



Propriétés thermoélectriques des composés de type $\text{Mo}_3\text{Sb}_{7-x}\text{Te}_x$

C. Candolfi¹, B. Lenoir¹, A. Dauscher¹, C. Bellouard², J. Tobola³, J. Hejtmanek⁴, C. Stiewe⁵ et E. Muller⁵

¹Laboratoire de Physique des Matériaux, Nancy Université, CNRS, ENSMN, Parc de Saurupt,
54042 Nancy Cedex

²Laboratoire de Physique des Matériaux, Nancy Université, CNRS, BP 239, 54506, Vandoeuvre-
lès-Nancy Cedex

³Faculty of Physics and Applied Computer Science, AGH University of Science and Technology,
30-059 Krakow, Poland

⁴Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Cukrovarnicka 10, CZ-162 53,
Praha 6, Czech Republic

⁵German Aerospace Center (DLR), Institute of Materials Research, Linder Hoehe, 51147
Cologne, Allemagne

Composé binaire Mo_3Sb_7

Structure cristallographique

Structure de bande et densité d'états

Synthèse et caractérisation physico-chimique

Propriétés de transport et propriétés magnétiques

Mo_3Sb_7 , un simple métal ?

Composés substitués au tellure $\text{Mo}_3\text{Sb}_{7-x}\text{Te}_x$ ($x = 1, 1,6$ et $1,8$)

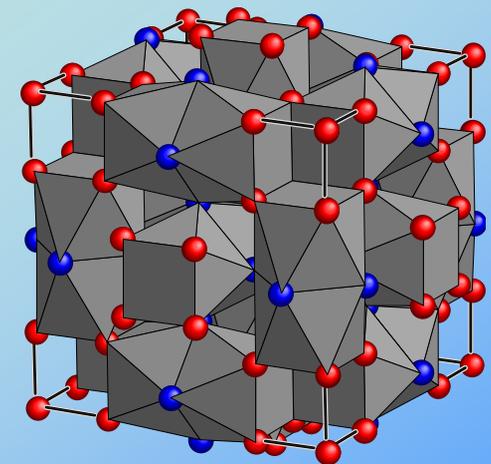
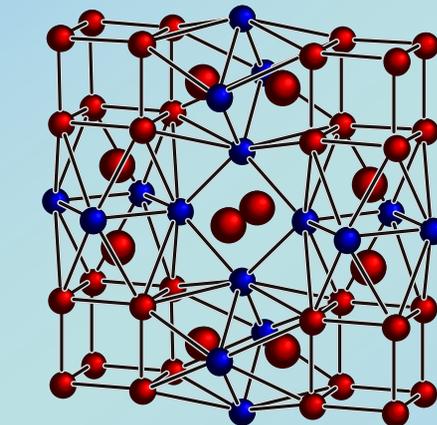
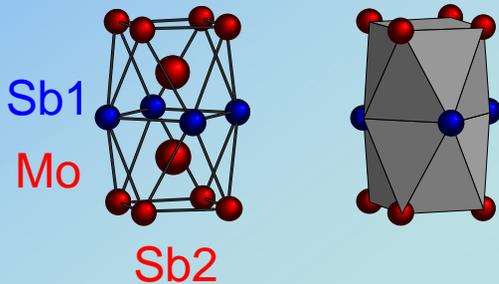
Evolution de la densité d'états

