

Etude du système Ba-Si sous hautes pressions par calculs ab-initio

Dr Romain VIENNOIS (Institut Charles Gerhardt Montpellier (UM/CNRS/ENSCM), Montpellier)

Abstract

Le système Ba-Si a attiré l'attention en raison de la présence de différentes phases supraconductrices et semiconductrices et l'obtention de phases clathrates intermétalliques sous hautes pressions et hautes températures (HP-HT) [1]. Ainsi, les phases BaSi_2 orthorhombique stable à conditions ambiantes et cubique HP-HT sont semiconductrices et la phase trigonale HP-HT est supraconductrice sous 8,9 K [2]. Les clathrates de type 1 $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$ et de type 9 $\text{Ba}_{24}\text{Si}_{100}$ obtenus sous HP-HT sont supraconductrices en dessous de 8 K et 1.55 K, respectivement [3], mais BaSi_6 et BaSi_3 , toutes deux obtenues à plus hautes pressions ($P > 10$ GPa), sont seulement métalliques [1,4]. Une étude théorique récente a rapporté la possibilité d'obtenir plusieurs nouvelles phases Ba-Si riches en Si mais était limitée aux stœchiométries 1 : 1, 1 :2, 1 :3, 1 :5 et 1 :6 [5].

Récemment, nous avons étudié la stabilité des phases clathrates Ba-Si HP-HT et montré que $\text{Ba}_{24}\text{Si}_{100}$ était stabilisé à la fois par la pression et les contributions vibrationnelles et électroniques [6]. Dans la présente étude théorique du système Ba-Si sous HP-HT, non seulement nous examinons la stabilité des différentes phases clathrates de type 1-9 et H tels que définis par la nomenclature des clathrates hydrates mais aussi explorons la formation de nouvelles phases Ba-Si jusqu'à des pressions de 25 GPa. Nous rapportons la prédiction de nouvelles phases binaires Ba-Si ainsi que leurs structures cristallographiques et leurs propriétés physiques.

[1] S. Yamanaka, S. Maekawa, Z. Naturforsch. 2006, 61b, 1493-1499

[2] J. A. Florès-Livas, R. Debord, S. Botti et al, Phys. Rev. Lett. 2011, 106, 087002

[3] R. Lortz, R. Viennois et al, Phys. Rev. B 2008, 77, 224507

[4] J.-M. Hübner et al, Materials 2019, 12, 145-158

[5] J. Shi et al, Phys. Chem. Chem. Phys. 2016, 18, 8108-8114

[6] R. Viennois et al, Inorg. Chem. 2024, 63, 5541-5551