

专题: 功能氧化物薄膜新奇物理性质

应变增强 Nb 掺杂 SrTiO₃ 薄膜热电性能*

马云鹏 庄华鹭 李敬锋 李千†

(清华大学材料学院, 新型陶瓷与精细工艺国家重点实验室, 北京 100084)

(2022 年 12 月 2 日收到; 2023 年 1 月 6 日收到修改稿)

高性能热电材料的发展有望帮助解决未来能源危机, 且随着可穿戴器件的发展与应用, 热电材料和器件除了要具备更高的热-电转化性能以外, 还必须具有良好的柔性. 将热电材料制成薄膜既可以为微型器件供电, 也有潜力应用于柔性器件. 本文使用脉冲激光沉积方法, 在商用 SrTiO₃ (STO) 和 La_{0.3}Sr_{0.7}Al_{0.65}Ta_{0.35}O₃ (LSAT) 衬底上制备得到了不同厚度的高质量铌掺杂钛酸锶薄膜 (Nb:STO), 并对薄膜的表面形貌、结构以及热电性能进行表征与测试. 结果显示, 使用 LSAT 作为衬底可以对薄膜施加面内压应变, 随着薄膜厚度的增大, 应变逐渐释放并接近于块体 Nb:STO. 随着厚度的增大, 薄膜的热电性能逐渐提升, 在 STO 衬底上生长的 208 nm 厚样品的室温功率因子相比于 52 nm 样品提升了 187%. 此外, 144 nm 厚度的 Nb:STO/LSAT 薄膜室温塞贝克系数达到了 265.95 $\mu\text{V}/\text{K}$, 这是由于衬底应变导致薄膜样品的能带变化. 本工作表明通过应变工程调控铌掺杂钛酸锶薄膜热电性能的可行性, 为后续提高此类薄膜材料的热电性能提供了一种新思路.

关键词: 脉冲激光沉积, 热电, 钛酸锶, 薄膜

PACS: 68.55.Ln, 73.50.Lw, 81.15.Fg

DOI: 10.7498/aps.72.20222301

1 引言

全球工业化的迅速发展在造福人类的同时也产生了极大的能源需求, 以化石燃料为主的能源结构加剧了环境污染^[1]. 而热能作为自然界中普遍存在的能量形式之一, 如果能够利用热电材料把这些能量直接转化为电能将可以极大缓解目前的能源危机. 因此开发高性能热电材料是目前的重要研究方向之一. 功率因子 (power factor, PF) 是评价热电材料性能的重要标准之一:

$$\text{PF} = S^2\sigma, \quad (1)$$

其中 S 为塞贝克系数, σ 为电导率. 可以看出, 热电材料功率因子的提升可以通过提高塞贝克系数和电导率来实现. 由于电导率和塞贝克系数受载流子浓度的影响相反, 所以可通过调控载流子的特性,

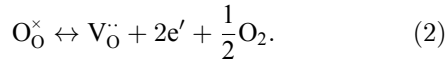
得到尽可能大的功率因子^[2].

柔性电子器件广泛应用于可折叠和可穿戴的电子设备, 如健康监测系统等^[3]. 当前广泛应用的柔性器件多为高分子材料, 虽然可以通过掺杂改性等方法得到柔性导电高分子^[4] 甚至具有热电性能的高分子材料^[5], 但是这些高分子材料在固有性能上仍比不上传统热电材料. 降低传统热电材料的厚度有望在保持高热电性能的同时使其具备高柔性. 另一方面, 有研究表明低维效应^[6-8]、应变以及压力^[9-11] 可调控二维热电材料的能带, 影响其态密度有效质量, 进而影响电导率. 除了通过对低厚度样品进行拉伸、弯曲等方法来施加应变之外^[12,13], 还可以使用不同晶格常数的衬底对外延薄膜施加不同的应变^[14-16]. 在很多热电材料中, Γ 点处的能带简并可以通过应变解除, 这提供了调节态密度有效质量和电子迁移率的可能性^[17]. 近年随着脉冲激光沉积、磁控溅射等薄膜制备技术的发展, 已经

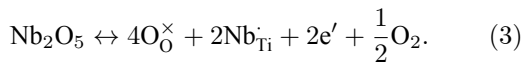
* 国家重点研发计划 (批准号: 2020YFA0309100) 和国家自然科学基金委原创探索计划 (批准号: 52150092) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: qianli_mse@tsinghua.edu.cn

可以利用这些方法制备高性能的热电薄膜^[18–21]. 目前, 热电薄膜的厚度及应变状态对其热电性能的影响鲜有报道. SrTiO₃ (STO) 具有立方钙钛矿结构, 载流子有效质量较大, 是潜在高性能热电材料^[22]. STO 具有 3.25 eV 的间接带隙 (直接带隙为 3.75 eV)^[23], 当对其进行 A 位 La 掺杂或 B 位 Nb 掺杂^[2,24,25], 或者引入氧空位时^[2,26], 它会显示出较高的电导率以及塞贝克系数. 当引入氧空位时, 有



当使用 Nb 元素对 Ti 位非本征掺杂时, 假设 Nb 原子完全电离, 有



如果 Nb 掺杂的 STO 样品没有经过高温真空或者还原性气氛退火, 那么样品中本征氧空位较少, 由 Nb 元素引入的电子起到主要作用^[27,28].

