

Recherche de nouveaux matériaux thermoélectriques par criblage ab-initio de composés intermétalliques ternaires

Céline BARRETEAU¹, Jean-Claude CRIVELLO¹, Jean-Marc JOUBERT¹ et Eric ALLENO¹

¹ Université Paris Est, ICMPE (UMR 7182), CNRS, UPEC, F-94320 Thiais, FRANCE

Résumé :

Dans le but de trouver de nouveaux matériaux thermoélectriques, nous avons décidé de mettre en œuvre une approche de criblage sur un ensemble large de composés ternaires par des méthodes de calculs des propriétés électroniques basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Cette approche a permis d'examiner 570 compositions possibles d'intermétalliques ternaires TMX avec T est un métal de transition des colonnes Ti, V, Cr, une terre rare ou un alcalino-terreux (Sr, Ba), M est élément de la première ligne des métaux de transition et X un élément sp (Al, Si, P, Sn et Sb). Le processus de criblage se fait en plusieurs étapes qui ont pour but d'identifier d'abord les composés stables puis ceux qui sont semi-conducteurs [1].

Dans un premier temps, une étude systématique des bases de données cristallographiques a permis d'identifier quatre types structuraux prédominants pour la stœchiométrie « 1 : 1 : 1 » : **TiNiSi** ($Pnma$, 62), **MgAgAs** ($F-43m$, 216), **BeZrSi** ($P6_3/mmc$, 194) and **ZrNiAl** ($P-62m$, 189). Toutes les compositions possibles ($13 T * 9 M * 5 X = 570$) ont été envisagées et calculées par DFT pour les quatre prototypes structuraux ($570 * 4 = 2280$ configurations). Ces calculs ont permis de prédire pour chaque composition si elle est stable thermodynamiquement, et si oui quel est le prototype structural le plus favorable. Ensuite, la structure électronique de chaque composé a été analysée afin d'éliminer les TMX qui sont métalliques pour ne garder que les semi-conducteurs. Ce travail de criblage a ainsi permis d'identifier 472 composés stables parmi lesquels 40 sont prédits comme étant non-métalliques.

[1] Barreteau C., Crivello J.-C., Joubert J.-M. and Alleno E., Looking for new thermoelectric materials among TMX intermetallics using high-throughput calculations, *Comput. Mater. Sci.* 156 (2019) 96-103