Calcul de la limite de phases A2/B2 dans le système Nb-Ti-Al par la méthode variationnelle des amas

V. Jacob, Catherine Colinet, P. Desre, F. Moret

► To cite this version:

V. Jacob, Catherine Colinet, P. Desre, F. Moret. Calcul de la limite de phases A2/B2 dans le système Nb-Ti-Al par la méthode variationnelle des amas. Journal de Physique IV Proceedings, 1996, 06 (C2), pp.C2-3-C2-10. 10.1051/jp4:1996201 . jpa-00254179

HAL Id: jpa-00254179

<https://hal.science/jpa-00254179>

Submitted on 1 Jan 1996

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Calcul de la limite de phases A2/B2 dans le système Nb-Ti-Al par la méthode variationnelle des amas

V. Jacob, C. Colinet*, P. Desre* et F. Moret

CEA, CEREM, SGM, 38054 Grenoble, France

* LTPCM, ENSEEG, 38402 Saint Martin d'Hères, France

Abstract : Considerable work has been devoted to Nb-Ti-Al phase diagram investigation to develop high temperature structural materials but the ordered B2 (Ti_2AlNb) phase field remains uncertain. The aim of this work is to calculate this phase diagram with a thermodynamic statistic method : the Cluster Variation Method (CVM). The CVM is used in the irregular tetrahedron approximation and takes into account first and second nearest neighbour interactions. The numerical values for the chemical pair interactions have been chosen to present the main experimental and theoretical results available in the literature. Isothermal sections at $T = 800, 1000, 1200, 1400^\circ\text{C}$ are presented. The B2 phase field is large and extended towards the Nb-rich area. The calculated probabilities of sites occupation show an ordered L2_1 (Heussler phase) instead of the B2 phase in the Ti-rich area. A miscibility gap is found between the ordered L2_1 phase and the disordered A2 phase. Another miscibility gap is obtained between the ordered B2 phase and the disordered A2 phase in the Al-rich area (metastable field). The temperatures of the order-disorder $\text{B2} \rightarrow \text{A2}$ transition and of the $\text{L2}_1 \rightarrow \text{B2}$ transition have been calculated for different compositions.

1. INTRODUCTION

Le diagramme de phases Nb-Ti-Al a été largement étudié dans le cadre du développement de matériaux de structure pour des applications aéronautiques [1-5]. Ce diagramme présente une phase ordonnée B2 (Ti_2AlNb) dont les limites du domaine d'existence sont encore mal définies. Le développement d'alliages de ce système exige une bonne connaissance du domaine d'existence de cette phase et de la température de transition ordre-désordre $\text{B2} \rightarrow \text{A2}$ à composition fixée. En effet, les propriétés mécaniques de ces alliages sont fortement dépendantes du degré d'ordre [6]. Kattner et Boettinger [7] ont réalisé un calcul du diagramme de phases Nb-Ti-Al mais leur modèle ne tient pas compte de la structure ordonnée B2.

Notre projet consiste à calculer la limite de phase A2 / B2 par une méthode de la thermodynamique statistique : la méthode variationnelle des amas. Cette méthode, initiée par Kikuchi [8], est particulièrement bien adaptée à l'étude de transformations ordre-désordre : elle permet de tenir compte de l'ordre à longue et courte distance. Nous avons choisi le tétraèdre irrégulier comme amas maximum qui prend en compte les interactions présentes dans la phase étudiée : interactions de paires de premiers et seconds voisins. La méthode variationnelle des amas dans l'approximation du tétraèdre irrégulier formulée pour la structure cubique centrée et pour un nombre quelconque de composants a été décrite par Ackermann et col. [9].

2. THEORIE

2.1. Approximation du tétraèdre irrégulier

La méthode variationnelle des amas, conduite dans l'approximation du tétraèdre irrégulier, prend en compte les interactions de premiers et seconds voisins. Le tétraèdre irrégulier est l'amas minimum à considérer pour que les sites occupés par l'amas soient représentatifs des surstructures observées dans le réseau cubique centré. Celui-ci est décomposé en quatre sous-réseaux cubiques faces centrées qui définissent quatre types de sites α , β , γ , δ . Le tétraèdre irrégulier est constitué par les sites α , β , γ , δ . Il compte quatre paires de premiers voisins (α - γ , α - δ , β - γ , β - δ) et deux paires de seconds voisins (α - β , γ - δ). Les atomes Nb, Ti, Al se répartissent sur les sites du réseau. Les indices i, j, k, l désignent les espèces occupant les sites considérés.