本文采用脉冲激光沉积方法, 在 STO 和 La_{0.3}Sr_{0.7}Al_{0.65}Ta_{0.35}O₃ (LSAT) 单晶衬底上制备了 5 种不同厚度的 Nb 掺杂 STO 薄膜 (Nb:STO). 由于 STO (3.905 Å), LSAT (3.870 Å), Nb:STO (3.924 Å) 的晶格常数不同^[29], 本工作通过调整生长工艺, 保证了 Nb:STO 薄膜以外延方式生长. 在薄膜生长时, 其受到面内的压应变, 且应变会随 Nb:STO 薄膜厚度的增大而逐渐弛豫, 并接近于块体 Nb:STO 状态, LSAT 衬底相比于 STO 衬底对薄膜施加了更大的压应变, 从而可通过应变调控热电性能. 利用 X 射线衍射 (XRD)、原子力显微镜 (AFM) 以及热电参数测试系统等, 对薄膜结构与电学性能进行详细的表征.

2 研究方法

2.1 样品制备

本文采用脉冲激光沉积方法制备 Nb:SrTiO₃ 薄膜. 使用自制的 5% 摩尔含量 Nb 元素掺杂的 SrTiO₃ 陶瓷靶材, 单晶衬底为购自于合肥科晶材料技术有限公司的 (001) 取向单晶 STO 衬底和 LSAT 衬底, 尺寸为 5 mm × 10 mm × 0.5 mm. 激光光源为 248 nm KrF 准分子激光器. 在 STO 与 LSAT 单晶衬底上生长 Nb:STO 薄膜时, 采用 650 °C 生

长温度, 10 Pa 生长氧压, 1.2 J/cm² 能量密度, 3 Hz 生长频率.

2.2 样品测试

X 射线衍射 (X-ray diffraction, XRD) 测试使用日本理学公司高分辨率 X 射线衍射仪, 使用 Cu-K_{α1} 作为辐射源 (波长为 1.5406 Å), 进行 θ -2 θ 扫描. 使用牛津仪器 Asylum Research MFP 3D 原子力显微镜 (atomic force microscope, AFM) 在轻敲模式下表征了样品表面形貌. 利用蔡司公司 Gemini2 扫描电子显微镜完成 X 射线能谱 (energy dispersive spectroscopy, EDS) 测试, 验证 Nb 元素掺杂. 使用嘉仪通公司的薄膜热电参数测试系统 MRS-3 测试了热电性能参数, MRS-3 采用动态法和四线法保证测试结果的准确性和稳定性, 并可以在 90—800 K 温度范围内进行测量. 测试时, 4 根电极均匀排布在 5 mm × 10 mm × 0.5 mm 样品表面, 两端电极固定, 中间两根电极通过弹簧确保与样品良好接触. 通电进行电导率测试后, 系统启动加热台对样品进行单侧加热, 通过热电偶测温差并通过金属电极检测并记录温差电动势, 计算出塞贝克系数. 使用 Toyo 8340DC-S 高灵敏度电阻率/霍尔系数测量系统测试了样品的载流子浓度.

3 结果与分析

使用脉冲激光沉积方法在 STO 单晶衬底依次制备厚度为 13, 26, 52, 104, 208 nm 的外延 Nb:STO 薄膜. 利用 XRD 对这些薄膜样品进行物相表征. 取样品的 (002) 衍射峰附近做精细的扫描^[29], 并将 13, 52, 208 nm 的 Nb:STO/STO 薄膜样品进行对比, 如图 1(a) 所示. 随着薄膜厚度的增大, 薄膜衍射峰的强度逐渐增大, 且均位于 STO 衬底峰的低角度侧. 这是由于 Nb 原子在掺杂时取代了 B 位的 Ti 原子, 而 Nb 原子半径 (0.64 Å) 比 Ti 原子半径 (0.605 Å) 大, 从而导致晶胞晶格常数增大, 加之面内受压应变, 同样会导致 c 轴晶格常数的增大. 此外, 52 nm 的 Nb:STO/STO 薄膜样品可以在薄膜峰周围观察到明显的振荡峰, 这说明 Nb:STO/STO 薄膜样品生长质量很高. 图 1(b) 显示了 AFM 测量的 13 nm 厚度的 Nb:STO/STO 样品 1 μm × 1 μm 范围内的表面形貌, 在该范围内达到了

