

## Contribution de la DFT à l'étude du diagramme de phases du système Al-Fe-V

Alexandre BERCHE<sup>1</sup>, Philippe JUND<sup>1</sup>

<sup>1</sup> ICGM, CNRS, Université de Montpellier, ENSCM, UMR 5253, Montpellier, France

### **Résumé :**

Parmi les matériaux thermoélectriques, les phases Heusler ( $X_2YZ$  ou  $XYZ$ ) présentent généralement des propriétés remarquables, avec un facteur de mérite  $ZT$  proche de 1 [1]. Cependant, dans le cas de la phase  $Fe_2VAl$ , la plupart des études ont montré que le  $ZT$  de la phase pure était proche de 0 [2]. Par contre, une légère variation de la stœchiométrie permet dans certaines conditions d'améliorer ces propriétés. Par exemple  $Fe_2V_{1.05}Al_{0.95}$  a un  $ZT$  de l'ordre de 0.13 [2] à 400K. Dans ce système, la connaissance du diagramme de phases apparaît donc fondamentale pour comprendre le comportement thermoélectrique de ce matériau.

Dans cette étude, les calculs DFT nous ont permis d'obtenir diverses données thermodynamiques qui ont été utilisées pour estimer la stabilité relative des phases à basse température. Plus particulièrement, les calculs d'énergies de formation des phases intermétalliques ainsi que de l'énergie de mélange dans des solutions solides, combinées aux données expérimentales nous ont permis d'estimer l'allure du diagramme de phases à 773K.

[1] T. Graf et al., Progress Solid State Chem. 39 (2011) 1-50

[2] H. Miyazaki et al., Mater Res. Express 1 (2014) 015901