

MODELISATION AB INITIO DES DEFAUTS PONCTUELS DANS LES ALLIAGESINTERMETALLIQUES

Lyacine RABAHI

Soutenu en: 2017

Abstract: Parmi les composés technologiquement intéressants, nous citons le $ZrFe_2$ et $NbFe_2$ auxquels le présent travail est consacré. Ce travail peut être scindé en deux grandes parties: Dans la première, nous avons appliqué une méthode de calcul ab initio dite des pseudopotentiels, basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), afin d'établir une corrélation entre propriétés magnétiques et stabilité structurale des composés $NbFe_2$, $Zr_{0.5}Nb_{0.5}Fe_2$ et $ZrFe_2$ dans les trois phases de Laves C14, C15 et C36, en ayant un intérêt particulier au cas du $NbFe_2$ puisque ce dernier présente un comportement magnétique très complexe. En effet, nous avons considéré l'état non magnétique, ferromagnétique ainsi que l'état antiferromagnétique. Pour ce dernier, toutes les configurations magnétiques possibles ont été considérées initialement, afin de mener une étude comparative complète et de porter un élément de réponse concernant l'état fondamental du composé $NbFe_2$ en particulier. Nous avons également calculé les énergies de formation, ainsi que les entropies vibrationnelles dans les trois structures C14, C15 et C36, ce qui est très utile pour la discussion de la coexistence et la stabilité des différentes phases à hautes températures. Puis, nous avons prédit l'évolution de l'expansion volumique, du module de compression, ainsi que la température de Debye de chacun des composés en fonction de la température. L'obtention de ces propriétés thermiques est difficile, voire coûteuse expérimentalement, notamment pour des structures complexes telles que les phases de Laves. La deuxième partie du travail, est consacrée aux effets des éléments de transition, sur l'absorption de l'hydrogène dans le système C15- $ZrFe_2$. Nous avons étudié la préférence de site de l'hydrogène dans les différents sites interstitiels de Wyckoff disponibles dans la phase C15, puis l'effet d'une série de métaux de transition sur les propriétés magnétiques, structurales et énergétiques du composé $ZrFe_2$, et ce, avant et après l'insertion de l'hydrogène. Un intérêt particulier est accordé aux énergies de formation des hydrures, ainsi qu'aux énergies d'interaction entre atomes d'hydrogène à l'intérieur de l'hydrure.

Keywords : Alliages Intermétalliques, défauts ponctuels, phases de laves, stabilité, Propriétés magnétiques, propriétés thermodynamiques, Insertion d'hydrogène, La théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, Le Modèle Quasi-Harmonique de Debye