Propriétés thermoélectriques

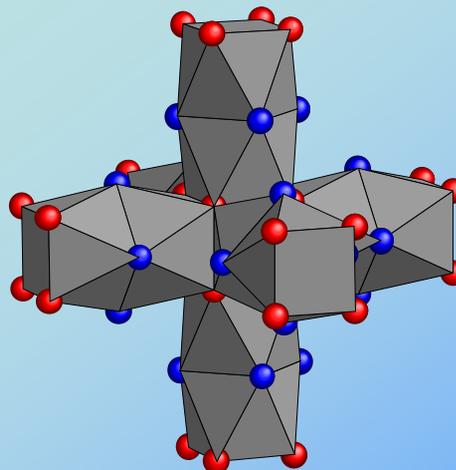
Conclusion et perspectives

Composé binaire Mo_3Sb_7

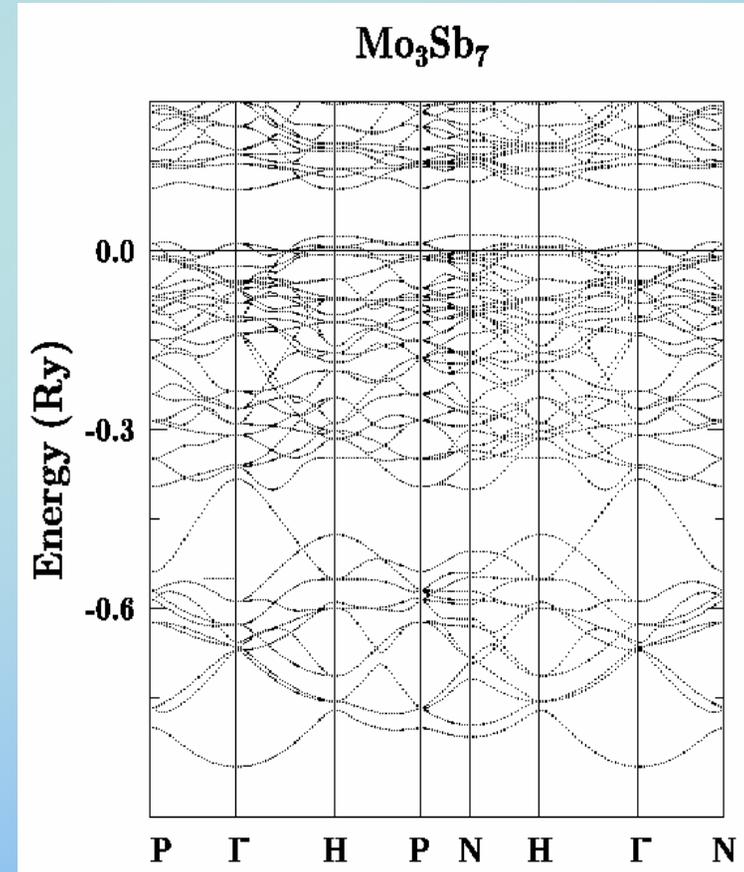
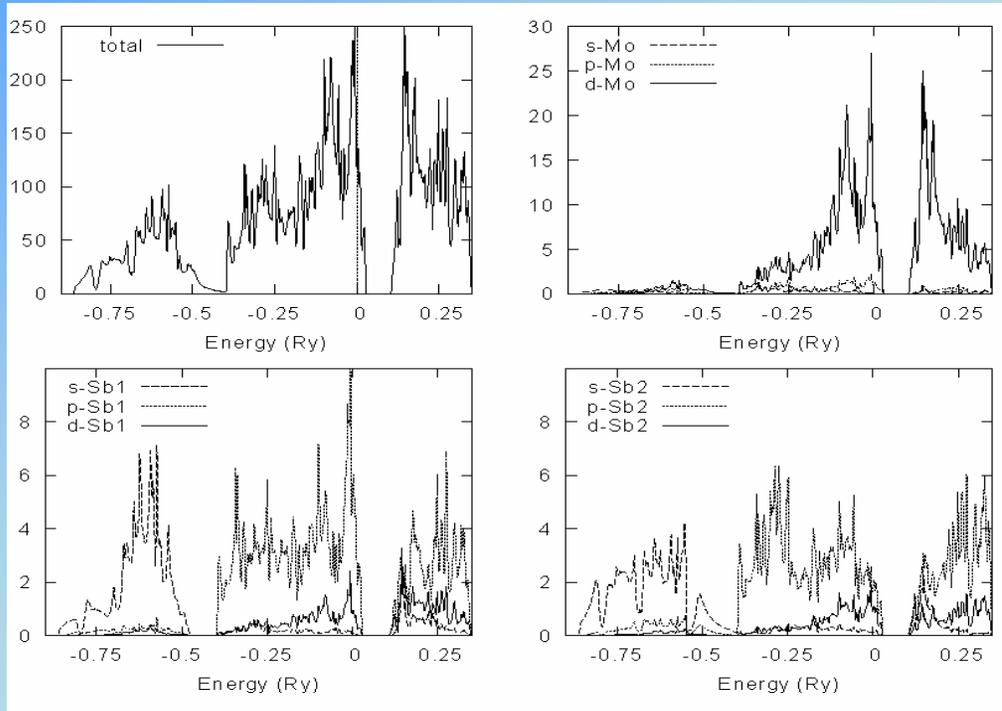
Structure cristallographique
Groupe d'espace $Im\bar{3}m$



