

# Modélisation AB initio des défauts ponctuels dans les phases de laves

Lyacine RABAHI

Soutenue en:

(Thèse en préparation)

**Abstract:** L'évolution de la concentration des défauts ponctuels en fonction de la température et de la composition d'alliage a été étudiée en utilisant le modèle de Wagner-Shottky. L'interaction entre les différents défauts doubles et triples dans les phases de Laves du système Fe-Zr, a été prise en compte dans l'approximation de Bragg-Williams.

**Keywords :** approximation de Bragg-Williams, modèle Wagner-Shottky, méthode des pseudopotentiels (PP), théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), défauts ponctuels, défauts triples, enthalpie de formation, propriétés thermodynamiques