料体系，目前报道的最大热电优值已超过 2.0，但其在 700 K 左右发生菱方-立方结构相变，该过程伴随较大的体积和应力变化，易导致材料与器件的力学失效。虽然掺杂固溶可在一定程度上降低 GeTe 的相变温度，但受限于固溶度等原因，很难将其结构相变温度显著降低到室温以下。 MnGeTe_2 可视为 GeTe 与 MnTe 等摩尔固溶形成的三元化合物，其在室温以上具有稳定的岩盐立方结构，相较于 GeTe 具有更好的服役前景。我们重点研究了该三元体系的阳离子局域偏心行为，及其对热输运性质的巨大贡献。探讨了过渡元素 Mn 对能带形成的重要影响，这是 MnGeTe_2 具有超高态密度有效质量的关键因素之一。同时，利用其本征低载流子迁移率的特点，在 Ioffe-Regel 理论框架下，利用 Ag 与 Sb 的协同固溶，实现了晶格热导率的大幅度降低，以及能带结构的有效调控，材料的热电性能显著提升，在 873 K 达到 1.7。 MnGeTe_2 基化合物具有重要的中温热电应用前景。

A02-12

 $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 基热电材料的结构调控与性能优化赵琨鹏^{*1}，史迅²

1. 上海交通大学

2. 中国科学院上海硅酸盐研究所

Mg_3Sb_2 基热电材料具有原料丰富无毒、力学和热电性能兼优、可同时实现 p 型和 n 型导电等诸多优点，吸引了研究人员的广泛关注。然而，本征 Mg_3Sb_2 基热电材料存在载流子浓度偏低、价带简并度低、晶界散射严重等问题。本报告将介绍团队在 Mg_3Sb_2 基热电材料方面的系列进展：系统研究了不同元素掺杂改性对该材料体系的电子浓度和空穴浓度调控，成功将电子浓度和空穴浓度分别提升至最佳范围；通过能带整形策略提高了 p 型 Mg_3Sb_2 的价带简并度并降低了能谷有效质量，探讨能带整形对电输运性能的影响；利用液相烧结工艺调控 n 型 Mg_3Sb_2 的晶粒尺寸，缓和中低温区的载流子晶界散射，进而实现了热电性能的优化。

A02-13

镁基材料的磁热电性能研究

冯涛, 刘玮书, 张文清

南方科技大学

磁热电（横向热电）技术主要基于能斯特效应即在垂直于温度梯度的方向上施加磁场可产生垂直于温度梯度和磁场方向的横向热电势，可以实现热能与电能之间的直接相互转换，在能源转换及低温制冷领域中具有巨大的应用潜力。同时，其特殊的横向几何结构不仅有利于解耦电子和声子传输，还有助于简化热电器件。拓扑半金属由于其低能激发具有线性色散的特点，往往对磁场表现出明显的响应行为，被认为是一类具有广阔前景的磁热电材料。 Mg_3Bi_2 是近几年来发现的一种全新的拓扑材料，2022 年我们首次报道了通过缺陷工程手段可在该材料中实现强磁热电效应，并阐明了磁热电性能与材料中 Mg 缺陷的关系。在考虑自旋轨道耦合时， Mg_3Bi_2 为 Z2 拓扑绝缘体，相比于拓扑半金属（如 Dirac 半金属）的线性色散特性，Z2 拓扑绝缘体态 Mg_3Bi_2 的磁热电性能仍有巨大提升空间。针对这个问题，研究团队又创新性地提出通过锰掺杂引入负化学压力进而诱导拓扑相变增强磁热电效应的研究思路，最终在多晶 $\text{Mg}_{3+\delta}\text{Bi}_2\text{:Mn}_{0.1}$ 中实现了可媲美单晶材料的高磁热电性能。XRD 精修表明随着锰的引入， $\text{Mg}_{3+\delta}\text{Bi}_2\text{:Mn}_x$ 材料的晶胞体积逐渐增大。同时，材料的磁阻从 940% 提升至 16600%(2K, 14Tesla)，最终该材料的横向热电势和横向功率因子分别达到 617 $\mu\text{V/K}$ 和 20393 $\mu\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ (14 K and 14 Tesla)。此外，我们发现通过择优取向调控可进一步改善该材料的磁热电性能，横向热电势可提升 2 倍，表明择优取向是提升载流子迁移率进而构筑理想巡游电子环境的有效途径，同时也为高性能磁热电材料优化研究提供了新思路。

参考文献:

[1] Tao Feng, et al., *Advanced Materials*, 2022, 34, 2200931.[2] Tao Feng, et al., *Energy & Environmental Science*, 2023, 16, 1560-1568.[3] Tao Feng, et al., *Next Energy*, 2024, 3, 100105.

A02-14

SnTe 热电材料的声子输运与性能优化

王洪超*, 李志昊, 王春雷

山东大学

SnTe 作为潜在的中温热电材料，其热电性能受本征较高的热导率的制约，如何有效调控声子输运以降低热导率仍需深入探究。本研究分析了 $(\text{SnTe})_{1-x}(\text{MnTe})_{0.5x}(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.5x}$ 样品的高阶非谐性对热电性能的影响。用最小二乘法对 $x = 14\%$ 样品的线热膨胀位移数据进行拟合，结果表明样品具有很强的晶格非谐性。通过拉曼散射光谱测试，观测到 $x = 14\%$ 的样品在 22 和 30 cm^{-1} 波数出现峰位，表明样品存在光学声子软模。利用布里渊散射光谱观测高频声学声子散射图谱，发现 $x = 14\%$ 样品的布里渊散射光谱出现宽化；同时利用高斯函数拟合分析，得到样品的声速和声子寿命，进而证明了低晶格热导率是由声子寿命降低引起的。最终，样品的最低晶格热导率达到 0.5 $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ ，最高 zT 值达到 1.3。基于非谐性的发现与作用，提出引入化学压力以增强晶格非谐性，从而加强声子-声子相互作用的热输运调控策略。通过 Pb 取代掺杂在 SnTe 中引入负化学压力，利用固体状态方程标定压力的数值。通过对变温拉曼光谱频移与展宽的拟合，揭示了四声子散射的增强。对布里渊光谱进行分析，发现由于声学、光学声子的散射增强，纵向声学声子寿命明显缩短。利用密度泛函理论计算，发现在化学压力驱动下，声子模式在 2-3 THz 频率范围内出现软化，声子态密度展宽，三声子和四声子的散射相空间增大以及散射率升高。最终，最低热导率达到 0.6 $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ ，最高 zT 值为 1.3。这些研究结果表明，非谐性可以有效调控 SnTe 的声子输运，进而实现热电性能的优化。

A02-15

基于热电/磁卡复合制冷技术的热电磁多功能材料

魏平, 赵文俞*, 张清杰

武汉理工大学

热电/磁卡制冷是一种将热电制冷与磁卡制冷集成的复合制冷技术。我们将重点介绍本团队围绕热电磁多功能材料开展的系列工作，涉及磁性热电材料和热电/磁卡复合制冷材料的制备与性能优化。在磁性热电材料方面，我们研究了 Mg_3Bi_2 材料中引入磁性粒子的负磁阻优化热电性能的作用机制，探究了 Mn 掺杂 GeTe 体系中铁磁有序和外磁场抑制自旋涨落改善材料电热输运的内在原因；在热电/磁卡复合制冷材料方面，我们采用低温高压放电等离子烧结工艺制备了同时具有良好热电性能和磁熵变性能的 $\text{Gd}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 基和 $\text{LaFeSi}/\text{Bi}_2\text{Te}_3$ 基热电磁多功能材料，揭示了复合材料内部热电/磁卡相异质界面反应机制，探索了界面反应层对电热输运性能和磁性能的影响规律。这些研究为发展热电/磁卡复合制冷技术起到了重要支撑作用。

A02-16

横向反常能斯特热电材料性能优化及其原型器件

付晨光*, 陈梦朝, 朱铁军

浙江大学

基于能斯特效应的横向热电器件具有独特的结构优势，在器件设计与系统应用方面具有灵活性。2018 年以来，随着磁性拓扑材料的发现，基于磁性拓扑材料反常能斯特效应的横向热电研究开始受到越来越多的关注。本报告将介绍我们近期在 Co_2MnGa 赫斯勒基横向反常能斯特热电材料及其原型器件研制方面的工作。我们揭示了反常能斯特热电势和纵向电导率分别由熵函数加权的贝利曲率强度和费米面主导的物理机制，提出了通过费米能级位置移动同时优化反常能斯特热电势和纵向电导率的策略，实现了反常能斯特功率因子和横向热电优值的显著提升。研制了数个原型 Co_2MnGa 基能斯特热电器件，证实了能斯特热电器件输出电压随材料长厚比增大而增大的结构优势；优选出 Ni 作为 Co_2MnGa 基能斯特热电器件的低阻异质界面阻挡层材料，使得器件内阻降低了 61%，在 16.1 K 温差下，所研制的横向反常能斯特器件开路电压达 6.0 mV，最大输出功率达 $69.7 \mu\text{W}$ ，比基于常规磁性材料的能斯特器件性能高出 2 个数量级。

参考文献：

- [1] M. Z. Chen, S. Qian, Z. H. Gao, S. Liu, S. Han, T. J. Zhu, Y. Sun, C. G. Fu. Design of anomalous Nernst thermoelectric generators for giant power output, *The Innovation*, 2025, in press.
- [2] M. Z. Chen, J. L. Wang, K. Liu, W. F. Fan, Y. Sun, C. Felser, T. J. Zhu, C. G. Fu. Topological Heusler Magnets-Driven High-Performance Transverse Nernst Thermoelectric Generators, *Advanced Energy Materials*, 2024, 14(21), 2400411.

A02-17

Develop High-Performance Metal Chalcogenides Thermoelectric Materials

Min Hong*

University of Southern Queensland

Thermoelectric materials have attracted worldwide attention for applications in power generation, waste heat recovery, and refrigeration. Enhancing figure-of-merit (zT) is the priority to realize mass-market applications, which is mainly achieved by decreasing thermal conductivity and enhancing the power factor. My research includes the following aspects. (1) Nanostructure engineering. Various types of nanostructures and lattice imperfections have been developed including dislocations, stacking faults, planar vacancies, and superlattice precipitates. (2) Theory Innovations. Guided by the big-data survey, an intuitive method was established to guide the enhancement of thermoelectric performance. Moreover, with the density-functional-theory calculations, fundamentals based on molecular orbital theory were explored to screen the dopants for achieving band convergence, and phonon engineering was proposed to strengthen inherent phonon scatterings. (3) High-performance materials. Benefiting from the rational design of nanostructures and innovative theories, quite high thermoelectric performance has been realized in materials of Bi_2Te_3 , SnTe , SnSe , PbTe , etc. Recently, record-high thermoelectric performance has been achieved in GeTe-based materials.

A02-18

Sb 离子掺杂 ZrNiSn 半哈斯勒合金的声子谱研究

马杰^{*1}, 杨炯², 付晨光³

1. 上海交通大学
2. 上海大学
3. 浙江大学

ZrNiSn 合金一直被认为是遵守 18 电子规则的典型半哈斯勒材料：不仅原子含量比保持 1: 1: 1，而且 Ni 离子严格占据 4d 位。近年来，我们利用中子衍射率先发现 ZrNiSn 的单晶和未经热处理的多晶样品不仅比经过热处理的样品在 4c 和 4d 位点表现出更均匀的 Ni 分布，而且 Sb 离子的掺杂可以诱导/调控 ZrNiSn_{1-x}Sb_x 中 Ni 原子与 4c 位的缺陷发生无序占位。通过利用非弹性中子散射及非弹性 x 光散射技术，我们分别对 ZrNiSn 多晶和单晶样品的声子谱开展测试，讨论了相关晶格动力学及热导率的起源。这些结果不仅进一步揭示了原子无序和缺陷是影响电子和声子输运的有效手段，而且为新型热电合金的设计和生长提供了思路。

A02-19

有序无序转变的电子显微学研究

葛炳辉*

安徽大学

微观结构决定热电材料的性能。比如完美晶体的晶格热导率高，但是电子电导率也高；相反的，无序结构或者缺陷会降低晶格热导，但是也会造成电子的散射。所以研究材料结构或者研究有序无序的转变，对于理解材料的物性有重要的意义。本报告主要介绍利用原位球差矫正电镜研究材料无序有序转变过程，包括非晶晶化，熔体凝固等方面。通过原子尺度的观察，理解物质尤其是有序态物质的形成机理，为原子级别制造和操控提供依据。

A02-20

N-型 Mg₃(Bi, Sb)₂ 单晶生长中的缺陷抑制与性能优化

夏盛清*, 周顺, 田雨, 王琦琦

山东大学

n-型 Mg₃(Bi, Sb)₂ 基热电材料具有本征低的热导率，通过载流子调控可实现优异的室温热电性能。由于 Mg 基热电材料构成元素丰富、无毒、成本低廉，极有希望替代当前商业化的 Bi₂Te₃ 热电材料。然而，未掺杂的 Mg₃(Bi, Sb)₂ 材料表现为 p 型导电或热电性能较差，因此在合成过程中常使用过量的 Mg 以保证其性能。尽管多晶材料研究表明，不同 Mg 含量热电材料的电性能相近，但是过量 Mg 的引入导致材料内部形成富 Mg 相包裹物，使热导率升高并削弱其长期稳定性。本工作中，通过优化组分 Mg_{3.1}Li_yBi_{1.49}Sb_{0.5}Te_{0.01} 生长了一系列高质量的 Mg 基热电单晶，该材料不仅有效消除了富 Mg 包裹相和晶体缺陷，并且通过调控掺杂 Li 的含量精确控制了载流子浓度。研究表明，Li 不仅可以提供有效的电子补偿，显著提升载流子浓度和功率因数，同时还能够增强声子散射和抑制双极效应，大幅降低材料的晶格热导率。基于 Mg_{3.1}Li_{0.003}Bi_{1.49}Sb_{0.5}Te_{0.01} 单晶，我们在 300 K 获得了 1.05 的高 zT 室温性能，优于当前先进的室温热电材料，显示出极具前景的制冷应用潜力。

A02-21

掺杂元素晶界偏析增强 p 型 Mg₃Sb₂ 热电性能

李周*

安徽大学

通过降低晶界密度或晶界散射强度，可以削弱多晶热电材料中不利于电荷载流子传输的晶界散射。对于 Mg_3Sb_2 基热电材料，通过抑制有害的晶界散射进而优化热电性能的策略已经在其 n 型材料中得到了广泛证实和应用，但对于性能滞后的 p 型 Mg_3Sb_2 热电材料此类问题尚未得到系统研究。针对这一问题，本报告将介绍 p 型 Cd 掺杂的 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2\text{-NaF}$ 中的晶界偏析调制削弱晶界散射以增强其热电性能。研究发现 Cd 元素进入 Mg_3Sb_2 基底中会在晶界处偏析，降低了晶界势垒和晶界散射强度从而增加了空穴迁移率。与此同时，Cd 元素在晶粒内部仍然保持均匀掺杂，这优化了晶体缺陷类型并增加了空穴浓度。这些益处结合 Cd 掺杂之后相对稳定的 Seebeck 系数，共同实现了电导率和功率因数的显著提高。另一方面，晶界 Cd 偏析和晶粒内部 Cd 掺杂同时增强了声子散射并降低了声速，大大抑制了热导率。最终，热电性能显著提高， $\text{Mg}_{2.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Sb}_2\text{-1\%NaF}$ 样品在 773 K 时取得最大 ZT 值 0.84，处于 p 型 Mg_3Sb_2 基热电材料中较高水平。这些发现提供了对晶界特征及其与输运参数相互作用的深入理解以促进高性能热电材料的研究。

A02-22

掺杂元素晶界偏析增强 p 型 Mg_3Sb_2 热电性能

李周*

安徽大学

通过降低晶界密度或晶界散射强度，可以削弱多晶热电材料中不利于电荷载流子传输的晶界散射。对于 Mg_3Sb_2 基热电材料，通过抑制有害的晶界散射进而优化热电性能的策略已经在其 n 型材料中得到了广泛证实和应用，但对于性能滞后的 p 型 Mg_3Sb_2 热电材料此类问题尚未得到系统研究。针对这一问题，本报告将介绍 p 型 Cd 掺杂的 $\text{Mg}_3\text{Sb}_2\text{-NaF}$ 中的晶界偏析调制削弱晶界散射以增强其热电性能。研究发现 Cd 元素进入 Mg_3Sb_2 基底中会在晶界处偏析，降低了晶界势垒和晶界散射强度从而增加了空穴迁移率。与此同时，Cd 元素在晶粒内部仍然保持均匀掺杂，这优化了晶体缺陷类型并增加了空穴浓度。这些益处结合 Cd 掺杂之后相对稳定的 Seebeck 系数，共同实现了电导率和功率因数的显著提高。另一方面，晶界 Cd 偏析和晶粒内部 Cd 掺杂同时增强了声子散射并降低了声速，大大抑制了热导率。最终，热电性能显著提高， $\text{Mg}_{2.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Sb}_2\text{-1\%NaF}$ 样品在 773 K 时取得最大 ZT 值 0.84，处于 p 型 Mg_3Sb_2 基热电材料中较高水平。这些发现提供了对晶界特征及其与输运参数相互作用的深入理解以促进高性能热电材料的研究。

A02-23

高熵氧化物热电陶瓷的高压制备与性能优化

马红安*

吉林大学物理学院高压与超硬材料全国重点实验室

工业废热发电和深空探测用 RTG 温差发电驱动着新一代高性能氧化物热电材料的发展。高温氧化物热电材料具有环境友好、高温下良好的化学稳定性和热稳定性、良好的力学性能、储量丰富、原料廉价等优势。但氧化物热电材料尤其是 N 型氧化物材料的热电性能普遍较低，其高的电阻率和热导率是制约其热电性能提升的关键因素。探索新型氧化物热电材料体系，调控其宽带隙，并协同优化电声输运，提升其热电性能是目前该领域的前沿和挑战性课题。高温高压合成技术提供了独立于温度和化学组分之外的更大范围内调控材料晶体结构、电子结构、化学组分和微观组织并进而优化材料性能的新手段和新途径，在制备高熵氧化物热电陶瓷的研究中已经显现出其独特的优势。本报告将介绍大腔体高压合成技术在制备块体高熵氧化物热电陶瓷方面的应用，并总结高温高压手段对高熵氧化物热电陶瓷热电输运性能的调制规律和优化机制。

A02-24

热电材料微纳力学行为及强韧化机制

李国栋*

武汉理工大学

过去 20 年，热电材料的热电性能已取得突破性进展，但是，传统的高性能热电材料通常表现为本征脆性，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、使用寿命低，发展热电材料力学性能增强理论、显著提升热电材料力学性能是热电转换技术从实验室走向工业化必须突破的瓶颈。

团队长期致力于研究热电半导体力学行为理论方法与强韧化机制研究。本报告主要介绍团队近年的主要创新性成果：开发了一种纳米孪晶和层错策略来增强 Bi_2Te_3 、 InSb 和 PbTe 半导体；证明了高密度堆叠断层、交错层可以显著增强 Bi_2Te_3 的层间相互作用，同时提高微柱内的抗压强度和薄膜器件的灵活性， Bi_2Te_3 的极限抗剪强度增加了两倍；提出了一种掺杂策略以协同提高 SnTe 的热电性能和强度。

A02-25

拓扑绝缘体 Bi-Sb 单晶的磁塞贝克效应

潘瑜*

重庆大学

热电效应可实现热能与电能直接相互转化，在温差发电、固态制冷与精准控温等领域具有广泛应用潜力。经典热电材料重点关注重掺杂窄带隙半导体材料，其优异热电性能在室温以上 ($>300\text{ K}$)。迄今，低温 ($<300\text{ K}$) 热电性能的进一步提升面临重大挑战，严重制约了热电材料的低温固态制冷应用。近年来，新型量子材料的兴起引发了诸多新奇热电输运行为，尤其是磁场下显著增强的低温热电性能，为大幅提升低温热电性能提供了新的机遇。例如，以拓扑量子材料为代表，其线性色散能带结构与超高迁移率使得磁塞贝克效应和能斯特效应显著增强。 Bi-Sb 单晶因此展现出高达 1.7 的塞贝克热电优值 (于 180 K , 0.7 T)，为低磁场乃至零磁场下反常能斯特效应的热电应用奠定了科学基础。

A02-26

高压下微观结构设计对热电材料性能的优化

孙海瑞*, 陈欣, 刘晓兵, 张永胜

曲阜师范大学

如何解耦电和热输运参数之间的制约，从而实现协同优化，一直是热电材料领域的核心科学问题。本研究采用高温高压技术，通过对单质 Te 基和 Ag_2Se 基热电材料的微观结构精确设计，实现了对材料电输运和热输运性能的系统调控。在电输运性能方面：通过在单质 Te 基材料内部构建 Te -黑磷异质结结构，显著优化了载流子的输运行为，使材料的电学性能获得系统性提升。特别是在 4.5 GPa 的高压制备条件下，同步实现了热导率的有效降低，使该体系的 ZT 值突破至 1.1；进一步地，在单质 Te 基材料的晶界处构建导电通道，不仅显著提高了载流子迁移率，同时晶界出纳米颗粒作为高效的声子散射中心可有效抑制了晶格热导率，最终将单质 Te 基材料的 ZT 值进一步提升至 1.2。在热输运性能方面：在 Ag_2Se 基体中成功构筑了多尺度分布的微观孔洞结构，使材料的热导率显著降低至 $0.52\text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。同时，特殊的孔洞结构消除了晶界势垒，维持了材料优异的电输运性能。该材料在 398 K 的获得 1.47 的高 ZT 值，单腿器件热电转化效率达到 5.1%。我们的工作表明，通过高压微观结构设计策略，可成功实现电学与热学性能的协同优化，为热电材料性能改善提供了新的研究思路。

A02-27

AgSbSe_2 中的载流子散射势调控与表征

卢旭*

重庆大学物理学院

热电性能高度依赖于载流子迁移率，而载流子迁移率主要由散射势所调控。然而，目前对总散射势能的实验测量以及区分本征和额外散射的贡献仍存在困难。我们利用飞秒级泵浦-探测超快光谱技术，成功定量测量了 AgSbSe_2 中的载流子散射势，发现在 Cd 掺杂的高质量 AgSbSe_2 晶体中，晶界的消除和短程有序

微观结构的重构有效降低了总散射势，在 323 K-723 K 范围平均功率因子提升三倍。在 723K 时， $\text{AgSb}_{0.973}\text{Cd}_{0.017}\text{Se}_2$ 晶体实现高热电优值 1.7，单腿热电器件效率达到 8%。

A02-28

固溶度调控优化热电材料性能研究

葛振华*

昆明理工大学

掺杂优化载流子浓度，提升热电性能在热电材料中是常见的优化方法。但是有效掺杂是高效优化载流子浓度的关键。受到固溶度的影响，一些元素掺杂量较小，难以充分优化载流子浓度。本课题组之前的研究发现在不同热电材料体系中调控固溶度的方法，并优化了材料的热电性能。比如在多晶 p 型 SnSe 体系中，Na, K 共掺杂，K 元素的掺杂提升了 Na 元素在 SnSe 中的固溶度，并同时调整了能带结构，引入了点缺陷，优化了热电性能。在碲化铋体系中发现 S 元素能够提升 Na 元素的固溶度，实现了在 p 型 BST 中的高效固溶掺杂，获得了高的热电性能。在硫化铜体系中使用铜合金代替铜粉，实现了部分在硫化铜中难掺杂元素的有效掺杂，获得了优异的热电性能和力学性能。同时发现 FeCoNi 合金掺杂硫化铜时，Co, Ni 元素能够降低 Fe 在硫化铜中的固溶度，引入大量纳米第二相，降低热导率，提升热电性能。综上，固溶度增强可以提升掺杂浓度，提升电性能优化材料的热电性能，固溶度降低可以调控第二相数量和尺寸亦可以降低热导率优化热电性能。

A02-29

超重力燃烧合成高性能热电材料

周敏*, 鲁安奎, 李来凤

中国科学院理化技术研究所

超重力燃烧合成技术是在自蔓延燃烧合成的同时施加超重力场，在超重力场的作用下迅速排除热电材料熔体内的气泡和杂质，一步生成致密的块体材料。在自蔓延燃烧结束，熔体凝固过程中超重力场促进其塑性变形，引入大量位错等微结构缺陷，增强声子散射、降低热导率。超重力燃烧合成的 SnTe , Bi_2Te_3 , BiSb 等热电材料都展示出较小的晶格热导率和较大的热电优值 ZT 。本文介绍了超重力燃烧合成 SnTe , Bi_2Te_3 , BiSb 等热电材料的研究结果。

A02-30

近室温硒化铅热电材料与制冷器件

肖钰*

电子科技大学

热电制冷技术在集成电路散热、光通讯控温及生物医疗冷却等领域具有重要应用。然而，目前商用碲化铋 (Bi_2Te_3) 热电制冷材料中碲元素的高成本限制了其在制冷领域中的广泛应用。本研究以低成本硒化铅 (PbSe) 热电材料为目标，开发其近室温制冷性能。针对 n 型 PbSe 材料，研究利用 Cu 和 Pb 双重金属间隙掺杂策略，以动态优化电子传输，使 $\text{Pb}_{1.02}\text{Se}-0.2\%\text{Cu}$ 样品的最大功率因子达到 $32.83 \mu\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，室温 ZT 值达到 0.54；而对于 p 型 PbSe 材料，通过 Pb 空位和 Cu 置换掺杂来优化空穴浓度，使 $\text{Pb}_{0.988}\text{Cu}_{0.002}\text{Se}$ 样品的最大功率因子达到 $28.69 \mu\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，室温 ZT 值达到 0.60。基于 n 型和 P 型 PbSe 材料，我们成功制备了由 7 对热电臂组成的 PbSe 基对称热电器件，在热端温度保持在 303 K 和 343 K 时，其制冷温差 (ΔT_C) 可分别达到 32.8 K 和 41.0 K。与商用碲化铋器件相比， PbSe 基对称热电器件在近室温制冷方面展现出较高的成本效益 ($\Delta T_{C/\text{cost}}$)，证明了 PbSe 热电材料在制冷领域的应用潜力。

A02-31

全镁基热电材料的进展与挑战

赵怀周*

中国科学院物理研究所

在过去几十年里，热电材料在制冷和废热回收领域的巨大应用潜力引发了人们广泛兴趣。迄今为止，尽管 Bi_2Te_3 作为近室温热电制冷与发电技术的主导商用材料，却始终受制于较低的优值 (zT) 和碲资源稀缺的瓶颈。因此，研究者们正致力于开发基于新型材料体系、兼具优异性能与低成本优势的新一代近室温 ($\leq 573\text{K}$) 应用热电模块。本次报告中，我将重点介绍我们在镁基高性能热电材料领域的最新进展，包括 P 型 $\alpha\text{-MgAgSb}$ 和 N 型 $\text{Mg}_3(\text{Bi,Sb})_2$ 体系。报告将聚焦于全镁基热电材料与模块在制冷及发电功能上的研究成果，尤其是器件在热端温度 $T_h \leq 583\text{K}$ 时实现了 12% 的热电转换效率，其制冷性能参数（如温差 ΔT 、性能系数 COP、制冷量 Q_c 等）均显著超越商用 Bi_2Te_3 模块。这些结果充分展现了镁基合金热电材料在近室温废热回收与固态制冷应用中的巨大潜力。最后，我将探讨镁基热电材料与模块未来实际应用中面临的关键挑战。

A02-32

 Mg_3Sb_2 基材料的电子结构调控及其热电性能提升机理和器件性能的研究

苗蕾*, 梁继升, 朱思静

广西大学

Mg_3Sb_2 -based Zintl compounds offer great potential for mid- to high-temperature thermoelectric applications due to their non-toxicity, low cost, and favorable electronic properties. In our work, we systematically developed a series of high-performance p-type and n-type Mg_3Sb_2 -based materials through targeted doping and structural design strategies, with a strong emphasis on synthesis control and device-level integration. For p-type materials, we employed co-doping of Na at the cation site and Bi at the anion site to simultaneously modulate the band structure and enhance phonon scattering. This strategy enabled a competitive ZT of 0.73 at 773 K, supported by a high power factor and reduced lattice thermal conductivity via Bi nanoprecipitates. A double-leg thermoelectric device assembled using this material achieved a conversion efficiency of 4.1% under a 390 K temperature difference. To address the mobility limitations in n-type $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$, we introduced Be as a cationic dopant to weaken bond polarity and improve electronic transport. This approach led to a significant mobility increase (from ~ 62 to $\sim 138 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$), a peak ZT of 1.54 at 673 K, and a high average ZT of 1.17. Further, we developed a dual-modulation doping strategy by integrating Zr-doped and intrinsic $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ phases to form electronic high-speed channels. This composite achieved a record-high average ZT of 1.7 and enabled a single-leg device with 13.6% conversion efficiency at a 467 K temperature difference. Our work demonstrates that precise compositional tuning, defect engineering, and phase boundary design can be effectively leveraged to boost both material- and device-level thermoelectric performance. These advances provide a robust foundation for the development of scalable and efficient thermoelectric systems based on Mg_3Sb_2 derivatives.

A02-33

基于“变形因子”的无机塑性半导体的筛选与设计

魏天然*

上海交通大学

脆性是制约包括热电材料在内的多种无机半导体变形、加工和多场景应用的瓶颈。在无机半导体中诱导或实现类似金属的塑性，一直以来是材料领域的重要挑战。报告人及团队前期发现了具有超常室温塑性的 InSe 等范德华单晶半导体材料，揭示了其塑性变形的微结构和化学键机理。在此基础上，报告人提出一个包含滑移能垒、解理能和杨氏模量的“变形因子”，建立了相关参量的自动化计算流程，筛选出数十种塑

性范德华晶体材料。进一步，将变形因子拓展到高温，建立了温度相关的塑性物理模型，预测并验证了一系列具有低韧脆转变温度（小于 500 K）的无机半导体材料。采用类似金属的冷加工或温加工方法（如冷轧、挤压、平板压），高效便捷地制备了高质量、大尺寸、高性能半导体膜、带、片、棒等，研制了高功率密度热电器件。

A02-34

电子熵的调控助力深低温与室温 Thomson 热电制冷

陈志炜，裴艳中*

同济大学

Thomson 效应是电子在热电材料的体内产生熵变所引起的吸放热效应。由于近自由电子气近似下的输运电子在传统半导体内部的熵变非常小，导致 Thomson 效应在经典热电材料中几乎可以忽略不计。这也导致了高性能热电制冷器的开发主要基于 Peltier 效应（其中吸放热发生在热电材料与电极材料的接点处），使得提高 ZT 成为提高制冷性能的唯一途径。本工作利用电子态的相变，在强关联体系 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 38K 的深低温下实现了大于 5 K 的稳定温差，使环境温度下降了约 15%。基于非平衡热力学，本工作进一步定义了广义 Thomson 系数，通过调控室温热电材料的电子输运熵，将经典热电材料的广义 Thomson 系数提高了 200%~700%。在保持 ZT 不变的情况下，实验剥离出 Thomson 效应额外贡献了 20%以上的室温热电制冷温差。本工作为热电制冷器的开发提供了一种新的方法，也为固态热电制冷应用提供了新的机会。

A02-35

Te 基热电器件的界面结构调控和输运特性

陈少平*

太原理工大学

以单质 Te/Ni 界面为研究对象，结合界面热力学、动力学和界面微观结构等影响原子迁移驱动力和阻力的因素，提出普适性的界面阻挡层设计策略。重点研究了界面微观结构和应变状态对界面稳定性的影响，发现共格应变是原子扩散的有效驱动力，具有高密度刃位错的半共格界面结构驰豫可有效缓解界面处的原子扩散。 $\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$ 阻挡层的引入使器件界面接触电阻率降低了 45%，转换效率提高了 17%，且在 473 K 时效 15 天过程中，接触电阻率及转换效率几乎不变。

A02-36

热电界面构筑与器件性能优化

昂然*

四川大学

本报告针对热电界面与器件设计展开系统研究，涵盖 n 型 PbSe 、n 型 $\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 、p 型 SnTe 及 p 型 GeTe 基体系。对于 n 型 PbSe ，通过 Cu 掺杂实现了晶格缺陷工程，优化了电子和声子输运性质，在温差 $\Delta T = 460 \text{ K}$ 下，达到了峰值 $zT \sim 1.9$ 以及热电转换效率 (η) $\sim 13.1\%$ 。在 p 型 GeTe 中，为克服铅毒性问题，通过 Bi 掺杂和 MXene 纳米结构的引入提升了其结构对称性和载流子迁移率，在 603 K 下获得峰值 $zT \sim 2.1$ ，在 $\Delta T = 300 \text{ K}$ 下 η 为 7.5%。 $\text{Ge}_{0.9}\text{Pb}_{0.1}\text{Te}+0.9\%\text{Zn}_4\text{Sb}_3$ 体系通过增强载流子输运与声子散射，在 753 K 时实现 $zT \sim 2.1$ ，对应的器件输出功率密度为 1.46 W cm^{-2} ($\Delta T = 350 \text{ K}$)。通过在 GeTe 中构建多相共格纳米界面网络，改善了载流子迁移率并降低了热导率，在 803 K 时实现 $zT \sim 2.22$ ，在 303-803 K 范围内平均 zT 可达 1.40，在 $\Delta T = 400 \text{ K}$ 下 $\eta \sim 7.0\%$ 。对于 p 型 SnTe ，通过有序晶界重构抑制了双极扩散效应，在 300-850 K 范围内实现了平均 $zT \sim 1.0$ 。由 p 型 SnTe 和 n 型 PbSe 组成的七对热电器件在 $\Delta T = 350 \text{ K}$ 下实现了 $\eta \sim 10.5\%$ ，功率密度为 2.0 W cm^{-2} 。此外，开发了基于 $\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 热电材料的多功能热电传感原型器件，展示了对不

同热刺激的快速响应和精确检测能力，实现了热电传感交叉领域的广泛可能性。通过热电界面构筑与器件性能优化，可有效突破热电材料固有瓶颈，为热电材料与器件集成应用提供理论与技术支撑。

A02-37

高效可靠的镁基热电器件

张骐昊^{*1}, 王连军², 江莞¹

1. 东华大学功能材料研究中心, 上海, 201620

2. 东华大学先进纤维材料全国重点实验室、材料科学与工程学院, 上海, 201620

高效可靠热电器件的开发对可持续能源转换（尤其是中低温废热回收领域）具有重大意义。本报告将系统阐述本课题组近三年在 Mg_3Sb_2 与 MgAgSb 基热电器件研究中取得的核心突破，重点涵盖材料优化、界面工程及器件集成三大研究方向。首先，通过构建 n 型 $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ /p 型 CoSb_3 异质结体系，我们在 750 K 工况下实现了 9% 以上的转换效率，为环境友好型热电器件树立了新基准。进一步开发的全 Mg_3Sb_2 同质器件利用材料本征兼容性优势，在长期热循环测试中同时保持 7.5% 效率与优异机械可靠性。在界面动力学调控方面，采用钛扩散阻挡层策略将接触电阻降至最低并实现界面稳定化，最终获得 11% 的破纪录效率。此外，我们最新提出的原子尺度界面强化技术，通过增强化学键合作用使 MgAgSb 基模块在 10.2% 效率下仍具备超长运行耐久性。上述成果形成了从材料设计到界面强化的全链条创新方案，不仅为镁基热电器件效率与寿命的协同提升提供了普适性策略，更为废热利用技术的规模化应用奠定了科学基础。

A02-38

高性能热电器件全链条制备

尹力, 张倩*

哈尔滨工业大学（深圳）

随着调控理论发展与新型体系开发，热电材料性能得到快速发展，理论转换效率已超过 20%。除热电材料外，热电器件还包括金属化层、焊料和电极等关键部件，其中各相邻层之间的界面连接性能对器件整体效率具有重要影响。针对不同热电材料选择匹配的接触层与焊料材料，并探索适宜的界面连接技术，是实现高效器件的关键。为了实现热电接触层的高效筛选，我们提出了基于热力学相图计算方法的筛选策略，在 Mg-Sb-Ni 体系中开发了新型 Mg_2Ni 接触材料。通过热老化与热循环实验证实了 $\text{Mg}_2\text{Ni}/\text{Mg}_3\text{Sb}_{2-x}\text{Bi}_x$ 界面的热稳定性与长期可靠性，并首次在全 Zintl 型热电器件中实现了 430 K 温差下~11% 的效率突破。同时，为了促进各种服役温度范围的热电器件的开发，同时保证热电性能和连接强度，我们将低温纳米银烧结技术引入热电器件互连中。基于低温连接和高温服役的特性，我们可以在远低于服役温度下进行器件制备并在目标温度下长期服役。通过界面设计以及新型连接技术的使用，在基于 PbTe 的模块中实现了创纪录的高效率（~11%）和出色的热循环可靠性。我们的工作为新型热电器件开发提供了从界面设计到互连集成的全链条技术路线，可以广泛应用于不同热电材料的器件制造，从而促进先进热电发电设备的发展。

A02-39

AI 赋能下的热电材料研究

杨炯*

上海大学，材料基因组工程研究院

热电材料的基本输运性质由电输运和热输运共同决定。这些输运性质的研究已有超过半个世纪的积累。结合先进的计算工具和材料基因组方法，电子和声子输运可应用于多种场景，例如新型热电材料的筛选以及对复杂热电材料输运现象的理解。在上海大学，我们建立了三维结构材料数据库 MatHub-3d，作为高通量计算、性能分析和热电材料设计的基础。我们开发了针对输运性质与弹性力学性质的高通量算法，并结合高通量计算结果与多种机器学习方法，实现了新材料体系的发现以及构效关系的挖掘。此外还构建了

HH130——一个针对 MatHub-3d 中 130 种半哈斯勒化合物的标准化机器学习原子间势数据库，并基于 HH130 数据预训练了通用力场 MACE-HH-v1.0。这些机器学习原子间势被用于研究复杂缺陷半哈斯勒体系的热输运及相关性质。

A02-40

溶液合成的热电材料

徐翥^{*1,2}

1. 南京邮电大学

2. 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，但经过二十余年的发展，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价值的策略，例如单原子配位单元掺杂，亚纳米团簇复合，位错诱导晶粒反向生长，低温掺杂抑制晶粒生长，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。

A02-41

热电/铁电功能耦合材料与制冷器件

罗裕波^{*}，李承骏，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载流子输运行为及热电性能的影响规律。结果表明，在 2 kV/mm 极化电场作用下，P 型 PZT/(Bi,Sb) $_2\text{Te}_3$ 薄膜功率因子提升至 $15.2 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ 。基于该复合薄膜的 5 腿热电发电机在 $\Delta T=39 \text{ K}$ 时实现 13.06 W/m 的最大输出功率密度。此外，制备的 BST/PZT/BTS 双层器件在 15 mA 电流下获得 1.9 K 净制冷温差，柔性 14 腿 PZT/PVDF/BST 器件在 10 mA 下实现 2.4 K 的最大净制冷温差。DFT 计算揭示了 PZT 极化可诱导 PZT/BST 界面电荷重分布并产生显著层间电荷转移，从而有效调控 BST 薄膜的载流子输运性能。本研究提出了一种基于铁电极化调控 BST 热电性能的有效策略。

A02-42

碲化铋基热电晶体的塑化调控

邓婷婷，仇鹏飞，陈立东，史迅

中国科学院上海硅酸盐研究所

国科大杭州高等研究院

碲化铋 (Bi_2Te_3) 基半导体是近室温区域性能最优异的热电材料，但 Bi_2Te_3 基材料通常表现为脆性，这严重限制了其在柔性/微型电子等领域的应用。本工作创新性地利用组分调制使 Bi_2Te_3 单晶材料中同时大量存在两种本征反位缺陷 (Bi_{Te} 和 Te_{Bi})，二者相互作用诱导晶格中形成高密度/多样化微结构 (如位错、链滴、交错层、超位错、晶格畸变等)，进而实现了 Bi_2Te_3 材料从脆性至塑性的转化。研究发现，在外力作用下， Bi_2Te_3 中的高密度/多样化微结构可以通过位移或变形等方式弛豫或耗散材料内部的集中应力以阻止裂纹产生与扩展，引起材料发生塑性变形。而与 Bi_2Te_3 具有相同结构和相近组分的 Bi_2Se_3 和 Sb_2Te_3 ，受限于两种本征反位缺陷难以调控至同时大量存在，而无法在晶格中形成类似 Bi_2Te_3 中高密度/多样化的微结构，材料表现为脆性，这佐证了 Bi_2Te_3 晶体中高密度/多样化微结构是其塑化的重要原因。进一步系统研究了 (Bi,Sb) $_2\text{Te}_3$ 与 $\text{Bi}_2(\text{Te,Se})_3$ 连续固溶体的微结构、力学性能与热电性能，绘制了 Bi_2Te_3 基单晶材料的组分-塑性-导电类型-热电性能关系图，发现当 Sb 和 Se 的固溶量分别不超过 60%和 10%时， Bi_2Te_3 基晶体内部

仍能保留多样化的微结构，并具有良好的塑性（最大弯曲应变 $> 10\%$ ）和优异热电性能（ $zT > 0.6$ ）。获得的 p 型塑性 $\text{Bi}_{0.8}\text{Sb}_{1.2}\text{Te}_3$ 晶体近室温最高 zT 可达 1.05，与传统脆性热电材料相当。利用其制备了可穿戴 Y 型柔性热电发电器件，将其佩戴于人体，在 19°C 的环境温度下获得的器件最大归一化功率密度为 $2.0 \mu\text{Wcm}^{-2}$ ，远高于其他可穿戴器件。该研究为无机非金属材料的塑化和可穿戴柔性热电器件的研制提供了重要借鉴。

A02-43

Half-heusler 热电材料选区激光熔化 3D 打印研究

唐军^{*1}，邱文彬¹，姚志富²，张倩²

1. 四川大学
2. 哈工大深圳校区

热电材料是一种能实现热电相互直接转换的半导体功能材料，也是固态致冷和温差发电技术的核心材料。利用热电材料制成的制冷和发电系统体积小重量轻；无任何机械转动部分，工作中无噪音，不造成任何环境污染；使用寿命长，且易于控制。近年来，由于热电材料性能的不断提升及环保等因素，利用热电转换技术，进一步将大量废热回收转为电能的方式，普遍得到日、美、欧等先进国家的重视。

然而，其应用受到低转换效率、材料利用率低和制造所需几何形状的繁琐加工的极大限制。在此，我们报告了一种使用激光粉末床（LPBF）对半赫斯勒（ $\text{Nb}_{0.88}\text{Hf}_{0.12}\text{FeSb}$ ）热电材料的 3D 打印工艺。高质量的球形粉末具有出色的流动性，确保了半赫斯勒 LPBF 打印成型。由于多维粒内和粒间缺陷，LPBF 半赫斯勒的热导率受到极大抑制，产生了巨大的声子散射中心，在 923 K 下 zT 值可达 1.2，在 513 K 的温差下，单腿器件最大效率约为 3.9%。此外，在 LPBF 打印过程中产生 HfO_2 纳米粒子，可以有效地防止裂纹扩展，保证 LPBF 制备的块体具有良好的机械和热电性能。我们目前的研究证明了 LPBF 在制造具有高度灵活结构定制的高效热电材料方面的可行性。

A02-44

半赫斯勒热电材料反常声子运输行为

刘紫航^{*}

哈尔滨工业大学

热电材料能实现热能和电能的直接相互转换，在余热废热利用和固态制冷等领域有重要的应用前景。半赫斯勒（Half-Heusler, HH）合金是一类重要的新型高温热电材料，具有环境友好、机械性能优异和热稳定好等优点，但热导率较高影响了该体系的高性能化。本报告重点介绍了 HH 合金的反常声子运输行为，主要包括 8 电子结构 MgCuSb 的超低晶格热导率物理起源和 18 电子结构 TiCoSb 的热导率与元素掺杂的关联特性。发现 MgCuSb 材料在 50~550 K 温度区间内晶格热导率仅有 $\sim 3 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ，比传统报道的过渡金属 Half-Heusler 合金的晶格热导率低一个量级，其主要原因源自缺失的 d 轨道避形成的较弱的离子键作用。通过第一性原理计算、中子散射分析和热电性能优化，发现异价掺杂在 TiCoSb 引起的补偿缺陷在热输运过程中的重要作用，导致晶格热导率出现了反常性降低，该体制对于理解半导体材料的热导率调控具有指导意义。

A02-45

基于表面化学调控的纳米热电材料微结构设计 with 性能优化

刘玉^{*}，卢少卿，孟维特

合肥工业大学

热电器件能够实现热能和电能之间直接相互转换，在余热回收、空天科技和微型化固态制冷等国家重大需求领域具有不可替代的应用价值。近年来，基于量子限域效应、能带工程和缺陷工程等创新理论指导，

结合合成技术在材料制备领域取得突破性进展, 推动建立了多尺度结构调控与跨维度界面设计的研究范式, 成功实现了宽温域范围内多材料体系热电性能的显著提升。相较于传统的固相合成路径, 液相合成方法因其温和的加工条件与高度的可控性, 已成为制备纳米热电材料的主要策略。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“Bottom-up”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。本研究聚焦于不同体系金属硫族化物纳米颗粒(包括 SnX 、 AgSbX_2 、 PbX 、 Ag_2X 等, $\text{X} = \text{S}$ 、 Se 或 Te) 表面化学性质的精细调控, 结合分子配体作为功能基元在纳米结构材料中的应用, 旨在系统优化其电学输运性能。通过构建可控的晶界与缺陷结构, 实现高性能纳米复合热电材料的设计与构筑。上述策略不仅为提升热电性能提供了有效途径, 也为深入理解热电材料的微观输运机制及新型纳米材料的可控制备奠定了理论基础与研究框架。

A02-46

高性能硫族热电材料

唐国栋*

南京理工大学

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。针对硫族热电材料性能低, 器件转换效率不高的问题, 我们通过双空位缺陷和共振能级协同提升 N 型 SnSe 热电性能方法, 设计得到了具有高 ZT 值的 N 型多晶 SnSe 材料^[1]。提出了掺杂轨道与超价键相互作用调控热电性能方法, 提出通过操控掺杂元素 s 轨道和 Te-p 轨道能量与尺寸的重叠程度, 导致费米面附近态密度峰来提高态密度有效质量, 使得最优载流子浓度靠近掺杂载流子浓度, 实现热电性能最大化。在 SnTe 材料中获得了优异室温和宽温域热电性能, 其平均 ZT 从 0.12 提升至 1.15, 增幅 830%^[2], 显著提升了热电器件近室温转换效率。通过减弱阳离子-s 轨道和阴离子-p 轨道相互作用促进 GeTe 价带收敛, 同时引入模块化纳米结构降低晶格热导率, 实现宽温域热电性能的优化, 最终在热电器件中实现 12% 的发电效率^[3]。通过基体晶格平整化材料热电性能方法, 设计得到了高 ZT 值的 Cu_2Se 热电材料^[4]。为获得高效热电材料与器件提供了新思路。

参考文献

- [1] Gong, Y.; Dou, W.; Lu, B.; Zhang, X. Nat. Commun. 2024, 15(1): 4231.
- [2] Tang, G.; Liu, Y.; Yang, X.; Zhang, Y. Nat. Commun. 2024, 15(1): 9133.
- [3] Li, Y.; Zhang, Qing.; Ti, Z.; Tang, G. Acta Mater. 2025, 288:120883.
- [4] Ying, P.; Jian, Q.; Gong, Y.; Tang, G. Nat. Commun. 2025. (Accepted)

A02-47

价键理论指导设计高性能热电材料

郭凯*

广州大学

热电材料通过外场下载流子与声子的定向迁移, 实现热能与电能直接相互转换, 在温差发电、热电传感、电子制冷等领域具有广泛的应用前景。材料结构中的化学键类型与强度对其中载流子与声子的本征传输速度、自由程等参数具有关键作用, 最终决定在晶体结构尺度上能否解耦电声输运特征从而提升材料的热电性能。因此, 通过理性选择不同电负性元素构建具有“分级”以及“超键”特征的窄带隙半导体是设计高性能热电材料的有效途径。本研究中, 我们以具有丰富晶体结构和化学键类型的 1-1-1 型 Zintl 相化合物 ACdSb (A 为一价元素) 为研究对象, 通过替换不通的 A 位原子, 发现该类型化合物晶体结构受 A 元素

的影响较大, 将产生多种晶体结构类型。在此研究背景下, 先后成功合成了半赫斯勒结构的八电子化合物 LiCdSb (空间群: Fm-3m), 正交结构的化合物 NaCdSb (空间群: Pnma) 及四方结构的化合物 KCdSb (空间群: P4/nmm), 并结合第一性原理计算对其电热输运行为进行了系统性研究。其中, 阴离子基团不仅有助于实现良好的电输运特性, 亦带来不同的声子输运特性, 对声子传输速度与弛豫时间有重要影响, 进而决定晶格热导率。这一系列工作为设计高性能的 Zintl 相热电材料指明了方向。

References:

- [1] Yang, X.; Yuan, S.; Guo, K.; Ni, H.; Song, T.; Lyu, W.; Wang, D.; Li, H.; Pan, S.; Zhang, J.; Zhao, J.-T. *Small Sci.* 2022, 2 (12), 2200065.
- [2] Guo, K.; Zhang, J.; Yu, X.; Jiang, Y.; Li, Y.; Zeng, Y.; Lian, R.; Yang, X.; Li, S.; Luo, J.; Li, W.; Zhang, H. *Adv. Sci.* 2024, 11(33), 2402209.
- [3]. Guo, K.; Zhang, Y.; Yuan, S.; Tang, Q.; Lin, C.; Luo, P.; Yang, J.; Pan, S.; Zhao, L. D.; Cheng, G.; Zhang, J.; Luo, J. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 62 (3), e202212515.
- [4] Huang, Y.; Jiang, Y.; Chen, C.; Li, S.; Guo, K. Zintl phase compounds ABSb: An emerging family of promising thermoelectric materials with low lattice thermal conductivity, *Chin. Chem. Lett.* DOI: 10.1016/j.cclet.2025.111229.