Figure 1. : Tétraèdre irrégulier

Nous définissons pour les diverses configurations d'amas :

- Z_{ijkl} : probabilité d'avoir le tétraèdre dans la configuration $\{ijkl\}$ sur les sites α , β , γ , δ .
- $U_{ijk}^{\alpha\beta\gamma}$: probabilité d'avoir le triangle dans la configuration $\{ijk\}$ sur les sites α , β , γ .
- $Y_{ik}^{\alpha\gamma}$: probabilité d'avoir la paire de premiers voisins α - γ dans la configuration $\{ik\}$.
- $V_{ij}^{\alpha\beta}$ et $V_{ij}^{\gamma\delta}$: probabilités de paires de seconds voisins.
- X_i^α : taux d'occupation du site α par l'élément i .

Les surstructures du réseau cubique centré A2 sont définies par les taux d'occupation :

$$A2 : X_i^\alpha = X_i^\beta = X_i^\gamma = X_i^\delta$$

$$B2 : X_i^\alpha = X_i^\beta \neq X_i^\gamma = X_i^\delta$$

$$D0_3 : X_i^\alpha = X_i^\beta \neq X_i^\gamma \neq X_i^\delta \text{ (pour les phases binaires)}$$

$$B32 : X_i^\alpha = X_i^\gamma \neq X_i^\beta = X_i^\delta$$

$$L2_1 : X_i^\alpha = X_i^\beta \neq X_i^\gamma \neq X_i^\delta \text{ (pour les phases ternaires)}$$

$$F43m : X_i^\alpha \neq X_i^\beta \neq X_i^\gamma \neq X_i^\delta$$

2.2. Expression de l'énergie

Comme la structure cubique centrée compte six tétraèdres par site, l'énergie de configuration s'écrit :

$$E = 6N \sum_{ijkl} e_{ijkl} Z_{ijkl} \quad (1)$$

e_{ijkl} représente l'énergie du tétraèdre dans la configuration $\{ijkl\}$. Cette énergie est fonction des énergies de paires de premiers et seconds voisins selon la relation :

$e_{ijkl} = \frac{1}{6}(\epsilon_{ik}^{(1)} + \epsilon_{il}^{(1)} + \epsilon_{jk}^{(1)} + \epsilon_{jl}^{(1)}) + \frac{1}{4}(\epsilon_{ij}^{(2)} + \epsilon_{kl}^{(2)})$, puisqu'une paire de premiers voisins est commune à 6 tétraèdres et qu'une paire de seconds voisins est commune à 4 tétraèdres.

Dans l'étude du système Fe-Co-Al [10], Colinet *et col.* ont choisi une expression de l'énergie de cette forme. Cependant, dans l'expression de l'énergie doivent apparaître des énergies de paires, qui dépendent de la composition, ou des énergies d'amas supérieurs à la paire sinon l'énergie de formation serait symétrique par rapport à 0.5, ce qui ne représente pas la réalité physique. En conséquence, dans l'étude du système Nb-Ti-Al, nous avons écrit l'énergie du système sous la forme d'énergies de tétraèdres en attribuant alors aux tétraèdres du type AAAB et BBBA des énergies différentes, ce qui conduit à des grandeurs thermodynamiques dissymétriques par rapport à 0.5 dans les systèmes binaires limitrophes. Les énergies de formation des phases binaires et ternaires D0₃, B2, B32, F43m, et L2₁ ont été calculées en fonction des énergies de tétraèdres.