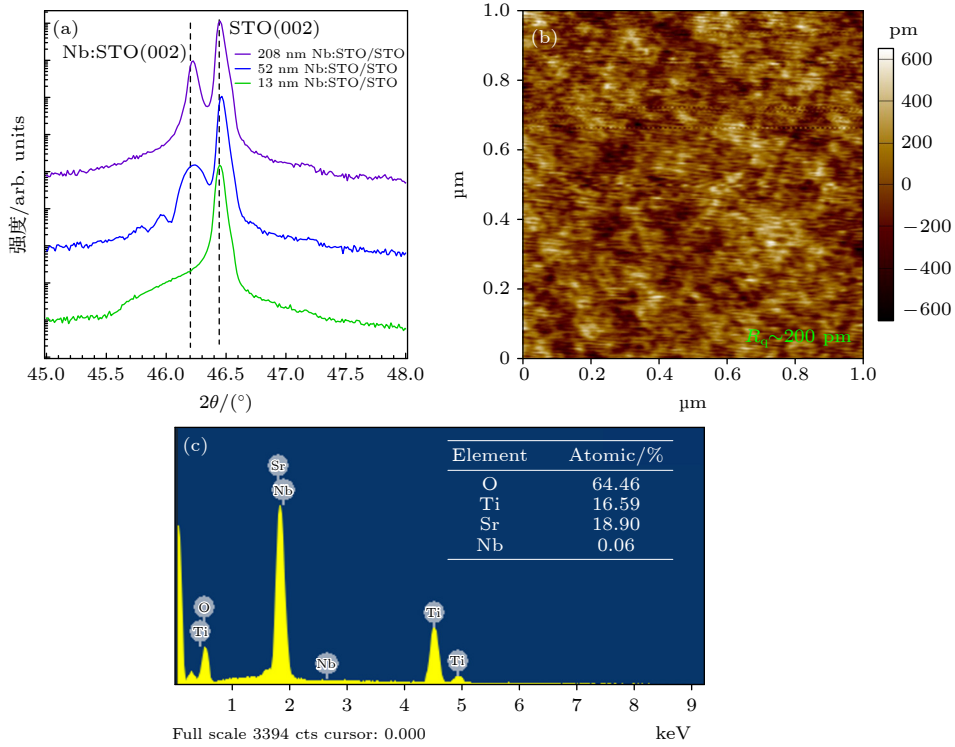


图 1 不同厚度 Nb:STO/STO 薄膜生长状况表征 (a) XRD 谱; (b) AFM 形貌图; (c) EDS, 插表为原子摩尔比
 Fig. 1. Characterization of Nb doped SrTiO₃ thin films on (001) SrTiO₃ substrates with different thicknesses: (a) XRD spectrum; (b) AFM image; (c) EDS, the inset is the measured element composition.

约 200 pm 的低表面粗糙度, 从另一个角度说明了 Nb:STO/STO 外延薄膜的高生长质量. 图 1(c) 为薄膜表面的 EDS 点扫描谱, 结合插表可以发现, STO 薄膜中成功掺入了 Nb 元素.

利用薄膜热电参数测试系统以及高灵敏度电阻率/霍尔系数测量系统, 对 52, 104, 208 nm 厚度的外延 Nb:STO/STO 薄膜进行了热电参数测试. 较薄样品由于电阻率较高, 测试结果不确定性较大, 因此不在文中展示和讨论. 图 2(a) 为薄膜的变温电导率测试数据. 在室温下, 随着薄膜厚度增大, 薄膜电导率逐渐上升, 从 52 nm 样品的 25.16 S/cm 提高到 208 nm 样品的 80.75 S/cm. n 型 STO 表面会形成带负电的电子耗尽层, 这是影响载流子浓度的重要因素之一. 随着薄膜厚度增大, 薄膜受电子耗尽层的影响减小, 载流子浓度逐渐提升, 进而电导率逐渐提升 [30,31] (如图 2(b) 所示). 随温度上升, 各样品的电导率单调递减, 表现出简并半导体特性. 载流子浓度基本与温度无关, 说明掺杂的 Nb 原子在室温下已经基本发生电离, 在温度升高时额外的热激发较少. 根据载流子浓度可以估算出 Nb 原子的掺杂摩尔分数约为 1.5%. 此外, 影响电导率 σ 和塞贝克系数 S 的关键因素为散射因子 s ,

其取值在不同散射因素占主导时不同, 在本文测试的温度范围 (300—600 K) 内, 声学声子散射占主导. 温度上升导致载流子的声学声子散射增强, 所以 Nb:STO/STO 薄膜样品的电导率逐渐下降.