A02-48

利用化学键原理设计具有超低及玻璃状晶格热导率的无机晶体材料

和建刚*

北京科技大学

具有超低和类玻璃晶格热导率的晶体材料不仅具有重要的科学研究价值, 还在热障涂层、热电转换和热管理等工程领域展现出广阔应用前景。尽管晶体结构与化学键合作用已被证实是调控热传导行为的关键要素, 但基于化学键设计低晶格热导材料的策略仍较少。本报告将概述通过减弱化学键来设计具有超低和玻璃状晶格热导率晶体材料的策略, 从而减少原子间相互作用、增强晶格非谐性并抑制晶格热导率。通过第一性原理计算, 我们发现了 30 种之前未研究过的化合物, 它们表现出超低的晶格热导率。我们还设计出五种基于 Ag_6 八面体的化合物 $\text{A}(\text{Ag}_3\text{X})_2$ ($\text{A} = \text{Li}, \text{Na}$ 和 K ; $\text{X} = \text{S}$ 和 Se), 这些化合物在较宽的温度范围内具有超低的热导率和近乎温度无关性。我们的研究表明减弱的化学键在设计具有超低和玻璃状晶格热导率的化合物中起着至关重要的作用, 强调了化学键工程在实现理想热传导属性方面的有效性。

References:

- [1] J. He, Y. Xia, W. Lin, K. Pal, Y. Zhu, M. G. Kanatzidis, C. Wolverton, *Advanced Functional Materials* 32, 2108532 (2022).
- [2] Z. Xia, X. Shen, J. Zhou, Y. Huang, Y. Yang, J. He, Y. Xia, *Advanced Science* 12, 2417292 (2025).

A02-49

类金刚石结构热电材料

谢鸿耀*

北京航空航天大学

类金刚石化合物是一类具有发展前景的热电材料, 其包含 Cu 基与 Ag 基两大类。长久以来 Cu 基与 Ag 基类金刚石材料热导率的巨大差异一直是人们关注的重点。本工作以 AgGaTe_2 为研究对象, 利用同步辐射 X 射线研究了 AgGaTe_2 化合物的精细结构, 并首次在类金刚石材料中发现了晶体局域对称性破缺现象, 即其局域结构随温度升高表现为从高对称性结构往低对称性结构转变。这种局域结构扭曲是由 Ag 原子的偏中心效应导致, 而偏中心效应产生的根源是 Ag 原子 sd^3 电子轨道的弱杂化。偏中心效应的存在使材料宏

观结构随温度升高而扭曲，并在材料中产生强烈的光声散射与极低的热导率。在此基础上我们揭示了这种局域对称性破缺与宏观晶体结构扭曲的内在联系，并首次提出利用结构对称性规律来预测 I-III-VI₂ 型类金刚石材料热导率的方法。此外我们通过在材料中引入该效应来降低晶格热导率，最终获得了一系列 $ZT = 1.5 \sim 1.6$ 的类金刚石热电材料。

A02-50

The lattice thermal conductivities of two-dimensional materials: from first-principles to machine learning

刘惠军*

武汉大学

The successful preparation of graphene has opened a new era in the study of two-dimensional (2D) materials. Compared with the electronic properties, the phonon transport properties of 2D materials are less known, especially for the lattice thermal conductivity (κ_L). In fact, κ_L plays a quite important role in various application scenarios, such as heat dissipation, thermoelectric conservation and thermal barrier coatings. It is therefore of great importance to quickly and accurately evaluate the κ_L of various 2D materials, as well as find effective methods to manipulate them. In this talk, we combine first-principles calculations and Boltzmann transport theory to investigate the thermal transport properties of the Janus SnXY (X, Y = O, S, Se) monolayers. Besides, a high-throughput model is proposed to readily and accurately predict the κ_L of monolayer systems by machine learning method. In addition, using Janus SnSSe as a prototypical example, we develop accurate machine learning interatomic potential, which is then combined with Boltzmann transport equation to study the effects of interlayer twisting on the κ_L .

A02-51

高性能碲化物热电材料与发电器件

谈小建*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

基于 Seebeck 效应和 Peltier 效应，热电材料能够实现热能与电能之间的直接相互转换，在特殊电源、余热回收利用、固态制冷和精密温度控制等领域具有重要的应用价值。当前，如何有效提升热电材料与器件的输出性能及服役可靠性是该领域亟待解决的关键科学问题。本研究聚焦于碲化铋、碲化铅和碲化锗等具有实际工程应用背景的中低温热电材料体系，针对其存在的热电性能最优温区较窄、力学性能难以协同优化、器件界面扩散导致性能衰减等关键问题，开展了同质分段热电臂的组分设计、可控制备工艺、综合性能优化以及界面材料筛选等方面的研究，旨在为中低温热电发电器件的性能提升和可靠性设计提供理论指导和技术支撑。

A02-52

Probing structural disorder and anharmonic phonons in thermoelectric materials using synchrotron techniques

Jiawei Zhang*

Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences

Obtaining precise knowledge of structural disorder and anharmonic phonons is crucial for understanding the microscopic origin of intrinsically low thermal conductivity, which is essential for designing efficient thermoelectric materials. In this talk, I will discuss advanced techniques for probing structural disorder, focusing on the maximum entropy method (MEM) and 1D/3D pair distribution function (PDF) analysis based on synchrotron X-ray scattering. Using examples such as chainlike InTe and Cs₃Bi₂Br₉, we realize direct observations

of 1D correlated disorder with In^+ interstitials, local octahedral distortions, and occupational disorder by combining synchrotron X-ray diffraction, diffuse scattering, MEM, and 1D/3D PDF. Static-to-dynamic transitions of subtle structural disorders are typically observed with increasing temperature. The detailed structural disorder information provides a basis for understanding thermoelectric properties. Moreover, by combining synchrotron inelastic X-ray scattering and first-principles phonon calculations, I will demonstrate how these methods probe soft, low-lying phonon modes and their strong anharmonicity, which are responsible for intrinsically low lattice thermal conductivity.

A02-53

n 型 AgBiSe_2 的自蔓延高温合成与 3D 打印成型

周志方*

中南大学 粉末冶金全国重点实验室

热电材料能够实现热能和电能直接相互转换，在废热回收和固态制冷等领域具有重要的应用价值。I-V-VI₂ 族化合物 (I=Cu, Ag; V=As, Sb, Bi; VI=S, Se, Te) 因其晶格高度非简谐特性而具有本征超低的晶格热导率，是一类极具发展潜力的热电材料体系。其中， AgBiSe_2 作为该体系中少有的 n 型半导体材料，近年来受到广泛关注。然而， AgBiSe_2 的制备方法以固相反应烧结或者熔融法为主，其步骤较为繁琐，所需制备时长大多超过 10 h，严重制约了材料性能提升策略的快速验证及规模化应用。为解决这一问题，本研究采用自蔓延高温合成技术，成功实现了高纯 n 型 AgBiSe_2 的高效制备。所获材料表现出优异的热电性能，在 773 K 时最高 ZT 值超过 0.8，300-773 K 温区内的平均 ZT 值为 0.41，是未掺杂 n 型 AgBiSe_2 目前所报道的性能最高值。进一步地，本研究将合成的 AgBiSe_2 粉末制备成适用于 3D 打印的浆料，通过挤出成形技术成功获得了具有多孔结构的块体材料，通过结构优化有望进一步提升其热电性能。本工作不仅为 AgBiSe_2 热电材料开发了一种高效的“合成-成型”策略，相关技术还可推广应用于其它热电材料体系。

A02-54

有机/钙钛矿材料的热电调控研究

唐俊晖, 陈睿思, 白雅馨, 吴嘉坤, 梁子骐*

复旦大学智能材料与未来能源创新学院

可溶液加工的有机和钙钛矿薄膜半导体在光电能量转换中得到了广泛研究，其作为热电材料的前景也日益受到关注。首先， π -共轭给-受体结构的光伏共聚物作为有机热电材料，非常适合应用于具有小温差且需要高泽贝克系数 (S) 的室温可穿戴场景。因此，我们发展了一种通用的“分子及薄膜序构”策略，通过调节从 π -主链到薄膜序构，利用 S 和电导率 (σ) 之间的平衡来获得优异的功率因子 (PF)，在室温下实现了最大值 $145.5 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ 以及最优 0.15 的 zT 值，打破了电、热传输中的“两相复合”法则。

其次，金属卤化物钙钛矿不仅与其无机类似物相比具有超低的热导率，而且与有机半导体相比具有更优越的 S 。然而，由于铅基钙钛矿的掺杂效率较低，其较差的 σ 严重阻碍了热电性能。为此，我们选择具有高背景载流子浓度的锡基卤化物钙钛矿，采取了顺序电掺杂和光掺杂策略，并辅助于光伏器件结构，显著减少了由载流子复合引起的严重电压损失。这使得钙钛矿热电材料的 σ 和 S 同时增强， PF 高达 $342 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ ，平均 zT 峰值为 0.27，创造了钙钛矿热电性能的新纪录。

尽管上述有机/钙钛矿半导体材料的 S 得到大幅提升，但面向人体传感及发电应用时仍存在对温差敏感性低及生物相容性差等问题。有机离子凝胶恰好满足要求，受离子热电电容特性的启发，我们首次探索并验证了“压电增强离子热电”的创新概念。利用压电内电场对离子的牵引作用，在静态应力下热电势 (α) 具有约 58% 的增强、离子电导率亦增加 2 倍以上。进而开发了一种嵌入式、自供电、多模态感知的凝胶传感器，分别搭载于动脉导管和医用负压吸引海绵中。通过体外心脏环境模拟测试，传感器展现出卓越且稳定的信号检测能力，对压力和温度变化的最小灵敏度分别为 0.13 mV kPa^{-1} 和 0.96 mV K^{-1} ，且在血压升高时温度响应信号可放大约 3 倍。在大型动物出血性休克模型测试中，成功展示了离子凝胶对关键生命体征的

实时精确检测能力，为发展新一代智能诊疗监测技术提供了重要的理论和实践基础。

综上，基于有机/钙钛矿材料的载能子（电子/离子）导体具有可定制的分子结构和可调的能带，有望在可穿戴设备中实现环境响应（光/热/电/力）的集成。

A02-55

从有机材料构象工程到热电转换性能调控

朱嘉*

国家纳米科学中心 纳米理论与人工智能实验室

新型有机热电转换材料的研究逐渐成为有机固体及其分子器件发展的新热点。由于有机分子结构和相应的聚集态的复杂性，对于热电转换过程中的关键物理量的变化和相互制约，依然在输运机制认知上缺乏足够的范式。报告人主要针对有机 D-A 型分子为主体结构的电荷转移复合类材料，细致研究其有序分子聚集态结构，并探索其电导率性能增强的潜力；进一步以电荷转移复合物作为理想的研究热电输运过程的材料体系，应用 Boltzmann 输运理论和形变势理论，针对多尺度掺杂条件下的分子结构和构象调控及其聚集态变化，研究 D-A 型电荷转移复合材料的电输运机制和 Seebeck 值变化，并预测其热电转换效率；报告人通过关键物理量变化机制分析，尝试揭示了热电转换过程中关键参数间的相互制约关系，进一步对突破热电参数的制约提出了相应的理论认识。

References:

- [1] Wang Yishan; Zhao Meng; Zhao Hu; Li Shuzhou; Zhu Jia*; Fang Weihai*; Thermoelectric Properties of Organic Charge Transfer Salts from First-Principles Investigations: Role of Molecular Packing and Triiodide Anions, *Journal of Materials Chemistry A* (2022) 10(8), 4288-4299.
- [2] Wang Yishan; Wei Yu; Hao Wei*; Li Hanying; Li Shuzhou; Zhu Jia*; Fang Weihai*; Regulating the Thermoelectric Power Factor of Donor – Acceptor Copolymers by Heavy Chalcogen Substitution: A First-Principles Study, *Journal of Materials Chemistry A* (2024) 12(25), 15036-15043.

A02-56

有机共轭配位聚合物的电荷传输机制及热电性质

卢阳*

重庆大学能源与动力工程学院

近年来，二维共轭配位聚合物在有机电子学领域展现出广阔的应用前景，然而其电荷传输机制仍缺乏系统深入的研究，成为制约材料性能优化与器件设计的关键科学问题。本报告围绕二维共轭配位聚合物的结构-性能关系，系统探讨了有机共轭配体的分子结构对电荷传输机制的影响规律。基于此，报告人提出了二维共轭配位聚合物的配体分子设计原则，发展了一系列高结晶度二维共轭配位聚合物体系，并成功拓展了其在有机热电与有机量子材料领域的应用。本研究为理解共轭配位聚合物的电荷传输机制提供了新视角，同时为高性能有机电子材料的开发开辟了新途径。

参考文献:

1. Lu. Y., et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2025, DOI: 10.1021/jacs.4c18681.
2. Lu. Y., et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 2574.
3. Lu. Y., et al. *Acc. Chem. Res.* 2024, 57, 1985.
4. Lu. Y., et al. *Nat. Commun.* 2022, 13, 7240.

A02-57

聚合物热电材料的化学掺杂及其传感应用

李慧*

聚合物热电材料因其优异的柔性、可溶液加工性和低成本优势，在柔性可穿戴电子器件领域展现出广阔应用前景。传统聚合物的侧链结构主要用于提高溶解性以满足溶液加工的需求，但其冗长结构易引发分子链缠结，增加无序度。而且，烷基侧链是绝缘的，对电荷传输并无贡献。为了保留聚合物的溶液加工优势并提升其电输运性能，我们提出了一种基于可酸裂解侧链的分子设计策略，将聚合物制备成膜后再移除绝缘烷基侧链，从而获得堆积致密有序的聚合物材料，并实现聚合物热电性能的显著提升。我们将苯并噻二唑（BT）基给-受体型聚合物作为研究对象，结合酸裂解和高温退火工艺，将硅烷侧链从聚合物薄膜中完全去除，并用三氯化铁进行掺杂。研究发现，无侧链 BT 基聚合物的载流子迁移率高于 $1.0 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 。其电导率达到 730 S cm^{-1} ，功率因子达到 $81 \mu\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。此外，无侧链的热电聚合物表现出优异的热稳定性，在 100°C 下加热 1000 分钟，功率因子衰减小于 10%。该研究为高电导率、优异稳定性的聚合物热电材料设计提供了新思路。

通过氧化还原反应掺杂的聚合物材料相较于本征聚合物通常表现出更丰富的电学性质，并且保持了其柔性特性，在可穿戴传感电子器件方面拥有巨大潜力，但其传感机制仍不明确。我们利用瞬态吸收光谱分析发现压力诱导下聚合物紧密堆积，而掺杂剂的存在使主链上电荷密度发生扰动。利用这一特性制备的压力传感器具有高灵敏度和快速响应能力。将该压力传感器贴附于喉咙，结合卷积神经网络，可以实现多样化语音信号的精准识别。

A02-58

Transverse thermoelectric effect of inclined thin films for high performance photo/thermal detectors

Shufang WANG*

Hebei University

Transverse thermoelectric (TTE) effect of inclined thin films, originating from the anisotropy of the Seebeck coefficient of the films, has received extensive attention owing to its great potential application in self-powered photodetectors and heat flux sensors. In this paper, novel TTE ultraviolet (UV) pulsed photodetectors and heat flux sensors were constructed by using high quality c-axis inclined AB_2Te_4 ($\text{A}=\text{Sn}, \text{Pb}$; $\text{B}=\text{Sb}, \text{Bi}$) thin films grown by pulsed laser deposition technique. The devices exhibited very high voltage sensitivity R_s as well as ultrafast response time t . For example, the R_s and t_r of the PbBi_2Te_4 -based TTE detectors is about 25.75 V/mJ and 18 ns respectively upon the 308 nm UV pulsed irradiation. In addition, the device showed long-term working stability in air after coating a thin layer of Al_2O_3 and perfect linearity with R-squared coefficient close to 1. The results demonstrate that layered compounds of AB_2Te_4 ($\text{A}=\text{Sn}, \text{Pb}$; $\text{B}=\text{Sb}, \text{Bi}$), which have a large anisotropy in the Seebeck coefficient, are promising new materials for fabricating high performance TTE-based ultraviolet pulsed photodetectors and heat flux sensors.

A02-59

热电薄膜性能调控及其在激光功率测量中的应用

郑壮豪*

深圳大学物理与光电工程学院 射频异质异构集成全国重点实验室

热电薄膜器件因其微型化、柔性化等独特优势，在微电子设备能源供给、热管理以及光热电传感等领域展现出广阔的应用前景。然而，已有报道的大部分热电薄膜的性能普遍低于其块体材料，这一性能差距主要源于两个关键因素：一方面，薄膜制备工艺难以精确复现块体材料的理想晶体结构和化学计量比；另一方面，薄膜生长过程中不可避免地会引入高密度晶界和各类缺陷，严重降低了热电性能。本报告介绍了

课题组在热电薄膜材料制备与性能调控方面的研究进展，主要通过生长工艺优化，结合择优取向控制、离子掺杂以及纳米复合等微结构调控策略，实现薄膜材料热电性能的优化，并基于所研制的薄膜材料，进一步开发了基于光-热-电耦合原理的热电式激光功率计。

A02-60

亚微级柔性薄膜的热电和光热电性能

蒋丰兴*

江西科技师范大学

近年来，亚微级柔性薄膜在热电和光热电领域展现出广阔的应用前景。在 p 型材料方面，PEDOT 基导电聚合物因其优异的电导率 ($\sim 2000 \text{ S/cm}$) 和可调控的聚集态结构成为研究热点。本课题组通过分子设计、能带工程及复合策略，显著提升了 PEDOT:PSS 薄膜的热电性能，使其热电优值从 10^{-3} 逐步优化至 10^{-1} ，并进一步开发了可穿戴热电纤维及器件，为柔性能源转换提供了新思路。然而，低 Seebeck 系数 ($\sim 15 \mu \text{ V/K}$) 仍是限制其功率因子的关键问题，需通过界面和分子结构的精准调控进一步突破。在 n 型材料方面，二维 MXenes 凭借高导电性 ($\sim 10 \text{ S/cm}$)、亲水性和结构可调性成为柔性热电材料的理想候选。尽管其本征金属行为导致低热电势 ($\sim -5 \mu \text{ V/K}$)，但通过缺陷工程、表面功能化及能带调控可有效优化其热电性能。本团队围绕 MXenes 基柔性薄膜开展了系列研究，探索了结构改性和载流子输运调控对其性能的影响。研究工作聚焦亚微级柔性薄膜的热电及光热电性能优化，结合 PEDOT 与 MXenes 的协同效应，探索界面工程、微结构设计及光热转换机制，旨在开发高性能柔性热电材料，为可穿戴能源器件提供新策略。

A02-61

热电薄膜的结构调控与物理性能优化

柳伟，唐新峰*

武汉理工大学，材料复合新技术全国重点实验室

已知热电材料通常具备优异的热电性能和新颖的拓扑物理特性。高质量外延生长的热电薄膜为深入研究结构-热电输运性能之间构效关系以及拓扑物性提供了理想平台。本研究通过分子束外延 (MBE) 技术制备了多种薄膜 (包括 Bi_2Te_3 、 GeTe 、 SnTe 、 MnTe 、 Mg_3Sb_2 及其衍生物)，并利用扫描隧道显微镜 (STM) 和角分辨光电子能谱 (ARPES) 系统研究了其物理性质。结果表明，MBE 参数的调控可有效调节本征点缺陷和费米能级位置，从而显著优化薄膜的热电性能。通过调控 TeBi 和 SbTe 反位缺陷，n 型 Bi_2Te_3 薄膜和 p 型 $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ 薄膜在室温下分别实现了 $4.78 \text{ mWm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 和 $5.50 \text{ mWm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 的卓越功率因子。在超晶格薄膜中，由组成基元间功函数差异驱动的界面电荷作用对载流子输运和热电性能起到了关键作用，自发的电荷注入和载流子能量过滤效应的引入协同优化了载流子浓度、迁移率和 Seebeck 系数。这一机制在 $\text{Sb}_2\text{Te}_3/\text{MnTe}$ 、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3/1\text{T}'\text{-MoTe}_2$ 和 $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Bi}_2$ 等超晶格体系中得到验证。此外，成分和异质结构调控可显著改变 $\text{Mg}_3\text{Sb}_{2-x}\text{Bi}_x$ 、 $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$ 、 $\text{Bi}_2\text{Te}_3/1\text{T}'\text{-MoTe}_2$ 异质结及 MnBi_2Te_4 等薄膜的 (拓扑) 电子能带结构及相关物理性质。本研究为通过缺陷/组分调控和异质结构工程理性调控和优化薄膜的热电性能与拓扑物性奠定了重要基础。

A02-62

界面增强热电和光热电效应

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 系数和大的电导率，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 BiSbTe/SrTiO_{3-x} 和 CrN/SrTiO_{3-x} 两种异质结构，相比 BiSbTe、CrN 薄膜以及 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 CuNi/SrTiO_{3-x} 异质结构体系中，利用 SrTiO₃ 高 Seebeck 系数和声子共振吸收特性 (Nat. Commun. 2019, 10, 138)，以及 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 Cu/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 (Adv. Mater. 2024, 36, 2313911)。

A02-63

N-型有机热电材料的态密度函数分子调控

刘剑*

中国科学院长春应用化学研究所

掺杂共轭聚合物作为有机热电 (OTE) 材料，因其兼具低热导率、易于加工和良好的机械性能等独特优势，正受到极大的关注。它们是构建便携式、个人化及柔性热电模块的理想选择。热电材料的性能由其热电优值 $ZT = S^2\sigma T/\kappa$ 来衡量，其中 S 代表塞贝克系数， σ 代表电导率， $S^2\sigma$ 代表功率因子 (PF)， κ 代表热导率。高性能的 p 型和 n 型 OTE 材料都是必需的。然而，n 型 OTE 材料的性能仍显著落后于其 p 型对应物。OTE 材料的电导率和塞贝克系数遵循特定的经验幂律关系，随后在高掺杂水平下塞贝克系数会急剧下降。这种关系的特征性弯曲可以通过掺杂诱导的态密度 (DOS) 分布展宽来解释。迄今为止，通过调控 DOS 分布来提高热电性能的研究还很少。

本文以 n 型 DPP 基聚合物为例进行案例研究，探讨 sp² 氮 (N) 取代对态密度 (DOS) 分布和热电性能的影响。通过分别聚合噻吩-DPP 和 3,6-二(噻唑-5-基)-DPP (或两者组合)，合成了三种新聚合物：PTh-DPP、PThTz-DPP 和 PTz-DPP。DPP 单元中引入了两亲性侧链，三种聚合物的区别在于其重复单元中 sp²N 取代基的数量。随着 sp²N 取代基数量的增加，DOS 分布变宽、强度增强，形成了向带隙延伸的新峰，导致电荷传输机制从跳跃主导模式转变为相干电荷传输模式，从而使电导率和功率因子随 sp²N 取代基数量的增加而提高。其中，掺杂的 PTz-DPP 具有最高的电导率值 (63.8 S cm⁻¹)、最高的功率因子值 (111.8 μW m⁻¹ K⁻²) 和最高的热电优值 ZT (0.46)，这使其成为目前最佳的 n 型 OTE 材料选择之一。

A02-64

氰基功能化的 n-型高分子半导体

冯奎*, 郭旭岗

南方科技大学

与广泛研究的 p-型有机半导体相比，n-型有机半导体 (特别是 n-型高分子) 发展十分缓慢。目前，n-型高分子的构建基元主要分为以下四类：酰胺、酰亚胺、硼氮配位键和氰基功能化的芳环等。其中氰基是一种构建强缺电子基元的新兴基团，但是由于缺乏溶解性，其应用十分有限。在此，我们通过分子设计将氰基引入至芳环基元中设计合成了两类高性能 n-型高分子半导体，如下所述：

(1) 将氰基引入苯并噻二唑 (BT) 中构成强拉电子的 5,6-二氰基-2,1,3-苯并噻二唑 (DCNBT)。我们利用强“给体-受体”相互作用的策略，使用含氧桥联的引达省单元与 DCNBT 构建了两个 n-型高分子半导体 DCNBT-TPC 和 DCNBT-TPIC，取得了超窄带隙 (1.38 eV 和 1.28 eV) 并在长波区域具有很强的吸收，打破了长期以来限制高分子受体材料在全高分子电池中性能的瓶颈。基于 DCNBT-TPIC 制备的全高分子太阳能电池器件获得了 22.52 mA·cm⁻² 的短路电流密度和 10.22% 的能量转换效率。基于 DCNBT-TPC 制备成三元全高分子太阳能电池可获得超过 13% 的能量转换效率。

(2) 联噻吩酰亚胺 (BTI) 具有较好的平面性, 但其拥有两个给电子的噻吩使其LUMO能级较高, 不利于n型性能的实现。我们在BTI骨架上引入氰基构建了一系列氰基化的噻吩酰亚胺构筑了一系列“受体-受体”型n-型高分子。它们应用在有机热电器件中可以实现电导率最高可达 $150 \text{ S} \cdot \text{cm}^{-1}$, 功率因子可至 $110 \mu\text{W m}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$, 是目前n-型热电器件的最高值之一。

这些结果表明氰基可以用来构建n-型高分子并取得了优异的器件性能, 也反映了氰基作为强拉电子基团能明显提升高分子的n-型性能。

参考文献:

- [1] **Feng, K.***; Wang, G.; Lian, Q.*; G áñez-Valenzuela, S.; Li, B.; Ding, R.; Yang, W.; Wang, K.; Zeng, J.; Zhang, Y.; Jeong, S. Y.; Xu, B.; Ho-Baillie, A.; Woo, H. Y.; Facchetti, A*.; Guo, X*. *Nat. Mater.* **2025**, DOI: 10.1038/s41563-025-02163-4.
- [2] Chen, Z.; Ding, X.; Wang, J.; Guo, X.; **Feng, K.***. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, **64**(7): e202316214.
- [3] G áñez-Valenzuela, S.; Li, J.; Ma, Su.; Jeong, S. Y.; Woo, H. Y.; **Feng, K.*** and **Guo, X.*** *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, **63**(40): e202408537.
- [4] Li, Y.; Wu, W.; Wang, Y.; Huang, E.; Jeong, S. Y.; Woo, H. Y.; **Guo, X.***; **Feng, K.***. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, **63**(3): e202316214.
- [5] Wu, W.; **Feng, K.***; Wang, Y.; Wang, J.; Huang, E.; Li, Y.; Jeong, S. Y.; Woo, H. Y.; Yang, K.; **Guo, X.** *Adv. Mater.* **2024**, **36**(1): 2310503.
- [6] Ma, S.; Li, B.; Gong, S.; Wang, J.; Liu, B.; Jeong, S. Y.; Chen, X.; Woo, H. Y.; **Feng, K.***; **Guo, X.** *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, **62**(39): e202308306
- [7] **Feng, K.***; Yang, W.; Jeong, S.; Ma, S.; Li, Y.; Wang, J.; Wang, Y.; Han, Y. W.; Chan, P. K. L.; Wang, G.; **Guo, X.** *Adv. Mater.* **2023**, **35**(31): 2210847
- [8] **Feng, K.***; Guo, H.; Wang, J.; Shi, Y.; Wu, Z.; Su, M.; Zhang, X.; Son, J. H.; Woo, H. Y.; Guo, X. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, **143**(3): 1539.

A02-65

有机热电材料电荷传输机制与调控策略

左光正^{*1}, 李泽龙¹, 崔勇², 侯剑辉², Martijn Kemerink³

1. 复旦大学
2. 中国科学院北京化学研究所
3. 海德堡大学

有机热电材料因具有热导系数低、成本低、柔性及可溶液加工等优点。特别在低温应用领域 ($< 80^\circ\text{C}$) 展现出比无机热电材料更广阔的应用前景。然而, 尽管已有十多年的深入研究, 该领域的进展仍相对有限, 且有机材料的热电转换效率与无机材料相比依然较低。近期, 中国院化学研究所的狄重安研究员团队, 通过构建具有周期性双异质结特征的聚合物多重异质结结构, 成功实现了有机材料在室温下ZT值超过 $1^{[1]}$, 验证了有机材料的应用潜力。目前报道的有机高分子材料的功率因子 (PF) 似乎停滞在 $300 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$ 左右 (未采用rubbing等分子取向的后处理工艺)^[2], 突显了迫切需要基于深入理解的、普适的材料设计规则。此外, 有机掺杂体系中, 特别是在高掺杂水平下, 出现了塞贝克系数 (多次) 翻转现象^[3], 然而其背后的物理机制仍不清晰。有机热电材料亟需对热电转换机制进行全面且深入的理解。

本报告首先简要介绍有机体系中的基本电荷传输过程, 包括掺杂机制、陷阱的本征特性等关键因素。随后, 探讨电荷传输过程在有机热电物理机制研究中的作用, 并介绍基于电荷传输过程的态密度策略和形貌调控等手段在高性能材料制备中的应用。此外, 揭示了有机热电中电导率与塞贝克系数之间存在的普适性规律及其背后的物理机制^[4], 并深入分析了塞贝克系数的“软上限”问题以及高掺杂下极性翻转的物理内因。最后, 提出了设计同时具有高电导率和高塞贝克系数的高效有机热电材料的设计原则^[5]。

参考文献:

- [1] D. Wang, J. Ding, Y. Ma, C. Xu, Z. Li, X. Zhang, Y. Zhao, Y. Zhao, Y. Di, L. Liu, X. Dai, Y. Zou, B. Kim, F. Zhang, Z. Liu, I. McCulloch, M. Lee, C. Chang, X. Yang, D. Wang, D. Zhang, L.-D. Zhao, C. Di, D. Zhu, *Nature* 2024, 632, 528.
- [2] I. Brunetti, A. Dash, D. Scheunemann, M. Kemerink, J. Mater. Res. 2024, 39, 1197.
- [3] D. H. L. Tjhe, X. Ren, I. E. Jacobs, G. D'Avino, T. B. E. Mustafa, T. G. Marsh, L. Zhang, Y. Fu, A. E. Mansour, A. Opitz, Y. Huang, W. Zhu, A. H. Unal, S. Hoek, V. Lemaure, C. Quarti, Q. He, J.-K. Lee, I. McCulloch, M. Heeney, N. Koch, C. P. Grey, D. Beljonne, S. Fratini, H. Sirringhaus, *Nat. Mater.* 2024, 23, 1712.
- [4] G. Zuo, X. Liu, M. Fahlman, M. Kemerink, *Adv. Funct. Mater.* 2018, 28, 1703280.
- [5] Z. Li, W. Fu, D. Scheunemann, X. Wei, M. Litterst, P. M. Viji, Y. Cui, J. Hou, J. Tang, Z. Liang, Z. Qu, M. Kemerink, R. Guo, G. Zuo, *Adv. Sci.* 2025, 12, 2409382.

A02-66

柔性热电器件中的热力优化及其应用研究

王自昱*, 侯悦

武汉大学

柔性热电器件在可穿戴能源收集与个人热管理中面临热转换效率低、机械柔性与环境适应性不足的挑战。课题组通过热导优化与力学结构设计协同策略提升性能: 在热导调控方面, 采用碳纳米管掺杂自愈合材料选择性封装液态金属电极 (导热系数 $0.9 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$), 结合热电腿间低导热聚合物 ($0.1 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$) 减少寄生热耗, 使有效温差提升 185%, 功率密度达 $3.14 \mu\text{W cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$; 开发 Ecoflex/AlN 高导热复合硅胶 (11.1 wt% AlN) 封装与交错间隙结构, 功率密度提升 107% 至 4.38 mW cm^{-1} ($\Delta T=30 \text{ K}$); 引入柔性相变材料散热器 (FPCM), 用于制冷时实现 11.21°C 体表降温并持续 300 秒, 用于发电时输出功率提升 38.6% 至 23.7 mW 。在力学结构设计方面, 课题组创新提出双向螺旋铰链超材料 (BSHK-MM), 实现 80% 面内拉伸率与 12496% 面外拉伸率, 填充因子 77.3%, 负泊松比特性抑制图像畸变, 可贴合 28 mm 阶差曲面; 通过交错间隙阵列设计释放弯曲应力 (150% 拉伸率), 使器件仅靠重力贴合 19 mm 曲率半径表面, 接触面积增加 105%; 结合液态金属电极与蛇形铜互联 (25 μm 厚), 器件在 20 mm 弯曲半径下经 1000 次循环电阻变化 <10%。优化器件成功驱动多场景应用: 防水型热电器件实现水下体温无线传输 (4 器件串联输出 0.32 mW); FPCM-TED 集成织物腕带构建自供能运动计步系统; 模块化自愈合器件支持堆叠制冷 (双层结构达 6.2 K 温差)。研究表明, 热-力协同优化策略显著提升了热电器件的能量转换效率与环境适应性, 为可穿戴系统提供可靠解决方案。

A02-67

热电纤维与织物的设计与应用

张坤*

东华大学

织物在人类社会生活中扮演着不可或缺的角色。将热电原理与纺织技术相结合, 开发具有三维共形性、透气透湿性、全身温度调控和能量收集功能的热电织物, 在人体表面温度调控和热能收集方面展现出重要的应用价值。本课题组近年来专注于可穿戴热电纤维及织物器件的探索与开发。本次报告将系统回顾并汇报课题组在热电纤维与织物领域的最新研究成果。

A02-68

SnSe: 一种崭新的室温催化材料

李顺*¹, 赵立东²

1. 江苏大学

2. 北京航空航天大学

本研究发现了一种具有 Sn 空位的硒化锡 (SnSe) 纳米催化材料, 其可在常温常压下直接催化水与氧气合成过氧化氢, 且无需额外能量输入 (如光、电)、助催化剂或牺牲剂。该方法在 40 °C 时达到 $2.6 \text{ mmol g}^{-1} \text{ h}^{-1}$ 的最优产率, 并在室温流动反应器中实现超过 50 小时的长期稳定生产 (0.3 mmol L^{-1})。实验与理论分析表明, 这种独特的热催化效应源于动态过程: 锡空位缺陷移动诱导 SnSe 纳米片表面的可逆重构实现了水分子连续吸附/解离和氧气活化。该研究为过氧化氢生产提供了一种极其简单、高效且完全绿色的策略, 对涉及水活化的其他催化反应也将具有更广泛的启示。

A02-69

高性能柔性热电薄膜制备及器件研究

逯瑶*

南方科技大学

热电材料是一种可以实现热能和电能之间相互直接转换的环境友好型“绿色”能源转换材料。近年来, 可穿戴式电子设备和传感器迅猛发展, 对供能方式也有了更多的要求, 然而, 目前大部分的穿戴式电子设备是由电池供电, 并且其受制于电池频繁的充电以及更换。柔性热电发电机可以利用人体与环境的温差进行发电, 可为穿戴式电子设备的自供电提供有效的解决方案。硫族化合物热电材料, 如 Ag_2Se , Bi_2Te_3 等, 是目前公认的最佳性能热电材料, 然而, 传统无机材料具有本征刚性, 难以应用于柔性电子。能否发展具有良好变形能力的高性能无机热电薄膜, 成为拓展热电技术新的规模化应用的关键因素之一。

基于上述挑战, 本工作分别采用“自上而下”和“自下而上”的方法制备了一系列高性能硫属化合物基柔性热电薄膜, 系统研究了无机热电薄膜中成分、微观结构等对热电性能和力学性能的影响机理, 实现了柔性与热电性能的同步提升。取得的主要成果如下:

1. 采用自上而下方法, 实现了从相应单晶剥离出来的基于 Bi_2Te_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 W m^{-2} 的高归一化功率密度。这项工作不仅为可穿戴电子设备提供了有用的范例, 还为理解和推进传统无机电子学中的结构-性能相关性铺平了道路。

2. 采用自下而上的湿化学模板法原位合成了 1D $\text{Ag}_2\text{Se}/2\text{D MXene}$ 纳米复合材料、然后经真空抽滤法和热压工艺在尼龙多孔滤膜上制备了柔性复合薄膜, 跨维度复合优化了载流子输运, 薄膜的室温功率因子最高为 $2.1 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。由六个热电臂串联而成的柔性热电发电装置, 当温差为 30 K 时产生的最大输出功率密度为 24 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。这项工作作为化学法制备高性能、柔性硒化物复合薄膜及器件提供了有效的方法。

A02-70

Flexible carbon nanotube film/conductive polymer thermoelectric composites toward wearable electronics

Yong Du*, Qiufeng Meng, Xiaohua Liu

Shanghai Institute of Technology

Carbon nanotube film (CNTF) is a two-dimensional macroscopic body of carbon nanotubes. The intertwined network structures composed of abundant aligned CNT fibers determine the excellent electrical and mechanical properties of CNTF. Therefore, the CNTF film is an attractive alternative to prepare flexible thermoelectric materials with conductive polymers.

Herein, CNTF/poly(3,4-ethylenedioxythiophene): poly(styrenesulfonic acid) (PEDOT:PSS) thermoelectric composite was prepared by a vacuum-assisted filtration method, and flexible CNTF/polyaniline (PANI) and

CNTF/polypyrrole (PPy) thermoelectric composites were prepared via an in-situ polymerization method. Among them, the CNTF/PANI composites with PANI polymerization time of 5 h achieved a maximum power factor of $536.8 \mu\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-2}$ at 360 K as well as significant mechanical performance. The electrical conductivity of the CNTF/PANI composites could maintain 93.3% after being bent for 500 times, and the tensile strength was as high as 232.3 MPa. These flexible, free-standing, and highly efficient thermoelectric-powered composites have potential applications for wearable electronics.

A02-71

基于锌离子电池热再生电池的废热回收利用

陈弘毅*

中南大学

热再生电化学电池技术，可通过在电化学循环过程中输入废热并释放额外电能的方式，在电池使用同时实现废热发电。本文基于普鲁士蓝锌离子电池，通过向电解液引入 NiSO_4 ，在锌负极表面构建出高熵可逆 Zn/Ni 层状双氢氧化物 (LDH) 反应层，显著增加了 Zn/Zn^{2+} 电极反应的离子种类，成功将阳极电压温度系数从 0.667 mV K^{-1} 提升至 2.116 mV K^{-1} ，并最终在 $\text{NiHCF}/\text{Zn-LDH}$ 全电池体系中实现了 -2.944 mV K^{-1} 的温度系数突破。当 $\text{NiHCF}/\text{Zn-LDH}$ 电池在 50°C 充电、 5°C 放电的工况下运行时，可获得 104.11% 的高能量效率与 26.08% 的相对卡诺效率。此外，该电池体系在室温条件下经 650 次循环 (1 C 倍率) 后容量衰减率低于 1.93%，展现出优异的循环稳定性。该研究成果表明，热再生锌离子电池可在储能过程中同步实现高效的废热回收利用。

A02-72

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。

参考文献:

1. Zhaopeng Liu, Yifeng Hu, Xin Lu, Ziwei Mo, Guangming Chen and Zhuoxin Liu*, Electrolyte engineering of quasi-solid-state thermocells for low-grade heat harvest at sub-zero temperatures, *Adv. Energy Mater.* 2024, 14, 2402226.
2. Xin Lu, Ziwei Mo, Zhaopeng Liu, Yifeng Hu, Chunyu Du, Lirong Liang, Zhuoxin Liu* and Guangming Chen*, Robust, efficient, and recoverable thermocells with zwitterion-boosted hydrogel electrolytes for energy-autonomous and wearable sensing, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202405357.

3. Xin Lu, Daibin Xie, Kaihua Zhu, Shouhao Wei, Ziwei Mo, Chunyu Du, Lirong Liang, Guangming Chen* and Zhuoxin Liu*, Swift assembly of adaptive thermocell arrays for device-level healable and energy-autonomous motion sensors, Nano-Micro Lett. 2023, 15, 196.

