

## **Incertitudes sur certains diagrammes de phases binaires à base de titane**

Jean-Marc JOUBERT<sup>1</sup>, Jean-Claude CRIVELLO<sup>1</sup>, Thomas VAUBOIS<sup>2</sup>, Mickael PERRUT<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Université Paris Est, ICMPE (UMR 7182), CNRS, UPEC, F- 94320 THIAIS

<sup>2</sup> Onera, DMAS/M3P – The French Aerospace Lab, Châtillon

### ***Résumé :***

Les diagrammes de phases binaires à base de titane (hexagonal compact à basse température, cubique centré à haute température) et des éléments cubiques centrés des colonnes du vanadium et du chrome (Ti–V, Ti–Nb, Ti–Ta; Ti–Cr, Ti–Mo, Ti–W) sont à priori très simples. A l'exception de Ti–Cr, les systèmes ne forment aucun composé et les diagrammes de phases montrent simplement :

- soit une solution solide complète dans le domaine cubique centré à haute température et un fuseau entre les phases hexagonale compacte et cubique centrée à basse température
- soit une lacune de miscibilité dans le domaine cubique centré et une réaction monotectoïde  $bcc \rightarrow bcc' + hcp$

Cependant, dans certains cas, comme par exemple les systèmes Ti–Mo et Ti–W qui sont reportés avec des lacunes de miscibilité dans la phase cubique centrée, des calculs DFT de phases ordonnées reportent des enthalpies de formation négatives pour des phases ordonnées de la structure cubique centrée et des calculs SQS dans la solution solide cubique centrée montrent un mélange exothermique. Ces résultats sont en contradiction manifeste avec les diagrammes de phases reportés et la présence d'une lacune de miscibilité.

Par ailleurs, une étude approfondie de la bibliographie montre aussi des contradictions importantes entre les différents auteurs sur la forme du diagramme de phases.

Une étude systématique par SQS a été menée conjointement avec un examen approfondi de la bibliographie. Une comparaison avec les systèmes à base de zirconium a aussi été faite. Ces résultats seront présentés de façon à tenter de réconcilier les études expérimentales et les calculs premiers principes.