图 2(c) 显示了薄膜的塞贝克系数随温度变化规律. 塞贝克系数为负值表明 Nb:STO/STO 中的多数载流子为电子, 与 Nb 施主掺杂类型一致. 在计算载流子输运特性时, 载流子能量对载流子波矢存在与费米面形状和能带都有关的色散关系, 实际情况可能非常复杂. 为了进行简化, 通常将费米面考虑成球形, 并只考虑最靠近费米面的单一能带, 并假设其形状为抛物带状, 即单抛物带 (single parabolic band) [32]. 随着温度的上升, 塞贝克系数的绝对值逐渐增大, 对于 52 nm 厚度的 Nb:STO/STO 样品, 532.2 K 时的塞贝克系数相比于室温提升了 45%, 最大达到 $-354.2 \mu\text{V/K}$, 变化趋势符合上述模型. 根据塞贝克系数及电导率计算得到功率因子, 如图 2(d) 所示. 在室温下, 208 nm 薄膜功率因子最高, 达到 $0.43 \text{ mW}/(\text{m}\cdot\text{K}^2)$, 这是由于其显著大的电导率以及与其他样品接近的塞贝克系数. 对比文献中其他相关体系热电薄膜结果, 如 SrTi_{0.88}Nb_{0.12}O₃/LAO 薄膜 (约 $0.33 \text{ mW}/(\text{m}\cdot\text{K}^2)$) [26], SrTi_{0.94}

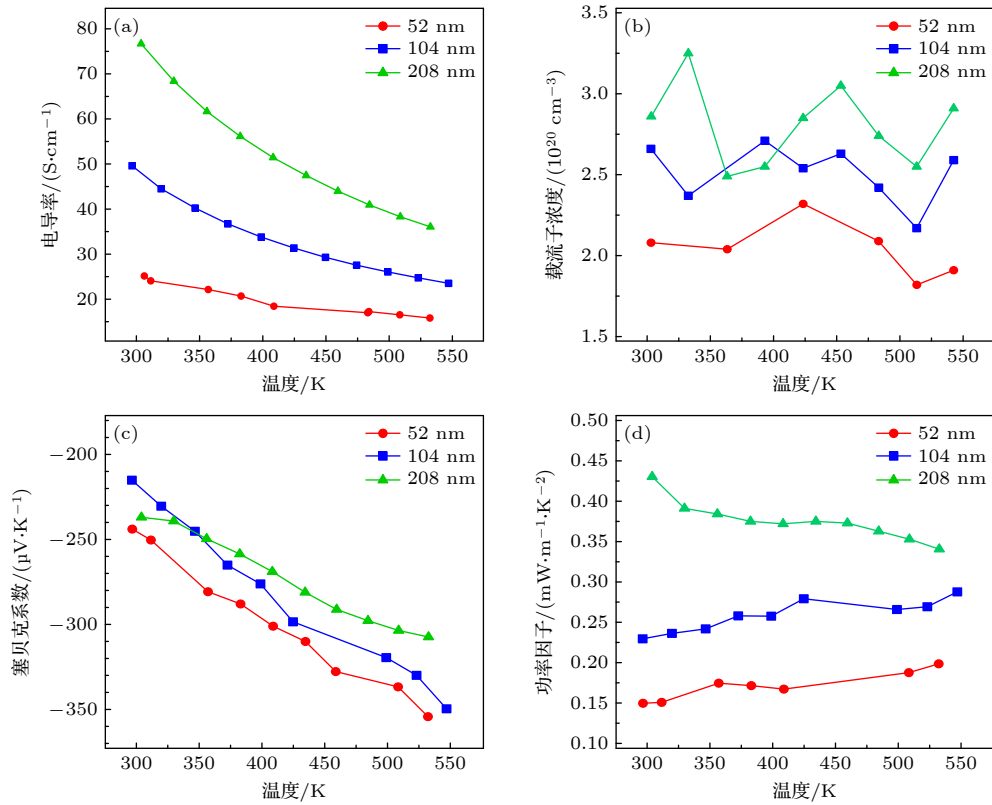


图 2 不同厚度 Nb:STO/STO 薄膜在不同温度下的面内热电性能 (a) 电导率; (b) 载流子浓度; (c) 塞贝克系数; (d) 功率因子
 Fig. 2. Temperature dependence of in-plane thermoelectric properties of Nb:STO/STO thin films with different thicknesses: (a) Conductivities; (b) carrier concentrations; (c) Seebeck coefficients; (d) power factors.

Nb_{0.06}O₃/LSAT 薄膜 (最高 0.84 mW/(m·K²))^[30], 以及 Bi_{1-x}Sb_xSe 薄膜 (0.218 mW/(m·K²))^[33], 本工作的功率因子达到较高水平. 由于不同厚度的样品电导率下降速度不同而塞贝克系数增大速度接近, 随着温度的上升, 208 nm 厚度的薄膜功率因子逐渐下降, 而其他两个厚度样品的功率因子缓慢上升.