A02-73

高分子电极界面调控离子热电性能

雷周玥*

东华大学

柔性离子热电池作为一种新型热电转换器件，能够将环境或人体散发的低品位热能直接转化为电能，为解决可持续能源收集问题提供了创新路径。然而传统体系受制于离子传输与电极-电解质界面电荷转移的协同失衡，导致热-电转化效率普遍低于 1%，严重制约其实际应用。本研究突破传统凝胶电解质本体调控的局限性，构建高分子电极界面：一方面通过温度敏感的电极界面双电层电容，提供高的电极电势差；另一方面依托赝电容型电极高分子与氧化还原离子的电荷转移，解决传统体系中电荷转移不可持续的关键瓶颈。这种协同强化策略使热电池的能量转化效率提升至 2.1%，为开发高效热能收集器件提供了新思路。

A02-74

纤维素基复合离子凝胶的热电性能调控与集成化应用

周泽航*, 卢灿辉

四川大学高分子研究所

随着全球能源与环境问题的日益严峻，开发高效、可持续的低品位热能收集技术成为研究热点，柔性离子热电材料因其高塞贝克系数备受关注。本研究基于溶解-凝胶法制备了一种 p 型纤维素基复合离子凝胶 (CIG)，提出一种基于调节水分含量优化其热电性能的绿色策略。通过形貌结构表征与分子动力学模拟揭示了水分对离子传输的调控机制：水分增加促使咪唑阳离子水合化，削弱阴、阳离子间静电作用，扩大其迁移率差异，同时诱导纤维素骨架形成贯通离子通道，极大提高纤维素离子凝胶的离子电导率 (51.2 mS cm^{-1})、离子塞贝克系数 (20.7 mV K^{-1}) 与热电优值 (2.36)。掺杂导电碳纳米管构筑混合型热电凝胶，通过优化调控孔隙结构并建立离子-电子摩擦作用进一步协同提高了其热电性能。基于良好热电性能 CIG 组装的柔性器件可以实现人体体温-环境温差的持续电能输出，具有自粘附、抗菌、自修复等特性，并可用于温度、湿度、心电/肌电的多模传感集成。同时，凝胶中的离子液体与纤维素骨架可完全回收再利用或生物降解，契合“双碳”战略下新材料绿色化转型需求

A02-75

晶界工程增强三维热电器件能量转换性能与柔性的兼容性

任广坤^{*1}, 刘若璞¹, 石岩¹, 林元华²

1. 中国工程物理研究院材料研究所

2. 清华大学

3D 热电器件 (TED) 的高能量转换性能和良好柔性对于拓展其应用领域具有重要意义，然而它们之间较差的兼容性则有待深入优化。在本研究中，我们首先通过晶界工程保持了低热导条件下 Bi_2Te_3 基热电材料 ZT 值的稳定，在此基础上基于 PI 衬底组装得到了柔性 TED (F-TED)。其中，p 型 $\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}\text{Te}_3$ 材料优化后在 373 K 时实现了 1.2 的最大 ZT ，相应热导率则通过改变平均晶粒尺寸和增强声子散射，从原始样品的 $1.2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 逐渐降低到 $0.7 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 。随后，我们组装得到了具有 200 对电极、填充率为 35% 的 F-TED，其在 73 K 温差下开路电压和功率密度分别达到 3.0 V 和 13.8 mW cm^{-2} 。在弯曲半径为 5 mm 的 1000 次循环拉伸试验后，F-TED 仍能保持完整且内阻恒定，体现了优异的电气稳定性和结构可靠性。此外，1.2 mm 的高度和 2 g 的重量相比初始器件分别减少了 70% 和 75%。因此，通过将颗粒重量减半并应用晶界工程和高密度策略，我们在不损失热电转换性能的基础上优化了 3D- Bi_2Te_3 基器件的舒适性和柔性特征，进一步提升了其在可穿戴应用等相关领域的实用性。

相变散热提升热电发电机的输出功率与穿戴舒适性

杨东旺*, 唐新峰

武汉理工大学

可穿戴式热电发电机 (w-TEG) 的发展为自供电电子设备提供了更多可能。当前 w-TEG 研究主要聚焦结构或热学设计, 却鲜少深入分析二者耦合关系, 导致发电性能与佩戴舒适性难以兼得。本研究通过有限元模拟对 w-TEG 与散热器进行热仿真分析, 发现优化冷端散热条件与热电腿长度可协同提升发电性能并改善舒适度。具体而言, 采用铜泡沫/石蜡复合散热器可实现高效散热, 在显著提升输出功率的同时缩短热电腿长度。当配置复合散热器 ($h=3\text{ mm}$) 和热电腿 ($l=3\text{ mm}$) 的 w-TEG 佩戴于手臂时, 其最大开路电压达 91.4 mV , 平均输出功率达 $121.9\text{ }\mu\text{W}$, 持续供电时长 1700 s , 可有效驱动温湿度传感器工作。本研究成果为优化 w-TEG 输出性能、加速自供电电子设备发展提供了重要指导。

口头报告

A02-77

基于 In-Se 相图设计的晶体生长研究

林思琪, 金敏*

上海电机学院

In-Se 基化合物在热电性能、柔塑性潜力而在近年来获得广泛关注, 获得高质量晶体材料尤为重要。相图是指导晶体生长的最基本信息, 基于 In-Se 二元体系相图, In 和 Se 元素可组合成 In_4Se_3 、 InSe 、 In_6Se_7 和 In_2Se_3 等多种化合物, 且均具有非一致熔融特性, 无法从准确的化学计量比溶液中析出得到晶体。为了进一步验证 In-Se 二元相图的正确性, 以便提高晶体转化效率, 本工作依据现有的 In-Se 相图进行了材料制备研究, 分别设计了多个组成配方, 其中 In 含量范围为 50-71%, 基于不同化学计量比的 In-Se 基化合物的合成渠道, 利用垂直区熔法技术生长出了多种单晶材料, 为设计目标产物提供了重要实验设计指导原则。

参考文献:

1. Chevy A, Kuhn A, Martin M S. Large InSe monocrystals grown from a non-stoichiometric melt[J]. Journal of Crystal Growth, 1977, 38(1): 118-122

A02-78

短程结构缺陷对热电性能的影响

陈荣春, 康慧君*, 王同敏

大连理工大学

原子无序/有序或偏心工程可通过选择性散射载流子与声子, 实现对电热输运性能的协同优化。本工作基于原子对分布函数、多元表征及理论计算系统研究了这一短程结构缺陷对典型热电材料(如 $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.4}\text{Sb}_{0.6}$ 、 BiSbSe_3 、 CuInTe_2 、 AgSbSe_2 及 ZrCoSb) 性能的影响规律。以 ZrCoSb 基 half-Heusler 合金为例, 在长程有序晶体结构中引入短程无序, 为解耦电声输运提供了新的自由度。具体地, Zr 缺失成功引入了 Zr 空位, 增强了 $\text{Zr}_{1-x}\text{CoSb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 的短程无序。最终, 在 973 K 时, $\text{Zr}_{1-x}\text{CoSb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 的峰值 zT 提升至 0.81, 几乎是原始 $\text{ZrCoSb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ 的两倍。本研究阐明了短程结构缺陷调控在热电性能调控中的关键机制, 为通过缺陷工程策略设计高性能热电材料提供了理论指导。

A02-79

高性能 PbSnGeTe_3 基热电材料研究

张旦*

河北大学, 物理科学与技术学院

热电材料可以直接实现热能与电能的相互转换而受到研究人员的广泛关注, 本征低热导率的 PbSnGeTe_3 化合物是一种有前景的热电材料之一, 然而过高的载流子浓度限制了其热电性能。本工作主要研究共振能级和构型熵调控对 PbSnGeTe_3 电热输运特性的影响: (1) 研究发现 In 掺杂能协同降低载流子浓度和引入共振能级增加 Seebeck 系数, 进而实现热电性能的优化, 其中 $(\text{PbSnGe})_{0.9875}\text{In}_{0.0375}\text{Te}_3$ 样品获得了 0.93 的平均 ZT 值(300-773 K); (2) 通过 AgSbSe_2 和 AgSbTe_2 固溶的方式, 发现增加体系构型熵不仅提高了晶体结构对称性而增加 Seebeck 系数, 还能加大晶格畸变程度而增强声子散射, 进而提升了材料的热电性能, 其中 $\text{PbSnGeTe}_3\text{-}0.4(\text{AgSbTe}_2)$ 样品的平均 ZT 值高达到 1.01(300-773 K), 相比基体提升了 58%。

A02-80

高密度 Widmannstätten 纳米析出相促进 SnTe 实现优异热电性能

吕途, 胡利鹏*

深圳大学

纳米析出相在高性能热电材料设计中发挥关键作用,尤其在声子平均自由程较短的材料体系中,对于抑制晶格热导率具有显著优势。然而,其调控效能常受到析出相浓度难以控制、界面共格性较差及形貌不理想等因素的制约,限制了其实际应用潜力。为突破上述瓶颈,本研究通过 SnTe 与 AgPbSbTe_3 合金化,诱导形成高密度 Ag_2Te -Widmannstätten 纳米析出相,从而实现热电性能的显著提升。系统的微观结构分析揭示了 SnTe 基体与 Ag_2Te 析出相间存在特定的晶体学取向关系,进而促进 Ag_2Te 沿特定方向生长,形成板条状形貌。构建的高密度 Widmannstätten 纳米析出相,有效增强了对声子的散射,从而显著降低晶格热导率。与此同时,借助载流子浓度的有效调控、以及能带收敛和能量过滤效应的协同作用,材料的电输运性能亦得到明显提升。最终, $(\text{SnTe})_{0.80}(\text{Ag}_{1.05}\text{PbSb}_{0.95}\text{Te}_3)_{0.20}$ 在 723 K 时获得了最高 ZT 值 1.5,并在 423–823 K 温度区间内实现了 1.1 的平均 ZT 。另外,基于该材料构建的单臂热电器件以及双对热电模块在 450 K 温差下分别实现了 7.22% 和 4.26% 的能量转换效率。该研究结果充分证明了高密度 Widmannstätten 纳米析出相作为声子散射中心的巨大潜力,为提升硫属化物的热电性能提供了新的设计思路与有效途径。

A02-81**从能带非抛物性因子看热电输运**朱建博¹, 隋解和^{*1}, 郭逢凯¹, 张永胜²

1. 哈尔滨工业大学

2. 曲阜师范大学

当前热电输运性质的模型化分析通常建立在抛物线近似能带模型基础上,并由此衍生出有效质量、权重迁移率和品质因子等指导热电材料性能设计的重要参数。然而,研究发现通过实验数据反解得到这些参数值与第一性原理计算值之间存在着明显的系统性偏差。基于对热电输运性质的深入分析,发现半导体材料的塞贝克系数和洛伦兹常数在能量维度上具有极强的非局域性,使得远离能带边缘深处的非抛物线性能带结构依然对其值有着突出的影响。研究表明即使在费米能级靠近能带边缘的轻掺杂热电半导体中,缺乏能带非抛物性考虑的洛伦兹常数预测偏差可达 50%,使得材料的电子热导率被严重高估,从而得到非物理的超低晶格热导率。本研究提出“能带非抛物性因子”特征参数,在量化描述半导体材料能带偏离抛物线程度的基础上,能有效修正经典抛物带模型的预测偏差,为材料热电输运性能的精准分析与设计提供前提保障,也为其它功能半导体材料的理论研究开辟新视角。

A02-82**通过微结构缺陷工程增强 Ag_2Se 材料中的声子散射与热电性能**

张子龙, Mazhar Hussain Danish, Zia Ur Rahman, 陈跃星, 郑壮豪*

深圳大学物理与光电工程学院

硒化银 (Ag_2Se) 热电材料因其在低温区表现出优异的电学性能与较低的热导率,被视为低温热电材料中最具潜力的竞争者之一。本研究采用机械研磨与固相反应熔融法在室温常压下制备了高纯度的 Ag_2Se 块体,并结合放电等离子烧结 (SPS) 工艺实现有效的结构调控。微结构分析结果表明,该结构调控在材料中引入了大量的纳米析出相以及多种微结构缺陷,显著增强声子散射,从而有效降低了晶格热导率 (κ_L)。在 388 K 温度下,研磨时间 5min 的 Ag_2Se 样品 κ_L 降低至 $0.10 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$,较未研磨的样品降低了约 77%。此外,该结构调控策略使得载流子浓度 (n) 下降,有效质量 (m^*) 提高,从而实现塞贝克系数 (S) 的提升。最终,研磨时间为 5 分钟的 Ag_2Se 样品在 388 K 时的热电优值 (zT) 达到 0.77,在 300 K 时为 0.58,

且在 300~388 K 区间的平均热电优值 (zT_{ave}) 为 0.67。综上, 在 Ag_2Se 材料中引入多维度的结构缺陷是一种高效、简洁的热导率调控策略, 可在降低晶格热导率的同时大幅提升材料整体的热电性能。

A02-83

Bi_2Te_3 定向热机械加工行为及性能提升

冯江河¹, 杨平², 李阿莉¹, 赵澎阳², 刘睿恒^{*1}

1. 中国科学院深圳先进技术研究院

2. 上海交通大学

Bi_2Te_3 是唯一商业的热电材料, 其热电性能与(0001)面织构度密切相关, 如何提升多晶面内织构度已经成为近年来研究碲化铋的核心问题之一。基于材料的滑移系, 我们利用与宏观形变量相关的泰勒模型, 系统分析了碲化铋在拉升和压缩时晶粒的形变行为, 并揭示了主导热变形与热挤压对材料宏观取向的滑移系, 提取了影响热挤压晶棒取向度的关键因素, 最终提出了倒转-热挤压提升面内织构度的有效措施。也就是, 简单地将挤出方向与初始面内织构平行化, 材料织构度讲提升 1 倍有余, 促使室温载流子迁移率和功率因数高达 $263 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 和 $\sim 47.3 \mu \text{Wcm}^{-1} \text{ K}^{-2}$, 无量纲品质因数(zT) $\sim 1.05@375\text{K}$ 。利用相同的方法开发出服役于不同温度的分级材料, 其 zT 为 $1.08@450 \text{ K}$ 。在此基础上制造了分段热电发电机模块, 在 293 K 的温差下实现了 7.6 % 的高转换效率。

A02-84

立方/菱方相共存 GeTe 的快速合成及其电声解耦

张文钰, 林元华*

清华大学

热电材料因能实现热能和电能之间的直接转换, 得到了广泛的研究。其中, GeTe 基热电材料由于其优异的热电性能, 在热电领域展现出了巨大潜力。然而传统制备工艺合成的 GeTe 难以在室温下保存具有高热电性能的立方相 (C-GeTe), 此外, 还包含长时间熔融、退火等多个耗时耗能过程。针对这些难题, 我们结合真空封管自蔓延高温合成技术(SHS-V)和放电等离子烧结(SPS)两种工艺成功快速合成了 GeTe, 并基于制备工艺中的非平衡反应过程, 首次成功实现了菱方相 (R-GeTe) GeTe 与高温立方相 (C-GeTe) 在室温下的共存, 有效减弱了 R-GeTe 中的电子-声子耦合作用。高度对称的 C-GeTe 在优化载流子浓度的同时增强了态密度有效质量, 显著提升了电输运性能; 同时, 快速制备过程中形成的相界面和晶粒细化增强了声子散射, 降低了晶格热导率。最终在 773 K 温度下实现了 1.24 的优异 ZT 值。这种快速合成策略也可推广至其他热电材料体系。

A02-85

高压下反常热输运行为解耦热输运性能

曹威, 侯悦, 王自昱*

武汉大学工业科学研究院

根据经典理论, 非金属晶体材料的晶格热导率总是要随着压力的增加而增加。然而经典理论是基于已有实验结果的一种简化近似, 并不适用于所有体系。若材料的热导率能够随着压力的增加而降低, 就有可能实现热电输运性能的解耦合调控。参考这些特殊的压力导致晶格热导率反常变化的工作, 我们展开了寻找特殊碲化物材料的研究。由 IIA 族元素和 VIA 元素构成的二元化合物很多都有立方相结构。不同于常规晶体材料, 金刚石相 MgSe 和 CaSe 的晶格热导率会随着压力的增加而减小。结果表明金刚石相 MgSe 和 CaSe 的横波声学声子会随着压力反常下移, Grüneisen 参数提高, 非谐性增加, 原子间成键发生软化, 泊松比降低。同时, 金刚石相 MgSe 和 CaSe 的 Seebeck 系数会随着压力增加而增加, n 型功率因子随着压力提升较大。最终 MgSe 的 ZT 值在 700 K 下可达到 0.94, CaSe 的 zT 值在 800 K 下可达到 1.2。实现了压力

解耦调控 MgSe 和 CaSe 的热电性能。

A02-86

透射电镜在热电材料构效关联中应用的探索

于勇*, 吴渊, 吕昭平

北京科技大学

作为一种可以将废热转化为电能的材料, 热电材料在集成电路、新型能源开发、深空探索等领域拥有广阔的应用前景。目前学界普遍认为纳米结构对载流子和声子输运产生重要影响, 但由于纳米结构尺寸小且埋藏在材料内部, 一般手段无法对其作用过程进行直接观察, 进而厘清纳米结构-热电性能的关系。因为具有超高空间分辨率, 透射电子显微技术可以对纳米结构进行直接的观察, 使得探究纳米结构的结构起源与作用机制成为可能。然而, 传统的透射电镜方法仅局限于对原子位置进行粗略成像, 无法实现对于多个关键物理量的精准表征, 例如对于材料热电性能起到关键作用的局域应变和电势场等, 这阻碍了材料工作者对于纳米结构的深入理解与合理调控。

针对传统透射电镜方法对纳米结构解析能力有限的问题, 我们基于多种前沿透射电子显微学表征分析方法并加以创新, 对影响热电性能的复杂微观结构基元与关键物理量进行系统性研究。我们基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, 纳米束衍射等, 采用超高质量样品制备技术和样品漂移扫描校准技术, 提升了应变分析的精准度约一个数量级, 创新采用原位电子全息揭示了热电材料服役过程中纳米结构低温至高温的电势分布, 利用原位纳米束衍射方法探明了缺陷形成前后应变场的变化。该系列成果全方位多角度地厘清了纳米结构对于载流子与声子输运的作用机制, 为进一步利用纳米结构提升材料热电性能提供了坚实的理论基础。近年来, 4D-STEM, 4D-EELS, 超快电镜等先进电镜技术的发展, 提供了测量热电材料局部物理量的更多可能性, 本文对这些方向进行展望。

A02-87

多尺度缺陷调控铜基超离子导体材料热电性能

张益欣*、葛振华

昆明理工大学材料科学与工程学院

二元铜基超离子导体材料 Cu_{2-x}M ($\text{M}=\text{S}, \text{Se}$) 具有潜在的高热电性能, 一直以来是国内外高度关注的重要材料体系。此类材料的晶体结构较为特殊, 铜离子 (Cu^+) 在高温下具有类液态行为, 并且材料的热电性能以及服役稳定性都与结构中的 Cu 空位密切相关, 因此通过结构和成分的调整有望实现铜基超离子导体材料热电性能的进一步优化。本课题组通过添加 Cu_3SnSe_4 以及金云母片实现了铜基超离子导体材料热电性能的显著优化。对于硫化亚铜材料, 利用 Cu 空位浓度的调整以及外来元素掺杂精确调控了复合材料的载流子浓度, 削弱过量铜空位对材料电导率及载流子热导率贡献的同时实现了较高功率因子的保持。通过引入多尺度第二相构筑了复杂的界面关系, 增强了声子散射作用, 从而显著降低材料在宽温区范围内的热导率。硫化亚铜基复合材料的最高热电优值 ZT 在 773K 时达到了 1.6, 同时 Cu 空位浓度的调控以及能够抑制铜离子长程迁移的多尺度第二相的引入显著改善了硫化铜基材料的稳定性。对于硒化亚铜材料, 利用放电等离子烧结制备 Cu_2Se -金云母片复合材料, Fe 离子掺杂调节了基体材料的载流子浓度, 宏观金云母片能够有效地抑制铜离子的长程迁移, 从而削弱了 Cu 离子迁移行为对于载流子传输的而化作用, 有利于保持 Cu_2Se 材料在高温下的电导率。多尺度的金云母颗粒有效散射声子而降低了复合材料的晶格热导率, 最终实现热电性能和服役稳定性的协同优化。本研究为优化其它类液态热电材料提供了一种值得借鉴的方法, 也证明了环境友好、成本低廉的铜基超离子导体材料具有潜在的商业化应用价值。

这成为器件在高温服役下是否具有高稳定性的关键问题。针对上述问题, 本团队基于 MgAgSb 材料为研究重点, 开发高效、快捷的高通量筛选阻挡层的方法, 成功筛选出钴作为其阻挡层材料, 与热电材料形成原子级别的界面结合, 573 K 高温环境下表现为化学惰性, 同时实现高强度结合, 完全满足器件在实际

环境中的服役条件。制备出的全 Mg 基的热电器件，在 287 K 的温差下，实现 10.2% 的热电转换效率，且经过 1440 个小时的热循环测试过程，器件发电性能输出稳定，未出现明显的衰减现象。本研究实现了全 Mg 基热电器件高效、稳定的服役，极大地推动了其实际应用进程。

参考文献:

1.W. Zuo, H. Chen, Z. Yu, Y. Fu, X. Ai, Y. Cheng, M. Jiang, S. Wan, Z. Fu, R. Liu, G. Cheng, R. Xu, L. Wang, F. Xu, Q. Zhang, D. Makarov, W. Jiang. Atomic-scale interface strengthening unlocks efficient and durable Mg-based thermoelectric devices. Nature Materials, 2025, 24 (5), 735-742.

A02-88

固有无序结构空位和掺杂对 ZrNiSn 基材料热电输运机制的影响

杨雄*

西南交通大学

Half-Heusler 合金具有优异的热电和力学性能，在废热回收和深空探索等领域具有广阔的应用前景。目前，性能优越的 N 型 half-Heusler 热电材料通常属于 $Zr_{1-x}Hf_xTi_yNiSn_{1-z}Sb_z$ ($x, y = 0 \sim 1, z = 0 \sim 0.04$) 体系。然而，该体系中 Hf 的最佳掺杂范围在 0.4 至 0.7 之间。过量 Hf 掺杂不仅会增加热电材料的生产成本，还限制了其实际应用。在本研究中，通过掺杂和调节基体中固有无序结构空位的含量，优化了电学和热学性能，获得了与大多数 Hf 掺杂样品相当的 ZT 值，并有效解决了 Hf 使用量高的难题。

A02-89

多策略协同优化高锰硅基材料热电性能

李志亮*, 张广旭, 董家琪, 王婧娴, 王淑芳*

河北大学, 物理科学与技术学院

热电材料是一种可实现热能和电能相互转换的重要功能材料。高锰硅 (HMS) 热电材料原料丰富、环境友好、热稳定性及机械性能优异，在中高温废热发电方面具有较好的应用前景。通过湿法球磨结合放电等离子烧结 (SPS) 技术制备了 $(Mn_{0.985}V_{0.015})(Si_{0.99}Al_{0.01})_{1.79+x}\%CrSi_2$ 块体样品。一方面，利用 V 和 Al 两元素分别取代 HMS 的阴、阳离子位，实现受主掺杂提高了载流子浓度。另一方面，通过复合 $CrSi_2$ 纳米颗粒，增强了晶界散射，降低了热导率。实现了电、热输运的协同优化。最终，在 823K 处， $(Mn_{0.985}V_{0.015})(Si_{0.99}Al_{0.01})_{1.79+20\%}CrSi_2$ 样品的 zT 值高达 0.72，比 $MnSi_{1.79}$ 基体 ($zT \approx 0.42$) 提升了近 71.4%。因此，阴阳离子取代以及纳米结构复合是提升 HMS 热电性能的有效策略。

A02-90

InSb 基热电材料性能优化与器件构筑

王晴^{1,2}, 王淑芳², 林元华*¹

1. 清华大学
2. 河北大学

InSb 是一种极具潜力的中温热电材料，其研究主要集中于 n 型热电性能。然而，缺乏高性能的 p 型材料是制约其热电器件发展的关键问题。本文通过能带工程调控 InSb 的费米能级，成功实现了 p 型 InSb 材料的可控合成，并通过调控载流子浓度，在提高电导率的同时，抑制双极扩散作用，从而显著提升了其热电性能，最终，p 型 $In_{0.93}Cd_{0.07}Sb$ 样品的 zT 值高达 0.40 (723 K)，较本征 InSb 提升约 7.0 倍，优于当前多数文献报道水平。此外，进一步通过 Sn 掺杂调控 n 型 InSb 的电子能带结构，Sn 的 5s/5p 轨道引入共振能级，提高有效质量与 Seebeck 系数，施主掺杂优化载流子浓度，使 $InSn_{0.00125}Sb$ 样品的功率因子在 723 K 处提升至 $5.60 \times 10^{-3} W m^{-1} K^{-2}$ 。Sn 掺杂引起的质量场和应力场波动以及纳米夹杂相的形成能够增强声子散

射，降低晶格热导率，最终 zT 峰值达到 0.80 (723 K)，较本征样品提升约 66.7%。在此基础上，本文构建了基于优化 InSb 材料的 π 型热电器件，展现出其在中温热电发电领域的良好应用前景。

A02-91

无机半导体材料的温加工

高治强¹、魏天然²、杨世琪¹、马玉鹏²、陈立东¹、史迅^{*1}

1. 中国科学院上海硅酸盐研究所

2. 上海交通大学

半导体是现代电子技术的核心。然而，由于其本征脆性，半导体薄膜通常需通过溅射或化学/物理沉积等工艺进行加工，这些方法复杂、成本高且耗时。相比之下，延展性金属可以通过轧制、挤压和压制等金属加工方法轻松制成所需形状，这些方法具有低成本、低浪费、高通用性和高生产率等优点。迄今为止，材料的加工方式仍受其力学性能的限制，即脆性半导体通常无法通过金属加工技术进行处理。

本研究表明，脆性半导体可通过温和金属加工方法（即在略高温下进行塑性加工）实现高达约 3000% 的延展性，从而实现类似金属的可塑性制造。多种经典块体脆性半导体（如 Cu_2Se 、 Ag_2Se 和 $\text{Bi}_{90}\text{Sb}_{10}$ ）可在低于 400–500 K 的温度下被加工成自支撑的、高质量的微米级大薄膜，厚度可从宏观尺度至几微米不等。本文提出了一种基于原子受热振动与集体位移耦合的模型，以解释其优异的塑性加工性能。

值得注意的是，这些通过温和金属加工制成的薄膜能够保持块体材料优异且可调的物理性能，如高达约 $5000 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的载流子迁移率，以及通过调控化学成分可实现跨越 6 个数量级的电导率调节。在热电器件的案例研究中，该方法实现了高达 $43\text{--}54 \mu\text{W cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$ 的超高归一化输出功率，几乎是延展性 Ag_2S 基半导体的两倍。

本研究表明，脆性半导体可通过温和金属加工方法实现类似金属的制造方式，具有在多种电子应用中广阔的应用前景。

A02-92

Interfacial Engineering and Modulation in Porous Thermoelectric Composite Materials

Shuankui Li*, Danning Ma, Bu Li

Guangzhou University

Thermoelectric technology, which enables direct heat-to-electricity conversion through the Seebeck effect, demonstrates significant potential for high-efficiency energy harvesting in next-generation wearable electronics and aerospace systems. However, conventional TE materials face critical limitations including excessive density, inherent brittleness, and interdependent thermoelectric parameters challenges that hinder their widespread adoption, particularly in emerging wearable device applications. The strategic introduction of porosity in TE materials presents a promising solution pathway by simultaneously reducing volumetric density and material costs while enhancing mechanical flexibility. Notably, optimized porous architectures may also improve thermoelectric performance through selective phonon scattering mechanisms. While effective medium theory predicts similar porosity-induced reductions in both electrical and thermal conductivity - theoretically maintaining constant thermoelectric figure of merit (zT) - practical material systems reveal more complex interfacial dynamics. The proliferation of interfaces in porous structures significantly modifies charge carrier transport characteristics, typically resulting in degraded electrical properties that outweigh thermal conductivity reductions. This highlights interfacial engineering as a crucial research frontier, particularly in composite porous systems such as BTS/CNT and BST/glass bubble architectures where interface modification has demonstrated measurable zT improvements. The work concludes by proposing future research directions, focusing on intelligent pore-structure design through machine learning optimization and system-level integration with thermal management solutions. By elucidating fundamental structure-property relationships and establishing practical design guidelines, this analysis advances

the rational development of porous TE materials and provides actionable insights for engineering next-generation self-powered systems in flexible electronics and aerospace applications.

A02-93

CuFeSnS 四元化合物的本征点缺陷与热电性能研究

宿太超*, 何智芬, 王涛, 朱红玉

桂林理工大学

Cu₆Fe₂SnS₈ 化合物是近期被发现的具有本征低热导率的环境友好型热电材料, 但其电输运性能远低于 PbTe 等传统热电材料, 且在高温 (>673 K) 条件下热稳定性较差。本课题组利用机械合金化结合真空热压烧结方法, 制备了一系列结构稳定的 Cu₆Fe_{2-x}Sn_{1+x}S₈ 化合物, 其中 Cu₆FeSn₂S₈ 具有较高能带简并度和较好的高温热稳定性 (~773 K)。利用密度泛函理论计算了 Cu₆FeSn₂S₈ 的本征点缺陷形成能, 筛选出容易合成的缺陷类型。进一步地在实验上构建了含有本征点缺陷的 Cu₆FeSn₂S₈ 化合物。研究发现, 通过引入本征点缺陷途径可以有效地调控 Cu₆FeSn₂S₈ 的载流子浓度并显著提升其热电性能。

A02-94

准无机碲化铋基热电材料的墨水直写 3D 打印及其热电性能调节

王正上*

电子科技大学

墨水直写 3D 打印热电材料可以实现多孔、网格、梯度等特殊结构的一次成型, 有效缩短了工艺流程, 降低了成本, 是学术界和产业界的关注重点。在直写打印中, 通常需要采用有机溶剂以形成热电材料墨水, 并使用有机物添加剂来调节墨水的流变性质。但有机含量过大势必增加有机物去除的难度, 从而导致有机杂质残留。针对上述问题, 我们设计了一种准无机碲化铋基热电材料墨水, 其有机物含量约~1wt%, 远小于目前常规热电墨水体系的含量 (~50wt%)。本研究所开发的墨水以少量有机物 PAA 和 PEI 为交联剂, 水为溶剂。其中, 溶于水中的少量 PAA 和 PEI 可以形成稳定的框架结构, 从而稳定墨水中的热电粉体, 并调节整体的流变性质以完成打印。墨水的固含量可达 80wt% 以上, 稳定 5 天性质不变。此外, 有机物含量降低抑制了杂质缺陷的产生, 防止电声子受到非正常散射, 有效提升了材料的热电性能, 所制备的碲化铋材料 ZT 达到 0.71 和 0.59, 接近目前最高水平。本工作设计的准无机墨水不仅适用于碲化铋基材料体系, 也可用于碲化铅、碲化锗、碲化锡等其他诸多热电材料体系, 为开发功能材料的 3D 打印技术及热电材料的实际应用提供了新思路。

A02-95

机械合金化与纳米材料合成的创新解决方案

游龙

科尔帕默仪器 (上海) 有限公司

机械合金化和纳米材料合成是材料科学中, 用传统方法难以获得的复合金属粉末及先进材料的尖端技术。该工艺不仅需要高能量的研磨设备, 还需依赖高性能设备实现精准控制。

科尔帕默 BM 系列高能球磨仪, 通过超过 70 年的研发和生产经验以及其在球磨机创新领域所做出的突出贡献, 成为球磨机行业标准的制定者。其通过独家专利的 ∞ 式三维运动模式, 在最短的时间内向样品输送最高的机械能量, 配备长效运行芯片, 其可持续提供稳定的高能球磨环境, 达到制备成分均匀的纳米级复合金属粉末, 是机械合金化与纳米材料合成的理想设备; 特别是用于开发具有耐腐蚀性、高强度等优化性能的新型合金制备科研与工业应用所需的纳米级材料。

A02-96

基于第一性原理的 Ag_2Q ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 热电材料缺陷化学研究乌力吉贺希格^{1,2}, 赵琨鹏², 史迅^{*2}

1. 内蒙古工业大学

2. 上海交通大学

银基硫族化合物 Ag_2Q ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 因其极低的热导率、高电子迁移率以及优异的室温塑性, 在柔性热电材料领域展现出广阔的应用潜力。特别是 Ag_2S 及其与 Se 、 Te 构成的固溶体, 不仅具有金属般良好的延展性, 还表现出优异的热电性能, 极具在柔性可穿戴器件中的应用潜力。然而, Ag_2Q 材料中本征 n 型导电行为的起源及其难以实现 p 型掺杂的内在机制仍不明确。此外, Ag_2S 本征较低电子浓度也在一定程度上限制了其热电性能的优化。本研究采用密度泛函理论结合 GW 修正的第一性原理计算方法, 系统研究了 Ag_2Q 材料低温相中的本征缺陷化学行为, 并深入探讨了 Ag_2S 和 Ag_2Se 低温相的掺杂调控策略。结果表明, 相比于其他本征缺陷, Ag 间隙具有较低的缺陷形成能, 更容易在材料制备过程中形成。这便是 Ag_2Q 材料在室温呈现本征 n 型导电特性的根本原因。然而, Ag_2Q 材料 p 型掺杂窗口较小甚至为负, 导致难以对其实现 p 型掺杂。此外, 通过计算 Ag_2S 的 17 种掺杂元素的缺陷形成能发现, Se 和 Te 在 S 位点的替代缺陷具有相对较低的形成能, 这与已有实验研究结果相吻合。其他 n 型掺杂元素则展现出极小的掺杂极限, 进一步印证了其较大的掺杂难度。然而, 在 Se 和 Te 掺杂体系中, 由于带隙的缩小以及 Ag 间隙缺陷的 p 型掺杂窗口进一步负向移动, 使得该掺杂体系电子浓度相比纯相 Ag_2S 显著提高。此外, 关于 Ag_2Se 的掺杂缺陷计算结果与 Ag_2S 基本一致。本研究为理解 Ag_2Q 材料的本征导电机理及优化其热电性能提供了理论依据, 同时也为其他窄带隙半导体缺陷化学的第一性原理研究提供了有益的参考。

A02-97**Synergistic Optimization of Thermoelectric Performance and High ZT in CuGaTe_2 through Ga Vacancies**

Zipai Zhang*

Xiamen University of Technology

Enhancing thermoelectric performance is critical for efficient energy conversion. This work demonstrates that controlled introduction of Ga vacancies in mid-temperature thermoelectric CuGaTe_2 synergistically optimizes its electrical and thermal transport properties, achieving a peak ZT of 0.86. First-principles calculations reveal that Ga vacancies drive the Fermi level into the valence band, significantly increasing hole concentration and electrical conductivity while simultaneously reducing phonon group velocity through strong point-defect scattering. Experimental results demonstrate that benefiting from the synergistic optimization of electrical and thermal transport properties by Ga vacancies, the $\text{CuGa}_{0.92}\text{Te}_2$ sample achieves both high power factor and low total thermal conductivity. Consequently, at the maximum operating temperature, its thermoelectric figure of merit reaches 0.86. This study confirms that Ga vacancy engineering is an effective strategy for enhancing the thermoelectric performance of CuGaTe_2 . By simultaneously optimizing electrical transport and suppressing thermal transport, it significantly improves the material's ZT value, providing crucial theoretical and experimental foundations for developing high-performance CuGaTe_2 -based thermoelectric materials.

A02-98**卤素固溶 Cu_2SnS_3 热电材料的电声输运特性研究**

杨顺达*

中科院福建物质结构研究所

提升晶体材料的空间对称性可促进能带简并以优化电输运性能, 但对称性提高往往伴随晶格热导率 (κ_{lat}) 上升, 成为实现高热电性能的核心瓶颈。本研究以低成本、环境友好的 Cu_2SnS_3 为基体, 通过“类晶格”合金化策略引入高浓度 CuX ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$), 诱导其单斜相向单一立方相转变。其中, 20 mol% CuBr

固溶促进立方相中价带能级对齐，使功率因子（PF）从单斜相的 $0.96 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 显著提升至 $7.80 \mu\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 。同时，CuX 高浓度固溶通过增强化学键离子性（如 Cu-Br 键离子占比 47.33%）显著提升晶格非谐性（Grüneisen 参数 $\gamma=2.13$ ），并结合局域畸变有效抑制对称性提高导致的 κ_{lat} 上升。进一步引入 Sn 空位调控载流子浓度并产生点缺陷散射，实现电输运与热导率的协同优化，最终获得峰值 $ZT \sim 1.20$ （773 K）及平均 $ZT \sim 0.65$ 的高水平性能。该工作通过“类晶格”合金化与空位工程的协同调控策略，成功解耦高对称性材料中电-声输运的竞争关系，为低对称性材料通过相变实现热电性能优化提供了新思路。

A02-99

拓扑半金属中能带不对称性调控的热电输运机制与性能优化

韩世豪*

贵州师范大学

热电材料作为清洁能源转换技术，其发展历经半导体能带工程和“电子晶体-声子玻璃”概念两次革命，但性能瓶颈仍制约实际应用。特别地，零带隙体系因极低的塞贝克系数被长期忽视，而拓扑半金属独特的电子结构为突破这一局限提供了新机遇——如何在高电导特性基础上实现高塞贝克系数，成为当前关键科学挑战。本报告基于第一性原理计算，系统研究了多种拓扑半金属的热电输运性质，重点探讨了能带不对称性对电-热输运性质的微观调控机制。研究发现，在具有线性能带和平坦抛物线型能带共存的 Dirac 半金属 Na_2AgSb 中，热电输运系数可实现有效解耦，使得 ZT 值主要由塞贝克系数决定。得益于显著的能带不对称性，该体系在室温下可获得高达 $179 \mu\text{V/K}$ 的塞贝克系数，相应 ZT 值达到 1.3。进一步，以具有二次型能带的 InAs 半金属为例，研究表明强能带不对称性可通过显著增强载流子态密度、弛豫时间及群速度的能量依赖性，大幅提升塞贝克系数，使其在考虑精确电声耦合的情况下仍能达到 $130 \mu\text{V/K}$ 。此外，针对二维体系，我们以兼具线性能带、平带和范霍夫奇点的双层 Kagome 硼烯为例，通过电声耦合计算发现其塞贝克系数也可超过 $80 \mu\text{V/K}$ 。本工作系统揭示了拓扑半金属中能带不对称性对热电输运系数的调控规律，特别是在零带隙体系中实现高塞贝克系数的可行性。通过能带工程调控电子结构特征，有望为设计新型热电材料提供新的思路。这些发现为理解拓扑材料中的热电转换机制提供了理论参考。

A02-100

高稳定高性能梯度 GeTe 热电器件

李娟，王恬恬，刘睿恒*

中国科学院深圳先进技术研究院

P 型 GeTe 材料热电性能可达到 2.4 及以上，是中温区高能量转换效率理想材料之一。但 GeTe 基材料在 600~700 K 温区发生结构相变，服役可靠稳定性是其在高性能区间应用的重要挑战。晶格结构调控或高熵策略虽然可调控相变温度，但无法完全避免相变发生。为发挥 GeTe 材料的性能优势，可采用性能优化的低温菱方相 GeTe，和晶格结构调控后相变温度发生在室温附近的材料组分，组成梯度器件，保证全温区结构的稳定性。GeTe-MnTe 固溶可有效调整晶格结构使近室温保持立方结构，并可在 600~800 K 的温区内实现 1.4 的平均热电优值。但 GeTe-MnTe 固溶体热膨胀系数高，且与低温菱方结构 GeTe 差异较大，本工作采用同族 SnMnTe 作为阻挡层同时实现了器件与电极的高强低阻焊接，以及不同组分高温低温材料的梯度连接。与 N 型方钴矿组成的热电器件在热端温度 500 °C 时实现了 10% 的能量转换效率，体现了梯度 GeTe 热电器件的优势，为高可靠性高性能的中温区发电器件的突破提供了方案。

A02-101

热电器件转换效率测量误差分析研究

王瑞奇，柴盈华，李勇*

武汉第二船舶设计研究所船舶热动力全国重点实验室

热电器件转换效率是表征热电转换过程的关键参数，但目前业界尚未形成统一的测量标准，主要原因是热流测量的不确定性较大。本研究针对国内外热电器件转换效率测量仪器结构等，基于热电转换测量中转换效率基本物理模型，通过误差传播原理，建立了热电器件转换效率的测量误差模型。基于测量误差模型，分析了各个测量仪器结构中各要素对热电转换效率测量误差的影响，结果显示温度测量误差对转换效率误差占据主导作用，热电器件转换效率测量误差模型及影响因素分析结果，可对热电转换效率测量改进提供指导。

A02-102

宽温区热电材料&器件综合性能评价系统

宋林兴

多场低温科技（北京）有限公司

热电材料是能够实现热能和电能直接相互转换的能源材料，在废热利用、特种电源、制冷等领域有广泛的应用前景。最近，热电器件在低温环境下的应用引发了越来越多的关注。面对在更宽温区下评估热电材料&器件综合性能的需求，多场低温科技（北京）有限公司开发了一款宽温区热电材料&器件综合性能评价系统，该系统能够实现对热电材料&器件的热电转换系数、制冷效率、最大温差和最大制冷量等热电性能参数的精准测量。

宽温区热电材料&器件综合性能评价系统除了支持传统的热流计法测量热流外，该系统还提供了一种热-电替代法的方案，即通过温控仪精准控制热端温度并记录温控仪电加热器功率的变化量来反推热电器件的热功率，使其具有更高的测量分辨率。该系统能够提供 75-500 K 的宽温区测量环境，并能够同时对热电材料&器件的热电转换系数、制冷效率、最大温差和最大制冷量等参数进行测量，将是热电材料开发和热电器件性能评价的理想解决方案。

A02-103

聚噻吩化学掺杂及其电子器件新应用

陈晨^{*1}，林悦²，殷小东¹，鲁凯晴²，程海峰¹

1. 国防科技大学

2. 中国科学院大学福建物质结构研究所

随着共轭聚合物（CPs）在电子器件领域的广泛应用，化学掺杂技术作为调控其电子特性的关键手段，已成为有机电子领域的研究热点。本报告将主要分享我们在聚噻吩化学掺杂研究方面的最新成果，特别是在电荷传输机制和电化学晶体管性能调控方面的研究进展。在电荷传输机制方面，系统探索了主体材料醚键侧链改性、成核剂改性对于聚噻吩体系掺杂过程、结构形貌以及热/电传输机制的影响规律。通过深入关联分析热激发活化能 E_a 、载流子跳跃传输势垒 W_γ 以及结构无序度随掺杂度的演变规律，首次揭示了在掺无序区域（特别是晶间连接区域）的链间传输受限是制约载流子离域度及金属态物性形成的关键因素；同时，通过引入成核剂调控 PBTBT 结晶度，我们有效提升了体系电荷传输性质，实现了电导率和塞贝克系数的解耦，经离子交换掺杂优化后，体系电导率可达 1894 S cm^{-1} ，此时，功率因子达到 $150 \mu\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，达到国际先进水平。在电化学晶体管性能调控方面，我们聚焦于器件的栅极和沟道两个重要组成部分，基于掺杂调控实现有机电化学晶体管（OECTs）性能优化，包括跨导、工作电压、响应时间、功耗等。例如，我们基于离子交换掺杂技术提出了一种 OECTs 通用栅极改性方法，可有效改善栅极界面处电压降，成功将 OECTs 模型器件的最大跨导由金栅极的 5.15 mS 提升至 10.4 mS，且最大跨导出现的栅极电压由 -2.4 V 降至 -0.55 V ；同时，使用沟道材料共混及高温摩擦法策略，进一步增强聚合物半导体的电子迁移率，并同时增大体积电容，从而进一步提升了跨导（ $G_{m_{\max}}$ 由 11.76 mS 提升到 21.36 mS），并显著降低响应时间（ τ 由 289 ms 降至 163 ms）。目前，基于聚噻吩化学掺杂技术研制的 OECTs 跨导性能可达 30.73 mS，已经显著超过了相关电信号传感文章报道的跨导的水平（3-8 mS）；并且器件在单脉冲、双脉冲易化以及多脉冲测试中表现良好的突触响应特性，为神经形态器件的研发提供了新思路。以上研究不仅显著深化了我们

对掺杂聚合物结构-输运性质之间复杂关系的理解,更为先进聚合物掺杂技术在新原理电子器件中的创新应用提供了新视角和新方法。

A02-104

温度-气体双模态自感知纤维的构筑策略及应用

于志财^{*1}, 周密¹, 黄乐乐¹, 徐杰¹, 于忠和², 何华玲¹

1. 武汉纺织大学纺织科学与工程学院, 织新材料与先进加工全国重点实验室
2. 武汉纺织大学技术研究院, 先进纺纱织造及清洁生产国家地方联合工程实验室

在复杂火灾场景中, 消防服的热防护性能不足与有毒气体预警功能缺失, 严重威胁消防员安全。本文提出一种基于三轴湿法纺丝技术制备的双模(温度-气体)三轴结构电子纤维(DM-TSF), 通过集成热电传感与气体传感功能, 实现极端火场环境下的主动安全防护。该纤维由三层功能结构组成: 1) p/n 型交替连接的热电芯层(p 段为单壁碳纳米管, n 段为改性单壁碳纳米管), 可在 10–500 °C 宽温域内实现高灵敏度温度监测(p 段 $8.44 \mu\text{V} \cdot \text{K}^{-1}$, n 段 $7.44 \mu\text{V} \cdot \text{K}^{-1}$); 2) 芳纶纳米纤维(ANFs)界面层, 提升力学强度与热稳定性; 3) $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{Tx MXene}@\text{MoS}_2$ 复合鞘层, 通过高密度吸附位点与肖特基异质结效应, 对 NH_3 气体表现出优异选择性(灵敏度 $3.14\% \text{ ppm}^{-1}@20 \text{ ppm}$)与抗干扰性。基于 DM-TSF 构建的便携式无线双模监测系统, 可分别在火焰侵袭 1–2 秒和 NH_3 侵入 15–28 秒内触发警报, 响应速度显著优于现有单模传感器。结果表明, DM-TSF 的三轴结构设计不仅突破了传统传感纤维功能单一的技术瓶颈, 还通过材料-结构协同优化, 实现了传感、防护与柔性的统一。该研究为极端环境下可穿戴智能防护装备的开发提供了新思路, 在消防及高温作业等领域具有重要应用潜力。本报告首先简要介绍有基于热电材料的温度传感纤维的传感机制、组装方法及在特殊领域的应用。随后, 探讨了具有温度及气体感知双模态纤维的设计思路及提高气体感知灵敏度的策略、及形貌调控等手段在智能纤维材料制备中的应用。最后, 提出了设计同时具有高电导率和高塞贝克系数的多模态环境感知纤维材料的设计原则。

参考文献:

- [1] H. He, J. Liu, Y. Wang, Y. Zhao, Y. Qin, Z. Zhu, Z. Yu and J. Wang, ACS Nano, 2022, 16(2):2953-2967. (ESI 高被引)
- [2] Q. Jiang, Y. Wan Y. Qin, X. Qu, M. Zhou, S. Huo, X. Wang, Z. Yu, H. He, Adv. Fiber Mater. 2024, 6:1387–1401. (ESI 高被引及热点)
- [3] H. He, Y. Qin, Z. Zhu, Q. Jiang, S. Ouyang, Y. Wan, X. Qu, J., Z. Yu, Nano-Micro Lett. 2023, 15, 226. (ESI 高被引及热点)
- [4] Z. Yu, Z. Zhu, Y. Zhang, X. Li, X. Liu, Y. Qin, Z. Zheng, L. Zhang, H. He, Carbohydr. Polym. 2024, 334, 122040. (ESI 高被引及热点)
- [5] H. He, Y. Qin, J. Liu, Y. Wang, J. Wang, Y. Zhao, Z. Zhu, Q. Jiang, Y. Wan, X. Qu, Z. Yu, Chem. Eng. J., 2023, 460:141661. (ESI 高被引及热点)

A02-105

正负磁阻共存的 $\text{Fe/Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ 热电薄膜

柯少秋, 叶先峰, 张昊俊, 聂晓蕾, 陈天天, 刘承姍, 朱婉婷, 魏平, 赵文俞*
武汉理工大学

具有优异电输运性能的热电薄膜是发展高效面内散热技术的关键材料, 但是过低的电输运性能是制约其应用的重要难题。热电磁耦合新效应是近年来发展的一种优化综合热电性能的新方法。为了探索热电磁耦合新效应对热电薄膜电输运性能的影响机制, 本研究发展了一种球磨分散-丝网印刷-热压固化一体化成型的方法, 成功制备了一系列 Fe 纳米粒子作为第二相的 xFe/BST /环氧树脂热电磁薄膜, 并重点研究了其热电磁耦合作用及其对电热输运性能的影响规律。研究发现, $\text{xFe/Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ (BST)/环氧树脂热电磁薄膜

中存在正、负磁阻共存的现象；BST (001) 择优取向因子与正磁阻 (MR+) 之间呈正比例关系并增加热电薄膜的电导率；源于强铁磁性 Fe 纳米粒子局部磁矩的自旋相关散射的负磁阻 (MR-) 会增加 Seebeck 系数。因此，室温附近 Fe/BST/环氧树脂热电薄膜的功率因子高达 $2.87 \text{ mW K}^{-2} \text{ m}^{-1}$ ，与 BST/环氧树脂热电薄膜相比，提高了 78%。这些结果表明，热电磁薄膜中正、负磁阻的共存不仅可解耦热电材料中电导率与 Seebeck 系数之间的耦合关系，还可以为磁纳米粒子诱导优异热电转换性能提供新的物理机制。

A02-106

PEDOT 复合热电材料及其柔性器件

梁丽荣*

深圳大学

热电材料作为一类重要的能源转换材料，能够实现热能与电能之间的直接相互转换，在废/余热和低品位热回收利用、制冷、温度传感以及柔性电子等领域展现出广阔的应用前景。其中，有机热电材料及其有机/无机复合材料因其优异的柔韧性和可加工性，在可穿戴电子设备领域具有独特的优势。在此基于导电聚合物 PEDOT，通过多尺度结构设计和界面工程，制备了三种高性能柔性热电材料：PEDOT:PSS/SWCNT 二元复合薄膜；PEDOT:Tos/Te/SWCNT 三元复合薄膜；弹性 PEDOT:PSS/SWCNT 复合热电气凝胶。基于上述复合热电薄膜，创新性地开发了两种新型热电器件：1) 具有高装配密度和可调控面内/面外结构的热电器件；2) 具备可拉伸、可压缩、可弯曲特性的三维螺旋形可穿戴热电器件，并系统研究了其输出性能与潜在应用价值。特别地，基于三维复合热电气凝胶设计的器件展现出优异的高温传感性能，成功实现了智能火灾预警和高温环境下的能量收集功能。以上研究为开发高性能柔性热电材料及其多功能器件提供了新的思路和方法。

A02-107

Elevating the thermoelectric performance in the sub-ambient temperature range for electronic refrigeration

Xiaojing Ma, Jun Mao*

Harbin Institute of Technology (Shenzhen)

The solid-state thermoelectric coolers, which can directly pump the heat by utilizing electricity, play an essential role in electronic refrigeration. Since thermoelectric devices usually cool down to the sub-ambient temperature range, the performance of the coolers critically hinges on the properties of the material below 300 K. Therefore, it is of great significance to promote the materials' properties below room temperature. Herein, the single-crystalline Mg_3Bi_2 -based material has been prepared and ensured a high electron mobility. As a result, thermoelectric figure-of-merit values of ~ 1.05 at 300 K and ~ 0.87 at 250 K (along the *ab* plane) have been achieved, which are superior to the commercial n-type $\text{Bi}_2(\text{Te, Se})_3$ -based alloys. Thermoelectric coolers (single- and double-stage devices) based on the n-type single-crystalline $\text{Mg}_3\text{Bi}_{1.497}\text{Sb}_{0.5}\text{Te}_{0.003}$ and p-type $(\text{Bi, Sb})_2\text{Te}_3$ have been fabricated. The maximum cooling temperature difference of the double-stage device is ~ 106.8 K at the hot-side temperature of 350 K, which outperforms the commercial Bi_2Te_3 -based device. After ~ 2000 cycles between the input electrical currents of 1 A and 3 A, the Mg_3Bi_2 -based double-stage device does not show any degradation in the cooling temperature differences. Our results show that the single-crystalline Mg_3Bi_2 alloys hold great promise for thermoelectric cooling applications.

