Seminar MSc Course “Advanced Functional Materials”
Monday 9/11/2026|12:15|Room 2.6 & via Zoom: https://authgr.zoom.us/j/93328530744

Ανάπτυξη και Χαρακτηρισμός Θερμοηλεκτρικών Υλικών Half-Heusler για Ανάκτηση της Απορριπτόμενης Θερμότητας.

Παναγιώτης Μαγγέλης
Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών του Πανεπιστημίου Κύπρου

Περίληψη

Η ομάδα των ενώσεων τύπου half-Heusler (HH) έχει προσελκύσει σημαντικό ερευνητικό ενδιαφέρον, καθώς τα υλικά αυτά παρουσιάζουν σημαντικές ιδιότητες ηλεκτρικής μεταφοράς, αλλά και εξαιρετικές μηχανικές ιδιότητες και θερμική σταθερότητα σε υψηλές θερμοκρασίες. Υλικά HH με γενικό χημικό τύπο $Nb_{0.6-x}Ti_xTa_{0.4}FeSb$ συντέθηκαν μέσω της μεθόδου της μηχανικής κραματοποίησης. Ο ρόλος της πρόσμιξης τιτανίου διερευνάται τόσο με πειραματικές όσο και με θεωρητικές προσεγγίσεις. Η περίθλαση ακτίνων X σε σκόνη, σε συνδυασμό με την ανάλυση Rietveld και την Ηλεκτρονική Μικροσκοπία Διέλευσης (TEM), επιβεβαιώνουν τον σχηματισμό φάσεων HH και την ενσωμάτωση των ατόμων Ti στην κρυσταλλική δομή. Οι μετρήσεις των ιδιοτήτων ηλεκτρικής μεταφοράς υποδεικνύουν ότι η υποκατάσταση Ti οδηγεί σε αποτελεσματικό ντόπινγκ οπών, αυξάνοντας σημαντικά την ηλεκτρική αγωγιμότητα. Ωστόσο, η αύξηση της συγκέντρωσης των οπών συνοδεύεται από μια μέτρια μείωση του συντελεστή Seebeck, με τις τιμές στις φάσεις που έχουν εμπλουτιστεί έντονα να διατηρούνται σε σχετικά υψηλά επίπεδα. Είναι αξιοσημείωτο ότι θεωρητικοί υπολογισμοί DFT αποκαλύπτουν νέες πτυχές σχετικά με τον ρόλο και τη συνεισφορά του Ti στον σχηματισμό της ηλεκτρονικής δομής του συστήματος (Nb,Ta)FeSb, στην περιοχή της ενέργειας Fermi. Η υποκατάσταση Ti φαίνεται να συμβάλλει στην ενίσχυση της οξύτητας της συνολικής ηλεκτρονικής πυκνότητας ενεργειακών καταστάσεων (Density of States - DOS) κοντά στη στάθμη Fermi όπου σύμφωνα με τη σχέση Mott, αυτό επηρεάζει θετικά τον συντελεστή Seebeck των φάσεων που έχουν εμπλουτιστεί έντονα. Οι θεωρητικές εκτιμήσεις του συντελεστή Seebeck, ενισχύουν αυτή τη διαπίστωση. Επιπλέον, η υποκατάσταση Ti, σε συνδυασμό με την ανάμιξη Nb/Ta και το φαινόμενο της νανοδόμησης, προκαλούν αποτελεσματική σκέδαση των φωνονίων, μειώνοντας σημαντικά τη θερμική αγωγιμότητα πλέγματος. Ως αποτέλεσμα, επιτυγχάνεται σημαντική αύξηση του δείκτη ZT στις φάσεις που είναι πλούσιες σε Ti, αναδεικνύοντας τον πολλαπλό ρόλο του Ti στη βελτίωση της θερμοηλεκτρικής απόδοσης των φάσεων HH.

Short CV

Ο Παναγιώτης Μαγγέλης είναι Μεταδιδακτορικός Ερευνητής και Ειδικός Επιστήμονας Διδασκαλίας στο Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών του Πανεπιστημίου Κύπρου από το 2022. Είναι απόφοιτος του Τμήματος Φυσικής του Πανεπιστημίου Αθηνών, με μεταπτυχιακές σπουδές στο Ηνωμένο Βασίλειο. Το 2013 ολοκλήρωσε το μεταπτυχιακό πρόγραμμα πάνω στα «Υλικά για Βιώσιμες και Ανανεώσιμες Πηγές Ενέργειας» στο Πανεπιστημίου του Heriot-Watt, και στη συνέχεια μετέβη στο Πανεπιστήμιο του Reading, όπου εκπόνησε τη διδακτορική του διατριβή στο Τμήμα Χημείας, διεξάγοντας έρευνα πάνω στις δομικές και θερμοηλεκτρικές ιδιότητες χαλκογονιδίων ενώσεων. Έχει εργαστεί επίσης ως Μεταδιδακτορικός Ερευνητής στο Ινστιτούτου Ηλεκτρονικής Δομής και LASER στο Ίδρυμα Έρευνας και Τεχνολογίας, διεξάγοντας έρευνα πάνω σε υπεραγώγιμα και μαγνητικά υλικά, καθώς και στο Πανεπιστήμιο της Πίζας πάνω στην ανάπτυξη νανο-διατάξεων, με τη μέθοδο της λιθογραφίας δέσμης ηλεκτρονίων. Οι ερευνητικές του δραστηριότητες εστιάζονται πάνω στην ανάπτυξη και χαρακτηρισμό θερμοηλεκτρικών υλικών και διατάξεων, μεθόδους σύνθεσης στερεάς κατάστασης, ανάπτυξη νανο-σύνθετων υλικών, και σε προηγμένες τεχνικές δομικού χαρακτηρισμού με τη χρήση νετρονίων. Το 2024 κέρδισε την Μεταδιδακτορική Υποτροφία υπό τη δράση Marie Curie όπου και διεξάγει αυτήν την περίοδο έρευνα πάνω στην ανάπτυξη θερμοηλεκτρικών υλικών Half-Heusler για ανάκτηση της απορριπτόμενης θερμότητας.