为与 STO 衬底对比, 使用脉冲激光沉积法在 LSAT 单晶衬底上依次制备了厚度为 18, 36, 72, 144, 288 nm 的 Nb:STO 外延薄膜. 图 3(a) 显示 18 nm 的 Nb:STO/LSAT 薄膜的表面粗糙度为 350 pm, 同样具有很高的表面平整度. 使用 XRD 对 5 种厚度的 Nb:STO/LSAT 薄膜样品的 (002) 衍射峰进行测试对比, 如图 3(b) 所示. LSAT 具有立方结构, 晶格常数约为 3.87 Å, 与实际测得的 (002) 衍射峰位 (46.9°) 一致. 该值小于 Nb:STO 的晶格常数 (块体靶材的实测值为 3.924 Å), 因此薄膜在面内方向受压应力, 而在面外方向 *c* 轴则相应增长. 通过双轴衬底应变模型, 根据泊松比可计算得到外延 Nb:STO 的理论 *c* 轴晶格常数. 通过 Bragg 方程从 XRD 图谱中计算出 *c* 轴晶格常数以及面外应

变, 如图 3(c) 所示. 当薄膜厚度为 18 nm 时, 通过 XRD 计算得到的 *c* 轴晶格常数与利用泊松比计算得到的理论 *c* 轴晶格常数相吻合. 随着薄膜厚度的增大, 衍射峰向高角度移动, 面内应力逐渐释放, 薄膜样品 *c* 轴长度逐渐降低, 并接近于 Nb:STO/STO 的晶格常数. 288 nm 的 Nb:STO/LSAT 样品有两个峰, 这表明薄膜较厚时会发生部分应变弛豫, 导致一部分薄膜样品的 *c* 轴晶格常数突变. 对 288 nm 样品的 XRD 图谱进行分峰处理, 得到两峰峰位分别为 46.02° 和 46.17°, 积分面积之比为 1:3.8, 所以薄膜在约 60 nm 处发生应变弛豫. 对于 144 nm 样品进行分峰, 两峰积分面积之比为 1:1.4, 可以得到相同弛豫厚度. 根据 Matthews-Blakeslee 模型计算, STO/LSAT 的弛豫厚度仅有 12 nm, 这是因为该模型没有考虑动力学势垒的影响, 从而低估了临界弛豫厚度. 不同厚度的 Nb:STO/STO 样品没有观察到明显的弛豫, 是因为更小的晶格失配会导致更大的临界弛豫厚度^[34,35].

图 4 对比了 Nb:STO/LSAT 与 Nb:STO/STO 薄膜的热电性能参数. 与 Nb:STO/STO 相同, LSAT

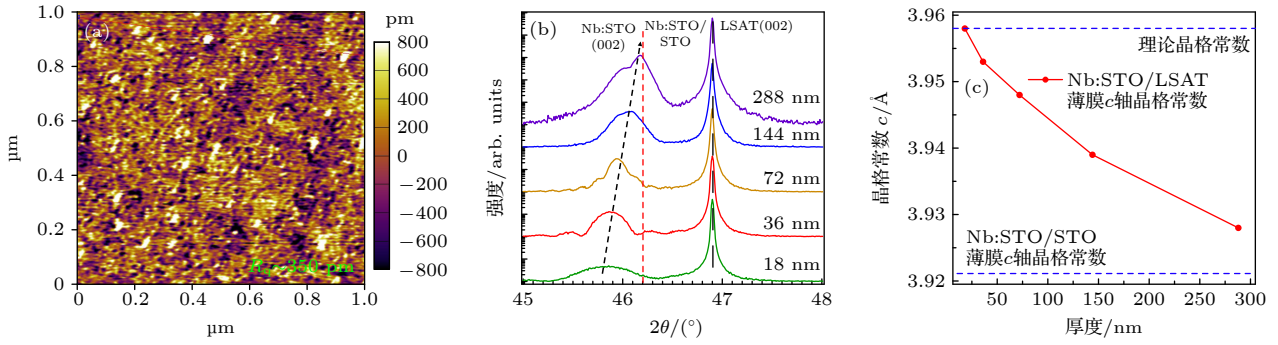


图3 NSTO/LSAT 薄膜生长状况表征 (a) AFM 形貌图; (b) XRD 谱; (c) 薄膜 c 轴晶格常数

Fig. 3. Characterization of Nb:STO/LSAT thin films: (a) AFM image; (b) XRD spectrum; (c) lattice parameters of the c axis.