A02-108

Self-powered photodetection based on the transverse thermoelectric effect of inclined PbSe thin films

Mingjing Chen, Xingkun Ning, Guoying Yan, Shufang Wang*

Hebei University

The transverse thermoelectric (TTE) effect is an unconventional thermoelectric effect in which a longitudinal temperature gradient gives rise to a transverse electric field. It has attracted extensive attentions because of the great potential application in self-powered photodetectors. Without any external voltage applied, large transverse voltage signals were detected when the surface of the inclined PbSe film was irradiated whether by a pulsed laser or continuous wave lasers (with wavelengths ranging from 360 nm to 10.6 mm) due to the anisotropic Seebeck coefficient induced by the lattice distortion. The amplitude of the output voltage showed very good linear dependence on the radiation density and $\sin 2\alpha$. The voltage sensitivity R_s can reach up to ~ 11.36 V/mJ and 415 $\mu\text{V cm/W}$ under the irradiation of 308 nm pulsed laser and 10.6- μm continuous wave laser, respectively. The detection Sensitivity can be enhanced by Pb self-doping and adding light-trapping coatings. These results demonstrate the great potential application of the inclined PbSe thin film for high sensitivity and fast response ultraviolet pulsed and ultra-broadband continuous-wave photodetection.

A02-109

具有绝缘衬底的 $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ /环氧热电薄膜的多束等离子烧结和优异性能

聂晓蕾, 柯少秋, 魏平, 赵文俞*, 张清杰

武汉理工大学

如何在绝缘衬底上制备大尺寸的高性能低成本热电薄膜是实现热电薄膜高效面内散热的关键难题。在此, 我们开发了一种多束放电等离子烧结技术(MB-SPS), 并利用该技术成功制备了一系列具有绝缘衬底的高性能大尺寸 $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ /环氧树脂(BST/EP)薄膜。我们发现 MB-BST/EP 薄膜中 BST 晶粒的(0001)择优取向因子达到 69%, 较传统 SPS 烧结的 BST/EP 薄膜(C-BST/EP 薄膜)提高了 72.5%, 从而显著提高了其电输运性能。在 300 K 时, MB-BST/EP 薄膜的最大功率因子达到 $2.47 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。无衬底的 MB-BST/EP 薄膜和有绝缘衬底的 MB-BST/EP 薄膜的无量纲优值 zT 分别约为 $0.91@350 \text{ K}$ 和 $1.38@340 \text{ K}$ 。用 MB-BST/EP 薄膜制作的单臂器件冷端的最大制冷温差达到 1.7 K, 较用 C-BST/EP 薄膜制作的器件冷端的最大制冷温差提高了 2.4 倍。尤其是 MB-BST/EP 薄膜的微观结构和电输运性能在直径为 25 mm 的大尺寸区域内几乎相同。我们的工作表明, MB-SPS 是一种烧结具有绝缘衬底的高性能大尺寸热电薄膜的有效方法。

A02-110

高性能单轴取向 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 多晶热电薄膜及其柔性发电器件

熊阳, 施翊璇*, 刘睿恒

中国科学院深圳先进技术研究院

基于 Bi_2Te_3 的柔性薄膜热电发电机 (f-TEGs) 是可穿戴电子设备和物联网 (IoT) 微传感器领域极具前景的自供电解决方案。然而, 其性能常受限于较低的功率因子 (PF), 亟需优化提升。本研究通过结合液态 Te 辅助成核与二次退火工艺, 在柔性聚酰亚胺基底上成功制备了具有近单轴 (001) 取向的 n 型 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 多晶薄膜。二次低温退火工艺显著降低了材料反位缺陷, 同时优化了载流子浓度和迁移率, 最终使 n 型 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 薄膜在 320 K 时, PF 达到 $35.1 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$; 并在 360 K 时热电优值达到 1.14。为验证实际应用, 采用 n 型 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 与 p 型 $\text{Bi}_{0.4}\text{Sb}_{1.6}\text{Te}_3$ 薄膜构建了 10 对平面放射状 f-TEG 器件, 其最大输出功率达 $16.52 \mu\text{W}$, 峰值功率密度为 848.01 W m^{-2} 。该制备方法为提升柔性器件热电性能提供了有效策略, 不仅为环境能量收集开辟了新途径, 更拓展了其在可穿戴电子与 IoT 系统中的潜在应用。

A02-111

Surface-Engineering Cellulose Nanofibers via In-Situ PEDOT Polymerization for Superior Thermoelectric Properties

Jiahe Lin*

Zhejiang University, Hangzhou 310027, PR China; Institute of Zhejiang University-Quzhou, Quzhou 324000,

Cellulose nanofibrils (CNFs) are abundant and possess exceptional mechanical strength, but their intrinsic electrical insulation limits their application in wearable electronics. In this study, we present a versatile methodology to produce highly conductive and durable CNFs through electrostatic potential-enhanced in-situ polymerization of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT). Guided by molecular dynamics simulations, we controlled electrostatic interactions by tailoring the chain length of PEDOT, achieving homogeneous polymerization. Compared to conventional polymerization and blending methods, this approach prevented the self-aggregation of PEDOT crystallites, which would otherwise localize charge carriers and hinder electrical transport, as confirmed by scanning Kelvin probe microscope (SKPM). These fibers can leverage nanocellulose's capillary effects to rearrange PEDOT crystallites, thereby boosting electrical conductivity by 5 orders of magnitude over suboptimal samples. The conductive nanocellulose paper achieves superior electrical conductivity (91 S/cm) and durability by retaining at least 90% of its initial electrical properties over 2000 bending cycles, 5000 abrasion tests, prolonged wet-heat aging, freezing test, and UV aging test. The CNF-based thermoelectric device generator (TEG) also demonstrates a stable TE performance with power factor exceeding $3.8 \mu\text{W}/\text{mK}^2$ and a promising device output of 46.6 nW. These findings advance the conventional notion that charge-transporting nanocellulose can only be obtained by carbonization, graphitization, or physical blending with conductive components, which further boosts its potential for wearable applications.

A02-112

可穿戴纤维基热电器件的结构设计及应用

李沐芳, 王栋*

武汉纺织大学

柔性可穿戴电子设备的快速发展急需能够持续、稳定供能的柔性电源系统。热电发电机可以利用人体与外界环境间存在的温差来进行发电,是实现持续、稳定可穿戴供能的有效途径。其中,纤维基热电材料具有柔软、轻便、穿戴舒适、结构多样、可高密度集成等优点,受到越来越多的关注。为了提高热电性能及机械性能,分别利用电子热电材料及离子热电材料设计制备了可穿戴纤维基热电器件。通过掺杂改性、改进纤维成形工艺、设计纤维-纱线-织物结构等进一步提高了热电纤维的电导率、塞贝克系数、力学强度及柔韧性。在此基础上,将纤维基热电材料作为自供能系统与压力、温度、化学传感材料相结合,构筑了多种自供能传感器件,为新一代可穿戴设备的开发提供了新途径。

A02-113

高温热电耦合协同增强蒸发驱动发电

周鑫, 李昌浩, 林建峰, 杨广, 张子佩, 吴章锋, 路密, 林建平*

厦门理工学院

自然蒸发过程蕴含巨大的未开发能量潜力。然而,现有的蒸发驱动发电技术面临着输出功率低的挑战。为克服这一局限,本文通过将蒸发驱动发电与热电效应协同来增强发电。研究在受控热条件(25 ℃和100 ℃)下,系统比较了两种不同实验装置的发电功率密度:纯蒸发发电(CC|Zn)以及利用p型或n型 Bi_2Te_3 的蒸发-热电耦合发电(CC|Zn|p- Bi_2Te_3 和CC|Zn|n- Bi_2Te_3)。实验结果表明,协同耦合效应具有温度依赖性。在100 ℃时,CC|Zn|p- Bi_2Te_3 装置的功率密度达到 $11.37\text{W}/\text{m}^2$,相比CC|Zn装置($8.65\text{W}/\text{m}^2$)提升了31.45%。这一提升归因于水溶液中离子电导率增强带来的电流放大效应。与此相反,CC|Zn|n- Bi_2Te_3 装置的功率密度则降低了29.83%。从机理上看,这种性能下降与热电电势和蒸发电势方向相反有关。研究还发现热容效应维持了稳定的电势输出,提升了系统可靠性。这些发现阐明了蒸发-热电协同效应的基本机制,为高温/高湿环境下的能量收集提供了新的见解。

A02-114

热电材料新概念生物学应用：热电仿生细胞构建及体温节律驱动的治疗策略

孙强*, 张雨欣

四川大学

热电材料凭借其温度响应的发电能力, 在生物治疗、生物传感等生命科学领域展现出广泛的应用前景。由于生命活动与电子传递行为密切相关, 热电材料等自供电材料有望成为调控生命活动的桥梁, 为生命科学领域带来革命性变革。

本工作首次构建了具有热电效应的仿生细胞 (Thermoelectric Biomimic Cells)。该仿生细胞结构通过巨噬细胞细胞膜、水凝胶骨架及 Ag_2Se 基热电异质结纳米材料的自组装搭建而成, 能够在动物体内动态靶向捕捉微生物。基于热电效应引发的电子转移, 该仿生细胞可介导类芬顿 (Fenton) 反应, 干扰细菌的正常活动。同时, 通过“热电催化”效应, 在液体环境中产生大量活性氧自由基 (ROS), 协同抑制细菌增殖。本工作以肺部感染为应用实例, 基于感染条件下生物节律驱动的温度波动驱动热电效应, 实现对微生物的高效清除。在此基础上, 本工作系统研究了热电材料的抗菌生物学机制, 为基于热电材料的抗菌疗法应用拓展提供了新的思路。

A02-115

用于人体热管理的柔性热电器件

吴波*

香港城市大学

皮肤是人体面向外界环境的多功能窗口, 它不仅是人体抵御有害物质的保护屏障, 也是感知和与周围环境互动的生物传感器。尽管皮肤非常重要, 但其自我调节能力有限, 尤其是体温调节能力, 在高温和消防安全等不断变化和苛刻的场景中可能会出现问题。个人热管理器件集环境感知、温度调节和能量捕获等功能, 可以有效帮助人体应对极端的外部环境。在所有热管理解决方案的替代方案中, 可穿戴热电器件因其可靠的温度感知和双向热电转换能力, 已经被认为具备优异的人体热管理能力。在我们的工作中, 系统地研究了基于纤维、薄膜等形态材料构筑柔性热电器件的基本策略, 并探究其在人体温度感知、热能捕获以及通电制冷中的应用。此外, 我们进一步将柔性热电器件与其他能源器件 (光伏、电致变色) 结合, 探索热电材料及其器件更广泛的应用前景。

A02-116

Enhancing the electrical transport properties of two-dimensional semiconductors through interlayer interactions

Qinghang Tang¹, Huijun Liu^{*2}, Jiong Yang³

1. Guizhou Normal University

2. Wuhan University

3. Shanghai University

Thermoelectric materials attract great attention due to promising applications in refrigeration and waste heat recovery. Strategies based on band engineering have been proposed to identify new thermoelectric materials with high electrical transport performance. These approaches typically seek enhancement of the Seebeck coefficient via sharp changes in the electronic density of states near the Fermi level. Here, we emphasize a long-overlooked approach for enhancing the Seebeck coefficient through manipulation of the electronic group velocity. This can be realized through the interlayer interactions in two-dimensional materials. We construct numerous bilayers in a high-throughput manner. It is found that interlayer interactions universally introduce significant changes in the energy bands. Among the 129 isotropic systems, 34 of the bilayers exhibit higher power factors compared with the

corresponding monolayers. Importantly, the improvement of the power factors and Seebeck coefficients in the As_2I_6 , Sb_2I_6 , and MoSe_2 bilayers is due to increased electronic group velocity, contrary to the paradigm where sharper electronic densities of states favor thermoelectric performance. Our work not only illustrates the use of interlayer interactions for tuning the band structures of thermoelectric materials, but also highlights the vital importance of the group velocity for simultaneously enhancing the Seebeck coefficient and electrical conductivity.

A02-117

一体化 Ag_2Se 基柔性太阳能热电发电器

侯帅航¹, 王淑芳^{*1}, 张倩², 曹峰²

1. 河北大学

2. 哈尔滨工业大学（深圳）

柔性太阳能热电发电器（STEG）在光电转换和可穿戴电子设备供电等应用中展现出广阔前景。与传统的分立式器件相比，一体化结构不仅能有效降低界面热阻，还能简化器件的制备工艺。然而，一体化 STEG 对材料的光热和热电性能提出了更高的要求。本研究通过对窄带隙柔性 Ag_2Se 薄膜进行结构设计开发了高性能一体化柔性 STEG。利用飞秒瞬态吸收光谱探究了 Ag_2Se 薄膜的光热响应机制。通过引入金属红外反射层与表面减反层，将薄膜的光热转换效率提升至 87.6%。所制备的 6 腿柔性 STEG 在标准太阳光照射下归一化输出功率密度高达 $4 \mu\text{W cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$ ，并且在户外阳光的长时间照射下，输出功率密度稳定在 3.3 mW cm^{-2} 。本研究为高效 STEG 的设计与制备提供了新思路，并为窄带隙热电薄膜在光热能量转换中的应用探索提供了有益参考。

A02-118

螺旋对称诱导低频声子实现 CsCu_2I_3 超低热导率

白清羽¹, 陈志炜¹, 陈粤², 骆军¹, 裴艳中^{*1}

1. 同济大学

2. 香港大学

热绝缘材料的发展对于推进热管理和能量转换技术至关重要。许多聚焦于调控声子输运的策略如原子响铃振动、缠绕振动和铁电不稳定性等，已被广泛用于构建低热导体系。其核心机制在于引入低位局域振动模式以显著增加声子散射通道。本工作中，我们提出了一种利用螺旋对称性诱导低位局域振动模式的新策略。以 CsCu_2I_3 为例，占据 8g Wyckoff 位点的碘原子在螺旋、反演和镜面对称操作下发生规律性位移。这些由特定对称操作构成的碘原子簇形成了与低频光学支相关联的亚晶格尺度振动模式，从而增强了声子散射过程。最终，多晶 CsCu_2I_3 实现了 $0.22 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 的超低室温热导率。这一发现为构建低位振动模式提供了一条新途径。

A02-119

Mg_3Bi_2 -based miniaturized thermoelectric coolers with high cooling power density for electronic thermal management

Chenhao Lin, Qian Zhang, Jun Mao*

Harbin Institute of Technology (Shenzhen)

Miniaturized thermoelectric coolers, known for their high cooling power density and rapid thermal response, hold great promise for localized thermal management applications. While traditional thermoelectric coolers have primarily relied on Bi_2Te_3 alloys, the recent development of n-type Mg_3Bi_2 -based materials presents a compelling alternative, offering enhanced cost-effectiveness and environmental sustainability. In this study, we have designed and fabricated a Mg_3Bi_2 -based miniscale thermoelectric cooler. At a hot-side temperature of 300 K, the cooler

achieves a maximum cooling temperature difference of ~ 59.0 K, a cooling power density of ~ 5.7 W cm $^{-2}$, and a cooling speed of 65 K s $^{-1}$, which significantly surpasses other state-of-the-art Mg $_3$ Bi $_2$ -based devices. In addition, the miniaturized Mg $_3$ Bi $_2$ -based cooler maintains its cooling performance after cyclic electrical current between 1 A mm $^{-2}$ and 3 A mm $^{-2}$ for approximately 3,000 cycles. Notably, this miniscale cooler has been applied to provide localized cooling for the central processing unit in a microcontroller. Our findings highlight the potential of Mg $_3$ Bi $_2$ -based coolers and advance their miniaturization, offering new possibilities for thermal management in electronic devices.

A02-120

First-principles investigation of the thermoelectric properties of layered γ - and γ' -GaSe

Fuyun Lv*

Wuhan University

Layered compounds have attracted considerable attention owing to their diverse chemical bonding environments and unique electronic structures. In this study, we give an in-depth study on the thermoelectric properties of γ - and γ' -GaSe by using first-principles calculations combined with Boltzmann transport theory. Both phases are confirmed to be dynamically and thermally stable, as evidenced by their positive phonon frequencies and minimal structural fluctuations at finite temperatures. Interestingly, the valence top of each system is composed of heavy and light bands, which is very beneficial for good thermoelectric performance. Compared with the γ -phase, the γ' -GaSe possesses obviously lower lattice thermal conductivity. Combined with its favorable electronic transport characteristics, a maximum in-plane ZT value of 2.2 at 600 K can be achieved for the p-type γ' -GaSe, revealing its promising potential for thermoelectric applications.

A02-121

基于深度学习势模型的 Mg、Te、Pb、Bi 热电材料晶体结构预测

王新选, 雷振帅, 冯晓斌, 段波, 李国栋, 翟鹏程*

武汉理工大学

具备优异热电 (TE) 和力学性能的 TE 材料对热能回收利用具有重要意义, 然而 TE 性能优异的无机热电材料却因共价或离子结合而具有显著脆性, 这使得这些材料的工程应用面临挑战。为获得本征热电和力学性能均优异的 TE 材料, 本工作选择 Mg、Te、Pb 和 Bi 四种单质及其现有化合物晶体结构, 采用深度学习拟合了一套四元通用势函数模型, 并将其应用于二元至四元的热电材料晶体结构预测。在预测的所有结果中, 筛选出了热力学、力学与动力学均稳定的三种 Mg-Te-Pb 三元热电材料, 其中, Mg $_2$ PbTe $_3$ 具有两种稳定结构, 其空间群分别为 $P-3m1$ 和 $P-6m2$, Mg $_2$ Pb $_2$ Te $_4$ 仅具有一种晶体结构, 空间群为 $P-6m2$ 。在施加剪切变形时三种材料均可在应变幅度达 60% 以上而不发生显著破坏, 且 300 K 时的晶格热导率和赛贝克系数均在 0.8 Wm $^{-1}$ K $^{-1}$ 以下和 300 μ V/K 左右, 是一类潜在的 TE 性能和力学性能兼顾的优异 TE 材料。

A02-122

Direct proof for electron-phonon interaction-driven phonon transport attenuation above ambient temperatureWentian Li¹, Shen Han¹, Shengnan Dai², Chenguang Fu¹, Jiong Yang², Wenqing Zhang³, Tiejun Zhu^{*1}

1. Zhejiang University

2. Shanghai University

3. Southern University of Science and Technology

While the electron-phonon interactions (EPIs) have been predicted to strongly suppress phonon transport and

lattice thermal conductivity (κ_L) above room temperature, direct experimental validation remains challenging because the observed reduction of κ_L in the doped materials is commonly a result of concurrent enhancement of EPIs and point-defect-induced phonon scattering (PDPS). Here, we circumvent this ambiguity through strategically designed aliovalent-alloying semiconductors, where the compositional deviations from $x = 0$ amplify EPIs while weakening PDPS. Experimentally, we observed a pronounced EPI-driven κ_L reduction of $\sim 50\%$ at room temperature and $\sim 40\%$ even at 1000 K as carrier concentration approaches $1 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$. The carrier-induced phonon softening and the enhanced electron-phonon scattering rates collectively lead to this remarkable phonon transport attenuation. Our findings establish a quantitative framework for disentangling EPI effects on phonon transport in heavily doped semiconductors or metals, and provide insights into phonon engineering strategies for advanced thermal management materials design.

A02-123

通过 Mn 掺杂调控安德森局域化以提高 AgSbSe₂ 化合物的热电性能

仲亚琼, 苏贤礼, 唐新峰

武汉理工大学材料复合新技术全国重点实验室

迄今为止, 安德森局域化对材料热电性能的影响还很模糊。本研究发现, 在 AgSbSe₂ 中掺杂 Mn 能够显著减弱安德森局域化效应。AgSb_{1-x}Mn_xSe₂ 化合物的温度-电子传输特性揭示了安德森局域化-弱局域化转变过程的三个不同阶段: 变程跳跃传导、近邻跳跃传导和带传导。Mn 掺杂降低了 AgSbSe₂ 化合物的电子局域化势垒, 并将电子局域化效应推移至更低的温区。这种安德森局域化效应的弱化显著优化了材料的电输运性能。具体而言, 室温电导率从本征 AgSbSe₂ 的 $1.01 \times 10^3 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$ 提升至 AgSb_{0.96}Mn_{0.04}Se₂ 的 $1.28 \times 10^4 \Omega^{-1} \text{ m}^{-1}$ 。相应地, 功率因子从 $0.11 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 提升至 $0.52 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$, 比本征提高了 5 倍。结合 AgSbSe₂ 固有的低晶格热导率, AgSb_{0.96}Mn_{0.04}Se₂ 样品在 690 K 时达到最高 zT 值 1.1, 较本征 AgSbSe₂ 实现了 3 倍以上的提升。此项工作表明, 有效调控安德森局域化是提升材料热电性能的重要途径。

A02-124

In 掺杂诱导共振能级和能带简并增强 Ag₂Te 半导体的热电性能

姜尔卓, 夏卓明, 李国栋, 翟鹏程, 段波*

武汉理工大学

能带工程是提升材料热电性能的一种有效策略。在这项工作中, 我们通过调控能带结构实现了 Ag_{2-x}In_xTe ($x = 0-0.007$) 热电材料中载流子浓度和 Seebeck 系数的协同优化。In 掺杂增加了载流子浓度, 并在能带中引入了共振能级和能带简并, 显著提高了 Ag_{2-x}In_xTe 样品的功率因子。Ag_{1.995}In_{0.005}Te 样品在 300 K 获得了 $1.88 \times 10^{-3} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 的功率因子, 与未掺杂的 Ag₂Te 样品相比, 提高了 3 倍。此外, In 掺杂引入了点缺陷并导致化学键软化, 使 Ag_{1.995}In_{0.005}Te 样品的室温晶格热导率降至 $0.2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, 与未掺杂的 Ag₂Te 样品相比, 降低了约 70%。最终, Ag_{1.996}In_{0.004}Te 样品在 400 K 时 ZT 值达到了 1.0, 300 至 400K 的平均 ZT 值达到了 0.67。这些发现为 Ag₂Te 基近室温热电材料的商业应用提供了一条途径。

A02-125

强非谐性和高能带简并度诱发 Fe₂NbAl 的优异热电性能叶先峰¹, 余健², 赵文俞^{*1}, 张清杰¹

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_2MAl ($\text{M} = \text{V}, \text{Nb}, \text{Ta}$) 的热电输运性能。发现 Fe_2NbAl 具有最低的晶格热导率和最高的电学输运性能，p 型 Fe_2NbAl 化合物在 900 K 时 zT 值达到 1.7。在 Fe_2NbAl 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_2NbAl 的晶格热导率，900 K 时仅 $4.85 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 。 Fe_2NbAl 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_2NbAl 简并度 N_v 高达 6，从而获得高的电输运性能。900 K 时 p 型 Fe_2NbAl 功率因子可达 $255.6 \mu\text{W} \cdot \text{K}^{-2} \text{ cm}^{-1}$ 。该研究表明 Fe_2NbAl 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。

A02-126

s 轨道参与成键的 n 型 AgBiSe_2 超价键化合物研究

黄彬荣，胡利鹏*

深圳大学

化学键剪裁工程为多领域功能材料的设计提供了一种创新途径。超价键展现出六配位的八面体结构，其以 p-p 轨道形成的半填充 σ 键为特征，赋予硫属化合物优异的热电性能。然而，相邻原子间仅通过单个 p 电子（即半个电子对）成键的要求（如 PbTe 和 Bi_2Te_3 ）限制了潜在超价键化合物的多样性。本工作表明，超价键的本质是半填充的单电子 σ 键，理论上该键合还可以包含 s 轨道的贡献。这在 AgBiSe_2 中得到了充分论证，其展现出三种相结构：六方、菱方和立方相。理论计算和断键特征表明，三种结构的 AgBiSe_2 均以 s 轨道参与成键的超价键结合。基于对化学键本质的理解，我们通过 PbTe 合金化调控化学键，并进一步以 Br 掺杂优化载流子浓度。最终，n 型立方相 AgBiSe_2 实现了创纪录的 $zT \sim 1.1$ 。根据 AgBiSe_2 研究所获得的超价键理论突破与化学键剪裁的方法有望为其他 Ag-V-VI_2 化合物提供新的优化路径。

A02-127

高性能 p 型碲化铋基热电材料的微观结构设计

梁昊，葛振华*

昆明理工大学

碲化铋基热电材料作为目前唯一商用热电材料，其热电性能仍存在很大的优化空间。本工作系统的研究了 Ag, P 掺杂 p 型碲化铋基体后，在 SPS 之前使用 S 粉对掺杂样品进行复合后的热电性能。XRD, SEM 及热电性能测试表明，Ag, P 引入基体后，由于受主掺杂，使得基体的空穴载流子浓度显著提高，制备了一系列电导率可控的样品，随后选取合适的载流子浓度样品对其在 SPS 之前进行 S 粉复合，结合 XRD, TEM 结果表明，S 粉复合后，在烧结过程中起到助烧剂及造孔剂作用，影响材料的热导率，而由于助烧剂的引入使得材料的晶粒尺寸长大，同时弥补了电导率的降低，实现了电声解耦，最终 ZT 峰值达到 $1.42@373\text{K}$ 在 $\text{Ag}_{0.003}\text{Bi}_{0.417}\text{Sb}_{1.58}\text{Te}_{2.997} + 0.03 \text{ wt\% S}$ 样品取得，同时我们采用同样的方法在 n 型碲化铋体系内，采用 Cu 作为施主掺杂剂，制备电导率可控及峰值 ZT 对应温度可控样品，随后 SPS 之前引入 S 粉，同样实现了 ZT 值及平均 ZT 值的协同提升。通过采用同种方法制备 n 型粒子组成的 4 腿热电器件转换效率达到 6% 在 250K 温差下。该研究表明，首先通过掺杂过优化基体材料的载流子浓度，使载流子浓度达到一个过优化区间，随后通过适当的造孔剂及助烧剂优化材料的热性能，可以很好的实现电声解耦，针对于热电材料来说是一种普适的策略，可以用来提高热电器件的性能，同种方法同时提升 n, p 型材料有利于大规模工业生产。

A02-128

多化学键协同全尺度结构增强 PbS 基热电材料的能量转换与机械性能宋鲁平^{1,2}，马粒¹，任广坤*¹，卢旭²

1. 中国工程物理研究院材料研究所

2. 重庆大学

作为一种有潜力的热电材料，PbS 仍面临着热电性能较差、力学性能不足等挑战，限制了其后续制备及相关应用。本工作通过 Ag/Cu 共掺设计多化学键，结合全尺度结构来解决上述问题。具体而言，Ag 掺杂用于优化载流子浓度并对 Pb-S 的键性进行调控。根据第一性原理计算，Cu 掺杂后将进入四面体间隙位，进一步通过增大简并度提升态密度有效质量，电输运性能在此基础上得到加强。在 $\text{Pb}_{0.985}\text{Ag}_{0.01}\text{Cu}_{0.005}\text{S}$ 材料中，873 K 条件下的功率因子达到 $11.5 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ 。此外，这两种点缺陷与纳米 Cu_2S 和介观尺寸晶粒相结合，成功形成了全尺度结构，通过增强声子散射显著降低了晶格热导率。最终，在 873K 时获得 1.1 的最佳 zT ，其平均 zT 在 673K 至 873K 范围内达到约 0.9。与初始样品相比，由于局域电子重排和对应化学键强化，Ag/Cu 共掺 PbS 的力学性能也得到明显强化，其维氏硬度提高 80%，杨氏模量和剪切模量则提高 300%。在此基础上我们组装了相应器件，其在温差为 570K 时最大输出功率和功率密度分别达到 1.2 W 和 0.28 W cm^{-2} ，综合性能与已报道器件相比具备一定优势。通过本项工作证明，多种化学键协同全尺度结构可以一定程度上缓解 PbS 基热电材料电声之间强耦合关系，为开发高性能热电材料及相应器件提供可行途径。

A02-129

通过模块化纳米结构设计获得高效率 GeTe 热电材料

李亚楠，李松，唐国栋*

南京理工大学材料科学与工程学院

本研究通过轨道相互作用调控实现了 GeTe 电子能带结构的精细优化。Bi-Cd-I 三元共掺杂通过削弱阳离子 s 轨道与阴离子 p 轨道的相互作用，降低价带顶位置并减小能量偏移，促使立方相 GeTe 产生强能带收敛效应。塞贝克系数的显著提升诱导出宽温域（623-823K）内高且近乎稳定的功率因子。基体内形成的模块化纳米结构主导了晶格热导率的降低，实现超低晶格热导率。最终在 GeTe 基热电材料中获得峰值 $zT=2.5$ ，并在 623-823K 温区形成 $zT>2.4$ 的宽平台区，创纪录地达成 1.82 的平均 zT 值。该卓越热电性能使单腿器件实现约 12% 的发电效率，这种通过模块化纳米结构与轨道相互作用调控协同实现的突破性进展，为热电材料发展开辟了新路径。

A02-130

磁致漫散射效应触发优异的热电性能

李孟扬，宋薇，孙丛立，聂晓蕾，魏平，赵文俞*，张清杰

武汉理工大学

$\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 基材料因其与商用室温热电材料 Bi_2Te_3 基合金相当的热电性能而备受关注。然而，其本征载流子迁移率较低，严重限制了材料的室温热电性能。本研究通过引入 Co 二次杂质，精细调控磁致漫散射效应，我们发现载流子迁移率显著提升，同时晶格热导率被有效抑制。基于平方场（ H^2 ）依赖性的负磁阻现象表明，磁致漫散射效应对载流子迁移率提升的贡献度达 46%。拉曼光谱半峰全宽的增加进一步证实了晶格热导率的降低。结果表明，磁性 $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 基合金在 300 K 时的最大热电优值 zT 为 0.94，在 300-400 K 温度区间的平均 zT 为 1.17。这项工作揭示了磁致漫散射效应在提升室温热电性能方面的重要作用。

A02-131

通过层状晶体堆叠热变形设计高性能织构化层状热电材料的通用方法

朱钰可，刘紫航、隋解和*

哈尔滨工业大学

热电转换技术是通过固体材料内部的声子和电子相互作用实现热能和电能直接转化的一种前沿科学技术，在深空探测特种电源、5G 芯片制冷和工业余热发电等方面具有广阔的应用前景。近年来，研究人员发现材料迁移率的提升可以实现电导率和温差电动势的解耦，提升功率因子。因此，层状结构材料利用

其沿层内方向的高迁移率可获得高热电性能。然而，单晶层状材料的制备时间长、成分控制难、力学性能差；而多晶材料又面临点缺陷波动复杂和强织构难以构建的问题，限制了层状热电材料的实际应用。

基于层状材料中范德华层间易解理的特性，本工作提出了层状晶体堆叠热变形新方法并在多个材料体系中构筑了强织构、提升了热电性能。其中在 N 型碲化铋材料中实现了 (001) 方向高达 0.79 的取向因子，获得了 $45 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ (300 K) 的超高功率因子和 1.2 (423 K) 的高热电优值。研制的发电模块在 250 K 的温差下转化效率达到 6.4%，制冷模块在热端 350 K 条件下实现 87 K 的制冷温差。为层状材料热电性能优化提供了新思路。

A02-132

方钴矿热电材料的强度和韧性优化

雷振帅，张子文，王新选，冯骁斌，段波，李国栋*，翟鹏程

武汉理工大学

方钴矿 (CoSb_3) 基热电材料因热点性能优异而具有广阔的发展前景，但由于典型的脆性力学特征使得其在工程应用领域面临极大挑战。本工作结合 CoSb_3 的晶界密集 Sb 悬空形貌特征与硬质晶粒特征，提出了一种晶界掺杂与晶粒内嵌非晶纳米颗粒的协同增强增韧策略。通过深度学习分子动力学模拟，发现晶界掺杂 Co 原子可使变形过程中 CoSb_3 的晶界悬空 Sb 原子减少而 Co-Sb 共价键增多，从而提高晶界强度；在晶内添加 2vol% 晶粒体积的 Sb-O 非晶纳米颗粒则能够软化晶粒而提供抗变形能力。研究结果表明，该策略提高了 CoSb_3 多晶 30.0 % 的抗剪切变形能力，同时还增加了 10.7 % 的极限剪切强度。此外，实施协同优化策略后的 CoSb_3 更易发生穿晶断裂情况而分散应力，因此在到达极限强度后也不易产生裂纹。

A02-133

通过重复淬火工艺加速合成高性能填充方钴矿热电材料

冯凡^{1,3}，饶旭日^{1,3}，昂然*^{1,2,3}

1. 四川大学辐射物理及技术教育部重点实验室&原子核科学技术研究所，成都，610064

2. 四川大学新能源与低碳技术研究院，成都，610065

3. 四川大学物理学院，中国，成都 610064

热电装置能够将废热直接转化为电能，是应对全球能源危机的关键技术之一。方钴矿因其优异的热稳定性和适用于器件集成的特性，成为中温区热电材料的重要候选者。然而，其工业化应用受到耗时的制备工艺限制。为解决这一问题，本研究开发了一种高效的熔融-淬火-退火-淬火工艺，将传统需要 5-8 天的退火时间显著缩短至 1 天，同时确保了材料的高性能。研究发现，退火后的快速淬火能有效加速 CoSb_3 相的形成，并在材料内部引入大量条状和点状缺陷。这种独特的微观结构有助于限制晶粒生长，同时结合 Yb 填充引入的偏心效应，诱发晶体结构的轻微扭曲，从而实现对宽频声子的强效散射，显著降低了晶格热导率。此外，优化的工艺设计还保证了材料的均匀性和高电学性能。最终，在 823 K 时，Yb 填充的 CoSb_3 样品实现了峰值 zT 值约 1.25，展示出较好的热电性能。本研究为高性能方钴矿热电材料的快速制备提供了一种创新性的高效方法，为其在热电器件中的规模化应用奠定基础。

A02-134

AgSbTe₂ 复合对 Bi_{0.4}Sb_{1.6}Te₃ 材料热电性能的影响

屈相，陈志权*

武汉大学物理科学与技术学院

Bi_2Te_3 基热电材料作为被广泛商业化应用的传统热电材料，在近室温区具有优异的热电性能。但由于其较窄的禁带宽度，温度升高时双极效应显著，严重恶化其热电性能。本文通过高能球磨法结合放电等离子体烧结法，成功制备了 $\text{Bi}_{0.4}\text{Sb}_{1.6}\text{Te}_{3-x}\text{wt}\%\text{AgSbTe}_2$ ($x = 0, 0.1, 0.15, 0.2, 0.25$) 复合材料。结果表明，球磨

可以有效降低样品的晶格热导率。而随着 AgSbTe_2 含量的增加,样品的空穴载流子浓度逐渐增加,电导率提高,功率因子得到优化。此外,由于空穴载流子浓度的提高,双极效应被显著抑制。同时,由于 Ag 取代了亚晶格中的 Bi/Sb,晶格热导率进一步降低。最终,当 AgSbTe_2 含量为 0.15wt% 时,其热电优值 ZT 在 393K 时达到最大为 1.35,相较于商用样品提高了 20.5%。此外,其在 303-483K 之间的平均热电优值 ZT 高达 1.25,相较于商用样品提高了 27.6%。

A02-135

Superior electron transport in the single-crystalline TiCoSb-based half-Heuslers

Sheng Ye, Jun Mao*

Harbin Institute of Technology, SHENZHEN

Half-Heusler compounds are among the most promising candidates for medium- to high-temperature thermoelectric applications. However, their polycrystalline forms often suffer from defect-induced electron scattering, which limits electronic performance. In this study, we report the successful synthesis of high-quality single-crystalline TiCoSb-based materials by employing Sb flux method, achieving crystal dimensions over 1 cm with minimal defects. Through co-doping with Nb and Ta, we effectively optimized carrier concentration, significantly enhancing electrical transport properties. Additionally, Hf alloying introduced strong phonon anharmonicity, resulting in a pronounced reduction in lattice thermal conductivity by over 80%. As a result, the optimized $\text{Ti}_{0.76}\text{Nb}_{0.03}\text{Ta}_{0.05}\text{Hf}_{0.19}\text{CoSb}$ single crystal exhibited a peak power factor of $\sim 50 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ and a peak zT value exceeding 1.0 at 973 K. Notably, a single thermoelectric leg based on this material achieved a conversion efficiency of $\sim 10.2\%$ at a 700 K temperature difference. These findings underscore the potential of single-crystalline TiCoSb-based half-Heuslers for efficient thermoelectric energy conversion and provide insights into defect engineering and phonon transport in high-performance thermoelectric systems.

A02-136

Ga/Se 共掺调节 $\text{Pb}_{0.98}\text{Ga}_{0.02}\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$ ($x=0.02-0.1$) 样品基材料深浅杂质能级与热电性能研究

余凌逍, 史艺璇, 苏贤礼, 唐新峰

武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

Ga 在 PbTe 中可以产生深、浅两种杂质能级,在宽温域范围内优化载流子浓度,但 Ga 在不同 PbX ($X=\text{Te}$ 、 Se 、 S) 体系中价态情况不同,这种良好的动态掺杂效果并不适用于所有 IV-VI 热电化合物体系。为了更好地了解基体材料对 Ga 化学环境的影响,本研究采用熔融法制备了一系列 Ga/Se 共掺的 $\text{Pb}_{0.98}\text{Ga}_{0.02}\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$ ($x=0.02-0.1$) 样品。研究了 Se 固溶对 Ga 在 PbTe 体系中掺杂性能的影响机制,并比较了二者电、热输运性能的差异。在 $\text{Pb}_{0.98}\text{Ga}_{0.02}\text{Te}_{1-x}\text{Se}_x$ ($x=0.02-0.1$) 固溶 Se 后,Se 将 Ga^+ 全部氧化成 Ga^{3+} ,杂质在低温时全部电离,载流子浓度在整个测试温度区间内变化不大,但一直保持着较高水平 $\sim 2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$,使样品在 482 K 时功率因子提高到 $3.04 \text{mW m}^{-1} \text{K}^{-2}$ 。同时 Se 固溶会显著增强合金化能在 $\text{Pb}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Te}$ 的基础上进一步增强点缺陷声子散射,降低晶格热导率,最终使样品在 721 K 获得高 ZT 值 1.57 和 300-843 K 温度范围内的高平均 ZT 值 1.13。

A02-137

The Role of Silver Nanowires in Modulating Electron and Phonon Transport in Ag_2Se -based Thermoelectric MaterialsDejwikom Theprattanakorn^{1,2}, Thanayut Kaewmaraya¹, Supree Pinitsoontorn^{*1}, Xun Shi²

1. Shanghai Institute of Ceramics, CAS / Khon Kaen University

2. Shanghai Institute of Ceramics, CAS

This study investigates the role of silver nanowires (AgNWs) in modulating the thermoelectric properties of bulk Ag_2Se nanocomposites. Ag_2Se samples with varying AgNW contents (0, 0.25, 0.5, and 1 wt.%) were synthesized using liquid-phase sintering, and their structural, morphological, and thermoelectric properties were thoroughly analyzed. X-ray diffraction confirmed the orthorhombic $\beta\text{-Ag}_2\text{Se}$ phase as the primary structure, with a cubic silver (Ag) phase emerging at higher AgNW concentrations. SEM and TEM analyses showed that AgNWs were uniformly dispersed at lower concentrations, reducing porosity and enhancing relative density, while excessive AgNW content led to agglomeration, affecting both charge and phonon transport. Electrical conductivity increased significantly with AgNW addition due to enhanced charge injection and reduced activation energy. Optimal AgNW incorporation (0.25 wt.%) not only enhanced the power factor but also induced microstructural and interface defects that effectively promoted phonon scattering, leading to a 37% reduction in lattice thermal conductivity and a peak figure-of-merit (zT) of 0.79 at 320 K. These findings highlight the critical role of controlled AgNW addition in optimizing thermoelectric performance by balancing electronic and thermal transport properties.

A02-138

基于相图指导的缺陷化学设计 EuZn_2Sb_2 热电材料

马宝鹏, 张倩*

哈尔滨工业大学(深圳)

相图在指导高性能热电材料的发现与优化过程中已被证明是一种不可或缺的关键工具。本工作系统绘制了 Eu-Zn-Sb 三元体系在 773 K 下的等温截面, 进而确定了 EuZn_2Sb_2 在该关键温度下的多种化学状态。通过相边界映射方法, 系统揭示了不同化学态下的缺陷化学及其对热电性能的影响机制。最终, 化学态 III ($\text{EuZn}_2\text{Sb}_2\text{-ZnSb}$ 平衡两相区) 在 723 K 下实现了可重复的峰值 $zT \sim 0.8$, 性能提升主要归因于 Eu 空位浓度的有效调控。在此基础上, 通过掺杂 Yb 和 Cd 进一步调控能带简并度, 同时引入强烈的质量场和应力场波动, 使材料在 773 K 下获得了峰值 $zT \sim 1.2$, 并在 323–773 K 范围平均 zT 值达到 0.68。进一步, 构建了 $\text{EuZnSb}_2/\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 两对热电器件, 在温差 $\Delta T = 473$ K 下实现了最高约 9% 的能量转换效率。本工作建立的“相图-缺陷化学-性能”关联模型, 为发展基于相平衡调控的热电材料设计方法提供了重要理论依据。

A02-139

纳米 $\text{SiC}/\text{Mg}_{3.2}\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ 复合材料热电与机械性能协同优化

俞快, 董行严, 隋解和*

哈尔滨工业大学材料结构精密焊接与连接国家重点实验室

针对低温废热回收应用对材料综合性能的需求, 本研究致力于开发兼具优异热电性能和良好机械性能的材料。目前广泛应用的 Bi_2Te_3 基材料机械性能较差, 限制了其在复杂工况下的应用和规模化制备。相比之下, n 型 $\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 展现出良好的综合潜力。本研究以 Te 掺杂的 $\text{Mg}_{3.2}\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}$ 为基体, 采用纳米 SiC 复合策略, 旨在实现热电与机械性能的协同优化。

通过机械合金化结合快速热压技术制备了不同 SiC 体积分数的 $\text{Mg}_{3.2}\text{Bi}_{1.5}\text{Sb}_{0.5}\text{-SiC}$ 复合材料。微观结构表征 (XRD, SEM, EPMA) 证实纳米 SiC 以物理分散的第二相形式存在于基体中。

研究发现, 添加 0.05 vol% SiC 能有效优化电传输性能。在近室温区电导率无明显下降, 塞贝克系数普遍提升, 导致功率因子显著增加, 在 330 K 时达到约 $31.7 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$, 较基体提升 11.6%。性能提升的机制归因于少量 SiC 第二相可能微调载流子浓度至更优值, 提升载流子迁移率; 同时, 纳米 SiC 夹杂物对低能载流子的选择性散射——能量过滤效应, 有效提高了塞贝克系数。

在热传输性能方面, 少量 SiC (<0.2 vol%) 的添加对晶格热导率 (κ_{lat}) 和电子热导率 (κ_e) 均未产生显著影响。结合理论模型分析, 这主要源于 $\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 体系晶格热导率对结构变化不敏感的特性。因此, 0.05 vol% SiC 复合样品在保持较低热导率的同时, 凭借功率因子的显著提升, 实现了热电优值 (ZT) 的整

体改善。

更重要的是，SiC 第二相显著增强了材料的机械性能。复合样品的弯曲强度 (σ_{bb}) 均提升超过 12%。0.05 vol% SiC 复合样品的硬度提升至 1.24 GPa (基体为 1.05 GPa)，弹性模量提升 2.9%。微观结构分析和有效介质理论表明，硬质 SiC 纳米颗粒在基体中的机械弥散强化是性能提升的主要原因。

本研究成功通过纳米 SiC 复合工程策略，在 Te 掺杂 $Mg_{3.2}Bi_{1.5}Sb_{0.5}$ 基体中实现了热电性能与机械性能的协同优化。0.05 vol% SiC 被确定为最佳复合比例，其热电优值 (ZT) 和机械强度均得到显著提升。这种复合策略有效克服了传统 Bi_2Te_3 材料机械性能的不足，为满足发电器件对材料综合性能的特殊需求提供了有前景的候选材料，并证明了该策略在优化 Mg_3Sb_2 基体系材料性能方面的有效性。

A02-140

晶格缺陷强化碲化铋层间范德华键合的影响机制

黄写格, 冯骁斌, 段波, 李国栋*

武汉理工大学

层状 Bi_2Te_3 作为经典热电材料，在 5G 通信、物联网及可穿戴柔性电子领域展现出重要应用潜力。然而，其本征弱 Te-Te 范德华 (van der Waals, vdW) 层间相互作用导致材料机械强度显著降低，这不仅制约了微加工工艺良率，更严重阻碍了其在柔性电子器件中的商业化进程。本研究旨在通过晶格缺陷工程策略，系统探究层状 Bi_2Te_3 剪切力学性能的强化机制。本研究阐明了晶格缺陷对层状 Bi_2Te_3 剪切力学性能的影响，并揭示了材料在应力场作用下的动态微观结构演变特征。研究发现策略性引入晶格缺陷可显著增强层间 vdW 相互作用，从而显著改善 Bi_2Te_3 的剪切力学性能。这种晶格缺陷工程为设计坚固高效的热电材料提供了理论基础。

A02-141

高 Te 掺杂工业区熔 p 型 BiSbTe 合金的热电性能与稳定性研究

张鸣奇*

武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

在 p 型 BiSbTe 合金的制备过程中，传统粉末冶金和工业区熔方法常通过引入过量 Te 以优化材料性能。然而，在实际工业生产条件下，过量 Te 是否有助于提升 p 型 BiSbTe 合金的热电性能及其对材料和器件热稳定性的影响尚不明确。本研究系统地分析了不同掺杂与固溶含量的 p 型区熔 BiSbTe 棒材的性能表现。结果表明，过量 3 wt% Te 可使峰值 ZT 由 0.94 提高至 1.11，且将峰值温度由 393 K 降低至 343 K。经 380 °C 退火后，过量 3 wt% Te 样品的 ZT 值下降至 0.98；而在 250 °C 下退火 1000 小时后，其 ZT 值下降约 8%，同时块体中仍存在 Te 的第二相。器件可靠性测试显示，经过化学处理的器件 (p: $Bi_{0.48}Sb_{1.52}Te_3 + 3 \text{ wt\% Te}$, n: $Bi_2Te_{2.79}Se_{0.21}$) ACR 阻值变化率接近 11%，显著高于未进行化学处理器件的 5.07%。透射电子显微镜 (TEM) 与电子探针显微分析 (EPMA) 进一步表明，Te 与 Ni 在阻挡层界面处反应生成大量 NiTe 晶粒，这些晶粒的生长引发了界面空洞与裂纹，进而导致界面接触电阻增加。

A02-142

Al 掺杂结合 SPS 热挤压工艺提高 n 型 $Bi_2(Te,Se)_3$ 合金的热电性能

高伟¹, 裴俊^{*1}, 单帜航¹, 齐兴源¹, 李和章², 张波萍¹

1. 北京科技大学

2. 清华大学

碲化铋基热电材料因优异的近室温热电性能在制冷与发电领域具有广泛的应用前景。相比于 p 型碲化铋，n 型碲化铋的性能偏低，制约了其进一步发展。热锻和热变形工艺是提高 n 型碲化铋 ZT 值的重要手段，但其工艺较为复杂。本文提出了一种新型细晶强织构工艺，结合了放电等离子体烧结 (SPS) 和热挤压工

艺的双重优势，即 SPS 热挤压工艺。在 SPS 热挤压过程中，实现了晶粒的细化并在平行于压力方向具有强的晶粒取向性，其择优取向方向为(hk0)，织构度为 0.21。SPS 热挤压工艺在不改变载流子浓度的同时有效提升了样品的载流子迁移率，室温下载流子迁移率从 $114 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 提升到 $165 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ；功率因子由 $18.33 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 提升至 $29.20 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。经过 SPS 热挤压工艺的 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.2}\text{Se}_{0.8}$ 样品沿平行于压力方向 473 K 时获得了 1.18 的 ZT 值。进一步通过 Al 掺杂进入 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.2}\text{Se}_{0.8}$ 层间位置和 Bi 位，显著增强声子散射， $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.2}\text{Se}_{0.8}+0.15\%\text{Al}$ 样品在 423 K 获得超低晶格热导率为 $0.28 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ，且电学性能无明显衰减。最终，该样品在 473 K 时获得最大 ZT 为 1.26，与原始样品($ZT_{\text{max}}=0.81$)相比提升了 56 %。SPS 热挤压工艺还可有效改善力学性能，其维氏硬度达 1.20 GPa，与机械合金化样品的性能相当。

A02-143

Enhanced thermoelectric cooling performance of $(\text{Bi}, \text{Sb})_2\text{Te}_3$ through platinum doping

Jiayue Du, Yuxin Sun, Jiehe Sui*

Harbin Institute of Technology

The requirements for solid-state cooling are growing, especially under extreme conditions. Bi_2Te_3 -based alloys stand as the sole thermoelectric (TE) materials currently available for large-scale commercial use, and it is of great significance to further improve their TE properties. In this study, Pt is doped into p-type $\text{Bi}_{0.4}\text{Sb}_{1.6}\text{Te}_3$ to optimize its TE transport performance. The doping of Pt results in a dramatic rise in carrier concentration and power factor. Simultaneously, the existence of the second phases PtSb along with nanopores, contribute to an obvious reduction in lattice thermal conductivity. Hence, the ZT value is boosted to 1.43 at 348 K, and the average ZT from 300 K to 450 K is as high as 1.32. The 7-pair TE cooling module is fabricated based on this material, which exhibits a maximum cooling temperature difference of 92.2 K, and a maximum cooling capacity of 2.9 W when the hot-side temperature is 350 K. This outstanding progress will facilitate the further development of Bi_2Te_3 cooling modules.