2.3. Expression de l'entropie

L'expression de l'entropie molaire de configuration de la phase ordonnée s'écrit :

$$S = -R \left\{ 6 \sum_{ijkl} L(Z_{ijkl}) - 3 \sum_{ijk} \left[L(U_{ijk}^{\alpha\beta\gamma}) + L(U_{ijk}^{\alpha\beta\delta}) + L(U_{ijk}^{\beta\gamma\delta}) + L(U_{ijk}^{\alpha\gamma\delta}) \right] + \frac{3}{2} \sum_{ij} \left[L(V_{ij}^{\alpha\beta}) + L(V_{ij}^{\gamma\delta}) \right] \right. \\ \left. + \sum_{ik} \left[L(Y_{ik}^{\alpha\gamma}) + L(Y_{ik}^{\alpha\delta}) + L(Y_{ik}^{\beta\gamma}) + L(Y_{ik}^{\beta\delta}) \right] - \frac{1}{4} \sum_i \left[L(X_i^{\alpha}) + L(X_i^{\beta}) + L(X_i^{\gamma}) + L(X_i^{\delta}) \right] \right\} \quad (2)$$

où $L(x) = -x \ln(x)$, R est la constante des gaz parfaits et N représente le nombre d'atomes du système. Cette relation conduit à une expression de l'entropie S fonction uniquement des probabilités de tétraèdres compte tenu des équations liant les probabilités d'amas et de sous-amas.

2.4. Grand potentiel

Le calcul du diagramme de phases consiste à rechercher les compositions des phases en équilibre à chaque température. Pour rechercher les conditions de l'équilibre entre deux phases, la fonction grand potentiel Ω est minimisée par rapport aux probabilités d'amas à potentiels chimiques effectifs fixés. Celle-ci est définie par :

$$\Omega = E - TS - \sum_i \mu_i^* X_i$$

μ_i^* désigne le potentiel chimique effectif de l'espèce i , il est fonction des potentiels chimiques μ_{Nb} , μ_{Ti} ,

μ_{Al} selon la relation : $\mu_i^* = \mu_i - \frac{1}{3}(\mu_{Nb} + \mu_{Ti} + \mu_{Al})$ avec $\sum_i \mu_i^* = 0$.

2.5. Résolution des équations de minimisation par la méthode d'itération naturelle.

La fonction grand potentiel doit être minimisée par rapport aux probabilités de tétraèdre en introduisant lors de la minimisation un paramètre de Lagrange λ qui permet de tenir compte de la relation de normalisation :

$\sum_{ijkl} Z_{ijkl} = 1$. La fonction à minimiser par rapport aux probabilités de tétraèdres s'écrit :

$$\Phi = \Omega + \lambda \left(1 - \sum_{ijkl} Z_{ijkl} \right). \text{ Nous cherchons donc } \frac{\partial \Phi}{\partial Z_{ijkl}} \text{ à température et potentiels chimiques constants.}$$

En résolvant cette équation, il vient : $Z_{ijkl} = Z_{ijkl}^0 \exp\left(\frac{\lambda}{6} N k_B T\right)$ (3)

$$\text{avec : } Z_{ijkl}^0 = U_{ijkl}^{1/2} V_{ijkl}^{-1/4} Y_{ijkl}^{-1/6} X_{ijkl}^{1/24} \exp\left(\frac{-\varepsilon_{ijkl}}{k_B T}\right) \exp\left[\frac{(\mu_i^* + \mu_j^* + \mu_k^* + \mu_l^*)}{24N k_B T}\right] \quad (4)$$

$$U_{ijkl} = U_{ijk}^{\alpha\beta\gamma} U_{ijl}^{\alpha\beta\delta} U_{jkl}^{\beta\gamma\delta} U_{ikl}^{\alpha\gamma\delta},$$

La méthode d'itération naturelle est utilisée pour déterminer à l'équilibre les probabilités de tétraèdre. L'algorithme de résolution est le suivant : choisir les valeurs initiales des probabilités de tétraèdre, calculer les probabilités des sous-amas à partir des équations de réduction, calculer les nouvelles probabilités de tétraèdre à partir des équations (3) et (4), reprendre ces valeurs de probabilités comme valeurs initiales jusqu'à convergence du processus itératif. La convergence est atteinte quand on obtient : $\lambda = \Omega$.

