

高性能铅锡硫族热电材料的制备、性能调控与应用

赵立东

北京航空航天大学材料科学与工程学院, 北京 100191

E-mail: zhaolidong@buaa.edu.cn

High-performance lead/tin chalcogenide thermoelectric materials: Preparation, optimization and application

Li-Dong Zhao

School of Materials Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China

E-mail: zhaolidong@buaa.edu.cn

doi: [10.1360/TB-2025-0049](https://doi.org/10.1360/TB-2025-0049)



赵立东

北京航空航天大学材料科学与工程学院院长、教授、博士生导师。教育部长江学者特聘教授, 国家级领军人才项目、科学探索奖、何梁何利基金科学与技术奖获得者。从事热电新能源技术领域研究, 开发宽温域高效温差发电和热电制冷材料及器件。

热电材料是一类能够通过热电效应将热能直接转换为电能的功能材料。这种材料在温差存在时可以产生电势差, 或者在电流通过时引起温度梯度, 因此被广泛应用于热电发电和热电制冷领域。在发电方面, 热电材料主要应用于深空探测、航天器、工业废热发电等关键领域。在制冷控温方面, 热电制冷技术因其体积小、模块化设计、低温制冷、快速响应以及高精度温度控制等优势, 在5G通信技术和集成电路领域备受青睐。

热电材料的性能通常通过无量纲优值 ZT 来衡量, 该值由材料的塞贝克系数、电导率和热导率共同决定。高效的热电材料需要具备高的塞贝克系数和电导率, 同时具有低的热导率。然而, 这几个性能参数之间相互依赖, 此消彼长。因此在热电领域, 其主要研究目标是通过电传输和热传输的耦合调控, 提高材料的电传输性能并降低其热传输性能。根据 ZT 最大值在不同温区的分布, 热电材料可划分为3种: 低温区(<400 K)、中温区($500\sim900$ K)和高温区(>1000 K)热电材料。由于中低温区热源来源最多, 因此开发宽温域高性能中低温区热电材料具有重要的研究价值。

铅锡硫族热电材料(PbQ , SnQ , $Q=S, Se, Te$)因其卓越的中低温宽温域热电性能而备受关注。自从纳米超晶格理论被提出以来, 铅锡硫族热电材料一直代表着热电研究的最高水平, 带来了一系列的理论和技术创新, 例如能带调控、全尺度声子散射、高熵材料以及晶格素化等, 从而不断打破热电材料的性能优值纪录。这些研究进展推动了铅锡硫族热电材料在热电发电和废热回收、电子器件冷却等领域的应用。我国研究人员在铅锡硫族热电材料领域深耕多年并取得了一系列的突破性研究成果。为了集中展示我国学者在本领域的研究成果, 推动铅锡硫族热电材料的进一步发展, 促进同行之间的学术交流, 《科学通报》组织出版

引用格式: 赵立东. 高性能铅锡硫族热电材料的制备、性能调控与应用. 科学通报, 2025, 70: 621–623

Zhao L-D. High-performance lead/tin chalcogenide thermoelectric materials: Preparation, optimization and application (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 621–623, doi: [10.1360/TB-2025-0049](https://doi.org/10.1360/TB-2025-0049)

“高性能铅锡硫族热电材料”专辑。此专辑特邀领域内多位学者撰文,涉及高性能铅锡硫族热电材料的制备、热电输运性质、性能优化策略等前沿内容^[1-14]。

铅锡硫族热电材料研究始终处于热电材料研究的最前沿,因此总结相关的研究进展至关重要。晶界作为各类缺陷形成以及调控的重要场所,在多晶热电材料的热电输运中扮演着重要角色。李雨欣和何文科^[1]系统总结了基于晶界调控实现热电参数提升及协同优化的有效策略。n型碲化锡晶体中的“二维声子-三维电荷”热电传输特性在解耦“声-电”矛盾上表现出十分优异的潜力,高天等人^[2]介绍了“二维声子-三维电荷”热电传输特性研究进展。作为PbTe的潜在替代者,SnTe近年来引起了热电领域研究者的广泛关注,庞慧梅和王华才^[3]综述了在p型SnTe中成功应用的载流子浓度优化、能带工程、能量过滤和声子工程等性能优化策略,总结了近年来对n型SnTe材料的探索工作。构建高性能热电器件需要拥有性能相匹配的高性能p型与n型热电材料,宿力中和冯孝坤^[4]分析了不同施主杂质掺杂的n型SnSe晶体热电输运特性的异同,介绍了SnSe相变对其热导率的影响,对n型SnSe晶体热电材料后续研究的重点与难点进行了展望。PbS受限于本身的低载流子浓度及高晶格热导率,热电性能的提升较为困难。王磊等人^[5]从载流子浓度、迁移率、有效质量、晶格热导率等热电参数优化的角度介绍了PbS基热电材料研究进展。Bi₂Te₃作为目前唯一商业化应用的热电材料体系,在近室温区内表现出优异的热电性能,彭佳怡等人^[6]详尽介绍了不同的优化策略——载流子调节、织构化调控、能带工程和声子工程对该体系热电性能和力学性能优化的研究进展。SnS和Sn_xSe_y凭借丰富的地壳储量、低廉的价格以及轻量化等优点,有望成为新一代环境友好型热电材料,刘姗姗等人^[7]和朱雨墨等人^[8]分别对这两种具有发展潜力的新型热电材料进行了介绍。胡学高和冯宝杰^[9]从性能表征的角度介绍了角分辨光电子能谱在热电材料研究中的应用。

