

# Étude atomistique (AB INITIO) des alliages intermétalliques Fe<sub>2</sub>Al(Zr<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>) et Fe<sub>2</sub>(Zr<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>) dans la phase Heusler et de laves C15; stabilité et propriétés structurales

Lyacine RABAHI

Soutenue en: 2010

**Abstract :** Dans ce travail, on s'est proposé d'étudier les propriétés structurales et la stabilité de quelques intermétalliques technologiquement importants, en utilisant une méthode de modélisation numérique dite ab-initio basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ainsi que les pseudopotentiels. Ces intermétalliques de formule Fe<sub>2</sub>(Zr<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>) et Fe<sub>2</sub>Al(Zr<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>) cristallisent respectivement dans la structure des Laves C15 et Heusler L21. Ces phases précipitent dans les alliages à base de Fer Aluminium contenant les éléments d'addition (Zr et Nb). Ces alliages sont destinés à des applications tels que; les échangeurs de chaleur, les composants de moteurs ou de turbines, ou pour la fabrication des pièces structurales. Les résultats des calculs, comparés aux valeurs tabulées dans la littérature, montrent un bon accord. De plus, la stabilité, la rigidité, ainsi que les propriétés magnétiques et thermodynamiques des deux systèmes dépendent fortement de la teneur du composé en Niobium (Nb).

**Keywords :** théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), méthode des pseudo potentiels, composés intermétalliques, phases de laves, phases Heusler, approximation quasi-harmonique (QHA), propriétés structurales, magnétiques et thermodynamiques