A02-144

通过合理设计铜空位和反位缺陷提升 CuGaTe_2 基化合物的热电性能

唐颖菲，苏贤礼，唐新峰

武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

CuGaTe_2 基化合物在高温热电发电领域展现出巨大潜力，但其宽带隙特性使得通过结构缺陷调控和掺杂提升热电性能面临重大挑战。本研究发现， CuGaTe_2 化合物中 Ga_{Cu} 反位缺陷的存在会促进铜空位的形成，反之亦然，这种相互作用倾向于形成一个 Ga_{Cu} 反位缺陷与两个铜空位组成的电荷中性复合缺陷结构。在 $(\text{Cu}_2\text{Te})_x(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ 化合物中，铜空位的持续积累会演变为孪晶和堆垛层错。这些缺陷与 Ga_{Cu} 反位缺陷共同增强了点缺陷声子散射，使晶格热导率从本征 CuGaTe_2 样品的 $6.95 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ （室温）显著降低至 $(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.45}(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{0.55}$ 样品的 $2.98 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 。此外，高浓度电荷中性复合缺陷缩小了材料带隙并提高了载流子浓度，使 $(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.49}(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{0.51}$ 样品在 600 K 时获得 $1.58 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 的功率因子，较本征 CuGaTe_2 样品提升 41%。最终， $\text{Cu}_{0.015}(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.48}(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{0.52}$ 在 915 K 时达到 0.82 的最高 ZT 值，较本征 CuGaTe_2 化合物提升了约 22%。

A02-145

Manipulating Phonon Transport in BaCu_2Se_2 for Improved Thermoelectric PerformanceKejia Liu¹, Honghao Yao¹, Haiqi Li¹, Wenxuan Wang¹, Dongyi Shen¹, Yujie Huang², Chen Chen², Yue Chen^{*1}

1. The University of Hongkong

2. Great Bay University

The strategic manipulation of phonon transport presents a critical pathway for decoupling thermal and electronic transport in thermoelectric materials. In Zintl-phase BaCu_2Se_2 , we present a synergistic phonon engineering that significantly suppresses lattice thermal conductivity while maintaining a high electrical transport performance. Substituting Cu with Ag significantly enhances lattice anharmonicity, causing a giant softening of the phonon spectrum. Combined with the point defect scattering caused by mass and strain fluctuation, the lattice thermal conductivity of $\text{BaAg}_{0.4}\text{Cu}_{1.6}\text{Se}_2$ reaches $\sim 0.29 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ at 773 K, a value below its Debye-Cahill amorphous limit. Furthermore, the introduction of Ag enhances the density-of-states effective mass of the material, ensuring a high power factor and a peak zT value of ~ 1.14 achieved at 773 K. This work demonstrates that phonon engineering provides a competitive strategy for thermoelectric performance enhancement.

通过合理设计铜空位和反位缺陷提升 CuGaTe_2 基化合物的热电性能

唐颖菲, 苏贤礼, 唐新峰

武汉理工大学材料复合新技术全国重点实验室

CuGaTe_2 基化合物在高温热电发电领域展现出巨大潜力, 但其宽带隙特性使得通过结构缺陷调控和掺杂提升热电性能面临重大挑战。本研究发现, CuGaTe_2 化合物中 Ga_{Cu} 反位缺陷的存在会促进铜空位的形成, 反之亦然, 这种相互作用倾向于形成一个 Ga_{Cu} 反位缺陷与两个铜空位组成的电荷中性复合缺陷结构。在 $(\text{Cu}_2\text{Te})_x(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{1-x}$ 化合物中, 铜空位的持续积累会演变为孪晶和堆垛层错。这些缺陷与 Ga_{Cu} 反位缺陷共同增强了点缺陷声子散射, 使晶格热导率从本征 CuGaTe_2 样品的 $6.95 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ (室温) 显著降低至 $(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.45}(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{0.55}$ 样品的 $2.98 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。此外, 高浓度电荷中性复合缺陷缩小了材料带隙并提高了载流子浓度, 使 $(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.49}(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{0.51}$ 样品在 600 K 时获得 $1.58 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$ 的功率因子, 较本征 CuGaTe_2 样品提升 41%。最终, $\text{Cu}_{0.015}(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.48}(\text{Ga}_2\text{Te}_3)_{0.52}$ 在 915 K 时达到 0.82 的最高 ZT 值, 较本征 CuGaTe_2 化合物提升了约 22%

A02-146

Sb_2Te_3 析出诱导的分级结构提高 GeTe 材料热电性能

黄四江*

昆明理工大学

GeTe 材料因其具有优异的导电性而在热电领域备受关注。然而, 其热电性能受到塞贝克系数低和导热系数高的限制, 部分原因是其本征的高阳离子缺陷浓度。本研究发现在 GeTe 材料中固溶 Sb 可以抑制该现象, 但获得优异的电声输运性能的物理机制需要深入挖掘。为了进一步优化该材料的能带结构, 在 $\text{Ge}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}\text{Te}$ 基体中引入 In 元素, 使 $\text{Ge}_{0.93}\text{Sb}_{0.06}\text{In}_{0.01}\text{Te}$ 样品在 723 K 时的塞贝克系数连续提高到 $250 \mu\text{V K}^{-1}$, 比优化前提高了 15%。令人惊讶的是, 在制备的 GeTe 基复合材料中首次发现了纳米级 Sb_2Te_3 析出相, 构成了 GeTe 材料中著名的全尺度分级结构。得益于全尺度声子散射效应, $\text{Ge}_{0.93}\text{Sb}_{0.06}\text{In}_{0.01}\text{Te}$ 样品在整个温度范围内的晶格热导率显著降低, 特别是在低温区域降低了 60%。最终, 电声输运性能的协同优化导致 $\text{Ge}_{0.93}\text{Sb}_{0.06}\text{In}_{0.01}\text{Te}$ 样品在 773 K 时 ZT 峰值为 2.2, 平均 ZT_{ave} 值为 1.31 (323-773 K)。此外, 细晶强化和固溶强化提高了 GeTe 基复合材料的力学性能。在 450 K 的温差下, 由该材料制备成的单臂热电器件的转换效率达到 $\sim 11.0\%$ 。研究表明高性能 GeTe 基材料在发电领域具有巨大的应用潜力。

A02-147

Ag 化学计量偏移对塑性 $\text{AgCuSe}_{0.6}\text{S}_{0.4}$ 力学性能与热电性能的影响

尹庭威^{1,2}, 邓婷婷^{1,2}, 仇鹏飞^{*1,2}, 史迅¹

1. 中国科学院上海硅酸盐研究所
2. 国科大杭州高等研究院

近年来, AgCuSe 基无机塑性热电材料由于能够在室温下同时实现优异的热电性能和良好的可变形性,

受到了广泛关注。目前, p 型 AgCuSe 基无机塑性热电材料的成分与性能关系已被系统研究, 但对 n 型 AgCuSe 基无机塑性热电材料的相关研究仍然缺乏。在本研究中, 我们制备了一系列 n 型塑性 $\text{Ag}_{1+x}\text{CuSe}_{0.6}\text{S}_{0.4}$ ($x = -0.02, -0.01, 0, 0.01$ 和 0.02) 样品, 并系统地探讨了 Ag 化学计量偏移对其相组成、力学性能及热电性能的影响。研究表明, $\text{AgCuSe}_{0.6}\text{S}_{0.4}$ 的晶体结构可以容纳少量的 Ag 过量以维持纯相, 但微量的 Ag 缺失就会诱导第二相的形成。Ag 化学计量偏移对材料的力学性能影响较小, 而引入 Ag 过量可以提高载流子浓度, 从而优化电导率和功率因子, 提升热电优值 (zT)。在 300 K 时, $\text{Ag}_{1.02}\text{CuSe}_{0.6}\text{S}_{0.4}$ 的 zT 值达到 0.17。基于 $\text{Ag}_{1.02}\text{CuSe}_{0.6}\text{S}_{0.4}$ 制备的六对面内型柔性热电器件展现出优异的输出性能, 优于有机柔性热电器件。本研究加深了对新型 AgCuSe 基无机塑性热电材料的理解。

A02-148

碲化锗基热电材料的 p-n 转变及性能优化策略

王德壮, 尹梁操, 刘庆丰*

南京工业大学

在全球能源约束和“双碳”战略目标驱动下, 热电转换技术因其能够直接将热能转化为电能, 在余热回收领域具有重要战略意义。GeTe 基热电材料因其环境友好、可控的晶体结构和能带特性, 成为中温热电领域最具潜力的候选体系之一。然而, 由于低本征 Ge 空位形成能导致强 p 型半导体特征 (载流子浓度 $\sim 10^{21} \text{ cm}^{-3}$), n 型 GeTe 材料的性能不足以匹配 p 型 GeTe, 严重限制了 GeTe 材料的规模化应用。

本报告针对 n 型 GeTe 材料中 p-n 转变、载流子散射和双极效应等关键科学问题, 进行了深入研究: 1) 为实现 p-n 转变, 通过 AgBiTe_2 合金化调制阴阳离子空位浓度将 GeTe 材料的主载流子由空穴转化为电子, 同时引入多层级缺陷结构强化声子散射并在 423 K 时获得 0.5 的 ZT 值; 2) 为抑制载流子散射, 通过优化退火时间诱导晶界迁移促进晶粒生长, 同时驱动 Ge 空位聚集形成空位团簇成功实现了载流子-声子散射解耦, 在 473 K 时实现了 ~ 0.4 的 ZT 峰值; 3) 为抑制双极效应, 在增大基体带隙的同时引入宽带隙的局部重掺杂区域构筑载流子势垒进一步阻碍少数载流子输运, 实现高温区性能的大幅提高。在 723 K 时, n 型 $\text{Ge}_{0.46}\text{Bi}_{0.17}\text{Pb}_{0.37}\text{Te}_{0.7}\text{Se}_{0.3}$ 的功率因数达 $5.3 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$, 实现了 0.45 的 ZT 值。

A02-149

载流子优化与超低晶格热导率实现 n-PbTe 超高热电性能

姚敏¹, 张忠伟², 陈俊良³, 高杰³, 彭英⁴, 苗蕾^{*1}

1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 南宁, 530004
2. 广西大学化学化工学院, 南宁, 530004
3. 桂林电子科技大学材料科学与工程学院, 桂林, 541004
4. 桂林电子科技大学信息与通信学院, 桂林, 541004

热电材料能够直接实现热能与电能之间的转换, 因其具有绿色无污染、零排放、无噪声等显著优势而备受关注。中温区工作的热电材料中 p 型 PbTe 展现出优异的热电性能但由于 n 型 PbTe 的性能瓶颈严重限制了全 PbTe 基材料在中温热电 (TE) 发电中的实际应用, 因此迫切需要提升 n 型 PbTe 的热电性能。本研究通过精确调控 $\text{Pb}_{1.03}\text{Te}$ 的 Ag 和 Br 掺杂元素 ($\text{Pb}_{1.03}\text{Ag}_{0.002+x}\text{Te}_{0.998}\text{Br}_{0.002}$), 实现了载流子浓度与声子输运的协同优化。通过动态调节载流子浓度, 在宽温度范围内载流子浓度始终保持在最优值范围内从而显著提升了电性能, 其功率因子在整个温度范围内均保持在 $2000 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^2$ 以上。同时, Ag 和 Br 的掺杂诱导形成了多尺度微观结构和丰富的沉淀物, 有效阻碍了声子的传播显著降低晶格热导率, 最终实现了超低的晶格热导率 ($0.274 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \text{ K}^{-1}$)。实验结果表明, n 型 PbTe 在 773 K 时达到了最大 ZT 值 1.65, 并且在 423 至 823 K 的温度区间内实现了平均 ZT 值 1.33 的优异性能, 该性能在 Ag 元素掺杂动态调节载流子浓度研究中处于领先地位。基于此, 制备的单臂器件在 480 K 温差下实现了 $\sim 8.9\%$ 的能量转换效率。这项研究显著提升了 n 型 PbTe 的热电性能, 为该材料的进一步性能优化提供了新的策略和研究思路。

A02-150

相结构调控和多孔化增强 $\text{Cu}_{1.8}\text{S}$ 材料的热电性能

杨添驭, 葛振华*

昆明理工大学

硫化铜是一种元素含量丰富、毒性低、成本低的热电材料, 由于铜离子具备的超离子导电性, 使得这类材料具有本征的低热导率, 在中温区具有应用前景。然而, 铜硫体系具有复杂的晶体结构, 在 361K 发生六方相到立方相的转变, 往往导致热电性能的变化。本研究通过调控硫化铜的相结构实现热电性能的优化, 室温立方相结构是进一步优化铜硫体系热电性能的良好基础。室温硫化铜展现出复杂的类棋盘相, 通过消除原始硫化铜中的成分差异, 形成了共格/孪晶界面及其位向关系, 并通过原位 XRD 和原位 TEM 证实了得到的室温立方相是热力学稳定的。另外, 参考矿石复杂的冶炼反应过程, 在硫化铜中借鉴并设计了改性的固相反应, 构筑了多孔化的硫化铜热电材料, 并获得了显著提升的热电性能。这项研究表明, 通过调节硫化铜的相结构能够显著提高热电性能, 且微观结构的设计对于热电性能的提升也同样重要, 该研究能够为其他热电材料的相结构与微观结构设计提供思路借鉴。

A02-151

基体平整化策略促使 $\text{Cu}_2\text{Se}/\text{SnSe}$ 高塑性复合材料实现高热电性能

应盼, 耿杨, 唐国栋*

南京理工大学

热电技术在发电和电子冷却领域展现出显著的应用潜力。本研究报道了在稳定的 $\text{Cu}_2\text{Se}/\text{SnSe}$ 复合材料中实现了优异的热电性能和高塑性。通过采用一种新颖的基体平整化策略, 消除了 $\text{Cu}_2\text{Se}/\text{SnSe}$ 复合材料中 Cu_2Se 基体内的晶格空位, 从而使载流子迁移率和功率因子得到显著提升。准共格界面的存在诱导了声子散射, 有效降低了晶格热导率, 同时不影响载流子迁移率。因此, 在 $\text{Cu}_2\text{Se}/5\text{wt.}\% \text{Sn}_{0.96}\text{Pb}_{0.01}\text{Zn}_{0.03}\text{Se}$ 复合材料中获得了高达 3.3 的品质因数 (ZT)。此外, 高密度纳米孪晶的存在赋予该复合材料显著的塑性, 使其压缩应变达到 12%。第二相通过键合作用阻碍了铜离子的大规模迁移, 从而有助于复合材料的稳定性。本研究结果为提升复合半导体材料的热电性能提出了一种新策略, 并有望推广应用于其他热电体系。

A02-152

准同型相界的热电性能调控

袁伟凡, 赵琨鹏*

上海交通大学

柔性热电技术能够将环境中的微小温差转化成电能, 在柔性电子领域以及可穿戴设备中具有广阔的应用前景。然而柔性半导体的发展是柔性热电技术快速发展面临的重要挑战, 热-电-力协同调控是柔性热电器件设计中的关键问题。得益于多中心、弥散的 Ag-S 键, Ag_2S 多晶具有类金属的变形能力, 同为银硫族化合物的 $\text{Ag}_2\text{X}(\text{X}=\text{S}, \text{Se})$ 在室温具备较高的热电性能, 构建 $\text{Ag}_2\text{X}(\text{X}=\text{S}, \text{Se}, \text{Te})$ 固溶体有望在多个维度协同调控材料的热电性能和力学性能。本工作采用熔融-退火与放电等离子体烧结的方法制备了一系列 $\text{Ag}_2\text{Se}_{0.6}\text{S}_{0.4-x}\text{Te}_x$ ($0 \leq x \leq 0.1$) 材料, 深入地研究了正交-单斜相界附近 $\text{Ag}_2\text{Se}_{0.6}\text{S}_{0.4-x}\text{Te}_x$ 样品的相变特征以及热电和力学性能。结果表明, 通过退火与过冷处理两种不同的热处理方式获得了在室温下单斜相与正交相的 $\text{Ag}_2\text{Se}_{0.6}\text{S}_{0.4-x}\text{Te}_x$ 多晶块体。直接退火缓冷促进了单斜相的形成, 而过冷处理则会诱导其向正交相的转变, 并伴随强烈的热滞后现象。说明其在室温的晶体结构不仅与化学成分有关, 也与其经历的热过程密切相关。借助差示扫描量热法和同步辐射变温 XRD, 获得了 $\text{Ag}_2\text{Se}_{0.6}\text{S}_{0.4-x}\text{Te}_x$ ($0 \leq x \leq 0.1$) 体系在升降温过程中的精确相图。并且发现 $\text{Ag}_2\text{Se}_{0.6}\text{S}_{0.4}$ 单斜相电导率较低, 300 K 时约为 5.6, 通过 Te 的固溶, 电导率可以提高近一倍, 而通过低温处理促使相变可以提高一倍以上。通过调节化学成分与过冷处理, 在 310K 时, 获得的正交相 $\text{Ag}_2\text{Se}_{0.6}\text{S}_{0.38}\text{Te}_{0.02}$ ZT 值可达 0.58, 压缩量超过 30%, 得到了高热电性能和优良可加工性的塑性热电

A02-153

不同禁带宽度的碲化物第二相对多晶 SnSe 热电性能的影响

李泽、葛振华*
昆明理工大学

硒化锡(SnSe)作为一种具有应用前景的热电材料,近年来受到学术界广泛关注。纳米工程技术为同时提升材料的热电传输性能和机械强度提供了一种直接有效的解决方案。本研究提出了一种策略,通过构建内源性纳米结构的 SnSe + 0.5% GaTe 样品,成功将 p 型多晶 SnSe 的热电优值(ZT)在 823 K 提升至 1.65。该策略通过 SnSe 基体与嵌入的第二相金属碲化物(ATe, A = Pb、Ge、Ga、Zn)之间的价带对齐,实现构建适宜的禁带宽度实现了对空穴载流子传输的调控,这一优异性能源于内源性纳米第二相的嵌入实现声子阻挡/电子传输协同调控。总体上看,与未改性 p 型多晶 SnSe 相比具有更宽带隙的纳米结构 GaTe 第二相发挥了双重作用:既通过调控载流子浓度并保持载流子迁移率将电传输性能提升至 $710 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$,又增强声子散射使 823 K 温度下的晶格热导率降至 $\sim 0.2 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ 。最终,在 823 K 时获得了峰值 $ZT \sim 1.65$ 的优异性能及较高的室温力学性能。该性能指标在已报道的多晶 SnSe 材料中具有显著竞争优势,为后续改性研究提供了重要参考,本研究制备的 SnSe 基纳米复合材料在低成本热电应用领域中具有巨大潜力。

A02-154

N 型高熵半导体 AgBiPbSe₂S 热电性能与机械性能研究

危颖超, 罗裕波, 杨君友*
华中科技大学

高熵半导体凭借独特的晶体结构和超低热导率,成为具有潜力的热电材料候选者。然而,相比于性能优异的 P 型高熵材料,N 型高熵材料的开发尤为迫切。本文介绍了一种新型 N 型高熵半导体 AgBiPbSe₂S,带隙为 0.43 eV,具有岩盐结构,823 K 时热导率低至 $0.36 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$,ZT 值达到 0.60。通过引入过量 Ag 产生的 Ag₂Se 纳米沉淀,Ag_{1.02}BiPbSe₂S 峰值 ZT 提升至 1.18,平均 ZT 为 0.60;再者,Ag_{1.02}BiPbSe₂S 的维氏硬度为 209 Hv,抗弯强度为 32 MPa,展现出优异的热电和机械性能,其综合性能在 N 型高熵材料中表现卓越。

A02-155

P 型 AgBiSe₂ 基热电材料的制备及其电声输运协同调控

刘皓明¹, 李善*¹, 张倩²
1. 西北工业大学民航学院
2. 哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院

AgBiSe₂ 作为一种兼具环境友好性、低晶格热导率及多重价带结构特性的材料,在 p 型热电材料领域展现出广阔的应用前景。然而,受晶体缺陷的显著影响,该材料通常表现出固有的强 n 型半导体行为,且其理论预测的优异热电性能尚未通过实验充分验证。本研究采用真空熔炼与热压烧结工艺,成功制备了 p 型 AgBi_{1-x}Cd_xSe₂、AgBi_{1-x}In_xSe₂ 及 AgBi_{1-2x}Cd_xIn_xSe₂ 系列掺杂材料。实验研究表明,Cd、In 单掺杂以及 Cd/In 共掺杂可有效提升 AgBiSe₂ 的空穴浓度,显著增强其电导率和功率因子。基于第一性原理的理论计算表明,Cd 和 In 掺杂能够降低材料的带隙、使价带结构趋于平坦化,并显著增加费米能级附近的态密度。这种掺杂效应在提高空穴浓度的同时,仍能保持较高的塞贝克系数。此外,TEM 微观结构分析结果显示,掺杂诱导产生的位错显著增强了声子散射,从而实现了较低的晶格热导率。最终,AgBi_{0.94}Cd_{0.03}In_{0.03}Se₂ 样品在室温下的 zT 值达到 0.4,其平均 zT 值(300-470 K)提升至 0.5,较未掺杂 AgBiSe₂ 提高了 27 倍。本研究为 p 型 AgBiSe₂ 基材料的制备及其热电性能优化提供了重要的理论依据与技术路径。

A02-156

消除第二相实现 GeTe-AgSbSe₂ 合金体系的热电与机械性能协同优化

张鹏远, 刘明*

哈尔滨工业大学金属精密热加工国家级重点实验室

三元硫属化合物 (ABX_2 , $A = Ag, Cu, Na$; $B = Sb, Bi$; $X = Te, Se, S$) 合金化已被证明是优化 IV-VI 热电族材料热电性能的有效策略。然而, 一方面, 当采用 ABX_2 合金化时, 第二相的析出可能导致材料在高温下不稳定; 另一方面, 目前关于此类固体机械性能的研究仍不足, 而这对热电器件的实际应用至关重要。本研究以 GeTe-AgSbSe₂ 合金化为例, 通过精确调控 Ag/Sb 化学计量比, 成功消除了富 Ag 第二相。更重要的是, 无富 Ag 相的 $(GeTe)_{80}(Ag_{0.8}Sb_{1.2}Se_2)_{20}$ 的机械性能优于含富 Ag 相的 $(GeTe)_{80}(AgSbSe_2)_{20}$, 其维氏硬度、压缩强度和断裂韧性分别从后者的 230 HV、105 MPa 和 1.49 MPa m^{1/2} 提升至 250 HV、166 MPa 和 1.75 MPa m^{1/2}。进一步的纳米压痕测试表明, $(GeTe)_{80}(AgSbSe_2)_{20}$ 机械性能的劣化源于富 Ag 第二相的存在。此外, 由于 Ag/Sb 取代 Ge 以及 Se 取代 Te 实现了能带收敛, 并引入显著的质量与应变起伏, 合金化样品在整个测试温度范围内热电性能均得到提高, $(GeTe)_{80}(Ag_{0.8}Sb_{1.2}Se_2)_{20}$ 在 300–773 K 范围的平均 ZT 为 1.07。本工作揭示了在 IV-VI 族材料与三元硫属化合物合金化体系中, 消除第二相对提升机械性能的关键作用。

A02-157

“响尾蛇”效应与热电输运性能的相关性

余爱先, 曹崇德, 赵银昌*

西北工业大学

在热电领域中, 主-客结构中 rattler 原子的存在引起了广泛关注, 因为它们剧烈的非简谐振动能够有效抑制材料的热输运性能。本报告预测了一种具有优异热电性能和高温稳定性的三元半霍斯勒化合物 LiAgTe, 其晶体结构呈现典型的主-客型结构。此外, 本文还对 rattler 在输运过程中的作用进行了深入分析。通过对 rattler (Ag 原子) 进行微观研究, 我们发现其在抑制主骨架热输运性能的同时, 还通过提供近自由且结合较弱的电子显著增强了电子输运能力。结合自洽声子理论与压缩感知晶格动力学方法, 本文准确捕捉了考虑四阶非简谐性和四声子散射下的晶格热导率, 并通过计算获得了包含各向异性声学变形势散射、极化光学声子散射以及离化杂质散射在内的电子弛豫时间, 进而计算了电子输运参数。我们利用电子局域函数、Bader 电荷密度分析以及振动可视化等方法系统剖析了 rattler 在主-客结构中的作用机制。rattler 的非简谐振动增强了散射过程对温度的响应, 使热输运性能在高温下迅速劣化。此外, rattler 原子的扩展 d 轨道电子与主骨架中 Te 原子的 p 轨道电子相互作用, 使价带同时呈现高简并度与强色散的共存特性, 从而极大提升了材料的电子输运性能。

A02-158

Cu₃InSnSe₅ 与 MnSe 伪二元固溶体的热电性能

罗官正, 罗裕波, 杨君友*

华中科技大学材料科学与工程学院

Cu₃InSnSe₅ 是一种新型铜基类金刚石半导体 (CDS) 热电材料, 其热电性能可以通过 MnSe 合金化进一步增强。我们观察到 MnSe₂ 沉淀物的形成有效地散射了低频声子, 这显著降低了中低温下的晶格热导率。较高含量的 MnSe 合金化导致 MnSe₂ 沉淀物的形成从而增强了声子散射, 而较低含量的 MnSe 也可以在一定程度上提高功率因子。最终, 我们的研究通过 10mol.%MnSe 与 Cu₃InSnSe₅ 合金化形成伪二元固溶体, 在 300–773K 温度范围内实现了 1.00 的峰值 ZT 和 0.50 的平均 ZT, 证明了 MnSe 合金化在优化铜基类金刚石半导体材料的热电性能的潜力。

A02-159

高性能 GeTe 基热电材料的电声输运调控及多功能器件应用研究

罗嘉兴, 谭晓波, 朱江龙, 昂然*

四川大学

GeTe 作为一种高性能、无铅的中温区热电材料, 因其卓越的热电性能和环境友好特性而备受关注。然而, 其电声输运的强烈耦合限制了进一步性能优化及多功能器件的开发。在本次报告中, 我们提出了一种基于能带工程与晶体结构协同调控的 $\text{Ge}_{0.885}\text{Zr}_{0.02}\text{Pb}_{0.08}\text{Te}_{0.985}(\text{Cu}_2\text{Te})_{0.015}$ 材料, 实现了热电性能与机械性能的提升, 适用于高效热电材料的开发及先进器件构建。具体而言, Zr/Pb 的协同掺杂优化了能带结构, 显著提高了 Seebeck 系数; Pb 的引入通过占据 Ge 位点对称几何中心, 减少了 Ge 空位, 提升了晶体对称性, 并促进了载流子的离域化传输, 从而实现了最大化的功率因子。同时, 几何中心的变化增强了晶格的声子非谐性, 多元素掺杂诱导的多尺度缺陷结构提供了丰富的声子散射源, 使得材料在全温区实现了显著的 μ_w/κ_L 提升, 峰值 zT 在 650 K 时可达~2.2。基于 7 对该材料的热电器件, 在 $\Delta T = 366$ K 获得~8.5% 的转换效率。此外, 我们进一步克服了传统 GeTe 反掺杂策略中载流子迁移率显著降低的问题。通过在 $\text{Ge}_{0.84}\text{Cd}_{0.06}\text{Pb}_{0.10}\text{Te}$ 中合金化 Cu_2Te , 构建了由伪立方 GeTe、 Cu_2Te 和 PbTe 相之间的多相共格纳米界面网络, 并引入 Cu 离子的离域化。这种设计有效调控了电荷载流子和声子的输运行为, 增加了迁移率, 优化了载流子浓度, 提高了功率因子, 在 653 K 下晶格热导率降至~0.33 $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$, 并获得了峰值 $zT \sim 2.22$ (803 K) 和平均 $zT \sim 1.40$ (303-803 K)。同时, 该策略显著增强了材料的机械性能。基于优化的 GeTe 材料, 我们制备了一种高输出功率密度的热电器件 ($\Delta T = 400$ K 时输出功率密度~1.47 W cm^{-2}), 组装的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。

A02-160

用于循环热调节模式的 Mg 基热电材料优化策略

王玉鹏, 刘玮书*

南方科技大学

热电循环热调节模式就是利用热电器件周期性地对物体进行加热和冷却。当热电器件同时控制两个物体的温度循环时, 由于器件可以快速转移物体间的热量, 从而实现在缩短循环周期的同时降低能耗, 提高热电器件的循环热调节性能。该模式在气体分离和温度驱动软体机器人等领域极具应用潜力。热电循环热调节模式更关注热电材料的瞬态响应特性, 这和更关注稳态响应特性的发电及制冷应用不同, 这也导致了该模式下的材料优化策略与传统优化策略间的差异。为了指导热电循环热调节模式下的材料优化, 本文提出了经验性的热电材料品质因子 ($Z_R T = S^2 \sigma T / \kappa^{2.3}$) 用于描述材料的循环热调节性能, 并通过降低 Mg 基热电材料的热导率提高材料的 $Z_R T$ 。通过引入 Ge 元素和提高烧结温度调控 $\text{Mg}_3(\text{Sb}, \text{Bi})_2$ 基热电材料的晶粒尺寸, 使其 $Z_R T$ 提升了 71.4%; 通过降低烧结温度在 MgAgSb 基热电材料内形成微米级孔洞降低样品的晶格热导率, 使其 $Z_R T$ 提升了 23.3%。利用优化后的 $\text{Mg}_3(\text{Sb}, \text{Bi})_2$ 基和 MgAgSb 基热电材料制备成 Mg 基热电器件, 实测发现尽管 Mg 基热电器件的发电效率低于商业 Bi_2Te_3 基热电器件, 但其循环热调节性能在特定场景下已经超越了后者, 从实验上验证了基于 $Z_R T$ 的优化策略的有效性。

A02-161

大面积 SnSe 基薄膜相调控生长的研究

华建梅, 苏贤礼, 唐新峰

武汉理工大学材料复合新技术全国重点实验室

SnSe 和 SnSe_2 作为典型的二维层状半导体材料, 因其独特的电子结构和优异的物理化学性质, 在热电、光电、能源存储等领域展现出广阔的应用前景。本文利用三温区化学气相沉积 (CVD) 方法, 从单质前驱

体中合成了大面积相可控、厚度可控的 SnSe 和 SnSe_2 薄膜。本文通过调节锡与基板之间的距离,实现了 SnSe 和 SnSe_2 的选择性生长,并通过有限元模拟验证了锡与基板之间的距离会显著影响基板处锡蒸汽的浓度,对 SnSe 和 SnSe_2 的相调控至关重要。合成的 SnSe 薄膜厚度在 10-150nm 之间可调,且最大横向尺寸可达 160 微米,为目前文献报到中通过 CVD 方式可获得的最大尺寸。该研究为基于高质量 SnSe 基化合物的新型光电器件和自旋谷电子器件的发展铺平了道路。

A02-162

Ta 在协同优化 $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 基热电材料中载流子与声子输运性能中的显著作用

攸广梦*

河南大学

$\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 基材料因其热电性能可调性强以及优异的力学性能而在热电发电领域引起了广泛关注。然而,其在室温附近表现出的热激发迁移率限制了其在低品位废热回收中的应用。本文通过引入 Ta 元素,有效解耦了材料的电输运与热输运行为,从而在 723 K 处实现了优异的热电优值 $zT=1.9$ 。得益于对载流子浓度与迁移率的协同调控, $\text{Mg}_3\text{Sb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}$ 材料的电输运性能显著提升,在整个测试温度范围内实现了平均功率因子达 $24.8 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ 的优异表现。此外,多尺度结构缺陷显著抑制了声子传热,使晶格热导率降低至 $0.46 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$, 接近理论极限值。最终,在 Ta 掺杂的 $\text{Mg}_3\text{Sb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}$ 样品中获得了 323–723 K 范围内平均 zT 值达 1.45 的卓越热电性能。本研究加深了对过渡金属在调控晶界结构以及提升 $\text{Mg}_3(\text{Sb,Bi})_2$ 基材料热电性能中的化学作用机制的理解。

A02-163

通过高密度纳米尺度 Ga/Bi 共偏析优化 $\text{Mg}_{3+\delta}(\text{Sb,Bi})_2$ 热电性能

潘政牛*

广西大学

热电技术是一种利用材料的热电效应,未来可实现热能和电能相互转化的技术。 $\text{Mg}_{3+\delta}(\text{Sb,Bi})_2$ 基热电材料因晶界处存在悬空原子键、局部非化学计量和各种缺陷形成捕获态,形成势垒阻碍载流子运动,导致室温附近性能被恶化。而 Janus 结构作为一种具有双面性质的材料设计,近年来在热电材料领域引起了广泛关注。因其独特的结构不对称性为调控热电材料的各项性能参数,进而提高能量转换效率提供了新的思路。然而,我们提出了一种室温液态金属镓辅助烧结策略,成功地将液态金属镓纳米作为烧结过程诱导 $\text{Mg}_{3+\delta}(\text{Sb,Bi})_2$ 基热电材料的 Bi/Ga-rich Janus 纳米沉淀和 Ga 析出,有效地增强电子-声子协同效应,提高室温电荷传输的能力($\mu_w=206 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)和超低的晶格热导率(300K 时, $0.41 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$)以及优异的品质因素(673K 时为 1.84)和平均品质因数(300K-773K 范围时为 1.55,提升了 32.5%),理论转化效率高达 16.36%。

总而言之,这项研究展示了,通过温液态金属镓辅助烧结策略合理设计 Janus 结构,实现降低晶格热导率和优化载流子传输,从而提高热电材料性能,为热电材料的设计和性能优化提供了新的自由度。为探索新型 Janus 结构材料、开发更有效的界面工程策略以及深入理解 Janus 结构对声子和载流子传输的影响机制贡献良策。

A02-164

铁磁半导体 $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ 的低温热电性能与磁增强热电效应葛军杰¹, 陈小凤¹, 李龙舟¹, 魏平¹, 赵文俞^{*1,2}

1. 武汉理工大学

2. 佛山仙湖实验室

GeTe 基热电材料在中温区展现优异的热电性能,在热电发电领域有重要应用潜力。大量研究表明, Mn 掺杂 GeTe 可促进立方相形成,可有效避免结构相变引起的应力突变,这有利于提升该热电材料体系的

稳定性。然而，磁性 Mn 离子在 GeTe 材料中的磁性作用机制一直缺少探究，因此，本工作针对性研究了 Mn 掺杂 GeTe 材料在 50-300 K 温度范围内的磁性能、磁增强热电输运以及外磁场下声子传输行为，以揭示磁性介质 Mn 在 GeTe 材料中的关键作用。研究发现，Mn 掺杂显著降低载流子浓度并增强电子散射，实现功率因子优化；Mn 掺杂导致光声子软化和声子群速度降低，显著降低晶格热导率。Ge_{0.85}Mn_{0.15}Te 材料在 300 K 时 zT 值达到 0.12，是未掺杂 GeTe 的 5 倍。磁性能测量结果表明，Mn 掺杂 GeTe 材料表现出软磁行为和强自旋涨落，矫顽力随 Mn 含量增加呈现先增加后减小趋势。此外，通过外加磁场抑制铁磁性的 Mn 掺杂 GeTe 材料内部磁激发声子模式，可实现外磁场优化综合热电性能。

A02-165

在半金属 MoTe₂ 中通过层间滑移原子级直接观察偶极子形成过程

廖琳，苏贤礼，吴劲松，唐新峰，张清杰

武汉理工大学材料复合新技术全国重点实验室

在过渡金属碲化物（TMTs）中，层堆叠顺序对晶体对称性及电子性质（如铁电性、超导性和电子相关性）有着显著影响。块体八面体 MoTe₂ 在室温下为非极性高阶拓扑 1T' 相，并在约 260 K 时转变为极性 Weyl 半金属 T_d 相，同时伴随层堆叠顺序的变化。然而，由于在原子分辨率下捕捉层间滑移十分困难，因此 MoTe₂ 在低温下的极化形成机制仍然不甚明了。在此，我们通过原位低温（扫描）透射电子显微镜（cryo-(S)TEM）来应对这一挑战，以追踪层间滑移及在范德瓦尔斯（vdW）层状 MoTe₂ 中诱导的极化。当温度在 300 K 至 193 K 范围内时，我们观察到了局部 T_d 域在 1T'-I 畴内的逐步形成。经过冷却/加热循环后，当温度回升至 300 K 时，初始的 1T'-I/1T'-II 混畴形成了单个较大的 1T'-I 畴。在 110 K 时，通过插入反向堆叠的 1T'-I 畴到 1T'-II 畴基体中发现了 T_d 相单元的增加。此外，我们展示了在 110 K 下纳米尺度 T_d 相的原子级观察以及 1T'/T_d 相无序混合堆叠的共存现象。构建了两种可能的滑移模型以阐明层间滑移路径，即计算得出的滑移能垒分别为 2.7 和 5.3 meV/u.c. 均较低，表明热可达的滑移行为。我们对滑移诱导的极化形成的研究为开发基于滑移的铁电非易失性存储器件及铁电场效应晶体管提供了有意义的见解。

A02-166

高效稳定的 MgAgSb 基热电器件

左武升，张骐昊，王连军，江莞*

东华大学

热电器件是可以直接将电能转化为热能的装置，对于低品位废热的回收具有潜在应用价值，在提升化石燃料利用效率的同时减少二氧化碳排放。然而，相应热电器件的制备与应用仍面临重大挑战。除了考虑材料自身的稳定性、环保性以及可加工性等因素，热电材料与电极连接的界面是热电器件制备的技术瓶颈，这成为器件在高温服役下是否具有高稳定性的关键问题。针对上述问题，本团队基于 MgAgSb 材料为研究重点，开发高效、快捷的高通量筛选阻挡层的方法，成功筛选出钴作为其阻挡层材料，与热电材料形成原子级别的界面结合，573 K 高温环境下表现为化学惰性，同时实现高强度结合，完全满足器件在实际环境中的服役条件。制备出的全 Mg 基的热电器件，在 287 K 的温差下，实现 10.2% 的热电转换效率，且经过 1440 个小时的热循环测试过程，器件发电性能输出稳定，未出现明显的衰减现象。本研究实现了全 Mg 基热电器件高效、稳定的服役，极大地推动了其实际应用进程。

A02-167

磁控溅射制备晶态/非晶态 Ni 基复合膜用于碲化铋热电阻挡层

舒文杰，罗裕波*

华中科技大学

磁控溅射凭借其可低温沉积、高沉积速率及薄膜制备的高致密度和强界面结合等众多特性，在热电材

料界面阻挡层中展现出独特优势。本研究采用单元 Ni 靶和多元 Ni 基合金靶 (NiCoCrMoTiAl=49:20:22.6:5.8:2.2:0.4 wt%), 通过溅射功率梯度调控, 在碲化铋热电基体上沉积晶态 Ni/非晶态 Ni 基合金/晶态 Ni 梯度复合膜用于器件的阻挡层。结果表明: 晶态 Ni 与碲化铋基体通过一定的反应形成 NiTe₂ 金属间化合物实现化学键合, p 型界面阻挡层剪切强度达 12.6MPa, n 型达 11.1MPa; 低温沉积不损失热电基片特性和高的膜层致密度保证了低的界面电阻, p 型阻挡层界面电阻低至 $4.25\mu\Omega\cdot\text{cm}^2$, n 型低至 $5.45\mu\Omega\cdot\text{cm}^2$, 中间非晶态 Ni 基多元合金缺少晶界快速扩散通道延缓了热电材料与电极、焊料元素间的扩散, 在 200°C 时效 7 天后元素扩散距离少于 1 微米。本研究系统阐明了晶态-非晶态梯度结构对扩散阻隔的协同作用机制, 该阻挡层兼具低阻、高强、稳定性好的特点, 为碲化铋基热电器件的大规模应用提供新的解决方案。

A02-168**通过界面接触设计与低温连接优化提升全 Mg 基热电器件性能**

陈尚豪, 张倩*

哈尔滨工业大学(深圳)

热电技术可将难以回收利用的低品位废热直接转化为电能。以 Mg₃(Sb,Bi)₂ 和 MgAgSb 为代表的 Mg 基材料, 凭借在室温附近优异的热电性能, 正成为 Bi₂Te₃ 基材料廉价且环保的替代。然而, 由于 Mg 元素固有的高化学反应活性和易挥发性, 加之 MgAgSb 对温度敏感的相变特性, 易引起热电性能显著下降。因此, 在高性能 Mg 基热电器件开发中, 界面接触和连接优化具有重要意义。本研究以 Mg₂Ni 作为两种 Mg 基热电材料的统一匹配接触层, 利用 Ni-Sn 瞬态液相低温键合技术, 在 MgAgSb 相变点温度以下完成器件集成, 制备了由 n 型 Mg₃(Sb,Bi)₂ 和 p 型 MgAgSb 配对的高性能热电器件, 在 300 K 的温差下实现了 10.8% 的超高热电转换效率。此外, 热老化和循环测试证实 Mg₂Ni 与热电材料接触界面, 以及 Ni-Sn 金属间化合物接头的长期服役稳定性。本工作将促进高性能、环保型 Mg 基热电器件在低品位废热回收中的应用。

A02-169**大面积单斜 Cr₅Te₆ 薄膜 CVD 调控生长研究**

周焱彬, 苏贤礼, 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

单斜相 Cr₅Te₆ 薄膜具有丰富的物理特性, 包括强自旋轨道耦合、高自旋极化率以及显著的磁性。这些特性使其在自旋电子学、磁存储和量子计算等领域展现出巨大的应用潜力, 本研究开发了一种限域条件下的常压 CVD 技术, 用于合成大面积厚度可控的单斜 Cr₅Te₆ 纳米片, 这些纳米片厚度最薄可到 7.8nm, 长边尺寸最大可到 150um, 这是目前合成单斜 Cr₅Te₆ 纳米片的最大尺寸。通过调节生长温度, 气流和前驱体与衬底之间的距离, 可以精确控制前驱体的蒸气压, 从而显著影响合成的单斜 Cr₅Te₆ 纳米片的尺寸和形貌。所获得的大尺寸单斜 Cr₅Te₆ 纳米片表现出强铁磁性, 居里温度接近室温。理论计算比较了单斜 Cr₅Te₆ 薄膜与未插层的 CrTe₂ 薄膜的磁矩, 揭示了单斜相 Cr₅Te₆ 薄膜铁磁性来源。这一改良的限域 CVD 制备技术为将单斜 Cr₅Te₆ 纳米片集成到下一代自旋电子学器件中开辟了新途径

A02-170**理想固溶粗晶范式推动 BiSb 合金实现跨温域深低温制冷**吴晓炜¹, 赵怀周^{*1}, 刘德欢²

1. 中国科学院物理研究所

2. 华中科技大学

热电材料能够实现热能与电能直接相互转换, 在固态制冷和大规模余热发电等领域具有广阔应用前景。在近室温热电制冷方面, 碲化铋是最重要的商业材料体系, 但是随着环境温度逐步降低, 其性能迅速衰减, 因此热电制冷技术在深低温面临困境。Bi-Sb 合金是迄今最好的深低温热电材料, 当其中 Sb 占比在

12%和 15%之间时，材料显示最佳热电性能。然而由于 Bi-Sb 二元相图中存在较大的固液两相区域，在熔体冷却和结晶过程中通常会发生相分离，造成材料组分严重偏析。传统单晶生长采用复杂的提拉工艺，均匀性较差并效率低下，同时单晶 Bi-Sb 层状结构极易解理，难以制作热电器件。而多晶制备中所使用的熔炼、粉碎和热压不能有效避免成分偏析，获得的材料晶粒尺寸过细且有界面氧化，导致材料热电性能不佳，失去应用价值。

为了应对这一挑战，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心怀柔研究部 HM-02 赵怀周研究员团队与华中科技大学刘德欢教授合作，通过基于虚晶近似（VCA）的第一性原理计算揭示了 Bi-Sb 材料中最重要的本征电声耦合特性，即电子平均自由程（ λ_{ele} ）高于声子平均自由程（ λ_{ph} ）两个数量级，发现当材料晶粒尺寸大于 10 μm 时即可实现本征电声解耦，为材料的微观结构设计和热电输运性能调控指明了方向。进一步，团队利用超快速淬火技术结合退火工艺制备了一系列元素分布高度均匀化的 Bi-Sb 粗晶样品，这对其形成能隙约为 20 meV 的电子结构具有关键作用，不仅实现了 Seebeck 值的最大化，同时电子迁移率在 100 K 时高达 $1.4 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{V s}$ 。而在 Bi-Sb 粗晶合金中均匀的质量波动对声子输运发生了显著的散射效果，降低了晶格热导率，最终实现了 Bi-Sb 多晶零磁场热电优值 $zT \sim 0.5 @125 \text{ K}$ ，材料压缩强度达到 200 MPa。通过构筑原型器件，本工作首次实现了 Bi-Sb 基热电器件制冷性能从室温到液氮温区的跨越，并在 75 K 时达到 4 K 制冷温差，显示出该材料在深低温区固态制冷方面的应用潜力。该结果不仅加深了人们对 BiSb 体系电声输运物理机制的认识，同时也对进一步提升材料热电性能，推进热电制冷技术在深低温温域关键应用具有指导意义。

相关研究成果以“Bulk Bi-Sb polycrystals underpinned by high electron/phonon mean free path ratio enabling thermoelectric cooling under 77 K”为题发表在 Nature Communications 16, 3534 (2025)。物理所博士生吴晓炜为该论文的第一作者，赵怀周研究员和刘德欢教授为通讯作者。研究工作得到了物理所怀柔研究部鲁振特聘研究员、李俊副研究员、朱航天副研究员，北京大学杨荣贵教授，华中科技大学钱鑫教授，以及河北大学王淑芳教授等人的支持。该研究获得了科技部重点研发计划和北京市科委等科研项目的资助。

文章链接: <https://www.nature.com/articles/s41467-025-58491-1>

A02-171

面向超导应用的多级热电深低温制冷器件

章淑娴，陈志炜，骆军，裴艳中*

同济大学

超导等精密仪器系统运行依赖稳定的低温环境，需借助高效制冷系统实现。其精密的测量需求对冷却系统的振动控制和响应速度提出了更高要求。热电制冷凭借其全固态、无振动等优势，在深低温应用中展现出独特潜力。然而，热电材料的性能提升在低温区面临瓶颈，多级级联结构成为实现深低温制冷的有效策略。理论上，随着级数趋于无穷，多级制冷器件可实现接近 0 K 的极限温度。然而，实际应用中，级联导致的能量损耗削弱了其降温能力。当前器件从室温制冷可得的最低温度仅为 170 K，限制了其在深低温领域的拓展与应用。

热电材料性能、级联结构设计及工况参数共同决定了系统的整体制冷能力。我们此前的研究已证明，通过优化多级器件中各级的工作电流，可实现约 10%的制冷性能提升^[1]。在此基础上，本研究以热力学内可逆性为理论支撑，采用温熵理论为设计指导，系统开展了多级热电制冷器件的材料选择与结构优化工作。通过设计近室温区高性能 Bi_2Te_3 材料与低温区高性能 BiSb 材料，优化器件级联结构，该六级器件成功实现了从室温降温至 130 K 的性能突破^[2]。本研究为深低温热电制冷器件的系统设计提供了理论依据与实现路径，并验证了其在超导系统等精密低温应用中的潜在价值。

参考文献:

- [1] Zhang, S., et al., Individualization of optimal operation currents for promoting multi-stage thermoelectric cooling. Mater. Today Phys. 2022, 26: 100746.
- [2] Zhang, S., et al., Vibration-free six-stage thermoelectric cryogenic cooler achieving 130 K low temperature.

