



# Propriétés thermoélectriques des composés de type $\text{Mo}_{3-x}\text{Ru}_x\text{Sb}_7$

C. Candolfi<sup>1</sup>, B. Lenoir<sup>1</sup>, A. Dauscher<sup>1</sup>, C. Bellouard<sup>2</sup>, J. Tobola<sup>3</sup>, E. Guilmeau<sup>4</sup> et J. Hejtmanek<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique des Matériaux, Nancy Université, CNRS, ENSMN, Parc de Saurupt,  
54042 Nancy Cedex

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

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

<sup>4</sup>CRISMAT-ENSICAEN, 6 Boulevard Maréchal Juin, 14050 CEDEX

<sup>5</sup>Institute of Physics, Academy of Sciences of the Czech Republic, Cukrovarnicka 10, CZ-162 53,  
Praha 6, Czech Republic

**Quelques rappels : composé  $\text{Mo}_3\text{Sb}_7$  et  $\text{Mo}_3\text{Sb}_{7-x}\text{Te}_x$**

**Structure de bande électronique des composés  $\text{Mo}_{3-x}\text{Ru}_x\text{Sb}_7$**

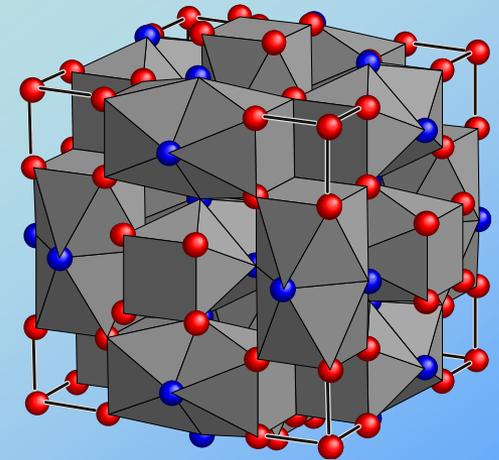
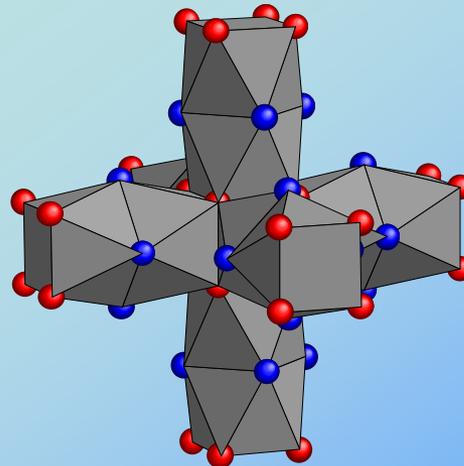
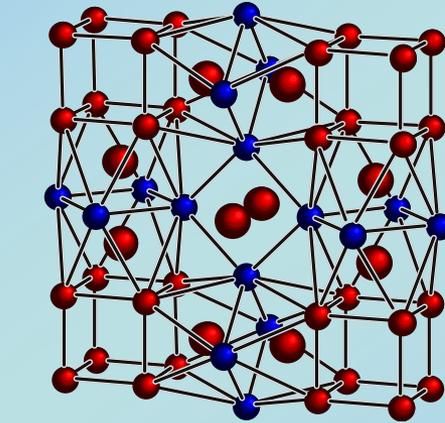
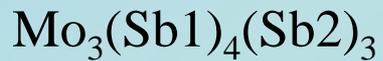
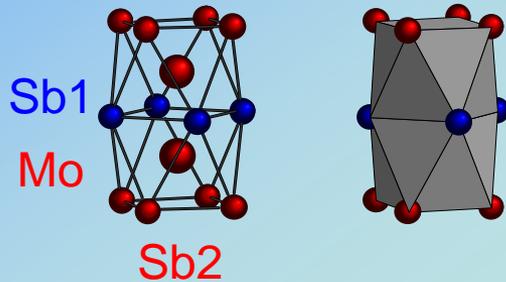
**Synthèse et caractérisation physico-chimique**