40 atomes par maille
élémentaire



Structure de bande et densité d'états (KKR)



Forte densité d'états (en états/Ry/f.u.) en bon accord avec des calculs LMTO*

Au niveau de Fermi $115 < N(E_F) < 120$

Supraconducteur ?

$IN_{\text{Mo}}(E_F) \sim 0,7$

Fluctuations de spin ?

*Soheilnia et al., *Journal of Material Chemistry*, 12, 345 (2002)

Synthèse et caractérisation physico-chimique

Synthèse par métallurgie de poudre

Réaction des éléments purs à 750 °C pendant 10 jours

Broyage puis recuit à 750 °C pendant 15 jours

Frittage par pressage uniaxial à chaud

Caractérisation physico-chimique

Diffraction des rayons X

Diffraction de neutron ($x = 0$ et $x = 1,6$)

Microsonde de Castaing

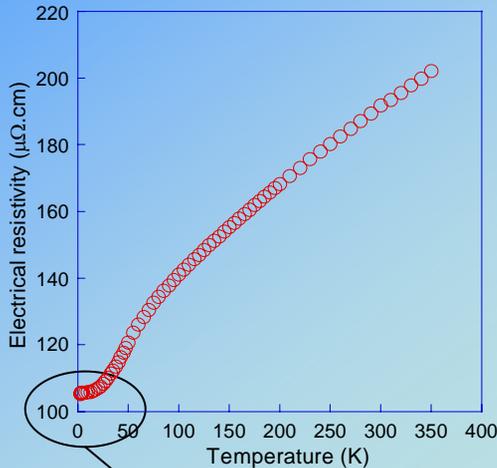
Aucunes phases secondaires détectées pour $x = 0$, $x = 1$ et $x = 1,6$

Présence de MoTe_2 (< 4 % en vol.) pour $x = 2,2$

Limite de solubilité: $x \sim 1,8$ en bon accord avec de précédents résultats*

Composé binaire Mo_3Sb_7

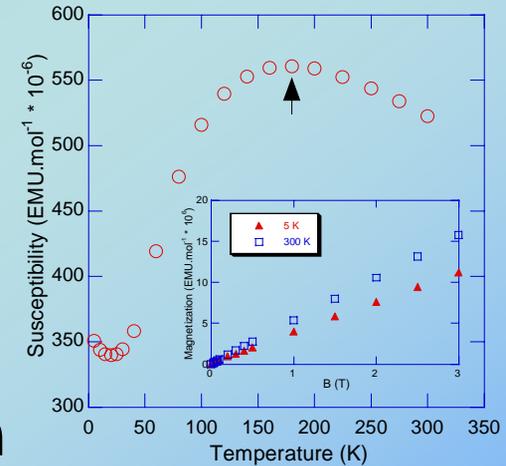
Propriétés de transport et propriétés magnétiques : Mo_3Sb_7 , un simple métal ?