A02-172

Bi₂Te₃ 基面内型热电薄膜器件制冷性能数值模拟验证

李龙舟, 宁宇, 柯少秋, 魏平, 赵文俞*

武汉理工大学

热电薄膜器件有望为芯片高效散热提供有效解决方案。面内型热电薄膜器件具有结构优势,但目前面内型薄膜器件的制冷性能远低于面外型块体和薄膜热电器件,如何提升面内型薄膜器件的制冷性能已成为一个挑战性难题。本研究通过有限元法模拟了单级和多级级联面内型薄膜器件的制冷性能,探究输入电流、工作环境、基底和接触电阻对不同级数薄膜器件制冷性能的影响,并与实验数据进行验证。结果表明:在真空环境、无基底和零接触电阻的理想条件下,单级 Bi₂Te₃ 薄膜器件的最大制冷温差可达 105.4 K,与基于 zT 值的理论估算值(96.6 K)接近;在大气环境、存在基底和接触电阻的实际工况下,五级 Bi₂Te₃ 薄膜器件的最大制冷温差为 2.1 K,与实验值(1.1 K)接近。这些结果表明,尽管 Bi₂Te₃ 薄膜材料具有高的热电性能,薄膜基底、接触电阻和工作环境成为限制薄膜热电器件制冷性能的重要因素。本研究为面内型薄膜热电制冷器件的设计和性能优化提供了理论指导。

A02-173

晶格缺陷工程与界面设计协同提升 n 型 PbSe 热电性能

赵志龙, 郑杰, 邓骞, 昂然*

四川大学

无 Te 热电材料因其潜在的高性能和经济性在近年来受到广泛关注。然而, PbSe 等无 Te 热电材料的转换效率受到材料中电热输运耦合及器件设计中界面兼容性问题的限制。为解决上述挑战,本研究创新性地提出了基于 Cu 掺杂的晶格缺陷工程策略,并在优化热电性能的同时,设计了高可靠性的器件界面结构,显著提升了 n 型 PbSe 的综合性能。通过在 PbSe 基体中引入 Cu 掺杂,我们利用同步辐射和高分辨球差电镜表征技术观察到大量 Cu₂Se 半共格纳米沉淀相的生成。该纳米沉淀相在晶格中引入了有效的散射机制,从而降低了晶格热导率,同时通过优化载流子输运特性,显著提升了材料的 Seebeck 系数和功率因子。在此协同优化的作用下, n 型多晶 PbSe 材料实现了最高 zT 值~1.9。此外,为了解决热电器件中的界面稳定性和兼容性问题,我们开发了一种由 Ag/Co/PbSe 构成的高性能界面结构。高通量实验表明,该界面具有极低的接触电阻率(~10.9 μΩ·cm²),并在高温条件下表现出优异的化学稳定性和机械可靠性。这种界面设计成功地抑制了界面处的化学反应与扩散问题,使得热电模块在高温差(ΔT = 460 K)工作时仍保持良好的稳定性和高效性。在分段式热电模块测试中,该设计实现了~13.1%的高转换效率。本研究通过晶格缺陷工程和界面优化的协同设计,为提升 PbSe 基热电材料的性能提供了新的思路,同时有效促进了无 Te 热电材料在高效、稳定热电器件中的应用。该工作为低成本、高性能热电材料的进一步发展奠定了坚实的基础。

A02-174

异质界面和阳离子空位协同优化 Cu₂Se 热电材料的热电性能和稳定性

谷雪珂*

河南大学

Cu₂Se 是一种很有前途的热电材料,但其高浓度的空位 Cu⁺离子的长程迁移限制了其性能和稳定性。本研究将 Ge 引入到 Cu₂Se 基体中,以提高稳定性和热电性能。Ge 的加入在 Cu₂Se/Ge 界面上产生了肖特基势垒,阻止了 Cu⁺离子的长程迁移和 Cu⁺还原为金属 Cu。微观结构表征表明,铜元素的偏析发生了抑制,显著提高材料的稳定性。此外,Ge 的引入通过填充 Cu 空位和晶格取代来优化载流子浓度和迁移率,而且诱导的纳米级富锗析出,与晶界位错协同优化了晶格热导率。因此,由于电气的协同优化和热传递性能好,

材料的总导热系数大幅降低。在 823 K 时从 $0.76 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 到 $0.28 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, 从而获得了优异的 ZT 值 2.44, 与原始 Cu_2Se 样品相比, 提高了 114%。进一步的, 同时, 纳米弥散强化和晶粒细化提高了压缩强度提高了 4 倍, 为工程设备提供关键支撑。

A02-175

Zintl 热电材料的微观结构转变

蒋蒙*, 王连军, 张骥昊, 江莞

东华大学

热电材料为实现废热到电能的高效直接转换提供了独特途径, 但其本征脆性与低加工性严重制约了实际应用。本研究提出分级球磨策略, 通过调控 YbZn_2Sb_2 基热电材料的微观结构 (晶粒细化、位错密度提升及中等角度晶界构筑), 在保持优异热电性能的同时, 成功制备出无裂纹大尺寸圆片 (直径~20mm) 状及微米级 (边长~500 μm) 块体。并将该策略拓展至 AZn_2Sb_2 、 AMg_2Sb_2 、 ACd_2Sb_2 ($\text{A}=\text{Yb}, \text{Mg}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) 等系列 Zintl 化合物体系后, $\text{Yb}_{0.5}\text{Mg}_{1.3}\text{Zn}_{1.2}\text{Sb}_2$ 样品展现出 9.1 eV/atom 的预形成结合能与 $0.5 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 的低热导率。同时, 基于 n 型 $\text{Mg}_{3.1}\text{Nb}_{0.1}\text{Sb}_{1.5}\text{Bi}_{0.49}\text{Te}_{0.01}$ 构建的热电器件, 在 458 K 温差下实现超 10% 的能量转换效率并稳定运行 40 小时以上。该研究为破解热电材料力学性能与热电性能的协同优化难题提供了普适性的解决方案, 为新一代高可靠性热电器件的工业化应用奠定基础。

A02-176

约束热变形增强 p 型碲化铋材料的热电和机械性能

魏明旭¹, 陈全胜¹, 余健², 魏平¹, 赵文俞^{*1}, 张清杰¹

1. 武汉理工大学

2. 九江学院

碲化铋是目前唯一实现商用的近室温高性能热电材料, 但其独特的层状结构导致机械性能较差, 严重制约了该材料的应用。本研究发展了一种制备高机械性能碲化铋材料的高效约束热变形工艺, 系统研究了不同变形温度 (673 K-823 K) 对材料物相组成、微观结构、热电性能以及机械性能的影响。结果表明, 热变形对相组成几乎没有影响, 但会诱发动态再结晶显著削弱材料的取向织构, 同时在材料内部引入高密度位错。随着变形温度升高, (0001) 面取向因子从 0.91 降至 0.16, 且再结晶区域逐渐变多, 晶粒细化至约 5 μm 。热变形导致的类施主效应会显著降低电导率, 当变形温度较高时热回复效应可有效增大载流子浓度, 从而缓解功率因子的下降。变形温度为 773 K 的材料具有最高的功率因子~3.33 $\text{mW K}^{-2} \text{ m}^{-1}$ 和最低的晶格热导率~0.59 $\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, 并在 350 K 获得最大 ZT 值 1.1, 相比于区熔基体, 提升了 10 %。同时由于晶粒细化, 热变形材料的机械性能显著提升, 变形温度为 723 K 的材料获得最大维氏硬度 0.67 GPa, 与区熔基体相比提高了约 40%。该研究表明约束热变形工艺可以协同增强 p 型 Bi_2Te_3 基区熔铸锭的热电性能和机械性能。

A02-177

热辊压取向塑化多晶 Bi 半金属热电材料

陈孝徽, 高治强, 仇鹏飞, 陈立东, 史迅*

中国科学院上海硅酸盐研究所

无机塑性热电材料的发现为高性能柔性、异形热电器件的发展带来了新的研究方向。然而, 目前具有本征塑性的热电材料体系少, 且热电性能低于传统脆性热电材料。因此, 若能将传统高性能脆性热电材料转化为塑性材料, 有望拓宽塑性热电材料的种类, 实现高热电性能与良好塑性变形能力的共存, 具有重要的实际应用价值。多晶 Bi 半金属基热电材料具有良好的室温及低温性能, 但该体系易发生沿着 (0001) 的层间解理, 被普遍认为是脆性材料。本工作利用热辊压技术在多晶 Bi 中引入强烈的 (0001) 面择优取向, 抑制了解理断裂并降低滑移能垒, 从而改善了多晶 Bi 的塑性变形能力, 三点弯曲应变达 15% 以上,

与现有塑性热电材料相当。热辊压后的塑性 Bi 材料, 功率因子达 $27 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$, 是已报道多晶塑性热电材料的最高值, 我们用其制备出面内型柔性热电器件, 在 30 K 温差下最大归一化功率密度为 0.42 W m^{-1} , 优于大部分已报道的面内型柔性热电器件。

A02-178

Ag₂(S,Se,Te)基材料多尺度协同设计实现优异的热电性能和延展性

戴尧, 罗裕波, 杨君友*

华中科技大学

无机塑性热电材料因其突破传统无机热电材料的脆性瓶颈而备受关注, Ag₂(S,Se,Te)材料是其中较为新颖且颇具潜力的一类。本研究通过 Ag 位点 Na 合金化策略, 成功构筑了兼具高塑性、低热导率与优异热电性能的 Ag_{2-x}Na_xS_{1/3}Se_{1/3}Te_{1/3} 材料体系。实验表明, Na 掺杂通过引入晶格畸变与局部化学无序, 显著增强声子散射, 使热导率降至 $0.5 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ 以下, 同时通过调控载流子有效质量与迁移率优化电输运性能, 最终在 300-500 K 温度区间内实现 $7.4 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ 的高平均功率因子, 创该体系记录。材料在 300 K 和 500 K 时分别达到 0.50 与 0.84 的优异 ZT 值, 并保持超常塑性 (弯曲应变>15%, 压缩形变>50%, 拉伸断裂应变 26%)。进一步通过 EBSD 与 TEM 技术揭示了其变形机制, 证实{112}滑移面主导的位错滑移行为, 为材料的微观设计提供理论依据。本研究通过成分-结构-性能的精准调控, 为开发高性能无机塑性热电材料开辟新路径, 在余热回收与可穿戴器件领域展现广阔应用前景。

A02-179

“三明治”结构实现热电材料兼具优异室温 ZT 值和塑性

吴昊, 刘庆丰*

南京工业大学

柔性热电转化技术为利用人体余热发电并实现自供电可穿戴电子设备提供了可能, 在柔性电子领域展现出广阔的应用前景。塑性半导体材料因其固有的优异延展性和易于调节的电传输性能, 成为制备柔性热电器件的理想材料。然而, 如何兼顾优异的室温热电性能和塑性变形能力仍是一大难题, 尤其是对于 N 型塑性半导体。基于此难点, 我们设计了一种新型的 N 型塑性 Ag₂(S, Se)-Ag₂Se 三明治结构的热电薄膜。薄膜具有不同的功能层, 其中的 Ag₂(S, Se)核心层提供了塑性变形能力并具有极低的热导率, 而外延生长的 Ag₂Se 壳层因其高度取向的结构表现出优异的电传输性能。这种不同功能层组成的复合结构使薄膜在室温范围内实现了创纪录的 ZT 值(323 K 时为 0.91), 在 N 型塑性半导体中表现出色, 同时薄膜保持了优异的柔韧性。此外, 基于材料制作的柔性面内器件在 50 K 的温差下的输出功率密度达到 26.5 W m^{-2} , 展现出其在可穿戴电子领域的巨大应用潜力。更为重要的是, 这种新颖的结构设计策略为缓解无机半导体中热电性能与延展性之间的妥协提供了新的思路。

A02-180

固相法制备全赫斯勒合金合金 Fe₂TiSi 块体材料及其热电磁性能

梁栋¹, 余健², 叶先峰¹, 赵文俞^{*1,3}

1. 武汉理工大学

2. 九江学院

3. 佛山仙湖实验室

全赫斯勒合金因其丰富的本征热电耦合效应和优异的力学性能在热电领域引起了广泛关注。理论计算显示全赫斯勒合金合金 Fe₂TiSi 是一种极具应用潜力的高性能热电材料, 但由于其亚稳态特性, 制备块体材料极其困难。本研究发展了一种电弧熔炼-球磨-放电等离子烧结-退火热处理的固相合成工艺, 首次成功制备出了 Fe₂TiSi 块体材料, 并系统研究了其热电磁性能。结果表明, 当退火温度达到 823 K 时, 可以获

得由大量 $L2_1$ 有序结构、少量 $D0_3$ 型无序结构及微量第二相 $FeTiSi$ 组成的 Fe_2TiSi 块体材料。 $D0_3$ 型结构无序导致 Fe_2TiSi 块体表现出弱铁磁性行为，且居里温度随结构无序程度的增加而逐渐升高（386 K 增加到 441 K），同时， $D0_3$ 型无序结构会大幅度降低材料的 Seebeck 系数较小（最大值仅为 $9 \mu V/K$ ），导致功率因子在 600 K 仅为 $20.43 \mu W K^{-2} m^{-1}$ 。值得注意的是，当退火温度升高到 923 K 时， Fe_2TiSi 块体材料的晶格热导率仅为 $2.8 W K^{-1} m^{-1}$ ，远低于经典的 Fe_2VAl 体系。

A02-181

Se 掺杂增强准一维范德华晶体 Ta_2PdS_6 的热电性能

任童威，瞿三寅，仇鹏飞，明辰，史迅*

中国科学院上海硅酸盐研究所

最近，准一维范德华晶体 Ta_2PdS_6 被报道为一种很有前途的热电材料，具有较高的热电功率因数。据报道， Ta_2PdS_6 多晶体的功率因数 (PF) 值仅为 $0.3 \mu W cm^{-1} K^{-2}$ 左右，比单个 Ta_2PdS_6 晶须的 PF 低约两个数量级。然而，尚未研究通过元素掺杂来调节 Ta_2PdS_6 多晶热电性能。在本研究中，我们通过固相反应和放电等离子体烧结制备了一系列 Se 掺杂的 Ta_2PdS_6 多晶块体，系统地研究了 Se 掺杂对 $Ta_2Pd(S_{1-x}Se_x)_6$ ($x = 0, 0.02, 0.05$ 和 0.07) 多晶块状材料的相组成、电荷传输特性和热电性能的影响。在 S 位点掺杂 Se 以增加载流子浓度和迁移率后， $Ta_2Pd(S_{0.93}Se_{0.07})_6$ 的电导率显著增强，而泽贝克系数略有降低，与原始的 Ta_2PdS_6 相比，功率因数显著提高。因此，当掺杂含量 $x = 0.07$ 时， $Ta_2Pd(S_{0.93}Se_{0.07})_6$ 在 700 K 处的峰值 ZT 为 0.29，是原始 Ta_2PdS_6 的两倍多。

A02-182

Anomalous Nernst Thermoelectric Effect in Polycrystalline Co_2MnAl Heusler magnets

Sheng Qian, Mengzhao Chen, Tiejun Zhu, Chenguang Fu*

Zhejiang University

Topological magnets, in which electronic band topology is intertwined with spin configurations, have demonstrated extraordinary transport phenomena that are highly promising for transverse thermoelectric applications. In this talk, I will share our results on the anomalous Nernst effect and transverse thermoelectric properties in polycrystalline Co_2MnAl -based topological Heusler magnets. By synergistically optimizing atomic ordering and fine-tuning the Fermi level through Si-for-Al substitution, we achieved an anomalous Nernst thermopower S_{yx} of $4.9 \mu V/K$ at 300 K. Concurrently, the anomalous Nernst conductivity increased from near zero to $1.64 A m^{-1} K^{-1}$, which is comparable to the previously reported single-crystalline Co_2MnAl . The development of high-performance polycrystalline topological magnets paves the way for the potential application of topological magnets for transverse thermoelectric energy conversion.

A02-183

用于自供电设备和多级信息加密的高质量 $SnSe$ 薄膜

余方媛，唐尊前，张倩，曹峰*

哈尔滨工业大学（深圳）

随着半导体技术不断迈向微型化与智能化，性能优良的热电薄膜材料在自供电器件及高灵敏温度传感领域展现出广泛的应用潜力。本工作采用磁控溅射法制备了高结晶质量的 a 轴取向 $SnSe$ 薄膜，系统研究了基底温度对其晶体取向、载流子迁移率及热电性能的影响。结果表明，将基底温度优化至 673 K 能够显著提升薄膜的晶粒尺寸和结晶度，从而有效提高载流子迁移率，实现电导率与塞贝克系数的平衡，使功率因子达到 $346 \mu W m^{-1} K^{-2}$ (620 K)。基于该高性能 $SnSe$ 薄膜构建的温度响应传感阵列实现了多级信息加密，具备一定的密码保护和安全通信能力。同时，采用六条 $SnSe$ 热电腿组成的热电发电机在温差 50 K 时

最大输出功率密度达到 9 W m^{-2} ，表现出较好的能量转换效率。该研究不仅加深了对 SnSe 薄膜热电性能调控的理解，也为高效集成热电器件的开发提供了新的思路，具有一定的科研意义和应用价值。

A02-184

Nb_{0.86}Hf_{0.14}FeSb 热电材料的原位抗氧化涂层研究

沈琦淏，柏胜强*，陈立东

中国科学院上海硅酸盐研究所

半赫斯勒材料具有优异的热电性能、机械性能和热稳定性，在高温热电发电等领域有重要应用前景，但高温含氧环境下材料的严重氧化问题阻碍了实际应用。本文提出包埋渗铝法在 Nb_{0.86}Hf_{0.14}FeSb (NHFS) 表面构建原位抗氧化涂层的策略，通过扩散在 NHFS 材料表面生成含多种铝化物的原位致密层，阻断了环境中氧向材料内部的扩散通道。氧化实验结果表明，含涂层的样品在 973 K 空气中老化 30 天后，样品增重率较无涂层组降低 99%。并且，该涂层与基体材料结合良好，在整个老化测试过程中保持结构完整，无开裂或剥落，含涂层的 NHFS 材料的电学性能未出现明显衰减，说明包埋渗铝法制备的原位涂层显著提升了 NHFS 基半赫斯勒材料在空气中的热稳定性，为其在含氧环境下的实际应用奠定了基础。

A02-185

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，聂晓蕾，魏平，赵文俞*，张清杰

武汉理工大学热电磁课题组

高性能热电薄膜的发展是突破基于帕尔贴效应的面内散热技术瓶颈的关键。本工作提出将磁性层插入到热电层之间，并制备出一系 p 型 Bi_{0.5}Sb_{1.5}Te₃(BST)/xFe-BST 树脂 (x 是层数 0, 1, 2, 3, 4, Fe-BST 指 Fe 纳米粒子层与 BST 层的复合) 多层膜。结果显示，随着 x 的增大，BST/xFe-BST 树脂多层膜的电导率大幅度提升而 Seebeck 系数下降的趋势被抑制，表明 Fe 层提供了载流子高速传输通道从而提升了迁移率，且磁阻测试表明铁磁性 Fe 层产生额外的层间磁性散射（自旋相关散射和弱局域钉扎效应）而抑制了 Seebeck 系数的下降。因此与 BST 树脂多层膜相比，BST/Fe-BST 树脂多层膜的最大功率因子 ($2.29 \times 10^{-3} \text{ W K}^{-2} \text{ m}^{-1}$) 提升了 139%，最大制冷温差提升了 1.2 倍。本工作研究了磁性层和热电层的耦合作用并提出了热电磁耦合新效应，为高性能热电薄膜的制备提供了思路。

A02-186

熵工程协同增强钛酸锶基陶瓷的热电性能

曹鹏，姚杰，王洪超*，王春雷

山东大学

钙钛矿型钛酸锶 (SrTiO₃) 基陶瓷作为 n 型热电材料展现出巨大潜力，但如何在保持优异电学性能的同时降低晶格热导率仍具有挑战性。熵工程为实现电热输运协同优化以提升钛酸锶基陶瓷热电性能提供了新思路。本研究通过 Goldschmidt 容许因子、离子半径差和热力学计算，先设计并成功合成了构型熵在 8.02-10.55 J mol⁻¹ K⁻¹ 内的单相立方结构的 Sr_{0.9-x}Ba_xLa_{0.1}Ti_{0.9}Nb_{0.1}O_{3-δ} 样品。研究表明，氧空位缺陷和高熵效应保持的高晶体对称性共同促成了优异的电输运性能，最终获得 602.1 μW m⁻¹ K⁻² 的高功率因子。通过构型熵调控增强的点缺陷和局域无序散射，特别是质量涨落效应，使晶格热导率显著降低。其中 x = 0.5 样品在 923 K 时获得最低晶格热导率 2.93 W m⁻¹ K⁻¹。通过熵工程协同优化，x = 0.2 样品在 973 K 时获得最高热电优值，ZT = 0.15，对应最佳构型熵范围为 9-10 J mol⁻¹ K⁻¹。在以上研究的基础上进一步调控构型熵，设计并成功合成了构型熵在 1.05-4.43 J mol⁻¹ K⁻¹ 内的单相立方结构的 (Sr_{1-4x}La_xNd_xDy_xY_x)TiO₃ 样品，实验结果显示，该组样品获得 1213 μW m⁻¹ K⁻² 的最高功率因子，较上一组样品提升 2 倍以上。通过增加的点缺陷，主要是应力场波动，材料在 973 K 时晶格热导率降至 3.0 W m⁻¹ K⁻¹，与上一组分相当。最终，x = 0.02-0.03

样品在高温区获得 0.2 的 ZT 峰值，对应构型熵值处于 $3.24\text{--}4.43\text{ J mol}^{-1}\text{ K}^{-1}$ 。此外，两组样品的维氏硬度都在 6 GPa 以上。因此，熵工程是优化钛酸锶基陶瓷热电性能的有效策略，为同时具备优良电输运性能和低晶格热导率的热电氧化物材料设计开辟了新途径。

A02-187

含可移除侧链自由基聚合物的热电性能优化

徐戆，钟飞，李慧*，陈立东

中国科学院上海硅酸盐研究所

有机自由基聚合物通常具有独特的电子结构和自旋特性，在电极材料、磁性材料和量子信息技术等领域中表现出巨大的应用潜力。但这类聚合物通常空气敏感、稳定性差，并且固有电导率较低，热电性能无法与传统聚合物热电材料相媲美。考虑到聚合物热电材料的电荷传输和稳定性均与侧链结构密切相关，我们提出含可移除侧链自由基聚合物的合成策略以提升其电输运性能。

本工作以醌式苯并[1,2-c;4,5-c']双噻二唑（BBT）为主要构筑单元，合成了一系列含可移除硅烷侧链的自由基聚合物 PBBTSi-T、PBBTSi-2T 和 PBBTSi-TVT，通过三氟甲烷磺酸处理一步实现了“去侧链+掺杂”的效果，获得了不含侧链的聚合物 PBBT-T、PBBT-2T 和 PBBT-TVT，并具有较高的掺杂效率。结果表明，PBBT-2T 在室温下的电导率高达 163 S cm^{-1} ，归因于无侧链的 PBBT-2T 在酸掺杂后具有较高的载流子浓度和高度致密的微观结构。而且，电导率和功率因子随温度升高而增大，最大 σ 和 PF 分别达到 194 S cm^{-1} 和 $28.4\text{ }\mu\text{W m}^{-1}\text{ K}^{-2}$ 。此外，此类聚合物薄膜表现出优异的热稳定性和空气稳定性。这项工作为自由基聚合物热电材料的结构设计和性能优化提供了一个新思路。

A02-188

聚酰亚胺复合增强 Cu_2S 材料的热电性能

张一鸣，葛振华*

昆明理工大学

硫化亚铜是一种原料来源丰富、成本低、毒性低的中温区热电材料。硫化亚铜由于具有超离子导体的特性而具有热电使用潜力。然而铜离子在高温外场的作用下会发生定向长程迁移，容易导致材料的失效。本研究将聚酰亚胺(Polyimide)引入到 Cu_2S 基体中，通过 X 射线衍射和扫描电子显微分析表征了聚酰亚胺在 Cu_2S 基体中的存在形式以及分布状态。得益于聚酰亚胺的本征低热导率，基体内重熔的第二相作为声子散射中心，有效降低了材料的热导率。此外，聚酰亚胺可作为宏观离子阻挡层阻碍铜离子的长程迁移以弱化铜离子迁移对于载流子传输的阻挡作用，因此复合材料的电输运性能获得提升。此外，由于铜离子长程迁移的抑制作用，聚酰亚胺作为宏观离子阻挡层隔绝了每个部分的实际电压，大大提高了 Cu_2S 的电稳定性。基于对电输运性能和热性能的优化， $\text{Cu}_2\text{S}+1\text{ wt\% Polyimide}$ 的样品在 773K 时最终获得的 ZT 峰值为 1.31。这项研究表明，有机绝缘聚合物可以提高材料热电性能并作为铜离子绝缘阻挡层提高 Cu_2S 的稳定性，该结论能够为其他铜基热电材料的性能优化提供借鉴。

A02-189

通过微结构工程提升共轭聚合物的热电性能

鲁凯晴，林悦

功能晶体与器件全国重点实验室，中国科学院福建物质结构研究所，福建，福州 350002

在共轭聚合物中同时实现高电导率和大塞贝克系数仍然是一个关键挑战，这源于其混合晶态-非晶态形貌所导致的固有低电荷迁移率。我们将极性聚噻吩 p(g32T-T)作为模型体系，采用离子交换掺杂法，协同提升了其在有序区域和无序区域的电荷传输能力。该方法实现了 $63\text{ }\mu\text{W m}^{-1}\text{ K}^{-2}$ 的功率因子，这是极性聚噻吩热电性能的创纪录提升。然而，过度掺杂会诱导分子堆积从边缘朝上（edge-on）重新取向为面朝上

(face-on), 尽管增强了域间传输, 却损害了域内电荷迁移率。为了定量分析这些矛盾, 我们引入了一个基于活化能 ($W\gamma$) 的定量分析框架 (该活化能源自加权迁移率), 以系统地分析域间传输。

A02-190

无机 Ag_2Se 三维导电网络填充有机 PVDF 制备柔性自支撑复合热电薄膜

徐子硕¹, 胡悦娟¹, 胡宇晨^{1,2}, 肖先锋^{1,2}, 姚琴*¹

1. 中国科学院上海硅酸盐研究所
2. 上海科技大学物质科学与技术学院

可穿戴设备、微电子器件和物联网等领域应用的快速增长, 对自支撑柔性薄膜热电材料提出了迫切需求。本研究通过滴涂法结合热处理技术成功制备出柔性自支撑 (无基底) PVDF (聚偏氟乙烯)/ Ag_2Se 复合薄膜。研究发现, 当滴涂成型的 PVDF/ Ag_2Se 复合薄膜被加热至 PVDF 熔点以上时, 薄膜中原本分散的细小 Ag_2Se 晶粒长大并相互连接, 形成三维导电网络以提升载流子迁移率, 而熔融态 PVDF 则能有效填充网络空隙从而增强柔性和机械强度。热处理后复合薄膜的电导率和塞贝克系数均显著提升, 其中质量比 1:4 的 PVDF/ Ag_2Se 复合材料在室温下的功率因子达到 $488.8 \mu\text{W m}^{-1} \text{K}^{-2}$, 处于 Ag_2Se 基或 PVDF 基柔性自支撑复合薄膜热电性能的领先水平。弯曲测试表明该复合薄膜具有优异柔韧性, 1000 次弯曲循环后电导率仅下降 10%。基于此材料组装的 5 腿热电器件在 30 K 温差下实现了 1.75 W m^{-2} 的输出功率密度。本研究为协同提升有机-无机复合薄膜的热电性能和自支撑性提供了创新策略。

A02-191

电沉积方法制备可调孔隙率 Ag_2Se 柔性网络及其热电性能研究

肖力铭, 张倩*

哈尔滨工业大学 (深圳)

随着物联网的快速发展, 柔性电子器件需求激增。然而, 当前多数柔性器件难以兼顾持续稳定的能力供给与良好柔性的适配性, 因此, 开发兼具本征弹性与优异热电性能的高性能热电材料成为迫切需求。已有研究报道了基于两步浸渍法构建的 Ag_2Se 三维网络结构材料, 该材料具有本征弹性与高热电性能, 然而其孔隙率的调控困难与工艺上原料的浪费问题限制了其微结构调控、性能提升与实际应用的可行性。基于以上, 本研究在两步浸渍法基础上引入电沉积工艺, 成功构建了可调控孔隙率的三维 Ag_2Se 热电网络。该方法实现了孔隙率在 65%-99% 范围内的连续调控, 单步电沉积便可形成高互联性的多孔网络, 避免多次化学镀的缺陷累积与原料浪费。所得网络在孔隙率 91% 时达到热电性能与力学性能的平衡, 电导率提升至 35 S cm^{-1} , 塞贝克系数保持在约 $-135 \mu\text{V K}^{-1}$ 。同时, 该材料有较好的应变稳定性, 800 次循环电阻仅上升 6.4%。器件在 40 K 温差下功率密度可达 $181.5 \mu\text{W cm}^{-2}$ 。基于该材料构建的原型智能热电腕带, 在人体手腕测试中可持续输出 0.7 mV 电压, 为可穿戴自供电系统提供了高性能材料新范式。

A02-192

具有热电制冷和电磁屏蔽功能的柔性碳/铁电/热电 (C/FE/TE) 复合薄膜

孙成伟, 罗裕波, 杨君友*

华中科技大学

本工作介绍了一种具有热电制冷和电磁屏蔽功能的柔性碳/铁电/热电 (C/FE/TE) 复合薄膜。该薄膜由碳层、铁电层 (PZT/PVDF-TrFE) 和热电层 ($\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ 或 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.5}\text{Se}_{0.5}$) 逐层组装而成, 其热电层的电学性能可通过铁电层的极化进行调控。对 $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ 和 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.5}\text{Se}_{0.5}$ 分别获得了最大功率因子 12.7 mW/cmK^2 和 5.3 mW/cmK^2 。利用该薄膜制备的柔性热电制冷器件在 300 K 下实现了 1.08 K 的净温差。此外, 由于自由空间与 C/FE/TE 的阻抗失配、碲化铋合金和碳层引起的传导损耗以及 PZT/PVDF-TrFE 中界面极化等因素, 该复合薄膜在 8.2-12.4 GHz (X 波段) 的频率范围内实现了最大平均屏蔽效率 32.0 dB 的优异电磁屏蔽

性能。该研究为电子设备的散热和电磁辐射防护提供了一种有效解决方案,有望确保电子设备的正常运行并减少对环境和人体健康的影响。

A02-193

基于超声焊接的柔性热电器件热增强基板设计

张梓楠, 王雨婷, 杨东旺*, 鄢永高, 唐新峰

武汉理工大学

柔性热电器件(f-TEDs)可实现热能与电能直接转换,在人体热收集和个人热管理方面具有巨大的潜力。采用聚酰亚胺(PI)基板的传统 f-TEDs 在贴合人体皮肤复杂曲面方面面临挑战,会产生空气间隙,从而导致接触热阻增加。因此,本研究设计了一种层压基板,通过超声焊接(优化超声频率 30 kHz、振幅 50%、焊接时间 6 s),将 PI 膜与导热硅胶垫集成,其热导率较 PI 膜显著提高 23.2 倍,同时提升了皮肤贴合性和穿戴舒适性。与未采用层压基底的柔性热电装置相比,优化后的柔性热电装置在恒定热源条件下的输出性能提升了 47%,从 0.38 mW 提升至 0.56 mW。优化后的柔性热电装置在 25 K 温差下输出功率达 5.02 mW,功率密度为 $313.7 \mu\text{W cm}^{-2}$,且性能稳定,经过 1000 次弯曲循环后电阻变化率仅为 3.03%。此外,我们开发了一套智能热管理系统,在 31.4°C 环境中可实现超 6°C 制冷,在 28°C 环境中可实现超 10°C 制热,在各类身体活动场景下均展现出优异的制冷和制热性能。这对推动柔性热电装置在智能可穿戴设备、个人热管理、环保及节能领域的应用具有重要意义。

A02-194

基于 Co 间隙掺杂的 $\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 多功能固态热电传感器的设计与性能研究

赵楚轲¹, 田邦州¹, 昂然^{*1,2,3}

1. 四川大学原子核科学技术研究所, 辐射物理及技术教育部重点实验室
2. 四川大学新能源与低碳技术研究院
3. 四川大学物理学院

$\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 基热电材料因其优异的热电性能,在发电和制冷领域取得了显著进展。然而,其在固态传感应用方面的研究仍然较为稀缺。探索适用于传感器领域的固态热电材料,不仅为跨学科应用提供了新的方向,还为热电材料的功能拓展带来了更多可能性。本研究采用间隙 Co 掺杂策略,成功提升了 n 型 $\text{Mg}_{3.2-x}\text{Co}_x\text{Sb}_{0.5}\text{Bi}_{1.49}\text{Te}_{0.01}$ 在低温区的热电性能。通过高分辨微观结构表征,确认了 Co 原子的间隙掺杂行为及其对材料电子结构的影响。Co 间隙掺杂提高了载流子迁移率,显著改善了材料的电导率,功率因子得到大幅提升。同时,多尺度缺陷的引入有效降低了晶格热导率,最终实现了较高热电优值。此外,材料表现出优异的显微硬度、抗压强度和应变能力,大幅优于多数传统近室温热电材料,完全满足实际器件加工和使用需求。基于 $\text{Mg}_{3.19}\text{Co}_{0.01}\text{Sb}_{0.5}\text{Bi}_{1.49}\text{Te}_{0.01}$ 材料的高热电性能和优异机械特性,我们设计了一种适用于低品位温差环境的多级温差发电装置,并进一步探索其在室温附近固态传感应用中的潜力。依托于其热电 Seebeck 效应,所开发的热电传感元器件在施加温差与输出电压之间展现出快速、实时的响应特性。测试结果显示,该传感器在呼吸监测、手指触摸、热辐射、红外激光照射以及液体接触刺激等应用场景中均表现出卓越的输出信号响应能力和稳定性,充分验证了其在多功能固态传感领域的实用价值。本研究不仅拓宽了 $\text{Mg}_3(\text{Sb, Bi})_2$ 基热电材料的多功能应用范围,还展示了其在固态热电传感领域的潜在能力,为跨学科前沿研究提供了新的设计思路与技术路径。这项作为开发集成化、智能化和高性能热电传感器件奠定了坚实基础。

A02-195

模块化组装的自修复柔性热电器件

孙晓龙*

武汉大学

柔性热电器件便于热能与电能直接转换, 契合可穿戴电子设备及个人热管理需求。然而, 当下这类器件功能模块拓展不足, 难以适配多样的能量收集热源, 也难以组装以满足电器特定的功率要求。而且, 现有器件无法在堆叠以增强热电制冷性能的同时, 保持灵活性与自修复能力。文中介绍了一种方法, 选择性地将液态金属电极用掺杂碳纳米管的自修复材料封装, 该材料热导率提高, 显著改善了热电腿的热传递, 进而最大化能量转换效率。该装置实现了 $3.14 \mu\text{W cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$ 的归一化功率密度, 为自修复热电器件树立了标杆。得益于自修复材料和液态金属的应用, 该装置既具备自修复能力, 又可模块化组装, 大幅拓展了柔性热电装置在可穿戴发电和制冷领域的应用场景。

A02-196

光模块热电控温系统的低阻化设计与热-电耦合特性研究

刘尊, 孙彤, 刘泽宇, 申利梅*

华中科技大学

高速光模块作为光通信网络的核心器件之一, 其发展对 5G 通信、电子、大数据、互联网行业的影响至关重要, 光模块中的微型热电制冷器作为光芯片的控温元件, 对确保光芯片的输出稳定性、可靠性具有重要作用。然而目前微型热电制冷器应用于光模块中功耗较大, 限制光模块的发展。因此, 提高微型热电制冷期间的制冷效率十分重要。

为准确评估热电制冷器件在光模块中的工作状况, 本研究建立了光模块的热-电仿真模型, 研究设计了 $2.6\text{mm} \times 2\text{mm} \times 0.8\text{mm}$ 的微型热电制冷器, 并搭建实验台架测试其制冷温差, 得出仿真与实测性能最大仅偏差 5%, 基于该模型分析了光模块的散热瓶颈, 探究了组件界面材料层、导热胶层、不锈钢管座等传热路径对散热的影响, 得出不锈钢管座是光芯片散热路径中的主要瓶颈。研究表明, 通过添加石墨烯层改变热流路径可优化散热, 且石墨烯层的最优厚度为 $20 \mu\text{m}$, 该厚度下可在光模块壳温 75°C 时将热电制冷器的制冷效率提升 13.6%。此外, 探究了不同环境参数(壳温、换热系数)、热电材料物性参数对制冷效率的影响, 得出热电材料的电导率是影响制冷效率的主要参数, 热导率的影响最小。本研究对拓展微型热电制冷器件应用在光模块中的应用具有重要的意义。

A02-197

碲化铋/碲化铋同质分段热电发电器件

王民^{1,2}, 张强^{1,2}, 谈小建^{1,2}, 蒋俊^{*1,2}

1. 中国科学院大学宁波材料技术与工程研究所

2. 中国科学院大学

近室温热电技术是实现大规模低品位工业余热 ($300\text{--}650 \text{ K}$) 高效回收的关键, 基于 Bi_2Te_3 的热电发电器件一直是低品位余热回收的重要选择, 但窄带隙导致的双极效应限制了其使用温区的进一步拓展。分段热电器件的发展为解决上述问题提供了有效途径, 但热膨胀失配导致的界面应力问题仍严重制约着器件服役稳定性。本研究基于 Sb_2Te_3 较宽的带隙以及与 Bi_2Te_3 相近的热膨胀系数, 提出构建 $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 同质分段器件, 实现服役温区拓宽并保持稳定性。由于其过高的载流子浓度和热导率, Sb_2Te_3 的热电优值 ZT 较低。本研究通过构建高密度孪晶界和位错以显著提高机械强度, 并通过 S 取代 Te 位点, 减少烧结过程中的 Te 析出相从而促进孪晶与位错的形成, 使室温晶格热导率降低 45% 左右; 此外, Cd 在 Sb 位点掺杂可提高态密度有效质量并拓宽有效带隙, 最终 ZT 值达 $1.1@650\text{K}$; 抗压强度和抗弯强度也分别提高到 197 MPa 和 56 MPa。设计集成的 17×17 同质分段器件转换效率在 350 K 温差条件下达到 9.3%, 并在约 200 小时热持久和 50 热循环测试中保持了较高的稳定性。本工作为拓展碲化物热电器件使用温区和提高服役稳定性提供了可行方案。

A02-198

余冷回收型热电制水装置的热-电-质耦合优化及性能验证

褚乐遥, 王定, 谭余波, 谈学志, 申利梅*

华中科技大学

全球约 40 亿人口每年至少经历一个月严重缺水, 干旱地区及特殊场景的水资源获取更面临严峻挑战。为解决极端场景的饮水问题, 本研究开发了一种基于热电制冷的高效空气取水系统。结合创新余冷回收设计, 突破了现有装置体积大、能效低及工况适应性差等技术瓶颈。

构建了精准描述制水过程热-电-质转换的理论模型。基于此模型, 创新性地提出并设计了一款高度集成的余冷回收热电制水装置。使用 COMSOL 仿真技术, 优选 TEC1-19906 型热电片作为核心制冷元件, 对比不同形状冷端翅片的温度分布, 优化设计出更有利于换热和集水的斜翅片结构, 设计工况下其传热量比普通平直翅片高 4 W。此外, 搭建了实验测试台架, 获得不同工况下装置性能。在环境温度为 30 °C, 相对湿度为 80% 的工况下, 装置最大产水速率为 28.6 g/h。余冷回收量最高可达到 221.8 W。存在使装置产水率最大的最优 TEC 输入电压, 且相对湿度一定时, 随环境温度升高产水速率增大, 环境温度由 10 °C 升高到 30 °C 时, 产水速率提升 130.6%, 比能耗降低 60.5%。

本研究提出的余冷回收热电制水装置, 其轻量化与高效化特性, 可有效拓展至野外生存、应急救援、士兵野战等场景, 对基于热电制冷的空气取水技术的推广使用具有一定指导意义。

A02-199

一步烧结 PbTe/Bi₂Te₃ 分段热电器件中接触层优化研究

温林茂, 张倩*

哈尔滨工业大学(深圳)

通过将不同温区性能优异的热电材料进行组合, 热电器件分段设计显著提高了器件的平均 ZT , 从而有效提升了器件输出性能。在分段设计中, 合理的接触层材料选择对于实现器件高性能、提高可靠性及简化制备工艺具有重要意义。本工作通过相图辅助筛选与实验验证相结合, 开发出了与 p 型热电材料 PbTe 和 (Bi,Sb)₂Te₃ 均具备热力学稳定、低接触电阻以及热膨胀匹配性的 TiTe₂ 接触层材料。将 TiTe₂ 作为通用接触层, 分别应用于 p 型分段器件冷端、热端以及不同热电材料的中间界面, 实现了 PbTe/(Bi,Sb)₂Te₃ 分段热电单臂的一步烧结。制备的分段单臂器件在 450 K 温差下实现了 15.3% 的最大热电转换效率与 1.77 W/cm² 的最大输出功率密度。同时, 在 50 h 的服役过程中性能衰减小于 2%, 展现出优异的热电性能与长期稳定性。

A02-200

碳纳米管复合热电材料及智能建筑应用

丁招福, 梁丽荣, 陈光明*

深圳大学

热电材料作为一种能够实现热能与电能直接相互转换的功能材料, 在能量收集与传感等领域具有独特的应用价值。近年来, 以碳纳米管为基础的热电材料在复合材料体系研究中取得了显著进展。另外, 随着智能建筑技术与物联网的快速发展, 基于聚合物复合热电材料的智能建筑系统展现出广阔的应用前景。本文围绕碳纳米管/聚合物复合热电材料的设计制备与性能优化, 重点探讨了其在构建智能建筑的两个应用探索: 1) 通过开发高性能复合热电材料, 构建了兼具阻燃和耐高温性能的超快速火灾报警系统, 实现了建筑火灾的远程实时监测与智能预警; 2) 采用生物基聚合物填充结合创新器件设计, 开发了高效建筑热电能量收集系统, 并将其与火灾预警功能集成, 为智能建筑的能源收集与安全防护提供了新的思路。

A02-201

基于填充八面体和三棱柱空隙设计 PbTe 的新型高性能热电材料

王顺福*

河南大学

PbTe 是一种优异的热电材料, 具有较低的晶格热导率和较大的塞贝克系数被广泛研究。目前 PbTe 的实验研究表明 P 型的 zT 值能达到 2.7, n 型只能达到 1.5, 提高 n 型热电性能仍然面临巨大挑战。PbTe 的 NaCl 相可以看成一层层 PbTe_{6/3} 八面体堆叠构成, 我们设计出一种 PbTe_{6/3} 八面体和 PbTe_{6/3} 三棱柱交替层组成的 P63/mmc 相。结合第一性原理计算, P63/mmc 相表现出优异的力学、热学和动力学稳定性, 且展现出较小的凸包距离而有望在实验中合成出来。接下来, 我们计算了 P63/mmc 相的晶格输运性质和电输运性质。证实 PbTe 的热电性质可以通过晶体结构工程进行调控, 使 NaCl 相的各向同性转变为各项异性。最终实现室温下 0.59 W/mK 的超低晶格热导率, 调控热电优值在高温下 n 型和 p 型均可达 2.5。本工作通过改变阳原子占据不同层空位堆叠设计出一种 PbTe 新结构, 为高性能热电器件的优化提供了新思路。

A02-202

基于热-电-力多场耦合的 Bi₂Te₃基热电发电器件阻挡层设计苗丽娅^{1,2}, 张强^{*1,2}, 谈小建^{1,2}, 蒋俊^{1,2}

1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所

2. 中国科学院大学

热电技术可实现热能与电能直接相互转换, 在工业余热回收领域具有重要应用潜力。然而, 阻挡层材料失效会严重制约热电发电器件的稳定可靠运行。以 Bi₂Te₃ 基器件为例, 通常采用金属 Ni 作为阻挡层, 但在高温下与 Bi₂Te₃ 的持续反应会导致界面劣化与器件失效。针对该问题, 本文提出一种结合相图预测、热膨胀匹配、电阻率评估与制备可行性分析的协同筛选策略, 系统探究热电材料阻挡层构建原则。研究发现, Ni₂SbTe₂ 和 NiTe₂ 分别有望与 p 型 (Bi,Sb)₂Te₃ 和 n 型 Bi₂(Te,Se)₃ 形成热稳定性优良、界面电阻低、力学强度高的理想界面。进一步采用放电等离子烧结 (SPS) 技术实现了 Ni₂SbTe₂/(Bi,Sb)₂Te₃ 和 NiTe₂/Bi₂(Te,Se)₃ 界面的一步成型, 所得界面结合强度达 ~10 MPa, 且界面材料热膨胀系数匹配良好, 有效抑制了残余热应力积累; 电学测试显示界面接触电阻低至 4 $\mu\Omega\text{ cm}^2$ 。基于此制备的发电器件在 230 K 温差下实现了 7.1% 的转换效率, 经 200 小时热循环后性能无明显衰减, 呈现了优异的稳定性。该工作为碲化铋基温差发电器件阻挡层材料设计与筛选提供了有效方案。

A02-203

采用取代能筛选 Ag₂Se 基热电制冷器件的扩散阻挡材料赵世原¹, 史晓磊², 周琦¹, 张忠玮¹, 梁继升¹, 潘政牛¹, 朱思靖¹, 李梦², 陈文艺², 陈俊良³, 高杰³, Tomohiro Sato⁴, 苗蕾^{*1}, 陈志刚²

1. 广西大学

2. 昆士兰科技大学

3. 桂林电子科技大学

4. 日本 SINTER LAND INC.