**Propriétés thermoélectriques**

**Conclusion**

# Composé binaire $\text{Mo}_3\text{Sb}_7$

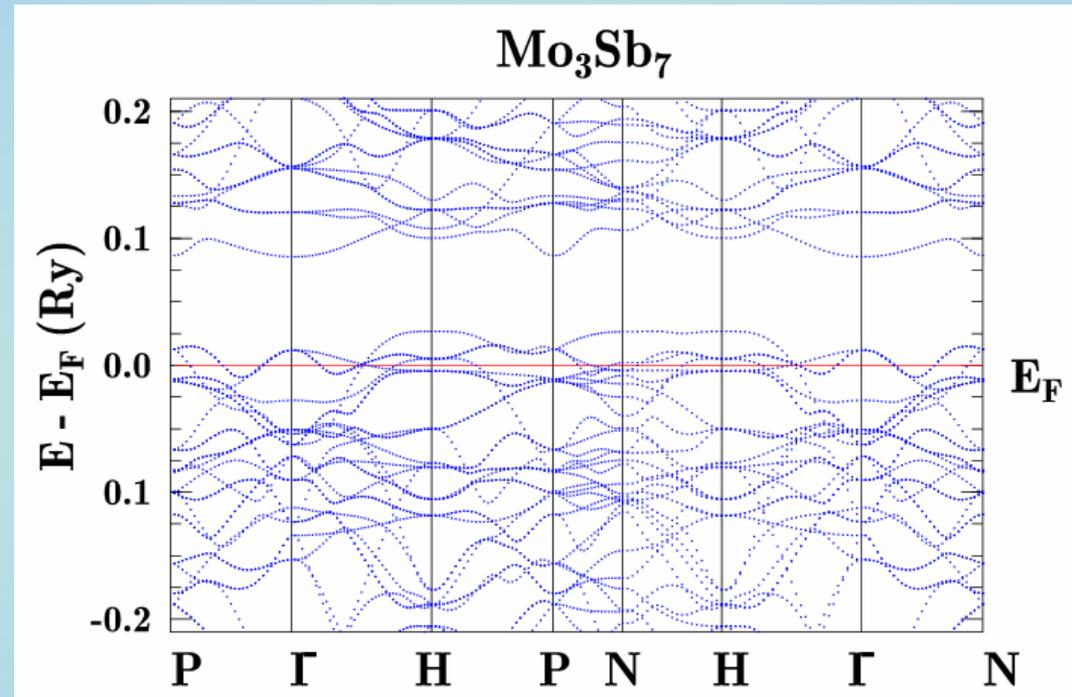
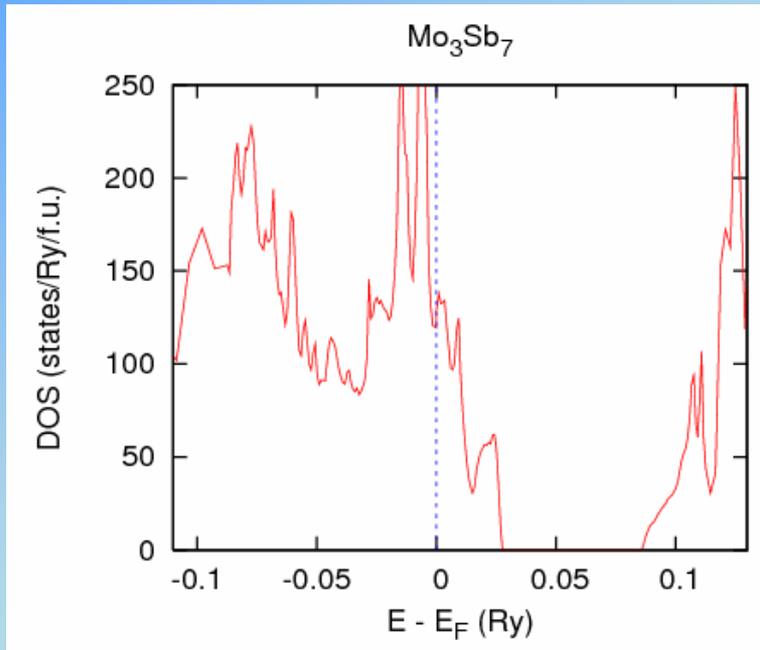
*Structure cristallographique*
  
