

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σκεπτόμενοι το γεγονός ότι περίπου τα 2/3 της παραγόμενης ενέργειας από καύσιμα αποβάλλονται με την μορφή θερμότητας, η βελτίωση του τρόπου παραγωγής μέσω της θερμοηλεκτρικής τεχνολογίας έχει γίνει επιτακτική ανάγκη. Αυτό σε συνδυασμό με τις ήδη βιομηχανοποιημένες εφαρμογές, σε συστήματα ψύξης και παραγωγής ενέργειας, έχει σαν αποτέλεσμα την ραγδαία αύξηση της ερευνάς στα θερμοηλεκτρικά υλικά. Η έρευνα για υλικά υψηλής απόδοσης επικεντρώνεται σε ημιαγωγούς χαμηλής θερμικής αγωγιμότητας. Οι αλλαγές της δομής στην νανοκλίμακα, σφάλματα δομής αλλά και διεπιφάνειες θεωρείται ότι είναι ο κύριοι παράγοντες που επηρεάζουν τις θερμοηλεκτρικές ιδιότητες. Τα παραπάνω συνηθίζουν να σκεδάζουν τα φωνόνια στον κρύσταλλο επιτρέποντας την διέλευση ηλεκτρικών φορέων. Για αυτό τον λόγο ο δομικός χαρακτηρισμός των διεπιφανειών αποτελεί υψίστης σημασίας για την κατανόηση των θερμοηλεκτρικών ιδιοτήτων.

Στην παρούσα εργασία γίνεται μελέτη των δομικών χαρακτηριστικών και των διεπιφανειών του νανοδομημένου θερμοηλεκτρικού συστήματος $\text{AgPb}_{18}\text{SbSe}_{20}$ με ηλεκτρονική μικροσκοπία HRTEM. Αρχικά αναλύεται το θεωρητικό επιστημονικό υπόβαθρο που απαιτείται για την κατανόηση της επικείμενης μελέτης. Παρουσιάζονται τα φαινόμενα που διέπουν τα θερμοηλεκτρικά υλικά, καθώς και η σύνδεση των δομικών με των θερμοηλεκτρικών χαρακτηριστικών. Σύνδεση η οποία αποδίδει και τον σκοπό της συγκεκριμένης εργασίας. Ακολουθεί μία εισαγωγή στην ηλεκτρονική μικροσκοπία με έμφαση στην ηλεκτρονική μικροσκοπία διερχόμενης δέσμης (TEM). Γίνεται περιγραφή του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου TEM, καθώς και των τρόπων απεικόνισης με αυτό. Μετέπειτα ακολουθεί ένα προοίμιο σχετικά με την Geometric Phase Analysis (GPA), η οποία αποτελεί μέθοδο για τη μέτρηση και χαρτογράφηση πεδίων μετατόπισης και τάσεων σε περιοδικές πλεγματικές δομές.

Στο πειραματικό μας, κύριο μέρος της εργασίας, αρχικά αναφέρονται τα υλικά προς μελέτη καθώς και τα υπολογιστικά πακέτα που χρησιμοποιήθηκαν. Ακολουθεί η ανάλυση GPA για τις εμφανιζόμενες φάσεις των νανοκρυστάλλων που μελετώνται. Από την GPA επιβεβαιώνεται η διαμόρφωση των τριών φάσεων στο υλικό, εμφανίζονται τα όρια των φάσεων αλλά και η μορφολογία των διεπιφανειών. Ακολουθούν προσομοιώσεις των δύο πρώτων φάσεων, της μήτρας και της Β φάσης με βάση τα μοντέλα που είναι ήδη γνωστά. Οι προσομοιώσεις έγιναν με το πρόγραμμα JEMS. Μετέπειτα πραγματοποιείται μία αναθεώρηση της C φάσης του συστήματος μας σε σχέση με αυτή που γνωρίζαμε μέχρι σήμερα. Κατασκευάζονται δομικά μοντέλα τα οποία και προσομοιώνονται για να συγκριθούν με την πειραματική μας εικόνα. Επιλέγοντας το πιο κατάλληλο προχωράμε στην μοντελοποίηση της διεπιφάνειας των δύο νανοκρυσταλλικών φάσεων Β και C. Τέσσερα μοντέλα προτείνονται όπου οι προσομοιώσεις της εικόνας HRTEM δείχνουν την εγκυρότητα αυτών των μοντέλων. Τέλος επιλέγεται αυτό που απεικονίζει καλύτερα την πειραματική μας εικόνα.

Λέξεις κλειδιά: Θερμοηλεκτρικά υλικά, Ηλεκτρονική μικροσκοπία διερχόμενης δέσμης (TEM), Geometric Phase Analysis (GPA), εικόνες Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας Υψηλής Διακριτικής Ικανότητας, μοντελοποίηση δομών, προσομοιώσεις κρυσταλλικών δομών με JEMS