扩散阻挡材料 (DBM) 能有效阻止热电材料与电极之间的相互扩散和化学反应, 同时确保器件在长期运行中界面接触电阻低且机械结合牢固。传统的基于 DFT 计算的 DBM 筛选方法计算量较大, 本项目团队基于纯金属与大多数金属硫族化合物 (Ag₂Q 和 Cu₂Q, Q = S, Se, Te) 之间的置换反应特性, 提出采用计算效率更高的取代能 (E_{Sub}) 替代复杂的界面反应能 (E_{IR}) 的筛选策略。以 n 型 Ag₂Se 材料为研究对象, 实验观测到的 DBM/Ag₂Se 界面反应行为与 E_{Sub} 计算结果一致。通过结合 E_{Sub} 与迁移能垒 (E_{Mig}), 我们快速筛选出 Ni 作为 Ag₂Se 的扩散阻挡材料。Ni/Ag₂Se 接头在 30 天的热时效过程中保持较低的接触电阻率和较高的结合强度。制备的 7 对 Ag₂Se/MgAgSb 器件在热端温度为 350 K 时, 最大制冷温差达到 68 K, 这一性能超过基于 PbSnS₂、PbTe、SnS 和 CdSb 的热电制冷器件, 且与先进的 Ag₂Se/Bi₂Te₃ 器件相当。此外, Ag₂Se/MgAgSb 器件的最大制冷温差在长期通电循环测试后几乎无衰减, 显示出优异的性能稳定性。

A02-204

AgInSe₂ 合金化提升(Bi, Sb)₂Te₃ 的热电和机械性能并拓展人机交互功能林子健^{1,3}, 李瑞恒^{1,3}, 昂然^{*1,2,3}

1. 四川大学原子核科学技术研究所, 辐射物理及技术教育部重点实验室, 中国, 成都 610064
2. 四川大学新能源与低碳技术研究所, 中国, 成都 610065
3. 四川大学物理学院, 中国, 成都 610064

随着物联网、智能机器人和智能生物医学设备的快速发展, 高性能热电设备的需求持续增长。这类设备能够高效地实现热能与电能的双向转换, 为绿色能源应用提供了新的解决方案。在室温附近具有优异热电性能的(Bi, Sb)₂Te₃ (BST) 材料, 因其环境友好性和高效性, 成为商业化应用的重要候选。然而, BST 材料通常在提升热电性能的同时, 受到机械性能不足的制约, 限制了其在复杂应用场景中的使用。本研究通过 AgInSe₂ 合金化策略, 显著提升了 BST 的热电和机械强度, 并深入探讨了其电子与声子协同优化的机制。实验结果表明, 在引入少量 AgInSe₂ (0.1 mol%) 后, BST 在 353 K 时达到峰值 $zT \sim 1.3$, 并在 303 K 至 503 K 的温度范围内平均 zT 达到 ~ 1.11 。同时, 材料的维氏硬度提升至 105 Hv, 大幅增强了其机械稳定性和加工适应性。此外, 通过对热电器件的设计与优化, 我们在 210 K 的温差下实现了 $\sim 6\%$ 的最大转换效率。基于该材料的优异热电性能与机械性能, 我们进一步开发了一款自供电信息交互腕带设备, 并成功验证了其基于 ASCII 码的高效人机交互功能。这一设备为信息的便捷传输与实时监测提供了新可能, 展现了 BST 材料在人机交互、可穿戴电子、无线通信和医疗监测领域的巨大潜力。通过 AgInSe₂ 合金化策略, 本研究为 BST 材料的多功能化及实际应用提供了新视角, 同时为热电材料与器件的创新发展奠定了坚实基础。

SiC 纳米颗粒复合增强立方 SnSe 合金的热电及力学性能

王文莹 祝军亮 薄琳 赵德刚*

材料科学与工程学院, 济南大学

SnSe 是一种极具发展潜力的热电材料, 近年来受到了越来越多的关注, 并在宽温度范围的应用中展现出其优越性能。纳米复合材料工程为提升材料的热电输运性能和机械强度提供了一种简单而实用的方法。本研究采用机械活化湿法球磨技术, 将不同质量分数的 SiC 纳米粒子作为分散相引入立方 SnSe 基热电材料中。在快速热压烧结过程中, SiC 纳米粒子由于钉扎效应而分散在基体界面, 有效抑制了晶粒的生长。晶粒细化及界面的增加改善了空穴载流子浓度并增强了声子散射, 进而优化了复合材料的电输运与热输运性能, 从而显著提升了无量纲热电优值(ZT)。其中, 复合 1.25 wt% SiC 的样品在 750 K 时 ZT 值最高, 约为 1.14, 是原始立方 SnSe 基化合物的两倍。此外, 所有纳米复合材料的维氏硬度均显著提高, 这进一步表明引入 SiC 纳米粒子能够有效改善立方 SnSe 基复合材料的力学性能。本研究为进一步提升立方 SnSe 基热电材料的性能提供了有效的策略

A02-205**Bi 合金化协同微结构工程实现高性能 Sb₂Si₂Te₆ 基热电材料**陈晨^{1,3}, 陈辰^{2,*}, 徐波^{1,**}, 李敬锋³, 田永君¹

- 1 高压科学中心 (CHiPS), 亚稳材料全国重点实验室, 燕山大学, 秦皇岛, 066004
- 2 物质科学学院, 大湾区大学, 东莞, 523000
- 3 新型陶瓷材料全国重点实验室, 材料学院, 清华大学, 北京, 100084

Sb₂Si₂Te₆ 作为中温区热电材料虽具潜力, 但相关研究匮乏, 且其层状结构固有的较弱范德华作用力使得基体材料力学性能普遍较差, 严重制约了器件加工与应用。因此, 本工作采用固相反应法结合球磨和放电等离子烧结技术制备了具有层状结构的 Sb_{2-x}BixSi₂Te₆ 化合物。Bi 元素的引入激发了强烈的合金散射效应, 而球磨引入了大量的晶界和微缺陷 (孪晶和层缺陷), 这些微观组织结构进一步增强了声子散射, 二者协同作用实现了全温区晶格热导率的有效抑制。得益于功率因子的提升和晶格热导率的显著降低, Sb_{1.7}Bi_{0.3}Si₂Te₆ 样品在 773 K 下的最大 ZT 值接近 1.5, 较基体提升近 50 %。此外, 球磨诱导的细晶强化效应与高密度孪晶的形成显著改善了其力学性能, 材料的硬度、压缩强度和抗折强度分别达到 0.8 GPa、

191 MPa 和 76 MPa。基于最佳样品研制的单腿发电器件最高转换效率为 8 % ($\Delta T = 473 \text{ K}$)。综上, 该工作通过 Bi 合金化与微结构工程的协同策略, 成功实现了 $\text{Sb}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$ 基材料热电与力学性能的同步优化。

关键词: $\text{Sb}_2\text{Si}_2\text{Te}_6$, Bi 合金化, 微结构工程, 热电性能, 力学性能

A02-206

Mn 基与 Co 基全赫斯勒合金的热电性能及其提升方法

李和章, Kei Hayashi, Yuzuru Miyazaki, 李敬锋, 王超

全赫斯勒合金具有丰富的功能, 其中 Mn 基与 Co 基全赫斯勒合金因具有高功率因子, 作为热电材料近年来受到越来越多的关注。我们围绕这两类材料, 重点研究了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。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。发现在 Mn_2CoAl 体系中也存在反位缺陷, Mn_2CoAl 合金不是自旋无隙半导体, 而是半金属。虽然全赫斯勒合金具有较高功率因子, 但是因其金属特性, 作为热电材料其热导率偏高, 最近研究表明, 通过 SiC 纳米颗粒复合可以显著降低 Co_2MnSi 热导率, 而对电输运性能不造成影响, 从而显著提高热电优值。而且, 纳米复合可以进一步提高力学性能, 有利于器件制备。

墙报

A02-P01

单晶 $\text{Mg}_{4.8}\text{Ag}_{1.4}\text{Sb}_4$ 中位点无序占据导致的显著非谐散射

芝世珍, 毛俊*

哈尔滨工业大学 (深圳)

Exploring new materials with low thermal conductivity is of great scientific and technological importance for applications like thermoelectrics and thermal barrier coatings. Herein, $\text{Mg}_{4.8}\text{Ag}_{1.4}\text{Sb}_4$ single crystal has been obtained and it exhibits an ultralow room-temperature thermal conductivity of $\sim 0.6 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Structure determination based on single-crystal X-ray diffraction analysis reveals the Fm-3m crystal type and identifies the mixed occupancy of Mg atoms ($\sim 60 \text{ at.}\%$), Ag atoms ($\sim 17.5 \text{ at.}\%$), and vacancies ($22.5 \text{ at.}\%$) at the 8c site. Such site occupation disorder results in significant phonon scattering and is responsible for low thermal conductivity. Theoretically, first-principles calculations confirmed the high anharmonic scattering rates and the short mean free path. In addition, molecular dynamics simulation discovers the abnormal atomic vibration of Ag atoms with a large amplitude at 300 K, which induces a low-lying acoustic phonon branch and increased phonon density of states at 0.6 THz. This can explain the enhanced anharmonic scattering rates with the increase in temperature and further reduction of the lattice thermal conductivity. Our work can shed new light on the discovery of novel materials with low thermal conductivity.

A02-P02

压力对热导率正/负影响的起源：化学键强度和晶格非简谐作用

吕芳*¹, 曹威¹, 梁汉普², 彭坦¹, 侯悦¹, 朱晓璐¹, 缪灵³, 王自昱¹, 熊锐¹

1. 武汉大学

2. 北京计算科学研究中心

3. 华中科技大学

热电转换效应对于促进清洁能源的开发具有重要意义, 使用压力调控热导率以提高化合物的热电性能的研究获得了越来越多的关注。压力作用下对热导率有两种主要影响: (1)正效应: 热导率随着压力增加而增加, 如: 金刚石, 立方-BN, 硅; (2)负效应: 热导率随着压力增加而减小, 如: 立方-BAS, BeTe, HgTe 和类金刚石构型的 CuInTe_2 。但是, 对于驱动压力作用下热导率不同响应的物理机制研究目前还不够完善, 这极大地限制了复杂能源材料的进一步发展。我们通过研究 F43m 和 Fm3m 下 XSe (X = Be, Mg, Ca) 化合物在不同对称性下对压力和元素的不同响应, 提出了由于不同的原子堆叠方式, 原子大小和化学键对压力的不同响应的是引起不同热导率响应的关键原因。其中, 在 Fm3m 构型中, 弱晶格非简谐作用和化学键通过离子驱动的简谐库仑相互作用导致压力对热导率起到积极效应; 在 F43m 构型中, 更强的晶格非简谐性和化学键通过共价驱动的非谐静电相互作用对压力下的热导率产生负效应。此外, 对于原子尺寸差异更大的结构, 由于正、负效应之间的竞争, 导致随着压力增大 F43m 构型下的 CaSe 热导率的响应并不是均匀减少的。此外, 通过研究费米水平附近复杂的电子结构间的电声相互作用发现, 声学声子和载流子之间的弱耦合促进了其电子输运, 降低的晶格热导率和高载流子输运提升了 CaSe 的热电性能。对压力依赖的热导率的物理起源的研究有利于促进新型材料的设计及高性能热电材料的发展。

A02-P03

化学压力调控 SnTe 热电性能

明洪蔚¹, 罗中箴*^{1,2}, 邹志刚^{1,2,3}

1. 闽都创新实验室

2. 福州大学

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 Σ 带之间存在较大的能量差 (~ 0.35 eV)，以及其高的晶格热导率，严重制约了其热电性能的提升。目前，SnTe 性能的优化主要通过 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，同时引入点缺陷散射声子以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、声子输运特性及热电输运性能的影响机制尚不明确。本研究突破了传统策略中通过牺牲 L 带高迁移率轻带特性来实现价带收敛的局限，发现 Sb、Ge 和 Cd 掺杂所伴随的化学压力能够有效调控 SnTe 的 Σ 带位置，在显著提升能谷简并度的同时，维持了 L 带的高迁移率特性，实现了非常规的价带收敛，从而大幅提升了 SnTe 的功率因子。进一步研究表明，Ge 和 Cd 等偏中心原子与其第四近邻原子之间的长程相互作用，诱导光学支声子模式发生软化，进而增强了光学支声子与声学支声子之间的共振散射，显著降低了材料的晶格热导率。最终，p 型 SnTe 在 848 K 的 $ZT_{\max}$ 提升至 1.51。

A02-P04

Impact of Sn-Induced Impurity States on Electrical Transport in Bi₂Te₃

Tianle Ge, Lirong Hu, Jiaying Liu, Chenguang Fu*

Zhejiang University

The resonant state has been proposed as a promising band engineering strategy for optimizing the Seebeck coefficient and potentially enhancing the performance of thermoelectric materials. However, there is a lack of direct experimental observation of the resonant state in previous studies. Here, we focus on the studies of electronic structures and thermoelectric properties of Sn-doped Bi₂Te₃, in which Sn was previously thought to induce resonant states in Bi₂Te₃. By first-principles calculations and angular-resolved photoelectron spectroscopy (ARPES), we demonstrate that Sn doping introduces localized impurity states within the bandgap of Bi₂Te₃, rather than resonant states. Further electrical transport measurements reveal strong ionized impurity scattering in Sn-doped Bi₂Te₃, resulting in significant degradation of carrier mobility and thermoelectric performance near room temperature.

A02-P05

铋碘共掺协同优化 PbTe 材料热电性能

刘若璞¹, 马粒¹, 宋鲁平¹, 郑哲¹, 谭珊珊², 杨磊², 任广坤*¹

1. 中国工程物理研究院

2. 四川大学

PbTe 作为典型热电材料，面临着高性能掺杂稳定性较差等问题。同时，n 型 PbTe 相较于 p 型 PbTe 能带简并度和有效质量都偏低。为了使 n 型 PbTe 与 p 型热电性能相匹配，并进一步优化 n 型材料的热电性能和稳定性，本工作中采取共掺杂策略进行优化。考虑到掺杂元素与基体元素的电子云密度和扩散能垒，选取 Bi 和 I 元素进行掺杂。首先利用 Bi 掺杂将样品载流子浓度调控至最优范围，发现 Pb_{0.97}Bi_{0.03}Te 在 823 K 条件下 ZT 达到 0.7。在此基础上进行 I 掺杂，双重点缺陷散射和 PbI₂ 第二相对声子的散射加强使热导率有一定程度下降。同时，态密度有效质量从 Bi 单掺的 $0.33m_e$ 进一步提高到 Bi/I 共掺的 $0.4m_e$ ，使得在 773 K 条件下 Pb_{0.97}Bi_{0.03}Te_{0.995}I_{0.005} 样品 ZT 提升到 0.8。基于有限元仿真，由 7 对 pn 结 (n: Pb_{0.97}Bi_{0.03}Te_{0.995}I_{0.005}; p: Pb_{0.99}Ag_{0.01}Se) 构成的热电器件在冷端温度 T_c 为 293K，温差 ΔT 为 530 K 时实现了 1.25 V 的开路电压、658.3 mW 的最大输出功率和 7.3% 的最大转换效率，相较于初始样品获得一定程度的提高。

A02-P06

镍基合金阻挡层改善 n 型碲化铋界面性能

张康*

中国科学院上海硅酸盐研究所

碲化铋作为应用最为广泛的热电材料，在解决能源环境问题方面发挥了重要作用。但碲化铋基热电器

件的发展长期受限于热电材料与金属电极之间的界面问题，即在长期服役条件下热电材料基体与电极界面的反应扩散，导致接触电阻升高、结合强度下降以及性能衰减。通常的做法是在热电材料与电极之间添加 Ni 阻挡层，但在较高温度下 ($>200^{\circ}\text{C}$)，Ni 与碲化铋基体之间的反应扩散加剧，严重影响热电器件性能，此外相比于 p 型碲化铋，n 型碲化铋的界面问题更加严重，因此解决 n 型碲化铋的界面问题是实现碲化铋基热电器件应用的关键。

本研究通过对 n 型碲化铋界面问题进行深入探究，旨在开发高稳定性的界面阻挡层，提升器件可靠性，主要包括：阻挡层制备工艺优化、阻挡层材料筛选、器件的长期服役性能研究。根据新型筛选策略筛选出阻挡层，并通过电镀工艺优化（如电流密度、pH、温度、搅拌速度等），制备 Ni 基金属阻挡层，并对阻挡层进行服役性能探究。初步研究表明，制备的阻挡层在保持接近 20 Mpa 的高结合强度下维持了较低的接触电阻 ($<5\mu\Omega\cdot\text{cm}^2$)，但高温条件下的长期服役性能有待进一步探究。

本研究通过寻找到合适的阻挡层材料以及与之匹配的制备工艺，实现碲化铋基热电器件的长期稳定服役，对碲化铋基乃至热电器件的发展等都具有一定的指导意义。

A02-P07

基于相图设计 n 型方钴矿热电材料及其性能研究

任运孜，张倩*

哈尔滨工业大学（深圳）

方钴矿体系在热电应用中具有重要潜力。通过元素填充可以降低方钴矿的热导率，实现材料 zT 值的提升，然而，填充元素在方钴矿结构中的最大稳定填充度受热力学相平衡限制，亟需通过可靠方法进行界定。本工作基于相图工程，通过平衡合金法构建了 Ce-Co-Sb 体系、La-Co-Sb 体系以及 Nd-Co-Sb 体系在 973 K 下的等温截面相图，明确了不同稀土元素在方钴矿结构中形成稳定填充化合物 $\text{M}_x\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ ($\text{M}=\text{Ce}, \text{La}, \text{Nd}$) 的填充度极限。进一步，根据相图设计制备了系列填充化合物，并系统研究了 Ce 填充 CoSb_3 电声输运机制，揭示其通过增强声子散射显著降低了晶格热导率，同时能够保持良好的电输运性能。最终材料在 973 K 下峰值 zT 达到 1.2。该研究为稀土填充型方钴矿热电材料的设计与优化提供了热力学依据与实验支撑。

A02-P08

银硫卤反钙钛矿热电性质研究

胡世杰，Kieran B. Spooner, David J. Singh, 韩丹*

吉林大学材料科学与工程学院

热电材料是一类能将热能和电能相互转换的功能材料，通过塞贝克、帕尔贴和汤姆逊效应实现热电能直接转换，其性能由热电优值 ZT 衡量，需协同优化电导率、塞贝克系数组成的功率因子并抑制晶格和电子热导率。

传统材料（如 Bi_2Te_3 ， $ZT \approx 1$ ）存在效率瓶颈、环境毒性和机械脆性^{[1][2]}；新型材料（ $ZT > 2$ ）则面临合成成本高、稳定性差和机理认知不足等产业化挑战。反钙钛矿材料因其独特的阴离子中心笼状结构，通过强非谐振实现超低 κ_l （如 K_3ITe 在 300 K 时 $\kappa_l=0.18 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ）^[3]，同时保持高的电导率（如 X_6NFSn_2 的电导率比 CsSnI_3 高一个量级）^[4]，实践了“声子玻璃-电子晶体”理念。此外在多个体系（如 Ca_3XN ^[5]， K_3IX ^[3]， X_6NFSn_2 ^[4]， X_3BiN ^[6]， Mg_3XN ^[7]）中展现出高理论预测的 ZT 值（可达 2.61）。

银基硫卤化物反钙钛矿 Ag_3SX ($\text{X} = \text{I}, \text{Br}$) 具有高离子电导率、 Ag^+ 无序可能导致的超低 κ_l 以及高效低温合成优势，展现出低温热电应用前景，但其热、电输运机制与热电性能尚缺乏研究。通过第一性分子动力学模拟及非谐晶格动力学研究，我们发现 Ag_3SX ($\text{X} = \text{I}, \text{Br}$) 在室温下呈现出超低的晶格热导率。与此同时它们呈现出理论预测的高功率因子。理论预测的 p 型 Ag_3SX 的室温条件下最高的 ZT 值为 1.4。基于理论研究，我们开展了两种化合物的实验合成及表征。本工作旨在阐明 Ag_3SX ($\text{X} = \text{I}, \text{Br}$) 潜在的热电机理，为高性能、低毒、室温热电材料的开发做出贡献。

参考文献:

- [1] Lon E. Bell ,Cooling, Heating, Generating Power, and Recovering Waste Heat with Thermoelectric Systems.Science321,1457-1461(2008).
- [2] Tingting Deng et al. Room-temperature exceptional plasticity in defective Bi₂Te₃-based bulk thermoelectric crystals. Science386,1112-1117(2024).
- [3] Zeng, Shuming, et al. Anomalous Thermal Conductivity and High Thermoelectric Performance of Cubic Anti-perovskites K₃IX (Se & Te). Chemistry of Materials 36.1, 211-218(2023).
- [4] Han, Dan, et al. Discovery of multi-anion anti-perovskites X₆NFSn₂ (X= Ca, Sr) as promising thermoelectric materials by computational screening. Matter 7.1, 158-174 (2024).
- [5] Lin, Shuyao, et al. Strong anharmonicity and medium-temperature thermoelectric efficiency in anti-perovskite Ca₃XN (X= P, As, Sb, Bi) compounds. Journal of Materials Chemistry A 12.30, 19567-19579 (2024).
- [6] Zeng, Shuming, et al. ,Low lattice thermal conductivities and good thermoelectric performance of hexagonal anti-perovskites X (Ba & Sr)₃BiN with quartic anharmonicity. Physical Chemistry Chemical Physics 25.39, 26507-26514 (2023).
- [7] Yue, Jincheng, et al. Role of atypical temperature-responsive lattice thermal transport on the thermoelectric properties of anti-perovskites Mg₃XN (X= P, As, Sb, Bi). Materials Today Physics 41, 101340 (2024).

A02-P09

锰和硒掺杂对 AgCuTe 热电性能的优化研究

郑启娴, 祁宁, 陈志权*

武汉大学物理科学与技术学院

热电材料由于可以提供热能和电能之间的直接转换,大大提高了资源利用效率,为缓解能源危机提供了新的解决方案。影响热电材料性能的各个参数之间具有很强的耦合关系,使得很难在不影响其它参数的情况下单独优化某个参数。因此,同时实现良好的电性能和最小化热传输是实现高 ZT 的主要挑战。声子液体-电子晶体(PLEC)热电材料由于其固有的低热导率引起了人们的极大关注。其中,三元化合物 AgCuTe 基材料在中低温下显示出作为优异热电材料的潜力。AgCuTe 材料因为倾向于形成阳离子空位,导致低温下的高空穴浓度和复杂的相组成,这也阻碍了材料的稳定性。本工作中,我们通过锰和硒掺杂改善了 AgCuTe 的热电性能。研究发现掺杂导致载流子有效质量的显著增加,实现了 Seebeck 系数增强。尤其是在室温附近,六方相的功率因数有显著的提高,并且电子热导率较低,最终在 723 K 下,AgCu_{0.99}Mn_{0.01}Te 实现了 1.06 的最高 ZT 值,而 AgCu_{0.99}Mn_{0.01}Te_{0.97}Se_{0.03} 的 ZT 接近 1.0,与本征材料(0.79)相比分别提升了 33%和 27%。此外,锰和硒的引入也抑制了第二相的形成并确保了均匀的相分布。我们的研究结果证实了 AgCuTe 基材料在中低温热电应用中的潜力。

A02-P10

异价重元素掺杂降低半赫斯勒化合物 ZrFeTe 热导率

胡欣然, 陈志权*

武汉大学物理科学与技术学院

在热电领域中,半赫斯勒材料因其具有优异的电输运性能、良好的稳定性、丰富的元素储量等优势,被认为是最有应用前景的高温热电材料之一,但其本征热导率过高长久以来限制了其热电性能。异价掺杂被广泛使用来优化材料的电输运性能,但其对声子结构和热输运的影响机制并不清晰。本工作中我们通过理论计算的方法研究了几种元素的掺杂对半赫斯勒化合物 ZrFeTe 热性能的影响。研究发现异价掺杂会导致光学声子的软化,光学支最高频率降低,这可能是由于引入了额外载流子增强了屏蔽作用。另一方面,重元素掺杂会导致声子谱中出现声学支和光学支避免交叉的现象,这会降低声子群速度。另外通过对格林艾森参数和声子散射率的计算,我们发现掺杂会使材料的非谐性增加。这些原因都会导致晶格热导率的降低。其中在 Zr 位进行 12.5%的 Ta 掺杂形成的 Zr_{0.875}Ta_{0.125}FeTe 相比本征 ZrFeTe 的晶格热导率降低了 70%,在

300 K 时从 $16 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 降低到 $4.8 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 。这些结果揭示了异价重元素掺杂在调控热电材料声子结构和热输运性能中的重要作用。

A02-P11

Sn 含量调节及 CuAgSe 复合对 SnSe 热电性能的影响

赖章恒, 陈祥斌, 祁宁, 陈志权*

武汉大学物理科学与技术学院, 湖北武汉, 430072

近年来, 多晶 SnSe 展现出相对较低的热导率而受到了各地学者的广泛关注。然而, 由于其较差的电导率, 热电性能也有所受限。本研究采用高能球磨法、熔融法结合放电等离子烧结技术制备了合金化不同 CuAgSe 含量的多晶 SnSe。结果表明, 在 Sn 位上掺杂 Ag 和 Cu 可以提高电导率, 尤其是在 Sn 含量较低的环境下, Ag_{Sn} 的缺陷形成能降低, 利于 Sn 位上的取代。而当加入的 CuAgSe 含量过剩时, Ag_i 作为电子供体形成, 空穴载流子的浓度的提升受限。同时, 部分 Ag 和 Cu 原子可填补 Sn 空位, 从而在一定程度上提高了霍尔迁移率与态密度有效质量。由于电导率提高的同时保留着较高的 Seebeck 系数, $\text{Sn}_{0.99}\text{Se}$ 合金化 0.75%CuAgSe 样品在 847 K 温度下达到了 $6.40 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 的最大功率因子, 随着热导率的降低, 最终在该温度下实现了 0.97 的最大 zT 值, 相比于本征 SnSe 样品有显著提升。该研究为通过调控 Sn 含量与 CuAgSe 合金化策略以优化 SnSe 基热电材料性能提供了新的研究思路和实验依据。

A02-P12

双相异质结构增强 Cu_{2-x}Se 热电材料强度与塑性

李梓锋, 肖晨阳, 李国栋, 翟鹏程, 段波*

武汉理工大学

高性能热电材料通常无法兼顾强度与塑性, 这限制了其在热电器件上的应用。本研究通过引入双相异质结构同时提高了 Cu_{2-x}Se 热电材料的强度与塑性。本研究采用固相烧结法制备了含高强度 α 相与高塑性 β 相的双相 Cu_{2-x}Se 材料。得益于 β 相的加工硬化现象, 双相 $\text{Cu}_{1.88}\text{Se}$ 材料的断裂应变、屈服强度和抗压强度相较于单 α 相 $\text{Cu}_{1.93}\text{Se}$ 分别提高了 266%、16% 和 44%。本研究为提高脆性热电材料强塑性提供了新的强化策略。

A02-P13

$\text{CuCr}_2\text{Te}_4/\text{Ag}_{0.006}\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 磁性热电复合材料热电性能优化研究

杜雅婷, 魏平, 赵文俞*

武汉理工大学

碲化铋合金是目前商业化最成熟的热电材料, 但是 n 型碲化铋合金 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 通常在 400 K 以上由于本征激发而发生热电性能恶化现象, 这极大限制了其在热电发电领域的更广泛应用。本研究先通过 Ag 元素掺杂优化 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 块体材料的载流子浓度, 再选择 CuCr_2Te_4 作为磁性第二相与 Ag 掺杂 $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 进行复合, 达到改善其热电性能的目的。采用熔融和放电等离子体烧结工艺制备了 $\text{CuCr}_2\text{Te}_4/\text{Ag}_{0.006}\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 磁性热电复合材料, 发现复合材料中 Cu^+ 扩散进入 $\text{Ag}_{0.006}\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 基体晶格并占据 Bi 位, 以受主掺杂形式优化了载流子浓度, 使得 Seebeck 系数增大和功率因子提高。同时, 磁性第二相的引入增强了界面声子散射, 降低了晶格热导率。值得关注的是, 受到磁性第二相的电子库效应影响, 复合材料高温段本征激发得到抑制, 引起高温段热电性能显著提升。与 $\text{Ag}_{0.006}\text{Bi}_2\text{Te}_{2.7}\text{Se}_{0.3}$ 基体材料相比, CuCr_2Te_4 含量为 6wt% 的复合材料其室温 zT 值和平均 zT 值分别提高了 5% 和 19%。本研究表明复合磁性第二相 CuCr_2Te_4 可改善 n 型碲化铋合金的整体热电性能。

A02-P14

铁电/铁磁效应增强 p 型碲化铋基热电材料的热电性能

巴倩, 刘志愿*

安徽工业大学

铁电/铁磁性材料具有较高的矫顽力, 可产生较强的微磁场。该微磁场会对其周围的载流子产生显著影响。此外, 磁性纳米颗粒的纳米效应以及其磁转变产生的热电磁效应可显著提升热电材料的 ZT 值。如果将居里温度位于室温附近的铁电/铁磁性纳米颗粒引入到碲化铋基材料中, 有望通过铁电/铁磁纳米颗粒产生的纳米效应、热电磁效应协同优化碲化铋基材料的电和热输运性能。本文采用高温熔融淬火、超声分散结合 SPS 烧结工艺成功制备了一系列 p 型碲化铋基铁电/铁磁性纳米复合热电材料 $x_{0.6}\text{BiFeO}_3\text{-}0.4(0.5\text{CaTiO}_3\text{-}0.5\text{SmFeO}_3)/\text{Bi}_{0.34}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3(\text{BiCaSm}/\text{Bi}_{0.34}\text{Sb}_{1.66}\text{Te}_3$ 质量百分比 $x = 0, 0.15\%, 0.25\%, 0.35\%$ 和 0.45%)。物相与微观结构分析结果显示, BiCaSm 铁电/铁磁纳米颗粒的引入未引起基体相组成和晶体结构的明显改变。 M - T 测试结果表明, BiCaSm -NPs 居里温度约 310 K, 接近室温, 具有较强的铁电/铁磁性。电热输运性能测试结果表明, BiCaSm -NPs 的引入增强边界散射作用和局部磁场效应, 导致载流子浓度降低, Seebeck 系数显著提高。同时, 得益于载流子迁移率的显著提升, 材料的电导率获得明显改善, 实现了 Seebeck 系数与电导率的解耦。 $\text{BiCaSm}25$ 样品在 300 K 时表现出最高的功率因子, 达到 $5.31 \text{ mW/K}^2\text{m}$, 相比基体材料提升了 22%。同时, 由于电子热导率的增加, 导致复合材料热导率有所上升。由于电性能的显著提升, 导致热输运性能未得到优化。然而, 得益于优异的电性能, $\text{BiCaSm}25$ 样品在 380 K 时获得最大 ZT 值 1.07, 与基体材料相比提升了约 17%。这表明 BiCaSm 铁电/铁磁纳米颗粒产生的纳米界面效应以及磁散射效应可有效提升 p 型碲化铋基材料的热电性能。

A02-P15

基于 Ag_2Se 的高性能柔性热电设备的多晶界面工程

李铭萱, 唐文欣, 兰金叻*, 杨小平

北京化工大学

柔性热电材料在众多应用, 特别是在便携式设备的电源或主动冷却器方面, 具有重要意义。 Ag_2Se 是一种近室温热电材料, 具有高载流子迁移率和低晶格热导率。然而, 其高载流子浓度和有限的柔性制约了其更广泛的应用。为此, 我们提出了一种 $\text{Ag-Ag}_2\text{Se}$ -石墨烯 (0D-1D-2D) 三元复合材料的多晶界面工程策略。其中, Ag 纳米颗粒与 Ag_2Se 纳米线之间的界面有效调控了载流子浓度, 而 Ag_2Se 纳米线与石墨烯间的界面则进一步提升了其热电性能和柔性。最终, $\text{Ag}_{2.25}\text{Se-}0.25 \text{ wt\%}$ 石墨烯复合薄膜实现了功率因子的提升 ($1643 \mu\text{W m}^{-1}\text{K}^{-2}$) 和柔性的改善。此外, 由这些薄膜组装的柔性三极热电发电机在 50 K 的温度梯度下, 可产生约 $1.5 \mu\text{W}$ 的最大输出功率。因此, 本研究为构建基于无机/碳纳米材料的高性能柔性热电复合薄膜, 提供了一种有效的多形界面结构设计策略。

A02-P16

 Ba-Sn-Te-S 体系中具有低热导率的两种新型混阴离子半导体

郭卫平, 罗中箴*

福州大学

本文中, 我们首次通过高温固相反应成功得到了两种新型混阴离子硫属化合物 $\text{Ba}_5\text{Sn}_2\text{Te}_{1.327}\text{S}_{7.673}$ (1) 和 $\text{Ba}_7\text{Sn}_3\text{Te}_{0.839}\text{S}_{12.161}$ (2), 它们均属于 $\text{Ba-Sn-Q}(\text{Q} = \text{S}_{1-x}\text{Te}_x; 0 \leq x \leq 1)$ 体系。其中, 化合物 1 结晶于单斜 $P2_1/c$ 空间群, 晶胞参数为 $a=17.501(5) \text{ \AA}$, $b=8.908(2) \text{ \AA}$, $c=12.508(3) \text{ \AA}$, $Z=4$ 。但是化合物 2 结晶于不同的正交 $Pnma$ 空间群, 晶胞参数为 $a=12.386(5) \text{ \AA}$, $b=24.17(2) \text{ \AA}$, $c=8.872(4) \text{ \AA}$, $Z=4$ 。化合物 1 和化合物 2 均属于 0 维的晶体结构, 它们的化学式可以表示为 $\text{Ba}_5(\text{SnQ}_4)_2\text{Q}$ 和 $\text{Ba}_7(\text{SnQ}_4)_3\text{Q}$, Sn/Q 的比例分别为 2/9 和 3/13。同时, 化合物 1 和化合物 2 含有 Q^{2-} 游离阴离子, 这是在 Ba-Sn-Q 体系中比较独特的, 这是因为结构中游离的 $[\text{SnQ}_4]$ 四面体和较低的 Sn/Q 比例造成的。结构中的弱键元素 Ba 原子, 高度畸变的 $[\text{SnQ}_4]$ 四面体, 和

游离的 Q^2 阴离子可以有效地散射声子的传输。因此，化合物 1 和化合物 2 具有较低的晶格热导率 (κ_{lat})，在 300–773 K 范围内的 κ_{lat} 为 $\sim 0.3\text{--}0.4\text{ W m}^{-1}\text{ K}^{-1}$ 。这为设计具有本征低晶格热导率的材料提供了一种新的思路。

A02-P17

具有超低热导率的 $\text{Ag}_4\text{M}_{0.5}\text{S}_2\text{Te}$ ($\text{M} = \text{Sn}$ 和 Ge) 新型立方硫银锗矿材料

杨亚, 庄乃锋, 罗中箴*

福州大学

热电材料能够实现热能和电能直接相互转换，在废热回收利用和微电子集成器件制冷等领域具有广泛的应用前景。但热电器件的能量转化效率不高，因此需要开发高性能的热电材料。其中，具有超低晶格热导率的类液态硫银锗矿作为一类有前途的热电材料引起了广泛关注。然而，n 型硫银锗矿的性能较差，与 p 型类液态材料不匹配。基于此，本工作合成了两种新型的 n 型立方银基硫银锗矿化合物 $\text{Ag}_4\text{M}_{0.5}\text{S}_2\text{Te}$ ($\text{M} = \text{Sn}$ 和 Ge)。这两种化合物结晶于 $F\bar{4}3m$ 空间群，具有优异的结构稳定性。其独特的三角形 $[\text{AgS}_2\text{Te}]^{5-}$ 、类棒状 $[\text{AgS}_2\text{Te}]^{3-}$ 、复杂的笼状 $[\text{Te}_4\text{Ag}_{36}]^{28+}$ 簇和 $\text{Ag} - \text{S}/\text{Te}$ 之间的弱键，共同导致了较大的晶格非谐性并增强了声子散射。这些结构特征导致其在 300 K – 823 K 下获得了超低热导率为 $0.22 - 0.32\text{ W m}^{-1}\text{ K}^{-1}$ ，接近其非晶极限 $0.24\text{ W m}^{-1}\text{ K}^{-1}$ 。由于高度无序材料的热传导以局域振动的形式传播，不同频率的振动耦合对热传导有贡献，所以晶格热导率随着温度的升高而升高。此外，通过引入 Te 空位，功率因子从 $\text{Ag}_4\text{Sn}_{0.5}\text{S}_2\text{Te}$ 的 $1.53\text{ }\mu\text{W cm}^{-1}\text{ K}^{-2}$ 提高至 $2.61\text{ }\mu\text{W cm}^{-1}\text{ K}^{-2}$ 。最终， $\text{Ag}_4\text{Sn}_{0.5}\text{S}_2\text{Te}_{0.92}$ 样品在 823 K 时获得了高达 0.74 的 ZT 值，比本征样品提高了 95%。这项作为高性能 n 型类液态材料的设计提供了指导。

A02-P18

GaSb 掺杂引起导带收敛和局域结构畸变在 n 型 PbSe 热电材料中实现优越的热电性能

周靖, 罗中箴*

福州大学

获得具有优异平均功率因子和热电优值的高稳定性热电材料对于最大化热电器件的输出功率密度和转换效率至关重要。在本研究中，将 GaSb 作为 n 型掺杂剂加入到 PbSe 中形成稳定的固溶体。掺杂 GaSb 使 PbSe 导带变平，减小了 Σ 和 L 导带之间的能量差，从而显著提高了塞贝克系数。通过密度泛函理论计算证实，与传统的单元素掺杂不同，Ga 和 Sb 原子共同占据了 Pb 位。GaSb 掺杂引起的局域结构畸变通过透射电镜证实，降低了晶格热导率。结果表明，在 300 ~ 873 K 温度范围内， $\text{Pb}_{0.99875}(\text{GaSb})_{0.00125}\text{Se}$ 样品的平均功率因子为 $\sim 22.37\text{ }\mu\text{W cm}^{-1}\text{ K}^{-2}$ ，平均热电优值为 ~ 0.94 。此外，间隙 Cu 和不协调 Zn 原子的引入进一步降低了晶格热导率。 $\text{Pb}_{0.99875}(\text{GaSb})_{0.00125}\text{Zn}_{0.01}\text{Se}_{1.01}\text{--}0.3\%\text{Cu}$ 样品在 873 K 温度下的晶格热导率为 $\sim 0.4\text{ W m}^{-1}\text{ K}^{-1}$ ，在 300–873 K 温度范围内的平均热电优值为 ~ 1.01 ，创历史新高。

A02-P19

参考 Hume-Rothery 规则实现铜离子在 PbSe 中的哑铃型占据并解耦载流子与声子传输

陈紫煊¹, 明洪蔚², 郑云鹏¹, 罗中箴^{*1,2}, 邹志刚^{1,2,3}

1. 福州大学
2. 闽都创新实验室
3. 南京大学

PbSe 与 PbTe 具有相同的晶体结构和相似的能带结构，因此被认为有望替代 PbTe。Cu 预计会在 PbSe 的价带附近引入杂质能级并提高 Seebeck 系数。然而 Cu 的低固溶度极大地限制了 p 型 PbSe 热电性能的提高。Hume-Rothery 规则可以指导固溶体的形成条件和稳定性的研究。在本研究中，我们参考 Hume-Rothery 规则成功地用两个 Cu^+ 取代了 PbSe 基体中的单个 Pb^{2+} ，从而促进了三价带的收敛。同时，两个 Cu^+ 的库仑力

引起的 Pb 偏心导致声子模式软化，协同提高了功率因子并降低了晶格热导率(κ_{lat})。此外，进一步掺杂 Ag 后，我们实现了 $\text{Pb}_{0.98}\text{Ag}_{0.02}\text{Se}-2\%\text{Cu}_2\text{Se}$ 的最低价带收敛起始温度 ~ 500 K。在 300 K 至 773 K 范围内，平均功率因子 (PF_{ave}) 约为 $15.1 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ ，平均 ZT 约为 0.66。这些结果表明，参考 Hume-Rothery 规则是提高固体溶解度和热电性能的一种有效策略。

A02-P20

具有超低热导率的 n 型 $\text{K}_2\text{Bi}_8\text{S}_{13}$ 热电性能研究

李萌，罗中箴*

福州大学材料学院

碱金属铋基硫属三元化合物具有复杂的结构，是一种具有低热导率的新型热电材料。本文研究了 $\text{K}_2\text{Bi}_8\text{S}_{13}$ 低热导率的原因，对 $\text{K}_2\text{Bi}_8\text{S}_{13}$ 的高温热电性能进行了系统性的研究。研究发现，由于大晶胞、结构复杂、强非谐性、Bi 和 K 原子在晶格中的混合占位等原因，n 型 $\text{K}_2\text{Bi}_8\text{S}_{13}$ 在 300 K 到 873 K 之间具有 $0.56 \sim 0.42 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ 的极低晶格热导率。 $\text{K}_2\text{Bi}_8\text{S}_{13}$ 在 873 K 时 ZT 为 0.33。为进一步提高材料热电性能，在体系中引入额外的 Bi。Bi 的引入提高了载流子浓度、电导率和功率因子。同时，额外的 Bi 引入的点缺陷有效散射了声子，降低了热导率。结果表明，在 823 K 时 $\text{K}_2\text{Bi}_{8.003}\text{S}_{13}$ 的晶格热导率为 $0.38 \text{ W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ ， ZT 提升到 0.53。

A02-P21

间隙 Ag 和 Pb 轨道杂化对 Ag_2Se 纳米复合材料热电性能的影响

孟维特^{1,2,3}，夏宇轩^{1,3}，卢少卿²，刘玉²，LIM Khak Ho^{*1,3}

1. 浙江大学衢州研究院

2. 合肥工业大学

3. 浙江-西班牙先进材料产品工程国际联合实验室

Ag_2Se 是一种极具潜力的室温热电材料。然而，其热电性能受限于较低的载流子有效质量 (m^*)。本研究采用微波加热法合成了 Pb 掺杂的 Ag_2Se ，通过 Pb 的引入显著提高了 m^* 并增强塞贝克系数，同时在材料中引入了高密度的点缺陷、位错及晶界，显著降低了晶格热导率，Pb 掺杂 $\text{Ag}_{1.9}\text{Se}$ 实现了优异的热电性能表现，由此制备的柔性热电发电器件在小温差条件下产生了可观的输出功率。本文通过空位调控与异价离子掺杂协同调节 m^* 及声子散射，为其它热电材料的性能优化和热电发电和制冷应用提供有效借鉴。

A02-P22

表面工程对硫化铅纳米材料输运性质的影响

卢少卿，孟维特，刘玉*

合肥工业大学

硫化铅 (PbS) 作为一种极具发展前景的热电材料，因其丰富的天然资源和高性价比而备受关注。然而，它的实际应用受到固有的高晶格热导率和低电导率的阻碍。在这项研究中，我们利用基于 Cu_2S 分子络合物的配体置换，通过表面功能化 PbS 纳米晶体来解决这些挑战。分子络合物促进了 Cu 与 PbS 基体的结合，导致纳米级缺陷、位错和应变场的形成，同时优化了载流子的输运。结构调制增强了声子散射，导致 $\text{PbS}-\text{Cu}_2\text{S}$ 体系中晶格热导率显著降低。同时，Cu 的掺入通过精心优化 Cu_2S 分子络合物的含量来提高载流子浓度和迁移率，从而提高了导电性能。这项工作强调了表面处理在克服基于 PbS 的材料固有局限性方面的有效性，并为开发高效 TE 系统提供了有前途的策略。

A02-P23

能带工程与熵工程协同优化 p 型 Mg_3Sb_2 基热电材料性能研究

罗浩凌, 李垦, 张兆, 张雄*

湖北师范大学

基于半导体热电材料的热电技术在热电发电和主动制冷方面具有广泛的应用前景。如何大幅度优化 p 型 Mg_3Sb_2 基材料的热电性能是热电领域面临的重要难题。本研究采用能带工程与熵工程协同策略实现了 p 型 Mg_3Sb_2 基热电材料性能的大幅度提升。通过引入 50% 的 YbZn_2Sb_2 , 实现了能带结构优化, 有效降低了晶体场分裂能, 同时提高了载流子浓度和迁移率, 使功率因子得到显著增加。在此基础上, 采用熵工程, 利用 Cd 合金化调控构型熵值, 使 $(\text{Mg}_{3.1}\text{Sb}_2)_{0.5}(\text{YbZn}_{2-x}\text{Cd}_x\text{Sb}_2)_{0.5}$ 样品的晶格热导率得到明显降低。进一步通过精准的 Ag 掺杂调控空穴浓度, 在 773 K 下获得 $10.3 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$ 的高功率因子。最终, 优化后的材料 $(\text{Mg}_{3.07}\text{Ag}_{0.03}\text{Sb}_2)_{0.5}(\text{YbZn}_{1.2}\text{Cd}_{0.8}\text{Sb}_2)_{0.5}$ 在 773 K 下获得 1.34 的高 zT 值, 并在 323 K-773 K 范围内获得 0.77 的高平均 zT 值。该研究为高性能 p 型 Mg_3Sb_2 基热电材料设计提供了一种切实可行的性能优化策略。

A02-P24

超价键与空位工程实现高性能立方 GeSe 热电材料

罗浩然¹, 史晓磊², 胡利鹏^{*1}, 陈志刚²

1. 深圳大学材料学院

2. 昆士兰科技大学

GeSe 作为一种具有层状结构的 IV-VI 族半导体, 其热电性能受限于本征晶体结构和化学键特性。为突破这一限制, 我们通过引入超价键和空位工程成功实现了 GeSe 从正交相到立方相的转变。具体而言, 我们以 Sb_2Te_3 作为合金化添加剂, 在仅添加 10% 的情况下于常温常压下获得了稳定的立方结构 GeSe, 避免了传统合金化方法因添加量过多而引入的杂质相及额外相变对性能的不利影响。与基于共价键结合的正交 GeSe 相比, 这种基于超价键结合的立方 GeSe 具有更低的阳离子空位形成能、更小的带隙、更强的能带简并、更弱的化学键结合能、更强的晶格非谐性以及大量声子散射中心。这些特性协同作用, 有效提升了功率因子并抑制了晶格热导率。通过微量铅掺杂进一步降低晶格热导率, 在立方结构 $(\text{Ge}_{0.95}\text{Pb}_{0.05}\text{Se})_{0.9}(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_{0.1}$ 中于 723 K 实现了 1.38 的 ZT 值, 并在 430 K 温差下获得了 6.13% 的能量转换效率。这些结果不仅推动了 GeSe 基合金在中温发电中的实际应用, 还为硒化物材料中正交晶体向立方晶体的相变机制提供了重要见解。