2.6. Calcul du diagramme de phases cohérentes

Les phases cohérentes étudiées diffèrent par leurs surstructures : les transformations de phases envisagées sont du type ordre-désordre : passage d'une structure ordonnée à une structure désordonnée (par exemple B2 $\rightarrow$ A2) ou passage d'une structure ordonnée à une autre structure ordonnée (par exemple B2 $\rightarrow$ L2₁). Le calcul de l'équilibre entre deux phases I et II a été conduit en recherchant pour quelles valeurs des potentiels chimiques effectifs les grands potentiels des deux phases sont identiques. La condition d'équilibre est donc : $\Omega^I = \Omega^{II}$ et $\mu_i^{*I} = \mu_i^{*II}$ ($i = \text{Nb, Ti, Al}$). Le calcul a été mené par une approche itérative de la manière suivante : choisir les valeurs des potentiels chimiques, calculer les grands potentiels des phases I et II, les valeurs des potentiels chimiques sont modifiées jusqu'à ce que la différence $|\Omega^I - \Omega^{II}|$ soit inférieure à la précision souhaitée.

3. PARAMETRES ENERGETIQUES

Les paramètres énergétiques des systèmes binaires limitrophes et du système ternaire ont été choisis de façon à représenter au mieux les résultats expérimentaux proposés dans la littérature (cf. tableau I).

• Ti-Al

Le diagramme de phases Ti-Al présente, pour des températures supérieures à 900°C, un large domaine de structure A2 : solution solide Ti(Al). La structure B2 n'est pas stable dans ce système [11]. Pour des compositions proches de la stoechiométrie Ti50-Al50, la phase L1₀, plus stable que la phase B2, apparaît. L'énergie de formation de cette phase B2 métastable est légèrement supérieure à celle de la phase L1₀ [12].

• Nb-Ti

Le diagramme de phases Nb-Ti présente une solution solide continue de structure A2 du niobium jusqu'au titane (pour des températures supérieures à 900°C). Pour des températures inférieures, on obtient du côté titane une solution solide hexagonale compacte. Les paramètres d'interaction sont faibles dans ce système.

• Nb-Al

Le diagramme de phases Nb-Al présente une solution solide A2 du côté niobium et trois phases intermétalliques Nb₃Al, NbAl₂ et NbAl₃. La phase B2 n'est pas stable dans le système Nb-Al, cependant elle a été observée par refroidissement rapide [13]. Par conséquent, l'énergie de formation de la phase B2 devrait être légèrement supérieure à celle des autres phases du système. L'instabilité de la phase B2 dans les binaires Nb-Al et Ti-Al rend difficile l'obtention des enthalpies de formation de cette phase dans ces deux systèmes.

• Nb-Ti-Al

A notre connaissance, il n'existe pas de données thermodynamiques expérimentales concernant les grandeurs thermodynamiques de mélange ou de formation dans le système Nb-Ti-Al. Les nombreuses études expérimentales du diagramme de phases Nb-Ti-Al montrent que la phase B2 est stable dans ce système et qu'elle présente un large domaine d'existence. Celui-ci est en particulier très étendu vers le côté riche en niobium.

Le système Nb-Ti-Al est particulièrement intéressant dans la mesure où la phase ordonnée B2 stable n'apparaît que dans le système ternaire. Toutefois, l'absence de phase B2 stable dans les systèmes binaires limitrophes ne permet pas d'avoir accès à des valeurs d'enthalpie de formation dans ces systèmes ni à des valeurs de température de transition ordre-désordre B2 $\rightarrow$ A2. C'est pourquoi, l'estimation des paramètres d'interaction dans le système Nb-Ti-Al s'est avérée particulièrement délicate. Nous avons estimé ces paramètres en tenant compte du domaine d'équilibre de la phase B2 dans le système ternaire. Nous avons aussi tenu compte du fait que, dans le système binaire Ti-Al, le domaine d'existence de la phase A2 est particulièrement étendu à haute température. Comme la phase B2 apparaît très stable dans le ternaire, il semble que des interactions spécifiques au système ternaire Nb-Ti-Al doivent être prises en compte. Nous nous sommes donc basés sur les valeurs des énergies de formation des phases A_2BC , AB_2C et ABC_2 de structure $L2_1$ et $F43m$ calculées par Rubin et Finel [14] pour estimer les énergies de tétraèdres qui contiennent les trois espèces A, B et C.