此外,对新型铅锡硫族热电材料制备和优化策略的探索也十分重要。三元PbBi₄Te₇化合物具有本征低晶格热导率,但低的电传输性能限制了其热电性能,曾宏等人^[10]研究了Cu掺杂优化层状PbBi₄Te₇化合物的热电性能。SnTe具有极高的载流子浓度,其近室温区的热电性能很难被提升,刘雨晴等人^[11]研究了掺杂Cd元素协同优化Sb₂Te₃(SnTe)₆的热电输运性能。目前关于PbS的研究主要聚焦于通过元素重掺杂提高其载流子浓度,以获得优良的中高温热电性能。然而,这种方法导致近室温热电性能较差,侯正浩等人^[12]通过载流子浓度优化与动态掺杂提高n型PbS宽温域的热电性能。第一性原理计算与Boltzmann输运理论是探索热电新材料的有效研究工具,王东洋等人^[13]和白树林等人^[14]分别通过第一性原理计算预测了层状化合物PbSnS₂和SrPbSe₂的热电输运性质。

由于篇幅有限,本专辑无法列出铅锡硫族热电材料领域的所有最新进展。但是,我们相信,本专辑通过提供有价值的信息和观点,将促进铅锡硫族热电材料研究的进步,推动热电材料研究的创新和突破。同时借此机会,本专辑献礼北京航空航天大学材料科学与工程学院成立70周年。最后,感谢全体作者、审稿人和编辑人员给予的大力支持。

参考文献

- Li Y X, He W K. Thermoelectric materials with grain boundary: Strategies to parameters (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2025, 70: 624–635 [李雨欣, 何文科. 晶界热电材料: 热电参数调控策略及研究进展. *科学通报*, 2025, 70: 624–635]
- Gao T, Su L Z, Zhao L D. Recent progress in “2D phonon-3D charge” thermoelectric transport (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2025, 70: 636–644 [高天, 宿力中, 赵立东. “二维声子-三维电荷”热电传输特性研究进展. *科学通报*, 2025, 70: 636–644]
- Pang H M, Wang H C. Research progress of tin telluride based thermoelectric materials (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2025, 70: 645–654 [庞慧梅, 王华才. 碲化锡基热电材料的研究进展. *科学通报*, 2025, 70: 645–654]
- Su L Z, Feng X K. Recent progress in n-type SnSe crystals thermoelectric materials (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2025, 70: 655–664 [宿力中, 冯孝坤. n型碲化锡晶体热电材料研究进展. *科学通报*, 2025, 70: 655–664]
- Wang L, Chang C, Zhao L D. Progress in PbS-based thermoelectric materials with low cost and high performance (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2025, 70: 665–673 [王磊, 常诚, 赵立东. 低成本高性能PbS基热电材料研究进展. *科学通报*, 2025, 70: 665–673]
- Peng J Y, Liu D R, Qin B C, et al. n-type bismuth telluride-based thermoelectric materials, devices, and applications (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2025, 70: 674–684 [彭佳怡, 刘东锐, 秦炳超, 等. n型碲化铋基热电材料、器件及应用. *科学通报*, 2025, 70: 674–684]
- Liu S, Liu D R, Qiu Y T, et al. Low-cost p-type SnS-based materials: Promising candidates for low-to-mid-temperature thermoelectrics (in

- Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 685–696 [刘姝, 刘东锐, 邱玉婷, 等. 低成本的p型SnS: 一种有前景的中低温热电材料. 科学通报, 2025, 70: 685–696]
- 8 Zhu X M, Chang C, Pei Y L. Sn_xSe_y : New promising thermoelectric materials (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 697–704 [朱雨墨, 常诚, 裴延玲. Sn_xSe_y : 一类具有发展潜力的新型热电材料. 科学通报, 2025, 70: 697–704]
- 9 Hu X G, Feng B J. Application of angle-resolved photoemission spectroscopy in thermoelectric materials research (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 705–717 [胡学高, 冯宝杰. 角分辨光电子能谱在热电材料研究中的应用. 科学通报, 2025, 70: 705–717]
- 10 Zeng H, Liu W, Xu L Q, et al. Optimizing thermoelectric performance of layered PbBi_4Te_7 compound through Cu doping (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 718–728 [曾宏, 刘伟, 徐莉青, 等. Cu掺杂优化层状 PbBi_4Te_7 化合物的热电性能. 科学通报, 2025, 70: 718–728]
- 11 Liu Y Q, Cui J H, Wang S F, et al. Synergistic optimization of thermoelectric transport properties in $\text{Sb}_2\text{Te}_3(\text{SnTe})_6$ through Cd doping (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 729–736 [刘雨晴, 崔金华, 王淑芳, 等. 掺杂Cd元素协同优化 $\text{Sb}_2\text{Te}_3(\text{SnTe})_6$ 的热电输运性能. 科学通报, 2025, 70: 729–736]
- 12 Hou Z H, Cui Q J, Qian X, et al. Carrier concentration optimization and dynamic doping enhance the thermoelectric performance of n-type PbS over a wide temperature range (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 737–745 [侯正浩, 崔秋娟, 钱鑫, 等. 载流子浓度优化与动态掺杂提高n型PbS宽温域的热电性能. 科学通报, 2025, 70: 737–745]
- 13 Wang D Y, Li X D, Zhu J Q, et al. Investigation of thermoelectric properties in layered PbSnS_2 from first-principles calculations (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 746–754 [王东洋, 李晓东, 朱佳琪, 等. 层状化合物 PbSnS_2 热电输运性质的第一性原理计算研究. 科学通报, 2025, 70: 746–754]
- 14 Bai S L, Zhang X, Zhao L D. Chalcogenides SrPbSe_2 : A potential thermoelectric material (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 755–766 [白树林, 张潇, 赵立东. 硫族化合物 SrPbSe_2 : 具有潜力的新型热电材料. 科学通报, 2025, 70: 755–766]