

Half-Heusler 材料结构性能及研究进展

周婷 王朝榕 黄红燕 黄靖*通讯作者

(莆田学院环境与生物工程学院 福建莆田 351100)

摘要: 化学工业中余热废热的再利用是解决当下能源问题的重要方式。热电材料是具有热效应和电效应且能相互转换作用的功能性新型材料, 利用这种性质可以将低品质的余热废热转化为优良品质的电能。Half-Heusler 热电材料具有优异的耐高温性和电气性能是一种新型的热电材料。本文主要综述 Half-Heusler 热电材料的研究热电和潜在应用。

关键词: Half-Heusler 材料; 高热导率; 掺杂; 潜在应用

1 前言

随着科技文化、政治经济的不断进步, 能源消耗巨大, 由于化石燃料的不可再生性以及因化石能源燃烧导致的环境污染问题频发, 人类开始有意识的寻找新型可再生资源。除了利用太阳能、风能等可再生能源外, 热电材料的研究是近些年的主流。热电材料是能将电效应与热效应作用相互转换的功能性新型材料^[1], 可以实现能量之间的相互转换。在全部工业能耗中, 超过 50% 的工业能耗是通过余热损失的。因此, 热电材料不仅可以通过能量转换来保护环境, 也提供了将废热转换为有用电能的有可能的解决方案, 这为解决不可再生资源以及环境问题提供了新的方向。

目前工业上最常用热电材料是基于 PbTe 合金^[2], 但是, PbTe 材料中的 Pb 本身具有毒性会对环境造成污染, 且 PbTe 合金的转化率极低以及其不稳定性等因素都大大地限制其工业上的大规模应用。而近些年来出现了 Half-Heusler 化合物等新型的热电半导体材料具有优异的耐高温性和电气性能、良好的机械强度和热稳定性, 而且没有 PbTe 材料的毒性和不稳定性。本文综述 Half-Heusler 材料研究进展, 包括最新 Half-Heusler 合金材料的结构以及应用方面的研究。

2 Half-Heusler 材料的结构

Half-Heusler 化合物是通式 ABX 的三元金属互化物, 其中 A 通常是带正电的过渡金属, B 是带次正电的过渡金属, X 则是主族元素。Half-Heusler 化合物由 3 个填充的互穿面心立方亚晶格和 1 个空位亚晶格构成, 如图 1 所示。在 Half-Heusler 化合物中, 由于 A、B 和 X 三个晶格位置容易被其他元素所替代, 若空位亚晶格也由过渡金属 B 填充, 则休氏勒结构可由式 AB₂X 表示。

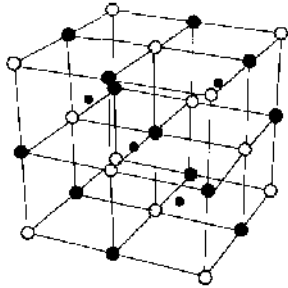


图 1 ABX 型 Half-Heusler 化合物晶体结构

3 Half-Heusler 热电材料性能及改善

Half-Heusler 合金的应用主要受其高热导率的制约, 对于降低晶格热目前主要有如下四种方法: 第一, 化学替位掺杂。例如: TaCoSb 合金中掺杂 Sn, Sn 掺杂使得样品的热导率和电导率同时降低, 但是材料的热电性能并没有得到提升, 所以最终选择往 Sb 右侧方向掺杂改性^[3]。第二, 外加引入以及原位形成纳米结构。例如, 在 Half-Heusler 合金中可以通过高能球磨结合直流热压法原位获得纳米复合相, 其中

形成的界面效应对热量的传输起到了一定的阻碍作用^[4]。第三, 利用不同原子之间质量和尺寸的差异引入质量场和应力场波动散射。第四, 对 Half-Heusler 的三元体系的研究。

4 Half-Heusler 热电材料的应用

热电材料是可以将热电直接进行彼此转换的功能材料。尽管目前热电能量的转换还远不如蒸汽机那样高效迅速, 但是随着未来电热性能的改善提升, Half-Heusler 热电材料将在工业余热发电、航天、汽车废热发电、微电子、制冷等领域将会具有极大的竞争力。随着 Half-Heusler 热电材料性能的改善, Half-Heusler 热电材料有望取代 PbTe 合金成为新一代的热电材料。

5 总结

Half-Heusler 热电材料, 常工作于中高温温区。它在具有较优秀热电优值的同时, 也具备良好的电学运输性能。尤其是这类材料体系数量大, 优异的稳定程度、热稳定性和机械性能使之能够成为所期望的热电材料。然而, 大多数 Half-Heusler 热电材料不足在于晶格热导值远高于其它热电材料体系。现如今, 大幅降低 Half-Heusler 热电材料的晶格热导率的研究方法除了对材料进行纳米化处理外, 还有在不同原子位置上的合金化手段。尽管先进的 Half-Heusler 热电材料性能在研究开发上取得了令人瞩目的进展, 但对提高现有热电材料的热电性能的改进以及降低晶格热导率的研究, 仍将是今后研究的重点。

参考文献

- [1]赵新兵. 热电材料与温差发电技术[J].现代物理知识, 2013, 25(147): 42-46.
- [2]黄丽宏, 袁波, 张勤勇. Half-Heusler 热电材料的研究进展及能带合并策略的应用[J].西华大学学报(自然科学版), 2016, 35(04): 1-7.
- [3]王浚臣, 袁国才, 禹劲秋, 莫小波, 金应荣, 黄丽宏. Half-Heusler 合金 TaCoSb 的制备及 Sn 掺杂对其热电性能的影响[J]. 西华大学学报(自然科学版), 2018, 37(162): 74-78.
- [4]樊毅, 李小亚, 蒋永锋, 包晔峰. Sb 掺杂对 N 型 Half-Heusler 材料热电性能的影响[J].无机材料学报, 2014, 29(178): 37-41.

基金项目:

教育部产学合作协同育人项目子课题 (201902323030815, 总课题 201902323030) 福建省本科高校一般教育教学改革研究项目 (FBJG20190099, FBJG20180331, FBJG20200109) 莆田学院校级教育教学改革研究项目(JG201917, JG202022) 莆田学院重点实验室协同创新专项 (2018ZP03, 2018ZP08, 2018ZP07) 莆田学院本科科研立项: Half-Heusler 热电材料能带的模拟与计算(负责人: 周婷)