

Einfluss der Mikrostruktur auf die Eigenschaften von Thermoelektrika

C. Scheu¹, R. Bueno Villoro¹, L. Abdellaoui¹, G. J. Snyder², S. Zhang¹

¹ Max-Planck-Institut für Nachhaltige Materialien GmbH, Düsseldorf, Deutschland

² Materials Science & Engineering, Northwestern University, Evanston, USA

Thermoelektrische Materialien können einen Beitrag zum Sektor der erneuerbaren Energien leisten, indem sie Strom aus Abwärme erzeugen. Sie sollten eine hohe elektrische Leitfähigkeit besitzen, während gleichzeitig die Wärmeleitfähigkeit niedrig sein sollte. Darüber hinaus sollten sie eine gewisse mechanische Festigkeit aufweisen, damit thermoelektrische Module hergestellt werden können. Um die Leistungszahl zT von Thermoelektrika zu erhöhen, wird oft das Defektengineering eingesetzt, wobei neben Punktdefekte vor allem Versetzungen und Korngrenzen in das Gefüge eingebracht werden, um Phononen zu streuen und somit die Wärmeleitfähigkeit zu reduzieren. Im Fall von PbTe, welches eine extrem hohe Leistungszahl besitzt, führt jedoch eine hohe Versetzungsdichte und die Immobilisierung der Versetzungen durch Dotierungselemente, zum Verspröden [1]. Bei Na dotiertem PbTe konnte ein paralleles Versetzungsnetzwerk sowie Cottrell-Atmosphären mittels Rastertransmissionselektronenmikroskopie und Atomsondentomographie nachgewiesen werden, welche sehr effektiv Phononen streuen [2]. Korngrenzen können ebenfalls Phononen effizient streuen, verringern aber oft die elektrische Leitfähigkeit. Durch Korngrenzengineering lässt sich dies verhindern. So konnte an Ti(Co,Fe)Sb-Halb-Heusler-Legierungen eine signifikante Fe-Segregation und Co-Verarmung an den Korngrenzen mittels Atomsondentomographie und energiedispersiver Röntgenspektroskopie im Rastertransmissionselektronenmikroskop detektiert werden [3]. Atomsäulenaufgelöste Aufnahmen zeigen, dass sich eine Korngrenzenphase („complexion“) bildet, die als schneller Ladungsträgerpfad dient. Die Auswirkungen auf die mechanischen Eigenschaften werden derzeit untersucht.

[1] J. P. Male, L. Abdellaoui, Y. Yu, S. Zhang, N. Pieczulewski, O. Cojocar-Mirédin, C. Scheu, G. J. Snyder, *Advanced Functional Materials*, 2021, 2108006.

[2] L. Abdellaoui, Z. Chen, Y. Yu, T. Luo, R. Hanus, T. Schwarz, R. Bueno Villoro, O. Cojocar-Mirédin, G. J. Snyder, D. Raabe, Y. Pei, C. Scheu, S. Zhang, *Advanced Functional Materials*, 2021, 2101214.

[3] R. Bueno Villoro, M. Wood, T. Luo, H. Bishara, L. Abdellaoui, D. Zavanelli, B. Gault, G. J. Snyder, C. Scheu, S. Zhang, *Acta Materialia*, 2023, 118816.