

**MODELISATION ATOMISTIQUE DES PROPRIETES
STRUCUTRALES ET THERMIQUES DES ALLIAGES Fe₂Zr ET
Fe₂Nb DANS LA STRUCTURE DES LAVES C15**

L. RABAHI^{1,2}, A. KELLOU¹

¹Laboratoire de physique théorique

Laboratoire physique des matériaux,

Faculté de Physique, USTHB, BP32 El-Alia, Bab Ezzouar, Alger.

E-mail : rabahil@yahoo.fr.

RESUME:

Les propriétés structurales et thermiques des alliages intermétalliques Fe₂Zr et Fe₂Nb 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.

Mots clés : Intermétalliques, Phases de Laves, *Ab initio*, Modèle quasi harmonique de debye.