

Effet des Additions ternaires et évolution des défauts ponctuels en fonction de la température dans les alliages FeNb et FeZr

L. Rabahi, D. Bradai, A. Kellou

Abstract : Les intermétalliques sont des composés prometteurs qui suscitent un grand intérêt technologique. Ces matériaux allient des propriétés mécaniques élevées à hautes températures et une assez bonne résistance à l'oxydation. Cependant leur utilisation est limitée par leur fragilité à basses températures. Ce qui incite les métallurgistes à introduire des éléments d'additions pour améliorer leurs caractéristiques physiques. Ce travail consiste à déterminer la concentration des défauts ponctuels en fonction de la température en utilisant le modèle Wagner-Schottky. Les énergies de formation des différents types de défauts sont calculées en utilisant une méthode *Ab initio* basée sur la méthode du pseudopotentiel et sur la base des ondes planes. Les calculs ont été faits pour deux alliages FeNb et FeZr cristallisant dans la structure B2. Les énergies de préférence de site des éléments d'addition Ti, V, et Cr sont calculées ainsi que les différents paramètres structuraux tels le paramètre de maille, le module de compression et les énergies de formation.

Keywords : Intermetalliques (IMC), FeNb, FeZr, défauts ponctuels, *ab initio*, Modèle de Wagner-Schottky