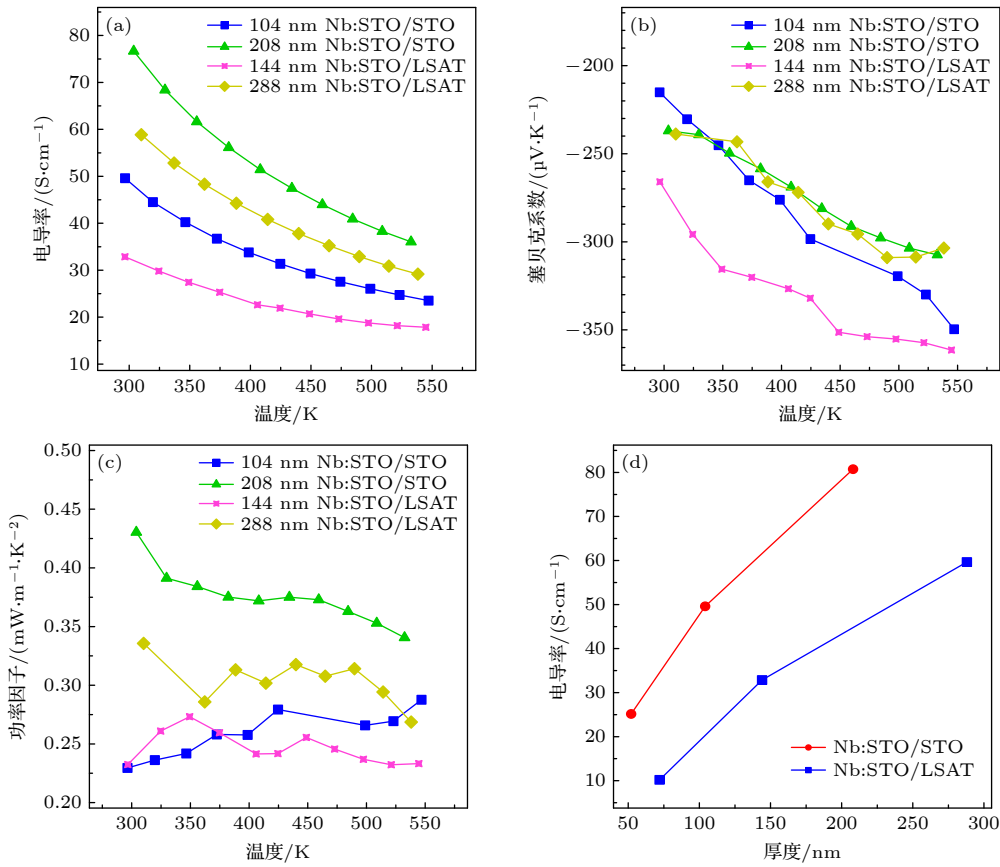


图4 不同厚度 Nb:STO/STO 和 Nb:STO/LSAT 薄膜在不同温度下的面内热电性能 (a) 电导率; (b) 塞贝克系数; (c) 功率因子; (d) 不同衬底、厚度薄膜的电导率对比

Fig. 4. Temperature dependence of in-plane thermoelectric properties of Nb:STO/STO and Nb:STO/LSAT thin films with different thicknesses: (a) Conductivities; (b) Seebeck coefficients; (c) power factors; (d) conductivity of thin films with different thicknesses and substrates.

上生长的 Nb:STO 薄膜的电导率随温度上升而降低, 塞贝克系数绝对值随温度上升而提高, 功率因子基本不变, 如图 4(a)–(c). 对比不同厚度以及衬底上 Nb:STO 的电导率, 生长在 LSAT 衬底上的 Nb:STO 薄膜样品具有更低的电导率, 如图 4(d) 所示. 144 nm Nb:STO/LSAT 样品在室温下有 $-265.95 \mu\text{V/K}$ 的较高的塞贝克系数, 并在 550 K 时

达到了 $-361.44 \mu\text{V/K}$, 室温塞贝克系数达到部分 n 型 STO 薄膜工作塞贝克系数的两倍 [30,26], 相比于块体 n 型 STO 也有一定优势 (Zhang 等 [2] 取得室温塞贝克系数最大约 $-150 \mu\text{V/K}$). 根据 Zou 等 [36] 对 SrTiO_3 的第一性原理计算结果, 未施加应变时 SrTiO_3 的导带底 Γ 点存在三重简并, 当对 SrTiO_3 施加应变时, 这种简并性被破坏. 压缩应变将导致

在 Γ 点出现两个较低能量的简并带和一个较高能量的分裂带, 而拉伸应变下 Γ 点出现两个较高能量的简并带和一个较低能量的能带. 这是由于 SrTiO₃ 中晶体场分裂导致 Ti 的 3d-t_{2g} 轨道大幅改变, 进而改变了导带底的态密度分布. 相比于无应变的 STO, 面内压缩应变的 STO 导带底能带形状更“胖”, 所以能带更重, 带边有效质量以及态密度有效质量的面内分量增大, 最终导致面内塞贝克系数增大 [36]. 因此, 通过应变工程来调控 n 型 STO 的热电性能是一种可行的路径.

