

2015

ETUDE DES PROPRIÉTÉS, STRUCTURALES, THERMIQUES DE CaO ET SiO₂ DANS LA DIATOMITE

BOUBENDIRA Khaled, LABIOD Kotbia, BENAYACHE Sihem, Meradi Hazem, AOUADJA Faycel

Abstract : La diatomite est une roche de couleur claire formée entièrement ou presque de "squelettes" de diatomées. Ces algues unicellulaires sont entourées d'une « carapace » en silice, le frustule, dont l'accumulation sur le fond peut conduire à la formation d'une roche. Dans ce travail nous déterminons les propriétés structurales et thermiques de CaO et SiO₂ dans la diatomite en utilisant la méthode des ondes planes augmentée et linéarisée (LAPW) dans la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le potentiel d'échange et de corrélation est calculé par l'approximation de gradient généralisée (GGA). Concernant les propriétés thermiques, nous avons calculé l'enthalpie libre G, l'entropie S, la chaleur spécifique C, la conductivité thermique ?.....ect de CaO et SiO₂ dans la Diatomite. Les températures utilisées dans ce travail sont 1450 et 1500 respectivement ;Les résultats obtenus sont en bon accord avec quelques données expérimentales.

Keywords : DFT, la Diatomite, les propriétés thermiques des alliages