*Groupe d'espace  $Im\bar{3}m$*



40 atomes par maille élémentaire

# Composé binaire $\text{Mo}_3\text{Sb}_7$

Structure de bande et densité d'états (**KKR**, KKR-CPA, FP-KKR, SR-KKR)

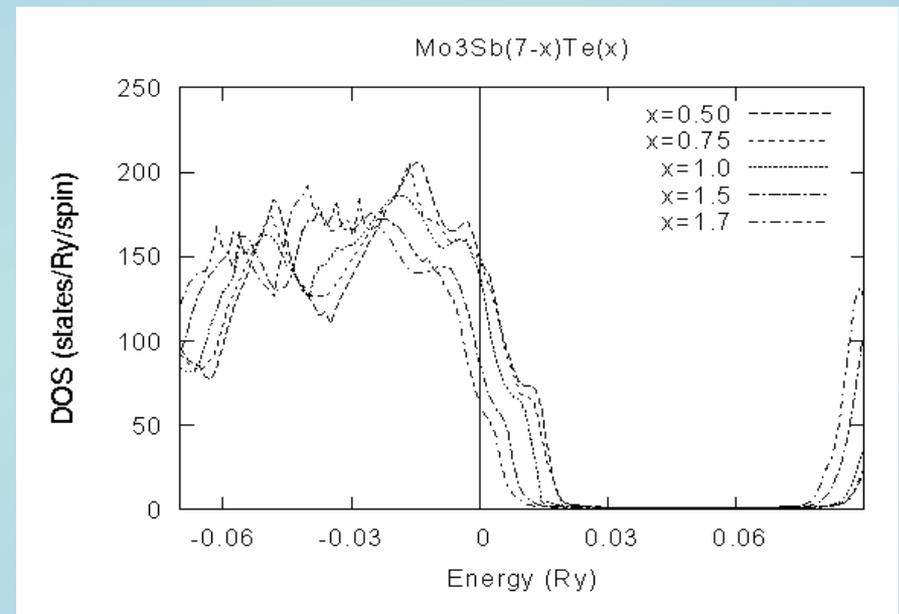
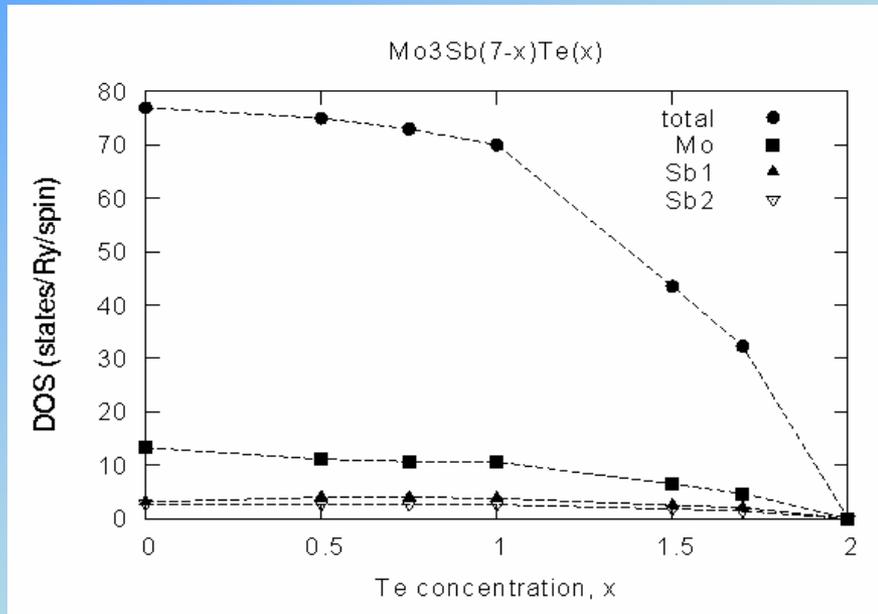