4 总 结

本文采用脉冲激光沉积方法, 在 (001) 取向 STO 和 LSAT 单晶衬底上制备了不同厚度的 Nb:STO 外延薄膜. XRD 和 AFM 测试结果表明生长得到了外延性好、表面平整度高且没有杂相的高质量薄膜. 变温电导率测试说明薄膜呈现出简并半导体特性, 这与温度升高导致的声子散射增强有关. 利用 XRD 进一步分析了薄膜的应变情况. 面内压缩应变增大了塞贝克系数, 这是因为应变影响了薄膜能带分布, 提高了带边有效质量以及态密度有效质量. 室温下, 144 nm 厚度 Nb:STO/LSAT 薄膜样品得到了 $-265.95 \mu\text{V/K}$ 的塞贝克系数, 相比其他样品有较大的提升. 本工作发现, 通过施加应变可以增大 Nb:STO 薄膜的塞贝克系数. 本工作对于塞贝克系数等热电参数的调控方法有望应用于其他热电薄膜体系, 为提升综合热电性能提供了新思路.

参考文献

- [1] Utlu Z, Hepbasli A 2007 *Renew. Sustain. Energy Rev.* **11** 1
- [2] Zhang B, Wang J, Zou T, Zhang S, Yaer X, Ding N, Liu C, Miao L, Li Y, Wu Y 2015 *J. Mater. Chem. C* **3** 11406
- [3] Gao W, Zhu Y, Wang Y, Yuan G, Liu J M 2020 *J. Materiomics* **6** 1
- [4] Chiang C K, Fincher C R, Park Y W, Heeger A J, Shirakawa H, Louis E J, Gau S C, MacDiarmid A G 1977 *Phys. Rev. Lett.* **39** 1098
- [5] Fan Z, Du D, Yu Z, Li P, Xia Y, Ouyang J 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 23204
- [6] Jalan B, Stemmer S 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 042106
- [7] Ohta H, Kim S, Mune Y, Mizoguchi T, Nomura K, Ohta S, Nomura T, Nakanishi Y, Ikuhara Y, Hirano M, Hosono H, Koumoto K 2007 *Nat. Mater.* **6** 129
- [8] Pu J, Kanahashi K, Cuong N T, Chen C H, Li L J, Okada S, Ohta H, Takenobu T 2016 *Phys. Rev. B* **94** 014312
- [9] Li P, Li L, Zeng X C 2016 *J. Mater. Chem. C* **4** 3106
- [10] Zhang X, Liu B, Liu S, Li J, Liu R, Wang P, Dong Q, Li S, Tian H, Li Q, Liu B 2021 *J. Alloys Compd.* **867** 158923
- [11] Wang N, Li M, Xiao H, Gong H, Liu Z, Zu X, Qiao L 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 15097
- [12] Xu R, Huang J, Barnard E S, Hong S S, Singh P, Wong E K, Jansen T, Harbola V, Xiao J, Wang B Y, Crossley S, Lu D, Liu S, Hwang H Y 2020 *Nat. Commun.* **11** 3141
- [13] Dong Z, Chen H, Qi M, Shen J, Liu W, Guo E, Li D, Zhang Y, Wu Z 2022 *Laser Photonics Rev.* **16** 2100454
- [14] Tikhomirov O, Jiang H, Levy J 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 147601
- [15] Haeni J H, Irvin P, Chang W, Uecker R, Reiche P, Li Y L, Choudhury S, Tian W, Hawley M E, Craigo B, Tagantsev A K, Pan X Q, Streiffer S K, Chen L Q, Kirchoefer S W, Levy J, Schlom D G 2004 *Nature* **430** 758
- [16] Bhansali S, Khunsin W, Chatterjee A, Santiso J, Abad B, Martin-Gonzalez M, Jakob G, Sotomayor Torres C M, Chávez-Angel E 2019 *Nanoscale Adv.* **1** 3647
- [17] Janotti A, Steiauf D, Van de Walle C G 2011 *Phys. Rev. B* **84** 201304
- [18] Bellucci A, Mastellone M, Girolami M, Orlando S, Medici L, Mezzi A, Kaciulis S, Polini R, Trucchi D M 2017 *Appl. Surf. Sci.* **418** 589
- [19] Venkatasubramanian R, Siivola E, Colpitts T, O'Quinn B 2001 *Nature* **413** 597
- [20] Chen Z J, Zhou B Y, Li J X, Wen C L 2016 *Appl. Surf. Sci.* **386** 389
- [21] Varghese T, Hollar C, Richardson J, Kempf N, Han C, Gamarachi P, Estrada D, Mehta R J, Zhang Y 2016 *Sci. Rep.* **6** 33135
- [22] Wunderlich W, Ohta H, Koumoto K 2009 *Phys. B Condens. Matter* **404** 2202
- [23] Benthem K, Elsässer C, French R H 2001 *J. Appl. Phys.* **90** 6156
- [24] Apreutesei M, Debord R, Bouras M, Regreny P, Botella C, Benamrouche A, Carretero-Genevriev A, Gazquez J, Grenet G, Pailhès S, Saint-Girons G, Bachelet R 2017 *Sci. Technol. Adv. Mater.* **18** 430
- [25] Zhao T, Lu H B, Chen F, Dai S Y, Yang G Z, Chen Z H 2000 *J. Cryst. Growth* **212** 451
- [26] Kumar S R S, Barasheed A Z, Alshareef H N 2013 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **5** 7268
- [27] Blennow P, Hagen A, Hansen K, Wallenberg L, Mogensen M 2008 *Solid State Ion.* **179** 2047
- [28] Chan N H, Sharma R K, Smyth D M 1981 *J. Electrochem. Soc.* **128** 1762
- [29] Culbertson C M, Flak A T, Yatskin M, Cheong P H Y, Cann D P, Dolgos M R 2020 *Sci. Rep.* **10** 3729
- [30] Chatterjee A, Lan Z, Christensen D V, Bauitti F, Morata A, Chavez-Angel E, Sanna S, Castelli I E, Chen Y, Tarancon A, Pryds N 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 3741
- [31] Ohtomo A, Hwang H Y 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 1716
- [32] Hicks L D, Dresselhaus M S 1993 *Phys. Rev. B* **47** 12727
- [33] Xu J, He Z M, Yang W L, Wu R, Lai X F, Jian J K 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 197301 (in Chinese) [许静, 何梓民, 杨文龙, 吴荣, 赖晓芳, 简基康 2022 *物理学报* **71** 197301]
- [34] Matthews J, Blakeslee A 1974 *J. Cryst. Growth* **27** 118
- [35] Wang T, Ganguly K, Marshall P, Xu P, Jalan B 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 212904
- [36] Zou D, Liu Y, Xie S, Lin J, Li J 2013 *Chem. Phys. Lett.* **586** 159

