



Institut de physique  
Résultat scientifique

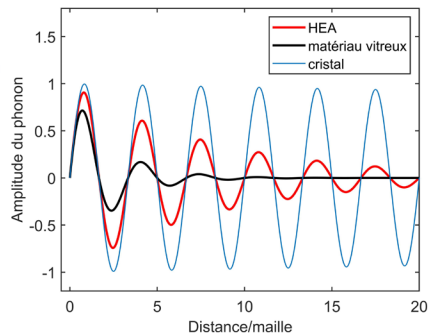
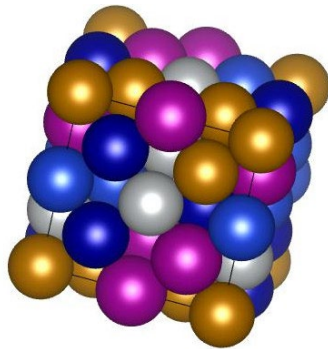
## Entre les cristaux et les verres : les alliages de « haute entropie »

**Une nouvelle classe de matériaux cristallins, les alliages à « haute entropie », se caractérise par des variations aléatoires dans la composition chimique de chaque maille qui n'altèrent cependant pas l'ordre cristallin. Ces matériaux au désordre partiel présentent des propriétés thermiques qui relèvent à la fois des cristaux et des verres, pourtant très différents en la matière.**

Dans le contexte actuel de crise climatique et de raréfaction des sources d'énergie, comprendre le transport de la chaleur dans les solides est un des défis majeurs de la recherche d'aujourd'hui, car la maîtrise de ces transferts est au cœur de la conception efficace de nouveaux matériaux pour la récupération d'énergie : on peut citer par exemple les matériaux thermoélectriques qui ont la propriété de convertir les différences de température en tension électrique, permettant la conversion de chaleur directement en électricité. La recherche dans ce domaine est ancienne et a conduit à des avancées majeures dans la compréhension du comportement thermique des systèmes cristallins d'une part et des systèmes complètement désordonnés que sont les verres d'autre part. Or, depuis une vingtaine d'années ont été découverts de nouveaux matériaux, qui se placent exactement à mi-chemin entre l'ordre quasi-parfait des cristaux et les structures complètement amorphes des verres : les alliages à haute entropie. Il s'agit de systèmes géométriquement cristallins, constitués de mailles élémentaires simples empilées de façon régulière dans tout l'espace, mais dont la « décoration intérieure » ne se répète pas d'une cellule à l'autre : l'occupation de chaque site de chaque maille par des atomes est laissée au hasard, seules les proportions globales de chacune des espèces chimiques présentes étant contrôlées lors de la synthèse du matériau.

Ce caractère aléatoire dans l'occupation des sites atomiques introduit du désordre dans la distribution des masses, des tailles, mais également dans les interactions entre atomes voisins, qui sont évidemment dépendantes de leur identité chimique. Ce sont les mêmes types de désordre qu'on retrouve dans un matériau amorphe bien que pour ces derniers l'ordre positionnel à longue distance du cristal soit en plus perdu. Ces différents désordres affectent la façon dont ces assemblées atomiques vibrent collectivement, et également la quantité d'électrons libres disponibles dans le matériau (et leur dynamique propre), deux ingrédients essentiels qui influencent la diffusion de la chaleur dans les solides.

Dans ce travail mené à l'Institut lumière matière (ILM, CNRS / Université Lyon 1) et au Laboratoire Léon Brillouin (LLB, CNRS / CEA), les physiciennes et physiciens ont utilisé des techniques de spectroscopie de neutrons et de rayons X pour étudier précisément comment sont modifiées les vibrations du réseau géométrique cristallin d'un mélange équilibré de Fe-Co-Cr-Mn-Ni (éléments métalliques voisins dans la table de Mendéleiev) formant un cristal de haute entropie macroscopique. Ils montrent que ces vibrations quantiques (aussi appelées phonons) sont affectées par le désordre chimique de l'alliage, d'une façon particulière qui reflète le statut intermédiaire de l'alliage lui-même. En effet, ces phonons se propagent comme dans un cristal ordonné, car ce dernier leur confère un statut ondulatoire et propagatif (on peut les voir comme la version quantique d'une vibration acoustique se propageant dans un milieu dense). Cependant, le désordre dans la répartition des interactions augmente très fortement l'atténuation de ces ondes, et ainsi empêche leur propagation sur un grand nombre de mailles cristallines, freinant ce faisant la propagation de la chaleur. Enfin le désordre chimique perturbe également le transport des électrons libres, ce qui abaisse non seulement la conductivité électrique, mais contribue également à réduire encore davantage la conductivité thermique. Ce dernier point, combiné avec la possibilité de varier de façon ad hoc la composition atomique globale de ces alliages, rend ces matériaux potentiellement intéressants pour des applications en thermoélectricité. Ces travaux sont publiés dans la revue *Nature Communications*.



Légende : (gauche) Structure de l'alliage à haute entropie FeCoCrMnNi. La structure est simple, cubique à face centrée mais les sites sont occupés aléatoirement par les atomes de l'alliage, représentés ici en différentes couleurs. Seul un cube de 2 mailles de côté, représentatif de l'alliage, est montré.

(droite) Représentation schématique de l'atténuation d'un phonon (de longueur d'onde égale à 5 fois la distance entre deux atomes voisins), dans le cas d'un cristal, d'un verre et d'un alliage de haute entropie (HEA). L'amortissement des phonons des HEA est clairement intermédiaire entre celui des cristaux (très faible) et celui des verres, que le désordre structurel augmente considérablement.

Crédit : Institut lumière matière (ILM)

## Référence

---

**Phonon behavior in a random solid solution: a lattice dynamics study on the high-entropy alloy FeCoCrMnNi.** S.R.Turner *et al*, *Nature Communications*, paru le 06 décembre 2022.

DOI : [10.1038/s41467-022-35125-4](https://doi.org/10.1038/s41467-022-35125-4)

Archives ouvertes [HAL](#)

## Contacts

---

**Valentina Giordano** | Chargée de recherche CNRS | ILM | [valentina.giordano@univ-lyon1.fr](mailto:valentina.giordano@univ-lyon1.fr)

Communication INP-CNRS | [inp.com@cnrs.fr](mailto:inp.com@cnrs.fr)