Propriétés métalliques, type p ( $ZT \sim 0,1$  à 800 K)

Supraconducteur BCS  $T_c \sim 2,3$  K

Interactions magnétiques complexes

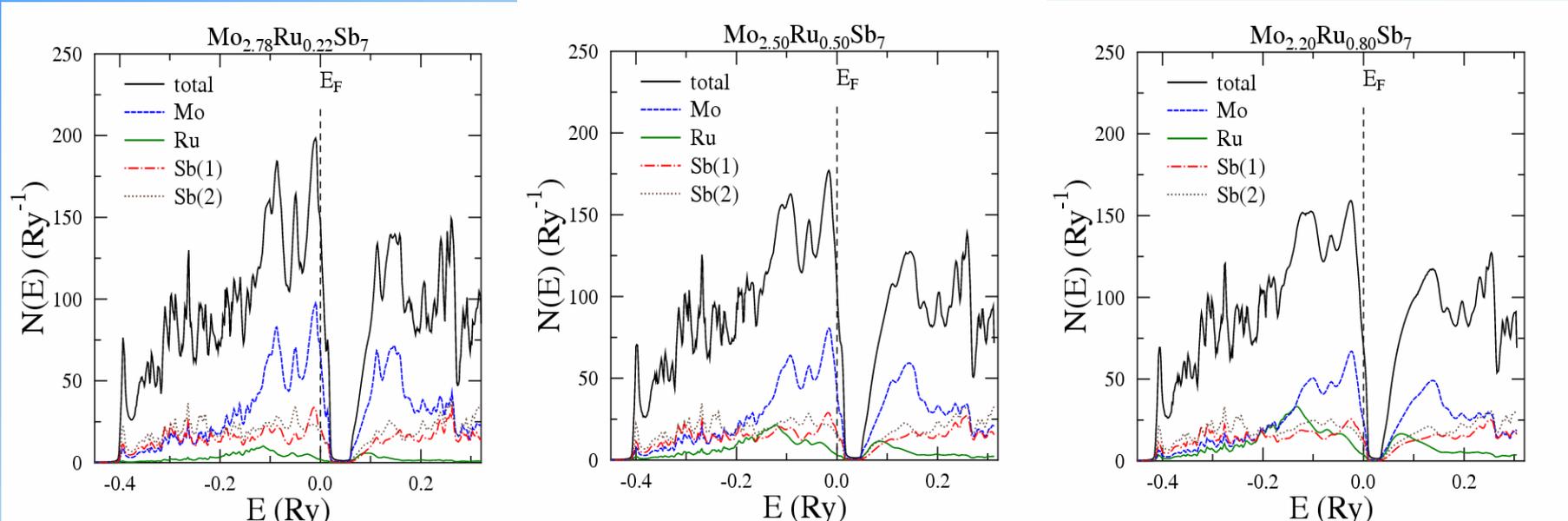
## Evolution de la densité d'état au niveau de Fermi



**Forte diminution de la densité d'état totale et de la densité d'état partielle du molybdène : augmentation de la resistivité électrique et du pouvoir thermoélectrique ( $ZT \sim 0.8$  à  $1050 \text{ K}^*$  pour  $\text{Mo}_3\text{Sb}_{5,4}\text{Te}_{1,6}$ )**