SPECIAL TOPIC—Novel physical properties of functional oxide thin films

Strain-enhanced thermoelectric properties of Nb-doped SrTiO₃ thin films*

Ma Yun-Peng Zhuang Hua-Lu Li Jing-Feng Li Qian[†]

(*State Key Laboratory of New Ceramics and Fine Processing, School of Materials*

Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 2 December 2022; revised manuscript received 6 January 2023)

Abstract

The development of high-performance thermoelectric materials can help solve the energy crisis in the future. Thin-film thermoelectric materials can meet the requirement for flexibility of wearable devices while supplying electrical power to them. In this study, high-quality Nb-doped SrTiO₃ films (Nb:STO) with different thickness are prepared on SrTiO₃ (STO) and La_{0.3}Sr_{0.7}Al_{0.65}Ta_{0.35}O₃ (LSAT) substrates by pulsed laser deposition. The surface morphologies, crystal structures, and thermoelectric performances of the films are characterized. The results show that the thermoelectric performance of the strain-free film increase with thickness increasing. The power factor at room temperature increases by 187%. The Seebeck coefficient of the 144 nm-thick Nb:STO/LSAT sample with strain is greatly improved to 265.95 μV/K at room temperature, which is likely to be due to the strain induced changes in the energy band of the thin film. The improvement of the thermoelectric performances of Nb:STO thin films by strain engineering provides a new approach to improving the thermoelectric properties of oxide thin films.

Keywords: pulsed laser deposition, thermoelectricity, SrTiO₃, thin film

PACS: 68.55.Ln, 73.50.Lw, 81.15.Fg

DOI: [10.7498/aps.72.20222301](https://doi.org/10.7498/aps.72.20222301)

* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2020YFA0309100) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52150092).

[†] Corresponding author. E-mail: qianli_mse@tsinghua.edu.cn



应变增强Nb掺杂SrTiO₃薄膜热电性能

马云鹏 庄华鹭 李敬锋 李千

Strain-enhanced thermoelectric properties of Nb-doped SrTiO₃ thin films

Ma Yun-Peng Zhuang Hua-Lu Li Jing-Feng Li Qian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 096803 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222301

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222301>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

脉冲激光沉积无氢钨掺杂类金刚石膜的摩擦与机械性能

Tribological and mechanical properties of non-hydrogenated W-doped diamond-like carbon film prepared by pulsed laser deposition
物理学报. 2021, 70(4): 046801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201505>

外延BaMoO₃, BaMoO₄薄膜的生长行为

Growth behaviors of epitaxial barium molybdate (BaMoO₃, BaMoO₄) film
物理学报. 2022, 71(17): 178103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220736>

高质量FeSe单晶薄膜的制备及相关性能表征

Preparation and characterization of high-quality FeSe single crystal thin films
物理学报. 2018, 67(20): 207416 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180940>

硒化亚铜薄膜热电性能研究进展

Research progress of Cu₂Se thin film thermoelectric properties
物理学报. 2021, 70(7): 076802 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201677>

掺铌SrTiO₃中的逆自旋霍尔效应

Inverse spin Hall effect in Nb doped SrTiO₃
物理学报. 2019, 68(10): 106101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190118>

高性能Bi₂Te_{3-x}Se_x热电薄膜的可控生长

Structural control for high performance Bi₂Te_{3-x}Se_x thermoelectric thin films
物理学报. 2021, 70(20): 207303 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211090>