

Dans ce travail, des modèles d'amas sur réseau ont été développés pour décrire le système Fe-Al-Mn-C. Ces modèles, ajustés sur des données ab initio, ont permis de calculer les propriétés thermostatistiques de ce système à l'aide de simulations en champ moyen, méthode variationnelle d'amas et Monte-Carlo.

Pour des raisons méthodologiques, le système quaternaire a été appréhendé séparément sur les réseaux cubique centré (CC) puis cubique à faces centrées (CFC) correspondant aux phases ferritiques et austénitiques, et en sous-systèmes de complexité chimique croissante. Nous avons examiné l'influence sur les diagrammes de phases des paramètres importants, notamment la base de données ab initio permettant l'ajustement des modèles, ainsi que le rôle des contributions non configurationnelles de vibrations des atomes.

L'étude du modèle binaire Fe-Al sur réseau CC, sujet d'une abondante bibliographie, a servi de cas de référence à notre approche. Elle a permis de mettre en évidence l'effet des structures ordonnées dans la base d'ajustement, et de montrer que la prise en compte des phonons a un effet non négligeable sur les températures de transition. Ces conclusions subsistent en présence de manganèse. Les modèles quaternaires du système Fe-Al-Mn-C sur réseau CC démontrent l'influence de la portée des paires impliquant atomes substitutionnels et interstitiels. La mise en ordre du carbone est modifiée par les interactions entre atomes interstitiels. Sur réseau CFC, les modèles développés n'ont pas permis d'aboutir à des résultats satisfaisants, notamment à cause de la difficulté à identifier une description valable du magnétisme dans l'austénite.