**Substitution sur le site du molybdène ?**

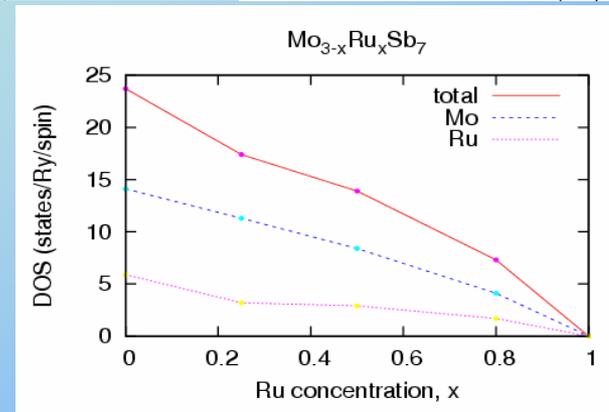
# Structure de bande électronique des composés $\text{Mo}_{3-x}\text{Ru}_x\text{Sb}_7$



**Diminution de la densité d'état totale lorsque  
la concentration en ruthénium augmente**

**Evolution rigide de la structure de bande**

**Etat semi-conducteur pour  $x = 1$**





# Synthèse et caractérisation physico-chimique

## Synthèse par métallurgie de poudre ( $x = 0,25, 0,5$ et $1$ )

*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 à 300 K et à basse température ( $x = 0,25$  et  $0,8$ )*

*Microsonde de Castaing*

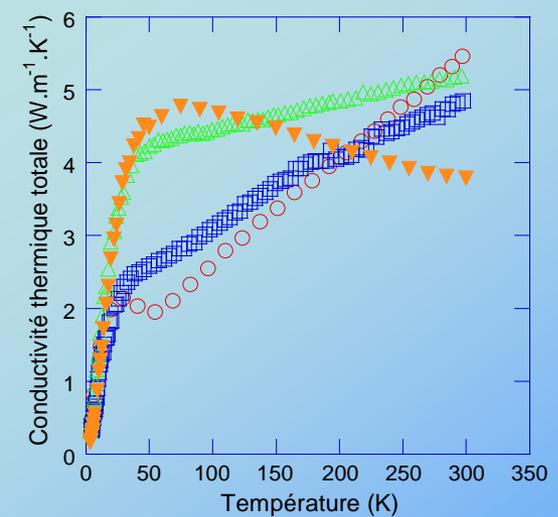
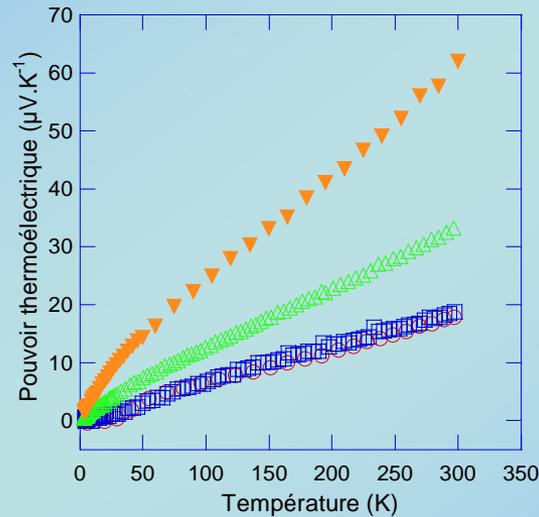
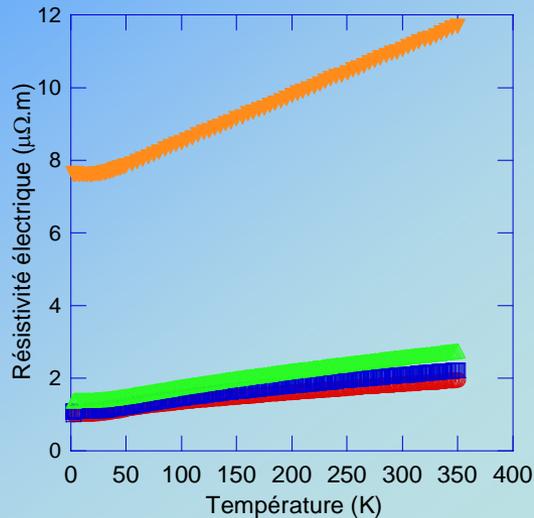
**Aucunes phases secondaires détectées pour  $x = 0,25$  et  $0,5$**

