

2009

# Modélisation atomistique des propriétés Structurales et Thermiques des alliages Fe<sub>2</sub>Zr et Fe<sub>2</sub>Nb dans la structure des Laves C15

**L. Rabahi, A. Kellou**

**Abstract :** Les propriétés structurales et thermiques des alliages intermétalliques Fe<sub>2</sub>Zr et Fe<sub>2</sub>Nb cristallisant dans la structure cubique C15 ont été étudiés en utilisant la modélisation numérique Ab initio et le modèle quasi harmonique de Debye. L'approche Ab initio utilisée est basée sur le formalisme de la théorie de la densité fonctionnelle ainsi que la méthode du pseudopotentiel. L'évolution des paramètres structuraux ainsi que la chaleur spécifique en fonction de la température a été déterminé en minimisant l'énergie libre de Gibbs.

**Keywords :** Intermetalliques, phases de laves, ab initio, Modèle quasi-harmonique de Debye