A) Binaires :			
Nb-Ti :	Nb ₃ Ti :	(DO ₃)	0
	NbTi :	(B2)	-2000
	NbTi :	(B32)	-2000
	NbTi ₃ :	(DO ₃)	-1600
Ti-Al :	Ti ₃ Al :	(DO ₃)	-20000
	TiAl :	(B2)	-28000
	TiAl :	(B32)	-26000
	TiAl ₃ :	(DO ₃)	-7000
Nb-Al :	Nb ₃ Al :	(DO ₃)	-11000
	NbAl :	(B2)	-20000
	NbAl :	(B32)	-12000
	NbAl ₃ :	(DO ₃)	-7000

B) Ternaire :			
Nb-Ti-Al :	Nb ₂ TiAl :	(L2 ₁)	-9000
		(F43m)	-24000
	NbTi ₂ Al :	(L2 ₁)	-24000
		(F43m)	-18000
	NbTiAl ₂ :	(L2 ₁)	-26000
		(F43m)	-12000

Tableau I. Energies de formation des phases binaires et ternaires (exprimées en Joules / mole d'atomes.)

4. RESULTATS

4.1. Sections isothermes

Les sections isothermes à $T = 800, 1000, 1200$ et 1400 °C ont été calculées et sont présentées sur la figure 3. Les calculs conduisent à un large domaine d'existence de la phase B2, ce domaine apparaît très étendu vers les compositions riches en niobium. A basse température, les probabilités d'occupation des sites calculées donnent une phase ordonnée $L2_1$ (phase de Heussler) au lieu de la phase B2, pour des compositions riches en titane. Une lacune de miscibilité a été obtenue entre cette phase $L2_1$ et la phase désordonnée A2 conduisant à un domaine biphasé A2 + $L2_1$ peu étendu. Du côté riche en niobium, un domaine biphasé très limité, B2 + $L2_1$, est obtenu. Une lacune de miscibilité a également été mise en évidence entre la phase ordonnée B2 et la phase désordonnée A2.

4.2. Sections verticales

Deux sections verticales ont été calculées (cf. figure 2). Elles montrent que la température de mise en ordre chute rapidement dès qu'on s'écarte de la stoechiométrie Ti_2AlNb ou Nb_2TiAl . Nous précisons que la température de mise en ordre correspond au passage du domaine monophasé A2 à un domaine monophasé ou biphasé présentant une phase ordonnée.

Nous avons aussi déterminé, pour diverses compositions, les températures de transition B2 $\rightarrow$ A2 et $L2_1 \rightarrow$ B2 (cf. Tableau II).

Figure 2. Sections verticales (Compositions exprimées en fraction atomique).

Transition :	Ti50-Al25-Nb25	Nb50-Ti25-Al25	Nb55-Ti30-Al15	Nb60-Ti30-Al10	Nb12-Ti63-Al25
B2 $\rightarrow$ A2	1440 °C	1720 °C	1070 °C	650 °C	1060 °C
L2 ₁ $\rightarrow$ B2	1140 °C	1230 °C	940 °C	600 °C	920 °C

Tableau II. Températures de transitions B2 $\rightarrow$ A2 et L2₁ $\rightarrow$ B2. (Compositions exprimées en % at)

5. DISCUSSION

Dans la littérature, les études expérimentales mettent en évidence un domaine d'existence de la phase B2 très étendu. La température de transition B2 $\rightarrow$ A2 a été déterminée pour différentes compositions. Du côté riche en titane, Bendersky *et col.* [3] obtiennent l'alliage Nb12.5-Ti62.5-Al25 (% at.) désordonné à 1100°C, Kestner-Weykamp *et col.* [15] trouvent une transition B2 $\rightarrow$ A2 entre 1000 et 1200°C pour l'alliage Nb11-Ti65-Al24. Concernant la composition Ti₂AlNb, des désaccords ont été observés pour la détermination de la température de transition B2 $\rightarrow$ A2. Celle-ci est supérieure à 1400°C d'après Bendersky *et col.* [3]. Or, d'après les travaux d'Hellwig [1], l'alliage Nb25-Ti53-Al22, de composition très voisine de la précédente, présente une transition A2 / B2 entre 1000 et 1200°C. Du côté riche en niobium, l'alliage de composition Nb75-Ti10-Al15 est ordonné à 900°C d'après Shyue *et col.* [16]. La température de transition A2 / B2 n'a pas été déterminée. Néanmoins, les auteurs ont montré qu'elle est inférieure à 1500°C. Cette zone riche en niobium reste encore peu étudiée et nous manquons d'information précise concernant la température de transition ordre-désordre.