**Présence de  $\text{RuSb}_2$  ( $< 4$  % en vol.) pour  $x = 1$**

**Existence d'une limite de solubilité du ruthénium :  $x \sim 0,8$**

# Propriétés thermoélectriques

## Propriétés à basse température



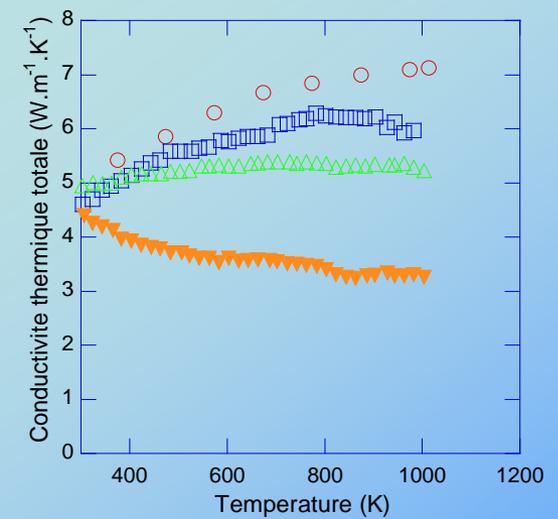
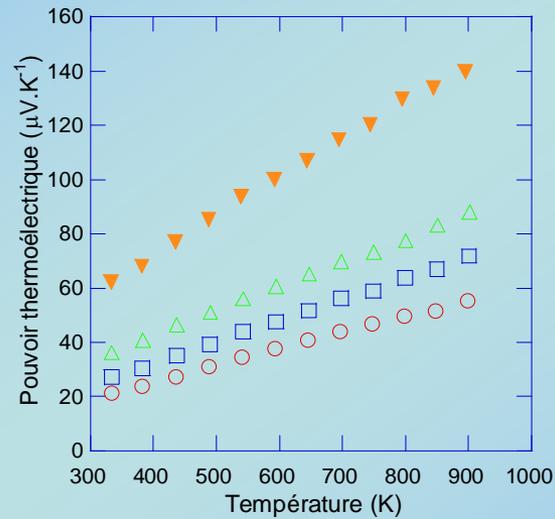
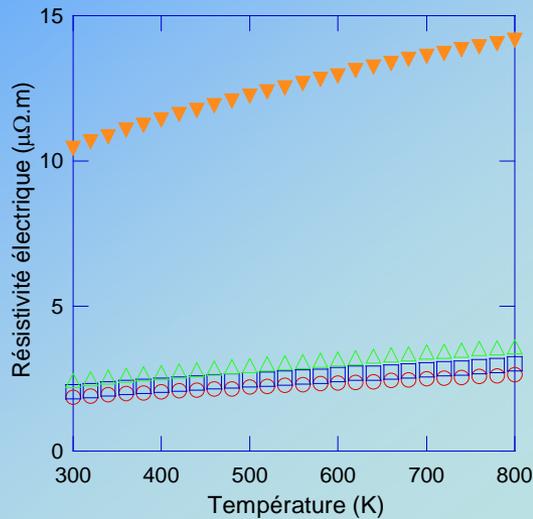
x = 0 (○), x = 0,25 (□), x = 0,5 (△), x = 0,8 (▽)

**Augmentation de la résistivité électrique et du pouvoir thermoélectrique lorsque la concentration en ruthénium augmente**