Supraconducteur $T_c \sim 2,25$ K

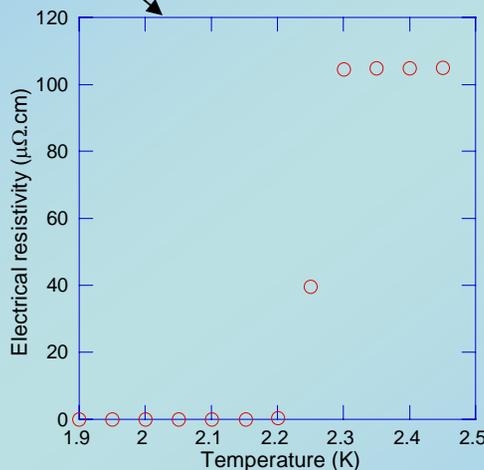
A basse température $\rho = \rho_0 + AT^2$

Tendance à saturer à partir de 80 K



Fluctuations de spin

(Candolfi et al., *Physical Review Letters*, accepté)



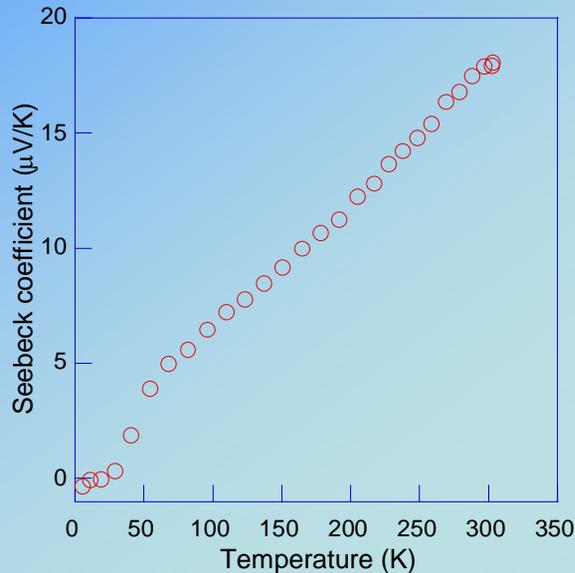
Absence d'impuretés ferromagnétiques ou paramagnétiques

Dépendance en T^2 à basse température

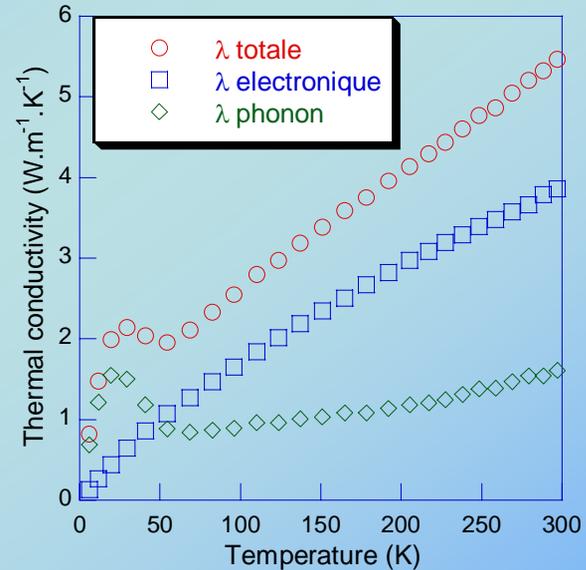
Comportement type Curie-Weiss au-delà de 180 K

Forte valeur à 300 K $\sim 520 \cdot 10^{-6}$ EMU.mol⁻¹

Propriétés de transport et propriétés magnétiques : Mo_3Sb_7 , un simple métal ?