A02-P25

Ti/Cu 共掺杂对 Bi_2SeS_2 基材料热电性能的优化

陈瑞华, Suniya Siddique, 赵健, 陈跃星, 郑壮豪, 李甫*

深圳大学

三元硫化物 Bi_2SeS_2 因其较大的中温热电应用潜力而受到关注, 但因其较低的载流子浓度和较高的晶格热导率, 热电性能仍然和传统材料具有差距。基于不同掺杂元素对材料性能影响的差异, 本文提出了一种 Ti、Cu 双掺杂策略, 实现 Bi_2SeS_2 材料电输运与热输运性能的协同调控。物相及晶体结构显示, Ti 取代 Bi 位引起 c 轴方向晶格常数的显著增大。价态测试表明, 样品中 Ti 以四价形式、Cu 以一价和二价混合价态形式存在, 有效提高了载流子浓度并实现电荷补偿。电输运性能测试表明, Cu 的掺杂有效提高了迁移率, Ti 的引入提升了载流子浓度, 使样品功率因子提高至约 $6.0 \mu\text{W/cm} \cdot \text{K}^2$ 。同时, 由于共掺杂而导致的晶格畸变与晶粒细化增强了声子散射, 晶格热导率降低至约 0.25 W/m K , 致使总热导率下降约 0.55 W/m K 。最终, $\text{Bi}_{1.96}\text{SeS}_2\text{Ti}_{0.04}\text{-1\%Cu}$ 样品在 773 K 实现了 0.77 的峰值 ZT 值, 较 Cu 单掺杂样品提升约 22%, 是 Ti 单掺杂样品的 3 倍。

A02-P26

Cu 离子的动力学调控协同提升 Cu 基快离子导体材料的热稳定性和热电性能

李嘉俊, 郭凯*

广州大学

Cu_2Se 快离子导体热电材料在高温区域的热电性能优异, 但是其阳离子容易在高温下发生长程迁移和偏析, 导致 Cu 单质在样品表面析出而恶化材料的热电性能。在本研究中, 通过向 Cu_2Se 基体中复合不同的第二相材料, 研究其对材料物相组成、显微结构、热电输运性能及稳定性的影响。基于同源相似结构复合思路, 选取 $\text{Cu}_{2.95}\text{SbSe}_4$ 作为复合第二相, 采用固相反应法结合高能球磨、热压烧结、放电等离子烧结等工艺制备了 $(\text{Cu}_{1.98}\text{Se})_{1-x}+(\text{Cu}_{2.95}\text{SbSe}_4)_x$ ($x = 0, 0.003, 0.006, 0.01, 0.02, 0.03$)。结果表明, 复合该第二相降低了材料的塞贝克系数, 增加了电导率。相较于纯相, 在 923 K 时, 塞贝克系数降低了 35%, 而电导率提升了 250%。虽然塞贝克系数变小, 但电导率的大幅提升对功率因子的影响更为显著。功率因子提高了 37%。此外, 复合物的引入增加了界面和晶界密度, 抑制了晶格热导率, 最后测得配比为 $(\text{Cu}_{1.98}\text{Se})_{0.98}+(\text{Cu}_{2.95}\text{SbSe}_4)_{0.02}$ 复合样品在 923 K 时具有最高的热电优值 $zT = 1.67$ 。另外, 由于第二相的特殊结构围绕在晶界附近, 使得 Cu^+ 的长程迁移难以进行, 阻止 Cu 偏析的现象产生, 提升了材料稳定性。为同体系内高性能热电材料设计提供了结构相变与成分调控的新思路。

A02-P27

碲化铋基商用废料的性能优化与再成型技术研究

王婧娴, 张广旭, 董家琪, 李志亮, 王淑芳*

河北大学

Bi_2Te_3 基材料是目前商用化较为广泛的热电材料, 商用废料的回收再利用是提高元素利用率的重要课题。通过在球磨过程中加入液相还原剂, 可以进一步去除商用碲化铋废料中的氧化物, 实现热电性能的优化。最终, n 型 Bi_2Te_3 废料加入乙二醇后, zT 值可优化至 0.91 (373 K), 比基体 ($zT=0.7$) 提升约 30%; p 型 Bi_2Te_3 废料加入水合肼后 zT 值可提升至 1.1 (323 K), 比基体 ($zT=0.94$) 提升约 17%。经过处理后的碲化铋废料均可实现 zT 值和器件性能的优化。

A02-P28

阴离子自补偿优化 Ag_2Se 材料热电性能

董家琪, 张广旭, 王婧娴, 李志亮, 王淑芳*

河北大学

Ag_2Se 材料具有优异的机械性能和热电性能, 被认为是替代 n 型 Bi_2Te_3 的最佳候选材料。采用微波辅助法结合 SPS 烧结制备了 Ag_2Se 块体, 同时采用阴离子自补偿优化了 Ag_2Se 材料的热电性能。本征 Ag_2Se 通常存在 Se 空位或者间隙 Ag , 通过溶液 Se 化、 S 化、 Te 化可以进行阴离子补偿, 在降低了 Ag_2Se 的载流子浓度的同时, 维持较高的迁移率, 从而优化其热电性能。最终, Te 化后的样品, 获得最优热电性能, 在 303 K 的 zT 为 0.80, 相对 Ag_2Se 基体提升了约 14.2%。通过微波辅助法进行阴离子补偿成功解决了传统掺杂引发的阴离子沉淀、迁移降低问题。

A02-P29

机械粉碎辅助制备高性能 Ag_2Se 热电材料

张贵霞, 侯帅航, 李志亮, 王淑芳*

河北大学

Ag_2Se 在室温附近表现出优异的热电性能, 且其构成元素无毒环保, 在可穿戴热电器件领域展现出独特优势。然而, 由于 Ag 与 Se 间饱和蒸气压差异较大, 传统熔炼烧结过程中易发生化学计量失衡, 限制了高性能块体材料的制备。为此, 本研究提出了一种简便高效的合成策略, 通过机械粉碎将 Ag_2Se 铸锭转化

为粉末，并在粉碎过程中添加额外的 Se 单质，结合 SPS 烧结工艺，成功制备出化学计量的 Ag_2Se 块体材料。实验结果表明，额外 2 at% Se 单质的引入显著降低了样品的载流子浓度 $\sim 3.8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ，迁移率达到 $1800 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ，室温功率因子达到 $\sim 27 \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。同时，多余 Se 单质在烧结过程中再次挥发并在基体中诱导形成纳米级孔洞结构，有效增强了声子散射，降低了晶格热导率。最终，材料的最大 zT 值达到 ~ 0.9 。基于该材料与商用 p 型 Bi_2Te_3 构建了 15×15 阵列的柔性热电器件，在佩戴于手腕时输出功率达到 $\sim 1.1 \text{ mW}$ ，经升压电路后可直接驱动多个 LED 灯。本研究为 Ag_2Se 块体材料热电性能的优化提供了新思路。

A02-P30

High Thermoelectric Performance in (Ga, Yb) Co-doped Bi_2S_3 Bulks Achieved by Band Structure and Carrier Concentration Modulation

Zeyuan Yang, Zhen-Hua Ge*

Kunming University of Science and Technology

Due to their high abundance, low cost, and low toxicity, Bi_2S_3 -based thermoelectric materials without Te are significantly promising for eco-friendly and scalable applications. However, the ZT value of Bi_2S_3 -based is not high enough and must be further improved. The rare-earth element doping is a promising strategy for synergistically enhancing the electrical and thermal transport properties. This study selected GaTe and YbBr₃ for co-doping in Bi_2S_3 polycrystals using a solid-state reaction and spark plasma sintering, which enabled simultaneous modulation of the band structure and carrier concentration for significantly enhanced thermoelectric and mechanical properties. Specifically, the synergistic optimization of electrical and phonon transport was initially achieved through GaTe doping in Bi_2S_3 , which effectively reduced the lattice thermal conductivity while enhancing electrical conductivity. However, the improvement in thermoelectric performance with GaTe doping alone remained limited. Br substituted S to introduce extra electrons, while Yb replaced Bi to reduce the bandgap from 1.38 to 1.05 eV. The two effects synergistically optimized the electrical transport properties of the matrix. As a result, the optimized $\text{Bi}_2\text{S}_3 + 0.5 \text{ wt\% GaTe} + 1.0 \text{ wt\% YbBr}_3$ sample achieved an exceptional average power factor of $475.4 \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ over 323–773 K. Additionally, point defects, dislocations, and micropores induced by the second phase contributed to strong phonon scattering, leading to a low lattice thermal conductivity of $0.56 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ at 773 K. Consequently, a peak ZT value of 0.67 at 773 K and a high average ZT value of 0.45 over 323–773 K were achieved, which were relatively higher than other values reported in the literature. Furthermore, the mechanical properties were improved, with hardness increasing from 2.55 to 2.93 GPa, making Bi_2S_3 more deformation-resistant and durable. This study showed that co-doping rare earth elements was an effective approach for enhancing the thermoelectric and mechanical properties of the Bi_2S_3 material.

A02-P31

晶界工程对 BiSbTe 基合金热电性能及力学性能的影响

马世方*

九江学院

层状结构的 Bi_2Te_3 基合金是室温附近性能最优的热电材料。然而，由于层与层之间的范德华相互作用较弱而导致其力学性能较差，阻碍了 Bi_2Te_3 基合金的进一步商业化应用。为此，本文采用粉末冶金结合放电等离子烧结工艺制备了一系列的 BiSbTe 基热电材料。显微结构表征结果表明，增加球磨时间可显著降低热电材料的晶粒尺寸。输运性能测量发现，晶粒细化可显著提高 BiSbTe 基热电材料的 Seebeck 系数，降低热导率，且保持较大的霍尔迁移率，对应的热电性能显著提高。同时，晶粒细化大幅提高维氏硬度，热电材料的机械性能显著提升。

A02-P32

Al 位 V 取代和 V 位 Nb 掺杂协同提升 Fe₂VAl 合金热电性能余健^{*1}, 郑元顺², 魏平², 赵文俞²

1. 九江学院, 材料科学与工程学院
2. 武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室

全赫斯勒合金 Fe₂VAl 蕴含丰富的热-电-磁耦合效应和良好的机械性能, 是一种潜在的极具应用价值的高性能热电材料, 但其高晶格热导率严重阻碍了热电优值 zT 提升。本研究首先采用电弧熔炼工艺制备了名义组成为 Fe₂V_{1-x}Al_{1-x} ($x = 0 \sim 0.21$) 的材料, 研究了 Al 位 V 取代对其微观结构、能带结构和电热输运性能的影响规律, 并在此基础上通过 V 位 Nb 掺杂进一步提升热电性能。结果表明, Al 位 V 取代将费米能级提升至导带底部, 使材料发生由 p 型传导向 n 型传导转变。随着 V 取代量增大, 载流子浓度大幅提升, 电导率先增大后小幅度降低, Seebeck 系数逐渐减小。Al 位 V 取代诱发的强烈点缺陷散射可显著降低晶格热导率, 取代量为 0.21 的材料具有最低晶格热导率, 室温时仅为 $6 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, Fe₂V_{1.15}Al_{0.85} 的材料 zT 值在 590 K 时达 0.14。进一步掺杂 Nb 后, 电导率出现降低, 但 Seebeck 显著增大, 晶格热导率大幅降低, Fe₂V_{1.1}Nb_{0.05}Al_{0.85} 材料具有最高的功率因子 $2.92 \text{ mW K}^{-2} \text{ m}^{-1}$ 和最低的晶格热导率 $3.52 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, 并取得最高 zT 值 0.16, 与 Fe₂VAl 基体材料相比, 提升近 2 个数量级。本研究表明, Al 位 V 取代和 V 位 Nb 掺杂是协同提升 Fe₂VAl 合金热电性能的有效策略。

A02-P33**通过钨原子层沉积界面效应协同优化 TiCoSb 基合金的热电性能优化**

张文星*, 陈衍晖

韩山师范学院

资源短缺和能源危机是社会面临的主要挑战, 热电材料因其直接将热能转化为电能的能力, 是一类备受关注的新能源材料。热电材料的性能的优劣通常由热电优值 ZT 的大小表示, 材料热电优值的提升需要提高材料塞贝克系数 S 和电导率 σ , 或者降低热导率 κ 。但是, 塞贝克系数 S 、电导率 σ 与热导率 κ 之间存在强耦合关系, 这使得传统优化方法 (如单纯调整载流子浓度或合金化) 难以有效地提升 ZT 值。所以, 如何通过适当方法解耦热电参数, 成为热电材料研发中的核心问题。

本工作提出了一种通过原子层沉积 (ALD) 方法在 TiCoSb 基体粉末的晶粒表面沉积纳米钨, 通过纳米钨第二相在金属-半导体界面形成能量势垒, 形成电子注入效应和能量过滤效应以同时提高 σ 和 S 。同时, 通过钨与基体之间的高声子阻抗, 有效抑制了晶格热导率的上升, 实现了 TiCoSb 基材料热电性能的协同增强。在现有文献中处于较高水平。本研究展示的纳米复合材料界面设计原理可扩展至其他热电体系, 为热电材料中热电参数的解耦提供了新途径。

A02-P34**高性能高强度本征 P 型 Bi_{0.3}Sb_{1.7}Te₃ 热电材料: 原子缺陷抑制及发电和制冷器件研究**

樊震, 赵琪, 王伊, 赵怀周*

中科院物理所怀柔研究部

高机械强度、高热电性能 P 型 (Bi,Sb)₂Te₃ 材料在近室温区热电转换领域至关重要, 可靠的材料合成和制备具有一定迫切性。高温合成过程中通常产生反位 Sb_{Te} 和空位 v_{Sb} 点缺陷贡献额外载流子, 这些缺陷同时作为空穴和声子传输的散射中心。目前, 无晶格缺陷的本征 P 型 (Bi,Sb)₂Te₃ 的电热输运性质仍有待研究。本研究中, 我们提出了通过简单的机械合金化结合等离子烧结 (SPS) 工艺, 在晶体学缺陷抑制的本征 (Bi,Sb)₂Te₃ 中实现机械强度和热电性能的协同增强。 Sb_{Te} 和空位 v_{Sb} 受体缺陷的有效抑制有助于显著提高载流子迁移率。本征 Bi_{0.3}Sb_{1.7}Te₃ 组分具有 (Bi,Sb)₂Te₃ 体系中较大的带隙 (0.24 eV), 实现了较宽温度范围内热电性能提升, 室温热电优值 $zT_{300\text{K}} = 1.16$, 且 300 - 473 K 的平均热电优值 $zT_{\text{ave}} = 1.21$ 。SPS 过程伴随纳米晶粒的原位受限粗化, 形成高结晶度且具有均匀分散纳米孔的微结构, 材料具有 206 MPa 的超高

抗压强度，超过目前商业热挤压 $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$ 产品。本工作搭配 N 型 Bi_2Te_3 构筑了 7 对热电臂器件，在热端 300 K 时实现了 70 K 的最大制冷温差，达到商业热挤压碲化铋器件水平。此外，与 N 型 Mg_3SbBi 构筑的 7 对热电臂全尺寸发电器件在 250 K 温差下实现了 9.5% 的热电转换效率，是目前碲化铋基发电器件的最高效率。本工作无需对本征 $(\text{Bi,Sb})_2\text{Te}_3$ 的复杂加工过程或外部掺杂，在热电发电和冷却领域初步显示应用潜力。

A02-P35**Microscopic and mesoscopic design unlocks high-performance n-type SnSe thermoelectrics**

Wenjie Li, Jing Shuai*, Yanglong Hou

School of Materials, Sun Yat-sen University, Shenzhen, 518107, China

N-type SnSe thermoelectrics have long been constrained by the lack of effective strategies to simultaneously optimize electrical transport, suppress lattice thermal conductivity, and enhance mechanical robustness. Here, we present a dual-scale design framework combining microscopic electroacoustic decoupling with mesoscopic ordered reconstruction to overcome these limitations. Through the incorporation of WCl_6 , electroacoustic decoupling is achieved, as confirmed by AC-STEM. Partial substitution of Sn and Se with W and Cl enhances carrier concentration, induces conduction band passivation and convergence, and significantly improves electrical transport. Simultaneously, the formation of low-dimensional defects and mesoscopic ordering reduces lattice thermal conductivity by disrupting phonon transport and aligning grain orientations. These synergistic mechanisms yield a remarkable thermoelectric figure of merit, $ZT \approx 1.9$ at 823 K, alongside a substantial improvement in mechanical hardness from 0.87 GPa to 1.5 GPa. This dual-scale approach not only establishes a novel pathway for advancing n-type SnSe thermoelectrics but also provides a generalizable strategy for designing high-performance thermoelectric materials with improved mechanical durability. These findings mark a significant advance in the pursuit of sustainable energy solutions and the development of robust, efficient thermoelectric systems.

A02-P36**基于超声辅助热压焊接方法制备热电器件与制冷性能提升**

汤志鑫，周畅，魏平，赵文俞*，张清杰

武汉理工大学

平板型热电器件的异质界面连接质量成为影响器件整体性能的关键因素。目前广泛应用于热电器件组装的热压焊接技术存在高孔隙率、成分不均匀和残余内应力等问题，造成了热电器件实际转换性能的衰减。本研究在热压焊接过程中引入横向超声波，分析了超声辅助焊接焊层的界面微观结构和接触性能（包括接触电阻与结合强度）变化规律。通过与常规热压焊接技术对比，发现超声辅助焊接接头试样在保持高结合强度的同时，其接触电阻大幅度下降。在 350°C 的热压焊接温度下，采用超声辅助工艺制造的平板型热电器件相比常规器件其制冷性能显著提升：最大制冷量增大 1 W，最大制冷温差提高 4-5 K。器件在 10 K 温差下的最大 COP 达到 3.2，较常规热压焊接器件提升了 18 %。该研究表明超声辅助热压焊接技术在热电器件制造方面具有潜在应用价值。

A02-P37**基于无接点 p-n 集成温差电复合材料实现高时空分辨率生物模拟热感受器**霍炳臣¹，杜春雨²，陈光明*²

1. 深圳大学，中国科学院大学

2. 深圳大学

人体温度是新陈代谢和体温调节功能的关键生理指标。为了模拟人类皮肤感知温度的能力，人们迫切需要开发出具有高时间和空间分辨率的仿生热感受器。在此，提出了一种选择性过滤方法，用于制备一种无接点的 p-n 型温差电模块，将 p 型和 n 型材料集成在一起，使界面处的电阻最小化。这种结构能够实现快速响应、收集微小的信号变化以及开路电压与温差之间的线性关系，适合作为仿生热感受器，以增强类机器人的智能感知能力。利用这种无接点的 p-n 模块作为传感元件，开发了一种具有高时间和空间分辨率的智能温差电传感系统。在时域热感知方面，该系统能够及时有效地识别热源，响应速度极快，小于 0.1 秒。此外，在空间热感知方面，该器件能够可靠地检测每个小于 $1 \times 1 \text{ cm}^2$ 区域内的热刺激。本研究为热电传感和仿生热感受器应用领域中的温度传感器提供了一种有效的策略。

A02-P38

Advancing Thermoelectric and Sensing Performance in Constrained GeTe Thin Films

Xiaoyu Sun*

Harbin Institute of Technology, Shenzhen

Thermoelectric thin films hold significant potential for self-powered microelectronic and advanced sensing devices. However, they normally demonstrate inferior electrical transport performance compared to their bulk counterparts. Herein, we deposited the growth-restricted GeTe thin films to improve their electrical transport performance and further employed optical thin films, serving as spectrally selective absorbers and radiative cooling coatings, to enlarge the temperature difference across the thermoelectric legs. The growth-restricted GeTe thin films with high crystallinity were achieved under the confinement effect of the top SiO_2 layer. Due to the increase in carrier mobility, the room-temperature power factor of the GeTe film is significantly improved to $26.1 \mu\text{W cm}^{-1} \text{K}^{-2}$. Incorporated with the W- SiO_2 -based spectrally selective absorber and PDMS/Ag radiative coating, the thin-film thermoelectric device assembled by the optimized GeTe and Ag_2Se thin films can realize a temperature difference of 22 K under the AM1.5 spectrum, and produce a maximum output power of $0.57 \mu\text{W}$. Furthermore, it can sense outdoor weather conditions through the detection of light intensity. These findings demonstrate the potential of GeTe thin film in both power generation and sensing.

A02-P39

基于 CuI 的透明热电薄膜研究

刘梦妍, 杨长*

华东师范大学

近年来，全球对能源的需求呈现持续增长的趋势。然而，在能源转换与利用过程中，仍有大量能量以废热的形式被直接排放至大气中，导致能源浪费与环境污染问题日益严重。因此，开发可替代的清洁能源，以实现社会的可持续发展，已成为当务之急。在这一背景下，热电材料因能够将废热直接转化为电能，从而有效提高能源利用效率，成为具有广阔应用前景的新型能源材料。尽管热电材料具有广阔的应用潜力，其在实际应用中仍面临诸多挑战。目前，商用热电材料多由 Bi、Te、Sb 等元素构成，尽管这些材料表现出优异的热电性能，但其高昂的成本、资源稀缺性以及潜在毒性限制了其在工业领域的规模化应用。鉴于此，本研究选用碘化亚铜 (CuI) 作为研究对象。CuI 不仅具有良好的半导体环境稳定性，其原料来源广泛、无毒且成本低廉，同时还具备较高的塞贝克系数和空穴导电性，以及相对较低的热导率等优势，因而在热电应用中展现出良好的应用潜力。本研究通过磁控溅射技术，制备出一系列 CuI 薄膜样品，研究其热电性能。在 300 K 的温度下测得 200 nm 厚度的 CuI 的热导率为 0.274 W/m K ，功率因子为 $108 \mu\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，热电优值为 0.119。通过光学透过性测试得到 50-300 nm 厚度的 CuI 薄膜在可见光波长和红外波长区间内有高透明性，结合柔性测试得到 CuI 薄膜在 7000 次弯曲后仍保持低于 20% 的电阻变化率，CuI 薄膜在柔性透明热电器件有着巨大的应用潜力。

A02-P40

SnBi₂Te₄ 外延薄膜中缺陷诱导多能谷及电输运优化

严帆, 柳伟*, 唐新峰

武汉理工大学

新颖的电子结构和优异的热电性能在拓扑绝缘体(TI)中的同时出现, 加速了研究人员对新结构拓扑绝缘体的探索。SnBi₂Te₄ 具有和 Bi₂Te₃ 类似的晶体结构和狄拉克类型的拓扑表面态, 且在自旋电子学器件、超导等领域展现出卓越应用潜力, 引发了人们对其热电性能的关注。在该体系内, 通过缺陷调控能带结构, 从而诱导多能谷产生, 是提高电子能谷简并数和优化热电材料电输运性能的一条有效途径, 但实验上容易引入第二相而劣化迁移率。在分子束外延 (MBE) 薄膜制备中, 通过生长工艺的调控, 结合 MBE 的非平衡生长特点, 可以在维持单相组分同时获得可控的反位缺陷含量。本工作基于上述策略, 制备了一系列 SnBi₂Te₄ 纯相薄膜。X 射线光电子能谱 (XPS) 和扫描隧道电子显微镜 (STM) 表明, 通过工艺调控实现了成分有效调控, 促进 Sn 和 Bi 互换并引入较高浓度的 Te 空位。角分辨光电子能谱 (ARPES) 和理论计算揭示出, 在 Sn 和 Bi 互换下, Γ 点导带形成了多能谷, Te 空位贡献的电子使得费米能级深入导带移动, 使 Γ 点和 M 点的导带可以同时贡献电子, 从而获得较高的能谷简并度。最终其功率因子在 375 K 达到 1.94 mW m⁻¹K⁻², 明显高于本征 SnBi₂Te₄ 的性能水平。

A02-P41

P 型 Bi_xSb_{2-x}Te₃ 组合薄膜的跨尺度表征及电热输运性质程嘉鸿¹, 金魁², 柳伟^{*1}, 唐新峰¹

1. 武汉理工大学材料复合新技术国家重点实验室
2. 中国科学院物理研究所

Bi₂Te₃ 基热电材料是室温热电性能最优异的热电材料, 在温差热电发电和热电制冷方面具有重要应用。实现宽温域高热电性能是 Bi₂Te₃ 基薄膜热电材料的重要研究课题。本研究利用组合激光分子束外延技术 (CLMBE), 通过优化生长工艺结合移动掩模板控制, 在单一 Al₂O₃ (0001) 衬底上实现了组分连续变化的 p 型 Bi_xSb_{2-x}Te₃ 组合薄膜的可控外延制备。在单个样品上通过紫外光刻结合微区电热输运表征, 获得了随着 Bi 含量变化而连续变化的电输运性能。随着 Bi 的含量从 0 逐渐增加到 2, 电导率由 19.4 S m⁻¹ 逐渐降低至 3.48 S m⁻¹; 载流子浓度先由 Sb₂Te₃ 端的 1.39×10²⁰ cm⁻³ 逐渐降低, 至中间组分后导电类型由 p 型转变为 n 型, 而后逐渐增加至 Bi₂Te₃ 端的 1.27×10²⁰ cm⁻³。上述结果表明, 组合薄膜可以实现单一薄膜样品的载流子浓度随组分的变化而连续变化, 为实现热电薄膜材料的宽温域性能提供了新思路 and 有效途径。

A02-P42

基于溶剂化结构设计的聚丙烯酰胺基热电水凝胶的性能优化

于鹏禄*, 钱万语, 兰金叻, 于运花, 杨小平

北京化工大学

通过引入 DMSO 作为共溶剂, 制备了一系列 PAM/SA-DMSO 水凝胶。由于 DMSO 能够有效地与锂离子相互作用, 形成稳定的溶剂化结构, 提升了水凝胶中的离子溶剂化熵, 从而使离子水凝胶热电性能得到提升。当 DMSO 添加量为 1 ml 时, 离子塞贝克系数最高, 为 1.87 mV K⁻¹。并且, PAM/CMC-1DMSO 水凝胶还具有良好的机械性能, 拉伸应力和断裂应变分别为 160.2 kPa 和 870.6%, 断裂韧性可达 729.0 kJ m⁻³。在应变为 100% 和 200% 的循环拉伸测试中, 其回弹性可达 95%。且由于 DMSO 与水形成强氢键作用, 破坏了水分子的有序排列, 从而可以抑制冰晶的形成, PAM/CMC-DMSO 离子水凝胶具有优异的抗冻性能。水凝胶可在 -20°C 条件下保持柔性和导电能力, 而 PAM/CMC-2DMSO 水凝胶抗冻温度更是达到 -60°C。此外, PAM/CMC-1DMSO 水凝胶还展现出良好的传感性能, 在较宽的传感范围内具有优异的灵敏度。基于 PAM/CMC-1DMSO 热电功能和传感功能进一步组装了自供电传感器, 展现出出色的传感稳定性和可逆性。

A02-P43

六方相 BiCuTeO 薄膜的可控制备及横向热电效应研究

袁希珍, 米兆宇, 闫国英, 王淑芳*

河北省保定市五四东路河北大学

探索新结构对于丰富材料特性、拓展潜在功能具有重要意义。不同于 BiCuTeO 块体的四方相结构, 在 c 轴取向生长的 BiCuTeO 薄膜中发现了一种新的六方金属相。该薄膜由六方的 Bi₂O₂ 层和 Cu₂Te₂ 层沿 c 轴交替堆叠, 晶格参数为 $c = 12.45 \text{ \AA}$, $a = b = 4.3 \text{ \AA}$ 。基于第一性原理, 通过交替堆叠六方的 Cu₂Te₂ 和 Bi₂O₂ 单层构建了该六方相的可能晶体结构模型。声子谱和电子能带结构计算表明该六方相的稳定性和金属本质。高电导率和较低的 Seebeck 系数使得该薄膜在 300-600 K 的功率因子达到 $3.4\text{-}7.7 \text{ mW cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。此外, 在 c 轴倾斜的 BiCuTeO:Ag_x 薄膜中观察到了超过 40 伏的巨大横向热电 (TTE) 电压, 其上升和衰减时间分别为 52 ns 和 195 ns。归一化灵敏度达到 $2(\text{V/mJ})/\text{mm}^2$, 超过了四方相 BiCuSeO 薄膜以及 TTE 研究的许多材料。该结果表明, 六方的 BiCuTeO 薄膜在高灵敏度、快响应、自供电的紫外脉冲光检测领域具有重大潜力。

A02-P44

基于衬底温度的 SnSe 薄膜结晶优化及其热电性能优化研究

胡一康, 李志亮, 王淑芳*

河北大学

具有本征超低热导率的 SnSe 基热电材料在中温区展现出优异的热电性能。采用磁控溅射技术在非晶玻璃衬底上成功制备了 a 轴择优取向的 SnSe 薄膜, 系统探究了衬底温度对薄膜结晶特性与组分比的协同调控机制。实验表明: 通过优化热力学参数可显著改善薄膜结晶质量, 晶粒尺寸的适度增大使载流子迁移率提升; 温度梯度诱导的组分偏析现象揭示 Se 元素在 623 K 以上出现选择性挥发, 导致载流子浓度呈指数衰减; 在临界温度 698 K 时观察到 Sn 元素的显著挥发及 SnSe₂ 第二相的形成, 此相变使载流子浓度回升至 10^{17} cm^{-3} 量级, 且导致迁移率下降。最终在最优衬底温度 (698 K) 下获得的 SnSe 薄膜展现出优异的热电性能, 其功率因子在 600 K 达到 $3.3 \text{ } \mu\text{W cm}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。本工作为低成本制备大面积高性能 SnSe 基热电取向薄膜提供了可量化的工艺窗口与理论依据。

A02-P45

Post-selenization tailored carrier-crystallographic synergy in c-axis Bi₂Se₃ thin films for advanced thermoelectrics

Zhi Gao, Shufang Wang*, Zhiliang Li, Shuaihang Hou

Hebei University

Bi₂Se₃ has emerged as a promising thermoelectric (TE) material due to its environmentally benign composition and earth-abundant constituents. However, the practical implementation of Bi₂Se₃-based systems remains challenging due to suboptimal TE performance. This study demonstrates the fabrication of c-axis oriented Bi₂Se₃ thin films through pulsed laser deposition, with subsequent selenization treatment significantly enhancing TE performance through dual optimization of carrier concentration and crystallographic alignment. A strategic post-deposition selenization process effectively mitigates selenium vacancies and correspondingly reduces the carrier concentration to $2.0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ while improving in-plane carrier mobility. A high power factor (PF) of about $9.5 \text{ } \mu\text{W} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$ is achieved at 475 K in the highly c-axis oriented Bi₂Se₃ thin films selenized for about 60 min, outperforming the reported state-of-the-art Bi₂Se₃ films. Demonstrating practical applicability, an 8-leg planar thin-film device generates an exceptional power density of $441.3 \text{ } \mu\text{W/cm}^2$ under a 25 K temperature gradient, establishing new performance benchmarks for chalcogenide-based microgenerators. These findings

provide crucial insights into defect engineering and structural optimization strategies for developing high-performance TE devices compatible with self-powered microelectronic applications.

A02-P46

Non-Covalent Interaction of Cellulose Nanofiber: Towards Homogeneous PEDOT Polymerization and Enhanced Electrical Properties

Yuxuan Xia^{1,2,3}, Xuan Yang^{1,2,3}, Khak Ho Lim^{*1,2,3}

1. National Key Laboratory of Chemical Engineering and Low-Carbon Chemical Engineering Technology, College of Chemical and Biological Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China
2. Zhejiang-Spain International Joint Laboratory of Advanced Material and Product Engineering, Institute of Zhejiang University-Quzhou, Quzhou, China
3. Key Laboratory of Biomass Chemical Engineering of Ministry of Education, College of Chemical and Biological Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China

Nanocellulose is renowned for its abundance and exceptional mechanical strength, but its electrical insulation has hindered their application for wearable electronics. In this study, we present a versatile methodology to produce highly conductive and durable nanocellulose fibers through an electrostatic potential-enhanced in-situ polymerization of poly(3,4-ethylenedioxythiophene) (PEDOT). Guided by a molecular dynamic simulation, we controlled electrostatic interactions by tailoring the chain length of PEDOT, achieving homogeneous polymerization. Compared to conventional in-situ polymerization and blending methods, this approach prevented the self-aggregation of PEDOT crystallites, which would otherwise localize the charge carriers and hinder electrical transport, as confirmed by Scanning Kelvin Probe Microscopy. These fibers can leverage nanocellulose's capillary effects to rearrange PEDOT crystallites, thereby boosting the electrical conductivity by 5 orders of magnitude over suboptimal samples. The conductive nanocellulose paper achieves superior electrical conductivity, durability and environmental stability, retaining over 90% of electrical properties (91 S/cm) over 2000 bending cycles, 5000 abrasion tests and long-term high temperature and high humidity durability tests (85°C, 85% RH), while also demonstrating a stable thermoelectric performance with a power factor exceeding 3.8 $\mu\text{W}/\text{mK}^2$ and a promising device output of 46.6 nW. These findings advance the conventional notion that charge-transporting nanocellulose can only be obtained by carbonization, graphitization, and physical blending, and further demonstrate its potential for wearable applications.

A02-P47

碘掺杂氢酞菁微观结构与电输运性能研究

叶宸宇, 瞿三寅*

中国科学院上海硅酸盐研究所

通过气相输运反应制备了碘掺杂氢酞菁 (H_2PcI) 样品, 并系统研究了碘掺杂对其电输运性能的影响。SEM、XPS、拉曼和 XRD 分析结果表明, 在碘和氢酞菁反应的过程中, 电子由酞菁环转移到碘原子, 碘以碘三负离子 (I_3^-) 的形式存在。碘掺杂使得 H_2PcI 样品的载流子浓度相比于 H_2Pc 显著提高, 其室温到 400 K 的电导率比纯 H_2Pc 提高 4-5 个数量级, 350 K 时达到 225 S/m。本文研究结果表明, 气相输运法是实现有机小分子高浓度掺杂的有效方法, 为其他有机小分子晶体材料的掺杂提供了借鉴。

A02-P48

有机碳化改性的碳纳米管: 高温下稳定的热电性能

邝凤霞¹, 梁丽荣², 陈光明^{*2}

1. 深圳大学, 中国科学院大学

2. 深圳大学

碳纳米管基热电复合材料在柔性电子领域具有广阔的应用前景。然而，由于它们的低热稳定性，其在高温下的热电性能往往会下降。通过有机碳化改性制备了高稳定性的碳纳米管基高温热电复合材料。利用聚多巴胺将碳纳米管与碳化葡萄糖相连接，在碳纳米管表面形成保护层。这层保护层起到了“一石二鸟”的作用。一方面，碳化葡萄糖涂层增强了碳纳米管表面的电子转移特性，从而提高了电子转移效率。另一方面，它减少了碳纳米管在高温下在空气中的氧化，从而提高了热电稳定性。该复合材料具有优良的电性能，在 513 K 时电导率为 $1014.7 \pm 40.1 \text{ S cm}^{-1}$ ，塞贝克系数为 $48.5 \pm 1.6 \text{ } \mu\text{V K}^{-1}$ ，功率因子为 $238.5 \pm 11.2 \text{ } \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 。在 583 K（温差 310 K）时，功率密度可达 $0.156 \text{ } \mu\text{W cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$ 。这种方法为设计和制造高性能热电材料提供了一种新的途径。

A02-P49

通过锌基金属有机骨架材料(ZIF-8)协同增强 Bi-Sb-Te 合金的热电性能和机械性能

俞江湖，葛振华*

昆明理工大学

碲化铋(Bi_2Te_3)基热电材料因其高热电优(ZT)值和热稳定性成为商业化主流，但进一步提升综合性能仍面临挑战。传统优化策略常面临电-运参数相互制约及力学性能不足的瓶颈，亟需开发新型复合改性方法。本研究提出金属有机框架辅助固相烧结新策略，将锌基沸石咪唑酯骨架材料 ZIF-8($\text{C}_8\text{H}_{12}\text{N}_4\text{Zn}$)引入 $\text{Bi}_{0.42}\text{Sb}_{1.58}\text{Te}_3$ 基体。创新点在于利用 ZIF-8 的热不稳定性，在烧结过程中同步实现：(1)原位热解生成碳基第二相，(2) Zn^{2+} 取代 Bi^{3+} 晶格位，(3)诱导位错网络与微孔结构，构建多尺度声子散射体系。该方法突破了传统水热法的工艺限制，实现了电-热-机械性能的协同调控。实验表明，0.3 wt% ZIF-8 掺杂样品展现出多重优化效应：①晶格热导率降至 $0.47 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ，源于均匀分布第二相、高密度位错和纳米微孔的多级散射；② Zn^{2+} 掺杂使载流子浓度提升至 $3.06 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ，功率因子达 $4000 \text{ } \mu\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ ；③由于晶粒细化，维氏硬度提升 20%至 1.2GPa。由此实现峰值 ZT 值 1.42(300 K)和平均 ZT 值 1.16(300-500 K)，单臂器件效率达 5%($\Delta T=250 \text{ K}$)。本研究通过 ZIF-8 热解创新性地解决了碲化铋基材料电-热-机械性能协同优化的难题，其核心机制在于：热分解产物的多尺度缺陷工程、 Zn^{2+} 受主掺杂效应和晶界强化效应的三重耦合。该策略为其他热电体系提供了“设计-载流子调控-力学增强”一体化的新思路，对推动柔性热电器件发展具有重要应用价值。

A02-P50

Enhanced Thermoelectric Performance in $\text{Cu}_7\text{Sn}_3\text{S}_{10}$ -based Hybrid Materials with Highly Dispersed Multiwalled Carbon NanotubesShun Wan^{*1}, Tingting Deng², Qingfeng Song³, Xudong Bai¹, Zhiping Liu³, Pengfei Qiu³, Tianran Wei⁴, Xun Shi³

1. Wuzhen laboratory

2. School of Chemistry and Materials Science, Hangzhou Institute for Advanced Study, University of Chinese Academy of Sciences

3. State Key Laboratory of High Performance Ceramics and Superfine Microstructure, Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences

4. State Key Laboratory of Metal Matrix Composites, School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University

Ternary copper chalcogenide $\text{Cu}_7\text{Sn}_3\text{S}_{10}$ has attracted great attention due to its complex and tunable crystal structure, good thermoelectric performance, and earth-abundant and eco-friendly elements. However, the optimization of thermoelectric performance in $\text{Cu}_7\text{Sn}_3\text{S}_{10}$ is greatly restricted because the strategy of element doping to tune electrical and thermal transports is only limited by halogen elements. Here, highly dispersed

multiwalled carbon nanotubes (MCNTs) are introduced into $\text{Cu}_7\text{Sn}_3\text{S}_{10}$ to realize hybrid materials with enhanced thermoelectric performance. A series of $\text{Cu}_{7+y}\text{Sn}_3\text{S}_{10}/x$ wt.% MCNTs hybrid materials are successfully fabricated by ball milling combined with spark plasma sintering. The high-purity $\text{Cu}_7\text{Sn}_3\text{S}_{10}/\text{MCNTs}$ hybrid materials are identified as polymorphs simultaneously crystalizing in tetragonal, primitive cubic, and face-centered cubic structures. Such complex phase structures can produce lots of intrinsic cation-disorders, phase interfaces, grain boundaries, and $\text{Cu}_7\text{Sn}_3\text{S}_{10}/\text{MCNTs}$ heterointerfaces, which can strengthen phonon and carrier scattering, while the heterointerfaces can serve as carrier reservoirs to trap holes to reduce the carrier concentration toward the optimal range. Combining these effects, both lattice thermal conductivity and carrier thermal conductivity are significantly reduced. Correspondingly, a maximum figure of merit zT of 0.65 is achieved in $\text{Cu}_{7.05}\text{Sn}_3\text{S}_{10}/2\text{wt.}\%$

MCNTs at 750 K, about twice as compared with the MCNTs-free $\text{Cu}_7\text{Sn}_3\text{S}_{10}$. This work suggests that hybrid materials with well dispersed MCNTs can greatly enhance the material's thermoelectric performance.

A02-P51

Anion-Complexation-Driven Giant Thermopower and Switchable Polarity in PEDOT:PSS Ionic

Thermoelectric for High-Performance Energy Harvesting

周思理¹, 张鹏^{1*}

1. 中山大学, 聚合物复合材料及功能材料教育部重点实验室, 材料科学与工程学院, 广州 510275

热电材料 (TE) 能够直接进行热电转换, 在废热回收和可穿戴电子产品等可持续能源技术方面具有变革潜力。相较于依靠空穴和电子传输电子型热电材料 (e-TEs), 离子热电材料 (i-TEs) 通过阴、阳离子传输, 其表现出来高的离子热电势和较大的热功率而受到广泛关注。然而有限的离子电导率、不稳定的载流子极性、以及性能依赖于环境湿度等关键问题的存在, 限制了它们的实际应用¹。聚 3, 4-乙烯二氧噻吩/聚苯乙烯磺酸盐 (PEDOT:PSS) 是一种由导电聚合物 PEDOT 和 水溶性非导电聚合物 PSS 通过库仑力相互作用在分子水平上混合而成的高分子杂化材料, 是当前最受关注、应用最为广泛的一种聚合物热电材料²。近年来, 科学家通过二次掺杂金属盐或有机盐的方式, 提高了其作为基体材料的热功率, 同时依靠本身优异的导电性, 拓宽了其在离子热电领域的应用。本次会议, 报告人将汇报课题组在高性能 PEDOT 基有机离子热电材料方面相关的最新工作。通过四氟硼酸锂 (LiBF_4) 和氯化铜 (CuCl_2) 的先后掺合, 我们设计出了可调热功率为 $+12.23 \text{ mV K}^{-1}$ 至 -18.83 mV K^{-1} 的 PEDOT:PSS 基 i-TEs, 三元杂化热电膜的功率因子最大可达 $23.77 \text{ mW m}^{-1}\text{K}^{-1}$ 。通过 Zeta 电位与动态光散射技术阐述了离子-胶体相互作用促进热力学, 同步辐射光源 X 射线吸收精细谱、紫外光谱和原位拉曼技术的使用明确了主导传输离子由 $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$ 、 Cl^- 向 $[\text{CuCl}_x]_{2-x}$ ($x=1\sim4$) 最后向稳定四面体结构 $[\text{CuCl}_4]^{2-}$ 的转变。由 p-n 型制成的离子热电发电机 (iTEG) 在 2K 温度梯度下的功率密度达 18.66 mW m^{-2} , 推进其在自供电系统和可扩展的能量收集应用中的可行性³。

参考文献:

1. B. Yang, G. Portale, Colloid and Polymer Science, 2021, 299, 465-479.
2. X. Li, Z. He, Z. Liu, Y. Chen, Z. Zhou, G. Chen, W. Qi, D. Rauber, C. W. M. Kay and P. Zhang, Chem Eng J, 2023, 454, 140047.
3. S. Zhou, X. Li, J. Wang, Q. Meng, Z. Liu, J. Zeng, Y. Zhang, L. Li, D. Zhao, X. Crispin and P. Zhang, Under Submission.

A02-PO01

MoS 耐高温性征实验方法

吕方*

安泰科技

MoS 作为润滑剂的添加可提高热稳定性，其自身品控的掌握要素之一在高温下的抗拉强度为研究视角进行分析，通过粉末冶金工艺生产加工试验用基材,实验温度设定为 1280℃，又依据 GB/T228.2 标准，将拉伸位移速率定为四档（0.5MM/MIN 1MM/MIN 1.5MM/MIN 2MM/MIN）试验，从抗拉强度与断后延伸率，维氏硬度三项指标为基点分析 MoS 耐受高温性能参数变化的特征。

A02-PO02

Probing structural and thermoelectric properties of polycrystalline $\text{GeSb}_{4-x}\text{In}_x\text{Te}_7$ compounds

Shao-Bo Mi*, Peng Li, Lu Lu

Ji Hua Laboratory

Thermoelectric (TE) materials have the ability to directly convert heat into electricity or vice versa, which holds significant potential for applications in waste heat recovery, air conditioning, semiconductor chip cooling, and advanced refrigeration, however, their efficiency is often limited by the material performance. Among the TE materials, (quasi) two-dimensional layered materials with strong intra-layer chemical bonds and weak inter-layer van der Waals (vdWs) interactions have received widespread attention. Among them, layered Ge-Sb-Te compounds have attracted considerable interest due to their impressive thermoelectric properties, including high electrical and low thermal conductivity. In this work, we report on the structural and TE properties of single-phase polycrystalline $\text{GeSb}_{4-x}\text{In}_x\text{Te}_7$ compounds synthesized by vacuum hot-pressing sintering. Our atomic-scale microstructural investigations reveal that the compounds exhibit site-occupation disorder due to the mixing of In, Ge, and Sb cations. The property measurements indicate that In-doping significantly increases the Seebeck coefficient while effectively reducing the thermal conductivity of the pristine GeSb_4Te_7 . Consequently, the highest zT value of approximately 0.625 was achieved for the $\text{GeSb}_{3.5}\text{In}_{0.5}\text{Te}_7$ compound, which is about 42% higher than that of the pristine GeSb_4Te_7 at 750 K. Additionally, our theoretical calculations suggest that In-doping modifies the band structure, thereby enhancing the TE performance. These findings provide deeper insights into the configurational entropy design and optimization of layered thermoelectric materials.

A02-PO03

Te 掺杂调控 n 型 $\text{Mg}_{3.2}\text{Sb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}$ 材料热电性能

莫宇涛，祁宁，陈志权*

武汉大学

提高能源综合利用率对于解决日益突出的气候变化和环境问题至关重要。由于能够将热量直接转化为电能，热电（TE）技术一直被认为是一种前景广阔的解决方案，n 型 Mg_3Sb_2 基热电材料因其优异的热电效率近期备受瞩目。本工作旨在通过 Te 掺杂来调控 n 型 $\text{Mg}_{3.2}\text{Sb}_{1.5}\text{Bi}_{0.5}$ 材料的热电性能。本工作采用球磨法结合放电等离子体烧结（SPS）成功制备出了一系列 $\text{Mg}_{3.2}(\text{Sb}_{0.75}\text{Bi}_{0.25})_{2-x}\text{Te}_x$ ($x=0.01, 0.02, 0.03, 0.04$) 样品。XRD 结果显示，所有衍射峰均对应于 $P\bar{3}m1$ 空间群的 $\alpha\text{-Mg}_3\text{Sb}_2$ 衍射峰。电性能测试结果表明， $x=0.01$ 样品在 473 K 和 723 K 具有 $2.38 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 和 $1.80 \text{ mW m}^{-1} \text{ K}^{-2}$ 的高功率因子。热性能测试结果显示， $x=0.01$ 样品在 723 K 时获得了 $0.80 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ 的低热导率。得益于热电性能的协同优化， $\text{Mg}_{3.2}(\text{Sb}_{0.75}\text{Bi}_{0.25})_{1.99}\text{Te}_{0.01}$ 样品在 723 K 时的 ZT 峰值高达 1.61。

A02-PO04

Sm_{1.95}Sr_{0.05}CuO_{4-δ} 中氧空位浓度对热电输运性质的调控及阈值效应研究魏凡茜^{1,2}, 关洲¹, 张富祥*¹

1. 松山湖材料实验室

2. 华南理工大学

稀土铜氧化物热电材料（如 Sm₂CuO₄）具有优异的高温稳定性、高的抗氧化性和较大的塞贝克系数，但其高电阻率和高热导率，导致其热电最优值（ ZT ）较小，而通过掺杂和热处理策略有望提高其热电性能。本研究以 Sr 掺杂 Sm₂CuO₄ 化合物为对象，利用不同温度和气氛环境的热处理工艺调控氧空位的浓度，形成 Sm_{1.95}Sr_{0.05}CuO_{4-δ} 化合物并利用 XPS 对样品中的氧空位含量进行测量，发现氧空位浓度 δ 随真空热处理温度升高而增加。结果表明，当 $\delta \leq 0.08$ 时，化合物的载流子类型为“空穴”，随温度升高化合物的电阻率先增大后降低，载流子类型由“空穴”转变为“电子”；当 $\delta > 0.08$ 时，由于氧空位浓度较大，化合物的载流子类型为“电子”。这一氧空位浓度阈值效应的发现，为深入理解稀土铜氧化物热电输运机制及优化其热电性能提供了重要实验依据和新途径。