

## Sujet de Master 2 CSM

### Etude théorique de composés antimoniures thermoélectriques pour des applications à très hautes températures

Responsables : Bruno Fontaine, Jean-François Halet, Régis Gautier

*Equipe « Chimie Théorique Inorganique », Institut des Sciences Chimiques de Rennes  
email : bruno.fontaine@ensc-rennes.fr, halet@univ-rennes1.fr, rgautier@ensc-rennes.fr*

Le projet de stage se situe dans le domaine de la chimie théorique appliquée à la chimie du solide. Il vise à utiliser les possibilités offertes par la simulation numérique au moyen de méthodes de chimie quantique pour le développement de matériaux thermoélectriques susceptibles d'être utilisés à hautes températures, afin de récupérer la chaleur perdue lors de procédés industriels générant de grande quantité de chaleur (métallurgie, industrie du verre ou des céramiques par exemple). Plus particulièrement, des composés à base d'antimoine qui adoptent un arrangement structural particulier du type  $\text{Th}_3\text{P}_4$  [1] seront étudiés. Si les matériaux de type « négatif » comme  $\text{La}_3\text{Te}_{4-x}$  sont bien connus et ont des figures de mérite supérieures à 1 à 1000 °C – ils intéressent la NASA américaine depuis une dizaine d'années, leur équivalent de type « positif », les antimoniures du type anti- $\text{Th}_3\text{P}_4$ , a encore besoin d'être largement amélioré.

[1] A. Chamoire, R. Viennois, J-C. Tedenac, M.M. Koza, F. Gascoin, Antimony based compounds with the anti- $\text{Th}_3\text{P}_4$  structure as potential high temperature thermoelectric materials, *J. Elec. Mater.*, **2011**, *40*, 1171-1175.