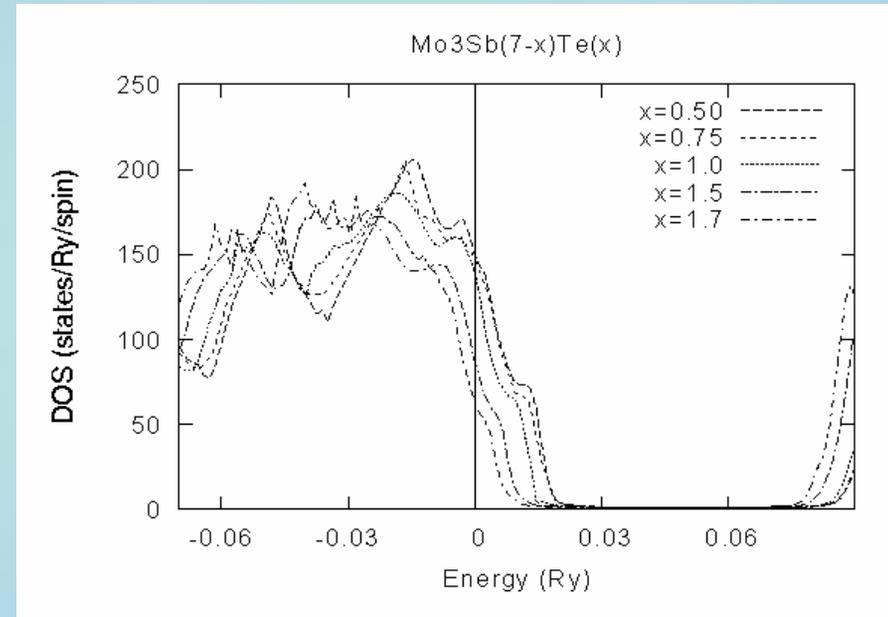
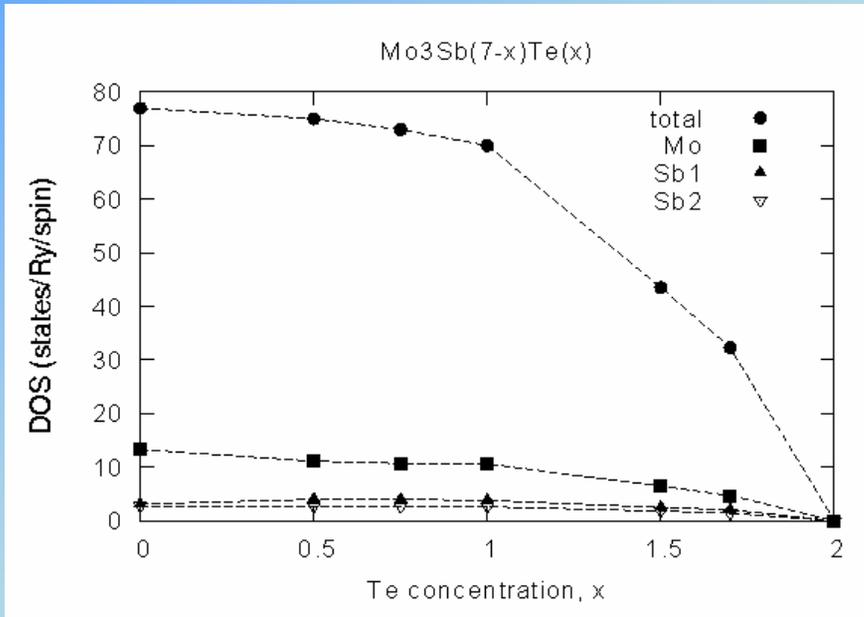
Anomalie vers 80 K : paramagnon drag ?



Conductivité thermique électronique majoritaire

Très faible valeur de la conductivité thermique de réseau : forte interaction paramagnon-phonon ?

