

Ηλεκτρονική Κρυσταλλογραφία στη νανοκλίμακα: Προσδιορισμός των φάσεων στο νανοδομημένο θερμοηλεκτρικό σύστημα $PbTe+25\%PbSnS_2$

Περίληψη

Η διπλωματική εργασία σχετίζεται με τον προσδιορισμό φάσεων νανοκρυσταλλιτών του θερμοηλεκτρικού συστήματος $PbTe+25\%PbSnS_2$. Εργαλείο είναι το Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο Διερχόμενης δέσμης. Το παρόν σύγγραμμα χωρίζεται σε δύο θεματικές ενότητες. Το πρώτο μέρος περιλαμβάνει το θεωρητικό υπόβαθρο. Δίνεται έμφαση στην περιγραφή του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου και στους τρόπους λειτουργίας του. Αναλύεται το πρόβλημα της διπλής περίθλασης στην εύρεση της κρυσταλλικής δομής και οι τεχνικές εξάλειψής του και ακολουθεί περιγραφή των θερμοηλεκτρικών υλικών και των χρησιμοποιούμενων υλικών. Το δεύτερο μέρος εστιάζει στις πειραματικές εικόνες και τη μελέτη τους. Ελήφθησαν εικόνες χαμηλής μεγέθυνσης, εικόνες περίθλασης καθώς επίσης και εικόνες Υψηλής Διακριτικής Ικανότητας. Οι εικόνες περίθλασης προέκυψαν είτε από πειράματα *tilting* είτε με τη μέθοδο *Precession Electron Diffraction* για εξάλειψη του φαινομένου τη διπλής περίθλασης. Οι εικόνες *χαμηλής μεγέθυνσης* μαρτυρούν ότι το υλικό είναι νανοδομημένο. Πραγματοποιήθηκαν πειράματα *Precession Electron Diffraction* και *πειράματα tilting* για καθαρό κρυσταλλικό $PbSnS_2$ και για το σύστημα $PbTe+25\%PbSnS_2$. Μέσω των πειραμάτων στροφής ταυτοποιήθηκε ως κυρίαρχο το υλικό $PbSnS_2$, ενδοταξιακά ανεπτυγμένο στο $PbTe$ και πιστοποιήθηκαν οι εμφανιζόμενες φάσεις του. Ακόμη, εντοπίστηκε το υλικό PbS ή το $Pb_{0.9}Sn_{0.1}S$ ανεπτυγμένο επίσης ενδοταξιακά στο $PbTe$ με καλό προσανατολισμό. Η ταυτοποίηση όλων των φάσεων πραγματοποιήθηκε αξιοποιώντας δεδομένα από καρτέλες. Επίσης, καταγράφηκαν *εικόνες Υψηλής Διακριτικής Ικανότητας*, οι οποίες υπέστησαν επεξεργασία για βελτίωση της ποιότητάς τους. Σχεδιάστηκαν τρία θεωρητικά μοντέλα βασισμένα σε βιβλιογραφικές αναφορές για περιγραφή της δομής και πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις στο πρόγραμμα *Jems* για την επιλογή του καταλληλότερου.