Les paramètres énergétiques retenus pour le calcul conduisent à une bonne représentation du système Nb-Ti-Al. En effet, le large domaine d'existence de la phase B2 obtenu sur les sections isothermes calculées est en accord avec les résultats expérimentaux issus de la littérature. Du côté riche en titane, pour la composition Nb12-Ti63-Al25, une température de transition ordre-désordre de 1060°C a été calculée. Ce résultat est en accord avec les travaux expérimentaux de Bendersky *et col.* [3] et avec ceux de Kestner-Weykamp *et col.* [15]. Pour la composition stoechiométrique Ti₂AlNb, la température de transition A2 / B2 calculée est de 1440°C, en accord avec Bendersky *et col.* [3]. Par ailleurs, les calculs ont aussi montré qu'un léger écart par rapport à la stoechiométrie entraîne une diminution considérable de la température ordre - désordre (figure 2), comme l'a observé Hellwig [1]. D'après les sections isothermes calculées, du côté riche en niobium, la température de transition A2 / B2 de l'alliage Nb75-Ti10-Al15 se situe entre 800 et 1000°C, en accord avec l'étude de Shyue *et col.* [16]. Cependant, les résultats issus de la littérature et concernant la zone riche en niobium sont encore incomplets pour pouvoir comparer la température de transition calculée à celle déterminée expérimentalement. Par ailleurs, les diagrammes calculés mettent également en évidence une phase L2₁. Dans la littérature, la phase L2₁ n'a pas été observée. Le domaine d'existence calculé ne prend pas en compte la précipitation de la phase

orthorhombique O présente sur une partie importante de ce domaine à basse température, ni la précipitation de la phase Nb_3Al du côté riche en niobium. Si la température de transition $\text{L2}_1 \rightarrow \text{B2}$ est inférieure à la transition $\text{O} \rightarrow \text{B2}$, la phase L2_1 ne peut pas être formée. Cette phase n'a peut être pas été observée expérimentalement en raison d'une cinétique lente de la transformation $\text{B2} \rightarrow \text{L2}_1$. Par ailleurs, la caractérisation par diffraction électronique de la phase L2_1 est difficile car les tâches de surstructure caractéristiques de cette phase ont une intensité extrêmement faible. Un domaine biphasé étroit $\text{A2} + \text{L2}_1$ à basse température (800-1000°C) est également obtenu par les calculs, une partie de ce domaine semble ne recouper, ni le domaine de la phase O, ni celui de la phase Nb_3Al . L'existence de ce domaine permettrait la préparation d'alliages biphasés $\text{A2} + \text{L2}_1$ dont les propriétés mécaniques pourraient être très intéressantes. Le diagramme Nb-Ti-Al présente aussi une lacune de miscibilité calculée $\text{A2} + \text{B2}$. Celle-ci correspond à un domaine métastable. En effet, l'aluminium a une structure cubique à faces centrées, la structure cubique centrée est instable.

Figure 3. Sections isothermes : a) $T = 800^\circ\text{C}$, b) $T = 1000^\circ\text{C}$, c) $T = 1200^\circ\text{C}$, d) $T = 1400^\circ\text{C}$.

Les désaccords observés dans la littérature pour la composition Ti_2AlNb [1, 3] nous conduisent à discuter la méthode expérimentale utilisée dans la littérature pour déterminer la transition $\text{B2} \rightarrow \text{A2}$. Les alliages sont recuits dans l'état ordonné ou l'état désordonné puis trempés. Ensuite, ils sont caractérisés par microscopie électronique en transmission. L'alliage est considéré recuit dans le domaine désordonné si les tailles de domaines ordonnés sont faibles (1nm-3µm). Ce résultat dépend de la vitesse de trempe et de la

cinétique de croissance des domaines ordonnés. Notons aussi que le résultat est très dépendant de la composition locale de l'alliage. Or, les sections verticales calculées ont montré que de faibles variations de composition conduisent à d'importantes variations de température de mise en ordre. Aussi, la présence d'hétérogénéités de composition dans le matériau peut donc conduire à des résultats très différents. Ces conditions expliquent certainement les désaccords obtenus dans la littérature. Les incertitudes sur la température de transition ordre-désordre $B2 \rightarrow A2$ dans le système Nb-Ti-Al limitent notre approche CVM. Nous caractériserons donc expérimentalement la phase ordonnée B2 par une méthode directe, à savoir : la caractérisation "in situ" de l'évolution en température d'alliages Nb-Ti-Al par diffraction neutronique [17]. La diffraction neutronique permet en effet une très bonne observation des pics de surstructure des phases B2 et L2₁. Elle présente aussi l'avantage de donner des informations quantitatives moyennées sur tout l'échantillon. Ce travail devrait permettre de mieux définir les paramètres énergétiques du système Nb-Ti-Al et d'obtenir ainsi une meilleure définition de la limite de phases A2 / B2.