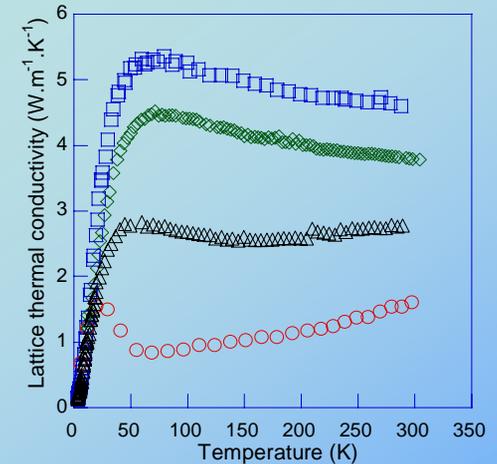
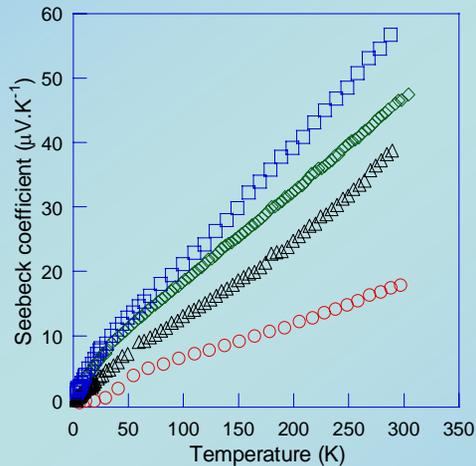
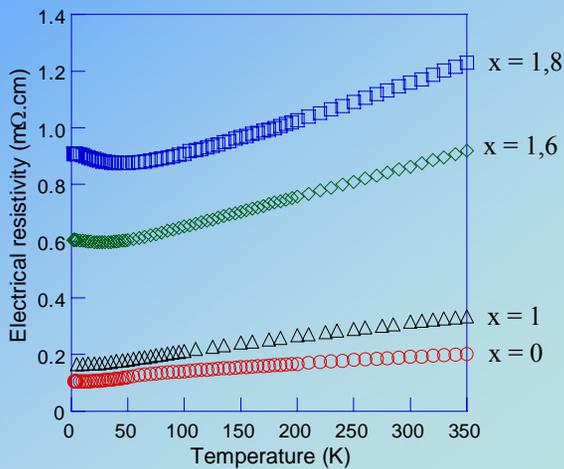
Evolution de la densité d'états (KKR-CPA)



Forte diminution de la densité d'état totale au niveau de Fermi et de la densité d'état partielle du Molybdène

Suppression des fluctuations de spin ?

Propriétés thermoélectriques basse température



Augmentation de la résistivité électrique
avec la concentration en tellure

Modification du comportement basse
température

Augmentation du pouvoir
thermoélectrique avec la concentration
en tellure

Augmentation de la conductivité
thermique de réseau avec
l'augmentation du désordre !!

**Suppression
des fluctuations
de spin**

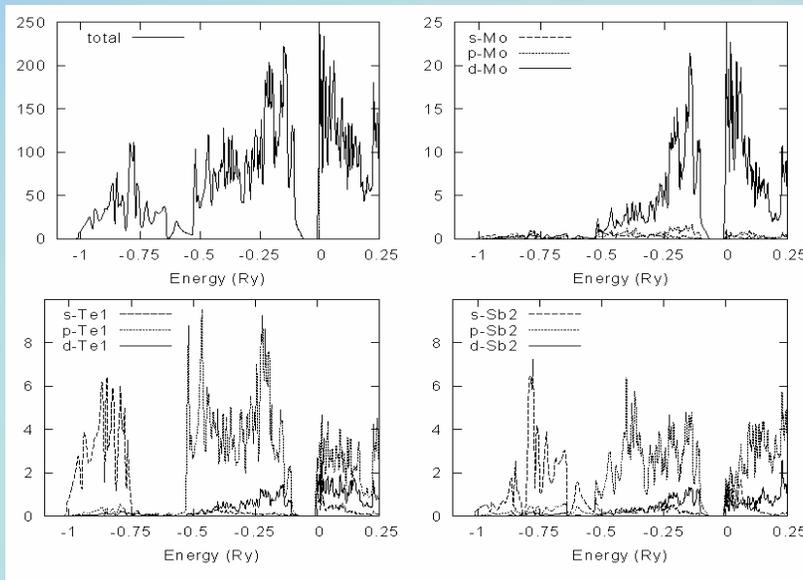
Conclusion et perspectives

Mo_3Sb_7 métal où coexistent supraconductivité et fluctuations de spin (forte influence des fluctuations de spin sur la température critique)

Nette amélioration des propriétés thermoélectriques avec le dopage au tellure

Composé intéressant à haute température pour la génération d'électricité

Pourquoi seulement $x = 1,8$? Magnétisme vs Etat anti-liant



Composé hypothétique $\text{Mo}_3\text{Sb}_4\text{Te}_3$

Densité d'état très élevée au niveau de Fermi induisant un moment magnétique sur les atomes de molybdène