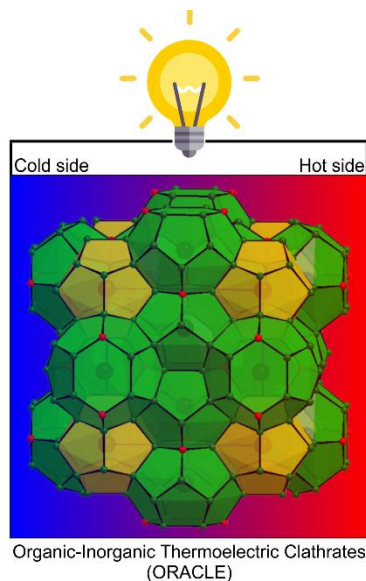


Ακρωνύμιο: ORACLE

Τίτλος: **Organic-inorganic thermoelectric clathrates**



Το έργο χρηματοδοτείται από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) και από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας (ΓΓΕΤ), με αρ. Σύμβασης Έργου 14730

Προκήρυξη με τίτλο «Χρηματοδότηση της Βασικής Έρευνας (Οριζόντια Υποστήριξη όλων των Επιστημών)», Εθνικό Σχέδιο Ανάκαμψης και Ανθεκτικότητας («Ελλάδα 2.0»)

Χρηματοδότης: Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας & Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.)

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δρ. Ανδρέας Καλτζόγλου

Επιστημονική περιοχή: ΕΠ.1 Φυσικές Επιστήμες

Επιστημονικό πεδίο: 1.3 Επιστήμη Υλικών

Φορέας Υποδοχής: Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Ινστιτούτο Θεωρητικής & Φυσικής Χημείας (ΙΘΦΧ)

Προϋπολογισμός: 187.000,00€

Διάρκεια: 24 μήνες



Αντικείμενο του έργου

Ο σκοπός του έργου 'Organic-inorganic thermoelectric clathrates' (ORACLE) είναι η μελέτη νέων οργανικών-ανόργανων ενώσεων εγκλωβισμού τύπου clathrates και η χρήση τους σε θερμοηλεκτρικές συσκευές υψηλής απόδοσης. Η σύνθεση θα περιλαμβάνει τήγματα υψηλών θερμοκρασιών, πρόδρομες ενώσεις υψηλής δραστηριότητας και περιστρεφόμενο μύλο (ball milling). Τα υλικά θα χαρακτηριστούν με τη βοήθεια κρυσταλλογραφικών και φασματοσκοπικών τεχνικών και οι σχέσεις δομής - φυσικών ιδιοτήτων θα μελετηθούν εκτενώς. Η βέλτιστη χημική σύσταση και νανομορφολογία των *n*- και *p*-τύπου clathrates θα βρεθεί και μαζί με αυτή θα οριστούν τα ηλεκτρικά και μηχανικά χαρακτηριστικά των αντίστοιχων θερμοηλεκτρικών διατάξεων, οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν για ανάκτηση ενέργειας από χαμένη θερμότητα κοντά σε θερμοκρασία δωματίου. Η πρωτοτυπία του έργου θα είναι η εξής: 1) οργανικά ανιόντα και κατιόντα θα ενσωματωθούν για πρώτη φορά σε ανόργανα πλέγματα clathrates από άτομα Sn με σκοπό την παρασκευή ενώσεων με χαμηλή τοξικότητα και υψηλή θερμοηλεκτρική απόδοση, 2) τεχνικές μηχανικής μάθησης και ανάλυση επιφανειών Hirshfeld θα χρησιμοποιηθούν ως δομικά μοντέλα που θα προβλέψουν τις host-guest αλληλεπιδράσεις και τις φυσικοχημικές ιδιότητες των ενώσεων εγκλωβισμού. Ο αντίκτυπος του έργου ORACLE θα είναι μια νέα τάξη ημιαγώγιμων clathrates που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε θερμοηλεκτρικές συσκευές. Οι διατάξεις αυτές θα έχουν αναλογία κόστους/ισχύος κάτω από €0.5/Watt και επομένως μεγάλη δυναμική για ευρείας κλίμακας χρήση, όπως σε επιφάνειες κτιρίων ως ανανεώσιμη πηγή ενέργειας. Επιπροσθέτως, η μελέτη αυτών των νέων οργανικών-ανόργανων ενώσεων θα επεκτείνει την υπάρχουσα βάση δεδομένων με κλασικές ενώσεις παρεμβολής, όπως οι ζεόλιθοι και τα metal-organic frameworks.