Références

- [1] Hellwig A., "Experimentelle Untersuchungen zur konstitution des Systems Aluminium-Titan-Niob", Thèse, Dortmund 1990
- [2] Naka S., Thomas M., Marty M., Lapasset G., Khan T., "Complex B2 aluminides of refractory metals : an attempt to explore novel alloy systems", Inter. Symp. Structural Intermetallics, Sevensprings, Pennsylvania, 26-30 Sept. 1993, pp. 647-656.
- [3] Bendersky L.A., Boettinger W.J., "Investigation of B2 and related phases in the Ti-Al-Nb ternary system", Proc. Int. Symp. High Temperature Ordered Intermetallic Alloys III, 29 Nov.-1 Déc. 1988, Boston, Massachusetts, US, pp 45-49
- [4] Perepesko J.H., Chang Y.A., Seitzman L.E., Lin J.C., Bonda N.R., Jewett T.J., Mishurda J.C., "High temperature phase stability in the Ti-Al-Nb", Proc. Int. Symp. High Temperature Aluminides and Intermetallics, 1-5 Oct. 1989, Indianapolis, Indiana US, pp 19-47.
- [5] Zdziobek A., Durand-Charre M., Driole J., Durand F., "High temperature equilibria in the Nb-Ti-Al system", *Zeitschrift für Metallkunde* **86** (1995) 334-340
- [6] Naka S., Marty M., Thomas M., Khan T., "Variation in the degree of order and its influence on mechanical behavior in complex B2 aluminides of refractory metals", *Mater. Sci. and Eng.* **A192/193** (1995) 69-76
- [7] Kattner U.R., Boettinger W.J., "Thermodynamic calculation of the ternary Ti-Al-Nb system", *Mater. Sci. and Eng.* **A152** (1992) 9-17
- [8] Kikuchi R., *Physica*. **142A** (1987) 321-341
- [9] Ackermann H., Inden G., Kikuchi R., "Tetrahedron approximation of the cluster variation method for b.c.c. alloys", *Acta Metall.* **37** (1989) N°1 1-7
- [10] Colinet C., Inden G., Kikuchi R., "CVM calculation of the phase diagram of b.c.c. Fe-Co-Al", *Acta Metall. Mater.* **41** N°4 (1993) 1109-1118
- [11] Kainuma R., Palm M., Inden G., "Solid-phase equilibria in the Ti-rich part of the Ti-Al system", *Intermetallics* **2** (1994) 321-332
- [12] Rubin G., Finel A., "Calculation of phase diagrams of ternary systems with cluster-variation-method entropy", *J.Phys. Condens. Matter.* **5** (1993) 9105-9120
- [13] Khomoto H., Shyue J., Aindow M., Fraser H.L., "Observation of metastable B2 phase in rapidly solidified ribbons of Nb-Al alloys", *Scripta Metall. and Mater.* **29** (1993) 1271-1274
- [14] Rubin G., Finel A., "Application of first-principles methods to binary and ternary alloy phase diagram predictions", *J.Phys. Condens. Matter.* **7** (1995) 3139-3152
- [15] Kestner-Weykamp H.T., Ward C.H., Broderick T.F., Kaufman M.J., "Microstructures and phase relationships in the Ti₃Al + Nb system", *Scripta Metallurgica* **23** (1989) 1697-1702
- [16] Shyue J., Hou D.H., Johnson S.C., Aindow M., Fraser H.L., "The stability of B2 compounds in Ti-modified Nb-Al alloys", Int. Symp. High Temperature Ordered Intermetallic Alloys V, 30 Nov.-3 Déc. 1992, Boston, Massachusetts, US, pp 243-248
- [17] Jacob V., Ressouche E., Ouladiah B., Arrons R., en préparation.