**Augmentation de la conductivité thermique totale : d'un comportement exotique pour x = 0 vers un comportement classique pour x = 0,8**

# Propriétés thermoélectriques

## Propriétés à haute température



$x = 0$  ( $\circ$ ),  $x = 0,25$  ( $\square$ ),  $x = 0,5$  ( $\triangle$ ),  $x = 0,8$  ( $\nabla$ )

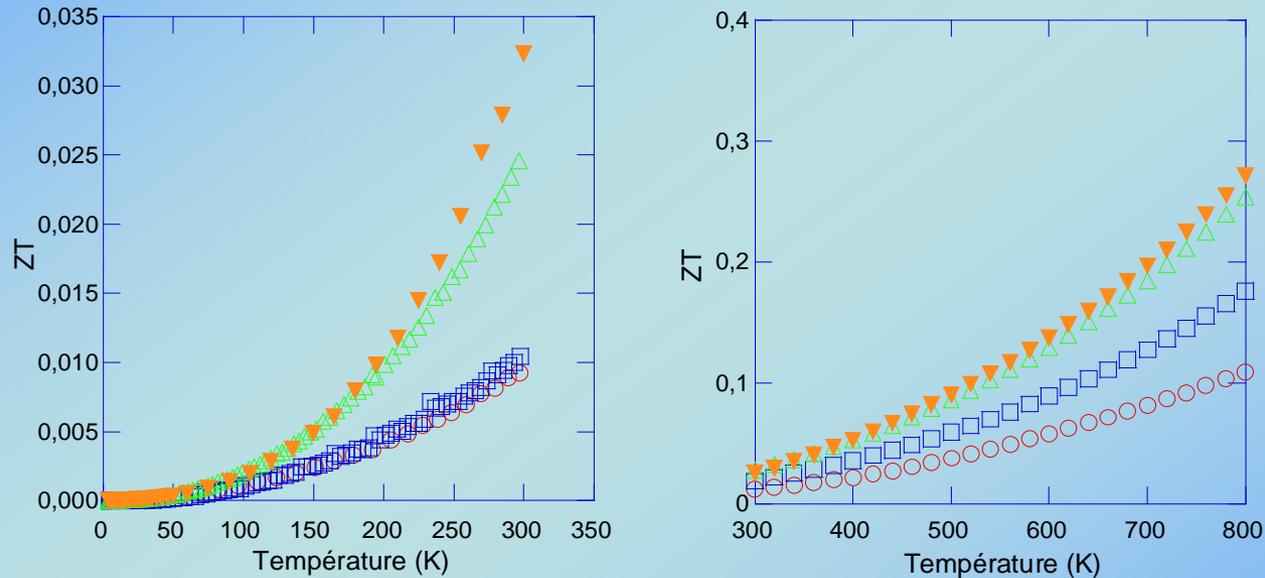
**Evolution linéaire de la résistivité électrique et du pouvoir thermoélectrique**

**La conductivité thermique a tendance à saturer pour  $x = 0, 0,25$  et  $0,5$**

**Faibles valeurs atteintes à haute température**

# Propriétés thermoélectriques

*Facteur de mérite adimensionnel ZT*



$x = 0$  (○),  $x = 0,25$  (□),  $x = 0,5$  (△),  $x = 0,8$  (▽)

**ZT ~ 0,3 à 800 K extrapolé à 0,6 à 1000 K**

**Dépendance linéaire de la résistivité électrique et du pouvoir thermoélectrique**

**Matériaux intéressants pour la génération d'électricité**



# Conclusion

**Possibilité de substitution sur le site du molybdène**

**Nette amélioration des propriétés thermoélectriques avec la substitution du molybdène par du ruthénium**

**Existence d'une limite de solubilité: impossibilité d'atteindre un état semi-conducteur**

**Composé intéressant à haute température pour la génération d'électricité**